

UPC

CTTC

**Modelización del cambio de  
fase sólido líquido. Aplicación  
a sistemas de acumulación de  
energía térmica.**

DOCTORAL THESIS

Centre Tecnològic de Transferència de Calor  
Departament de Màquines i Motors Tèrmics  
Universitat Politècnica de Catalunya

Bàrbara Vidal Jiménez  
Doctoral Thesis



# Modelización del cambio de fase sólido líquido. Aplicación a sistemas de acumulación de energía térmica.

Bárbara Vidal Jiménez

TESI DOCTORAL

presentada al

Departament de Màquines i Motors Tèrmics  
E.T.S.E.I.T.  
Universitat Politècnica de Catalunya

per a l'obtenció del grau de

Doctor Enginyer Industrial

Terrassa, June 2007



# **Modelización del cambio de fase sólido líquido. Aplicación a sistemas de acumulación de energía térmica.**

Bárbara Vidal Jiménez

## **Directors de la Tesi**

Dr. Miquel Costa Pérez

Dr. Carlos David Pérez Segarra

Dr. Assensi Oliva Llena

## **Tribunal Qualificador**

0.25cm

0.25cm



# Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer este trabajo, por esto y por mucho más, por darme buenos momentos, momentos en los que no puedo pensar en nada más que no sea en ella, lo cual va genial para desconectar, por ser mi mejor trabajo, mi mejor proyecto, y sí señor, fue creada durante el periodo en que estuve realizando esta tesis, mi niña: Lucía, este trabajo te lo quiero dedicar y agradecer en primer lugar a tí (Besos de mamá). Como no, un muy especial agradecimiento a mis padres y a David por haberme aguantado todos estos años: ellos no solo son ingenieros, sino que ahora también son doctores. Felicidades.

Gracias a mi familia. Manoli, Manolo, Toni y Lolo. A mis tíos, tías y a ti Yaya. Os quiero. No quiero dejar de mencionar a mi abuela Margarita que me aconsejó sabiamente en todo momento. A todos mis amigos, Tenti, Carlos, Paula, Nuria, Fran, Mari Carmen, Irene y Alex. Sois geniales. Como no a Emily y Esther, por esos buenos ratos que hemos pasado estos dos últimos años y los buenos consejos que me habéis dado. No me gustaría olvidarme de Jose Manuel y Mari, vuestra ayudita ha sido realmente muy importante. Muchas gracias a todos.

Quiero agradecer el apoyo incondicional de todos los que me habéis sufrido a lo largo de estos años en el laboratorio: Xavi Albets y Dani por aquellos desayunos míticos. Elisabet por haber estado en el momento más oportuno, eres una colaboradora excepcional. Roser, Cristian, Guillem, Xavi, Rashmin y Deniz compañeros de sala que me habéis resuelto un montón de dudas. A todas las mujeres que han ido pasando y/o siguen pasando por el laboratorio y esas cenas tan provechosas. Muchas gracias a todos.

Finalmente, dar las gracias a mis directores de Tesis, sin ellos no hubiera podido realizar este trabajo. Esta Tesis se ha realizado gracias a las becas para la Formación de Personal Investigador (FI) 2002-2006 de la Generalitat de Catalunya.



# Índice

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>15</b>
1.1	Preámbulo . . . . .	16
1.2	Antecedentes generales . . . . .	16
1.3	Antecedentes del CTTC . . . . .	19
1.4	Objetivos . . . . .	20
1.5	Conclusiones . . . . .	21
	Bibliografía . . . . .	21
<b>2</b>	<b>El cambio de fase sólido líquido.</b>	
	<b>Materiales, aplicaciones y formulación matemática</b>	<b>27</b>
2.1	Introducción . . . . .	28
2.2	Materiales de cambio de fase . . . . .	29
2.2.1	Materiales comerciales/no comerciales . . . . .	30
2.2.2	Compuestos orgánicos/inorgánicos . . . . .	33
2.2.3	Propiedades termofísicas . . . . .	40
2.2.4	Campos de aplicación . . . . .	41
2.3	Formulación matemática . . . . .	47
2.3.1	Condiciones iniciales y condiciones de contorno . . . . .	49
2.3.2	Métodos numéricos . . . . .	50
2.3.3	Conservación de la masa . . . . .	50
2.3.4	Conservación del momento lineal . . . . .	50
2.3.5	Conservación de la energía . . . . .	52
2.4	Solución numérica del cambio de fase sólido-líquido . . . . .	53
2.5	Conclusiones . . . . .	61
2.6	Nomenclatura . . . . .	62
	Bibliografía . . . . .	63
<b>3</b>	<b>Solución numérica del cambio de fase</b>	<b>67</b>
3.1	Introducción. Definición del caso en estudio . . . . .	68
3.2	Estudio previo: Elección de parámetros . . . . .	69
3.2.1	Elección de la precisión . . . . .	70
3.2.2	Elección del número de pasadas por campos escalares y por presiones . . . . .	71
3.2.3	Elección de los factores de relajación . . . . .	73
3.2.4	Elección de las constantes $C$ y $\delta$ . . . . .	74
3.2.5	Elección del esquema numérico . . . . .	76
3.3	Estudio de verificación . . . . .	83

3.4	Conclusiones . . . . .	90
3.5	Nomenclatura . . . . .	91
	Bibliografía . . . . .	92
<b>4</b>	<b>Métodos de subdominios conservativos</b>	<b>95</b>
4.1	Introducción . . . . .	96
	4.1.1 Esquemas de interpolación . . . . .	98
	4.1.2 Esquemas de interpolación del campo de velocidades . . . . .	99
	4.1.3 Esquema de interpolación para los campos escalares . . . . .	108
4.2	Dificultades en la simulación del cambio de fase con subdominios . . . . .	109
4.3	Calentamiento de un sólido: conducción pura . . . . .	111
4.4	Enfriamiento de un líquido: convección sin cambio de fase . . . . .	114
4.5	Enfriamiento de un líquido: comportamiento del flujo para bajos números de Prandtl . . . . .	126
4.6	Caso con cambio de fase: resolución sin subdominios . . . . .	144
4.7	Caso con cambio de fase: resolución con dos subdominios coincidentes. Dependencia en una única dirección . . . . .	154
4.8	Caso con cambio de fase: resolución con tres subdominios. Dependencia en dos direcciones . . . . .	163
4.9	Conclusiones . . . . .	172
4.10	Nomenclatura . . . . .	174
	Bibliografía . . . . .	175
<b>5</b>	<b>Métodos de sudominios basados en la presión</b>	<b>177</b>
5.1	Introducción . . . . .	178
5.2	Aspectos del método . . . . .	180
5.3	Estudio de verificación . . . . .	188
5.4	Comparación métodos: MOM vs MASS . . . . .	201
5.5	Mallas no coincidentes . . . . .	205
5.6	Conclusiones . . . . .	216
5.7	Nomenclatura . . . . .	217
	Bibliografía . . . . .	217
<b>6</b>	<b>Estudio paramétrico</b>	<b>219</b>
6.1	Introducción . . . . .	220
6.2	Relación de aspecto . . . . .	222
6.3	Condiciones de contorno . . . . .	226
	6.3.1 Temperatura de la pared caliente, $T_h$ . . . . .	226
	6.3.2 Temperatura de la pared fría, $T_c$ . . . . .	230
6.4	Propiedades termofísicas . . . . .	233
6.5	Conclusiones . . . . .	244

<i>Índice</i>	11
6.6 Nomenclatura . . . . .	246
Bibliografía . . . . .	246
<b>7 Conclusiones y Actuaciones Futuras</b>	<b>247</b>
7.1 Conclusiones . . . . .	248
7.2 Actuaciones Futuras . . . . .	249



# Resumen

En este trabajo se ha realizado una simulación numérica detallada del fenómeno de cambio de fase sólido-líquido, por ser esta fenomenología de gran interés en diferentes áreas industriales.

La simulación realizada implica problemas de no linealidad, fuertes acoplamientos y frontera móvil. Como resultado de esto, solo para las configuraciones más simples se pueden utilizar herramientas analíticas, mientras que para resolver la mayoría de problemas de interés se requiere el uso de métodos numéricos. Estos métodos consisten en discretizar las ecuaciones que definen la fenomenología que nos ocupa en pequeñas celdas o volúmenes de control. En este estudio se ha optado por utilizar el Método de Volúmenes Finitos (FVM) para la discretización de las ecuaciones gobernantes utilizando mallas cartesianas. Se utiliza una malla desplazada; esto quiere decir que las componentes del vector velocidad se calculan en las caras de los volúmenes de control, lo que permite un acoplamiento adecuado entre la ecuación de conservación de la masa y momentum.

Tanto el código como las soluciones numéricas han sido convenientemente verificados. La verificación del código consiste en comprobar que éste está libre de errores de programación y que el comportamiento de los esquemas numéricos implementados está acorde con su comportamiento teórico. Para la verificación de la solución numérica se han utilizado métodos de extrapolación de Richardson o realizando un estudio de refinamiento de malla y observando la evolución de algunas magnitudes características del problema como pueden ser la fracción de líquido en el dominio o el número de Nusselt en la pared caliente.

Una vez que el código y las soluciones numéricas han sido convenientemente verificados, la validación final de la simulación del proceso es la que se obtiene de comparar los resultados predichos con los datos experimentales.

El problema de la fusión del galio en una cavidad rectangular calentada por un lado ha sido ampliamente utilizado por investigadores con el fin de evaluar los métodos numéricos para la resolución del cambio de fase. Si bien comentar que este material tiene las ventajas de que sus propiedades termofísicas están bien establecidas, que tiene una temperatura de cambio de fase cercana a la temperatura ambiente y que es un material con gran interés industrial, también presenta algunas desventajas como es el hecho de que tiene un comportamiento anisotrópico en cuanto a la conductividad de la fase sólida. No obstante, el gran número de trabajos experimentales que se encuentran en la literatura relacionados con este material nos ha conducido a escoger este material para la realización de un estudio detallado del cambio de fase sólido-líquido en este trabajo.

Si bien en la literatura aparece este problema con diferentes configuraciones, en este trabajo nos hemos centrado en el estudio del caso en que la relación de aspecto (alto/ancho) es de 0,5. Existen diferentes métodos numéricos para resolver problemas de cambio de fase sólido-líquido: métodos que siguen la frontera móvil, métodos que fijan la frontera móvil, etc. En este trabajo utilizaremos el Método Entálpico pues nos permite utilizar una malla fija en todo el dominio, la condición de Stefan queda impuesta de manera implícita, permite la coexistencia de más de un frente de cambio de fase y permite que la interfase tenga un cierto grosor.

El caso que nos ocupa tiene la singularidad de encontrarse en un rango de Prandtl muy bajo. Esto provoca que se alcance el régimen turbulento para números de Rayleigh relativamente bajos. Esto nos ha hecho pensar sobre la conveniencia de realizar un estudio más detallado para determinar para que valor de Rayleigh se produce la transición de régimen permanente a flujo oscilatorio y de éste a un régimen caótico.

Los problemas que han ido surgiendo a lo largo de la realización de este trabajo nos han conducido a la utilización del método multiblock, también conocido como método de descomposición de subdominios. El método se emplea considerando flujos incompresibles y mallas desplazadas. En este trabajo se explicarán las modificaciones que han sido necesarias para la utilización de este método en la fenomenología del cambio de fase sólido líquido. Se han utilizado dos aproximaciones: una conservativa y otra basada en la presión. Para la obtención de la solución de referencia se ha empleado los métodos de subdominios basados en la presión, pues con el método conservativo se han observado discrepancias entre la solución obtenida con un único subdominio y la obtenida con varios subdominios.

Finalmente, se ha realizado un estudio paramétrico del caso, para el cual se han considerado diferentes relaciones de aspecto, diferentes condiciones de contorno y variaciones de  $\pm 10\%$  en las propiedades termofísicas con respecto al caso de referencia, con el objetivo de ver como afectan estas modificaciones sobre la fenomenología que nos ocupa.

# Capítulo 1

## Introducción

En este capítulo se presentan las principales líneas de trabajo de esta Tesis. En primer lugar, se realiza una breve introducción a la fenomenología del cambio de fase sólido-líquido para a continuación exponer los antecedentes que podemos encontrar en la literatura: primero a nivel general para después enfocarlos en el caso que se estudiará en este trabajo, es decir, la fusión del galio (tanto a nivel numérico como a nivel experimental). A continuación, se pone especial énfasis en los antecedentes del propio centro de trabajo, el CTTC. Finalmente se exponen los principales objetivos de este trabajo.

## 1.1 Preámbulo

Diferentes mecanismos actúan cuando un sólido funde o un líquido solidifica. Nos encontramos con fenómenos de transferencia de calor, transferencia de masa, subenfriamiento, absorción o cesión de calor latente, cambios en las propiedades termofísicas, efectos superficiales, etc. Todos estos procesos son descritos por las ecuaciones de Navier-Stokes que expresan matemáticamente los principios de conservación de la masa, de la cantidad de movimiento y de la energía. Estrictamente hablando, solo las dos primeras son conocidas como ecuaciones de Navier-Stokes, pero la comunidad científica normalmente utiliza este nombre cuando se refiere a todas ellas. Estas ecuaciones son un conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, no-lineales y fuertemente acopladas.

Existen diferentes métodos numéricos para resolver problemas de cambio de fase sólido-líquido (métodos que siguen la frontera móvil, métodos que fijan la frontera móvil, ...) pero en este trabajo utilizaremos el Método Entálpico pues nos permite utilizar una malla fija en todo el dominio, la condición de Stefan queda impuesta de manera implícita, permite la coexistencia de más de un frente de cambio de fase y permite que la interfase tenga un cierto grosor.

Los problemas que han ido surgiendo a lo largo de la realización de este trabajo nos han conducido a la utilización del método multiblock, también conocido como método de descomposición de subdominios. El método se emplea para flujos incompresibles y mallas de discretización desplazadas. Las técnicas multiblock consisten en dividir el dominio físico en varios subdominios independientes. Esta separación genera nuevas fronteras, llamadas contornos de interpolación. Los nodos situados en estos contornos requerirán de información adicional debido a la carencia de nodos vecinos, que son calculados en otros subdominios.

## 1.2 Antecedentes generales

El fenómeno de cambio de fase sólido-líquido es de gran interés en diferentes áreas científicas e ingenieriles como por ejemplo la cristalografía, la acumulación de energía térmica, la metalurgia, la crioconservación de celdas, etc. Yao y Prusa [1] realizan en su trabajo una revisión de todas estas áreas.

Desde el punto de vista experimental, se ha realizado un gran esfuerzo en investigar la evolución del frente de fusión y las características de la transferencia de calor y de masa para materiales con un número de Prandtl bajo, como son el galio y el estaño. Así pues, Wolff y Viskanta [2] aportaron los perfiles de temperatura y la posición de la interfase durante el proceso de solidificación para una cavidad rectangular sobrecalentada. Utilizaban una técnica invasiva para determinar

la posición de la interfase sólido-líquido. Gau y Viskanta [3] investigaron la fusión del galio en una pared vertical, haciendo referencia al efecto de la convección natural en la forma y el movimiento del frente de fusión. En este trabajo determinan una expresión para calcular la fracción volumétrica de sólido. Debido a la naturaleza anisotrópica de los cristales de galio y a los efectos de la convección natural, la morfología irregular de la interfase no la pudieron representar de forma precisa. Campbell y Koster [4] utilizan en su trabajo una técnica no intrusiva, a tiempo real y radioscópica de observación para determinar la posición de la interfase durante la fusión del galio en una pared vertical. Campbell y Koster [4] realizaron sus experimentos con el fin de comprobar los resultados obtenidos por Gau y Viskanta [3].

También se han estudiado casos con materiales que tengan un número de Prandtl elevado, como por ejemplo ceras parafínicas o aceites de silicona. Ho y Viskanta [5], Bernard et al. [6] y Zhang et al. [7] investigaron el cambio de fase del n-octadecano en una cavidad rectangular. La posición del frente de fusión se determinó fotográficamente en ambos estudios debido a la transparencia de la parte fundida. Además, pusieron énfasis en la fuerte influencia de la convección natural en este caso.

Junto a los estudios experimentales, se han realizado un gran número de trabajos basados en simulaciones numéricas utilizando técnicas tanto de malla fija como de malla móvil, que se han visto facilitadas por el rápido incremento de la potencia computacional. No obstante, la mayoría de estudios con el galio, se han realizado con mallas relativamente poco densas, debido a las limitaciones computacionales. Algunos de estos autores reconocen que su elección del tamaño de malla fue una solución de compromiso entre la precisión de la solución numérica y el coste computacional. Se han utilizado variantes del método entálpico, como el método de porosidades [8] o el método de la capacidad de calor aparente [9]. También se han propuesto diferentes técnicas basadas en mallas móviles [10] [11]. Viswanath y Jaluria [12] primero y Bertrand et al. [13] después, realizaron estudios comparativos entre la utilización de métodos de malla fija o métodos de malla móvil. Llegaron a la conclusión que la elección más apropiada en cuanto al método dependerá de cada problema.

El problema de fusión del galio ha sido ampliamente utilizado por investigadores. De hecho, en la literatura aparece este problema con diferentes configuraciones, tal como se muestra en la Tabla 1.1.

Aspect Ratio	Rayleigh	Stefan	Referencias
0,286	$4,0 \cdot 10^4$	0,04	[14, 4, 3]
0,5	$2,2 \cdot 10^5$	0,04	[15, 16, 17, 12, 18, 19, 20, 21, 22]
0,714	$6,0 \cdot 10^5$	0,04	[8, 23, 17, 12, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31]
1,0	$1,6 \cdot 10^6$	0,04	[17, 32, 33, 34, 35, 13]

**Tabla 1.1:** Diferentes configuraciones que podemos encontrar en la literatura para el caso de fusión del galio

En estudios anteriores, si bien muchos autores decían que sus soluciones numéricas eran independientes de los parámetros numéricos, pocos adjuntaban en sus trabajos estudios de refinamiento de malla. Dantzing [23] obtenía sus resultados con mallas bastas, Viswanath [12] estudiaba la mallas de 30x30 y 50x50 e indicaba que se producía un cambio del 3% en los principales valores de flujo y que por lo tanto su solución era satisfactoria. Rady y Monhanty [34] seguían esta misma línea para las mallas de 20x20 y 35x35. El único estudio de malla publicado es el realizado por Stella [27], pero ellos no trataban de realizar un estudio de refinamiento de malla, sino que estaban analizando el número de recirculaciones que se producían.

En cuanto a esquemas numéricos, existen diversas publicaciones en las que se realiza un trabajo comparativo: Dantzing [23] que utilizaba el CDS y UDS, pero sorprende que encuentre 6 bucles de convección en los primeros estados de fusión del material. Stella [27] que encontró solo 4 bucles de convección utilizando el mismo esquema con mallas 5 veces más finas. Shyy [35] utilizaba un Upwind de primer y segundo orden llegando a la conclusión de que el número de bucles aumentaba a medida que aumentaba el orden del esquema numérico. Por último, Kim [36] realizó un estudio comparativo entre 4 esquemas numéricos: Hybrid, Upwind, Centered y Power Law pero utilizaba una malla de discretización demasiado basta.

Aunque el problema de fusión del galio se ha utilizado extensamente con fines comparativos, la exactitud de resultados pasados nunca ha sido claramente demostrada. Actualmente existe la controversia sobre la estructura del flujo en la parte fundida. La controversia surgió en los estudios de Dantzing [23], quien encontró en su trabajo sobre la fusión de galio una estructura de flujo con diferentes bucles, mientras que en trabajos anteriores solo se había encontrado un único bucle de convección en la zona fundida. Además, los resultados de Dantzing entraban en contradicción con los resultados experimentales de Gau y Viskanta [3], mientras que parecen estar en consonancia con aquellos obtenidos en sus estudios numéricos utilizando el método entálpico de Brent [8]. Dantzing utilizó en su trabajo el código comercial *FIDAP* y argumenta que el uso del esquema numérico *Upwind*

para los términos convectivos por la mayoría de autores podía ser la causa de la no presencia de todos los bucles de convección que se observan cuando se utiliza el *Central Difference Scheme*. Los resultados obtenidos por Dantzing han sido recientemente confirmados en el trabajo de Stella y Giangi [27] que utilizan mallas muy finas y el *Central Difference Scheme*. Cerimelle [28] en su trabajo trata de explicar porque existen diferencias entre los resultados numéricos y los resultados experimentales obtenidos por Gau y Viskanta, llegando a la conclusión de que las simulaciones numéricas llevadas a cabo no son consistentes con el procedimiento experimental. Cruchaga y Celentano [14] obtuvieron resultados numéricos con dos recirculaciones en los primeros estados y después tres recirculaciones. Esto confirmaba los resultados obtenidos por Dantzing, pero el número de recirculaciones era diferente.

Así pues, en el caso de fusión del galio existen dos líneas bien diferenciadas: aquellas que defienden la existencia de un único bucle de convección y aquellos que creen que existen dos recirculaciones. Además existen discrepancias en el número de Nusselt: cuando aparecen recirculaciones se observan oscilaciones en el resultado del número de Nusselt. Comentar que, si bien estas recirculaciones no se han mostrado en ningún estudio experimental para el Galio, es legítimo preguntarse sobre su validez. En el estudio experimental de Chikhaoui [37] aparece un comportamiento multicelular tal y como el que indica en su trabajo Dantzing [23]. Chikhaoui encontró en su trabajo 6 recirculaciones en un experimento con aire en una superficie vertical con convección natural. En otro estudio experimental con convección natural en una pared vertical con una relación de aspecto elevada, Vest y Arpacı [38] observaron 9 recirculaciones. Así pues, parece viable pensar en esta estructura multicelular [29].

También se ha sugerido que las dificultades en satisfacer experimentalmente las hipótesis aceptadas en las simulaciones numéricas podría explicar las discrepancias entre los resultados numéricos y los experimentales. Se podría decir que este caso requiere más investigación: verificación de código, estudios de refinamiento de malla y experimentos más detallados.

Así pues comentar, que los principales problemas que se presentan en el caso de fusión del galio son las diferencias observadas entre los estudios realizados con mallas de discretización finas y esquemas de alto orden con las soluciones experimentales, así como, la falta de estudios de refinamiento de mallado existentes en publicaciones.

### 1.3 Antecedentes del CTTC

El trabajo de esta Tesis se ha desarrollado en el Centro Tecnológico de Transferencia de Calor (CTTC) de la Universidad Politécnica de Cataluña (UPC). El

CTTC enfoca su trabajo en la formulación matemática, resolución numérica y validación experimental de fenómenos de transferencia de calor y de masa, así como de la optimización fluido-dinámica de equipos y sistemas térmicos. Los conocimientos adquiridos en estos temas han permitido el desarrollo de un código general, *DPC* [39], el cual permite la modelización de diferentes situaciones como por ejemplo de convección [40, 41], turbulencia [42, 43], combustión [44, 45], radiación en medios participantes y no-participantes [46], medios porosos [47] o mallas móviles [48].

El código utiliza el Método de Volúmenes Finitos (FVM) para la discretización de las ecuaciones gobernantes utilizando mallas cartesianas. Se utiliza una malla desplazada; esto quiere decir que las componentes del vector velocidad se calculan en las caras de los volúmenes de control, lo que permite una discretización más sencilla de la ecuación de continuidad, y la programación resulta más fácil.

En el marco del cambio de fase sólido-líquido la experiencia del CTTC es amplia [49, 50, 51, 52]. La problemática de esta temática con respecto al elevado tiempo computacional requerido para la obtención de resultados, nos hizo pensar en aprovechar la experiencia del centro en el uso de las técnicas multiblock en la fenomenología del cambio de fase [53, 54]. Las principales ventajas de este tipo de metodología son que nos permite optimizar la discretización con diferentes niveles de refinamiento y además, nos permite una relativamente fácil paralelización del problema. El Centro ha obtenido buenos resultados tanto en fenómenos simples [55] como complejos [44]. Por lo tanto, en el marco de este trabajo surge la extensión de las técnicas multiblock en la fenomenología del cambio de fase.

Las instalaciones del CTTC incluyen un cluster llamado Joan Francesc Fernandez (JFF), en memoria del ya desaparecido profesor de ciencias computacionales y análisis numérico que trajo el primer ordenador a la Escuela. El primer cluster se instaló en 1999 y estaba formado por 16 máquinas con AMD K7 a 600 MHz. Fue uno de los primeros sistemas de este tipo en España. Actualmente este cluster tiene diferentes tipos de ordenadores, tal como se muestra en la Tabla 1.2.

## 1.4 Objetivos

El principal objetivo de esta Tesis es el estudio, desarrollo y aplicación de técnicas de CFD para el análisis de la transferencia de calor y la dinámica de fluidos en problemas en los que tenga lugar la fenomenología de cambio de fase sólido-líquido.

Uno de los principales problemas en la simulación numérica del cambio de fase es el tiempo de cálculo, lo que ha conducido a la introducción de una serie de mejoras sobre el código DPC, entre las que cabe destacar la utilización de diferentes técnicas multiblock así como la posterior verificación y validación de las mismas.

Computer type	Number	CPUs (total)	RAM (total)	Network (switched Ethernet)	Disk space
Nodes AMD K7-900 MHz	48	48	24.576 Mb	100 Mbits/s	960 Gb
Nodes AMD K7 MP 1900+	3	6	5.120 Mb	100 Mbits/s	100 Gb
Nodes AMD K7 XP 2600+	40	40	40.690 Mb	100 Mbits/s	2.560 Gb
Nodes Pentium IV 2.8Ghz	26	26	26.624 Mb	1 Gbits/s	2.080 Gb
Server (K7 XP 2000+)	1	1	1.024 Mb	2x100 Mbits/s + 1 Gbit/s	100 Gb
Server (K7 MP 1900+)	2	4	2.048 Mb	2x100 Mbits/s + 1 Gbit/s	1452 Gb
<i>Total cluster</i>	<i>120</i>	<i>125</i>	<i>100Gbytes</i>		<i>7.25Tbytes</i>

**Tabla 1.2:** Características actuales del cluster JFF en el CTTC

En este trabajo se realiza una verificación tanto del código como de las soluciones numéricas utilizando métodos de extrapolación de Richardson y estudios de refinamiento de malla. Por otra parte, y dado que nos centraremos en el estudio de la fusión del galio, material que se encuentra en un rango de Prandtl muy bajo, trataremos de estudiar como afecta esto a la transición entre flujo laminar y turbulento, pasando por un estado oscilatorio.

Finalmente, y con el fin de conocer como afectan los diferentes parámetros del problema sobre el resultado final del mismo, se pretende realizar un estudio paramétrico.

## 1.5 Conclusiones

En este capítulo se presentan las principales líneas de trabajo de esta tesis. En primer lugar, se ha realizado una breve introducción a la fenomenología del cambio de fase sólido-líquido. A continuación se han expuesto los antecedentes que podemos encontrar en la literatura: primero a nivel general para después enfocarlos en el caso que se estudiará en este trabajo, es decir, la fusión del galio (tanto a nivel numérico como a nivel experimental). A continuación, se ha puesto un especial énfasis en los antecedentes del propio centro de trabajo, el CTTC. Finalmente se han expuesto los principales objetivos de este trabajo.

## Bibliografía

- [1] L.S. Yao and J. Prusa. Melting and Freezing. *Adv. Heat Transfer*, 19:1–95, 1989.

- [2] F. Wolff and R. Viskanta. Solidification of a Pure Metal at a Vertical Wall in Presence of Liquid Superheat. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31:1735–1744, 1988.
- [3] C. Gau and R. Viskanta. Melting and Solidification of a Pure Metal on a Vertical Wall. *ASME J. Heat Transfer*, 108:174–181, 1986.
- [4] T.A. Campbell and J.N. Koster. Visualization of Liquid-Solid Interface Morphologies in Gallium Subject to Natural Convection. *J. Cryst. Growth*, 140:414–425, 1994.
- [5] C.J. Ho and R. Viskanta. Inward Solid-Liquid Phase-Change Heat Transfer in a Rectangular Cavity with Conducting Vertical Walls. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27:1055–1065, 1984.
- [6] C. Bénard, D. Gobin, and F. Martinez. Melting in Rectangular Enclosures; Experiments and Numerical Simulations. *ASME Jour. Heat Transfer*, 107:794–803, 1985.
- [7] Y. Zhang, Z. Chen, Q. Wang, and Q. Wu. Melting in an Enclosure with Discrete Heating at a Constant Rate. *Experimental Fluid and Thermal Science*, 6:196–201, 1993.
- [8] A.D. Brent, V.R. Voller, and K.J. Reid. Enthalpy-Porosity Technique for Modelling Convection-Diffusion Phase Change: Application to the Melting of a Pure Metal. *Numerical Heat Transfer*, 13:297–318, 1988.
- [9] J.E. Simpson and S.V. Garimella. An Investigation of Solutal, Thermal and Flow Fields in Unidirectional Alloy Solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 41:2485–2502, 1998.
- [10] H. Zhang, V. Prasad, and M.K. Moallemi. Numerical Algorithm Using Multizone Adaptive Grid Generation for Multiphase Transport Processes with Moving and Free Boundaries. *Numerical Heat Transfer, part B*, 29:399–421, 1996.
- [11] C.J. Kim and M. Kaviany. A Numerical Method for Phase-Change Problems with Convection and Diffusion. *Int. Jour. Heat and Mass Transfer*, 35:457–467, 1992.
- [12] R. Viswanath and Y. Jaluria. A Comparison of Different Solution Methodologies for Melting and Solidification Problems in Enclosures. *Numerical Heat Transfer*, 24:77–105, 1993.

- [13] O. Bertrand, B. Binet, H. Combeau, S. Couturier, Y. Delannoy, D. Gobin, M. Lacroix, P. Le Quéré, M. Médale, J. Mencinger, H. Sadat, and G. Vieira. Melting Driven by Natural Convection. A Comparison Exercise: First Results. *Int. Jour. Therm. Sci.*, 38:5–26, 1999.
- [14] M.A. Cruchaga and D.J. Celentano. A Fixed-Mesh Finite Element Thermally Coupled Flow Formulation for the Numerical Analysis of Melting Processes. *Int. Jour. Numer. Meth. Eng.*, 51:1231–1258, 2001.
- [15] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez Segarra, and R. Alba. Numerical Simulation of Solid-Liquid Phase Change Phenomena. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 91(1–3):1123–1134, 1991.
- [16] M. Lacroix and V.R. Voller. Finite Difference Solutions of Solidification Phase Change Problems: Transformed versus Fixed Grids. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 17:25–41, 1990.
- [17] C.P. Desai and K. Vafai. A United Examination of the Melting Process within a Two-Dimensional Rectangular Cavity. *Jour. Heat Transfer*, 115:1072–1075, 1993.
- [18] D.J. McDaniel and N. Zabaras. A Least-Squares Front-Tracking Finite-Element Method Analysis of Phase-Change with Natural Convection. *Int. Jour. Numer. Meth. Eng.*, 37:2755–2777, 1994.
- [19] W. Shyy, S. Pal, H.S. Udaykumar, and D. Choi. Structured Moving Grid and Geometric Conservation Laws for Fluid Flow Computation. *Numer. Heat Transfer, part A*, 34:369–397, 1998.
- [20] R. Sampath and N. Zabaras. An Object Oriented Implementation of a Front Tracking Finite Element Method for Directional Solidification Processes. *Int. J. Numer. of Meth. Eng.*, 44:1227–1265, 1999.
- [21] Z.X. Gong, S. Devahastin, and A.S. Mujumdar. Enhanced Heat Transfer in Free Convection-Dominated Melting in a Rectangular Cavity with an Isothermal Vertical Wall. *Applied Thermal Engineering*, 19(12):1237–1251, 1999.
- [22] Z.X. Gong and A.S. Mujumdar. Flow and Heat Transfer in Convection-Dominated Melting in a Rectangular Cavity Heated from Below. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(17):2573–2580, 1998.
- [23] J.A. Dantzig. Modelling Liquid-Solid Phase Change with Melt Convection. *Int. J. Numer. of Meth. Eng.*, 28:1769–1785, 1989.

- [24] V.R. Voller. *An Overview of Numerical Methods for Solving Phase Change Problems*, volume 1. Advances in Numerical Heat Transfer, Taylor and Francis, 1997.
- [25] S.A. Khashan. *An Advanced Numerical Model for Phase Change Problems in Complicated Geometries*. PhD thesis, University of Pittsburgh, 1998.
- [26] Y. Jaluria. Numerical Modeling of Thermal Materials Processing Systems. *Proc. AMEFED*, 250:137–148, 1999.
- [27] F. Stella and M. Giangi. Melting of a Pure Metal on a Vertical Wall: Numerical Simulation. *Numer. Heat Transfer, part A*, 138:193–208, 2000.
- [28] M.M. Cerimele, D. Mansutti, and F. Pistella. A Front-Fixing Method for Fluids in Liquid/Solid Phase Change with Benchmark Test. In *Proceedings of the Fifth European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS)*, 2000.
- [29] N. Hannoun, V. Alexiades, and T.Z. Mai. Resolving the Controversy over Tin and Gallium Melting in a Rectangular Cavity Heated from the Side. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 44:253–276, 2003.
- [30] D. Pal and Y.K. Joshi. Melting in a Side Heated Tall Enclosure by a Uniformly Dissipating Heat Source. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44:375–387, 2001.
- [31] S. Jana, S. Ray, and F. Durst. A Numerical Method to Compute Solidification and Melting Processes. *Applied Mathematical Modelling*, In Press, 2005.
- [32] W. Shyy. *Computational Modelling for Fluid Flow and Interfacial Transport*. Elsevier, 1994.
- [33] W. Shyy and M.M. Rao. Enthalpy Based Formulation for Phase Change Problems with Application to g-Jitter. *Microgravity Science and Technology-VII*, 1:41–49, 1994.
- [34] A. Rady and A.K. Mohanty. Natural Convection during Melting and Solidification of Pure Metals in a Cavity. *Numer. Heat Transfer, part A*, 29:49–63, 1996.
- [35] W. Shyy, H.S. Udaykumar, M.M. Rao, and R.W. Smith. *Computational Fluid Dynamics with Moving Boundaries*. Microgravity Science and Technology-VII, Taylor and Francis, 1996.
- [36] S. Kim, S. Anghaie, and G. Chen. A Fixed-Grid Two-Phase Numerical Model for Convection-Dominated Melting and Solidification. *Proc. First MIT Conf. on Computational Fluid and Solid Mechanics*, pages 12–14, 2001.

- [37] A. Chikhaoui, P. Bontoux, M.K. Maslanik, and R.L. Sani. Steady Three Dimensional Thermal Convection in a Vertical Rectangular Enclosure: Transition to Multicellular Flow. In M.S. Engelman, editor, *Fluid Dynamics International*, pages 4.1–4.19. FIDAP User’s Convergence, 1987.
- [38] C.M. Vest and V. Arpaci. Stability of natural convection in a vertical slot. *J. Fluid Mechanics*, 36:1–15, 1969.
- [39] CTTC-UPC. DPC: library for the development of programs focussed on the resolution of combined heat and mass transfer problems, 2004.
- [40] R. Cònsul, I. Rodríguez, C.D. Pérez Segarra, and M. Soria. Virtual Prototyping of Storage Tanks by means of Three-Dimensional cfd and Heat Transfer Simulations. *Solar Energy*, 77:179–191, 2004.
- [41] J. Cadafalch, A. Oliva, G. Van Der Graaf, and X. Albets. Natural convection in a large, inclined channel with asymmetric heating and surface radiation. *Journal of Heat Transfer*, 125(5):812–820, 2003.
- [42] C.D. Pérez-Segarra, A. Oliva, and M. Costa. Benchmark of turbulent natural convection in a square cavity. Comparison between different k- $\epsilon$  turbulence models. pages 109–120, 1993.
- [43] J. Cadafalch. *Numerical simulation of turbulent flows. Multiblock techniques. Verification and experimental validation*. PhD thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, 2002.
- [44] R. Cònsul, C.D. Pérez-Segarra, K. Claramunt, J. Cadafalch, and A. Oliva. Detailed numerical simulation of laminar flames by a parallel multiblock algorithm using loosely coupled computers. *Combustion Theory and Modelling*, 7(3):525–544, 2003.
- [45] K. Claramunt, R. Cònsul, C.D. Pérez-Segarra, and A. Oliva. Multidimensional mathematical modeling and numerical investigation of co-flow partially premixed methane/air laminar flames. *Combustion and Flame*, 137:444–457, 2004.
- [46] G. Colomer, M. Costa, R. Cònsul, and A. Oliva. Three dimensional numerical simulation of convection and radiation in a differential heated cavity using the discrete ordinates method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(2):257–269, 2004.
- [47] C. D. Pérez-Segarra, C. Orozco, and C. Oliet. Multidimensional computation of fluid flow and heat transfer in fin-and-tube heat exchangers. In *Proceedings of the 6th IIR Gustav Lorentzen Natural Working Fluids Conference*, 2004.

- [48] C. Orozco, K. Claramunt, R. Cònsul, and A. Oliva. Finite Volume Computation and Verification of Fluid Flow and Heat Transfer in Domains with Moving Boundaries. In *Proceedings of the Fourth European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS)*, 2004.
- [49] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, and R. Alba. Numerical simulation of solid-liquid phase change phenomena. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 91(1-3):1123–1134, 1991.
- [50] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, and N.R. Reyes. Numerical simulation of solid-liquid phase change storage units. In *Proceedings of the 9th Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*, volume VIII, pages 115–126, 1993.
- [51] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, and A. Ivancic. Three-dimensional numerical simulation of melting processes. *Physical Models for Thermal Energy Stores*, pages 87–94, 1996.
- [52] M. Costa, A. Oliva, and C.D. Pérez-Segarra. A three-dimensional numerical study of melting inside a heated horizontal cylinder. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 32(5):531–553, 1997.
- [53] J. Cadafalch, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, M. Costa, and J. Salom. Comparative study of conservative and nonconservative interpolation schemes for the domain decomposition method on laminar incompressible flows. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 35(1):65–84, 1999.
- [54] J. Cadafalch, C.D. Pérez-Segarra, M. Sòria, and A. Oliva. Fully conservative multiblock method for the resolution of turbulent incompressible flows. In *Proceedings of the Fourth European Computational Fluid Dynamics Conference (ECCOMAS CFD)*, volume 1.2, pages 1234–1239, 1998.
- [55] J. Cadafalch, J. Salom, M. Costa, and A. Oliva. Domain decomposition as a method for the parallel computing of laminar incompressible flows. In *Proceedings of the Second European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS)*, pages 845–851, 1996.

## Capítulo 2

# El cambio de fase sólido líquido.

## Materiales, aplicaciones y formulación matemática

En este capítulo se trata la problemática del cambio de fase, explicando, en primer lugar, en que consiste esta fenomenología. A continuación se dan las características que debe tener un material para que se pueda utilizar como material de cambio de fase en procesos de acumulación de energía. En este punto se clasifican los materiales de cambio de fase en dos familias: materiales comerciales/no comerciales y compuestos orgánicos/inorgánicos, dando una amplia base de datos de materiales que pueden ser utilizados como materiales de cambio de fase junto con sus propiedades termofísicas. A continuación se expondrá la formulación matemática que rige esta fenomenología, dando la diferentes hipótesis que se tendrán en cuenta a lo largo de este trabajo. Finalmente, comentar que si bien existen diferentes métodos numéricos para resolver el fenómeno del cambio de fase, en este trabajo se ha optado por utilizar el método entálpico. Entre sus ventajas cabe destacar que evita tener que introducir ecuaciones específicas para la interfase, además permite utilizar una malla fija en todo el dominio y la condición de Stefan queda impuesta de manera implícita. Esta metodología, ampliamente utilizada en el *CTTC*, permite además la coexistencia de más de un frente de cambio de fase y que la interfase tenga un cierto grosor.

## 2.1 Introducción

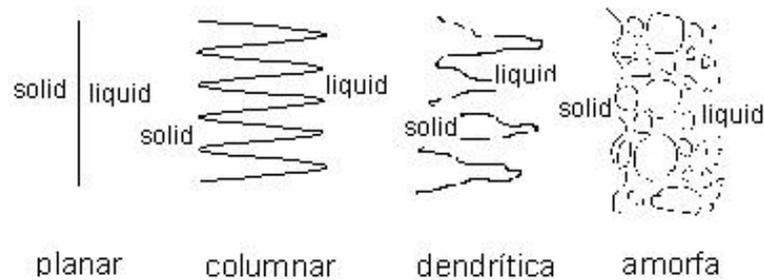
Diferentes mecanismos actúan cuando un sólido funde o un líquido solidifica. Así pues, un cambio de fase implica transferencia de calor e incluso puede implicar transferencia de masa, subenfriamiento, absorción o cesión de calor latente, cambios en las propiedades termofísicas, efectos superficiales, . . .

Tanto la fase sólida como la líquida están caracterizadas por la presencia de fuerzas de cohesión debidas a la cercanía entre los átomos que las componen. En la fase sólida las moléculas vibran alrededor de posiciones fijas de equilibrio, mientras que en la fase líquida estas moléculas deben permanecer entre estas posiciones de equilibrio. La manifestación macroscópica de esta energía de vibración es lo que conocemos como **energía térmica**, la medida de la cual es la **temperatura**. Claramente se ve que los átomos en la fase líquida son más enérgicos que en la fase sólida; así pues, antes de que un sólido funda deberá adquirir una cierta cantidad de energía para superar las fuerzas de cohesión que mantienen la estructura de sólido. Esta energía es la conocida como **calor latente de cambio de fase** ( $L$ ) del material y representa la diferencia de energía térmica (entalpía) entre las fases líquida y sólida. Está claro que para la solidificación de un líquido se requerirá la cesión de este calor latente y la estructuración de los átomos en sus posiciones de estabilidad [1].

La transición de una fase a otra, es decir, la absorción o cesión de calor latente tendrá lugar a una temperatura a la cual la estabilidad de la fase se rompe en favor de la otra en función de la energía disponible. Este cambio de fase tendrá lugar a la **temperatura de fusión** ( $T_m$ ) que dependerá de la presión y de otras variables termodinámicas.

La región de transición donde coexisten las fases sólida y líquida se conoce con el nombre de **interfase**. Su espesor puede variar desde unos pocos Angstroms hasta algunos centímetros y su microestructura puede ser muy compleja, en función de diferentes factores: del propio material, el ratio de enfriamiento, el gradiente de temperaturas en el líquido, la tensión superficial, . . .

En la mayoría de materiales puros que solidifican a un temperatura constante la interfase es *planar* (ver Figura 2.1) y con un espesor despreciable. En otros casos, normalmente debido a que se encuentra líquido por debajo de la temperatura de fusión en un estado termodinámicamente inestable, la región de transición entre fases puede tener un espesor aparente y se conoce como región de mezcla o *mushy region* y su estructura puede ser dendrítica o columnar.



**Figura 2.1:** Diferentes estructuras de interfase con que nos podemos encontrar [1]

En este trabajo se ha estudiado la modelización matemática y el análisis de los procesos de cambio de fase a nivel macroscópico. El propósito de la modelización matemática es cuantificar el proceso con el fin de ser capaces de predecir la evolución del campo de temperaturas de un material, la cantidad de energía utilizada o almacenada, la posición de la interfase, así como otras magnitudes que puedan ser de interés. Las ecuaciones y condiciones que expresarán la física del problema estarán sujetas a unas ciertas aproximaciones con el fin de poder solucionar la problemática.

Finalmente, cuando nos refiramos a sustancias con un alto calor de cambio de fase especialmente aptas para la acumulación de energía muchas veces utilizaremos las siglas *PCM* que significan *Phase Change Material* (Material de cambio de fase).

## 2.2 Materiales de cambio de fase

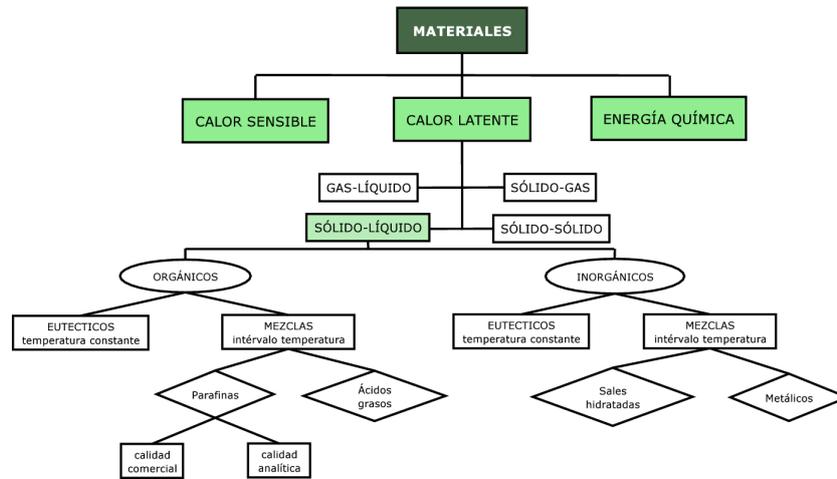
La acumulación de energía térmica por calor latente ha sido ampliamente estudiada por investigadores en los últimos 20 años. Este tipo de acumulación provee soluciones en áreas muy específicas:

- Tiempo de retardo y potencia disponible entre producción o disponibilidad de energía y su consumo en sistemas receptores (energía solar, cogeneración, etc).
- Suministro de energía de seguridad (hospitales, centros computacionales, etc).
- Inercia térmica y protección térmica.

En el primer caso, las aplicaciones relacionadas con el uso de energías renovables son muy comunes, en particular el uso de la energía solar, aunque se pueden encontrar otras aplicaciones en equipos de cogeneración con reducciones importantes en el precio de la energía eléctrica consumida en las horas valle. Actualmente, el suministro de energía de seguridad se suele realizar con un equipo auxiliar. Por último, en el campo

de la inercia térmica y la protección térmica son donde los *PCMs* han alcanzado una mayor penetración en el mercado.

En la Figura 2.2 aparece una posible clasificación que se puede realizar de los materiales que pueden ser utilizados para la acumulación de energía térmica.



**Figura 2.2:** Clasificación de los materiales que se utilizan para la acumulación de energía térmica

### 2.2.1 Materiales comerciales/no comerciales

Si bien muchas sustancias han sido estudiadas como *PCMs*, solo unas pocas se han comercializado como tales. En la Tabla 2.1 se muestra una lista de materiales de cambio de fase comerciales que se pueden conseguir en el mercado, con sus propiedades termofísicas dadas por las compañías así como las empresas que los producen.

PCM	$T_m$ [°C]	L [kJ/kg]	$\rho$ (s/l) [kg/m <sup>3</sup> ]	$\lambda$ (s/l) [W/m·K]	$c_p$ (s/l) [kJ/kg·K]	Empresa
SN33	-33	221.77	724	1.6/2.2	3.48/5.37	Cristopia
TH-31	-31	131.00	n.d.	n.d.	n.d.	TEAP
SN29	-28.9	207.75	681	1.6/2.2	4.23/6.08	Cristopia
SN26	-26.2	243.41	704	1.6/2.2	4.35/6.14	Cristopia

n.d. no disponible

<b>PCM</b>	<b>T<sub>m</sub></b> [°C]	<b>L</b> [kJ/kg]	<b>ρ (s/l)</b> [kg/m <sup>3</sup> ]	<b>λ(s/l)</b> [W/m·K]	<b>c<sub>p</sub>(s/l)</b> [kJ/kg·K]	<b>Empresa</b>
SN21	-21.3	217.21	613	1.6/2.22	3.86/6.01	Cristopia
TH-21	-21	222.00	n.d.	n.d.	n.d.	TEAP
STL-21	-21	240.00	1120	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
SN18	-18.3	242.21	706	1.6/2.2	4.59/6.32	Cristopia
TH-16	-16	289.00	n.d.	n.d.	n.d.	TEAP
STL-16	-16	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
IN15	-15.4	277.48	602	1.6/2.2	4.19/6.7	Cristopia
IN12	-11.7	276.97	620	1.6/2.2	4.35/6.33	Cristopia
STLN10	-11	271.00	1050	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
IN10	-10.4	291.15	617	1.6/2.2	4.08/6.24	Cristopia
TH-10	-10	283.00	n.d.	n.d.	n.d.	TEAP
STL-6	-6	284.00	1070	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
IN06	-5.5	256.90	625	1.6/2.2	4.32/6.34	Cristopia
TH-4	-4	286.00	n.d.	n.d.	n.d.	TEAP
STL-3	-3	328.00	1010	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
RT-4	-3	165.00	860/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
IN03	-2.6	293.72	592	1.6/2.2	4.86/7.3	Cristopia
IC00	0	312.26	558	1.6/2.2	4.52/7.1	Cristopia
AC00	0	311.14	560	1.15/1.85	4.5/7.07	Cristopia
RT2	6	214.00	860/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
Termasorb43	6	163.14	870	n.d.	n.d.	Thermasorb
Climsel C7	7	54.00	1420	0.6/0.7	3.6	Climator
RT5	7	156.00	860/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
RT6	8	174.00	860/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
Climsel C15	15	130.00	n.d.	n.d.	n.d.	Climator
Termasorb65	18	173.14	880	n.d.	n.d.	Thermasorb
RT20	22	172.00	870/750	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
SP22 A4	24	165.00	1380	0.6	2.5	Rubitherm
Climsel C24	24	108.00	1480	0.5/0.7	3.6	Climator
SP25 A8	26	180.00	1380	0.6	2.5	Rubitherm
STL27	27	213.00	1090	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
S27	27	207.00	1470	n.d.	n.d.	Cristopia
AC27	27	184.78	867	1.15/1.85	3.57/4.32	Cristopia
RT27	28	179.00	870/750	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
GR27	28	72.00	750	0.2	1.5	Rubitherm
PX27	28	112.00	640	0.1	1.6	Rubitherm

n.d. no disponible

PCM	$T_m$ [°C]	L [kJ/kg]	$\rho$ (s/l) [kg/m <sup>3</sup> ]	$\lambda$ (s/l) [W/m·K]	$c_p$ (s/l) [kJ/kg·K]	Empresa
Termasorb83	28	186.00	900	n.d.	n.d.	Termasorb
TH29	29	188.00	n.d.	n.d.	n.d.	TEAP
RT31	31	168.00	870/760	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
Climsel C32	32	194.40	1450	0.5/0.7	3.6	Climator
RT35	35	157.00	880/760	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
Termasorb95	35	180.00	900	n.d.	n.d.	Termasorb
RT42	43	174.00	880/760	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
RT41	45	155.00	880/760	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
GR41	45	64.00	750	0.2	1.5	Rubitherm
PX41	45	98.00	640	0.1	1.6	Rubitherm
STL47	47	221.00	1340	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
Climsel C48	48	216.40	1360	0.5/0.7	3.6	Climator
Termasorb122	50	160.00	900	n.d.	n.d.	Termasorb
STL52	52	201.00	1300	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
RT52	52	167.00	900/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
PX52	52	105.00	640	0.1	1.6	Rubitherm
STL55	55	242.00	1290	n.d.	n.d.	Mitsubishi Chemical
RT54	55	179.00	900/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
TH58	58	193.68	500	n.d.	2.69/3.91	TEAP
Climsel C58	58	255.60	1460	0.6/0.7	3.6	Climator
RT58	59	181.00	900/780	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
Termasorb143	61	188.00	920	n.d.	n.d.	Termasorb
RT65	64	173.00	910/790	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
Climsel C70	70	280.80	1700	0.6/0.7	3.6	Climator
PCM72	72	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.	Merck KgaA
Termasorb175	79	200.00	930	n.d.	n.d.	Termasorb
RT80	81	175.00	920/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
GR80	81	70.00	750	0.2	1.5	Rubitherm
FB80	81	132.00	920/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
PK80 A6	81	149.00	900	0.2	2.0	Rubitherm
TH89	89	152.64	1500	n.d.	2.02/3.10	TEAP
RT90	90	194.00	930/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
RT100	99	168.00	940/770	0.2	1.8/2.4	Rubitherm
Termasorb215	101	193.00	930	n.d.	n.d.	Termasorb

n.d. no disponible

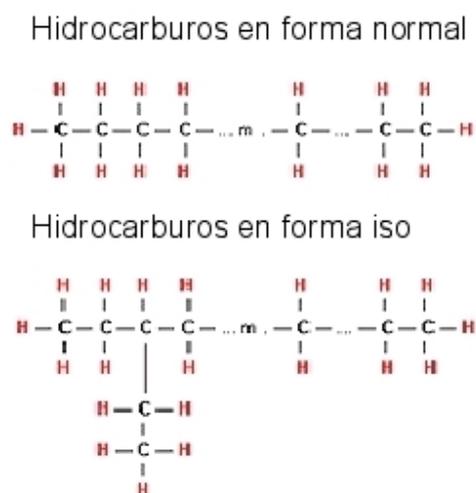
**Tabla 2.1:** PCMs comerciales disponibles en el mercado [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]

### 2.2.2 Compuestos orgánicos/inorgánicos

Los **compuestos orgánicos** son sustancias químicas basadas en carbono, hidrógeno y oxígeno y muchas veces con nitrógeno, azufre, fósforo, boro o halógenos. Entre los compuestos orgánicos utilizados como materiales de cambio de fase cabe destacar las parafinas y los polioles.

Las *parafinas* son mezclas de hidrocarburos saturados, normalmente consistentes en una mezcla de numerosos alcanos obtenidos durante el proceso de refinamiento del crudo de petróleo o producidas sintéticamente mediante el proceso de Fisher-Tropsch. Son materiales orgánicos. Después del refinamiento son un producto inodoro, insípido y no tóxico. La fórmula general de estos hidrocarburos saturados es del tipo  $C_nH_{2n+2}$  donde  $n$  varía entre 18 y 50 (temperatura de fusión entre 30 y 90 °C).

Pueden encontrarse en dos formas, tal y como se muestra en la Figura 2.3: en forma normal, es decir, formada por cadenas rectas, o en forma iso, cuando estas cadenas tienen ramificaciones.

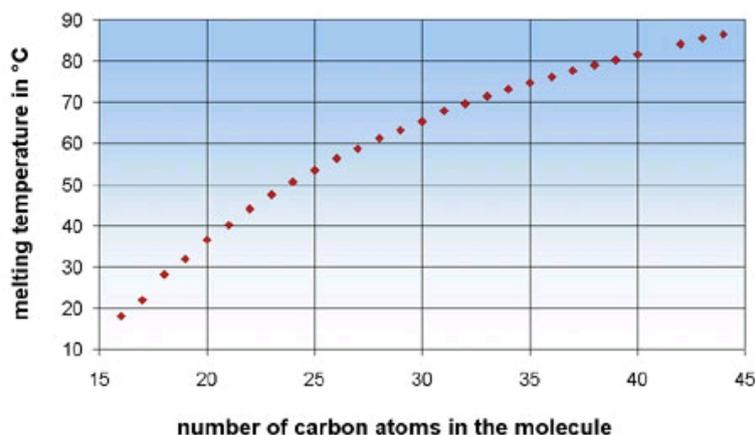


**Figura 2.3:** Estructura molecular de las parafinas

No obstante, se ha de comentar que como elementos de acumulación de calor principalmente se utilizan las normal-parafinas, pues éstas poseen una mayor capacidad de acumulación.

El átomo de carbono de la cadena principal está muy relacionado con la temperatura de fusión: al aumentar su contenido, aumenta la longitud de la cadena

y por lo tanto su peso molecular lo cual provoca un aumento en la temperatura de fusión del material. Este efecto aparece representado en la Figura 2.4 .

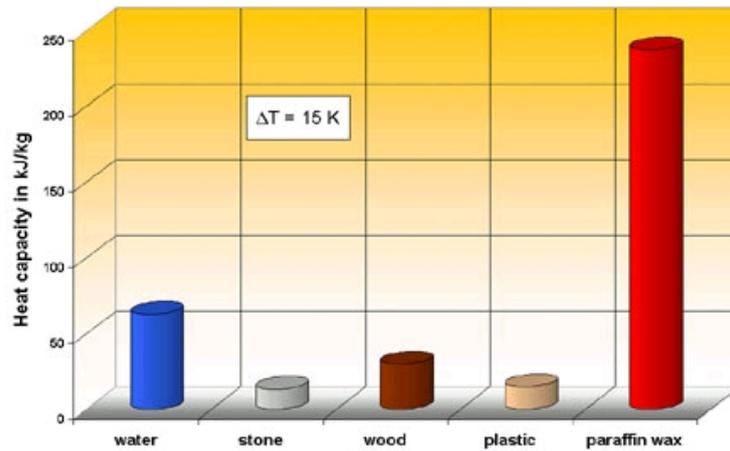


**Figura 2.4:** Variación de la temperatura de fusión de las parafinas al aumentar el número de átomos de carbono en la cadena principal [9]

Su calor específico es de  $2,1 \text{ kJ}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ , muy superior al de otros materiales utilizados como materiales de acumulación térmica (ver Figura 2.5).

Para ser un material orgánico, poseen un elevado calor de fusión por unidad de peso, de entre  $180$  y  $250 \text{ kJ}/\text{kg}$ . La combinación de estos dos factores hace que tenga un excelente valor de densidad de energía acumulada (entre  $54$  y  $71 \text{ kWh}/\text{m}^3$  en función de la parafina utilizada para una diferencia de temperatura de  $20 \text{ K}$ ). Consecuentemente, este material ofrece de cuatro a cinco veces una mayor capacidad de acumulación por unidad de volumen o masa que el agua cuando se trabaja con bajos gradientes de temperatura.

Las parafinas son estables hasta  $250^\circ\text{C}$  aproximadamente. Su viscosidad es baja en la fase líquida. Además es un líquido no polar, lo que significa que no se mezclará con otros líquidos polares como por ejemplo el agua o el alcohol. Como la mayoría de compuestos orgánicos, las parafinas tienen una baja conductividad térmica. Esto es una desventaja, que puede ser compensada aumentando la superficie de transferencia de calor en el interior del material. Su conductividad eléctrica también es baja, lo que hace que tengan excelentes propiedades como aislante eléctrico. Son inflamables, pero su punto de ignición se encuentra por encima de los  $250^\circ\text{C}$ .



**Figura 2.5:** Densidad de energía acumulada de diferentes materiales utilizados para la acumulación de energía térmica [9]

La densidad de este material en estado líquido es de 750 a 850 kg/m<sup>3</sup>, y en estado sólido de 800 a 900 kg/m<sup>3</sup>, esto hace que su máximo volumen de expansión sea de aproximadamente un 10% durante el proceso de cambio de fase, valor que se puede considerar como aceptable, si bien condiciona el dimensionado del contenedor.

Poseen un amplio abanico de puntos de fusión a temperaturas relativamente bajas (de -5 a 66 °C), no son tóxicos ni corrosivos, son estables a lo largo del tiempo pues no existe ninguna reacción química durante el proceso de fusión (la fusión y la solidificación son procesos puramente físicos) y son químicamente estables e inertes por debajo de los 500 °C. Pero no todo son ventajas, pues, como se ha comentado, tienen una baja conductividad térmica y son inflamables.

Los *polioles* son compuestos orgánicos derivados de los azúcares, en los que un grupo carbonilo se ha transformado por hidrogenación en un grupo hidroxilo. Los polioles son materiales extremadamente seguros utilizados como agentes edulcorantes. Erythritol, Xylitol, Sorbitol, entre otros, existen originalmente en la naturaleza. El Erythritol se utiliza en bebidas (sobretudo en Japón) para endulzar sin calorías. El Xylitol en un agente edulcorante muy famoso, se utiliza en un caramelo muy popular. Sus propiedades aparecen reflejadas en la Tabla 2.2 [10]. Todos los polioles mostrados en esta Tabla tienen un elevado calor de fusión, excepto el D-Sorbitol. La configuración del Erythritol y el Galactitol es especular, la configuración del Mannitol es axialsimétrica, y la del Xylitol y el Sorbitol se encuentra entre estas dos.

Hoermansdoerfer, [11] en su trabajo dispuso que si el número de carbonos de su cadena principal era par y al mismo tiempo su configuración era simétrica, esto implicará un elevado calor de fusión.

En cuanto a los **compuestos inorgánicos** cabe destacar las sales hidratadas. Una *sal hidratada* es una combinación de un compuesto y agua, encontrándose esta molécula de agua en el interior de una red cúbica. Este agua se puede liberar cuando la sustancia es sometida a altas temperaturas. Poseen un alto calor de fusión, una conductividad térmica relativamente alta y son fácilmente disponibles y económicos. Además al fundirse no se producen variaciones de volumen importantes, pero pierden progresivamente su reversibilidad y a menudo son corrosivos.

En las Tablas 2.2 y 2.3 se pueden observar algunos compuestos orgánicos e inorgánicos, respectivamente junto con algunas de sus propiedades termofísicas.

PCM	$T_m$ [°C]	$L$ [kJ/kg]	$\rho$ (s/l) [kg/m <sup>3</sup> ]	$\lambda$ (s/l) [W/m·K]	$c_p$ (s/l) [kJ/kg·K]
hetanone-4	-33.0	209.00	822	n.d.	2.25
n-undecane	-26.0	141.00	740	0.13	1.43/2.21
ethylene glycol	-11.5	179.00	1109	0.256	-/2.406
dodecane	-9.6	211.00	749	0.15	1.66/2.21
n-tetradecane	5.5	228.00	-/771	n.d.	-/2.21
polyglycol E400	8.0	100.80	1228/1125	0.186	n.d.
dimethyl-sulfoxide	16.5	85.78	1009	n.d.	n.d.
n-Pentadecane	10.0	205.00	-/768	n.d.	n.d.
n-Hexadecane	16.7	237.10	835/774	0.15	2.11
n-Heptadecane	21.7	213.00	-/778	n.d.	n.d.
polyglycol E600	22.0	127.20	1232/1126	0.188	n.d.
1-dodecanol	26.0	260.00	820	n.d.	-/2.36
n-Octadecane	28.0	243.00	814/774	0.15	2.16
nonadecane	32-34	222.00	785	n.d.	1.92/2.3
n-Eicosane	36.7	247.00	856/778	0.15	2.21
1-tetradecanol	38.7	205.00	858.77	n.d.	2.4/3.0
n-Heneicosane	40.2	200.00	-/756	n.d.	n.d.
n-Decosane	44.0	249.00	-/763	n.d.	n.d.
n-Tricosane	47.5	232.00	-/764	n.d.	n.d.
hexacosane	56-59	250.00	800	n.d.	1.9/2.4
heptacosane	58.8	235.00	802	n.d.	1.9/2.4

n.d. no disponible

PCM	$T_m$ [°C]	L [kJ/kg]	$\rho$ (s/l) [kg/m <sup>3</sup> ]	$\lambda$ (s/l) [W/m·K]	$c_p$ (s/l) [kJ/kg·K]
octacosane	61-64	254.00	803	n.d.	1.9/2.4
nonacosane	63.2	239.00	805	n.d.	1.9/2.5
triacontane	65-67	252.00	806	n.d.	1.9/2.5
polyglycol E6000	66.0	190.00	1212/1085	n.d.	n.d.
stearic acid	67-69	203.00	941	0.17	2.35
dotriacontane	67-72	266.00	809	n.d.	1.9/2.4
biphenyl	69.85	120.45	1166/976	n.d.	1.08/1.46
hexatriacontane	77.7	259.00	815	n.d.	1.84/2.45
heptatriacontane	77.7	275.00	815	n.d.	1.84/2.45
propionamide	79.65	168.20	1088	n.d.	-/2.05
naphthalene	80.1	147.70	1145/976	0.32/0.132	-/1.52
polyethylene	90.0	276.50	-/910	0.16	1.56
xylitol	91.0	226.00	1422/1352	0.730/0.430	2.00/3.80
D-sorbitol	96.0	165.80	1490	0.2296	1.63/1.52
HDPE	100-150	200.00	n.d.	n.d.	n.d.
erythritol	122.1	339.80	1480/1300	0.731/0.326	1.38/2.77
lactitol	145-150	n.d.	800/600	n.d.	n.d.
D-mannitol	164-169	308.00	1540	n.d.	1.27/1.34
pentaerythritol	256-258	320.00	1380/885.36	0.1497	1.39/1.87
dulcitol	275-280	357.40	1470	n.d.	1.31

n.d. no disponible

**Tabla 2.2:** Compuestos orgánicos que pueden utilizarse como PCMs, [12, 13, 14]

PCM	$T_m$ [°C]	L [kJ/kg]	$\rho$ (s/l) [kg/m <sup>3</sup> ]	$\lambda$ (s/l) [W/m·K]	$c_p$ (s/l) [kJ/kg·K]
LiClO <sub>3</sub> ·3H <sub>2</sub> O	8.1	253.0	1720	n.d.	n.d.
ZnCl <sub>2</sub> ·3H <sub>2</sub> O	10.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
K <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub> ·6H <sub>2</sub> O	13.0	108.0	n.d.	n.d.	n.d.
NaOH·3½H <sub>2</sub> O	15.5	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Na <sub>2</sub> CrO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O	18.0	n.d.	1483	n.d.	n.d.
KF·4H <sub>2</sub> O	18.5	231	1455/1447	n.d.	1.84
Mn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	25.8	125.9	1820	n.d.	n.d.
CaCl <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	27.0	190.6	1710	0.53/1.08	2.5/1.87
LiNO <sub>3</sub> ·3H <sub>2</sub> O	30.0	296.0	1550/1430	n.d.	n.d.
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O	32.0	251.1	1485/1460	0.23/0.46	1.92/3.26
Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·10H <sub>2</sub> O	32.0	267.0	1442	n.d.	n.d.
CaBr <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	34.0	115.5	2194/1956	n.d.	n.d.
Na <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub> ·12H <sub>2</sub> O	35.0	281.0	1520	0.514	1.70
Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	36.4	147.0	2065	0.464	1.34
KF·2H <sub>2</sub> O	41.4	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
K(CH <sub>3</sub> COO)·1½H <sub>2</sub> O	42.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O	43.0	142.0	n.d.	n.d.	n.d.
K <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> ·7H <sub>2</sub> O	45.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O	45.5	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Na <sub>2</sub> S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ·5H <sub>2</sub> O	48.0	201.0	1729	0.41/0.69	1.86/2.35
Na <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub> ·7H <sub>2</sub> O	48.1	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O	54.5	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Na(CH <sub>3</sub> COO)·3H <sub>2</sub> O	58.0	265.	1290/1440	0.65/0.41	3.18/2.07

n.d. no disponible

PCM	$T_m$ [°C]	L [kJ/kg]	$\rho$ (s/l) [kg/m <sup>3</sup> ]	$\lambda$ (s/l) [W/m·K]	$c_p$ (s/l) [kJ/kg·K]
Cd(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O	59.5	n.d.	2455	n.d.	n.d.
Fe(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	60.0	n.d.	2455	n.d.	n.d.
NaOH·H <sub>2</sub> O	64.0	272.0	1720	n.d.	1.51
Na <sub>2</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ·10H <sub>2</sub> O	70.0	184.0	n.d.	n.d.	n.d.
Na <sub>2</sub> B <sub>4</sub> O <sub>7</sub> ·10H <sub>2</sub> O	75.0	n.d.	1730	n.d.	n.d.
Na <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> ·12H <sub>2</sub> O	75.0	216.0	1620	n.d.	1.98/1.58
Ba(OH) <sub>2</sub> ·8H <sub>2</sub> O	78.0	301.0	2180/1937	1.26/0.65	1.17/1.26
AlK(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·12H <sub>2</sub> O	80.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Al <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ·18H <sub>2</sub> O	88.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Al(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ·8H <sub>2</sub> O	89.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Mg(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	89.0	150.0	1636/1550	0.67/0.50	n.d.
(NH <sub>4</sub> )Al(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	95.0	269.0	n.d.	n.d.	n.d.
Na <sub>2</sub> S·5½H <sub>2</sub> O	97.5	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
CaBr <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O	110.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
Al <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ·16H <sub>2</sub> O	112.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
MgCl <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	117.0	169.0	1560/1440	0.69/0.57	1.72
Mg(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O	130.0	n.d.	n.d.	n.d.	n.d.
NaNO <sub>3</sub>	310.0	174.0	2258	0.5	n.d.
NaOH	318.0	158.0	2135	n.d.	n.d.
KNO <sub>3</sub>	337.0	116.0	2110	0.5	n.d.
KOH	360.0	167.0	2044	0.5	n.d.
MgCl <sub>2</sub>	714.0	450.0	2140	n.d.	n.d.
NaCl	800.0	480.0	2160	5.00	n.d.
Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	854.0	275.7	2533	2.00	n.d.
KF	857.0	452.0	2370	n.d.	n.d.
K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	897.0	235.8	2290	2.00	n.d.

n.d. no disponible

**Tabla 2.3:** Compuestos inorgánicos que pueden utilizarse como PCMs, [12, 13, 14]

Finalmente, en la Tabla 2.4 aparece una comparación de las ventajas e inconvenientes que tiene el uso de materiales orgánicos o inorgánicos para la acumulación de energía térmica.

Orgánicos	Inorgánicos
<i>Ventajas</i>	
No corrosivos	Mayor entalpía de cambio de fase
Bajo o nulo subenfriamiento	
Estabilidad térmica y química	
<i>Desventajas</i>	
Menor entalpía de cambio de fase	Subenfriamiento
Baja conductividad térmica	Corrosión
Inflamabilidad	Separación de las fases
	Segregación de las fases, falta de estabilidad térmica

**Tabla 2.4:** Comparación entre materiales orgánicos e inorgánicos para acumular calor

### 2.2.3 Propiedades termofísicas

Las propiedades termofísicas que deben poseer los materiales de cambio de fase aparecen recopiladas en la Tabla 2.5.

<b>Propiedades térmicas</b>	<b>Propiedades físicas</b>
Temperatura de fusión adecuada para la aplicación	Las variaciones en su volumen al cambiar de estado deben ser pequeñas
Calor latente de cambio de fase elevado	Densidad elevada
Alta conductividad térmica	Capacidad calorífica elevada
	No debe producirse subenfriamiento
<b>Propiedades químicas</b>	<b>Otras Propiedades</b>
Estabilidad	Barato
No debe producirse separación entre sus fases	Abundante
Compatibilidad con el material del contenedor	
No tóxico, no inflamable, no contaminante, no corrosivo	

**Tabla 2.5:** Características importantes que deben tener los materiales de cambio de fase en aplicaciones de acumulación de energía

### 2.2.4 Campos de aplicación

El cambio de fase sólido-líquido resulta de gran interés en diferentes áreas industriales. Estas áreas se pueden dividir en dos:

- Aquellas orientadas a la manufactura de materiales sólidos con unas determinadas características, entre las que cabe destacar la industria metalúrgica, que a través de la solidificación de un metal fundido consigue una pieza previamente diseñada.
- Aquellas interesadas en aprovechar el calor latente que se genera en el propio proceso de cambio de fase. Estas a su vez se subdividen en dos: el campo del control térmico y el de la acumulación por energía térmica. En el primer caso lo que se hace es aprovechar el hecho de que durante el cambio de fase la temperatura no varía; esto resulta muy interesante en el control térmico de equipos eléctricos y electrónicos. En el segundo caso nos referimos a la acumulación por energía térmica (TES) que lo que hace es aprovechar que el calor latente de cambio de fase es más importante que el calor sensible en algunos materiales, lo cual hace que tengan una capacidad de acumulación mayor. Existe una diferencia entre estos dos campos de aplicación que es la conductividad térmica de la sustancia en cuestión. En algunos casos de protección térmica es apropiado tener valores bajos de conductividad mientras que en los sistemas de acumulación valores bajos de esta propiedad pueden conducirnos a problemas, como puede ser la incapacidad de disponer de la energía almacenada rápidamente.

En la Tabla 2.6 se muestran diferentes aplicaciones del cambio de fase en el campo de la acumulación por energía térmica [15].

A continuación se exponen algunas de estas aplicaciones con más detalle.

#### Elemento pasivo de acumulación

En ambientes cálidos las casas normalmente se construyen con materiales ligeros. Estos materiales tienen el inconveniente de que no proporcionan suficiente masa térmica para la acumulación de calor, por lo que estas casas estarán sobrecalentadas durante el día y por la noche se enfriarán rápidamente. Para compensar estas fluctuaciones de temperatura, se utiliza aire acondicionado durante el día y un sistema de calefacción por la noche, que funcionan mayoritariamente con energía fósil. Para reducir este consumo de energía fósil puede utilizarse la energía solar pasiva. Durante las horas de sol la radiación solar puede transformarse en calor. Esta energía térmica se acumula en el hormigón de las paredes para poderlo utilizar en periodos en los que la energía solar no está disponible, por ejemplo, durante la

<b>Aplicación</b>
Acumulación térmica de energía solar
Elemento pasivo de acumulación en construcción/arquitectura bioclimática
Enfriamiento: utilización de la tarifa nocturna reducida y reducción de la potencia instalada
Calentamiento de agua caliente sanitaria: utilización de la tarifa nocturna reducida
Seguridad: mantenimiento de la temperatura en habitaciones con ordenadores o aplicaciones eléctricas
Protección térmica de alimentos: transporte, helados, etc.
Industria agroalimentaria, vino, productor lácteos (absorbiendo picos en la demanda), invernaderos
Protección térmica de componentes electrónicos.
Aplicaciones médicas: transporte de sangre, terapias de frío-calor
Máquinas de enfriamiento (eléctricas o por combustión)
Confort térmico en vehículos
Control de picos exotérmicos en reacciones químicas
Sistemas térmicos en industria espacial

**Tabla 2.6:** Aplicación de los materiales de cambio de fase en el campo de la acumulación por energía térmica

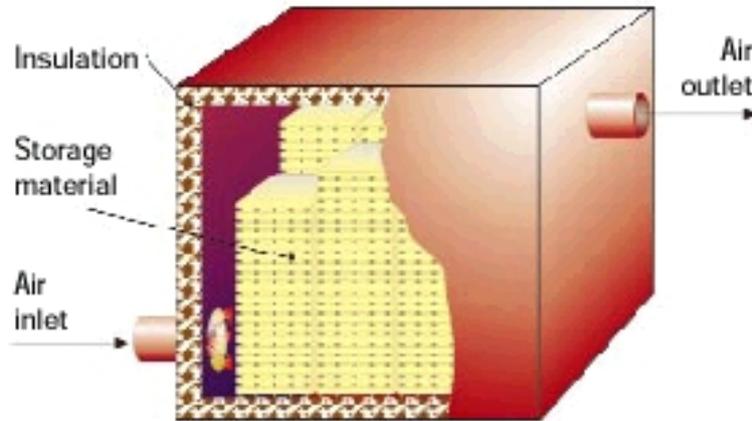
noche. Sin embargo, a menudo no es deseable usar paredes de hormigón en viviendas nuevas pues es muy pesado.

Una solución puede ser utilizar una fina capa de materiales de cambio de fase para así aumentar la masa térmica de la casa. De este modo, las paredes almacenarán energía térmica durante el día que cederán a la habitación por la noche. Con esto, no solo se consigue un ahorro energético, sino que también un ahorro económico, pues ahorraremos el consumo de energía del aire acondicionado y el sistema de calefacción.

### **Sistemas de aire caliente**

Hasta hace poco, estos sistemas solo se utilizaban en edificios industriales, oficinas, hoteles, . . . , pero actualmente su popularidad está creciendo en las casas privadas, especialmente para aquellas con un bajo consumo energético. En estos casos, son necesarios unos tiempos de reacción cortos para proveer la energía térmica requerida. En la Figura 2.6, se representa esquemáticamente un sistema de aire caliente.

La utilización de energía solar, energía de regeneración y de una tarifa



**Figura 2.6:** Representación esquemática de un sistema de aire caliente [9]

nocturna reducida mediante el uso de bombas de calor en combinación con una unidad de acumulación por calor latente puede ser un método de calefacción muy ventajoso, desde el punto de vista económico y energético. En este tipo de unidades de acumulación normalmente se utilizan ceras parafínicas.

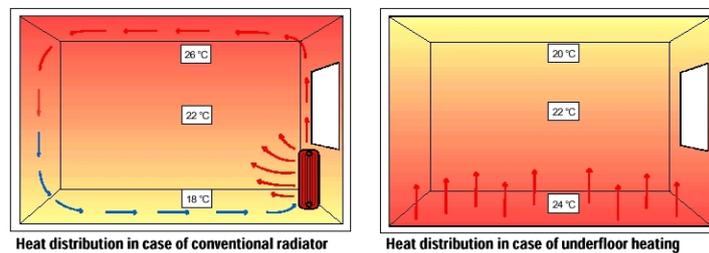
La forma del material de almacenamiento hace que tenga una gran superficie de transferencia de calor que permite que el contenedor tenga cualquier forma concebible. Por otra parte, la capacidad de acumulación por unidad de volumen se ve incrementada de 3 a 5 veces con respecto a los sistemas que utilizan otros materiales como piedra, grava o arena; por lo tanto, la unidad es sensiblemente más ligera y requiere menos espacio, haciendo que su coste de construcción sea inferior.

### Sistemas de calefacción bajo el suelo

Los sistemas de calefacción bajo tierra reúnen todas las ventajas de los sistemas de calefacción modernos.

- Calor confortable
- Coste de operación bajo
- Fácil utilización

La sensación de confort en una habitación se ve influenciada por muchos factores incluyendo un buen balance en la distribución del calor. Los radiadores convencionales mueven el aire caliente hacia el techo, creando una corriente en la habitación. El movimiento que sigue el aire aparece representado en la Figura 2.7. En esta Figura se observa como el aire frío baja, haciendo que la temperatura más baja se produzca a nivel de suelo, causando una sensación de insatisfacción por pies fríos. Esto se tiende a solucionar ajustando el radiador a una mayor temperatura lo cual hace que aumente el coste.

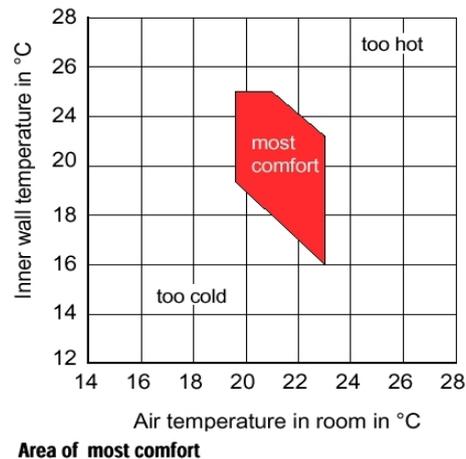


**Figura 2.7:** Distribución de temperaturas y movimiento seguido por el aire para diferentes sistemas de calefacción [2]

Un sistema de calefacción bajo el suelo produce un calor uniforme en toda la superficie del suelo. El aire caliente se va enfriando lentamente al subir hacia arriba. El resultado es una habitación climatizada de manera muy cercana a la situación ideal, que se muestra en la Figura 2.8. Esta sensación de confort óptimo se alcanza cuando la temperatura media está sobre 20 o 22 °C. La temperatura en la habitación puede entonces reducirse de 2 a 3 °C comparado con los sistemas de calefacción convencionales y al mismo tiempo se incrementa la sensación de confort. De esta manera, el coste de calefacción puede verse reducido en más de un 15%.

Las ventajas de estos sistemas de calefacción sobre los convencionales son múltiples: calor de radiación confortable, situación climática ideal en la habitación, reduciéndose las corrientes de aire, quedan más paredes libres que se pueden utilizar para otras cosas (para muebles, o cualquier otro elemento decorativo) pues no hay radiadores, regulación automática, no hay chimeneas ni sala de caldera, no se despiden humo (como pasa con una chimenea o una estufa de gas), bajo coste de funcionamiento...

En los sistemas de calefacción bajo el suelo convencionales, toda la capacidad de acumulación que tienen se consigue mediante la incorporación de una fina capa de hormigón que introduce un gradiente de temperatura entre la fuente y la superficie



**Figura 2.8:** Área de mayor confort [2]

superior del suelo.

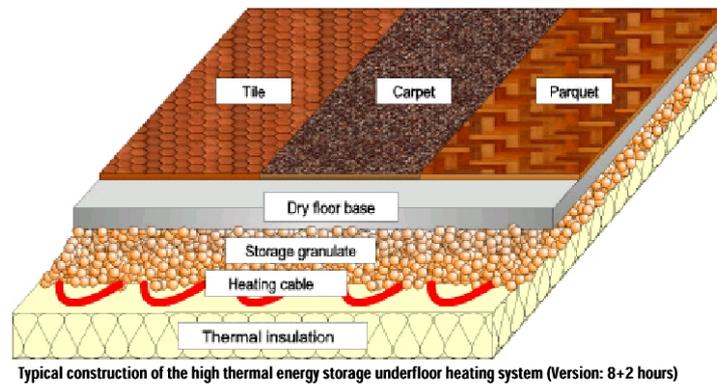
Si se utilizan materiales de cambio de fase, se conseguirá tener una capacidad de acumulación superior y por lo tanto se podrá utilizar un espesor de pared inferior, pudiéndose reducir más de un 50% en comparación con la construcción convencional.

Su funcionamiento es sencillo: durante la noche, cuando la tarifa eléctrica es reducida, el material de cambio de fase se calienta mediante un cable eléctrico, alcanzándose la fusión. Durante este proceso de fusión, se acumulará el calor asociado a este.

Cuando este calor es requerido durante el día, el material cede este calor acumulado, cambiando su estado de líquido a sólido. Una ventaja muy importante es que estos procesos de fusión y solidificación tienen lugar a una temperatura prácticamente constante.

En la Figura 2.9 se ve como resultaría la construcción al utilizar un material de estas características. A pesar de la fina capa de construcción, una gran cantidad de energía puede ser acumulada. La combinación del granulado como soporte y el material de acumulación térmica, garantizan que las dimensiones y la estabilidad del suelo se mantenga a lo largo de los ciclos de cambio de fase.

Estos materiales pueden ser fácilmente manipulados y confinados, por ejemplo, utilizando fibras de madera.



**Figura 2.9:** Utilización de materiales de cambio de fase en calefacción por suelo radiante [2]

Las ventajas más importantes de utilizar este tipo de materiales son:

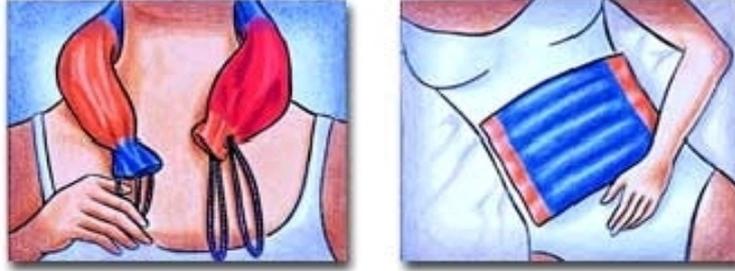
- Gran capacidad de acumulación térmica
- Son ecológicos (100% reciclables) e inofensivos para la salud humana
- Ligeros y hidrorrepelentes
- Larga vida
- Fáciles de manipular

### Productos de confort y terapia médica

En este campo hay dos tipos de productos: productos calientes y productos fríos.

Los *productos calientes* proporcionan una agradable sensación de calor durante un largo periodo de tiempo. El producto se carga con calor durante unos pocos minutos en un microondas. El calor absorbido será liberado a una temperatura relativamente constante durante 1 o 2 horas.

Los *productos fríos* son ligeros y proporcionan una terapia de frío segura y placentera. Estos productos se enfrían introduciéndolos en un congelador durante un mínimo de 4 horas antes de la aplicación.



**Figura 2.10:** PCM en terapia médica: Productos Calientes [2]

Finalmente, existe un producto en forma de polvo que proporciona tanto frío como calor basado en un PCM con una forma extremadamente fina que ha sido desarrollado y patentado en Estados Unidos. Más fino que la tierra, este producto permanece suave y permite la libre circulación a cualquier temperatura y siempre podrá ajustarse perfectamente al contorno del cuerpo.

Estos productos no son tóxicos y cumplen todos los requisitos de 'United States Food an Drug Administration' (FDA). Son ecológicamente seguros y no tienen efectos adversos en plantas, animales o microorganismos y son biodegradables.

### 2.3 Formulación matemática

Las ecuaciones gobernantes básicas describen los principios de conservación de la masa, del momento lineal y de la energía. En una región del espacio arbitraria de volumen  $V$ , delimitada por una superficie cerrada  $S$ , los principios de conservación antes mencionados pueden escribirse de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_S \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \vec{v} \rho dV + \int_S \vec{v} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \int_S \vec{n} \cdot \vec{\sigma} dS + \int_V \vec{b} \rho dV \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_V (u + e_c) \rho dV + \int_S (u + e_c) \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \\ & - \int_S \vec{q} \cdot \vec{n} dS + \int_S \vec{v} \cdot (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) dS + \int_V \vec{v} \cdot \vec{b} \rho dV + \int_V \Phi \rho dV \end{aligned} \quad (2.3)$$

En estas ecuaciones  $\vec{n}$  representa el vector unitario normal a la superficie  $S$  y dirigido hacia el exterior. Las fuerzas externas están representadas por el tensor de tensiones  $\vec{\sigma}$ , el cual incluye las fuerzas de presión y las tensiones viscosas.

Con el fin de expresar estas ecuaciones gobernantes en su forma diferencial asumiremos las siguientes hipótesis:

- *Medio Continuo*: estrictamente un fluido es un conjunto de moléculas que se mueven por la influencia de fuerzas, pudiendo ser éstas internas, que son debidas a la presencia de otras moléculas cercanas, o externas, que son debidas a la influencia de otros cuerpos situados a una cierta distancia (por ejemplo, las fuerzas gravitatorias). En un análisis detallado de un fluido sería necesario conocer la posición y la velocidad inicial de todas las moléculas del fluido y seguir su movimiento a lo largo del tiempo. Pero si se coge una muestra grande de moléculas y las dimensiones del dominio de análisis son grandes en comparación con el tamaño de las moléculas, es posible asumir que las propiedades del fluido varían de forma continua en el tiempo y en el espacio.
- *Modelo bidimensional*: Utilizaremos las coordenadas cartesianas y supondremos que las variaciones en la dirección  $z$  son menores que en las direcciones  $x$  y  $y$ , y por lo tanto las despreciaremos.
- *Flujo incompresible*: Las densidades no varían con la presión. Esto no implica que las densidades sean constantes, pues pueden variar con la temperatura.
- *Fluido Newtoniano*: El fluido se guiará por la ley de viscosidad de Stokes.
- *Hipótesis de Boussinesq*: Para los casos de convección forzada es admisible despreciar los términos de las fuerzas másicas en las ecuaciones de cantidad de movimiento. Para los casos de convección natural es admisible suponer un comportamiento incompresible del flujo, considerando únicamente las variaciones de densidad con la temperatura en el término de fuerzas másicas de las ecuaciones de cantidad de movimiento.
- *Disipación viscosa negligible*: La disipación viscosa es en general negligible en la ecuación de la energía, excepto para fluidos con una viscosidad muy elevada o fluidos a altas velocidades.
- *Fluido no participante en la radiación*: se considera que el medio no emite ni absorbe ni dispersa radiación térmica. Realmente, sólo el vacío se comporta así, pero para los fluidos a temperaturas absolutas bajas y/o gradientes de temperatura bajos podemos considerar esta hipótesis como válida.

- *Equilibrio termodinámico en la interfase sólido-líquido*: el cambio de fase ocurrirá a una temperatura constante ( $T_m$ ), y la interfase se encontrará a esta temperatura (esto se da así para sustancias puras).
- *Las propiedades termofísicas son las mismas en la fase sólida y en la líquida*: por ejemplo, cabe comentar que en el caso de la densidad en la mayoría de materiales esto no es así, lo que provoca un fenómeno de expansión o de contracción de la fase líquida en función de si esta densidad es menor o mayor a la del sólido. No obstante, se ha comprobado que este hecho afecta poco al campo térmico y a la transferencia de calor.

### 2.3.1 Condiciones iniciales y condiciones de contorno

Para poder describir un caso en concreto es necesario añadir a las ecuaciones de Navier-Stokes unos datos adicionales; estos datos adicionales son las *condiciones iniciales* y las *condiciones de contorno*. Las condiciones iniciales vienen dadas por los valores de las variables independientes en el instante de tiempo inicial. La información del exterior entra en el dominio a través de las condiciones de contorno.

Existen, principalmente, dos formas de introducir estas condiciones de contorno: fijando el valor de la variable (*condición de Dirichlet*) o especificando el flujo de esta variable (*condición de Neumann*). Así pues, y a modo de ejemplo, podemos decir que un contorno es isoterma cuando su temperatura es conocida y uniforme o que otro contorno es adiabático cuando su flujo de calor es nulo.

Para sustancias puras, en la interfase sólido-líquido la temperatura de cambio de fase es conocida. Sin embargo, la posición de la interfase es desconocida, por lo que se precisa de una condición adicional para completar el problema. Esta condición adicional se obtiene de imponer la conservación de la energía a través de la interfase. Es la denominada **condición de Stefan** [16, 17].

La condición de Stefan relaciona los flujos caloríficos a un lado y otro de la interfase con el calor latente liberado (solidificación) o consumido (fusión). La condición de Stefan nos proporciona el movimiento de la interfase y puede escribirse:

$$\lambda \left[ \frac{dT}{dn} \right]_l^s = \rho L \frac{ds}{dt} \quad (2.4)$$

donde  $ds/dt$  es la velocidad de la interfase sólido-líquido. Esta condición lo que viene a decir es que, la cantidad de calor latente liberada debido al desplazamiento de la interfase es igual al flujo neto de calor en la superficie.

### 2.3.2 Métodos numéricos

Existen diferentes métodos para resolver problemas de cambio de fase sólido-líquido. De una parte podemos mencionar los *métodos que siguen la frontera móvil* [18, 19, 20, 21, 22, 23], los cuales utilizan mallas variables de modo que en cada instante la interfase coincida con los puntos de la malla. Serán mallas adaptables al contorno de cambio de fase y dinámicas en el tiempo, pero este método tiene el inconveniente de que es difícil de utilizar cuando las situaciones son complejas (situaciones tridimensionales, contorno de fusión complejo, etc.) y además necesitan una región fundida inicial. Por otra parte, existen *métodos que fijan la frontera móvil* [24, 25]. Estos métodos tratan de introducir los cambios de variables necesarios para que el problema se reduzca a una frontera con focos internos fija en el espacio, pero este método tiene el problema de que el conjunto de ecuaciones resultante será más complejo que el inicial. Finalmente está el *Método Entálpico* [26, 27, 28], que consiste en reformular el problema de manera que se elimine explícitamente la condición de frontera sólido-líquido, obteniéndose un conjunto de ecuaciones que son aplicables a todo el dominio físico y obteniéndose la posición de la interfase a posteriori.

El método que nosotros empleamos en este trabajo es el **Método Entálpico**, pues nos permite utilizar una malla fija en todo el dominio, la condición de Stefan queda impuesta de manera implícita, permite la coexistencia de más de un frente de cambio de fase y permite que la interfase tenga un cierto grosor.

### 2.3.3 Conservación de la masa

La ecuación de continuidad puede escribirse de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.5)$$

Lo que viene a decir que la variación de la masa debe ser igual al flujo másico que atraviesa el volumen de control.

En coordenadas cartesianas, bidimensional y teniendo en consideración la hipótesis de flujo incompresible, resulta:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2.6)$$

### 2.3.4 Conservación del momento lineal

La ecuación de la cantidad de movimiento puede escribirse como:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \nabla \cdot \vec{\sigma} + \vec{b} \quad (2.7)$$

Teniendo en cuenta que  $\vec{\sigma}$ , como ya hemos comentado antes, incluye las fuerzas de presión ( $-P\vec{\delta}$ ) y las tensiones viscosas ( $\vec{\tau}$ ), y que de las fuerzas volumétricas ( $\vec{b}$ ) sólo consideraremos la fuerza gravitatoria ( $\rho\vec{g}$ ), esta ecuación queda:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla P + \nabla \cdot \vec{\tau} + \rho\vec{g} \quad (2.8)$$

Introduciendo la Ley de viscosidad de Stokes para flujo incompresible y viscosidad constante, queda:

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \vec{v} + \rho\vec{g} \quad (2.9)$$

En el caso que nos ocupa, y con el objetivo de forzar que las velocidades sean nulas en la fase sólida, se introducen unos términos adicionales  $S_{\vec{\sigma}}$  en las ecuaciones de cantidad de movimiento. Así, la ecuación 2.9 en forma cartesiana y bidimensional, resulta:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial P_d}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + S_u \quad (2.10)$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial P_d}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho g \beta (T - T_\infty) + S_v \quad (2.11)$$

siendo  $P_d$  la denominada presión dinámica y donde se ha introducido la hipótesis de Boussinesq (considerando  $\vec{g} = -g\vec{k}$ ) y los términos fuente adicionales,  $S_u$  y  $S_v$ , que se definen de la siguiente manera:

$$S_u = -A \cdot u \quad S_v = -A \cdot v \quad (2.12)$$

donde  $A$  es un parámetro que valdrá 0 en la fase líquida y  $C$  en la fase sólida, siendo  $C$  un valor muy elevado (típicamente  $10^8$ ). Para los volúmenes de control donde tiene lugar el cambio de fase se han hecho diferentes aproximaciones [29, 30], algunas de las cuales se presentan a continuación.

Una posibilidad es considerar que si la fracción de líquido en el volumen de control es menor de 0.5 el valor de  $A$  es cero; si por contra, el valor de esta fracción líquida es mayor que la mitad, el valor del parámetro  $A$  sea el de  $C$ .

Otra opción, si el cambio de fase es discreto, es reducir la velocidad de forma lineal con la fracción líquida, es decir:

$$A = C \cdot (1 - f_l) \quad 0 < f_l < 1 \quad (2.13)$$

Finalmente está la opción de aplicar la ecuación típica para medios porosos de Carman-Kozeny (citado en [29]), para reducir de manera gradual la velocidad a cero. Lo que se hace es considerar el volumen de control como un medio poroso y aplicar la siguiente expresión:

$$A = C \cdot \frac{(1 - f_l)^2}{f_l^3 + \delta} \quad 0 < f_l < 1 \quad (2.14)$$

donde  $\delta$  será un valor muy pequeño, para evitar la división por cero. Esta expresión, que es la que nosotros hemos utilizado en este trabajo, también es útil cuando el cambio de fase tiene lugar en una franja de temperaturas, es decir, cuando existe una región donde coexisten las fases sólida y líquida.

Por último, señalar que para asegurarse que el sistema de ecuaciones convergerá, se ha de recurrir a un tratamiento implícito de estos términos fuente.

### 2.3.5 Conservación de la energía

La ecuación de la energía, convenientemente simplificada según las hipótesis anteriores y despreciando los términos de energía cinética y trabajo de las fuerzas másicas, puede escribirse:

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla h = -\nabla \cdot \vec{q} \quad (2.15)$$

El calor de conducción se relaciona con la temperatura a través de la Ley de Fourier, resultando:

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla h = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (2.16)$$

La entalpía se puede relacionar con la temperatura en términos de la fracción líquida y del calor latente como:

$$h(T) = (1 - f_l) \int_{T_{ref}}^T c_s dT + f_l \int_{T_{ref}}^T c_l dT + f_l(T)L \quad (2.17)$$

considerando que la capacidad específica de las fases sólida y líquida es la misma, esta expresión resulta:

$$h(T) = \int_{T_{ref}}^T c_p dT + f_l(T)L \quad (2.18)$$

Es muy importante en esta expresión la definición de la relación entre la fracción líquida y la temperatura ( $f_l(T)$ ). En el caso de un cambio de fase isoterma (a la temperatura  $T_m$ ) la fracción líquida local viene dada por la siguiente función:

$$f_l = \begin{cases} 1 & \text{si } T > T_m \\ 0 & \text{si } T < T_m \end{cases}$$

Introduciendo la ecuación 2.18 en la expresión 2.16 y teniendo en cuenta la definición que hemos hecho de la  $f_l$  resulta:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \vec{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \rho L \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (2.19)$$

que en coordenadas cartesianas, bidimensional y conductividad térmica constante, queda:

$$\rho c_p \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right] = \lambda \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] - \rho L \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (2.20)$$

El problema radica en la determinación del campo de temperaturas conjuntamente con la fracción líquida ( $f_l$ ). Esta fracción líquida es la que seguirá el proceso de cambio de fase y es justamente este concepto el que nos permitirá utilizar una malla fija en el espacio y en el tiempo.

## 2.4 Solución numérica del cambio de fase sólido-líquido

En este apartado se va a abordar la solución numérica del fenómeno del cambio de fase sólido-líquido, sin olvidar el objetivo principal: modelizar el cambio de fase, a nivel macroscópico, con el propósito de predecir la evolución del campo de temperaturas, la cantidad de energía almacenada y la posición de la interfase.

El comportamiento térmico del fenómeno de cambio de fase está gobernado por la ecuación de la energía en la fase sólida, por la ecuación de continuidad, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la energía en la fase líquida, y finalmente, la condición de Stefan en la interfase. Esto hace que sea necesario un tratamiento simultáneo de estas ecuaciones acopladas para obtener una solución numérica.

Resumiendo los comentarios y consideraciones anteriores (fluido Newtoniano, flujo laminar, disipación viscosa despreciable, cambio de fase isotérmico, hipótesis de Boussinesq y flujo bidimensional), el sistema de ecuaciones gobernantes toma la forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \\
& \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial P_d}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + A \cdot u \\
& \rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial P_d}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho g \beta (T - T_\infty) + A \cdot v \\
& \rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \left[ u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right] = \frac{\lambda}{c_p} \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] - \frac{\rho L}{c_p} \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (2.21)
\end{aligned}$$

Obsérvese que este conjunto de ecuaciones se puede compactar en la denominada ecuación de convección-difusión, esto es:

$$\frac{\partial (\rho \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S \quad (2.22)$$

o bien, introduciendo la ecuación de continuidad:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \vec{v} \nabla \phi = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S \quad (2.23)$$

Los cuatro términos que constituyen esta ecuación son, de izquierda a derecha, el término transitorio, el convectivo, el difusivo y finalmente el término fuente. Físicamente, la ecuación indica que la acumulación de una propiedad intensiva  $\phi$  en el diferencial de volumen más el flujo neto saliente debido al transporte convectivo más el flujo neto saliente de  $\phi$  debido al transporte difusivo es igual a  $S$ , que será un valor que representará la generación de  $\phi$  por unidad de volumen. El hecho de que el término difusivo aparezca en el lado derecho de la igualdad indica que la difusión va en el sentido contrario al que establece el gradiente.

El valor de los parámetros que aparecen en la expresión 2.22 para las diferentes ecuaciones se indican en la Tabla 2.4

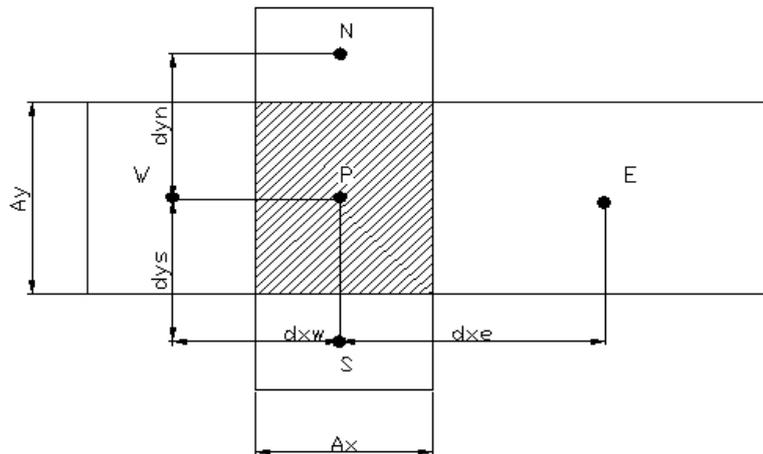
Ecuación	$\phi$	$\Gamma$	$S$
Continuidad	1	0	0
CDM <sub>x</sub>	u	$\mu$	$-\frac{\partial P_d}{\partial x} + Au$
CDM <sub>y</sub>	v	$\mu$	$-\frac{\partial P_d}{\partial y} + \rho g \beta (T - T_\infty) + Av$
Energía	T	$\frac{\lambda}{c_p}$	$-\frac{\rho L}{c_p} \frac{\partial f_l}{\partial t}$

**Tabla 2.7:** Parámetros de la ecuación de convección-difusión

El proceso de discretización de la ecuación de convección-difusión consiste en reemplazar la información continua contenida en la formulación diferencial por

valores adjudicados en un cierto número de nodos ubicados en el dominio. Esto requiere la transformación de la ecuación diferencial en una ecuación algebraica, con el fin de poder relacionar los valores de la variable en los nodos considerados.

El método de discretización que utilizaremos será el método conocido como Técnica de Volúmenes Finitos. Este método ofrece la ventaja de que la solución obtenida satisface la conservación de la masa, la cantidad de movimiento y la energía, independientemente del número de nodos utilizados. Consiste en dividir el dominio en estudio en un número finito de volúmenes de control no solapados entre sí, de manera que en el interior de cada uno de ellos haya un nodo (ver Figura 2.11). El mallado podrá ser estructurado o no estructurado, según le correspondan a cada nodo cuatro nodos vecinos o no. En este trabajo solo se trabajará con mallas estructuradas y rectangulares. La malla podrá estar o no regularmente distribuida.



**Figura 2.11:** Geometría de un volumen de control bidimensional

La ecuación de convección-difusión puede escribirse:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = S \quad (2.24)$$

donde han sido agrupados los flujos convectivos y difusivos en un solo término denominado  $J$  y que representa el flujo total a través de cada una de las caras. Esta

ecuación integrada sobre un volumen finito queda:

$$\frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \Delta x \Delta y + J_e - J_w + J_n - J_s = (S_C + S_P \phi_P) \Delta x \Delta y \quad (2.25)$$

Por otra parte la ecuación de continuidad también puede tratarse de la siguiente manera:

$$\frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t} \Delta x \Delta y + F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \quad (2.26)$$

donde  $F$  representa el flujo másico en cada una de las caras, y que se calculará:

$$\begin{aligned} F_e &= (\rho u)_e \Delta y \\ F_w &= (\rho u)_w \Delta y \\ F_n &= (\rho v)_n \Delta x \\ F_s &= (\rho v)_s \Delta x \end{aligned} \quad (2.27)$$

Si multiplicamos la expresión 2.26 por  $\phi_P$  obtendremos:

$$\frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \Delta x \Delta y + F_e \phi_P - F_w \phi_P + F_n \phi_P - F_s \phi_P = 0 \quad (2.28)$$

y restamos a esta expresión la ecuación 2.25,

$$\begin{aligned} (\phi_P - \phi_P^0) \frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t} + (J_e - F_e \phi_P) - (J_w - F_w \phi_P) + \\ (J_n - F_n \phi_P) - (J_s - F_s \phi_P) = (S_C + S_P \phi_P) \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (2.29)$$

Lo que tratamos es de escribir la expresión 2.29 de la forma:

$$a_P \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (2.30)$$

Si seguimos la propuesta de Patankar [31], los coeficientes los podemos calcular de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} a_E &= D_e A (\|Pe_e\|) + \max(-F_e, 0) \\ a_W &= D_w A (\|Pe_w\|) + \max(F_w, 0) \\ a_N &= D_n A (\|Pe_n\|) + \max(-F_n, 0) \\ a_S &= D_s A (\|Pe_s\|) + \max(F_s, 0) \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + \rho_P^0 \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \\ b &= \rho_P^0 \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \phi_P^0 + S_P \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (2.31)$$

donde la letra D indica el término difusivo, la F el convectivo y Pe es el número de Peclet local y pueden escribirse:

$$\begin{aligned} D_e &= \Gamma_e \frac{\Delta y}{\delta x_e} & D_w &= \Gamma_w \frac{\Delta y}{\delta x_w} & D_n &= \Gamma_n \frac{\Delta x}{\delta y_n} & D_s &= \Gamma_s \frac{\Delta x}{\delta y_s} \\ F_e &= (\rho u)_e \Delta y & F_w &= (\rho u)_w \Delta y & F_n &= (\rho v)_n \Delta x & F_s &= (\rho v)_s \Delta x \\ Pe_e &= \frac{F_e}{D_e} & Pe_w &= \frac{F_w}{D_w} & Pe_n &= \frac{F_n}{D_n} & Pe_s &= \frac{F_s}{D_s} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Por último, la función  $A(\|Pe\|)$  dependerá del tipo de esquema numérico que se utilice.

Si nos centramos en la ecuación de la energía observamos que la fracción líquida se tendrá que calcular iterativamente utilizando la ecuación algebraica resultante de esta ecuación. La discretización de la ecuación de la energía en el caso en que se produce un cambio de fase es:

$$a_P T_P = \sum_{nb} a_{nb} T_{nb} + b \quad (2.33)$$

siendo  $b$  el término fuente, que estará formado a su vez por una parte que corresponderá al término transitorio de la ecuación de la energía y por otra debida al propio fenómeno de cambio de fase para el caso que nos ocupa de propiedades físicas constantes. Estos términos se escriben como:

$$S_{transitorio} = b_P T_P^0 \quad (2.34)$$

$$S_{cambio\ de\ fase} = -\frac{\rho}{c_p} L \left( \frac{\partial f_l}{\partial t} \right)_P = -\frac{\rho}{c_p} L \frac{f_{lP} - f_{lP}^0}{\Delta t} \quad (2.35)$$

Introduciendo estos términos en la ecuación algebraica, tenemos;

$$a_P T_P = \sum_{nb} a_{nb} T_{nb} + b_P T_P^0 + \frac{\rho}{c \Delta t} L (f_{lP}^0 - f_{lP}) \quad (2.36)$$

En esta ecuación ya se observa la necesidad de ir actualizando la fracción líquida paralelamente a la temperatura, por lo que en cada instante de tiempo se procederá de la manera que se explica a continuación.

1. Inicialmente suponemos que el valor de la fracción líquida es el del instante de tiempo anterior, esto es,

$$f_{lP}^* = f_{lP}^0 \quad (2.37)$$

2. Mediante la ecuación de la energía, calculamos el valor de la temperatura en el nodo P, de la siguiente manera:

$$a_P T_P = \sum_{nb} a_{nb} T_{nb} + b_P T_P^0 + \frac{\rho}{c\Delta t} L (f_{lP}^0 - f_{lP}^*) \quad (2.38)$$

3. A continuación calculamos el valor de  $f_{l,P}$  a partir del valor de  $T_P$  que acabamos de calcular teniendo en cuenta que el valor de esta variable debe limitarse entre 0 y 1,

$$f_{lP} = f_{lP}^0 + \frac{c\Delta t}{\rho L} \left( \sum_{nb} a_{nb} T_{nb} + b_P T_P^0 - a_P T_P \right) \quad (2.39)$$

$$si \quad f_{lP} > 1 \quad f_{lP} = 1$$

$$si \quad f_{lP} < 0 \quad f_{lP} = 0 \quad (2.40)$$

4. Tomar el nuevo valor de  $f_{lP}$  como valor supuesto y volver al punto 2 hasta llegar a la convergencia. En ocasiones puede ser adecuado utilizar criterios de subrelajación

Con esta actualización iterativa estamos calculando la fracción líquida en cada uno de los nodos, y al mismo tiempo estamos imponiendo que en los nodos en los que hay dos fases la temperatura sea la de cambio de fase.

Así pues, y para resumir, en los volúmenes de control que sean sólidos con la ecuación de la energía se calculará la temperatura y la fracción líquida será un valor conocido e igual a 0. Para los volúmenes de control ocupados por la fase líquida también se calculará la temperatura con la ecuación de la energía y la fracción líquida será 1. En los volúmenes de control en que tenga lugar el cambio de fase con la ecuación de la energía lo que se calcula es la fracción líquida y la temperatura es un valor conocido ( $T_m$ ).

Una vez tenemos el sistema de ecuaciones discretas, las condiciones iniciales, las condiciones de contorno y los esquemas numéricos, se procede a la solución del mismo. No obstante, la presencia de los siguientes problemas complican mucho el proceso de resolución:

- Presencia de no linealidades en la parte convectiva especialmente en las ecuaciones de cantidad de movimiento. Esto se puede solucionar linealizando el sistema de ecuaciones utilizando el valor más reciente de la variable en los coeficientes y reactualizándola mediante cálculo iterativo.
- Acoplamientos entre las ecuaciones:

- *Presión-Velocidad*: no hay una ecuación específica para la presión. La presión en sistemas incompresibles es aquel valor que hace que el resultado de las ecuaciones de cantidad de movimiento dé unas velocidades que cumplan la ecuación de continuidad.
- *Temperatura-Velocidad*: este acoplamiento existe en el caso de convección natural o propiedades físicas dependientes de la temperatura.

Este problema se soluciona utilizando un tratamiento *segregado* o secuencial, es decir, resolviendo las variables separadamente. Concretamente utilizaremos el método denominado *Semi Implicit Pressure-Linked Equation* más conocido como *SIMPLE*, y consiste en que una vez tengo linealizados los coeficientes, mientras se resuelve una variable, las otras se mantienen constantes. Este método tiene el problema de que es muy sensible al modo en que se realicen las correspondencias cuando se resuelven las diferentes variables. Además todas las variables deben ser llevadas a la convergencia al unísono y deben ser actualizadas paralelamente.

- La no existencia de una ecuación para la presión, variable que además es desconocida. En nuestro caso lo que se hace es utilizar la ecuación de continuidad para conocer de forma indirecta el campo de presiones. Esto se puede utilizar en el caso de fluidos incompresibles. Si el fluido fuera compresible lo que se haría sería utilizar la ecuación de estado, pues el efecto de la densidad sobre la presión es mayor.

Existe toda una familia de métodos segregados que se basan en los principios planteados por el método *SIMPLE*, los cuales se diferencian por el grado de aproximación en la corrección de la presión que realizan. En este trabajo hemos empleado el método *SIMPLEC*. Este método se caracteriza por la utilización de tres mallas diferentes: una centrada para las variables escalares, una desplazada en el sentido positivo del eje de abscisas para calcular el vector velocidad  $u$ , y finalmente, una desplazada en el sentido positivo del eje de ordenadas para calcular el vector velocidad  $v$ . En la Figura 2.12 puede verse el algoritmo global de resolución del sistema de ecuaciones gobernantes.

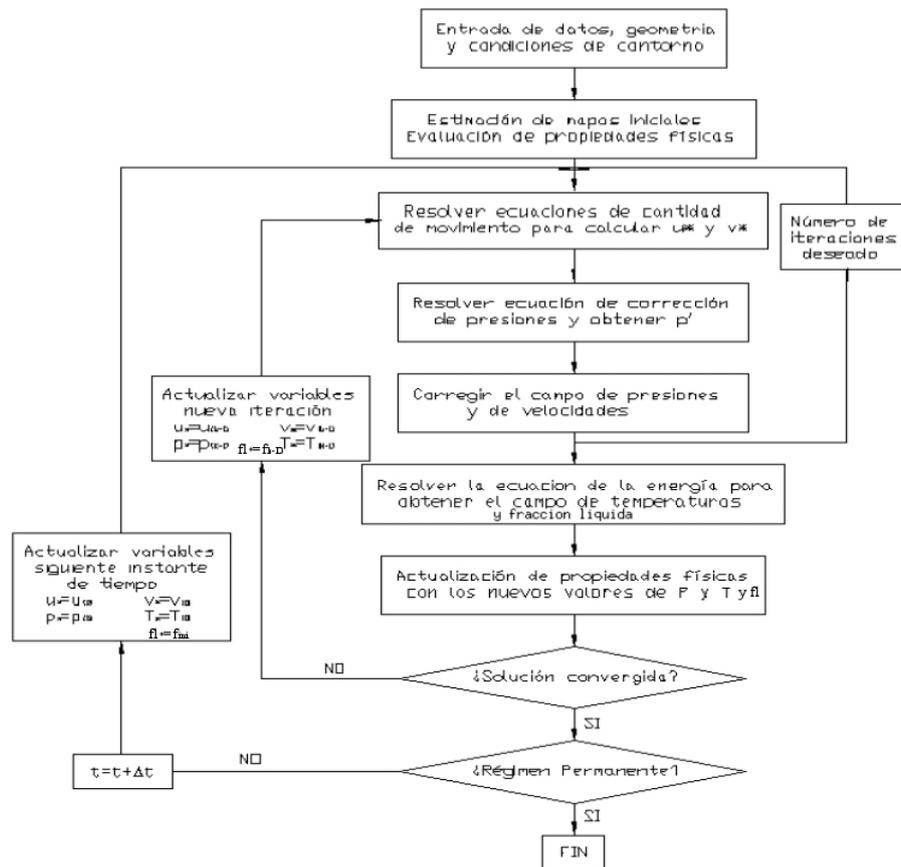


Figura 2.12: Algoritmo de cálculo utilizado en el código

## 2.5 Conclusiones

En este capítulo se ha abordado la problemática del cambio de fase. Se ha explicado en que consiste esta fenomenología y se han dado las características que debe tener un material para que se pueda utilizar como material de cambio de fase en aplicaciones tecnológicas (almacenamiento de energía, ...). Se han explicado las principales características de los materiales que se utilizan como *PCMs*: parafinas, polioles, sales hidratadas, .... Finalmente, se ha expuesto la formulación matemática que rige esta fenomenología. Comentar que en el marco de este

trabajo, se ha optado por utilizar el Método Entálpico, entre otras cosas, por tener el *CTTC* una gran experiencia en la utilización de este método que evita el tener que introducir ecuaciones específicas para la interfase, permite utilizar una malla fija en todo el dominio y la condición de Stefan queda impuesta de manera implícita. Además, permite la coexistencia de más de un frente de cambio de fase y que la interfase tenga un cierto grosor.

## 2.6 Nomenclatura

$A$	parámetro que interviene en la definición de $S_u$ y $S_v$
$b$	valor muy pequeño
$\vec{b}$	fuerzas volumétricas
$C$	valor muy elevado
$c_p$	Calor específico a presión constante
$D$	término difusivo
$\frac{ds}{dt}$	velocidad de la interfase sólido líquido
$F$	flujo másico
$f_l$	fracción de líquido
$\vec{g}$	fuerza gravitatoria
$h$	entalpía
$J$	flujo total a través de una cara
$L$	Calor latente de cambio de fase
$\vec{n}$	vector superficie unitario
$Pe$	número de Peclet
$PCM$	Material de cambio de fase
$P_d$	presión dinámica
$\vec{P}$	fuerzas de presión
$\dot{q}$	calor de conducción
$S$	superficie
$S_u$	término fuente de la ecuación de conservación del momento lineal en la dirección x
$S_v$	término fuente de la ecuación de conservación del momento lineal en la dirección y
$t$	tiempo
$T$	temperatura
$T_m$	Temperatura de fusión
$u$	componente horizontal del vector velocidad
$v$	componente vertical del vector velocidad
$V$	volumen
$\vec{v}$	vector velocidad

### Símbolos griegos

$\delta$	valor muy pequeño
$\phi$	propiedad intensiva
$\lambda$	conductividad térmica
$\rho$	densidad
$\vec{\rho}$	tensor de tensiones
$\vec{\tau}$	tensiones viscosas

**subíndices**

<i>s</i>	fase sólida
<i>l</i>	fase líquida
<i>N</i>	norte
<i>S</i>	sur
<i>E</i>	este
<i>W</i>	oeste
<i>P</i>	nodo en estudio
<i>nb</i>	nodos vecinos
*	valor supuesto
<i>0</i>	instante de tiempo anterior

**Bibliografía**

- [1] V. Alexiades and A.D. Solomon. *Mathematical Modelling of Melting and Freezing Processes*. 1993.
- [2] Rubitherm, <http://www.rubitherm.de/english>.
- [3] Climator, <http://www.climator.com>.
- [4] Thermasorb, <http://www.thermasorb.com.au>.
- [5] Cristopia, <http://www.cristopia.com>.
- [6] Teap, <http://www.teappcm>.
- [7] Mitsubishi chemical, <http://www.m-kagaku.co.jp/index-en.htm>.
- [8] Merck, <http://www.merck.com>.
- [9] K. Fieback and H. Gutberlet. The Use of Paraffin Waxes in Thermal Energy Storage Applications. In *Phase Change Materials and Chemical Reactions for Thermal Energy Storage*, pages 111–118. 1998.
- [10] H.Kakiuchi, M.Yamazaki, M.Yabe, S.Chihara, Y.Terunuma, Y.Sakata, T.Usami, K. Fieback, and H. Gutberlet. A Study of Erythritol as Phase Change Material. In *Phase Change Materials and Chemical Reactions for Thermal Energy Storage*, page Annex 10. 1998.
- [11] G. Hoermansdoerfer. Us patent 4,795,580, 1989.
- [12] <http://www.chemfinder.com>.

- [13] <http://www.knovel.com>.
- [14] <http://www.sigmaaldrich.com>.
- [15] B. Zalba, J.M. Marín, L.F. Cabeza, and H. Mehling. Review on Thermal Energy Storage with Phase Change: Materials, Heat Transfer Analysis and Applications. *Applied Thermal Engineering*, 23:251–283, 2003.
- [16] S. Fukusako and N. Seki. Fundamental Aspects of Analytical and Numerical Methods on Freezing and Melting Heat Transfer Problems. In *Annual Review of Numerical Fluid Mechanics and Heat Transfer*, volume 1, pages 351–402. Hemisphere, 1987.
- [17] R. Viskanta. Heat Transfer During Melting and Solidification Metals. *Jour. Heat Transfer*, 110:1205–1219, 1988.
- [18] C.J. Ho and R. Viskanta. Inward Solid-Liquid Phase-Change Heat Transfer in a Rectangular Cavity with Conducting Vertical Walls. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27:1055–1065, 1984.
- [19] C.F. Hsu, E.M. Sparrow, and S.V. Patankar. Numerical Solution of Moving Boundary Problems by Boundary Immobilization and a Control-Volume Based fd Scheme. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 24:1335–1343, 1981.
- [20] H. Reiger, U. Projahn, M. Barciss, and H. Beer. Numerical and Experimental Study of Heat Transfer During Melting Inside a Horizontal Tube. In *U. Grigul*, pages 375–380. Hemisphere, 1982.
- [21] N. Ramachandran, J.P. Gupta, and Y. Jaluria. Two-Dimensional Solidification with Natural Convection in the Melt with Convective and Radiative Boundary Conditions. *Int. Jour. Heat Mass Transfer*, 25:187–194, 1982.
- [22] A. Gadgil and D. Gobin. Analysis of Two Dimensional Melting in a Rectangular Enclosure in Presence Convection. *Jour. Heat Transfer*, 106:20–26, 1984.
- [23] M. Lacroix. Computation of Heat Transfer During Melting of a Pure Substance from an Isothermal Wall. *Numerical Heat Transfer*, 14:165–186, 1988.
- [24] J. Crank. *Free and Moving Boundary Problems*. Clarendon Press, 1984.
- [25] C.J. Kim and M. Kaviany. A numerical method for phase-change problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 33(12):2721–2734, 1990.
- [26] V.R. Voller, M. Cross, and N. Markatos. An Enthalpy Method for Convection Diffusion Phase Change. *Int. Journal. Numer. Meth. Eng.*, 24:271–284, 1987.

- [27] V.R. Voller, A.D. Brent, and C. Prakash. A Fixed Grid Numerical Modeling Methodology for Convection Diffusion Mushy Region Phase Change Problems. *Int. Journal. Mass and Heat Transfer*, 30:1709–1719, 1987.
- [28] Y. Cao and A. Faghri. A Numerical Analysis of Phase Change Problems Including Natural Convection. *J. Heat Transfer*, 112:812–816, 1990.
- [29] A.D. Brent, V.R. Voller, and K.J. Reid. Enthalpy-Porosity Technique for Modelling Convection-Diffusion Phase Change: Application to the Melting of a Pure Metall. *Numerical Heat Transfer*, 13:297–318, 1988.
- [30] V. Voller and C. Prakash. A Fixed Grid Numerical Modelling Methodology for Convection-Diffusion Mushy Region Phase Change Problems. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 30:1709–1719, 1987.
- [31] S.V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [32] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, and R. Alba. Numerical simulation of solid-liquid phase change phenomena. In *Proceedings of the Second World Congress on Computational Mechanics*, pages 685–688, 1990.
- [33] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, and R. Alba. Numerical simulation of solid-liquid phase change phenomena. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 91(1-3):1123–1134, 1991.
- [34] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, and N.R. Reyes. Numerical simulation of solid-liquid phase change storage units. In *Proceedings of the 9th Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*, volume VIII, pages 115–126, 1993.
- [35] M. Costa. *Desenvolupament de criteris numèrics per a la resolució de la transferència de calor en medis amb conducció, convecció i canvi de fase sòlid-líquid. contrastació experimental*. PhD thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, 1993.
- [36] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, and H. Schweiger. Numerical prediction of thermal behaviour of latent energy storage units. In *Proceedings of the ISES Solar World Congress 1993*, volume 6, pages 407–412, 1993.
- [37] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez-Segarra, and A. Ivancic. Three-dimensional numerical simulation of melting processes. *Physical Models for Thermal Energy Stores*, pages 87–94, 1996.

- [38] M. Costa, A. Oliva, and C.D. Pérez-Segarra. A three-dimensional numerical study of melting inside a heated horizontal cylinder. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 32(5):531–553, 1997.
- [39] M. Costa, A. Oliva, and M. Soria. Melting within a rectangular highly conductive container. a numerical study. In *Proceedings of the 10th Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*, volume X, pages 253–264, 1997.
- [40] M. Costa, D. Buddi, and A. Oliva. Numerical simulation of a latent heat thermal energy storage system with enhanced heat conduction. *Energy Conversion Management*, 39(3-4):319–330, 1998.

# Capítulo 3

## Solución numérica del cambio de fase

En este capítulo presentamos el problema que nos va a ocupar en gran parte de esta tesis: la fusión del galio en una cavidad rectangular calentada por un lado. Este problema ha sido ampliamente utilizado por distintos investigadores con el fin de evaluar distintas metodologías de resolución del cambio de fase. En la literatura aparece este problema con diferentes configuraciones pero en este capítulo nos centraremos en el estudio del caso en que la relación de aspecto es de 0,5. Existen diferentes métodos numéricos para resolver problemas de cambio de fase sólido-líquido (métodos que siguen la frontera móvil, métodos que fijan la frontera móvil,...) pero en este trabajo utilizaremos el Método Entálpico. A continuación, expondremos el proceso de selección de una serie de parámetros que nos permitirán obtener unos resultados fiables en el menor tiempo de cálculo posible. En este capítulo tanto el código como la solución numérica serán convenientemente verificados. La verificación del código consiste en comprobar que éste está libre de errores de programación y que el comportamiento de los esquemas numéricos implementados está acorde con su comportamiento teórico. Para la verificación de la solución numérica se pueden utilizar métodos de extrapolación de Richardson (ver capítulo 4), o, tal y como veremos en este capítulo, realizar un estudio de refinamiento de malla y observar la evolución de algunas magnitudes características del problema como pueden ser la fracción de líquido en el dominio o el número de Nusselt en la pared caliente.

Una vez que el código y la solución numérica hayan sido verificados independientemente, la validación de la formulación matemática implementada es la que se obtiene de comparar los resultados predichos con los datos experimentales.

### 3.1 Introducción. Definición del caso en estudio

Para la validación y verificación del modelo como ya hemos comentado antes, vamos a utilizar el caso de fusión de un metal puro, el galio, dentro de una cavidad rectangular bidimensional. Los contornos superior e inferior son adiabáticos. En el instante de tiempo inicial todo el dominio se encuentra a una temperatura  $T_0$ , inferior a la temperatura de fusión,  $T_m$ . En el instante de tiempo inicial,  $t = 0$ , la temperatura de la pared izquierda aumenta repentinamente por encima del punto de fusión (ver Figura 6.1). El recinto tiene unas dimensiones alto x ancho de 4.45x8.89 cm respectivamente, siendo la relación de aspecto 0.5 [1, 2, 3, 4]. Las propiedades del galio que hemos utilizado son las que se muestran en la Tabla 3.1, en las que se asume idénticos valores para la fase líquida y la fase sólida. Se presenta también los números de Rayleigh, de Stefan (para la fase sólida y la líquida) y de Prandtl. Estos parámetros adimensionales los hemos calculado como sigue:

$$Ra = \frac{g\beta(T_h - T_m)H^3}{\nu\alpha} \quad Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (3.1)$$

siendo la viscosidad cinemática  $\nu = \frac{\mu}{\rho}$  y la difusividad  $\alpha = \frac{\lambda}{\rho c_p}$ .

$$St_l = \frac{c_p(T_h - T_m)}{L} \quad St_s = \frac{c_p(T_m - T_c)}{L} \quad (3.2)$$

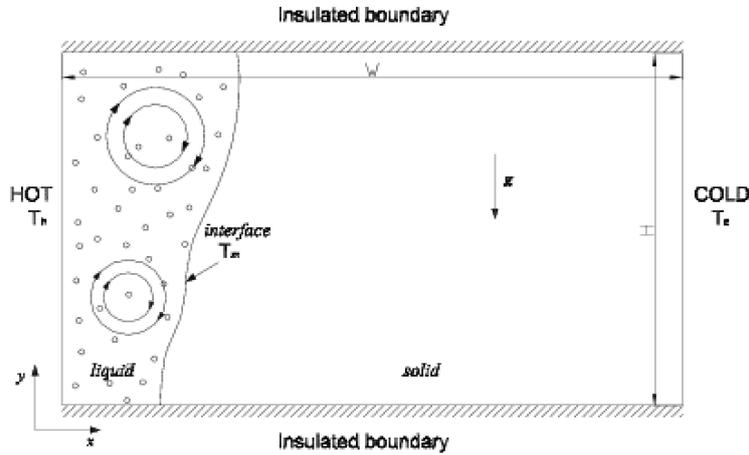


Figura 3.1: Configuración del problema de fusión del galio

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidades
Temperatura de fusión	$T_m$	29.78	$^{\circ}C$
Temperatura de la pared caliente	$T_h$	38	$^{\circ}C$
Temperatura de la pared fría	$T_c = T_0$	28.3	$^{\circ}C$
Densidad	$\rho$	6093	$kg/m^3$
Calor específico	$c_p$	381.5	$J/kgK$
Viscosidad dinámica	$\mu$	$1.81 \cdot 10^{-3}$	$kg/ms$
Conductividad térmica	$\lambda$	32	$W/mK$
Coefficiente de expansión volumétrico	$\beta$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$K^{-1}$
Calor latente de fusión	$L$	$8.106 \cdot 10^4$	$J/kg$
Número de Rayleigh	$Ra$	$2.1 \cdot 10^5$	—
Número de Prandtl	$Pr$	0.0216	—
Número de Stefan del líquido	$St_l$	$3.87 \cdot 10^{-2}$	—
Número de Stefan del sólido	$St_s$	$6.97 \cdot 10^{-3}$	—

**Tabla 3.1:** Parámetros del problema de fusión del galio

Para resolver el conjunto de ecuaciones planteado en el capítulo anterior, emplearemos el algoritmo SIMPLEC, haciendo uso de una malla ortogonal invariante en el tiempo. En cuanto al incremento temporal, éste será dinámico. El criterio seguido es que en un principio el paso de tiempo es siempre el mismo excepto si en un instante de tiempo no se alcanza la precisión requerida; en este caso se disminuirá el paso temporal hasta poder resolver este instante con el grado de precisión fijado.

## 3.2 Estudio previo: Elección de parámetros

En este estudio previo vamos a proceder a la elección de una serie de parámetros de manera que los resultados sean fiables y el tiempo de cálculo sea el menor posible.

El esquema que vamos a seguir es el siguiente:

1. Elección de la precisión.
2. Elección del número de pasadas por campos escalares y por el cálculo de presión.
3. Elección factores de relajación de las variables.
4. Elección de las constantes C y b del término fuente de la ecuación de cantidad de movimiento.
5. Elección del esquema numérico para los términos convectivos.

### 3.2.1 Elección de la precisión

A la hora de decidir si un código está convergido nos basamos en tres criterios: residuos, incrementos e imbalance de la ecuación de la energía.

Para los residuos nos fijamos en el máximo entre el residuo de la ecuación de continuidad (residuo másico), de momentum (residuo de la velocidad longitudinal  $u$  y el de la velocidad transversal  $v$ ) y de energía (residuo de la temperatura  $T$ ). En los incrementos nos fijamos en la máxima diferencia entre dos iteraciones consecutivas que se produce entre las matrices que se corresponden a las variables  $u$ ,  $v$  y  $T$ .

Hemos realizado los cálculos para dos mallas de discretización espacial: 10x10 y 20x20 y para decidir entre los diferentes casos estudiados nos fijamos en los siguientes valores:

- Número de Nusselt en la pared caliente en el instante de tiempo 1140 segundos calculado como [5]:

$$Nu = \frac{q_w}{\frac{\lambda(T_h - T_m)}{W}} \quad (3.3)$$

- La fracción de líquido en el dominio en el instante de tiempo de 1140 segundos (FL).
- El tiempo computacional requerido (en minutos).
- El número de iteraciones totales.

Y fijamos el resto de parámetros de la siguiente manera:

- $NPSCAL = 4$  y  $NPPP = 4$
- $\alpha_T = \alpha_F = \alpha_U = \alpha_V = 1.0$
- $C = 1 \cdot 10^6$  y  $b = 1 \cdot 10^{-3}$
- Esquema numérico términos convectivos:  $PLDS$  (ver apartado 3.2.5)

Hemos probado con diferentes valores de incrementos, residuos e imbalances máximos y observamos con que combinación el número de iteraciones totales es menor y el tiempo computacional es menor siempre que la solución sea la asintótica. En la Tabla 3.2 observamos que para la malla de 20x20 de utilizar una precisión de  $10^{-5}$  a utilizar una de  $10^{-7}$  el tiempo de cpu se ve incrementado en 7.126 minutos. Si mantenemos los residuos e incrementos en  $10^{-7}$  y somos un poco menos restrictivos con el imbalance y lo aumentamos a  $10^{-4}$  el tiempo de cpu no solo se ve reducido con respecto a cuando la precisión es igual para todos de  $10^{-7}$  sino que también se reduce con respecto al caso de  $10^{-5}$ .

vc	precisión			Nusselt	FL	cpu	ite
	res-max	inc-max	imb				
10x10	1.0 · 10 <sup>-2</sup>			0.225997	0.46593	1.6055	20687
	1.0 · 10 <sup>-4</sup>			0.229796	0.46577	2.1208	24406
	1.0 · 10 <sup>-5</sup>			0.229796	0.46577	2.4488	32420
	1.0 · 10 <sup>-7</sup>	1.0 · 10 <sup>-7</sup>	1.0 · 10 <sup>-4</sup>	0.229796	0.46577	2.4488	32420
	1.0 · 10 <sup>-10</sup>			0.229796	0.46577	3.9867	53101
20x20	1.0 · 10 <sup>-3</sup>			0.283272	0.55552	18.519	77734
	1.0 · 10 <sup>-5</sup>			0.283272	0.55552	24.092	101591
	1.0 · 10 <sup>-7</sup>	1.0 · 10 <sup>-7</sup>	1.0 · 10 <sup>-4</sup>	0.283272	0.55552	24.027	100493
	1.0 · 10 <sup>-7</sup>			0.283272	0.55552	31.218	126331
	1.0 · 10 <sup>-9</sup>			0.283272	0.55552	39.074	151009

**Tabla 3.2:** Elección parámetros de precisión

### 3.2.2 Elección del número de pasadas por campos escalares y por presiones

Estos parámetros se refieren al número de veces que pasamos, dentro del bucle principal, por la ecuación de conservación de la energía (*NPSCAL*) y por la ecuación de corrección de presiones (*NPPP*). En primer lugar vamos a elegir según los factores comentados en la sección anterior el parámetro *NPSCAL*, siendo:

- $res - max < 10^{-7}$ ,  $inc - max < 10^{-7}$  y  $imb < 10^{-4}$
- $NPPP = 4$
- $\alpha_T = \alpha_F = \alpha_U = \alpha_V = 1.0$
- $C = 1 \cdot 10^6$  y  $b = 1 \cdot 10^{-3}$
- Esquema numérico términos convectivos: *PLDS* (ver apartado 3.2.5)

En la [Tabla 3.3](#) nos volveremos a fijar en la malla de discretización más fina, por ser los valores de los parámetros *cpu* y *ite* más elevados, esto nos permite apreciar con mayor claridad las diferencias entre los casos estudiados. En esta tabla podemos ver que lo que nos conviene es realizar 6 pasadas por la ecuación de conservación de la energía. Esto es así porque cuando realizamos 4 tardamos 24.03 minutos mientras que si realizamos 6 pasamos a tardar 21.77 minutos, suponiendo una reducción en el tiempo de *cpu* de 2.25 minutos. En este caso, si seguimos aumentando el parámetro *NPSCAL* observamos que el tiempo computacional también aumenta.

vc	NPSCAL	Nusselt	FL	cpu	ite
10x10	2	0.229796	0.46577	2.8283	56070
	3	0.229796	0.46577	2.36	39910
	4	0.229796	0.46577	2.0115	29680
	5	0.229796	0.46577	1.879	25029
	6	0.229796	0.46577	1.8458	21951
	7	0.229796	0.46577	1.855	19763
	8	0.229796	0.46577	1.8837	18530
20x20	4	0.283272	0.55552	24.027	100493
	5	0.283272	0.55552	22.590	83280
	6	0.283272	0.55552	21.774	72055
	7	0.283272	0.55552	22.677	68916

**Tabla 3.3:** Elección parámetro Número de pasadas por escalares *NPSCAL*

Repetimos este procedimiento para el número de pasadas por la ecuación de corrección de presiones, *NPPP*, tomando los siguientes parámetros constantes:

- $res - max < 10^{-7}$ ,  $inc - max < 10^{-7}$  y  $imb < 10^{-4}$
- $NPSCAL = 6$
- $\alpha_T = \alpha_F = \alpha_U = \alpha_V = 1.0$
- $C = 1 \cdot 10^6$  y  $b = 1 \cdot 10^{-3}$
- Esquema numérico términos convectivos: *PLDS* (ver apartado 3.2.5)

vc	NPPP	Nusselt	FL	cpu	ite
10x10	1	0.229796	0.46577	1.8017	21952
	2	0.229796	0.46577	1.8102	21951
	4	0.229796	0.46577	1.8458	21951
	10	0.229796	0.46577	2.0705	21951
20x20	2	0.283272	0.55552	21.287	72055
	4	0.283272	0.55552	21.774	72055
	6	0.283272	0.55552	22.159	72055

**Tabla 3.4:** Elección parámetro Número de pasadas por la presión de corrección *NPPP*

En la Tabla 3.4 se muestran los resultados obtenidos para los diferentes casos estudiados. En esta tabla observamos que en este caso las diferencias no son tan

importantes, si bien existen. Si el parámetro  $NPPP$  es de 4, el tiempo computacional es de 21.77 minutos, en cambio, si es de 2 el tiempo es de 21.29 minutos, con lo cual hemos conseguido una reducción en el tiempo computacional de 0.49 minutos. Observar que en este caso el número de iteraciones totales no se ve modificado en ningún caso.

### 3.2.3 Elección de los factores de relajación

El factor de relajación está relacionado con la forma de realizar la actualización iterativa. Esta actualización la realizamos de la siguiente manera:

$$\phi^n = \alpha_\phi \cdot \phi^n + (1 - \alpha_\phi) \cdot \phi^{n-1} \quad (3.4)$$

siendo  $\phi$  una variable cualquiera,  $n$  el superíndice que indica que estamos utilizando el valor de la variable en la iteración actual, por lo que  $n - 1$  será el de la iteración anterior dentro de un mismo instante temporal y  $\alpha_\phi$  será el factor de relajación de la variable  $\phi$ .

Las cuatro variables en que nos vamos a fijar son las velocidades longitudinal ( $u$ ) y transversal ( $v$ ), la temperatura ( $T$ ) y la fracción líquida ( $f_l$ ). En primer lugar nos centraremos en el valor de  $\alpha_T$ , y fijaremos el resto de los factores de relajación, quedando los parámetros que mantenemos constantes de la siguiente manera:

- $res - max < 10^{-7}$ ,  $inc - max < 10^{-7}$  y  $imb < 10^{-4}$
- $NPSCAL = 6$  y  $NPPP = 2$
- $\alpha_F = \alpha_U = \alpha_V = 1.0$
- $C = 1 \cdot 10^6$  y  $b = 1 \cdot 10^{-3}$
- Esquema numérico términos convectivos:  $PLDS$  (ver apartado 3.2.5)

En la Tabla 3.5 aparecen los resultados de este caso. Como siempre nos fijaremos en la malla más densa. Observamos que cuando el factor de relajación es de 1.0 el tiempo de cpu es de 21.29 minutos y en cambio cuando es de 0.7 el cpu es de 16.06, suponiendo una reducción de 5.23 minutos. A partir de aquí cualquier reducción de cualquier otro factor de relajación supone un aumento en el tiempo computacional tal como se ve en las Tablas 3.6 y 3.7.

vc	$\alpha_T$	Nusselt	FL	cpu	ite
10x10	1	0.229796	0.46577	1.8017	21951
	0.9	0.229796	0.46577	1.3227	15865
	0.8	0.229796	0.46577	1.1417	13729
	0.7	0.229796	0.46577	1.0775	13063
	0.6	0.229796	0.46577	1.1075	13368
20x20	1	0.283272	0.55552	21.287	72055
	0.7	0.283272	0.55552	16.057	54117
	0.6	0.283272	0.55552	17.787	59810

**Tabla 3.5:** Elección del factor de relajación de temperatura  $\alpha_T$ 

vc	$\alpha_F$	Nusselt	FL	cpu	ite
10x10	1	0.229796	0.46577	1.0775	13063
	0.9	0.229796	0.46577	1.1017	13104
	0.8	0.229796	0.46577	1.1075	13333
20x20	1	0.283272	0.55552	16.057	54117
	0.7	0.283272	0.55552	17.853	60344

**Tabla 3.6:** Elección del factor de relajación de la fracción líquida  $\alpha_F$ 

vc	$\alpha_U \backslash \alpha_V$	Nusselt	FL	cpu	ite
10x10	1.0\1.0	0.229796	0.46577	1.0775	13063
	0.9\0.9	0.229796	0.46577	1.0895	13067
	0.8\0.8	0.229796	0.46577	1.091	13067
20x20	1.0\1.0	0.283272	0.55552	16.057	54117
	0.7\0.7	0.283272	0.55552	16.248	54117

**Tabla 3.7:** Elección de los factores de relajación de las velocidades  $\alpha_U$  y  $\alpha_V$ 

### 3.2.4 Elección de las constantes C y $\delta$

El término fuente de la ecuación de cantidad de movimiento representa la reducción gradual de la velocidad en los volúmenes de control en los que se está produciendo el fenómeno de la solidificación, de esta manera, su valor debe ser 0 en los volúmenes de control que son completamente líquidos y debe tomar un valor muy elevado en aquellos que son completamente sólidos, haciendo que la velocidad en éstos sea prácticamente nula. En aquellos volúmenes de control en que está teniendo lugar el cambio de fase emplearemos las expresiones 2.12.

Hemos procedido a ir modificando el valor de estas constantes manteniendo fijos los siguientes parámetros:

- $res - max < 10^{-7}$ ,  $inc - max < 10^{-7}$  y  $imb < 10^{-4}$
- $NPSCAL = 6$  y  $NPPP = 2$
- $\alpha_T = 0.7$  y  $\alpha_F = \alpha_U = \alpha_V = 1.0$
- Esquema numérico términos convectivos: *PLDS* (ver apartado 3.2.5)

En la Tabla 3.8 observamos los casos que hemos estudiado. Se observan diferencias en la medida que aumentamos el valor de  $C$  y disminuimos el de  $\delta$ .

ref	$C$	$\delta$	Nusselt	FL	cpu	ite
A	$1.0 \cdot 10^6$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	0.283272	0.55552	16.057	54117
B	$1.0 \cdot 10^6$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	0.283275	0.55550	17.201	53928
C	$1.0 \cdot 10^7$	$1.0 \cdot 10^{-5}$	0.283283	0.55545	12.537	53357
D	$1.0 \cdot 10^8$	$1.0 \cdot 10^{-6}$	0.283289	0.55542	12.404	52992

**Tabla 3.8:** Elección de las constantes del término fuente de la ecuación de momentum

Si calculamos las diferencias que se producen en los diferentes campos entre los diferentes casos, calculados como los incrementos que se producen en cada uno de los nodos promediado, podemos comprobar, tal como se ve en la Tabla 3.9, que estas son en general pequeñas, exceptuando la presión, en que las diferencias son mayores. No obstante, se debe tener en consideración que estos términos los utilizamos en la ecuación de corrección de presiones para fijar la presión a cero en aquellos volúmenes de control que son sólidos<sup>1</sup>. Además en el código fijamos la presión de un nodo a cero, con el objetivo de evitar problemas de convergencia, pero puede estar afectándonos a la hora de comparar este campo.

---

<sup>1</sup>En secciones posteriores veremos como afecta fijar también la velocidad a cero en los vc sólidos

Incrementos	$U$	$V$	$P$	$T$	$f_t$
A-B	$4.2 \cdot 10^{-8}$	$3.9 \cdot 10^{-8}$	$1.5 \cdot 10^{-1}$	$6.2 \cdot 10^{-5}$	$4.4 \cdot 10^{-4}$
A-C	$1.6 \cdot 10^{-7}$	$1.4 \cdot 10^{-7}$	$1.9 \cdot 10^{-1}$	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$1.6 \cdot 10^{-3}$
A-D	$2.2 \cdot 10^{-7}$	$2.0 \cdot 10^{-7}$	$9.1 \cdot 10^{-1}$	$3.1 \cdot 10^{-4}$	$2.2 \cdot 10^{-3}$
B-C	$1.1 \cdot 10^{-7}$	$1.0 \cdot 10^{-7}$	$4.0 \cdot 10^{-2}$	$1.7 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$
B-D	$1.8 \cdot 10^{-7}$	$1.6 \cdot 10^{-7}$	$7.8 \cdot 10^{-1}$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-3}$
C-D	$6.4 \cdot 10^{-8}$	$5.7 \cdot 10^{-8}$	$7.5 \cdot 10^{-1}$	$8.7 \cdot 10^{-5}$	$6.0 \cdot 10^{-4}$

**Tabla 3.9:** Incrementos medios de las diferentes variables con los mapas obtenidos en los diferentes casos

### 3.2.5 Elección del esquema numérico

Estos esquemas surgen de la necesidad de relacionar los valores de las variables en las caras con los valores nodales de éstas. Si bien existen otros, nosotros vamos a realizar el estudio con los que siguen (ver [6] para los cuatro primeros y [7], [8] para el esquema SMART).

#### Upwind (UDS)

Asume que el valor de la variable en la cara es el valor del nodo más próximo aguas arriba. Este es un esquema de orden 0.

#### Hybrid (HDS)

Aprovecha las ventajas del upwind para valores de Peclet altos y los del Central Difference Scheme para valores de Peclet bajos. Es un esquema de primer orden.

#### Power Law (PLDS)

Es una aproximación a la solución exacta de la ecuación de convección-difusión unidimensional. También es un esquema de primer orden.

#### Central Difference Scheme (CDS)

Asume que el valor de la variable es el valor medio de los nodos vecinos. Es un esquema de alto orden, pero se debe vigilar su uso, pues puede darse el caso de que los coeficientes de la ecuación algebraica resulten negativos (números de Peclet superior a 2) dándonos lugar a una solución sin sentido físico.

**SMART**

Es un esquema de altas prestaciones y partimos de un esquema de bajo orden Upwind. Se caracteriza por la introducción de un término diferido en la expresión algebraica. El orden de precisión de este esquema variará, en función del caso, entre uno de primer orden y uno de tercer orden.

Hemos ejecutado el caso para cada uno de estos esquemas numéricos manteniendo constantes el resto de parámetros.

- $res - max < 10^{-7}$ ,  $inc - max < 10^{-7}$  y  $imb < 10^{-4}$
- $NPSCAL = 6$  y  $NPPP = 2$
- $\alpha_T = 0.7$  y  $\alpha_F = \alpha_U = \alpha_V = 1.0$
- $C = 1 \cdot 10^8$  y  $b = 1 \cdot 10^{-6}$

Los resultados que se han obtenido con los diferentes esquemas utilizando unas mallas de discretización espacial de 20x20 y de 40x40, utilizando 12000 y 19200 pasos temporales, para resolver los 1140 segundos respectivamente, son los que se muestran en la Tabla 3.10.

n cv	ndt	esquema	Nusselt	FL	cpu	ite
20x20	12000	UDS	0.308419	0.583602	12.21633	53251
		HDS	0.280255	0.545619	11.61933	53145
		PLDS	0.283289	0.555420	12.39600	52992
		CDS	0.311182	0.610039	19.19517	91558 <sup>2</sup>
		SMART	0.302769	0.572016	23.00433	72707
40x40	19200	UDS	0.334557	0.633689	122.7785	128060
		HDS	0.315669	0.601809	125.8932	127351
		PLDS	0.319280	0.606681	171.8810	127005
		CDS	0.353767	0.670384	151.2537	159659 <sup>3</sup>
		SMART	0.340868	0.632406	227.8630	165280
Resultado experimental			-	0.7282	-	-

**Tabla 3.10:** Resultados obtenidos con los diferentes esquemas numéricos

De estos resultados el único comentario que podemos realizar es que a medida que utilizamos un esquema de mayor orden el tiempo computacional necesario es más elevado, pero se debe comprobar si la solución obtenida es más cercana a la solución

<sup>2</sup>en este caso se recurre en una ocasión al incremento de tiempo dinámico

<sup>3</sup>en este caso se recurre en dos ocasiones al incremento de tiempo dinámico

experimental, en cuyo caso su uso será positivo. Además, la utilización de esquemas de bajo orden nos puede llevar a no notar ciertos efectos en el movimiento del fluido.

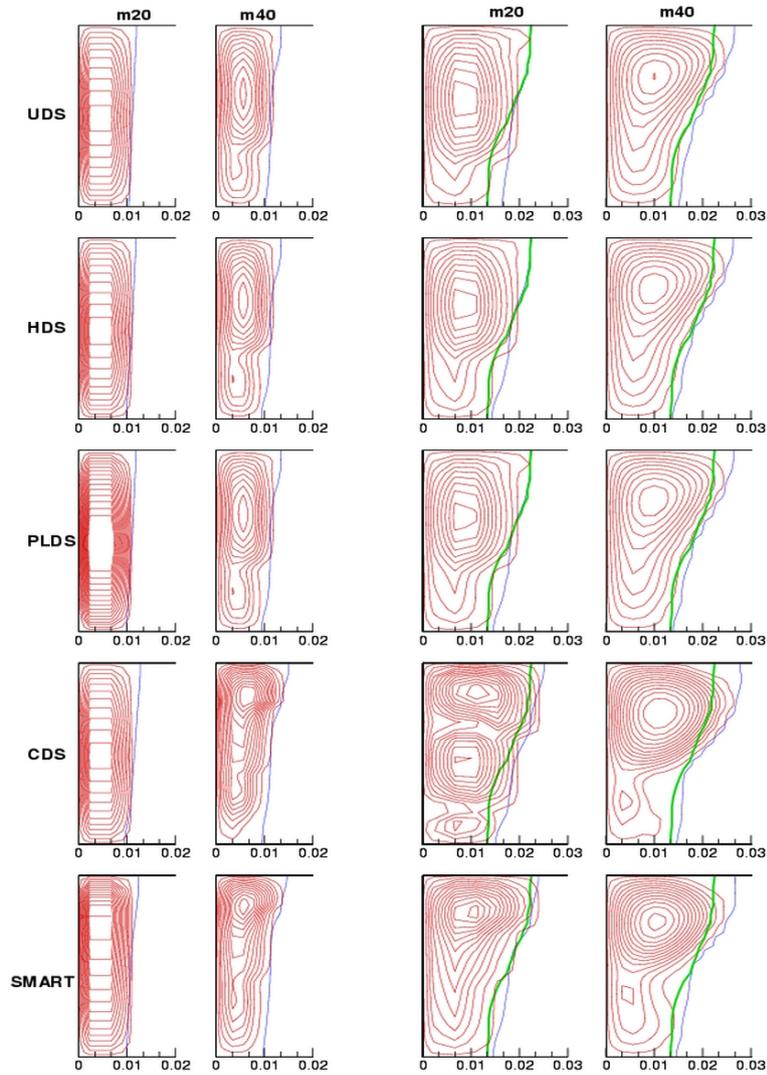
Con el objetivo de sacar algunas conclusiones hemos realizado una visualización gráfica de las líneas de corriente y de la posición de la interfase para los diferentes casos estudiados en diferentes instantes de tiempo y en el caso de la posición de la interfase hemos añadido, en aquellos casos que se dispone, el resultado obtenido experimentalmente por Ho y Viskanta [9, 10] (ver Figuras 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5).

Tanto en la Tabla 3.10 como en las Figuras 3.2, 3.3, 3.4, 3.5 observamos que los resultados que más se aproximan al resultado experimental son los obtenidos mediante los esquemas UDS, CDS y SMART; no obstante comentar que en los estados iniciales la solución obtenida se aproxima más a la solución experimental que en los últimos instantes. Además en los esquemas de alto orden aparecen unas recirculaciones en el fluido que no aparecen en los esquemas de bajo orden, por lo que sería conveniente la utilización de estos esquemas por mostrar estos efectos en el fluido. Comentar que, si bien estas recirculaciones no se han mostrado en ningún estudio experimental para el Galio, es legítimo preguntarse sobre su validez. En el estudio experimental de Chikhaoui [11] aparece un comportamiento multicelular tal y como el que indica en su trabajo Dantzing [12]. Chikhaoui encontró en su trabajo 6 recirculaciones en un experimento con aire en una superficie vertical con convección natural. En otro estudio experimental con convección natural en una pared vertical con una relación de aspecto elevada, Vest y Arpaci [13] observaron 9 recirculaciones. Así pues, parece viable pensar en esta estructura multicelular [14]. En cuanto a los resultados obtenidos con el CDS si bien los resultados son cercanos a los experimentales, lo vamos a descartar, pues presenta problemas de convergencia y además las líneas de corriente dan un poco raras en algunos casos. Estas anomalías pueden ser debidas a que este esquema para números de Peclet<sup>4</sup> superiores a dos, da como resultado unos coeficientes de la ecuación algebraica negativos, lo que da claramente resultados irreales.

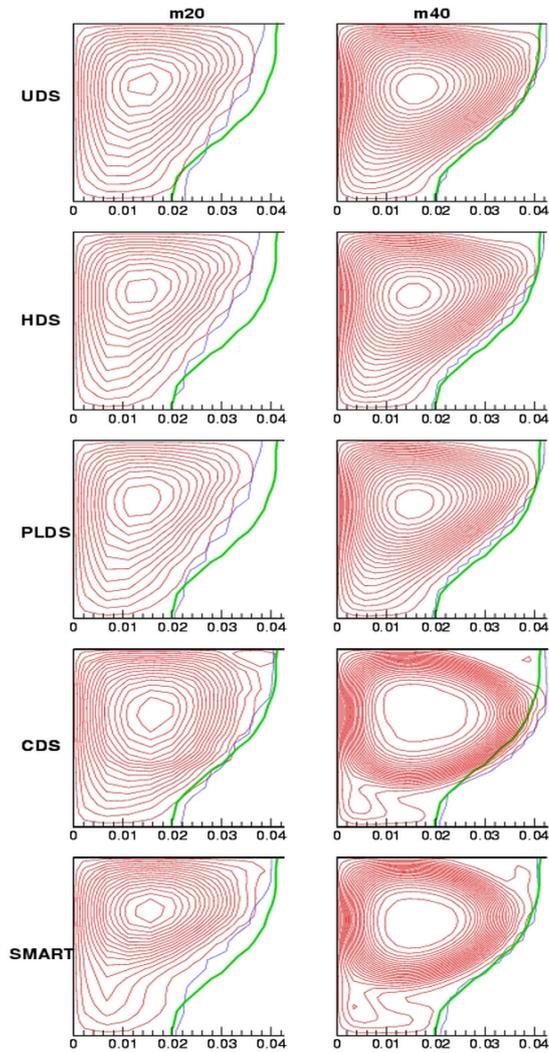
A continuación realizaremos este mismo estudio con la malla de discretización 80x80 volúmenes de control y compararemos los resultados obtenidos con Power Law y con SMART. En la Tabla 3.11 aparecen los resultados obtenidos con la malla de 20x20 y 12000 incrementos temporales, con la de 40x40 y 19200 y la de 80x80 y 76800.

---

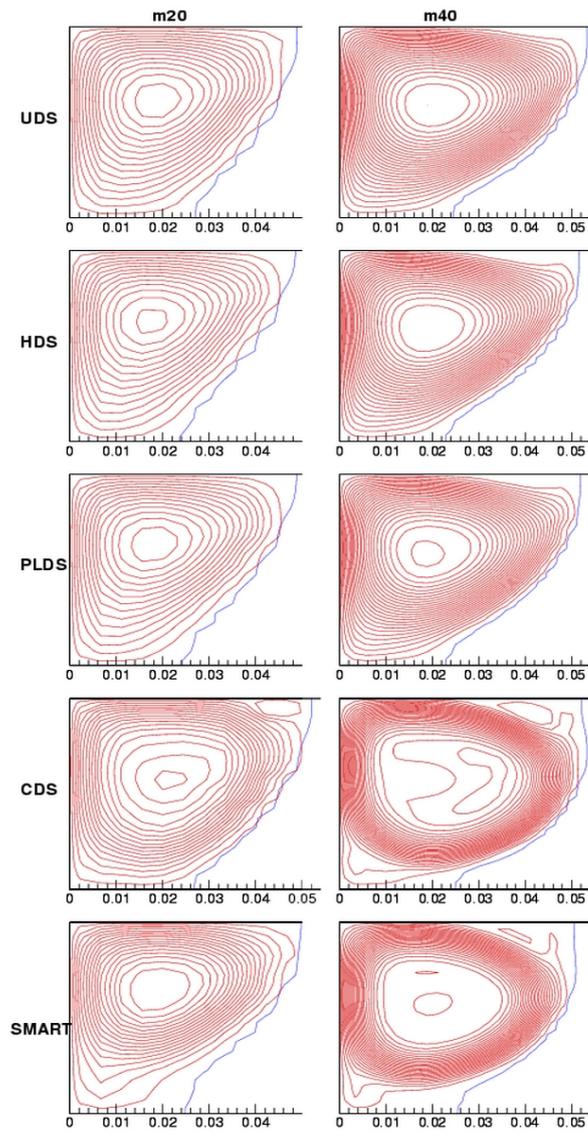
<sup>4</sup>El número de Peclet es el ratio entre las fuerzas convectivas y las difusivas



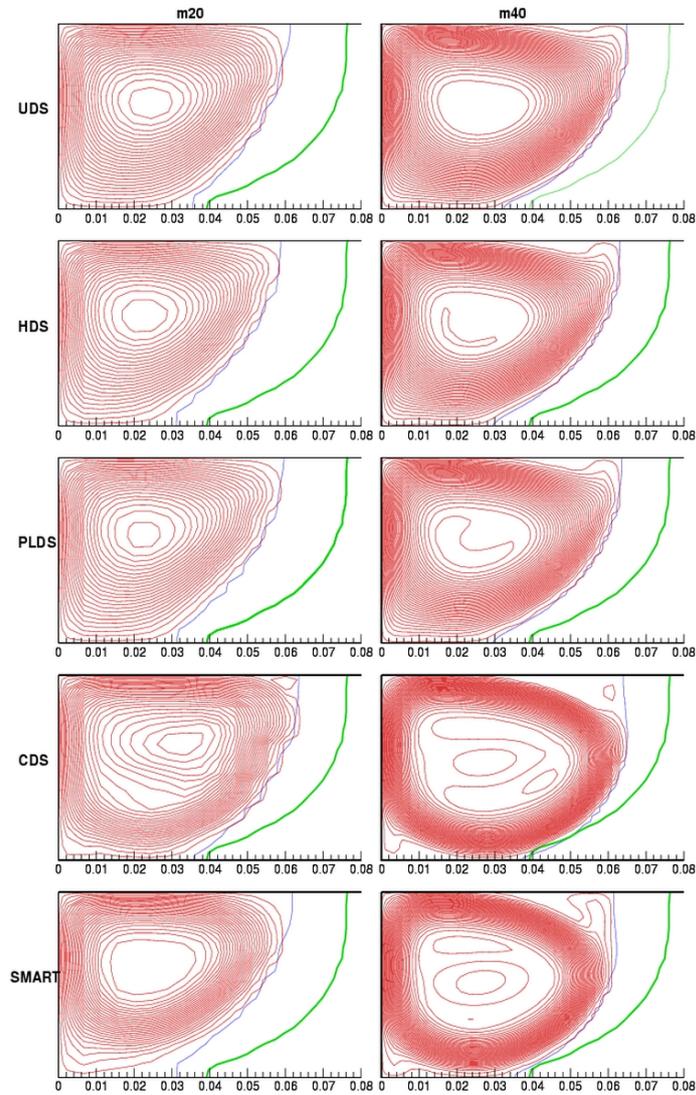
**Figura 3.2:** Líneas de corriente y posición de la interfase para el caso de fusión del galio, en azul solución numérica, en verde solución experimental, cuando han pasado 2 minutos (a la izquierda) y 5 minutos (a la derecha)



**Figura 3.3:** Líneas de corriente y posición de la interfase para el caso de fusión del galio, en azul solución numérica, en verde solución experimental, cuando han pasado 10 minutos



**Figura 3.4:** Líneas de corriente y posición de la interfase para el caso de fusión del galio cuando han pasado 14 minutos



**Figura 3.5:** Líneas de corriente y posición de la interfase para el caso de fusión del galio, en azul solución numérica, en verde solución experimental, cuando han pasado 19 minutos

ncv	ndt	esquema	Nusselt	FL	cpu
20	12000	PLDS	0.283289	0.555420	12.39600
		SMART	0.302769	0.572016	23.00433
40	19200	PLDS	0.319280	0.606681	171.8810
		SMART	0.340868	0.632406	227.8630
80	76800	PLDS	0.340693	0.633366	2885.367
		SMART	0.361476	0.672534	4164.887

**Tabla 3.11:** Resultados obtenidos con los esquemas PLDS y SMART para las diferentes mallas de discretización

En la Tabla 3.11 observamos que el resultado que obtenemos utilizando la malla de 80x80 con un PLDS es muy similar al obtenido con una malla de 40x40 y el SMART con un tiempo de cpu más de 10 veces inferior lo que hace muy conveniente el uso de este esquema de altas prestaciones.

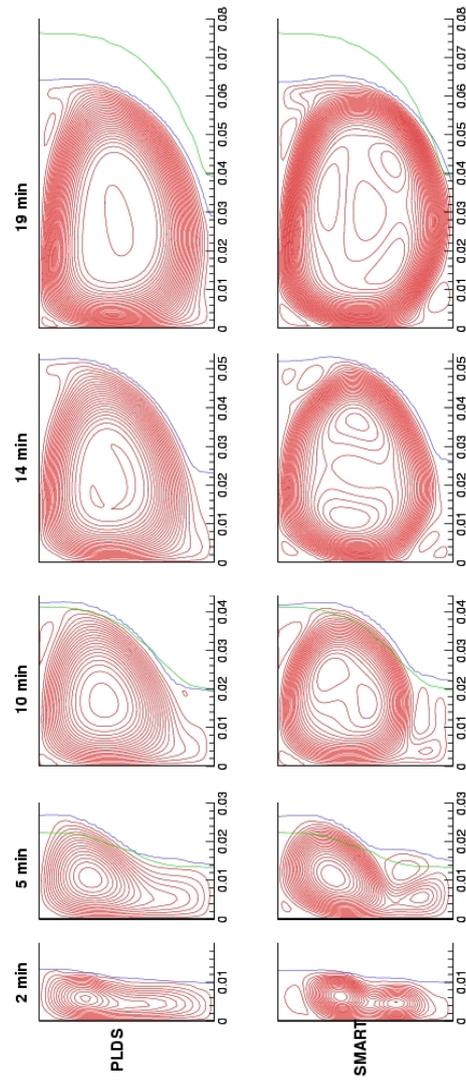
En la Figura 3.6 mostramos las líneas de corriente para la malla de discretización más fina (80x80), en la que se ve claramente que al ir aumentando el tamaño de malla el número de bucles de convección también aumenta; además estos bucles de convección aparecen con mallas más bastas para esquemas de alto orden, mientras que con esquemas de bajo orden solo aparecen, y en menor cuantía, en la malla de 80x80. En cuanto a la posición de la interfase, que también aparece representada en esta figura, comentar que en los resultados experimentales parece como si en un principio la fusión fuera más lenta y al ir avanzando el tiempo, ésta se acelerara.

### 3.3 Estudio de verificación

Una solución numérica es el resultado de dos pasos: una modelización del fenómeno físico para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales (*PDEs*) y la conversión de este *PDEs* en ecuaciones algebraicas para su posterior resolución computerizada. Ambos pasos introducen aproximaciones en sus soluciones y los errores resultantes deben ser identificados y cuantificados a ser posible. Los errores introducidos en el segundo paso son los conocidos como *errores computacionales* y el proceso de estudio de estos errores es lo que se conoce como *verificación del proceso* [15].

Una vez que el modelo matemático y el modelo computacional han sido verificados independientemente, la validación final de la simulación del proceso es la que se obtiene de comparar los resultados predecidos con los datos experimentales, lo que se conoce como *validación del proceso*.

No obstante, cuando se observan discrepancias entre los resultados de la simulación y los experimentales estos no deben sólo asignarse al modelo numérico sino



**Figura 3.6:** Líneas de corriente y posición de la interfase para el caso de fusión del galio, en azul solución numérica, en verde solución experimental, para diferentes instantes de tiempo analizados

que también al proceso adoptado para obtener los datos experimentales. La mayoría de errores computacionales son debidos a la discretización. En los problemas de transitorio, utilizando un criterio de convergencia suficientemente elevado y cuando el código está libre de errores, el error computacional puede ser debido a la discretización (mallado), al esquema numérico y al esquema temporal.

Si asumimos que la solución numérica está libre de errores de convergencia, errores de redondeo y errores de programación, el error computacional en un punto del dominio  $x$  es:

$$e_D(x) = \frac{|\phi(x) - \phi_E(x)|}{\phi_E(x)} \quad (3.5)$$

siendo  $\phi(x)$  la solución numérica y  $\phi_E(x)$  la solución exacta. Debido a que en la mayoría de casos no conocemos la solución exacta, en la expresión anterior tendremos que utilizar como solución exacta el valor obtenido con la mejor solución que disponemos.

Sólo consideraremos los errores debidos al esquema numérico y a la malla de discretización. Con el objetivo de cuantificarlos utilizaremos dos parámetros:

- $h$ : parámetro geométrico de discretización representativo del mallado espacial.
- $p$ : orden de ajuste del esquema numérico.

La teoría de la extrapolación de Richardson dice que en un punto dado del dominio  $x$  y cuando la solución está en su rango asintótico el error de discretización absoluto local puede calcularse como:

$$e_D(x) = |C_p(x)h^p| \quad (3.6)$$

A continuación realizaremos este estudio de convergencia para el caso de fusión del galio con una relación de aspecto de 0.5 y los parámetros dados en la Tabla 3.1. Solamente lo realizaremos para el esquema numérico SMART; en el rango asintótico, si doblamos el mallado y mantenemos constante el número de pasos temporales, el valor de  $p$  se tendrá que encontrar entre 1 y 3, mientras que si lo que mantenemos constante es el mallado y lo que doblamos es el número de pasos temporales, dado que para la derivada temporal estamos utilizando una aproximación de primer orden, el valor de  $p$  deberá ser 1.

En la Tabla 3.12 observamos los resultados cuando doblamos el mallado espacial y mantenemos el temporal. El error lo calculamos según la expresión 3.5 tomando como solución exacta la obtenida cuando el número de volúmenes de control el 80x80. Esto hará que los ratios de error obtenidos con la malla de 40x40 no sean del todo fiables, por ser demasiado cercanos a la solución tomada como exacta. En esta tabla lo que

aparece son los errores en el cálculo de la fracción de líquido en el dominio, el número de Nusselt en la pared caliente y el mapa de temperatura en el instante de tiempo final (cuando han pasado 1140 segundos) y el error promediado en el tiempo de la fracción de sólido, el número de Nusselt en la pared caliente. Junto a estos valores de error aparece el valor de  $p$ , que lo hemos calculado tomando como  $\frac{e_D}{C_p}$  el ratio de error de las soluciones que vamos obteniendo (si vamos doblando el mallado espacial será el logaritmo en base dos de este ratio de error).

n <sub>cv</sub>	FL <sup>5</sup>	e <sub>FL</sub>	p	Nusselt <sup>5</sup>	e <sub>Nu</sub>	p
10x10	0.4753	$2.94 \cdot 10^{-1}$	-	0.226448	$3.46 \cdot 10^{-1}$	-
20x20	0.5720	$1.50 \cdot 10^{-1}$	0.97	0.302785	$1.26 \cdot 10^{-1}$	1.46
40x40	0.6324	$6.00 \cdot 10^{-2}$	1.32	0.340627	$1.63 \cdot 10^{-2}$	2.95
80x80	0.6728	-	-	0.346254	-	-

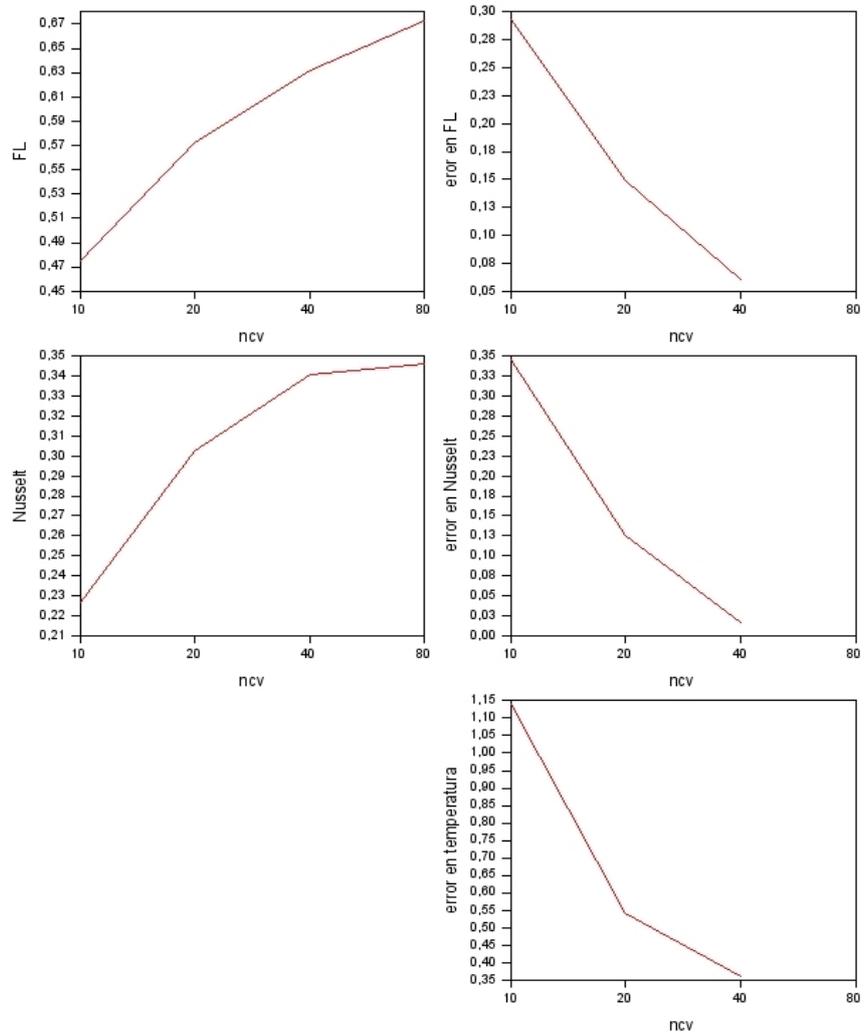
n <sub>cv</sub>	e <sub>T</sub> <sup>5</sup>	p	e <sub>FS</sub>	p	e <sub>Nu</sub>	p	cpu
10x10	$1.14 \cdot 10^0$	-	$1.96 \cdot 10^{-1}$	-	$3.42 \cdot 10^{-1}$	-	13.0
20x20	$5.42 \cdot 10^{-1}$	1.07	$1.01 \cdot 10^{-1}$	0.95	$1.70 \cdot 10^{-1}$	1.00	43.8
40x40	$3.61 \cdot 10^{-1}$	0.59	$4.29 \cdot 10^{-2}$	1.24	$7.06 \cdot 10^{-2}$	1.27	273.7
80x80	-	-	-	-	-	-	10563.5

**Tabla 3.12:** Valor de  $p$  para los diferentes valores estudiados cuando doblamos n<sub>cv</sub> y mantenemos constante ndt en 48000

De modo gráfico, en la Figura 3.7, observamos como se va aproximando la solución a la solución asintótica. En esta figura se ve claramente la necesidad de seguir doblando la malla de discretización espacial, pero el elevado tiempo computacional necesario ya para la malla de 80x80 (más de 7 días) hace impensable seguir doblándola.

En la Tabla 3.13 observamos los resultados cuando doblamos el número de incrementos temporales y mantenemos constante el mallado espacial. El error lo volveremos a calcular según la expresión 3.5, en este caso, tomando como solución exacta la obtenida cuando el número el número de pasos temporales es de 153600. Esto hará que los ratios de error obtenidos para ndt=76800 no sean del todo fiables por ser demasiado cercanos a la solución tomada como exacta.

<sup>5</sup>Valores calculados en el instante de tiempo final



**Figura 3.7:** Evolución de la fracción de líquido en el dominio, el número de Nusselt y los errores en el cálculo de la fracción de líquido, el número de Nusselt y el mapa de temperatura en el instante de tiempo final cuando mantenemos constante  $ndt$  y doblamos  $ncv$

En la Figura 3.8 observamos que la solución no depende apenas de la discretización temporal, por lo que podríamos afirmar se encuentra en el rango asintótico. En cuanto al valor de  $p$  en la Tabla 3.13 observamos que si no nos fijamos en los valores de  $ndt=76800$ , su valor ronda la unidad, que es lo que se corresponde a la aproximación de primer orden utilizada para la derivada temporal.

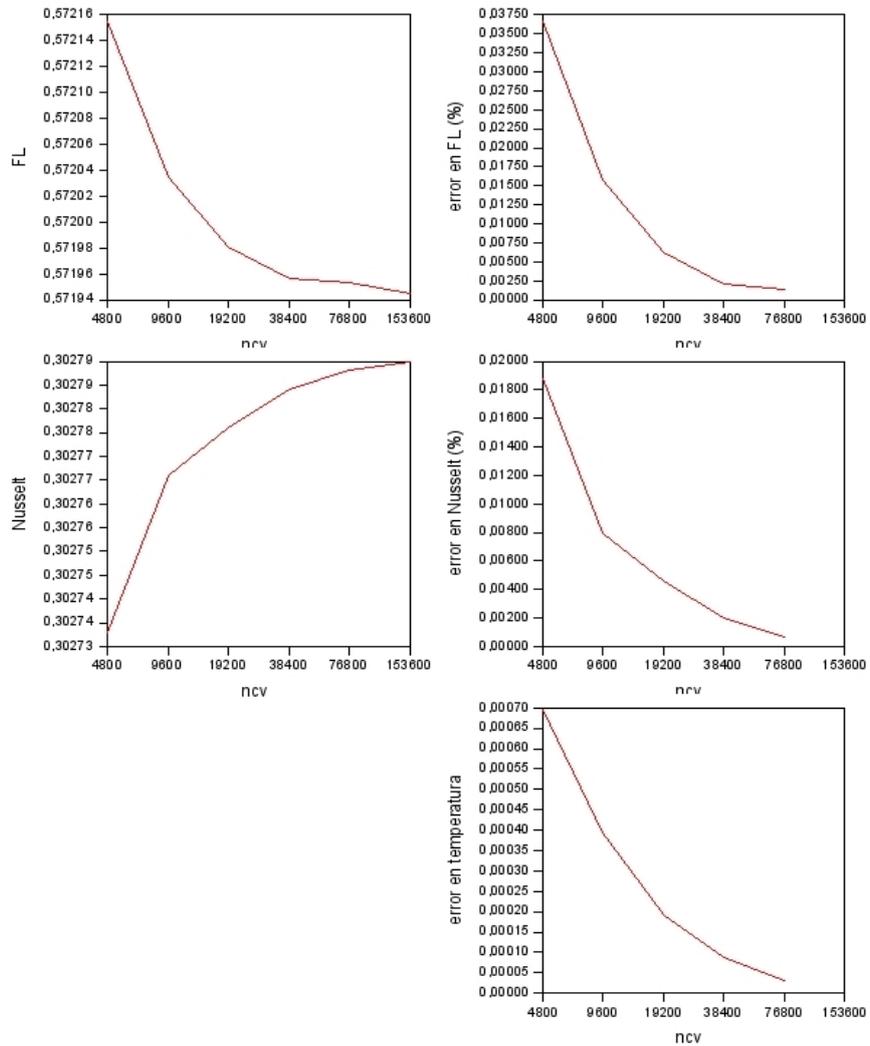
<b>ndt</b>	<b>FL</b> <sup>6</sup>	<b>e<sub>FL</sub></b>	<b>p</b>	<b>Nusselt</b> <sup>6</sup>	<b>e<sub>Nu</sub></b>	<b>p</b>
4800	0.5722	$3.74 \cdot 10^{-2}$	-	0.302733	$1.90 \cdot 10^{-2}$	-
9600	0.5720	$1.64 \cdot 10^{-2}$	1.19	0.302766	$8.14 \cdot 10^{-3}$	1.22
19200	0.5720	$6.99 \cdot 10^{-3}$	1.23	0.302776	$4.75 \cdot 10^{-3}$	0.78
38400	0.5720	$2.80 \cdot 10^{-3}$	1.32	0.302784	$2.07 \cdot 10^{-3}$	1.20
76800	0.5719	$8.74 \cdot 10^{-4}$	1.68	0.302788	$7.67 \cdot 10^{-4}$	1.43
153600	0.5719	-	-	0.302790	-	-

<b>ndt</b>	<b>e<sub>T</sub></b> <sup>6</sup>	<b>p</b>	<b>error<sub>FS</sub></b>	<b>p</b>	<b>error<sub>Nu</sub></b>	<b>p</b>	<b>cpu</b>
4800	$6.96 \cdot 10^{-4}$	-	$1.88 \cdot 10^{-4}$	-	$1.06 \cdot 10^{-3}$	-	19.7
9600	$3.93 \cdot 10^{-4}$	0.82	$8.40 \cdot 10^{-5}$	1.16	$5.27 \cdot 10^{-4}$	1.00	21.5
19200	$1.91 \cdot 10^{-4}$	1.04	$3.66 \cdot 10^{-5}$	1.20	$2.45 \cdot 10^{-4}$	1.11	21.6
38400	$8.68 \cdot 10^{-5}$	1.14	$1.44 \cdot 10^{-5}$	1.34	$1.03 \cdot 10^{-4}$	1.25	49.5
76800	$2.94 \cdot 10^{-5}$	1.56	$4.50 \cdot 10^{-6}$	1.68	$3.38 \cdot 10^{-5}$	1.60	62.0
153600	-	-	-	-	-	-	145.9

**Tabla 3.13:** Valor de  $p$  para los diferentes valores estudiados cuando doblamos  $ndt$  y mantenemos constante  $ncv$  en  $20 \times 20$

<sup>6</sup>Valores calculados en el instante de tiempo final



**Figura 3.8:** Evolución de la fracción de líquido en el dominio, el número de Nusselt y los errores en el cálculo de la fracción de líquido, el número de Nusselt y el mapa de temperatura en el instante de tiempo final cuando mantenemos constante ncv y doblamos ndt

### 3.4 Conclusiones

En este capítulo presentamos diversos aspectos numéricos relacionados con la metodología utilizada para la resolución del cambio de fase sólido-líquido: el método entálpico.

En cuanto a la malla de discretización, hemos utilizado unas mallas fijas en el espacio y en el tiempo, regulares y ortogonales. Para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes hemos utilizado el algoritmo *SIMPLEC* y el incremento de tiempo será dinámico, con el fin de asegurar la convergencia de todos los instantes de tiempo.

En este capítulo hemos mostrado que la correcta elección de ciertos parámetros supone un ahorro importante en el tiempo de cálculo. Así pues, para el caso de fusión del galio con una relación de caja de 0.5 y unos valores de  $Ra = 2.1 \cdot 10^5$  y de  $St_l = 0.039$  estos parámetros serán:

- $res - max < 10^{-7}$ ,  $inc - max < 10^{-7}$  y  $imb < 10^{-4}$
- $NPSCAL = 6$  y  $NPPP = 2$
- $\alpha_T = 0.7$  y  $\alpha_F = \alpha_U = \alpha_V = 1.0$
- $C = 1 \cdot 10^8$  y  $b = 1 \cdot 10^{-6}$

Cuando nos dispongamos a estudiar un nuevo caso, es importante realizar este estudio previo con el objetivo de comprobar con que valores de estos parámetros optimizamos el tiempo de cpu.

En cuanto a los esquemas numéricos, el estudio resalta la conveniencia de utilizar esquemas de alto orden, en nuestro caso el SMART, por obtener éstos mejores soluciones con mallas menos finas, y mostrar algunos aspectos del movimiento del fluido que los esquemas de bajo orden no son capaces de captar.

También hemos realizado la verificación de este caso, pudiendo concluir que los resultados obtenidos en cuanto a la discretización temporal son satisfactorios. En cambio, en cuanto a la discretización espacial los resultados no presentan el mismo grado de precisión, pues el valor de  $p$  se encuentra entre 1 y 3 y el esquema SMART utiliza un UDS o un CDS o un QUICK en función del caso, pero la solución no se encuentran en el rango asintótico, por lo que sería necesario incrementar la malla, pero esto no es posible debido a que el tiempo computacional es demasiado elevado. Una manera de poder seguir doblando la malla de discretización espacial sería la utilización de subdominios, pues nos permitiría utilizar un menor número de volúmenes de control en la zona sólida y además nos permitiría una paralelización fácil del problema.

Finalmente, comentar que hemos comparado los resultados numéricos y los experimentales observándose diferencias que pueden ser debidas a:

1. Las propiedades termofísicas: se tiene claras incertidumbres en cuanto a la conductividad térmica del galio. La conductividad del sólido en su forma cristalina es altamente anisotrópica y puede variar en un rango de 88.5 a 16 W/mK en función de la dirección. El modelo numérico no está preparado para predecir este comportamiento anisotrópico, por lo que se tendría que ver la influencia de ésta en los resultados numéricos. En el trabajo de Costa et al. [2] se demuestra la influencia de esta propiedad en los resultados que se obtienen numéricamente.
2. Condición de contorno de la pared caliente: en la realidad la temperatura de esta pared no se ve incrementada de manera brusca, por lo que en los estadios iniciales seguramente la temperatura de esta pared sea ligeramente inferior [16].
3. Efectos tridimensionales: ha sido demostrado en diferentes trabajos que en el fenómeno de cambio de fase existen efectos tridimensionales a tener en cuenta [17]

### 3.5 Nomenclatura

$c_p$	Calor específico a presión constante
$cpu$	tiempo computacional
$e_D$	error computacional
$FL$	fracción de líquido en el dominio
$g$	gravedad
$H$	Altura del recinto en estudio
$ite$	número de iteraciones totales
$L$	Calor latente de cambio de fase
$ncv$	número de volúmenes de control
$ndt$	número de pasos temporales
$NPPP$	Número de pasadas por la ecuación de corrección de presiones
$NPSCAL$	Número de pasadas por los campos escalares
$Nu$	Número de Nusselt
$p$	orden de ajuste del esquema numérico
$Pr$	Número de Prandtl
$Ra$	Número de Rayleigh
$St$	Número de Stefan
$T_c$	Temperatura de la pared fría
$T_h$	Temperatura de la pared caliente
$T_m$	Temperatura de fusión
$W$	Anchura del recinto en estudio

**Símbolos griegos**

$\alpha$	difusividad
$\alpha_\phi$	coeficiente de relajación sobre la variable $\phi$
$\beta$	coeficiente de expansión volumétrico
$\phi$	propiedad intensiva
$\lambda$	conductividad térmica
$\mu$	viscosidad dinámica
$\nu$	viscosidad cinemática
$\rho$	densidad

**subíndices**

$s$	fase sólida
$l$	fase líquida

**Bibliografía**

- [1] R. Viswanath and Y. Jaluria. A Comparison of Different Solution Methodologies for Melting and Solidification Problems in Enclosures. *Numerical Heat Transfer*, 24:77–105, 1993.
- [2] M. Costa, A. Oliva, C.D. Pérez Segarra, and R. Alba. Numerical Simulation of Solid-Liquid Phase Change Phenomena. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 91(1–3):1123–1134, 1991.
- [3] Z.X. Gong and A.S. Mujumdar. Flow and Heat Transfer in Convection-Dominated Melting in a Rectangular Cavity Heated from Below. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(17):2573–2580, 1998.
- [4] Z.X. Gong, S. Devahastin, and A.S. Mujumdar. Enhanced Heat Transfer in Free Convection-Dominated Melting in a Rectangular Cavity with an Isothermal Vertical Wall. *Applied Thermal Engineering*, 19(12):1237–1251, 1999.
- [5] D. Pal and Y.K. Joshi. Melting in a Side Heated Tall Enclosure by a Uniformly Dissipating Heat Source. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44:375–387, 2001.

- [6] S.V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [7] M.S. Darwish. A new high-resolution scheme based on the normalized variable formulation. *Numerical Heat Transfer*, 24:353–371, 1993.
- [8] M.S. Darwish and F.H. Moukalled. Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes. *Numerical Heat Transfer*, 26:79–96, 1994.
- [9] C.J. Ho. Solid Liquid Phase Change Heat Transfer in Enclosures. Master’s thesis, Purdue University, 1982.
- [10] C.J. Ho and R. Viskanta. Inward Solid-Liquid Phase-Change Heat Transfer in a Rectangular Cavity with Conducting Vertical Walls. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27:1055–1065, 1984.
- [11] A. Chikhaoui, P. Bontoux, M.K. Maslanik, and R.L. Sani. Steady Three Dimensional Thermal Convection in a Vertical Rectangular Enclosure: Transition to Multicellular Flow. In M.S. Engelman, editor, *Fluid Dynamics International*, pages 4.1–4.19. FIDAP User’s Convergence, 1987.
- [12] J.A. Dantzig. Modelling Liquid-Solid Phase Change with Melt Convection. *Int. J. Numer. of Meth. Eng.*, 28:1769–1785, 1989.
- [13] C.M. Vest and V. Arpaci. Stability of natural convection in a vertical slot. *J. Fluid Mechanics*, 36:1–15, 1969.
- [14] N. Hannoun, V. Alexiades, and T.Z. Mai. Resolving the Controversy over Tin and Gallium Melting in a Rectangular Cavity Heated from the Side. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 44:253–276, 2003.
- [15] J. Cadafalch, C.D. Pérez-Segarra, R. Cònsul, and A. Oliva. Verification of finite volume computations on steady state fluid flow and heat transfer. *Journal of Fluids Engineering*, 124:11–21, 2002.
- [16] M.M. Cerimele, D. Mansutti, and F. Pistella. A Front-Fixing Method for Fluids in Liquid/Solid Phase Change with Benchmark Test. In *Proceedings of the Fifth European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS)*, 2000.
- [17] M. Costa, A. Oliva, and C.D. Pérez-Segarra. A three-dimensional numerical study of melting inside a heated horizontal cylinder. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 32(5):531–553, 1997.



# Capítulo 4

## Métodos de subdominios conservativos

En este capítulo se explica la metodología de descomposición de subdominios o método multibloc. Este método nos ha de permitir obtener una solución en el rango asintótico que de otra manera sería muy costosa dado el elevado tiempo de cálculo necesario para obtener la solución transitoria de este tipo de problemas.

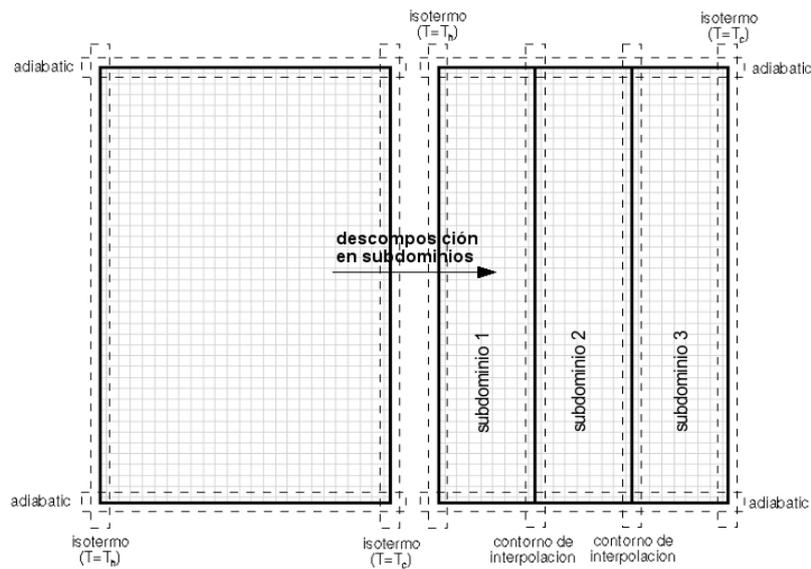
Una vez explicada la metodología, procederemos a exponer los casos que hemos utilizado para realizar la verificación del código numérico implementado. Con este objetivo, estudiaremos dos casos en los que no interviene la fracción de líquido: un primer caso de conducción pura, es decir, un caso en que todo el dominio estará en estado sólido y permanecerá sólido durante todo el tiempo simulado. El segundo caso corresponde a convección sin cambio de fase, o lo que es lo mismo, todo el dominio estará en estado líquido. El caso que nos ocupa tiene la singularidad de encontrarse en un rango de Prandtl muy bajo. Esto provoca que se alcance el régimen turbulento para números de Rayleigh relativamente pequeños. Esto nos ha hecho pensar sobre la conveniencia de realizar un estudio más detallado para determinar para que valor de Rayleigh se produce la transición de régimen permanente a flujo oscilatorio y de éste a un régimen caótico.

A continuación, y volviendo al caso de fusión del galio, estudiaremos el caso en que sólo tenemos un subdominio que se corresponde al dominio físico total. Este caso, además, nos servirá para ver que variaciones provoca el hecho de fijar a cero la velocidad de los volúmenes de control que son sólidos. Se presenta el funcionamiento del código cuando tenemos dos subdominios: uno que se corresponda al dominio físico completo y el otro a una porción del mismo. En este caso sólo tendremos un subdominio que pasa información a otro (no existe cruce de información entre subdominios). Finalmente, estudiaremos el caso en que existen dos subdominios y la dependencia se da en los dos sentidos, es decir, existe un cruce de información entre ellos.

## 4.1 Introducción

En este capítulo se realizará una descripción detallada del método multibloc, también conocido como método de descomposición en subdominios para flujos incompresibles y con el uso de mallas desplazadas [1, 2, 3], con el objetivo de utilizarlo para la resolución de fenómenos de cambio de fase. Se explicarán las modificaciones que han sido necesarias para la utilización de este método en esta fenomenología y se explicarán los problemas que han ido apareciendo. Finalmente, se mostrarán los casos que se han resuelto con el fin de verificar el código.

El método multibloc se basa en descomponer el dominio de integración de las ecuaciones gobernantes en diferentes subdominios antes de discretizar. Esto provoca la aparición en cada uno de los subdominios de unas condiciones de contorno ficticias que no existirían si el dominio entero de análisis no se descompusiera. Estos contornos se llamarán *contornos de interpolación*, por el simple hecho de que de una manera u otra la información de contorno necesaria en estos contornos para tener el subdominio acotado, y poder resolverlo independientemente de los otros, ha de provenir interpolada de los valores de las variables de los subdominios adyacentes, ya sea directamente en forma de valor (*Dirichlet*) o en forma de flujo (*Neumann*).

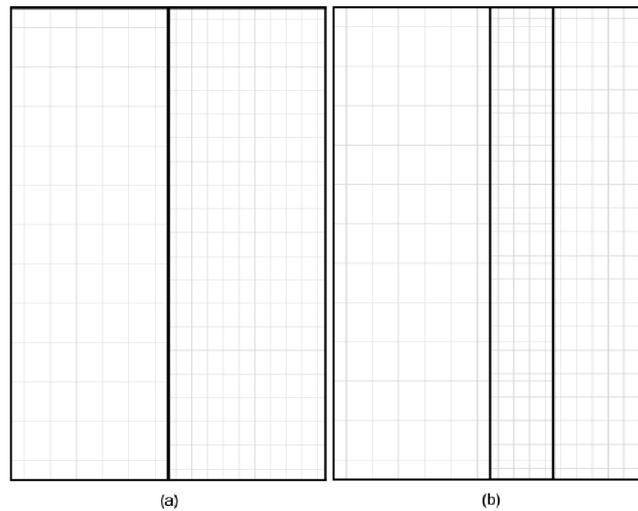


**Figura 4.1:** Ejemplo de descomposición de un dominio en tres subdominios, con la aparición de dos contornos de interpolación

En la Figura 4.1 aparece representado un caso de descomposición en subdominios: a la izquierda aparece el dominio físico que realmente se quiere resolver y a la derecha este mismo dominio descompuesto en tres, que entre todos forman el dominio físico que se tiene a la izquierda. Estos subdominios se pasan la información a través de las fronteras de interpolación. Por supuesto, la solución obtenida en ambos casos ha de ser coincidente, si no, es que el método está fallando.

Los métodos utilizados para calcular la información que un subdominio pasa a otro son los llamados *esquemas de interpolación*. Estos esquemas son la parte más importante del método: unos esquemas bien planteados y formulados pueden llevar rápidamente a la solución, mientras que en caso contrario pueden llevar lentamente a la solución, hacer que el método no converja, o lo que es peor, que converja a una solución falsa (e.g. cuando en la solución se tienen discontinuidades en los valores de las variables en los contornos de interpolación).

Lo primero que se tendrá que decidir es si las mallas de los subdominios estarán solapadas (*overlaped grids*) o no estarán solapadas (*patched grids*). En la Figura 4.2 se muestran estas dos posibilidades.



**Figura 4.2:** Representación gráfica de los diferentes métodos de descomposición de subdominios: (a) *Patched grids*; (b) *overlaped grids*

En el caso de *patched grids* la información necesaria en los contornos de interpolación se va a buscar a unos nodos ficticios de la malla que caen sobre el

subdominio adyacente, donde se han calculado los valores en función de los valores del otro subdominio adyacente. En cambio en *overlaped grids* los propios nodos del subdominio ya están sobre el subdominio adyacente y se calculan los datos interpolados necesarios.

Es deseable que la formulación sea conservativa; esto es que verifique los principios de conservación de la masa, de la cantidad de movimiento y de la energía. Es importante que el método multibloc siga esta filosofía y que garantice la conservación en los contornos de interpolación, pues en zonas con 3 o más subdominios solapados son necesarias unas condiciones especiales adicionales en cuanto a la disposición de las mallas para garantizarla. En caso contrario es bastante probable que se obtengan imbalances, que se genere masa artificialmente en los contornos de interpolación, aunque se utilicen esquemas de interpolación localmente conservativos.

#### 4.1.1 Esquemas de interpolación

Son estrategias utilizadas para calcular la información que un subdominio pasa al otro. Se pueden clasificar de la siguiente manera:

- Esquemas conservativos
  - Localmente conservativos
  - Globalmente conservativos o conservativos basados en flujos corregidos
  - Completamente conservativos o conservativos basados en flujos consistentes
- Esquemas no conservativos

Los esquemas no conservativos son los más intuitivos. Se basan en hacer interpolaciones matemáticas directas de las variables dependientes en los contornos de interpolación e introducir los valores obtenidos como condiciones de contorno de Dirichlet en el subdominio de destino.

El orden de precisión del esquema de interpolación ha de ser como mínimo un orden por encima del esquema numérico utilizado para así mantener la precisión del esquema numérico.

Los esquemas conservativos son los más recomendados en la literatura. Los esquemas globalmente conservativos se basan en hacer interpolaciones matemáticas directas de las variables como los no conservativos, cosa que no asegura la conservación local y, entonces, distribuir una corrección entre los nodos del contorno de interpolación, calculada de un balance global sobre este contorno de la cantidad

que se quiera conservar. Los problemas aparecen cuando se tienen gradientes fuertes justo en las zonas de interpolación, entonces se tiene que idear un algoritmo que distribuya esta corrección de forma conveniente.

Los esquemas completamente conservativos (*Fully conservative*) garantizan la conservación local y global. Los flujos locales de los volúmenes de control del contorno de interpolación se calculan de manera que sean consistentes con la formulación de estos flujos del subdominio fuente. De esta manera no se necesita ninguna corrección. Los esquemas que solo son localmente conservativos sólo se preocupan de mantener la conservación en cada uno de los volúmenes de control del contorno de interpolación; esto nos conducirá en muchos casos a una conservación global, convirtiéndose en estos casos en esquemas completamente conservativos.

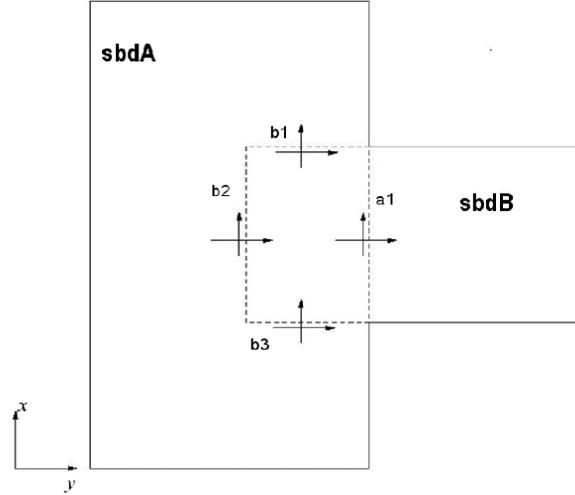
Por lo que se ha optado es para el campo de velocidades una conservación de la masa y de la cantidad de movimiento en la dirección tangencial, es decir, se realizan interpolaciones conservativas tanto para la velocidad normal como para la tangencial; para los campos escalares existen dos opciones: **No conservativa (AC)** que cuando se producen gradientes elevados de las variables los imbalances aumentan pero estos desaparecerán al refinar la malla y **completamente conservativas (FC)**.

#### 4.1.2 Esquemas de interpolación del campo de velocidades

Los esquemas de interpolación que se utilizarán para las tres componentes de la velocidad serán localmente conservativos usados como base para ser completamente conservativos. Se ha de tener en cuenta que el método que se está utilizando para la resolución de cada uno de los subdominios es el método SIMPLEC, que es un método segregado basado en la corrección de presiones y, además, se están utilizando mallas desplazadas.

A continuación vamos a proceder a la deducción de las ecuaciones para un caso bidimensional, no obstante su extensión al caso tridimensional es directa. En la Figura 4.3 se muestra una configuración de dos subdominios (A y B). Los contornos de interpolación están representados en línea discontinua. Los flujos perpendiculares a los contornos de interpolación simbolizan flujos másicos, mientras que los tangentes simbolizan los flujos de cantidad de movimiento en la dirección indicada.

La ecuación de corrección de presiones puede tener dos posibles condiciones de contorno: la de presión conocida en el contorno o la de componente normal de la velocidad conocida en el contorno, que es igual que decir que el flujo másico en el contorno es conocido. La técnica se basa en realizar una conservación explícita del flujo másico a través de los contornos de interpolación, entonces estos flujos sirven como condición de contorno para la ecuación de corrección de presiones. Se dice explícita porque los flujos se calculan a partir de los datos de los subdominios fuente



**Figura 4.3:** Ejemplo bidimensional utilizado para la explicación de los esquemas de interpolación en campos vectoriales

sobre los contornos de interpolación correspondientes en los subdominios destino y se introducen explícitamente en la ecuación de corrección de presiones de los subdominios destino. Una vez se conocen los flujos másicos, la distribución de la componente normal de la velocidad en los contornos de interpolación para cada destino es conocida.

A continuación se han de obtener las condiciones de contorno de forma conservativa para la ecuación de cantidad de movimiento. La ecuación de cantidad de movimiento en la dirección  $x$  la podemos escribir como:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho u}{\partial t} \Delta x \Delta y + [(\rho u u)_e - (\rho u u)_w] \Delta y + [(\rho v u)_n - (\rho v u)_s] \Delta x = \\ & \left[ \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_e - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y + \left[ \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)_n - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x - \frac{\partial P}{\partial x} \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (4.1)$$

Los flujos totales a través de las caras, que estarán formados por los flujos difusivos y los convectivos se pueden escribir como:

$$J_e = \left[ (\rho u u)_e - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_e \right] \Delta y \quad (4.2)$$

$$J_w = \left[ (\rho u u)_w - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y \quad (4.3)$$

$$J_n = \left[ (\rho v u)_n - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)_n \right] \Delta x \quad (4.4)$$

$$J_s = \left[ (\rho v u)_s - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x \quad (4.5)$$

quedando la ecuación de cantidad de movimiento,

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} \Delta x \Delta y + J_e - J_w + J_n - J_s = -\frac{P_e - P_w}{\Delta x} \Delta x \Delta y \quad (4.6)$$

y añadiendo a los flujos el término fuente, estos quedan:

$$J'_e = \left[ (\rho u u)_e - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_e + P_e \right] \Delta y \quad (4.7)$$

$$J'_w = \left[ (\rho u u)_w - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_w + P_w \right] \Delta y \quad (4.8)$$

quedando entonces la ecuación de momentum en la dirección  $x$ :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} \Delta x \Delta y + J'_e - J'_w + J_n - J_s = 0 \quad (4.9)$$

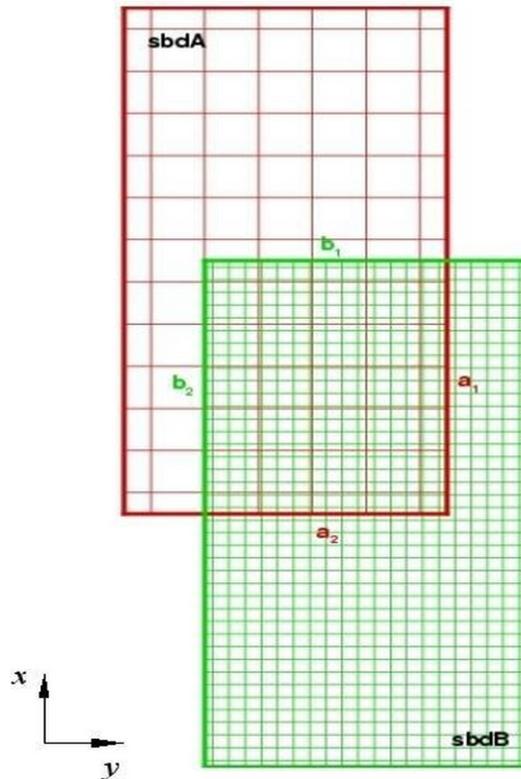
En un caso bidimensional se han de distinguir entre dos condiciones de contorno de interpolación:

- Condiciones de contorno para las caras de interpolación perpendiculares a la dirección  $x$  ( $a_1, b_2$ ). Vienen dadas por la velocidad normal al contorno, calculada por conservación de flujo másico.
- Condiciones de contorno en las caras no perpendiculares a la dirección  $x$  ( $b_1, b_3$ ). El *subdominio A* no tiene condiciones de este tipo. En estas caras, el flujo de cantidad de movimiento se tiene que conservar, y viene dado por las expresiones 4.4 y 4.5.

### Formulación matemática

El procedimiento a seguir será el siguiente:

1. Calcular la información necesaria en el subdominio fuente.
2. Introducir esta información en las ecuaciones del subdominio destino.



**Figura 4.4:** Caso con el que se realizará la explicación de la formulación matemática de los esquemas de interpolación para los campos de velocidades

Como ya hemos comentado anteriormente, la explicación la daremos para un caso bidimensional (ver Figura4.4).

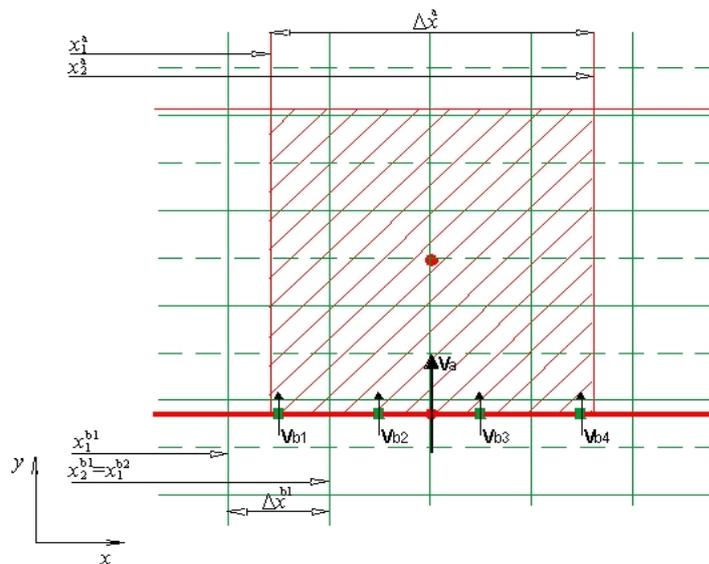
A modo de ejemplo, explicaremos como viaja la información en el caso de la Figura4.4. Nos encontramos con un caso de 2 subdominios, A y B, con dos contornos de interpolación cada subdominio,  $a_1$ ,  $a_2$  y  $b_1$ ,  $b_2$ . En la Tabla4.1 se ve cual es el papel de cada subdominio en cada contorno de interpolación.

En primer lugar procederemos al cálculo, en el subdominio fuente, del flujo másico en los contornos de interpolación y tomaremos como ejemplo el contorno de interpolación  $a_2$  de la Figura4.4. En este contorno, tal como se ve en la Tabla4.1, el subdominio B actúa como fuente y el A como destino. Como la ecuación de

Contorno de Interpolación	subdominio	
	fuente	destino
$a_1$	B	A
$a_2$	B	A
$b_1$	A	B
$b_2$	A	B

**Tabla 4.1:** Relación del papel que juega cada subdominio en los contornos de interpolación del caso tomado como ejemplo -Figura4.4-

continuidad se resuelve en malla centrada, el procedimiento es calcular el flujo másico que pasa por cada uno de los volúmenes de control de la malla centrada del contorno  $a_2$  del subdominio A. Así se conseguirá la conservación local.



**Figura 4.5:** Detalle del contorno de interpolación  $a_2$  para la velocidad en la dirección longitudinal (ver Figura4.4). Los puntos circulares indican los nodos de la malla centrada del subdominio A y los puntos rectangulares los nodos de la malla desplazada en la dirección  $y$  del subdominio B

El flujo másico en  $a_2$  se calcula como la suma de todos los flujos másicos del subdominio B afectados por un factor de área compartida,  $fa$ :

$$\dot{m}_a = \sum_i \dot{m}_{bi} \cdot fa_{bi} \quad (4.10)$$

donde,

$$\dot{m}_{bi} = (\rho v \Delta x)_{bi} \quad (4.11)$$

$$fa = \begin{cases} 1 & \text{si } x_1^{bi} \geq x_1^a \text{ y } x_2^{bi} \leq x_2^a \\ \frac{x_2^{bi} - x_1^a}{\Delta x^{bi}} & \text{si } x_1^{bi} < x_1^a \text{ y } x_2^{bi} \leq x_2^a \\ \frac{x_2^a - x_1^{bi}}{\Delta x^{bi}} & \text{si } x_1^{bi} \geq x_1^a \text{ y } x_2^{bi} > x_2^a \\ \frac{\Delta x^a}{\Delta x^{bi}} & \text{si } x_1^{bi} < x_1^a \text{ y } x_2^{bi} > x_2^a \end{cases}$$

La última de las expresiones de la ecuación 4.11 solo es válida para el caso en que  $\Delta x^a < \Delta x^{bi}$ , es decir, cuando los volúmenes de control del subdominio fuente son mayores que los del subdominio destino, o lo que es lo mismo, la información viaja de una malla basta a una fina. Para los contornos de interpolación perpendiculares a la dirección  $x$  el método sería análogo.

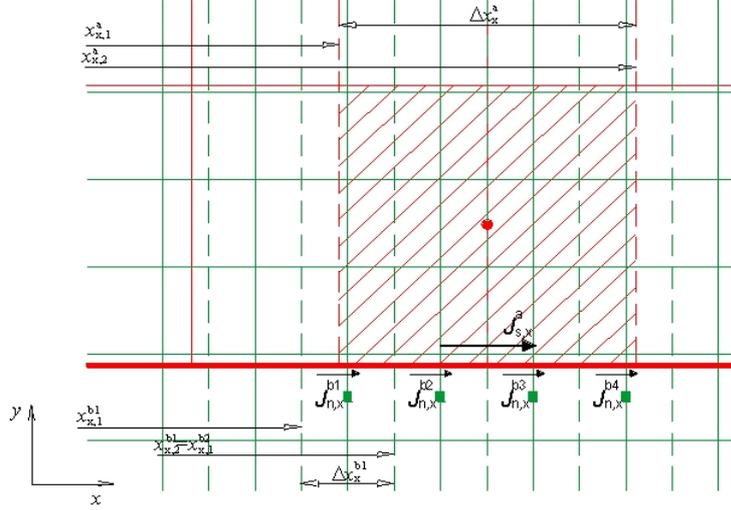
Por otro lado, se realizará el cálculo en el subdominio fuente de los flujos de cantidad de movimiento en las direcciones tangenciales al contorno de interpolación. Para la explicación de este cálculo también se cogerá el contorno de interpolación  $a_2$  de la Figura 4.4. El método será el mismo que el utilizado para el flujo másico. El flujo de cantidad de movimiento en la dirección  $x$  (tangente al contorno de interpolación) en  $a_2$ , se calcula como la suma de todos los flujos de cantidad de movimiento en la dirección  $x$  del subdominio B afectados por un factor de área compartida,  $fa_x$ .

De esta manera, tal como se observa en la Figura 4.6, se puede decir que:

$$J_{s,x}^a = \sum_i (J_{n,x}^{bi} \cdot fa_x^{bi}) \quad (4.12)$$

donde  $J$  viene dado por las expresiones 4.4 y 4.5.  $J_{s,x}^a$  es el flujo de cantidad de movimiento en la cara sur del volumen de control del subdominio A (destino) y  $J_{n,x}^{bi}$  es el flujo de movimiento en el subdominio B (origen) y se puede calcular tanto con los flujos en la cara norte de los volúmenes de control de debajo del contorno de interpolación como con los flujos de la cara sur de los volúmenes de control por encima del contorno de interpolación.

Los factores de malla compartida se calculan como en el caso anterior pero con las coordenadas de malla desplazada en  $x$ . El valor de  $J_{n,x}^{bi}$  se puede calcular en función de los coeficientes algebraicos de la ecuación discreta.



**Figura 4.6:** Caso con el que se realizará la explicación de la formulación matemática de los esquemas de interpolación para la velocidad en la dirección tangencial, siendo los puntos circulares los nodos de la malla desplazada en  $x$  del subdominio A y los puntos rectangulares los nodos de la malla desplazada en  $x$  del subdominio B

Para expresar el flujo en función de los coeficientes algebraicos se partirá del flujo de cantidad de movimiento en la dirección  $x$ ,

$$J_n = \left[ (\rho v u)_n - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)_n \right] \Delta x \quad (4.13)$$

$$J_n = [(\rho v)_n \Delta x] u_n - \mu_n \Delta x \frac{u_N - u_P}{\partial y_n} \quad (4.14)$$

siendo subíndice  $P$  el correspondiente al nodo del volumen de control  $bi$  y el  $N$  el nodo vecino en el norte. Esto se puede expresar como:

$$J_n = F_n u_n - D_n (u_N - u_P) \quad (4.15)$$

Para continuar, suponemos que se utiliza un esquema CDS para el término convectivo, pero con cualquier otro esquema de bajo orden se obtendría el mismo

resultado. De este modo:

$$u_n = \frac{u_P + u_N}{2} \quad (4.16)$$

Si introducimos esta ecuación en la 4.15, obtendremos:

$$J_n = \frac{1}{2}F_n(u_P + u_N) - D_n(u_N - u_P) \quad (4.17)$$

Introduciendo la definición del número de Peclet en la cara norte:

$$Pe_n = \frac{F_n}{D_n} \quad (4.18)$$

$$J_n = \frac{1}{2}D_nPe_n(u_P + u_N) - D_n(u_N - u_P) \quad (4.19)$$

$$J_n = D_n \left(1 + \frac{1}{2}Pe_n\right) u_P - D_n \left(1 - \frac{1}{2}Pe_n\right) u_N \quad (4.20)$$

$$J_n = D_n \left(1 - \frac{1}{2}Pe_n\right) u_P + Pe_n D_n u_P - D_n \left(1 - \frac{1}{2}Pe_n\right) u_N \quad (4.21)$$

$$J_n = D_n \left(1 - \frac{1}{2}Pe_n\right) u_P + F_n u_P - D_n \left(1 - \frac{1}{2}Pe_n\right) u_N \quad (4.22)$$

Teniendo en cuenta que,

$$D_n \left(1 - \frac{1}{2}Pe_n\right) = D_n \left(1 - \frac{1}{2}|Pe_n|\right) + \max(-F_n, 0) \quad (4.23)$$

se obtiene que

$$J_n = \left[ D_n \left(1 - \frac{1}{2}|Pe_n|\right) + \max(-F_n, 0) + F_n \right] u_P - \left[ D_n \left(1 - \frac{1}{2}|Pe_n|\right) + \max(-F_n, 0) \right] u_N \quad (4.24)$$

Para el esquema numérico CDS definimos  $A(|Pe|)=1-0.5|Pe|$ , entonces la expresión anterior queda:

$$J_n = [D_n A(|Pe_n|) + \max(-F_n, 0) + F_n] u_P - [D_n A(|Pe_n|) + \max(-F_n, 0)] u_N \quad (4.25)$$

sabiendo que  $a_N = D_n A (|Pe_n|) + \max(-F_n, 0)$  obtenemos,

$$J_n = (a_N + F_n) u_P - a_N u_N \quad (4.26)$$

Para esquemas numéricos de altas prestaciones se tienen que introducir los términos diferidos (*Deferred correction*); de esta manera tendremos unos términos diferidos debidos a los términos convectivos en la cara norte:

$$dctcn = F_n (u_n^l - u_n^h) \quad (4.27)$$

y unos términos diferidos debidos a los términos difusivos en la cara norte:

$$dctdn = \left[ \tau_n - \mu_n \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)_n \right] \Delta x \Delta z \quad (4.28)$$

De esta manera, para cualquier variable  $u$ , tendremos:

$$J_n^* = (a_N + F_n) u_P - a_N u_N - dctcn - dctdn \quad (4.29)$$

y para el resto de caras, con un procedimiento análogo, obtendremos:

$$J_s^* = (F_s - a_S) u_P + a_S u_S - dctcs - dctds \quad (4.30)$$

$$J_e^* = (a_E + F_e) u_P - a_E u_E - dctce - dctde + P_e \Delta y \Delta z \quad (4.31)$$

$$J_w^* = (F_w - a_W) u_P + a_W u_W - dctcw - dctdw + P_w \Delta y \Delta z \quad (4.32)$$

En definitiva, ahora ya se puede definir el valor de  $J_{n,x}^{bi}$  como,

$$J_{n,x}^{bi} = [(a_N + F_n) u_P - a_N u_N - dctcn - dctdn]_x^{bi} \quad (4.33)$$

Finalmente procederemos a explicar como se realizará la introducción de la condición de contorno en el subdominio de destino para las ecuaciones de cantidad de movimiento.

En el caso de las direcciones tangenciales al contorno de interpolación (Figura 4.6) se introducirá el flujo en forma de velocidad, es decir, la condición de contorno para la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección  $x$  será de velocidad conocida en el nodo  $S$ , y esta velocidad será aquella que haga que el flujo en la cara sur del nodo  $P$  sea el que se ha calculado en el subdominio fuente.

$$J_s, x^a = [(F_s - a_S) u_P + a_S u_S - dctcs - dctds]_x \quad (4.34)$$

Despejando esta ecuación obtendremos la velocidad que se utilizará como condición de contorno del subdominio A.

$$u_S = \left[ \frac{J_s, x^a - (F_s - a_S) u_P + dctcs + dctds}{a_S} \right]_x \quad (4.35)$$

donde  $J_s, x^a$  es el flujo proveniente del subdominio origen, y para el resto de términos de la derecha de la igualdad se toman los valores más actuales posibles del subdominio destino. En nuestro código, debido a la estructura del mismo, resulta más útil calcular la velocidad en el contorno de la siguiente manera:

$$u_S = \left[ \frac{J_s, x^a - (F_s - a_S) u_P}{a_S} \right]_x \quad (4.36)$$

En el caso de las direcciones normales (Figura4.5) se introducirá aquella velocidad en el nodo  $S$  como condición de Dirichlet, de manera que haga que el flujo másico calculado en la cara sur sea  $\dot{m}_a$

$$v_a = \frac{\dot{m}_a}{\rho_s \Delta x^a} \quad (4.37)$$

### 4.1.3 Esquema de interpolación para los campos escalares

En el caso en que nos encontramos, estamos hablando de las variables temperatura y fracción líquida. Para la resolución de esta fenomenología optaremos por el uso de la estrategia asintóticamente conservativa (AC), que es una estrategia no conservativa: se hacen interpolaciones matemáticas directas de las variables en el subdominio fuente sobre los contornos de interpolación del subdominio destino. Esto no asegura la conservación del flujo, pero se ha demostrado que a medida que la malla se va refinando se consigue la conservación global. Además, si se utiliza en un caso donde las mallas son coincidentes y se interpola sobre los nodos interiores, sí que se garantiza la conservación.

#### Formulación matemática

Volviendo al ejemplo de la Figura4.4, en la Figura4.7 se presenta el contorno de interpolación  $a_2$  donde el subdominio B pasa la información al A. En el caso de la temperatura realizaremos interpolaciones lagrangianas bi-cuadráticas para el caso bidimensional y tricadráticas para en caso tridimensional, mientras que para la fracción líquida las interpolaciones serán bi-lineales y tri-lineales, respectivamente. Existen dos métodos: interpolación de la variable en los nodos interiores e interpolación de la variable en los nodos del contorno. La solución obtenida con ambos métodos es igual de buena, pero en el caso de mallas coincidentes los nodos

interiores de A coinciden con los de B, mientras que los del contorno no. Utilizando un esquema asintóticamente conservativo con mallas coincidentes e interpolación sobre los nodos interiores, la solución obtenida es conservativa para cualquier malla.

El primer paso a realizar es determinar el nodo base del subdominio fuente. El criterio escogido ha sido el de aquel nodo del subdominio fuente que esté más cercano al nodo del subdominio destino y que se encuentre en el sur y oeste de este nodo destino. Una vez se tiene este nodo (nodo 5 en la Figura 4.7) ya se tienen identificados el resto de nodos que intervendrán en la interpolación.

A continuación ya podemos proceder a hacer la interpolación bi-cuadrática o bi-lineal, según el caso. Así, se calcularía el valor de la variable en *III* realizando una aproximación parabólica o lineal, y después, de la misma manera, el valor de la variable en *II* y en *I*. Con estos valores en *I*, *II* y *III* podemos aproximar el valor de la variable en  $P^a$  en función de una parábola, para la temperatura, y en función de una recta, para la fracción líquida. Los valores calculados de esta manera se pasarán directamente al subdominio destino.

## 4.2 Dificultades en la simulación del cambio de fase con subdominios

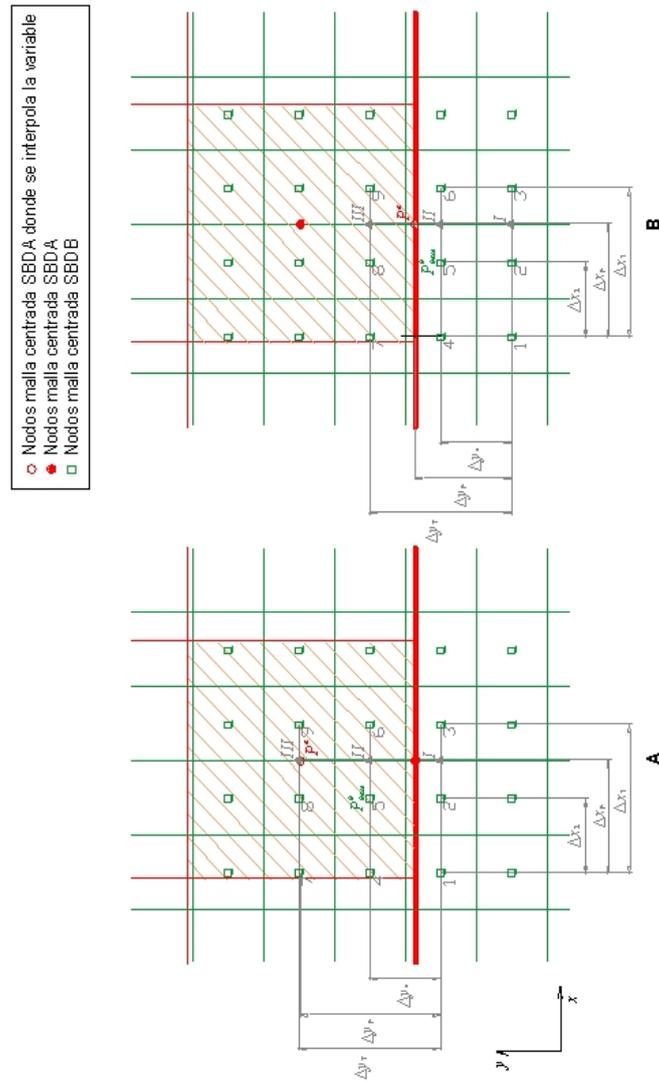
A la hora de resolver casos de cambio de fase con la utilización de subdominios nos hemos encontrado problemas a la hora de utilizar ciertos esquemas numéricos. La problemática se ha encontrado cuando se utilizan los esquemas *Power Law* (PLDS), *Exponential* (EDS) y *Central Difference scheme* (CDS).

En el caso del PLDS el problema es la existencia de valores de los coeficientes de la ecuación algebraica muy pequeños (del orden de  $10^{-16}$ ). Estos coeficientes se utilizan para el cálculo de la velocidad tangencial en el contorno de interpolación (expresión 4.35) lo cual da como resultado un valor de velocidad que se aleja de mucho de la realidad, y este error se irá propagando en el propio proceso iterativo hasta que este diverja.

Para el EDS los problemas ya aparecen sin utilizar subdominios y son debidos a la existencia de la función exponencial. Los problemas surgen cuando el número de Peclet es muy bajo, lo que hace que el denominador de la función que se emplea para el cálculo de  $A$ , tienda a 0.

Finalmente, en el caso del CDS el problema es la existencia de números de Peclet superiores a 2, lo que hace que existan coeficientes de la expresión discreta negativos, dando problemas cuando los utilizamos en la expresión 4.35.

Todo esto ha hecho que a partir de ahora solo se utilicen dos esquemas numéricos



**Figura 4.7:** Caso con el que se realizará la explicación de la formulación matemática de los esquemas de interpolación para las variables escalares. (A) Interpolación sobre nodos interiores (B) Interpolación sobre nodos de contorno.

para los términos convectivos: el *Upwind*(UDS) y *Smart*.

Antes de proceder a la resolución optimizada del caso de fusión del galio, vamos a ejecutar una serie de casos para comprobar que el código funciona correctamente para estas situaciones. En primer lugar estudiaremos dos casos en los que no interviene la fracción líquida; en la primera todo el dominio será sólido y se mantendrá sólido durante todo el periodo de simulación y en la segunda todo el dominio será líquido. A continuación estudiaremos el caso en que sólo tenemos un subdominio que se corresponde al dominio físico total. Este caso, además, nos servirá para ver que variaciones provoca el hecho de fijar a cero la velocidad de los volúmenes de control que son sólidos. A continuación veremos como funciona el código cuando tenemos dos subdominios: uno que se corresponda al dominio físico completo y el otro una porción del mismo. En este caso sólo tendremos un subdominio que pasa información a otro (no existe cruce de información entre subdominios). Todos estos casos los resolveremos con los esquemas *UDS* y *SMART*.

### 4.3 Calentamiento de un sólido: conducción pura

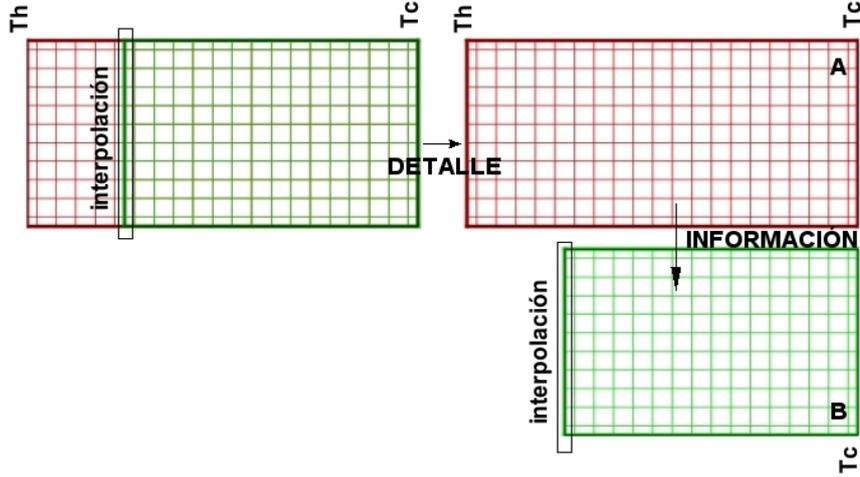
Nos encontramos ante un caso previo utilizado para la validación del código. Consiste en un dominio que inicialmente se encuentra a una temperatura inicial  $T_0$  por debajo de la  $T_m$  y en el instante de tiempo inicial la temperatura de la pared derecha aumenta bruscamente a  $T_i$  que también se encuentra por debajo de  $T_m$ , de manera que se produce un calentamiento en el sólido. De esta manera consigo que en el problema no intervenga la fracción líquida y me permite validar el código cuando se utiliza más de un subdominio en un caso de conducción pura.

El estudio lo realizaremos para una relación de caja de 0.5 (0.0889/0.0445 m) tomando como  $T_0=T_c=20^\circ C$  y  $T_h=28^\circ C$ , ambas, tal como se ve en la Tabla 6.1, inferiores a la temperatura de cambio de fase. La división en subdominios la realizaremos tal como se observa en la Figura 4.8, de manera que solo el subdominio B recibe información del subdominio A (sólo se produce el intercambio de información en una dirección).

Lo que trataremos de comprobar es que el valor de las variables en el subdominio B calculados mediante la información transferida desde el subdominio A por el contorno de interpolación es igual a los que se han calculado en esos mismos nodos de discretización en el subdominio A, es decir:

$$\Delta\phi = |\phi_i^A - \phi_i^B|; \quad (4.38)$$

Este incremento lo calcularemos en todos los nodos de discretización espacial y miraremos que el máximo de todos estos se encuentre por debajo de un cierto límite



**Figura 4.8:** Representación de la descomposición de subdominios del caso: a la izquierda la definición del caso en la que aparecen los dos subdominios solapados; a la derecha una representación gráfica para permitirnos exponer con mayor claridad lo que se está definiendo

( $10^{-7}$ ). Este procedimiento lo repetiremos para todas las variables que intervengan en el problema en cuestión. En el caso que nos ocupa, en que todo el dominio es sólido y se mantiene sólido durante todo el proceso, la única variable que intervendrá será la temperatura.

En la Tabla 4.2 aparecen los diferentes casos que se han estudiado; para cada uno de estos casos se muestra el Nusselt en la pared caliente promedio temporal, la temperatura media en el dominio promedio temporal, el número de iteraciones totales y el tiempo de cpu requerido para la simulación de 19 minutos de proceso. Para el Nusselt y la temperatura media se muestra el error calculado como:

$$e = \frac{|\phi - \phi_{ref}|}{\phi_{ref}} \quad (4.39)$$

tomando como el valor de la solución de referencia la correspondiente a la solución obtenida con la malla más fina, temporal y espacialmente hablando, que hemos obtenido y, en cuanto al valor de  $p$ , este lo calcularemos como:

$$2^p = \frac{e_1}{e_2} \rightarrow p = \log_2 \left( \frac{e_1}{e_2} \right) \quad (4.40)$$

ncv	ndt	Nu	e	p	$T_{ave}$	e	p	ite	cpu
10x5	1200	0.0519513	$3.52 \cdot 10^{-4}$	-	23.82878	$1.39 \cdot 10^{-4}$	-	3137	0.22
20x10	2400	0.0519652	$8.42 \cdot 10^{-5}$	2.06	23.83130	$3.30 \cdot 10^{-5}$	2.07	5994	1.33
40x20	4800	0.0519688	$1.50 \cdot 10^{-5}$	2.49	23.83193	$6.60 \cdot 10^{-6}$	2.32	11477	9.73
80x40	9600	0.0519695	-	-	23.83209	-	-	21961	163.28

**Tabla 4.2:** Resultados obtenidos en los diferentes casos estudiados en el caso del calentamiento de un sólido

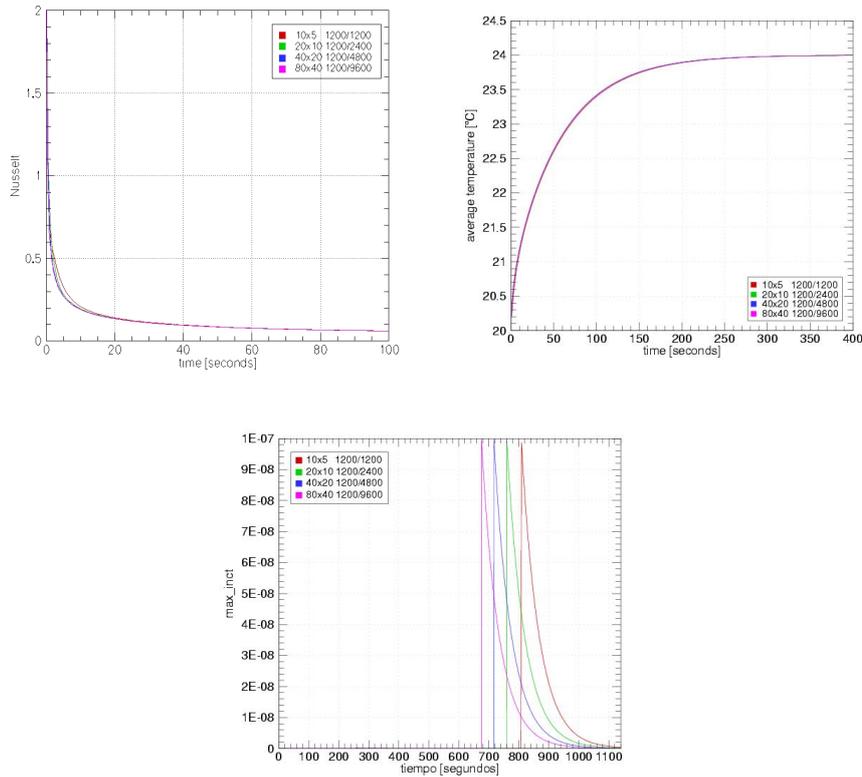
La evolución de las diferentes variables así como la del incremento máximo para los diferentes casos que aparecen en la Tabla 4.2, se muestra gráficamente en la Figura 4.9.

En esta figura se observa que la solución ya se encuentra en su rango asintótico. Por otra parte, la diferencia entre la solución obtenida con un subdominio y la obtenida con dos subdominios comentar que siempre se encuentra por debajo de lo que hemos concretado como aceptable, es decir  $10^{-7}$ . Por lo tanto, podemos decir que la transferencia de información se lleva a cabo de forma correcta.

En cuanto a que la solución se encuentra en su rango asintótico, a modo puramente ilustrativo, mostramos unas tablas obtenidas con unas herramientas de post\_proceso para la verificación de un algoritmo computacional. Se basa en la **extrapolación de Richardson** y el **Índice de convergencia** (*GCI: Grid Convergence Index*). La extrapolación de Richardson puede tomarse como un límite superior de la solución interpolada y como una estimación del error [4].

En este caso, se puede decir que hemos realizado una verificación parcial de un caso en que interviene un material de cambio de fase pero sin producirse el fenómeno en sí mismo. Los valores en esta tabla se encuentran entre lo que cabía esperar. El valor de  $p$  da el valor esperado en cada una de las diferentes situaciones teniendo en cuenta que nos encontramos en un caso de conducción transitoria; es decir, si mantenemos constante la malla temporal y doblamos la espacial siendo esta malla centrada el valor de  $p$  es 2 (Tabla 4.3a), si mantenemos la malla constante y doblamos el número de pasos temporales su valor es 1 (Tabla 4.3b) y si doblamos la temporal y doblamos la espacial nos da de entre 1 y 2 (Tabla 4.3c).

Finalmente, comentar que como se observa tanto en tablas como en figuras las mayores diferencias aparecen en los estados iniciales; esto es debido a que en un cierto instante de tiempo el dominio alcanza un estado de equilibrio.



**Figura 4.9:** Evolución del número de Nusselt en la pared caliente, la temperatura media en el dominio y el incremento máximo en el cálculo de la temperatura de los dos subdominio en el caso de que el recinto se mantiene sólido durante los 19 minutos de análisis

#### 4.4 Enfriamiento de un líquido: convección sin cambio de fase

Volvemos a encontrarnos ante un caso previo utilizado para la validación del código. En este caso el dominio, que inicialmente se encuentra a una temperatura inicial  $T_0$  por encima de la  $T_m$ , en el instante de tiempo inicial la temperatura de la pared derecha desciende bruscamente a  $T_i$ , que también se encuentra por encima de  $T_m$ , de manera que se produce un enfriamiento en el líquido. De esta manera consigo

grid $n_3/n_2/n_1$	time= 100 seconds			time= 600 seconds		
	$p$	$GCI^*$ [%]	$e_D^*$ [%]	$p$	$GCI^*$ [%]	$e_D^*$ [%]
m1 m2 m3	2.0	$7.9 \cdot 10^{-2}$	$5.0 \cdot 10^{-2}$	2.1	$7.7 \cdot 10^{-5}$	$4.8 \cdot 10^{-5}$
m2 m3 m4	2.0	$2.0 \cdot 10^{-2}$	–	2.0	$2.0 \cdot 10^{-5}$	–

(a)

grid $n_3/n_2/n_1$	time= 100 seconds			time= 600 seconds		
	$p$	$GCI^*$ [%]	$e_D^*$ [%]	$p$	$GCI^*$ [%]	$e_D^*$ [%]
m1 m2 m3	1.0	$1.1 \cdot 10^0$	$4.3 \cdot 10^{-1}$	1.1	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$5.0 \cdot 10^{-4}$
m2 m3 m4	1.0	$5.4 \cdot 10^{-1}$	–	1.1	$5.7 \cdot 10^{-4}$	–

(b)

grid $n_3/n_2/n_1$	time= 100 seconds			time= 600 seconds		
	$p$	$GCI^*$ [%]	$e_D^*$ [%]	$p$	$GCI^*$ [%]	$e_D^*$ [%]
m1 m2 m3	1.6	$2.6 \cdot 10^{-1}$	$1.6 \cdot 10^{-1}$	1.6	$2.7 \cdot 10^{-4}$	$1.7 \cdot 10^{-4}$
m2 m3 m4	1.4	$1.2 \cdot 10^{-1}$	–	1.4	$1.3 \cdot 10^{-4}$	–

(c)

**Tabla 4.3:** Estudio de convergencia de un caso en que el material de cambio de fase se encuentra en estado sólido de manera permanente (a) manteniendo  $ndt$  constante doblamos  $ncv$  (b) manteniendo  $ncv$  constante doblamos  $ndt$  (c) doblamos  $ncv$  y  $ndt$

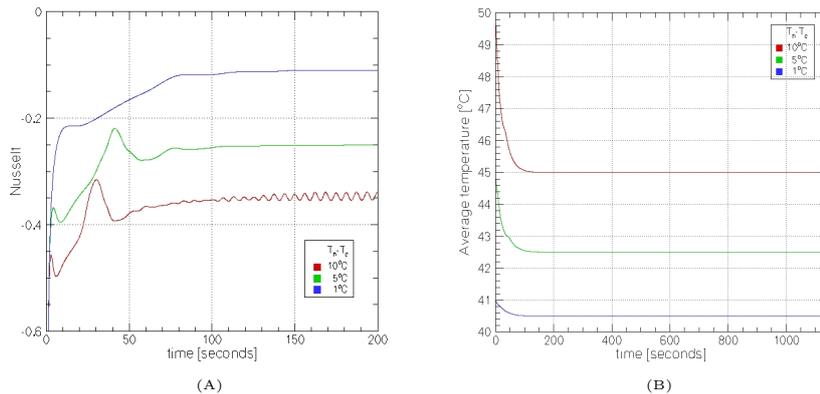
que en el problema no intervenga la fracción líquida y me permite validar el código cuando se utiliza más de un subdominio en un caso con convección.

El estudio lo realizaremos para una relación de caja de 0.5 (0.0889/0.0445 m) tomando como  $T_0=T_c$  y  $T_h$  superiores a la temperatura de cambio de fase. La división en subdominios la realizaremos tal como se observa en la Figura 4.8, de manera que solo el subdominio B recibe información del subdominio A (sólo se produce el intercambio de información en una dirección).

Lo que trataremos de comprobar es que el valor de las variables en el subdominio B calculados mediante la información transferida desde el subdominio A por el contorno de interpolación es igual a los que se han calculado en esos

mismos nodos de discretización en el subdominio A (ecuación 4.38). Este incremento lo calcularemos en todos los nodos de discretización espacial y miraremos que el máximo de todos estos se encuentre por debajo del límite establecido ( $10^{-7}$ ). Este procedimiento lo repetiremos para todas las variables que intervengan en el problema en cuestión, que en este caso son las velocidades longitudinal y transversal, la presión y la temperatura.

En el caso que nos ocupa, en función del número de Rayleigh, podemos encontrarnos con que no se alcanza el régimen permanente sino que se llega a una situación oscilatoria o flujo periódico. Esto aparece representado en la Figura 4.10. En esta figura observamos que cuando el incremento de temperatura entre la pared caliente y la fría es de  $10^{\circ}\text{C}$ , se producen unas oscilaciones en el número de Nusselt que van desapareciendo al disminuir este incremento, o lo que es lo mismo, al reducir el número de Rayleigh.



**Figura 4.10:** Evolución del número de Nusselt en la pared caliente (A), la temperatura media en el dominio (B) en el caso de que el recinto se mantiene líquido durante los 19 minutos de análisis: resultados cuando la diferencia de temperaturas entre las paredes caliente y fría son de 10, 5 y  $1^{\circ}\text{C}$ , respectivamente

En la Figura 4.10A observamos la conveniencia de optar por el caso en que el incremento de temperatura es de  $1^{\circ}\text{C}$ , pues en este caso no se producen oscilaciones apreciables para el ojo humano. Una vez escogidas todas las condiciones del problema, realizaremos el estudio de verificación del código. Los casos que hemos estudiado aparecen representados en la Tabla 4.4 junto con el tiempo computacional

en minutos que se ha necesitado para simular los 19 minutos de fenómeno, tanto para el esquema UDS como para el SMART. En la Figura 4.11 aparece esto mismo representado gráficamente.

Para cada uno de estos casos, en la Tabla 4.5 observamos el número de Nusselt en la pared caliente, la temperatura media en el dominio y el tiempo que se tarda en alcanzar el régimen permanente. De modo gráfico, en la Figura 4.12 observamos como si mantenemos constante el número de volúmenes control y doblamos el número de incrementos de tiempo, la solución va aproximándose a su valor asintótico y una vez alcanzado este valor, el doblar el número de incrementos de tiempo lo único que me aporta es un incremento en el tiempo de cpu, que como se ve en la Figura 4.11 es más importante conforme vamos aumentando el número de volúmenes de control. En cambio, en la Figura 4.13 observamos que al mantener el número de pasos temporales y doblar los espaciales la solución, si bien va acercándose a su valor asintótico, éste no se alcanza, por lo que sería necesario seguir doblando el mallado espacial; no obstante, los elevados valores en el tiempo de cpu, para el caso en que la malla es de 80x40 volúmenes de control (ver Tabla 4.4) hace impensable seguir por este camino.

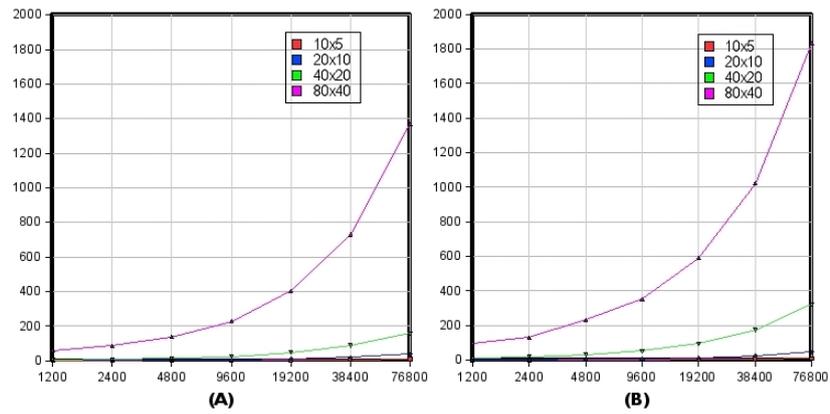
ncv/ndt	1200	2400	4800	9600	19200	38400	76800
10x5	0.380	0.611	0.987	1.628	2.844	5.298	10.003
20x10	1.046	1.718	3.091	5.936	11.141	20.954	38.843
40x20	5.115	7.998	13.193	24.195	46.885	87.932	158.362
80x40	58.659	86.617	137.916	227.131	404.815	729.262	1368.584

(A)

ncv/ndt	1200	2400	4800	9600	19200	38400	76800
10x5	0.615	0.987	1.589	2.561	4.105	6.995	12.321
20x10	1.602	2.546	4.330	8.090	14.439	25.920	46.774
40x20	11.723	19.650	30.689	52.147	95.419	174.349	324.140
80x40	98.099	132.118	233.463	353.750	591.059	1021.347	1830.700

(B)

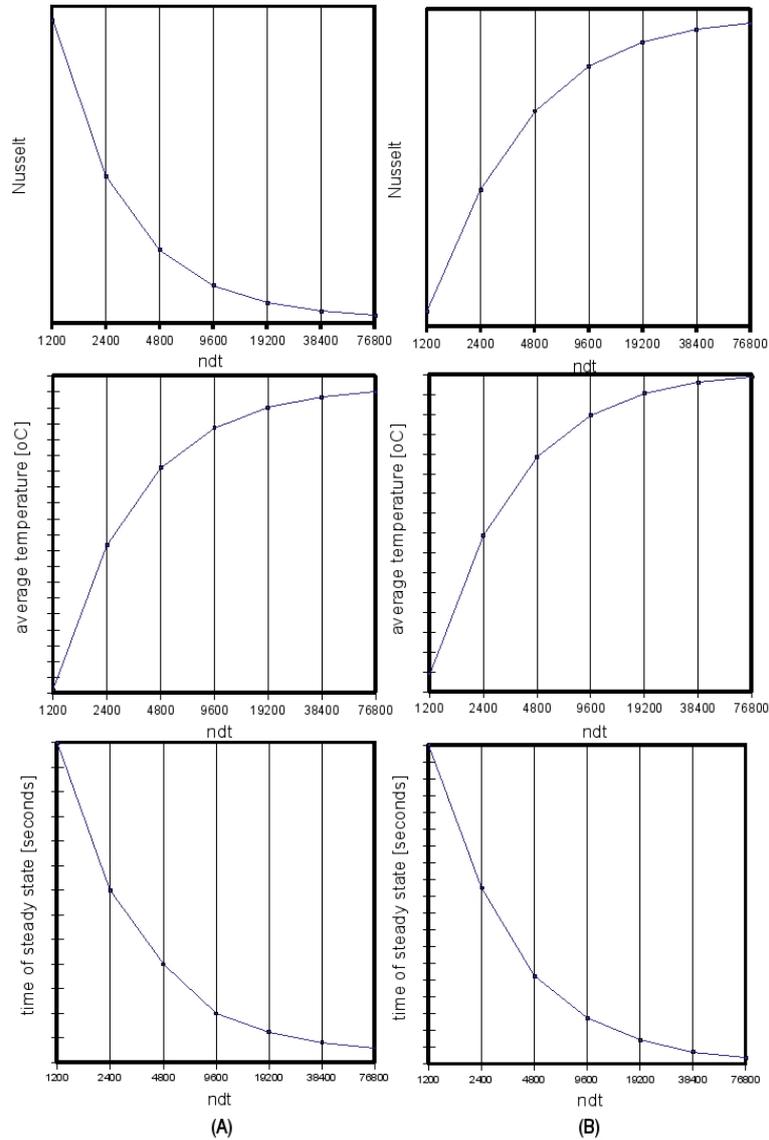
**Tabla 4.4:** Tiempo computacional para los diferentes casos analizados(A) UDS (B) SMART



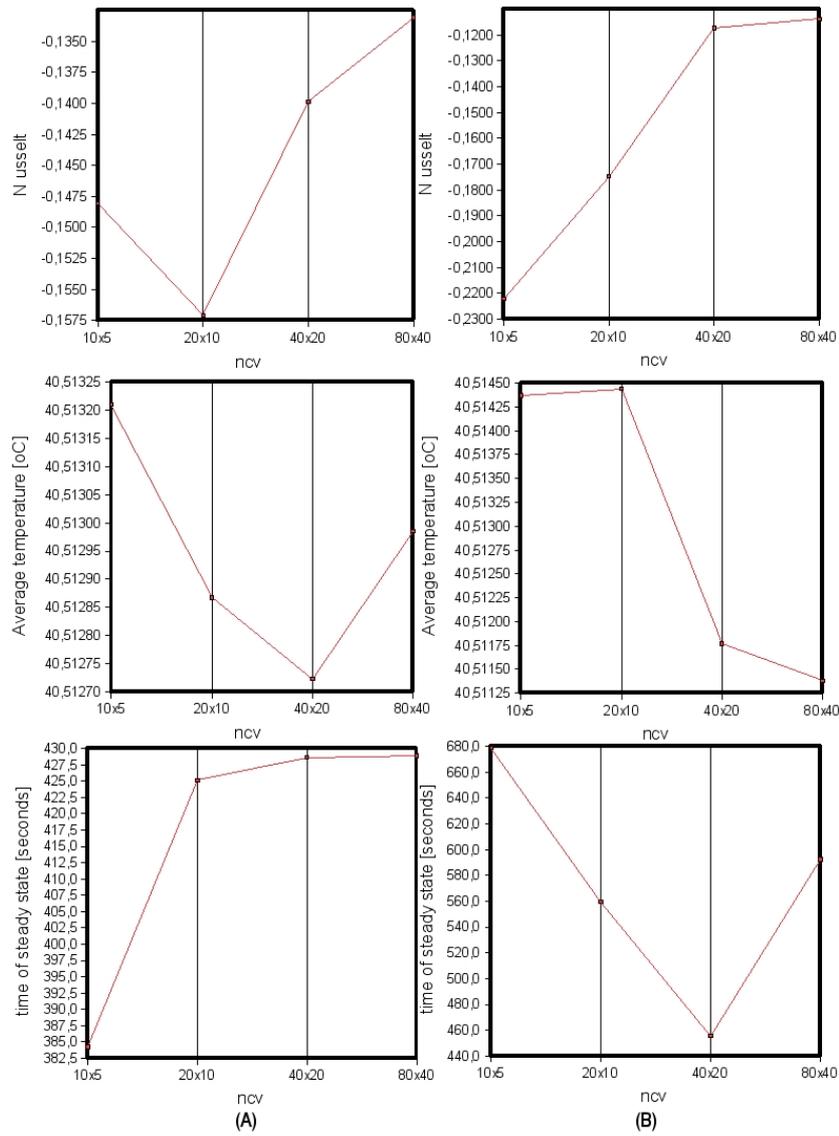
**Figura 4.11:** Evolución del tiempo computacional para los diferentes casos analizados (A) UDS (B) SMART

ncv/ndt	1200	2400	4800	9600	19200	38400	76800
<i>Nusselt pared caliente</i>							
<b>UDS</b>							
<b>10x5</b>	-0.1480798	-0.1480814	-0.1480820	-0.1480823	-0.1480825	-0.1480825	-0.1480826
<b>20x10</b>	-0.1570944	-0.1570994	-0.1571017	-0.1571028	-0.1571033	-0.1571036	-0.1571037
<b>40x20</b>	-0.1398497	-0.1398506	-0.1398507	-0.1398506	-0.1398506	-0.1398506	-0.1398506
<b>80x40</b>	-0.1330801	-0.1330693	-0.1330630	-0.1330596	-0.1330579	-0.1330570	-0.1330565
<b>SMART</b>							
<b>10x5</b>	-0.2220366	-0.2220460	-0.2220520	-0.2220552	-0.2220570	-0.2220580	-0.2220585
<b>20x10</b>	-0.1747608	-0.1747261	-0.1747037	-0.1746910	-0.1746842	-0.1746807	-0.1746789
<b>40x20</b>	-0.1173364	-0.1172590	-0.1172135	-0.1171886	-0.1171755	-0.1171688	-0.1171654
<b>80x40</b>	-0.1139772	-0.1138776	-0.1138153	-0.1137817	-0.1137641	-0.1137551	-0.1137505
<i>Temperatura media en el dominio</i>							
<b>UDS</b>							
<b>10x5</b>	40.5131812	40.5131960	40.5132038	40.5132078	40.5132098	40.5132109	40.5132114
<b>20x10</b>	40.5128230	40.5128459	40.5128581	40.5128644	40.5128676	40.5128692	40.5128700
<b>40x20</b>	40.5126830	40.5127034	40.5127145	40.5127202	40.5127232	40.5127246	40.5127254
<b>80x40</b>	40.5129620	40.5129740	40.5129803	40.5129835	40.5129852	40.5129860	40.5129864
<b>SMART</b>							
<b>10x5</b>	40.5143042	40.5143397	40.5143569	40.5143650	40.5143689	40.5143708	40.5143717
<b>20x10</b>	40.5142990	40.5143689	40.5144085	40.5144296	40.5144405	40.5144461	40.5144489
<b>40x20</b>	40.5118303	40.5118039	40.5117847	40.5117733	40.5117671	40.5117639	40.5117623
<b>80x40</b>	40.5116532	40.5115320	40.5114501	40.5114038	40.5113789	40.5113660	40.5113594
<i>tiempo, en segundos, que se tarda en alcanzar el régimen permanente</i>							
<b>UDS</b>							
<b>10x5</b>	390.000	387.000	385.500	384.625	384.250	384.094	384.000
<b>20x10</b>	431.000	428.000	426.500	425.500	425.125	424.906	424.797
<b>40x20</b>	435.000	431.500	430.000	429.000	428.625	428.313	428.406
<b>80x40</b>	436.000	432.500	430.250	429.375	428.875	428.656	428.578
<b>SMART</b>							
<b>10x5</b>	700.000	688.500	682.500	679.750	678.563	678.000	677.719
<b>20x10</b>	577.000	568.500	563.250	560.750	559.438	558.719	558.375
<b>40x20</b>	484.000	466.000	459.000	456.625	455.500	455.031	454.766
<b>80x40</b>	601.000	602.500	597.250	593.750	592.250	591.625	591.250

Tabla 4.5: Resultados obtenidos para cada uno de los casos en estudio

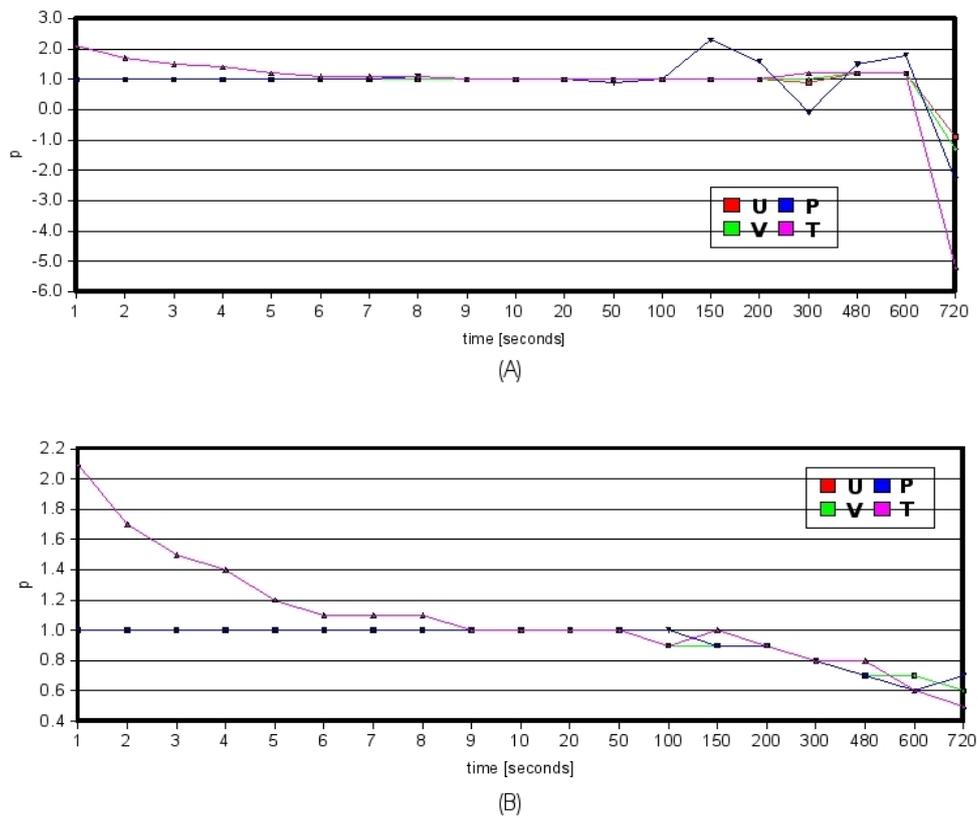


**Figura 4.12:** Evolución del Número de Nusselt, la temperatura media en la pared caliente y el tiempo que tarda en alcanzar el régimen permanente al ir doblando el mallado temporal para el caso en que el número de volúmenes de control es de  $20 \times 10$  (A) UDS (B) SMART



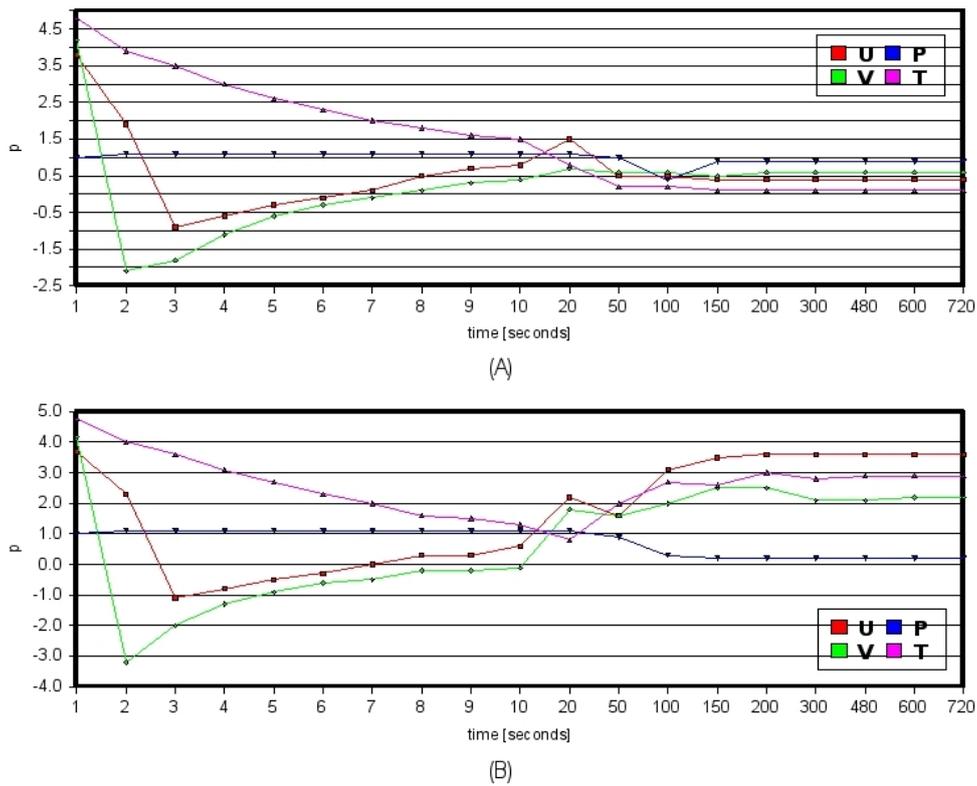
**Figura 4.13:** Evolución del Número de Nusselt, la temperatura media en la pared caliente y el tiempo que tarda en alcanzar el régimen permanente al ir doblando el mallado temporal para el caso en que el incremento de tiempo es de 1200/19200 (A) UDS (B) SMART

A continuación realizamos es estudio de convergencia con las herramientas de que disponemos en el *CTTC*. En la Figura 4.14 observamos el valor del parámetro  $p$  en diferentes instantes de tiempo para las diferentes variables que intervienen manteniendo constante el mallado espacial (hemos optado por la malla de  $80 \times 40$ ) y doblando el temporal, quedándonos en este caso con las tres mejores soluciones, es decir, 19200, 38400 y 76800.



**Figura 4.14:** Evolución del valor de  $p$  en el caso en que la malla de discretización espacial es la de  $80 \times 40$  y los temporales son los de 19200, 38400 y 76800 (A) UDS (B) SMART

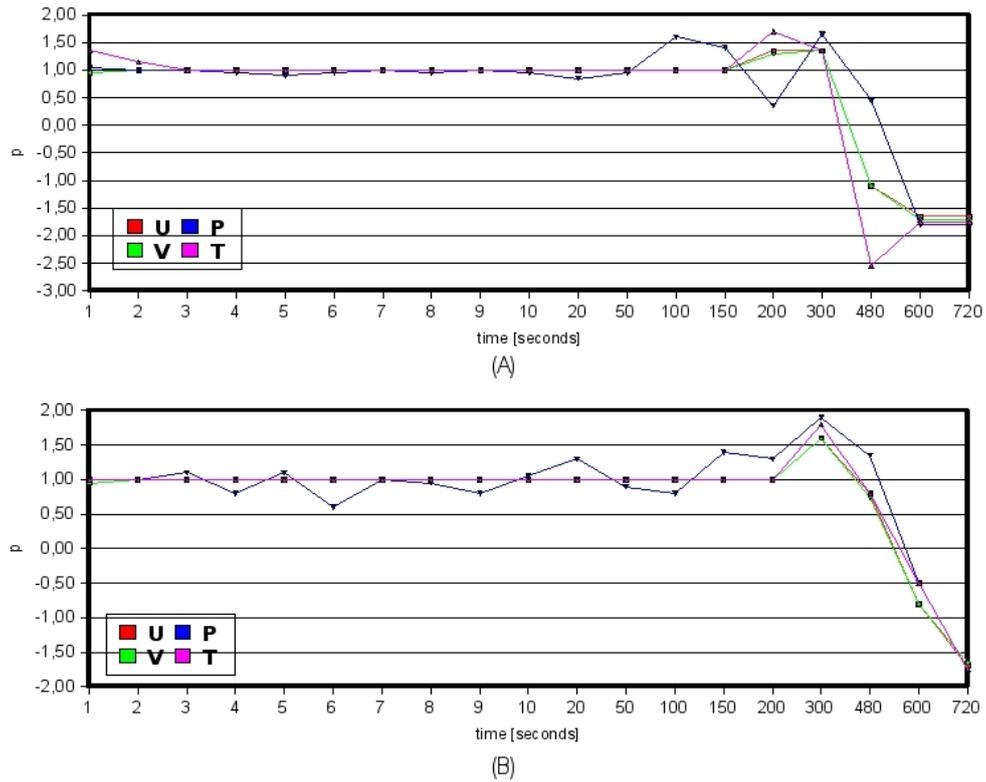
En la Figura 4.15 observamos la evolución de este parámetro  $p$  cuando mantenemos constante el mallado temporal (paso temporal de 1200/19200) y doblamos el mallado espacial. En esta figura aparece el valor de  $p$  cuando utilizamos las mallas más finas (20x10, 40x20 y 80x40).



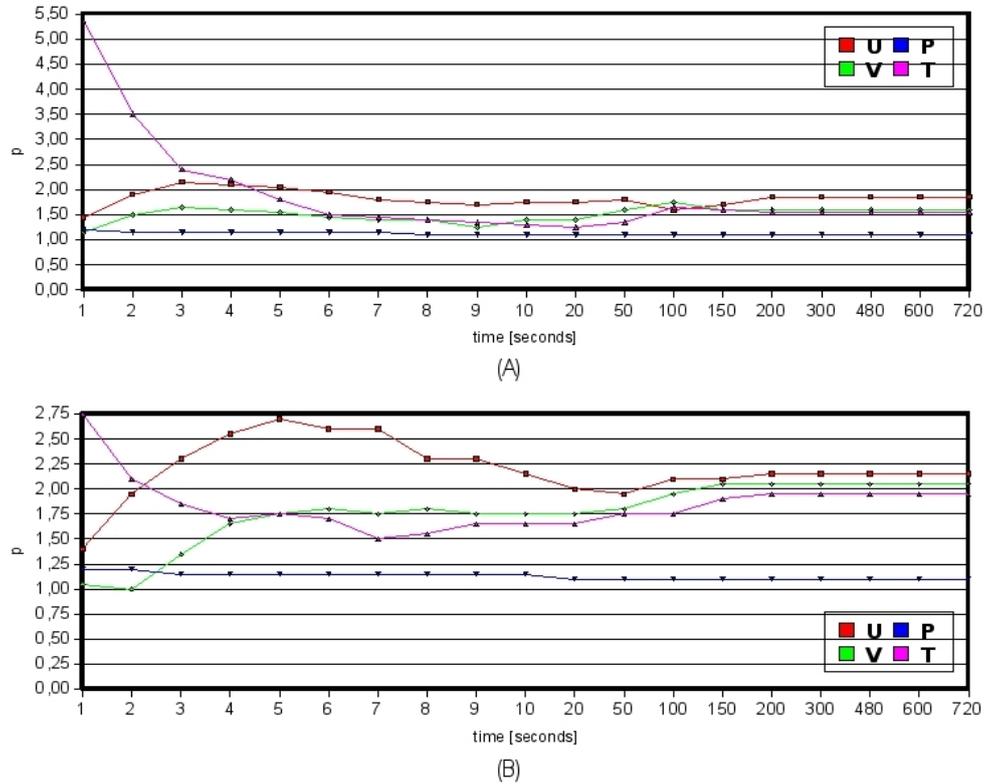
**Figura 4.15:** Evolución del valor de  $p$  en el caso en que la malla de discretización temporal es de 19200 y las espaciales son las de 20x10, 40x20 y 80x40 (A) UDS (B) SMART

Observamos unas ciertas anomalías en el valor de  $p$ . Su valor tendría que ser de 1 para la discretización temporal por tratarse ésta de una aproximación de primer orden, de 2 para la discretización espacial en el caso de que el esquema numérico sea el *upwind* y entre 1 y 3 si el esquema es el *smart*. Aparecen incluso valores negativos. Si se realiza este estudio para un valor de Prandtl de 0.71 y un valor de Rayleigh de 10000, valores con los que sabemos se alcanza régimen permanente, observamos que

los valores de  $p$  en la mayor parte de los casos, son los correctos (ver Figuras 4.16 y 4.17).



**Figura 4.16:** Evolución del valor de  $p$  en el caso en que la malla de discretización espacial es la de  $80 \times 40$  y los temporales son los de 19200, 38400 y 76800 cuando el número de Rayleigh es de 10000 y el número de Prandtl es de 0.71 (A) UDS (B) SMART



**Figura 4.17:** Evolución del valor de  $p$  en el caso en que la malla de discretización temporal es de 19200 y las espaciales son las de  $20 \times 10$ ,  $40 \times 20$  y  $80 \times 40$  cuando el número de Rayleigh es de 10000 y el número de Prandtl es de 0.71 (A) UDS (B) SMART

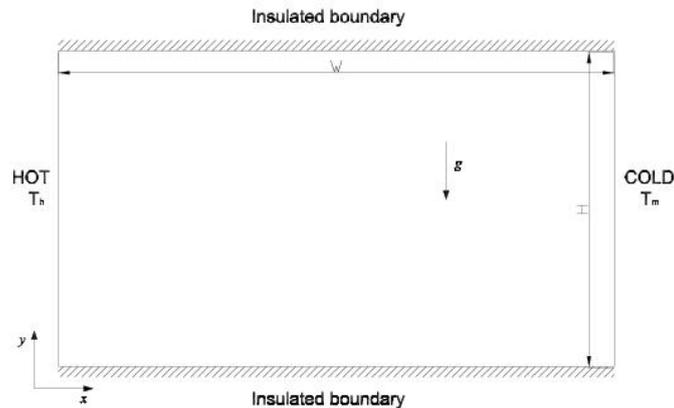
Comentar, que en el caso en que estamos estudiando la discretización temporal (Figura 4.16), en los últimos instantes de tiempo los valores de  $p$  son incorrectos para todas las variables; en este caso, lo que pasa es que los diferentes mapas comparados son muy parecidos (diferencias del orden de  $10^{-15}$ ). En este caso el valor de  $p$  no tiene mucho sentido pues no se está resolviendo suficientemente bien el transitorio como para realizar este estudio.

Para concluir, comentar que en el caso del Galio, el número de Prandtl es muy bajo. Este valor de Prandtl tan bajo puede producir que el límite de Rayleigh a partir del cual el comportamiento del flujo es turbulento no sea el típico de  $10^9$ . Esto nos ha

hecho decidir la conveniencia de realizar un estudio más detallado para este número de Prandtl.

## 4.5 Enfriamiento de un líquido: comportamiento del flujo para bajos números de Prandtl

El caso que nos ocupa tiene la singularidad de encontrarse en un rango de Prandtl muy bajo (0.021579). Esto provoca que se alcance el régimen turbulento para números de Rayleigh relativamente bajos. Esto nos ha hecho pensar sobre la conveniencia de realizar un estudio más detallado para determinar para que valor de Rayleigh se produce la transición de régimen permanente a flujo oscilatorio y de éste a un régimen caótico. Además, este estudio lo hemos realizado para diferentes valores de la relación de caja. Para hacer que este caso se asemeje más al caso en que en el dominio se encuentran ambas fases, y solo se estuviera analizando la fase líquida, la pared fría vamos a suponer que se encuentra a la temperatura de fusión del material (ver Figura 4.18), es decir, a la temperatura en la que se encontraría la interfase sólido-líquido. Las diferentes relaciones de aspecto, nos servirán para comprobar si cuando se haya fundido esa parte del dominio, en la zona líquida el comportamiento del flujo será laminar, laminar oscilatorio o turbulento [5, 6, 7, 8].



**Figura 4.18:** Descripción del problema de calentamiento del Galio en estado líquido: Estudio del número de Rayleigh

Los casos que se han estudiado para cada valor del número de Rayleigh son los

que aparecen en la Tabla 4.6. En esta tabla aparecen los diferentes anchos del dominio que se han analizado, con sus respectivas relaciones de caja. Para cada uno de los casos se han estudiado cuatro mallas de discretización espacial. El criterio que se ha seguido ha sido el de que en cada uno de los casos el tamaño de los volúmenes de control sea el mismo, de ahí que el número de volúmenes de control para las diferentes relaciones de aspecto sea diferente.

<b>W</b>	<b>A<sub>R</sub></b>	<b>m1</b>		<b>m2</b>		<b>m3</b>		<b>m4</b>	
[m]	-	vcx	vcy	vcx	vcy	vcx	vcy	vcx	vcy
0.022225	2.002250	5	10	10	20	20	40	40	80
0.04445	1.001125	10	10	20	20	40	40	80	80
0.066675	0.667	15	10	30	20	60	40	120	80
0.0889	0.5	20	10	40	20	80	40	160	80

**Tabla 4.6:** Diferentes casos estudiados para cada uno de los números de Rayleigh en función de la relación de caja

Para cada uno de los casos mostrados en la Tabla 4.6 se han estudiado los casos que aparecen en la Tabla 4.7. En esta tabla, en función de  $T_h$  se ha calculado el número de Rayleigh, y el de Stefan.

<b>T<sub>h</sub></b>	<b>Ra</b>	<b>St</b>
29.80	507.328	0.000095
29.90	3043.967	0.000571
30.00	5580.605	0.001047
31.00	30946.993	0.005806
32.00	56313.381	0.010565
33.00	81679.769	0.015325
34.00	107046.158	0.020084
35.00	132412.546	0.024843
36.00	157778.934	0.029602
37.00	183145.322	0.034362
38.00	208511.710	0.039121

**Tabla 4.7:** Diferentes números de Rayleigh para los que se ha realizado el estudio

Los resultados obtenidos para todos estos casos se muestran en las Tablas 4.8, 4.9, 4.10 y 4.11. En estas tablas se muestran el valor de Nusselt en la pared caliente cuando se alcanza el permanente (en aquellos casos que no se alcance el régimen laminar se tomará como tal el valor medio de la oscilación que se produce en esta variable), el

valor de Nusselt medio en la pared caliente durante los 19 minutos de análisis y el valor medio de temperatura en el dominio durante estos 19 minutos.

Cojamos, a modo de ejemplo una relación de aspecto intermedia, y veamos la evolución del número de Nusselt en la pared caliente con el tiempo cuando se utiliza la malla de 60x40. Esto es lo que aparece representado en la Figura 4.19A. En esta figura observamos que, a partir de un cierto valor de temperatura de la pared caliente, llega un momento que en vez de alcanzarse el régimen permanente, esta variable empieza a oscilar alrededor de un cierto valor (alcanza un régimen periódico). La amplitud de estas oscilaciones va aumentando a medida que aumentamos el valor de la temperatura en la pared caliente. Este mismo fenómeno se puede observar en el resto de gráficos que aparecen en la Figura 4.19. Comentar que en el caso de las velocidades al aumentar la temperatura de la pared caliente, no solo aparece una oscilación en la variable al alcanzar el régimen permanente, sino que también aumenta la oscilación de la variable mientras dura el transitorio, esto ya era de esperar pues al aumentar la temperatura de esta pared el gradiente de temperatura entre la pared fría y la caliente aumenta con lo que también se incrementará el movimiento en el fluido.

A continuación vemos como afecta la relación de aspecto; para ello realizaremos la representación gráfica de dos casos: uno que sabemos es laminar ( $T_h=30^\circ\text{C}$  y m4) y otro que sabemos es oscilatorio ( $T_h=35^\circ\text{C}$  y m3) para cada una de las relaciones de caja. El caso laminar aparece representado en la Figura 4.20. Observamos que se producen diferencias al aumentar la relación de aspecto, por ejemplo en la velocidad en que se alcanza la temperatura de permanente, que aumenta a medida que aumenta  $A_R$ . En cuanto a la velocidades, es difícil establecer una pauta de comportamiento, sólo decir que parece que para la relación de aspecto más grande, las oscilaciones que se producen en el transitorio son mucho más pequeñas que para relaciones de aspecto menores. El caso oscilatorio se muestra en la Figura 4.21. En este caso es más difícil sacar conclusiones; solo decir que parece ser que para relaciones de aspecto próximas a la unidad la amplitud de las oscilaciones es menor.

Cabe preguntarnos que diferencias existe a nivel de alcanzar una solución convergida el que la solución alcance un régimen laminar o por el contrario alcance un régimen oscilatorio. Esto es lo que tratamos de mostrar en la Figura 4.22. En esta figura aparece representado el valor de Nusselt medio y el de la temperatura media en el dominio a medida que vamos aumentando el tamaño de malla en el caso en que la temperatura de la pared caliente es de  $30^\circ\text{C}$  (laminar) y cuando esta es de  $33^\circ\text{C}$  (oscilatorio) para el caso en que la relación de aspecto es de 2. En esta figura observamos que cuando la temperatura es de  $30^\circ\text{C}$  tanto el número de Nusselt como la temperatura media parecen acercarse a la solución asintótica de manera progresiva y rápida, mientras que en el caso en que la temperatura es de  $33^\circ\text{C}$  el modo de acercamiento a la solución asintótica parece ser oscilatorio.

$T_h$	$Nu_{perm}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	0.045000	0.045000	0.045000	0.045000
29.90	0.046736	0.045764	0.045625	0.045625
30.00	0.050702	0.047748	0.047293	0.047293
31.00	0.088426	0.071160	0.061232	0.060875
32.00	0.108505	0.090363	0.070104	0.068095
33.00	0.121046	0.104359	0.077158	0.072962
34.00	0.129863	0.115629	0.083388	0.076790
35.00	0.136492	0.124818	0.088537	0.080005
36.00	0.141653	0.132751	0.093536	0.082841
37.00	0.145875	0.139623	0.098027	0.085654
38.00	0.149413	0.145526	0.102711	0.088013
$T_h$	$Nu_{ave}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	0.04545150	0.04545500	0.04545550	0.04545525
29.90	0.04709444	0.04618542	0.04605556	0.04605278
30.00	0.05090186	0.04811901	0.04768409	0.04768285
31.00	0.08796852	0.07126318	0.06152399	0.06117527
32.00	0.10798440	0.09030442	0.07035198	0.06843810
33.00	0.12055091	0.10422892	0.07725663	0.07344214
34.00	0.12940605	0.11545294	0.08320409	0.07743146
35.00	0.13607566	0.12461747	0.08857402	0.08086252
36.00	0.14127724	0.13253376	0.09358378	0.08399036
37.00	0.14553507	0.13939330	0.09837030	0.08699314
38.00	0.14910473	0.14529631	0.10290493	0.09008772
$T_h$	$T_{ave}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	29.7899717	29.7899732	29.7899736	29.7899737
29.90	29.8398301	29.8398395	29.8398419	29.8398424
30.00	29.8896885	29.8897052	29.8897095	29.8897106
31.00	30.3882548	30.3883215	30.3883186	30.3883274
32.00	30.8867986	30.8869032	30.8868624	30.8868933
33.00	31.3853466	31.3854832	31.3853796	31.3854590
34.00	31.8838762	31.8840708	31.8838715	31.8840415
35.00	32.3824096	32.3826661	32.3823263	32.3826686
36.00	32.8809534	32.8812705	32.8806913	32.8813757
37.00	33.3795089	33.3798862	33.3789510	33.3789974
38.00	33.8780815	33.8785076	33.8770977	33.8765495

**Tabla 4.8:** Resultados obtenidos para el caso en que la relación de aspecto es 2.002250

$T_h$	$Nu_{perm}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	0.04500000	0.04500000	0.04500000	0.04500000
29.90	0.04673611	0.04576389	0.04562500	0.04562500
30.00	0.05070248	0.04774793	0.04729339	0.04729339
31.00	0.08842583	0.07115963	0.06123220	0.06087544
32.00	0.10850540	0.09036300	0.07010389	0.06809512
33.00	0.12104635	0.10435911	0.07715752	0.07296208
34.00	0.12986276	0.11562942	0.08338761	0.07678960
35.00	0.13649176	0.12481790	0.08853731	0.08000470
36.00	0.14165285	0.13275057	0.09353579	0.08284137
37.00	0.14587542	0.13962285	0.09802718	0.08565389
38.00	0.14941338	0.14552637	0.10271073	0.08801290
$T_h$	$Nu_{ave}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	0.04682700	0.04682950	0.04682875	0.04682975
29.90	0.06646042	0.06444722	0.06441389	0.06440278
30.00	0.08148760	0.07666756	0.07637149	0.07641260
31.00	0.14957775	0.12424899	0.11714915	0.11756688
32.00	0.18432089	0.14915433	0.13458502	0.13479212
33.00	0.20852554	0.16833399	0.14707449	0.14671875
34.00	0.22678361	0.18420544	0.15722906	0.15604911
35.00	0.24095100	0.19808379	0.16588059	0.16379228
36.00	0.25248377	0.21004267	0.17364498	0.17047086
37.00	0.26212427	0.22111214	0.18065917	0.17637162
38.00	0.27034357	0.23200602	0.18712781	0.18168985
$T_h$	$T_{ave}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	29.7898932	29.7898947	29.7898951	29.7898952
29.90	29.8393661	29.8393750	29.8393765	29.8393769
30.00	29.8888447	29.8888684	29.8888696	29.8888698
31.00	30.3839943	30.3842808	30.3843195	30.3842949
32.00	30.8795770	30.8800695	30.8803027	30.8802258
33.00	31.3753709	31.3759957	31.3765678	31.3764304
34.00	31.8713022	31.8719977	31.8730204	31.8728191
35.00	32.3673343	32.3680991	32.3696047	32.3693446
36.00	32.8634505	32.8642664	32.8662923	32.8659778
37.00	33.3596318	33.3604904	33.3630538	33.3627004
38.00	33.8558759	33.8568431	33.8598812	33.8594980

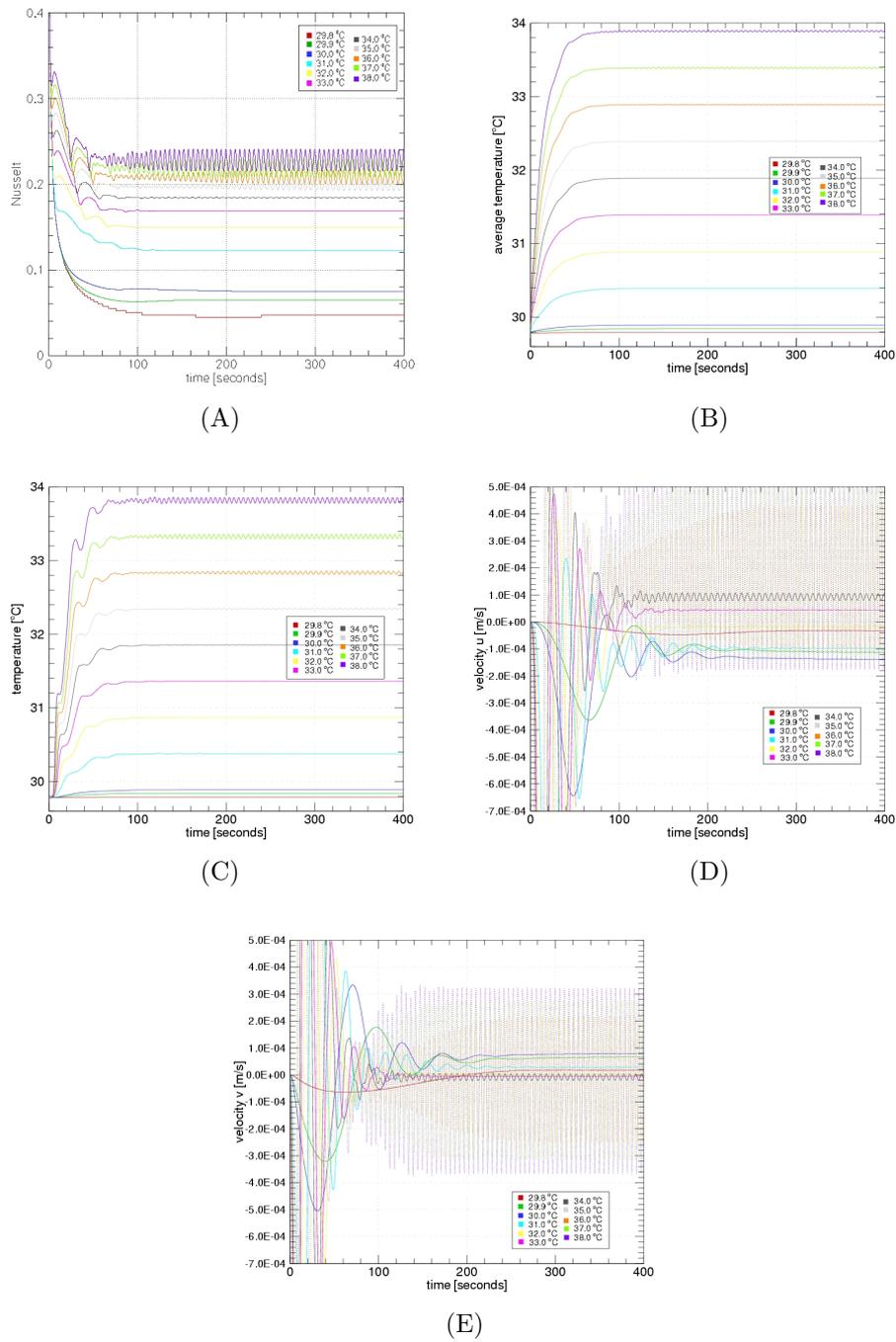
**Tabla 4.9:** Resultados obtenidos para el caso en que la relación de aspecto es 1.001125

$T_h$	$Nu_{perm}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	0.04750000	0.04750000	0.04750000	0.04750000
29.90	0.07027778	0.06430556	0.06444444	0.06451389
30.00	0.08743802	0.07446281	0.07450413	0.07464876
31.00	0.18006047	0.12975141	0.12217885	0.12337409
32.00	0.23233240	0.16569150	0.14969361	0.15156075
33.00	0.26973525	0.19314340	0.16902203	0.17102909
34.00	0.29831871	0.21586886	0.18423328	0.18597027
35.00	0.32149616	0.23531657	0.19701832	0.19819711
36.00	0.34046975	0.25385904	0.20842157	0.20880936
37.00	0.35629503	0.26789619	0.21123092	0.21862593
38.00	0.36983427	0.28260252	0.22806519	0.22690400
$T_h$	$Nu_{ave}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	0.05135000	0.05122500	0.05120000	0.05117500
29.90	0.07253194	0.06726250	0.06736319	0.06738889
30.00	0.08931157	0.07752562	0.07755062	0.07766405
31.00	0.18071003	0.13247284	0.12513251	0.12622735
32.00	0.23259901	0.16801204	0.15234259	0.15407840
33.00	0.26984647	0.19527196	0.17156310	0.17343179
34.00	0.29840447	0.21788083	0.18673088	0.18833601
35.00	0.32159169	0.23734803	0.19946856	0.20045360
36.00	0.34060766	0.25568623	0.21077199	0.21089028
37.00	0.35649436	0.27014908	0.22095044	0.22011767
38.00	0.37010027	0.28505971	0.23026332	0.22845886
$T_h$	$T_{ave}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	29.7897638	29.7897652	29.7897655	29.7897656
29.90	29.8386568	29.8386638	29.8386604	29.8386603
30.00	29.8876186	29.8876716	29.8876555	29.8876532
31.00	30.3796432	30.3796905	30.3788350	30.3795870
32.00	30.8714976	30.8726685	30.8729993	30.8728416
33.00	31.3647654	31.3658544	31.3669673	31.3666576
34.00	31.8583525	31.8591463	31.8613213	31.8608254
35.00	32.3521830	32.3527252	32.3559642	32.3552390
36.00	32.8461806	32.8464016	32.8508218	32.8498523
37.00	33.3403215	33.3402397	33.3458323	33.3446135
38.00	33.8345712	33.8343538	33.8409410	33.8394958

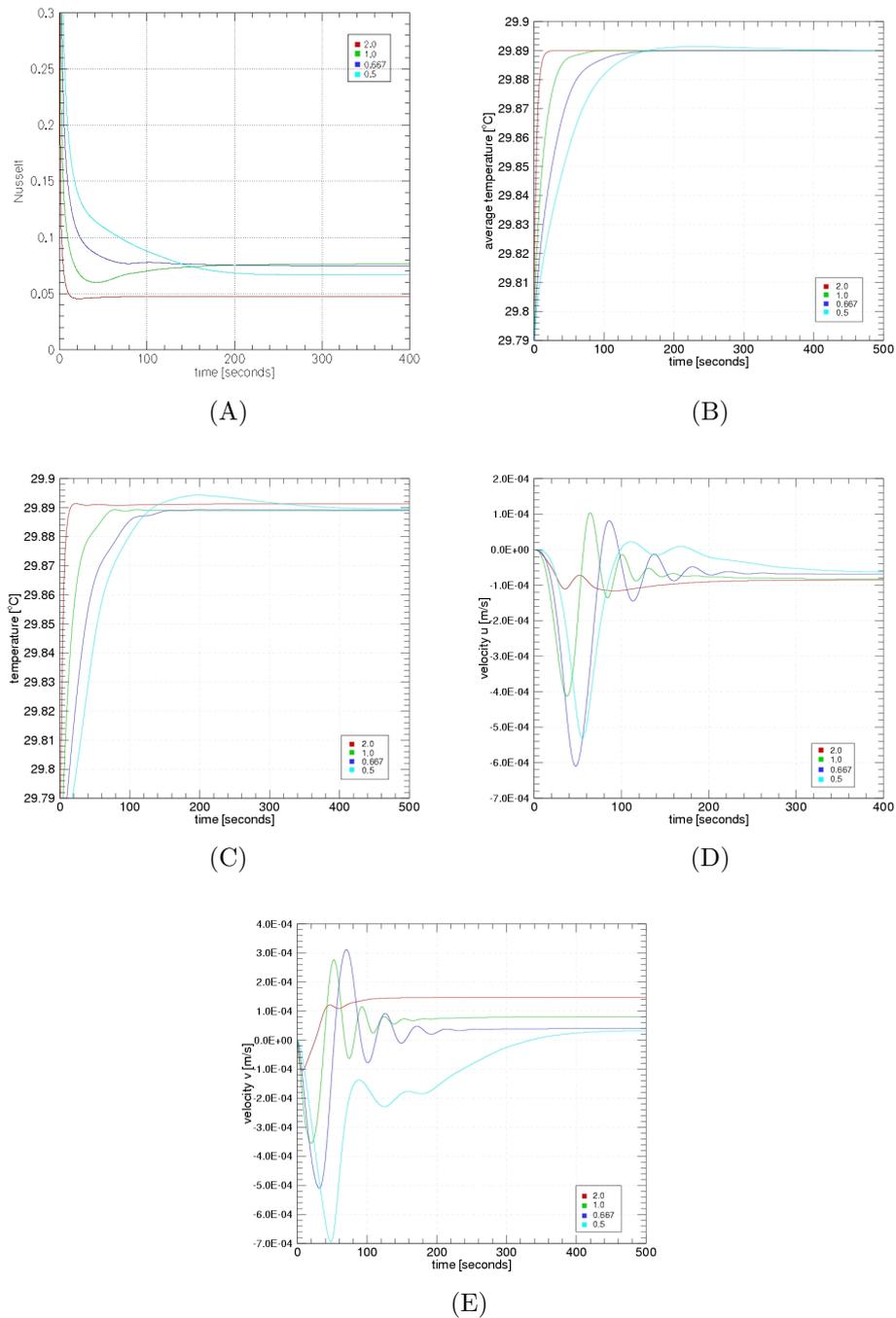
**Tabla 4.10:** Resultados obtenidos para el caso en que la relación de aspecto es 0.667417

$T_h$	$Nu_{perm}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	0.04750000	0.04750000	0.04750000	0.04750000
29.90	0.06527778	0.05951389	0.05944444	0.05951389
30.00	0.08053719	0.06704545	0.06698347	0.06704545
31.00	0.19044477	0.12258197	0.11823031	0.11857364
32.00	0.26197265	0.16837635	0.15998661	0.16080269
33.00	0.31142905	0.20329945	0.18988465	0.19055737
34.00	0.35053593	0.23145858	0.21276476	0.21316278
35.00	0.38223712	0.25575032	0.23184848	0.23138973
36.00	0.40874862	0.27733171	0.24813639	0.24658554
37.00	0.43152121	0.29785376	0.26242893	0.26012692
38.00	0.45108394	0.31754489	0.27527661	0.27172465
$T_h$	$Nu_{ave}$			
	m1	m2	m3	m4
29,80	0,05443750	0,05442500	0,05442250	0,05440500
29,90	0,07153542	0,06643681	0,06635556	0,06636597
30,00	0,08652479	0,07414483	0,07405537	0,07408595
31,00	0,19383447	0,12876096	0,12431889	0,12462011
32,00	0,26409790	0,17356379	0,16493336	0,16565568
33,00	0,31316156	0,20800220	0,19433243	0,19502768
34,00	0,35203525	0,23593315	0,21688786	0,21708363
35,00	0,38365389	0,26006254	0,23566814	0,23496595
36,00	0,41013819	0,28154220	0,25174093	0,24986378
37,00	0,43291152	0,30193799	0,26597240	0,26265010
38,00	0,45250910	0,32149865	0,27869366	0,27402586
$T_h$	$T_{ave}$			
	m1	m2	m3	m4
29.80	29.7895862	29.7895871	29.7895873	29.7895874
29.90	29.8378364	29.8379017	29.8378945	29.8378926
30.00	29.8862224	29.8866146	29.8865922	29.8865843
31.00	30.3730435	30.3758821	30.3764495	30.3763296
32.00	30.8629114	30.8655243	30.8671622	30.8669091
33.00	31.3539118	31.3554524	31.3586727	31.3581537
34.00	31.8454496	31.8454891	31.8507210	31.8499095
35.00	32.3373101	32.3358325	32.3431437	32.3420931
36.00	32.8294267	32.8264198	32.8358149	32.8344541
37.00	33.3217624	33.3173468	33.3286863	33.3274060
38.00	33.8142589	33.8088034	33.8216495	33.8199964

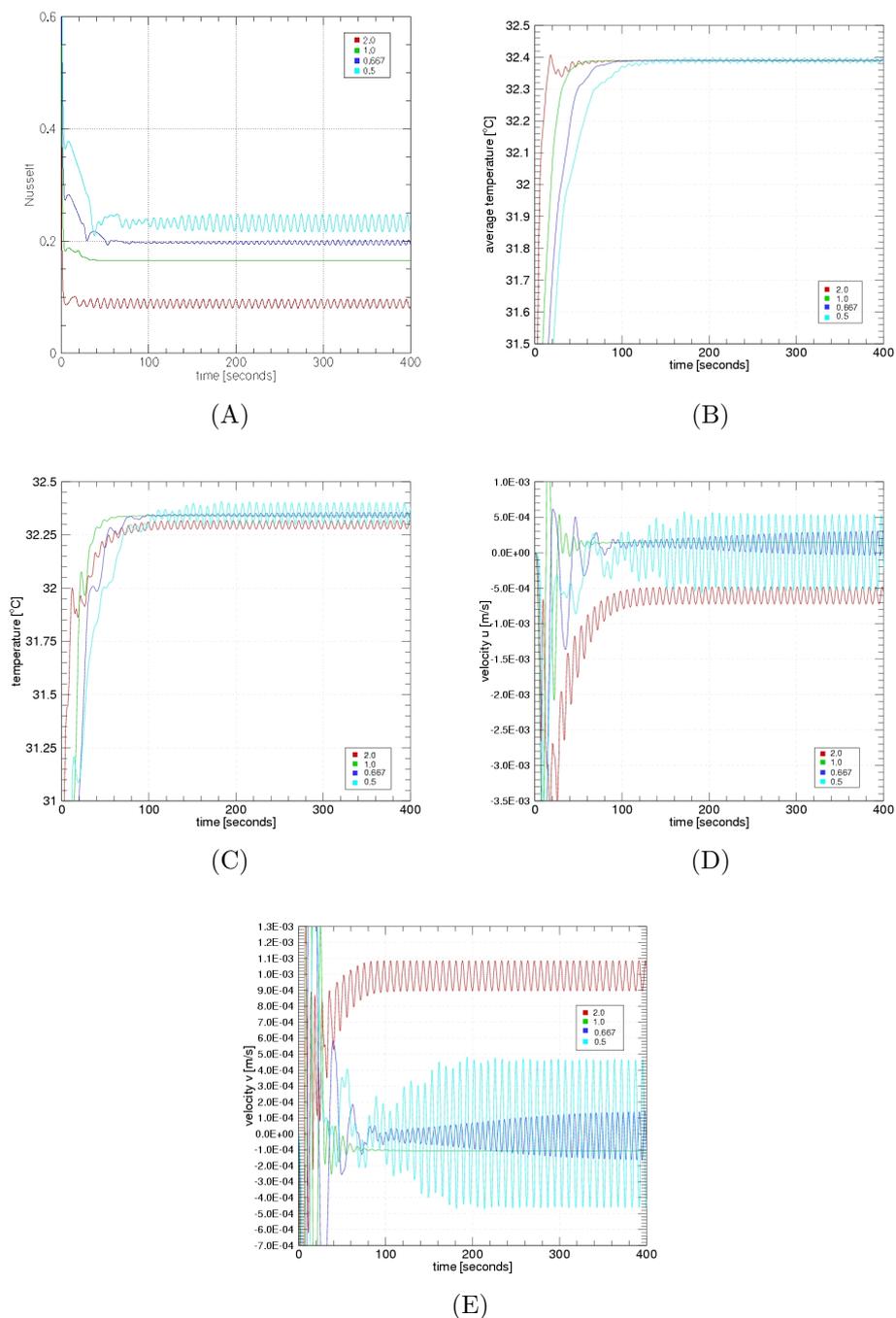
**Tabla 4.11:** Resultados obtenidos para el caso en que la relación de aspecto es 0.500562



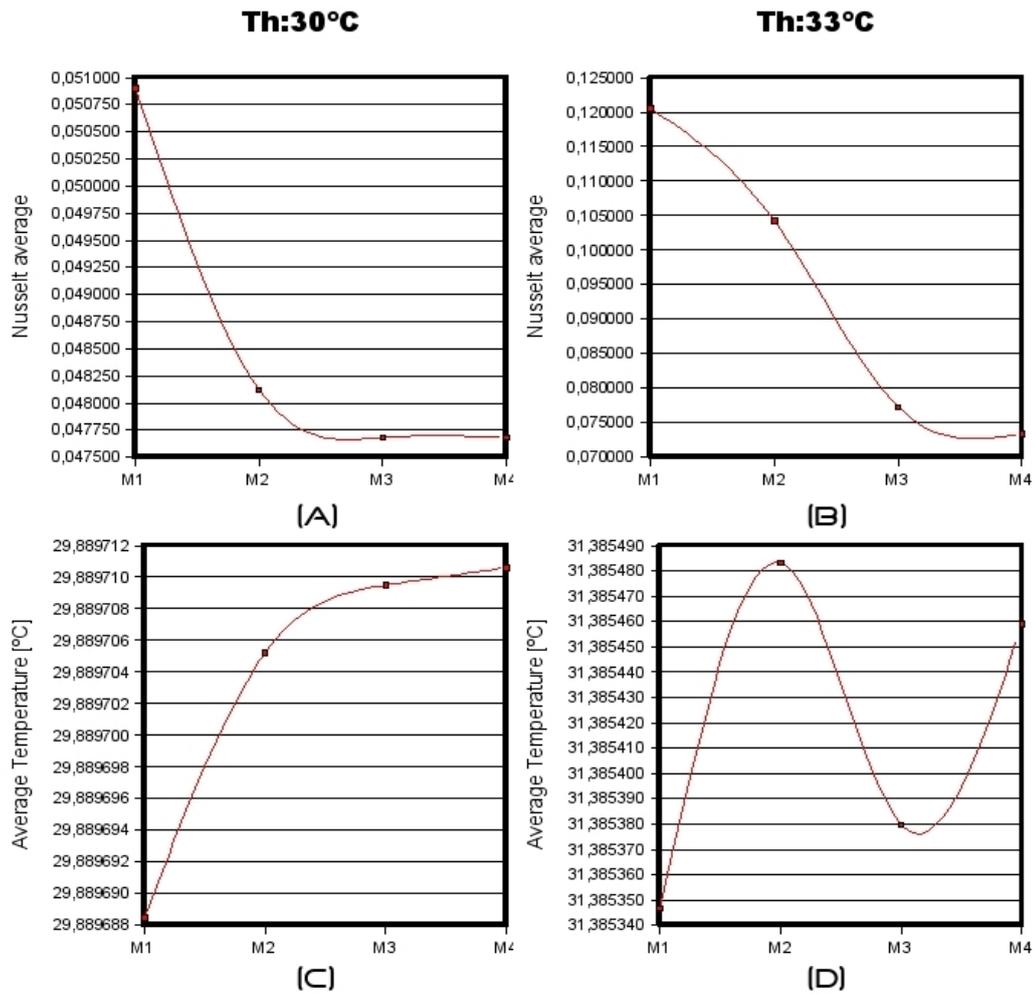
**Figura 4.19:** (A) Evolución del número de Nusselt en la pared caliente, (B) la temperatura media en el dominio, (C) temperatura en el punto medio del dominio, (D) velocidad horizontal en el punto medio del dominio y (E) velocidad vertical en el punto medio del dominio en el caso de que el recinto se mantiene líquido durante los 19 minutos de análisis



**Figura 4.20:** (A) Evolución del número de Nusselt en la pared caliente, (B) la temperatura media en el dominio, (C) temperatura en el punto medio del dominio, (D) velocidad horizontal en el punto medio del dominio y (E) velocidad vertical en el punto medio del dominio en el caso de que el recinto se mantiene líquido durante los 19 minutos de análisis



**Figura 4.21:** (A) Evolución del número de Nusselt en la pared caliente, (B) la temperatura media en el dominio, (C) temperatura en el punto medio del dominio, (D) velocidad horizontal en el punto medio del dominio y (E) velocidad vertical en el punto medio del dominio en el caso de que el recinto se mantiene líquido durante los 19 minutos de análisis



**Figura 4.22:** Evolución a medida que densificamos la malla de discretización espacial de (A) y (B) número de Nusselt medio (C) y (D) temperatura media en el dominio, cuando la relación de aspecto es de 2.0