



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

SIMULACIÓN DE CONVECCIÓN NATURAL EN MEDIOS
POROSOS USANDO EL MÉTODO MULTIMALLA

T E S I S A

para obtener el título de:

ESPECIALISTA EN EXPLORACIÓN Y
APROVECHAMIENTO DE RECURSOS GEOTÉRMICOS

PRESENTA:

CRISTHIAN DAVID QUINTERO GUTIÉRREZ

ASESOR:

DR. FERNANDO JAVIER GUERRERO MARTÍNEZ



Ciudad Universitaria, CD. MX 2023



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Documento maquetado con T_EX^IS v.1.0.

Este documento está preparado para ser imprimido a doble cara.

*“Soil Mechanics arrived at the borderline between science and art.
I use the term art to indicate mental processes leading to satisfactory results
without the assistance of step-for-step logical reasoning?
To acquire competence in the field of earthwork engineering
one must live with the soil.
One must love it and observe its performance
not only in the laboratory but also in the field,
to become familiar with those of its manifold properties
that are not disclosed by boring records?”*

Karl Terzaghi

Agradecimientos

Agradezco a mi tutor, Fernando Javier Guerrero Martínez por su inmenso apoyo y valiosa orientación durante la realización de este trabajo. Por su tiempo, dedicación y buena voluntad para ayudarme a resolver todas las dificultades.

De igual forma, agradezco a los docentes que con gran compromiso y esmero compartieron sus conocimientos e inculcaron su pasión y amor por el trabajo de la geotermia.

A la Universidad Nacional Autónoma de México por la oportunidad que me brindó para la realización de esta especialización.

A la secretaría y coordinación del programa por todo su apoyo y orientación en los diferentes trámites administrativos.

A mis compañeros de estudio con los que pude realizar un excelente trabajo en conjunto y construir una gran amistad.

Finalmente, agradezco a mi familia por todo su apoyo durante este año y muy especialmente a María José, por el gran cariño que pone en todo lo que hace, por compartir mis sueños y ayudarme a lograr mis metas.

Resumen

En este trabajo se implementa el método de volumen finito para el modelado de los fenómenos de conducción, advección-difusión y convección natural. Inicialmente, se evalúa el desempeño de diferentes solucionadores de ecuaciones algebraicas: el algoritmo de Thomas, el método de Gauss-Seidel (GS) y el método de Sobrerrelajación sucesiva (SOR). Posteriormente, se implementan diferentes esquemas multimalla y se compara su desempeño con esquemas de una sola malla. Los códigos son implementados en el lenguaje de programación Python y su rendimiento se evalúa mediante la comparación de parámetros como el tiempo de cómputo, número de ciclos y el comportamiento del residual. La comparación entre los diferentes solucionadores, muestra que se puede acelerar la convergencia de los códigos mediante el apropiado uso de un parámetro de relajación o mediante la implementación de un esquema multimalla. Para los modelos de conducción se encuentra que el esquema multimalla *Full Multigrid* (FMG) presenta el mejor rendimiento, mientras que para el fenómeno de advección-difusión este mismo esquema puede presentar inestabilidades o una falsa difusión si no se implementa de manera adecuada. Finalmente, se tiene que para el modelo de convección natural, el método multimalla presenta un comportamiento del número de Nusselt global equivalente al del método SOR de una sola malla pero con un menor tiempo de cómputo, lo que indica que la convección se lleva a cabo de forma apropiada en el código multimalla y con un mayor rendimiento al de los métodos de una sola malla.

Abstract

In this paper, the finite volume method was programmed for the modeling of conduction, advection-diffusion, and natural convection phenomena. Firstly, the performance of the Thomas algorithm (tridiagonal matrices or TDMA), the Gauss-Seidel (GS) method, and the successive overrelaxation method (SOR) was evaluated. Then, different multi-grid schemes were programmed, and their performance was compared with single-grid methods. The codes were written in Python programming language and their performance was compared by the evaluation of parameters such as computational time, number of cycles, and their residual behavior. The results show that the convergence of the codes can be accelerated through the appropriate use of a relaxation parameter or through the implementation of a multi-grid scheme. The Full Multigrid scheme (FMG) has the best performance for conduction models, while for the advection-diffusion phenomenon it could show instabilities or false diffusion if it is not used correctly. Finally, the multi-grid method has a similar behavior of the global Nusselt number to the SOR single-grid method for the natural convection model. That shows that convection takes place appropriately in the multigrid method, but with a shorter computational time or with higher performance than single-mesh methods.

Índice

Agradecimientos	III
Resumen	v
1. Introducción	1
1.1. Objetivos	2
1.1.1. Objetivo general	2
1.1.2. Objetivos específicos	2
1.2. Metodología	2
1.3. Símbolos empleados	3
1.3.1. Ecuaciones	3
1.3.2. Figuras	4
2. Marco Teórico	7
2.1. Fundamentos físicos	7
2.1.1. Ley de Darcy	7
2.1.2. Ley de conservación de momento:	8
2.1.3. Aproximación de Boussinesq	8
2.1.4. Derivada advectiva	8
2.1.5. Ley de conservación de masa:	9
2.1.6. Ecuación de advección-difusión	9
2.1.7. Conducción	9
2.1.8. Convección	9
2.2. Modelo Conceptual	10
2.3. Modelo Numérico	10
2.3.1. Definición de una malla	10
2.3.2. Método de Volumen finito	11
2.3.3. Conducción	11
2.3.4. Advección-difusión	13
2.3.5. Convección natural en medios Porosos	15
2.3.6. Solucionadores de Ecuaciones algebraicas	16
2.3.7. Algoritmo de Thomas	18
2.3.8. Método Gauss-Seidel	18
2.3.9. Métodos de Relajación	19
2.3.10. Método multimalla	20
3. Análisis de resultados	23

3.1. Conducción 1D	23
3.2. Conducción 2D	27
3.3. Advección-difusión 1D	30
3.4. Advección-difusión 2D	33
3.5. Convección natural 2D	34
4. Conclusiones	39
A. Códigos implementados	41
A.1. Conducción y advección-difusión	41
A.2. Convección natural	42
A.3. Métodos Multimalla	43
Bibliografía	47

Índice de figuras

2.1. Elementos de una malla 2.1 (ManchesterCFDTeam, 2018)	10
2.2. Disposición de una malla 1D para el método volumen finito (Versteeg H. K., 2007).	12
2.3. Disposición de una malla 2D para el método volumen finito (Versteeg H. K., 2007).	12
2.4. Disposición de una malla 1D para el fenómeno de advección-difusión (Versteeg H. K., 2007).	13
2.5. Disposición de una malla 2D para el modelado numérico de convección natural en medios porosos (Guerrero, 2017).	17
2.6. Disposición de una malla 2D para el método multimalla (Gerya, 2019).	21
2.7. Estructura de los ciclos multimalla V,W y F (Gerya, 2019).	22
2.8. Estructura del ciclo FMG (Briggs, 2019).	22
3.1. Geometría del problema de conducción 1D (Versteeg H. K., 2007).	24
3.2. Salidas del código conducción 1D para diferentes longitudes de celda con el algoritmo de Thomas.	24
3.3. Resultados del solucionador SOR en función del parámetro de relajación.	25
3.4. Geometría del problema de conducción 1D usando un algoritmo multimalla (Versteeg H. K., 2007).	26
3.5. Perfil de temperaturas del código de conducción 1D para una malla de 64 nodos.	26
3.6. Residual y tiempo de cómputo en función del número de iteraciones para los diferentes esquemas multimalla en una malla de 64 nodos.	26
3.7. Geometría del problema de conducción 2D. Modificado de (Versteeg H. K., 2007).	27
3.8. Distribución de temperaturas de una placa de dimensiones $\Delta x = 1,0$ m, $\Delta y = 1,0$ m y $\Delta z = 0,01$ m	28
3.9. Residual y tiempo de cómputo para los métodos tradicionales de una sola malla de 64×64 nodos y los esquemas multimalla con solucionador SOR.	28
3.10. Tiempo de cómputo en función del número de prolongaciones y restricciones para los diferentes esquemas multimalla.	29
3.11. Geometría del problema de advección-difusión 1D (Versteeg H. K., 2007).	30
3.12. Dos casos para el problema de advección-difusión 1D.	31
3.13. Aplicación de los esquemas multimalla V y FMG para los casos 1 y 2 en una malla de 32 nodos.	32
3.14. Comparación de los esquemas de diferencias centradas y el “Upwind” para una longitud de las celdas de $\Delta x = 0,1$	33

3.15. Geometría del problema de advección-difusión 2D. Modificado de (Versteeg H. K., 2007).	33
3.16. Perfil de temperaturas para el fenómeno de advección difusión 2D usando un método multimalla V y FMG.	34
3.17. Salidas del código de convección natural.	35
3.18. Comparación del residual y tiempo de cómputo (segundos) entre el método SOR y el esquemas multimalla V para la función de temperatura y la función de corriente en una malla de 32×32 nodos.	36
3.19. Tiempos de cómputo del método SOR y método multimalla en función del número de nodos.	37
3.20. Diferencia porcentual del número de Nusselt para diferentes números de celdas.	37
A.1. Diagrama de flujo de para los códigos de conducción y advección-difusión en 1D y 2D.	41
A.2. Algoritmo iterativo del método punto fijo (Guerrero, 2017).	43
A.3. Diagrama de flujo de para lo métodos multimalla V, W y F.	44

Índice de Tablas

3.1. Comparación de tiempos de cómputo (segundos) y número de iteraciones para los algoritmos de Thomas, Gauss Seidel y SOR para el código de conducción 1D.	24
3.2. Comparación de tiempos de cómputo(segundos) para los esquemas multimalla V,W y F.	27
3.3. Tiempos de cómputo para los métodos multimalla 2D en función del número de niveles de malla, con una resolución de 64×64 nodos.	29
3.4. Comparación de tiempos de cómputo (segundos) para los métodos tradicionales de una sola malla y los esquemas multimalla en 2D, para 3 niveles de malla.	30
3.5. Comparación de tiempos de cómputo (segundos) para el método SOR de una malla y el esquema multimalla V en el problema de advección-difusión 2D.	34
3.6. Comparación de tiempos (segundos) entre el método SOR de una sola malla y el esquema multimalla V para el problema de convección natural 2D y número de Raileight=100. El valor presentado con asterisco (*) corresponde a los resultados para un número de Raileight=150.	36
A.1. Descripción de las funciones implementadas para los códigos de conducción y advección difusión en 1D y 2D.	41
A.2. Descripción de las funciones utilizadas para el código de convección natural 2D.	42
A.3. Descripción de las funciones utilizadas para los códigos multimalla.	44

Capítulo 1

Introducción

El desarrollo de la sociedad ha traído consigo no sólo grandes beneficios, sino también grandes retos. Un desarrollo tecnológico e industrial no está completo si detrás de este hay una afectación negativa a los recursos con los que cuenta el planeta y que sustentan la vida en todas sus formas. El desarrollo energético basado principalmente en combustibles fósiles, ha hecho que sea necesario encontrar nuevas fuentes de energía cada vez más sustentables. La energía geotérmica es una fuente renovable muy confiable, eficiente y con un gran potencial por ser aprovechado (**Sanchez J., 2011**). Esta puede ser explotada de forma sostenible y aunque es una tecnología que se ha desarrollado por más de un siglo (**Kepinska, 2003**), la geotermia aún no ha sido implementada en muchos países del mundo que cuentan con gran potencial, siendo una de las principales razones, el alto costo y el alto riesgo de inversión durante la etapa exploratoria (**Gehring M., 2012**).

En la actualidad, la geotermia no se podría entender plenamente sin las técnicas de la simulación computacional. Esta es una herramienta útil para modelar sistemas, estudiar su comportamiento ante cambios en sus propiedades físicas y permite realizar experimentos computacionales que de otra forma serían muy complejos de realizar en un laboratorio. Esto ayuda a comprender de una mejor forma el sistema y reducir los costos y riesgos de inversión (**Bundschuh J., 2010**).

Los sistemas geotérmicos se clasifican en dos grandes grupos; sistemas conductivos y sistemas convectivos de acuerdo a su mecanismo principal de transferencia de calor (**Moeck, 2013**). No obstante esta clasificación, es importante considerar que en la mayoría de los sistemas se presentan ambos mecanismos en una mayor o menor medida. Dada la importancia de los fenómenos de conducción y convección en los sistemas geotérmicos, la transferencia de calor en medios porosos ha sido un tema de investigación clave para el avance de la geotermia. Algunos de los estudios realizados en este campo incluyen el fenómeno de convección natural, convección termohalina, equilibrio térmico y el no equilibrio térmico, el efecto de radiación en medios porosos, disipación viscosa y la transferencia de masa y calor en cavidades de diferentes geometrías (**Badrudin I., 2018**).

Como se mencionó previamente, la convección natural juega un papel muy importante en el transporte de energía en sistemas porosos (**Hewitt, 2020**), sin embargo, su simulación puede demandar altos costos computacionales, sobre todo si se desean realizar modelos 3D que pueden entregar resultados más representativos que los obtenidos por los modelos 2D (**Aithal, 2017**). Esto ha generado la necesidad de implementar códigos cada vez más eficientes y que ayuden a acelerar la solución del problema. Muchos de los métodos numéricos tradicionales, pueden requerir de un alto consumo de memoria o de la realización de un alto número de operaciones, lo que representa un alto costo computacional en tiempo y recursos. Los métodos multimalla por su parte, representan una excelente alternativa

para acelerar la obtención del resultado, al facilitar la reducción del error de aproximación numérica. (Pierson, 2019).

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivo general

Evaluar el rendimiento del método multimalla para modelar la convección natural en medios porosos.

1.1.2. Objetivos específicos

- Simular el transporte de calor por conducción, advección-difusión y convección natural en 1D y 2D usando el método de volumen finito.
- Comparar el rendimiento de diferentes solucionadores de ecuaciones algebraicas: para la conducción y advección-difusión en 1D y 2D.
- Programar en Python diferentes esquemas multimalla, para la simulación de la conducción, advección-difusión y convección natural en medios porosos en 2D.

1.2. Metodología

El presente trabajo se desarrolla desde un enfoque fenomenológico a través del modelamiento y la simulación computacional. Para lograr los objetivos propuestos, inicialmente se consulta la literatura relacionada con la dinámica de fluidos computacional (CDF), transporte de calor en medios continuos y medios porosos y la implementación de métodos multimalla. Para la generación de los códigos, se hace uso del lenguaje de programación Python, se implementa el método de volumen finito y diferentes solucionadores como el algoritmo de Thomas, el método de Gauss-Seidel y el método SOR (Burden R., 2010). Se parte de la solución de casos específicos como conducción y advección-difusión en 1D y 2D, y posteriormente, se aborda el problema de convección natural en 2D como caso general de estudio. Con el propósito de evaluar el rendimiento de los métodos multimalla para el problema de convección natural, primero se resuelven cada uno de los casos de estudio por métodos tradicionales de una sola malla, luego, se resuelven los mismos casos con diferentes esquemas multimalla y se comparan los resultados. Para los métodos tradicionales se evalúa el número de iteraciones, la resolución de resultados, el comportamiento del residual y el tiempo de convergencia del código en función del número de nodos de la malla, el tipo de solucionador y particularmente para el método SOR, el parámetro de relajación. Estos mismos parámetros son evaluados para los esquemas multimalla en función del número de nodos, el tipo de esquema utilizado y el número de niveles de refinamiento-engrosamiento de la malla original (restricciones y prolongaciones).

1.3. Símbolos empleados

1.3.1. Ecuaciones

α	Parámetro de relajación del método SOR
β_0	Coefficiente de expansión térmica
Γ	Coefficiente de difusión
Δh	Nivel piezométrico
θ	Temperatura normalizada
μ	viscosidad dinámica del fluido
ρ	Densidad del fluido
ρ_∞	Densidad a una temperatura T_∞
ϕ	Magnitud física generalizada
$\phi_P, \phi_E, \phi_W, \phi_N, \phi_S$	Magnitud física evaluada en los nodos de las celdas
$\phi_e, \phi_w, \phi_n, \phi_s$	Magnitud física evaluada en las caras de las celdas
$\Delta x = \delta x$	Longitud de la celda
$\frac{D}{dt}$	Derivada advectiva
∇	Operador diferencial vectorial
A	Área
\vec{A}	Matriz de coeficientes del sistema de ecuaciones
a_P, a_E, a_W, a_N, a_S	Coefficientes del método de Volumen finito
$a_n b$	Coefficientes vecinos al nodo central
b_P, b_E, b_W, b_N, b_S	Coefficientes de V.F para un paso de tiempo previo
D	Razón entre el coeficiente de difusión y la longitud de las celdas
\vec{e}	Vector de error
F	Producto de la densidad por la velocidad del fluido
g	Gravedad
H	Altura del medio
K_H	Conductividad hidraulica
k	Permeabilidad
L	Longitud del medio
P	Presión del fluido
P_e	Número de Péclet
Q_V	Flujo de Darcy
R_0	Residual claculado en la primera iteración
$\bar{R} = R/R_0$	Residual normalizado
\vec{r}	Vector residual
R_a	Número de Rayleigh
S_ϕ	Término fuente
T	Temperatura
T_0	Condición inicial de temperatura
T_∞	Temperatura promedio del medio
V_ϕ	Volumen poroso
V_S	Volumen sólido
V_B	Volumen del total de la roca
v	Velocidad del fluido
\bar{x}	Variable normalizada
x_i^k	Valor de la variable i para una iteración k
y^{nh}	Solución para un nivel de malla nh, donde $n = 1, 2, 3..$

1.3.2. Figuras

<i>CD</i>	Esquema de diferencias centradas
<i>GS</i>	Método de Gauss-Seidel
<i>MM</i>	Método Multimalla
<i>Ng</i>	Número de Nusselt
<i>SA</i>	Solución analítica
<i>nl</i>	Número de niveles de malla
<i>SOR</i>	Método de Sobrerelajaciones Sucesivas
<i>TDMA</i>	Algoritmo de Thomas
<i>Uw</i>	Esquema Upwind
<i>V, M, F, FMG</i>	Diferentes esquemas multimalla

Capítulo 2

Marco Teórico

Un sistema geotérmico es una región del subsuelo con características geológicas definidas donde el calor interno de la tierra puede ser transportado a capas más superficiales mediante diversos mecanismos, lo que permite su aprovechamiento (**Moeck, 2013**). En términos de sus propiedades físicas, un sistema geotérmico se puede entender como un medio poroso en el cual se puede almacenar un fluido en su interior y que cuenta con un gradiente de temperatura anómalo o una fuente de calor a profundidad. Este calor puede ser transportado a la superficie por conducción o convección, siendo la convección el mecanismo más eficiente en el transporte de energía.

2.1. Fundamentos físicos

De acuerdo con (**Bundschuh J., 2010**), un medio poroso se puede entender como un medio continuo con espacios vacíos interconectados entre sí. Así pues, se puede definir el volumen total de un medio poroso V_B , como la suma del volumen ocupado por los espacios vacíos o poros V_Φ más el volumen ocupado por la matriz sólida V_S (Ec. **2.1**).

$$V_B = V_\Phi + V_S \quad (2.1)$$

Dos propiedades muy importantes que caracterizan un medio poroso son la permeabilidad k y la conductividad hidráulica K_H . La primera, es una propiedad asociada a la roca porosa y mide la capacidad de la misma para transportar fluido, mientras que la última es un parámetro relacionado con las características del fluido y permite conocer la facilidad con que este puede circular a lo largo de la red de poros. Estas dos propiedades se encuentran relacionadas por la expresión **2.2**.

$$K_H = \frac{\rho g}{\mu} k \quad (2.2)$$

Donde ρ y μ son respectivamente la densidad y la viscosidad dinámica del fluido y g la aceleración de la gravedad.

2.1.1. Ley de Darcy

La circulación de un fluido en un medio poroso obedece la ley de Darcy, la cual expresa la descarga total Q_V del fluido en función del área A , la diferencia en el nivel piezométrico Δh y la conductividad hidráulica del medio K_H para una distancia $L = \Delta z$ (Ec. **2.3**). En la ley de Darcy no se considera la disposición exacta de la red de poros, sino que se realiza una aproximación a un movimiento global del fluido dentro de la matriz. Esta aproximación es

válida para flujos laminares donde la velocidad del fluido es pequeña (**Versteeg H. K., 2007**).

$$Q_V = -K_H \frac{\Delta h}{\Delta z} A \quad (2.3)$$

2.1.2. Ley de conservación de momento:

La ley de Darcy es una consecuencia de la ley de conservación de momento cuando la energía cinética del fluido es despreciable (**Bundschuh J., 2010**). La descarga volumétrica por unidad de área $v_f = \frac{Q_V}{A}$ se conoce como la velocidad de Darcy. Al expresar la Ecuación **2.3** en términos de la viscosidad dinámica del fluido, la permeabilidad del medio y el gradiente de presión ∂P , se puede encontrar una relación para la velocidad del fluido en sus diferentes componentes (Ecuaciones **2.4** a **2.6**).

$$v_x = -\frac{k_x}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \quad (2.4)$$

$$v_y = -\frac{k_y}{\mu} \frac{\partial P}{\partial y} \quad (2.5)$$

Para la componente vertical es necesario incorporar el término ρg asociado a la acción de la gravedad sobre el volumen del fluido.

$$v_z = -\frac{k_z}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g \right) \quad (2.6)$$

2.1.3. Aproximación de Boussinesq

La aproximación de Boussinesq considera que la densidad del fluido es constante, salvo en el término de flotación ρg de la Ley de Darcy. En el caso de convección natural la densidad depende de la temperatura, una forma común de representar esta dependencia es la siguiente:

$$\rho(T) = \rho_\infty (1 - \beta(T - T_\infty)) \quad (2.7)$$

En el fenómeno de convección natural, las variaciones en la densidad del fluido son lo suficientemente pequeñas como para poder realizar esta aproximación (**Guerrero, 2017**). Si se incluye la Ecuación **2.7** en la Ecuación **2.6**, esta se puede reescribir como:

$$v_z = -\frac{k_z}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial z} + \rho_\infty g (1 - \beta(T - T_\infty)) \right) \quad (2.8)$$

2.1.4. Derivada advectiva

Adicionalmente, es necesario involucrar diferentes leyes de la termodinámica y la mecánica de fluidos. Al definir un volumen de control, se puede establecer un principio de conservación general de la magnitud ϕ (**Versteeg H. K., 2007**). La derivada advectiva $\frac{D\phi}{dt}$ permite medir la variación de la magnitud $\phi(x, y, z, t)$ en el espacio y el tiempo. A partir de esta se pueden deducir leyes de conservación como la ley de conservación de masa, la ley de conservación de momento y la Ecuación de transporte de calor.

$$\frac{D\phi}{dt}(x, y, z, t) = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\vec{u}) \quad (2.9)$$

2.1.5. Ley de conservación de masa:

La Ecuación de continuidad para un fluido compresible puede obtenerse al realizar un balance de la cantidad de materia en un elemento de volumen. Para este caso la derivada advectiva está definida en función de la variación en la densidad del fluido ρ .

$$\frac{D\rho}{dt}(x, y, z, t) = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\rho \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.10)$$

Para un fluido incompresible se asume que no hay variación en su densidad por lo que el término dependiente del tiempo se anula y la Ecuación de continuidad se transforma en $\nabla \cdot \vec{u} = 0$

2.1.6. Ecuación de advección-difusión

Como se mencionó al inicio del capítulo, la Ecuación de transporte de calor para un fluido se puede escribir en términos de la derivada advectiva. En esta se contempla el aporte gracias al proceso convectivo, al proceso difusivo y a las fuentes de calor dentro del volumen de control.

$$\frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\phi\vec{v})}_{T.Convectivo} = \underbrace{\vec{\nabla} \cdot (\Gamma\nabla\phi)}_{T.Difusivo} + \underbrace{S_\phi}_{T.fuente} \quad (2.11)$$

2.1.7. Conducción

El proceso de conducción es un mecanismo de transferencia de energía térmica sin transferencia de materia. El transporte de calor por conducción se da en sentido contrario al gradiente térmico, es decir, se transfiere desde los cuerpos de mayor temperatura hacia los de menor temperatura. Este fenómeno se puede modelar desde la Ecuación de transporte como un proceso difusivo. Eliminando la componente convectiva y la componente dependiente del tiempo en la Ecuación de transporte **2.11** se obtiene la Ecuación de difusión de calor en estado estacionario:

$$\nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi = 0 \quad (2.12)$$

2.1.8. Convección

A diferencia de la conducción, el proceso de convección implica una transferencia de energía y de masa. En la convección natural, la diferencia de temperatura en un fluido genera una diferencia de densidad, y por lo tanto, una diferencia en su flotabilidad. De esta manera el fluido más caliente y menos denso asciende, mientras que el fluido más frío y denso desciende, produciéndose así una circulación del mismo y sirviendo este como medio para el transporte del calor. La Ecuación de advección-difusión se puede obtener nuevamente de la Ecuación **2.11** al eliminar el término dependiente del tiempo.

$$\nabla \cdot (\rho\phi\vec{v}) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (2.13)$$

2.2. Modelo Conceptual

Para los diferentes casos estudiados se tienen en cuenta las siguientes consideraciones:

- Los modelos están dados de acuerdo con una aproximación Euleriana donde se debe garantizar la conservación de las leyes para un elemento de volumen fijo.
- Los fluidos del sistema son incompresibles.
- Se asumen geometrías rectangulares simples, por lo que se usan mallas estructuradas.
- La circulación del fluido en el medio poroso está controlada por la Ley de Darcy y la aproximación de Boussinesq.
- El problema de convección natural se aborda como un problema adimensional.

2.3. Modelo Numérico

2.3.1. Definición de una malla

Una malla se puede entender como una red interconectada de nodos y celdas, donde cada nodo representa un elemento del espacio para el cual se genera una solución de las Ecuaciones diferenciales que modelan el problema (**Briggs, 2019**), y que se explican en la Sección **2.1**. Existen diferentes tipos de mallas las cuales deben elegirse según las características del problema específico, con el fin de explotar al máximo las cualidades de cada una de estas. Las mallas se pueden clasificar con base a su forma de discretización, siendo estas estructuradas o no estructuradas dependiendo de si siguen un patrón de discretización periódico; y se clasifican también como uniformes o no uniformes de acuerdo a si los nodos se encuentran espaciados de manera equidistante.

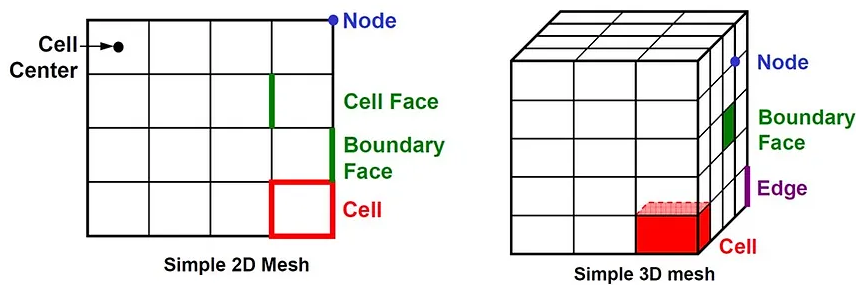


Figura 2.1: Elementos de una malla **2.1** (**ManchesterCFDTeam, 2018**).

Algunas de las características más importantes que definen una malla son:

Números de nodos: Indica la cantidad de puntos que representan el dominio del problema y donde se calcularán las soluciones de la Ecuación diferencial. Un mayor número de nodos, generalmente representa una solución más cercana a la real y curvas más suaves de la solución, no obstante, implica un mayor número de cálculos. Por el contrario, un menor número de nodos representa una menor cantidad de cálculos, pero una solución de menor resolución e inexacta.

Tamaño de las celdas: El tamaño de la celda indica la distancia que existe entre sus caras. En una malla estructurada y uniforme, el tamaño de las celdas se encuentra relacionado con el número de nodos si se establece una longitud fija del dominio.

2.3.2. Método de Volumen finito

La aplicación del método de volumen finito para la discretización de las ecuaciones de transporte analizadas en el apartado **2.1.6**, hace necesario la integración de la Ecuación **2.11** sobre un volumen de control. Una ventaja que proporciona el método de volumen finito, es que la integración de la Ecuación diferencial da como resultado un sistema de ecuaciones algebraicas donde se cumple con la conservación de la propiedad ϕ en el volumen de control. La deducción detallada de las ecuaciones de transporte de calor discretizadas con el método de volumen finito puede ser consultada en (**Versteeg H. K., 2007**).

2.3.3. Conducción

1D: En una dimensión, la Ecuación de transporte toma la forma:

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + S_\phi = 0 \quad (2.14)$$

Donde Γ se conoce como el coeficiente de difusión y S_ϕ el término fuente. Al integrar la Ecuación de transporte se obtienen los términos $\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e$, $\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w$ y $S\Delta V$ que representan respectivamente, el flujo difusivo en la cara este, oeste y las fuentes al interior de las celdas. Los primeros dos términos, correspondientes al flujo difusivo en las caras de la celda, están dados de acuerdo con las características de la malla utilizada (ver Figura **2.2**). Por otro lado, el último término asociado a las fuentes, puede ser separado en dos componentes, un término S_u independiente de la variable ϕ_p y un término S_p dependiente de la misma (Ec **2.17**).

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad (2.15)$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) \quad (2.16)$$

$$S\Delta V = S_u + S_p \phi_p \quad (2.17)$$

Los coeficientes de difusión Γ se pueden calcular al aplicar un esquema de diferencias centradas, que para el caso de una malla uniforme puede realizarse mediante una el promedio de dos nodos vecinos: $\Gamma_w = \frac{\Gamma_W + \Gamma_P}{2}$ y $\Gamma_e = \frac{\Gamma_P + \Gamma_E}{2}$. De esta forma la integración de la Ecuación de la Ecuación de transporte da como resultado:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u \quad (2.18)$$

Donde los coeficientes a_W , a_E y a_P reciben el nombre de coeficientes a_P 's y para el problema de conducción 1D en estado estacionario se definen como: $a_P = a_W + a_E - S_p$, $a_w = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w$ y $a_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e$.

En la Figura 2.2 se observa la definición de la malla para el caso de conducción 1D y su nomenclatura correspondiente.

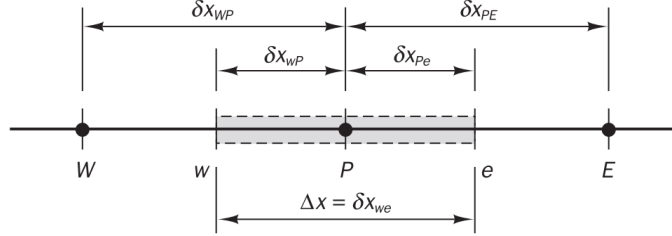


Figura 2.2: Disposición de una malla 1D para el método volumen finito (Versteeg H. K., 2007).

2D: En dos dimensiones, la Ecuación de transporte para el fenómeno de conducción se puede escribir:

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + \frac{d}{dy} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dy} \right) + S_\phi = 0 \quad (2.19)$$

Repetiendo el mismo proceso que para el caso 1D, se puede calcular un sistema de ecuaciones algebraicas discretizadas para el flujo a través de cada una de las caras, este, oeste, norte y sur (ver Figura 2.3). Para el caso 2D, nuevamente se asume una malla uniforme donde se incluyen los índices S para el nodo sur y N para el nodo norte y los índices s y n para las caras de las celdas vecinas al nodo P en la componente vertical.

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_u \quad (2.20)$$

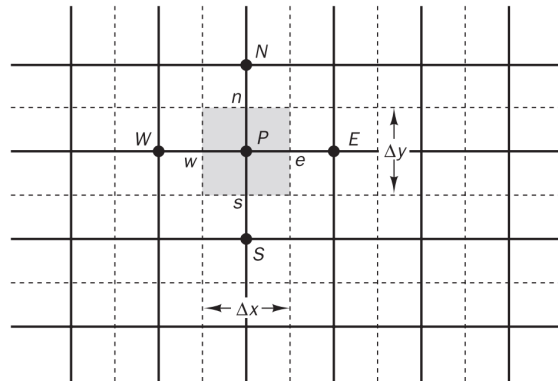


Figura 2.3: Disposición de una malla 2D para el método volumen finito (Versteeg H. K., 2007).

Los coeficientes a_P 's en este caso se definen como $a_P = a_W + a_E + a_S + a_N - S_p$, $a_w = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w$, $a_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e$, $a_s = \frac{\Gamma_s}{\delta x_{SP}} A_s$ y $a_n = \frac{\Gamma_n}{\delta x_{PN}} A_n$ y las áreas de las caras para el caso 2D son: $A_w = A_e = \Delta y$ y $A_s = A_n = \Delta x$.

Es importante considerar que en los nodos donde se evalúan las condiciones de frontera, las ecuaciones discretizadas cambian su forma para incorporar dichas condiciones. En estos casos, se hace valer cero los coeficientes asociados a los nodos que se encuentran en la vecindad de las condiciones de frontera y estas condiciones se incorporan en los términos fuente S_u y S_p según el problema.

2.3.4. Advección-difusión

Para los casos abordados en el fenómeno de advección-difusión, se asume que las velocidades de flujo en las caras son conocidas y por tanto, no representan una variable adicional en el problema.

1D: Para el caso 1D en ausencia de fuentes, la Ecuación de transporte **2.13** y la Ecuación de continuidad toman la forma:

$$\frac{d}{dx}(\rho\phi\vec{v}) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (2.21)$$

$$\frac{d}{dx}(\rho u) = 0 \quad (2.22)$$

Aquí, se deben incluir en la definición de la malla las velocidades del fluido en las caras de las celdas, como se aprecia en la Figura **2.4**.

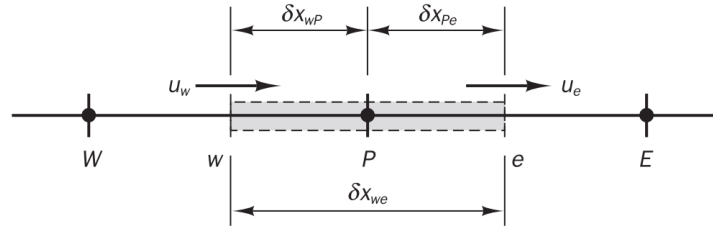


Figura 2.4: Disposición de una malla 1D para el fenómeno de advección-difusión (**Versteeg H. K., 2007**).

Al definir las variables $F = \rho u$ y $D = \frac{\Gamma}{\delta x}$, integrando sobre el volumen de control para las relaciones **2.21** y **2.22** en una malla uniforme, realizando nuevamente un promedio para los términos difusivos de las caras de las celdas y se asumiendo que $A_w = A_e = A$, las ecuaciones toman la forma:

$$F_e\phi_e - F_w\phi_w = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (2.23)$$

$$F_e - F_w = 0 \quad (2.24)$$

Como se observa en la Ecuación **2.23**, ahora es necesario conocer el valor de ϕ en las caras de las celdas. Para esto se aplica nuevamente el esquema de diferencias centradas (Ec **2.27** y Ec **2.28**), aunque existen otros esquemas como: el “*upwind*”, el “*hybrid differencing*”, el “*power law*” y el “*Higher-order differencing*” (**Versteeg H. K., 2007**). Cada uno de estos esquemas tienen características de exactitud, “Conservativeness”, “Boundedness” y

“Transportiveness” que los hacen más o menos adecuados en la implementación de un problema (Versteeg H. K., 2007).

En términos generales, para que los resultados de la simulación sean coherentes con la física del problema, se deben cumplir con las siguientes restricciones:

“**Conservativeness**”: Expresa que las ecuaciones involucradas en el transporte de la magnitud ϕ , deben cumplir con los principios de conservación de la magnitud.

“**Boundedness**”: para garantizar la convergencia de un método iterativo la matriz del sistema de ecuaciones debe ser diagonalmente dominante, esto es:

$$\frac{\sum |a_{nb}|}{a_P} \begin{cases} \leq 1 & \text{en todos los nodos} \\ < 1 & \text{al menos en un nodo} \end{cases} \quad (2.25)$$

“**Transportiveness**”: Esta condición indica que se debe cumplir con una relación coherente entre la dirección de flujo, la magnitud del número de Péclet (Ec. 2.26) y la dirección de influencia de los nodos.

$$Pe = \frac{F}{D} = \frac{\rho u}{\Gamma/\delta x} \quad (2.26)$$

- **Diferencias Centradas:** Un esquema de diferencias centradas posee un orden de exactitud de segundo orden, sin embargo este puede generar oscilaciones espurias en problemas donde la convección toma un rol importante. En terminos generales este esquema garantiza el cumplimiento de la propiedad de “Conservativeness” pero el cumplimiento de las otras dos propiedades dependerá de las características de la malla y del problema. Para una malla uniforme, el valor de ϕ en las caras de las celdas está dado por las Ecuaciones 2.27 y 2.28.

$$\phi_e = \frac{(\phi_P + \phi_E)}{2} \quad (2.27) \quad \phi_w = \frac{(\phi_W + \phi_P)}{2} \quad (2.28)$$

Al reemplazar estas relaciones en la Ecuación 2.23 y reordenar, la Ecuación discretizada finalmente queda:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (2.29)$$

Donde $a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w)$, $a_w = D_w + \frac{F_w}{2}$ y $a_e = D_e - \frac{F_e}{2}$.

- “**Upwind**”: En el esquema “Upwind” el orden de exactitud es de primer orden, no obstante este presenta una mayor estabilidad para abordar problemas de convección ya que en este se toma en cuenta la dirección e influencia del flujo convectivo. Por este motivo, en este esquema se garantiza el cumplimiento cada una de las propiedades de “Conservativeness”, “Boundedness” y “Transportiveness”. Para este caso, asumiendo un flujo convectivo en la dirección W-E, el valor de ϕ en las caras de las celdas está dado por la influencia del nodo inmediatamente anterior, de acuerdo con las Ecuaciones 2.30 y 2.31.

$$\phi_w = \phi_W \quad (2.30)$$

$$\phi_e = \phi_P \quad (2.31)$$

Al reemplazar y reordenar, la Ecuación discretizada toma la misma forma de la Ecuación **2.29**, donde $a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w)$, $a_w = D_w + F_w$ y $a_e = D_e$.

2D: En dos dimensiones, la Ecuación de transporte y la Ecuación de continuidad para la advección-difusión se escribe como:

$$\frac{d}{dx}(\rho\phi\vec{v}) + \frac{d}{dy}(\rho\phi\vec{v}) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + \frac{d}{dy} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dy} \right) \quad (2.32)$$

$$\frac{d}{dx}(\rho u) + \frac{d}{dy}(\rho v) = 0 \quad (2.33)$$

Realizando un análisis similar al caso 1D la Ecuación discretizada será:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_S\phi_S + a_N\phi_N \quad (2.34)$$

Donde $a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w) + (F_n - F_s)$, $a_w = D_w + \frac{F_w}{2}$, $a_e = D_e - \frac{F_e}{2}$, $a_s = D_s + \frac{F_s}{2}$ y $a_n = D_n - \frac{F_n}{2}$.

2.3.5. Convección natural en medios Porosos

Para el problema de convección natural en medios porosos se debe solucionar la Ecuación de continuidad, de transporte dependiente del tiempo **2.11** y de momento con la aproximación de Boussinesq **2.8**. Estas ecuaciones son normalizadas de acuerdo con las variables adimensionales presentadas en (**Guerrero, 2017**):

Longitud y velocidad

$$\bar{x} = \frac{x}{H} \quad (2.35) \quad \bar{u} = \frac{H}{\Gamma}(u, v, w) \quad (2.36)$$

Presión y Temperatura

$$\bar{P} = \frac{k}{\mu\Gamma}P \quad (2.37) \quad \theta = \frac{T - T_0}{T_0 - T_c} \quad (2.38)$$

Tiempo y número de Darcy-Rayleigh

$$\bar{t} = \frac{t\Gamma}{\sigma H^2} \quad (2.39) \quad Ra = \frac{Hk\beta\rho_0}{\Gamma\mu}(T_0 - T_c) \quad (2.40)$$

Incluyendo las variables adimensionales, las ecuaciones de momento, de transporte de calor y de continuidad adimensionales toman la forma:

$$\bar{u} + \nabla\bar{P} = Ra\theta \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial\bar{t}} - \nabla^2\theta + \bar{u} \cdot \nabla\theta = 0 \quad (2.42)$$

$$\nabla \cdot \bar{u} = 0 \quad (2.43)$$

Para solucionar este problema se usó la aproximación de la función de corriente donde las velocidades del fluido se definen en términos de la función ψ (**Guerrero, 2017**).

$$u = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}, -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (2.44)$$

Al incluir la función de corriente en la definición de la Ecuación de momento adimensional **2.41**, esta se transforma en:

$$-\frac{1}{Ra} \nabla^2 \psi = \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (2.45)$$

El sistema de Ecuaciones **2.41** a **2.43** se resuelve mediante método de punto fijo (**Gue- rrero, 2017**). La Ecuación de transporte de calor **2.42** se discretiza primero en el tiempo usando un esquema implícito y luego en el espacio usando el método de volumen finito con un esquema de diferencias centradas para el cálculo de la magnitud θ en las caras de una de las mallas.

$$a_P \theta_P^{m+1} - a_E \theta_E^{m+1} - a_W \theta_W^{m+1} - a_N \theta_N^{m+1} - a_S \theta_S^{m+1} = a_P \theta_P^m - a_E \theta_E^m - a_W \theta_W^m - a_N \theta_N^m - a_S \theta_S^m - \lambda (b_P \theta_P^m - b_E \theta_E^m - b_W \theta_W^m - b_N \theta_N^m - b_S \theta_S^m + s_P) \quad (2.46)$$

Donde los coeficientes $bp's$ asociados a la iteración m están dados por $b_P = b_E + b_W + b_N + b_S + \frac{\Delta V}{\Delta t}$, $b_W = \frac{A_w}{\delta x} - \frac{u_w^m A_w}{2}$, $b_E = \frac{A_e}{\delta x} - \frac{u_e^m A_e}{2}$, $b_S = \frac{A_s}{\delta y} - \frac{u_s^m A_s}{2}$ y $b_N = \frac{A_n}{\delta y} - \frac{u_n^m A_n}{2}$.

Por otro lado, los coeficientes $ap's$ se definen como: $a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + \frac{\Delta V}{\Delta t}$, $a_W = \frac{A_w}{\delta x}$, $a_E = \frac{A_e}{\delta x}$, $a_S = \frac{A_s}{\delta y}$, $a_N = \frac{A_n}{\delta y}$ y el término fuente $s_P = -\theta^0 \frac{\Delta V}{\Delta t}$.

Como se mencionó previamente las velocidades del fluido en las caras de las celdas están dadas en términos de la función de corriente.

$$u_e^m = \left(\frac{\partial \psi^m}{\partial y} \right)_e \quad (2.47) \quad u_w^m = \left(\frac{\partial \psi^m}{\partial y} \right)_w \quad (2.48)$$

$$u_n^m = \left(\frac{\partial \psi^m}{\partial y} \right)_n \quad (2.49) \quad u_s^m = \left(\frac{\partial \psi^m}{\partial y} \right)_s \quad (2.50)$$

Para la Ecuación de momento **2.45** la Ecuación discretizada toma la forma:

$$a_P \psi_P^{m+1} = a_E \psi_E^{m+1} + a_W \psi_W^{m+1} + a_N \psi_N^{m+1} + a_S \psi_S^{m+1} - s_P \quad (2.51)$$

Donde $a_P = a_E + a_W + a_N + a_S$, $a_W = \frac{\Gamma_w A_w}{\delta x}$, $a_E = \frac{\Gamma_e A_e}{\delta x}$, $a_S = \frac{\Gamma_s A_s}{\delta y}$ y $a_N = \frac{\Gamma_n A_n}{\delta y}$ y el término s_P asociado a la flotabilidad del fluido $s_P = (\theta_e^{m+1} - \theta_w^{m+1}) \delta y$.

Para el método de volumen finito se utilizaron dos mallas desfasadas (Figura **2.5**), una para el cálculo de las temperaturas en los centros de las celdas y la otra para el cálculo de la función de corriente y la definición de las velocidades en las caras de las celdas, lo que facilitará el cálculo de las expresiones **2.47** a **2.50**.

2.3.6. Solucionadores de Ecuaciones algebraicas

Una vez se han discretizado las ecuaciones diferenciales por medio del método de volumen finito, es necesario resolver el sistema de ecuaciones algebraicas que resulta de evaluar las variables en cada uno de los nodos de la malla (**Versteeg H. K., 2007**). En general,

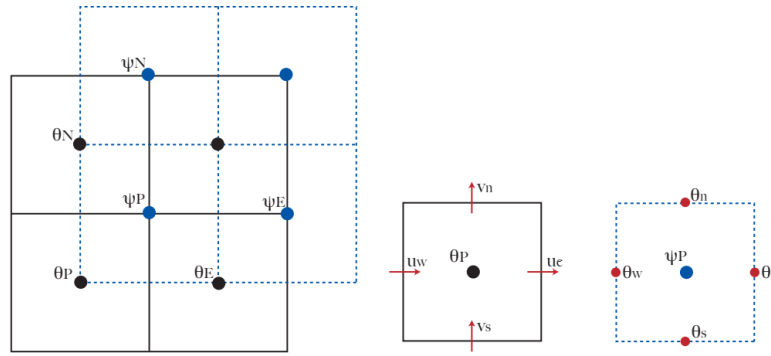


Figura 2.5: Disposición de una malla 2D para el modelado numérico de convección natural en medios porosos (Guerrero, 2017).

existen dos métodos para resolver este sistema de ecuaciones: los métodos directos que, por medio de una serie de operaciones elementales buscan calcular las variables del problema, como el de Cramer o el método de eliminación de Gauss-Jordan y los métodos iterativos, que calculan una aproximación inicial de las variables a partir de las condiciones iniciales del problema y de forma iterativa recalculan cada una de las variables hasta que estas converjan al valor real.

De acuerdo con (Almeida P.R., 1996) se puede demostrar que el costo computacional de los métodos directos es considerable para sistemas de ecuaciones de grandes dimensiones. Para el método de Cramer por ejemplo, se requiere resolver $(n^2 - 1) \times n! + n$ multiplicaciones y divisiones, lo que involucra un mínimo 359 251 210 operaciones para una malla 1D que contenga 10 nodos. Por otro lado, para el método de eliminación de Gauss-Jordan el número de operaciones necesarias para resolver el mismo sistema de ecuaciones es de $\frac{n^3}{2}$ multiplicaciones y divisiones, lo que implica un total de 500 operaciones para la misma malla. Aunque la cantidad de operaciones para este caso no es tan grande como para el primer caso, la principal desventaja que presentan los métodos directos es que se requiere un espacio de memoria de $n \times n$ para el almacenamiento de todos los coeficientes. Los métodos iterativos, por otro lado, sólo necesitan almacenar aquellos coeficientes diferentes de 0, lo que reduce significativamente el espacio de memoria requerido. Esto constituye una gran ventaja para la solución de problemas con matrices tridiagonales o pentadiagonales que son muy comunes en problemas donde se aplica el método de volumen finito.

Cuando se desea evaluar el desempeño de un código en términos de su estabilidad, su velocidad de convergencia o su costo computacional es necesario conocer algunos parámetros como:

- **Tolerancia:** Es el error máximo permitido por el usuario, entre la solución numérica y la solución exacta del problema.
- **Residual:** De forma general, el sistema de ecuaciones algebraicas que resulta de la implementación del método de volumen finito puede expresarse en la forma $\vec{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$. Como se mencionó previamente, en los métodos iterativos se realizan varios ciclos donde las variables son recalculadas y actualizadas aproximándose en cada ciclo a su valor real. Después de un número k de iteraciones es posible encontrar un valor intermedio de la variable $y_j = x_j^{(k)}$ el cual todavía no ha convergido a la solución exacta del problema, de modo que $\vec{A} \cdot \vec{y} \neq \vec{b}$.

De esta forma, el residual $r_j^{(k)}$ se puede definir como la diferencia que existe entre

ambos miembros de la Ecuación, de tal manera que cuando este toma el valor de 0 (o muy cercano a 0) se puede decir que la Ecuación se ha satisfecho para los valores de x_j o en otras palabras que la solución ha convergido.

$$\vec{r} = \vec{b} - \vec{A} \cdot \vec{x} \quad (2.52)$$

- **Error:** Después de una serie de iteraciones, el error para un método iterativo puede definirse como la diferencia entre la solución real \vec{x} y una solución intermedia \vec{y} .

$$\vec{e} = \vec{x} - \vec{y} \quad (2.53)$$

De esta forma, una solución intermedia de la Ecuación $\vec{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ está dada por $\vec{A} \cdot \vec{y} = \vec{b} - \vec{r}$ y, el error y el residual están relacionados por $\vec{A} \cdot \vec{e} = \vec{r}$

2.3.7. Algoritmo de Thomas

El algoritmo de Thomas o algoritmo de matrices tridigonales (TDMA) es un método directo que permite resolver de forma rápida una matriz tridiagonal al aplicar una sustitución hacia atrás. En 2D y 3D este se puede desarrollar de forma iterativa. La ecuación discretizada por el método de volumen finito se puede escribir: $-a_W\phi_W + a_P\phi_P - a_E\phi_E = b$ en 1D y $-a_S\phi_S + a_P\phi_P - a_N\phi_N = a_W\phi_W + a_E\phi_E + b$ en 2D.

Para revisar a detalle la implementación de este método se puede consultar (**Versteeg H. K., 2007**).

2.3.8. Método Gauss-Seidel

Para los métodos iterativos la forma general del sistema de ecuaciones $\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i$ puede reorganizarse al extraer la variable x_i de la sumatoria y posteriormente evaluar esta en una iteración k , en función de las otras variables x_j que ya han sido calculadas para una iteración previa $k - 1$.

Para el método de Gauss-Seidel, particularmente, se parte de una condición inicial $x_j^{(k-1)}$ para cada una de las variables. Estas son evaluadas en una de las ecuaciones del sistema, dando como resultado una primera aproximación para una de las variables $x_j^{(k)}$. Esta primera aproximación $x_j^{(k)}$ junto con las condiciones iniciales $x_j^{(k-1)}$ son reemplazadas en otra de las ecuaciones obteniendo así una nueva aproximación para otra de las variables $x_i^{(k)}$. Este proceso se repite de forma iterativa hasta lograr la convergencia del problema.

$$x_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{i-1} \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} x_j^{(k)} + \sum_{j=i+1}^n \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} x_j^{(k-1)} + \frac{b_i}{a_{ii}} \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (2.54)$$

El residual asociado al método de Gauss Seidel al incluir las aproximaciones de las variables en las iteraciones $x_j^{(k)}$ y $x_j^{(k-1)}$ en **2.52** será:

$$r_i^{(k)} = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k-1)} - a_{ii}x_i^{(k-1)} \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (2.55)$$

Al incluir la definición del residual en el método de Gauss-Seidel, este también puede expresarse de la forma:

$$x_i^{(k)} = x_i^{(k-1)} + \frac{r_i^{(k-1)}}{a_{ii}} \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (2.56)$$

2.3.9. Métodos de Relajación

Los métodos de relajación incluyen un parámetro α el cual puede ayudar a acelerar la convergencia del método en cuestión. Estos métodos pueden ser aplicados a métodos iterativos como el método de Gauss-Seidel. Si el parámetro utilizado es $\alpha = 1$, el método no sufre relajación y se reduce al esquema original. Si se usa un parámetro $\alpha < 1$ el método se conoce como subrelajado y si el parámetro es $\alpha > 1$ se conoce como sobrerrelajado. Este método se basa en el principio de que cualquier residual $r_i^{(k-1)}$ de la Ecuación 2.56 tenderá a 0 cuando $k \rightarrow \infty$. De esta forma, la introducción del parámetro α puede aprovecharse para modificar el camino que seguirá el residual a lo largo de las iteraciones hasta alcanzar la convergencia, pero sin afectar el resultado final (Versteeg H. K., 2007).

$$x_i^{(k)} = x_i^{(k-1)} + \alpha \left[\frac{r_i^{(k-1)}}{a_{ii}} \right] \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (2.57)$$

No existe una forma general de conocer el valor óptimo del parámetro α ya que este depende tanto de las características del problema como de la malla. Sin embargo, para algunos casos particulares se puede llegar a calcular el parámetro de relajación óptimo existen una serie de teoremas que pueden ayudar a (Burden R., 2010).

- **Teorema de Kahan:** Si se cumple que todos los coeficientes de la diagonal principal son diferentes de cero, el radio espectral de la matriz de iteración del método SOR $\rho(T)$ cumple con la condición $\rho(T) \geq |\alpha - 1|$. Esto implica que el método SOR converge cuando $0 < \alpha < 2$.
- **Teorema de Ostrowski-Reich:** Si la matriz de coeficientes del problema A es definida positiva y $0 < \alpha < 2$ el método SOR converge para cualquier aproximación inicial $x^{(0)}$
- Si la matriz de coeficientes del problema A es definida positiva y tridiagonal o pentadiagonal (extendido al problema de 2D), el radio espectral de la matriz de iteración del método SOR y del método de Jacobi $\rho(T_j)$ cumplen con la condición $\rho(T_g) = (\rho(T_j))^2 < 1$ y el parámetro de relajación óptimo está dado de acuerdo con la relación:

$$\alpha = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - (\rho(T_j))^2}} \quad (2.58)$$

Es posible mostrar que para el caso $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = G(x, y)$ definido en R y $u(x, y) = g(x, y)$ definido en S , donde R y S representan el dominio, siendo S el borde de un rectángulo de

dimensiones $l \times l$ y R el interior del mismo, el radio espectral se puede calcular a partir de la relación (**Taniguchi T., 1983**):

$$\rho(T_j) = \frac{1}{2} \left(\cos \left(\frac{\pi}{n_x} \right) + \cos \left(\frac{\pi}{n_y} \right) \right) \quad (2.59)$$

Donde n_x y n_y son el número de nodos de la malla en las direcciones x y y respectivas.

El método de sobrerrelajaciones sucesivas (SOR) aplicado al método de Gauss-Seidel toma la forma:

$$x_i^{(k)} = (1 - \alpha)x_i^{(k-1)} + \frac{\alpha}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k-1)} \right] \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n) \quad (2.60)$$

2.3.10. Método multimalla

Los métodos multimalla se fundamentan en la forma de la propagación del error en mallas de diferentes dimensiones. La propagación del error depende del método iterativo, del tamaño de malla y del esquema de discretización (**Versteeg H. K., 2007**). Como se mencionó previamente en el apartado **2.3.1**, el número de nodos de una malla y su tamaño de celdas definirá las dimensiones de la misma, la exactitud y la calidad de los resultados, así como el número de cálculos que deberán realizarse, la velocidad de convergencia y el tiempo de ejecución del programa. Mallas más gruesas permiten una convergencia más rápida (reducción más acelerada del residual), sacrificando la calidad del resultado final. Por el contrario, una malla muy fina entregará mejores resultados, aunque la disminución del residual será más lenta y el número de iteraciones hasta lograr la convergencia será mayor.

Por lo tanto, se puede inferir que el error tiene diferentes componentes de corto y largo periodo. El error de corto periodo se elimina rápidamente en una malla fina mientras que el error de largo periodo tarda más en desaparecer. Por otro lado en una malla gruesa el error de largo periodo se puede eliminar rápidamente (**Versteeg H. K., 2007**). Por lo que, de forma similar a los métodos de relajación, los métodos multimalla buscan acelerar la convergencia del código al aumentar la velocidad en la reducción del residual, sólo que en este caso no se realiza mediante la inclusión de un parámetro, sino al utilizar mallas de diferentes dimensiones en un mismo problema (Figura **2.6**).

En general, un método multimalla se compone de las siguientes etapas:

Aproximación inicial: Se realiza un pequeño número de ciclos de un método iterativo como el Gauss-Seidel o el SOR en la malla de dimensiones originales para calcular una aproximación inicial y se calcula el residual $r^h = b - A^h \cdot y^h$ correspondiente.

Restricción: El residual calculado para la aproximación inicial es restringido (promediado) a una malla más gruesa r^{2h} . Posteriormente se debe calcular el error $A^{2h} \cdot e^{2h} = r^{2h}$ asociado al residual r^{2h} y con el error se recalcula el residual $r'^{2h} = r^{2h} - A^{2h} \cdot e^{2h}$. Este nuevo residual se restringe nuevamente a una malla aún más fina r^{4h} y se repetirá este proceso hasta alcanzar el número máximo de restricciones r^{nh} . Una vez logrado el número máximo de restricciones se debe calcular el error para la malla más gruesa e^{nh} .

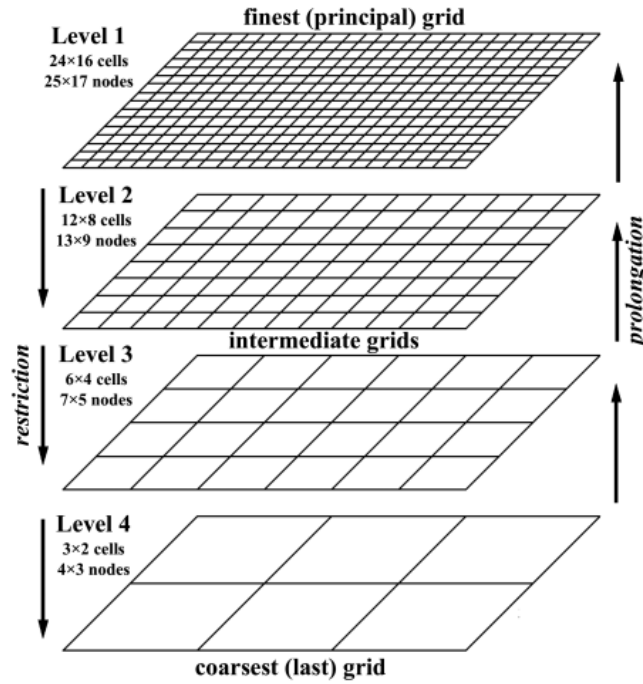


Figura 2.6: Disposición de una malla 2D para el método multimalla (Gerya, 2019).

Prolongación: El error de la malla más gruesa e^{nh} se debe prolongar hacia las mallas más finas por medio de una serie de interpolaciones para los nodos intermedios. Después de cada prolongación, es necesario realizar algunos ciclos de un método iterativo para el error $e^{\frac{ih}{2}}$ con el fin de corregir los errores generados durante el proceso de la interpolación.

Corrección: El error prolongado hacia la malla más fina e^h , debe sumarse a la aproximación inicial $y' = y + e^h$ con el fin de obtener una solución intermedia a la cual se le ha reducido el error de largo periodo. Finalmente, se realizan unos cuantos ciclos del método iterativo para corregir la solución final. Si aún no se ha cumplido el criterio de convergencia, se puede repetir nuevamente esta serie de pasos hasta que el código converja.

Al realizar esta serie de pasos en diferente orden, se puede obtener diferentes formas del ciclo multimalla con diferentes tasas de convergencia. El orden de pasos para la implementación de los ciclos V, W y F se resumen en la Figura 2.7.

Para el ciclo Full Multigrid (FMG), a diferencia que para los ciclos V, W y F; se parte de calcular la aproximación inicial para la malla más gruesa y^h . Esta aproximación inicial luego es prolongada a una malla más fina y^{2h} y se calcula el respectivo residual r^{2h} . Luego para este residual, se realiza un ciclo **V** de una restricción y una prolongación, el cual permite calcular el error e^{2h} que se sumará a la aproximación inicial del mismo nivel $y'^{2h} = y^{2h} + e^{2h}$. Luego, esta aproximación intermedia y'^{2h} se prolonga hacia una capa más refinada y^{4h} y se realiza un ciclo **V** de dos restricciones y dos prolongaciones para calcular el error e^{4h} . Este error nuevamente se suma a la aproximación y^{4h} y se continúa con este proceso hasta alcanzar el número máximo de prolongaciones indicados por el usuario. Una vez alcanzado el número máximo de prolongaciones, si aún no se ha cumplido el criterio de convergencia, se puede realizar de forma iterativa un ciclo **V** de nh restricciones y nh prolongaciones hasta lograr la convergencia del código. La lógica seguida por el ciclo FMG se muestra en la Figura 2.8.

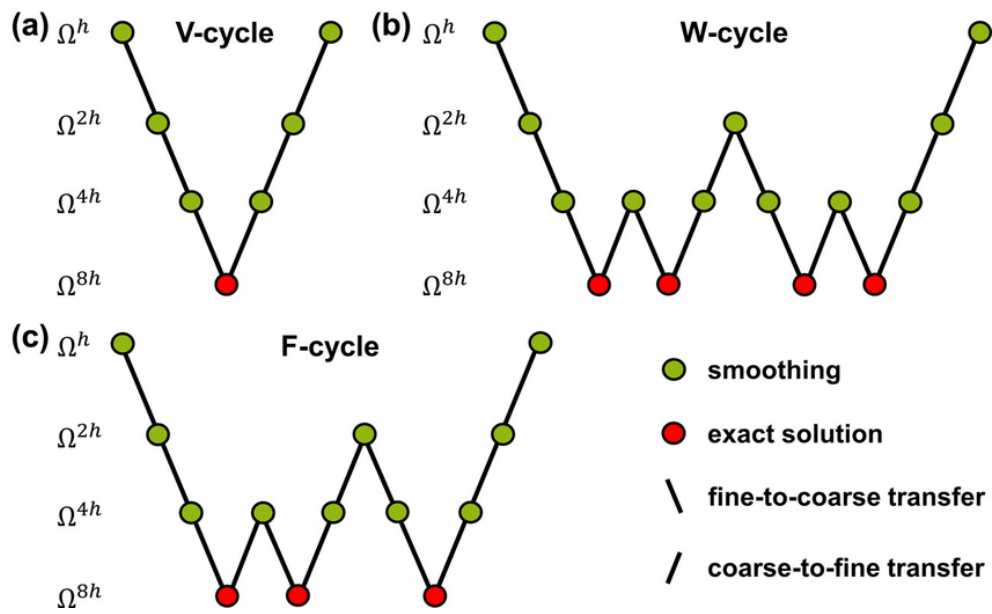


Figura 2.7: Estructura de los ciclos multimalla V,W y F (Gerya, 2019).

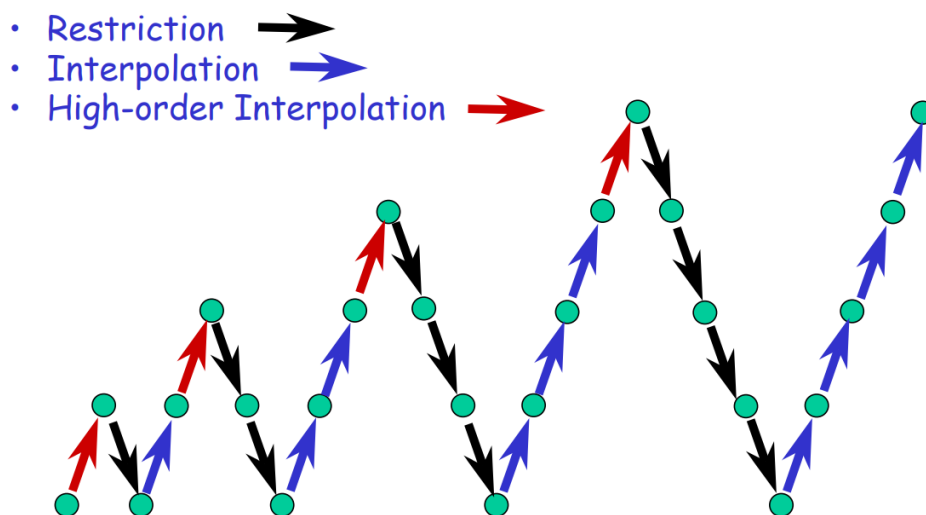


Figura 2.8: Estructura del ciclo FMG (Briggs, 2019).

Capítulo 3

Análisis de resultados

Los resultados obtenidos para los diferentes casos de estudio se analizan aquí en 3 secciones; dos para los fenómenos de conducción y advección-difusión, analizados tanto en 1D como en 2D, y otro para el problema de convección natural estudiado en 2D. Para los casos de conducción y advección-difusión, los códigos implementados corresponden a la solución de una serie de ejemplos propuestos en (Versteeg H. K., 2007), mientras que el problema de convección natural aborda un caso 2D presentado en (Guerrero, 2017). Con el fin de reducir los errores para los tiempos de cómputo medidos en los diferentes códigos, los valores presentados son el resultado del promedio de varias simulaciones. Para una mejor comparación en el comportamiento del residual, éstas gráficas se presentan en escala semilogarítmica y la componente vertical $R_{norm}^{(k)}$ se encuentra normalizada respecto al valor del residual en la primera iteración R_0 y de acuerdo con la expresión:

$$R_{norm}^{(k)} = \frac{R^{(k)}}{R_0} \quad (3.1)$$

3.1. Conducción 1D

En este código se da solución al ejemplo 4.3 de (Versteeg H. K., 2007), el cual consiste en un problema de conducción en una superficie extendida (barra cilíndrica), que cuenta con los siguientes parámetros y cuya geometría puede observarse en la Figura 3.1: temperatura de la base $T_B = 100$ °C, temperatura ambiente $T_\infty = 20$ °C, longitud de la barra $L = 1$ m, constante $hP/(kA) = 25$ m⁻² y su frontera este se encuentra aislada. La Ecuación diferencial que define este sistema y solución analítica están dadas por las Ecuaciones 3.2 y 3.3 respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(kA \frac{\partial T}{\partial x} \right) - hP(T - T_\infty) = 0 \quad (3.2) \quad \frac{T - T_\infty}{T_B - T_\infty} = \frac{\cosh(n(L - x))}{\cosh(nL)} \quad (3.3)$$

En la Figura 3.2 puede observarse el perfil de temperaturas calculado para diferentes tamaños de malla. Un mayor número de nodos representa un menor error y un decaimiento más lento del residual, mientras que longitudes de celdas mayores entregan soluciones menos exactas, con un decaimiento más acelerado del residual y un tiempo de cómputo menor.

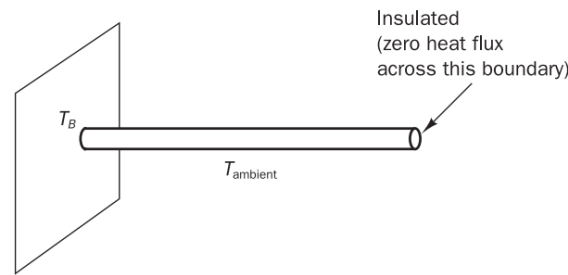


Figura 3.1: Geometría del problema de conducción 1D (Versteeg H. K., 2007).

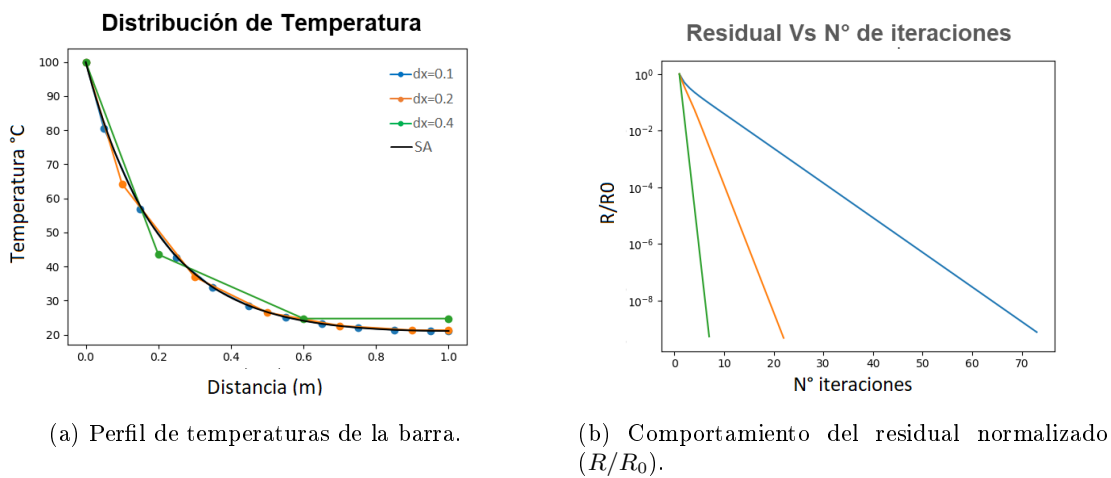


Figura 3.2: Salidas del código de conducción 1D para diferentes longitudes de celda con el algoritmo de Thomas.

Al comparar los resultados obtenidos por los diferentes solucionadores (Tabla 3.1), se observa que el algoritmo de Thomas presenta menores tiempos de cómputo y que al tratarse de un método directo no requiere de la realización de varios ciclos para llegar al resultado final. Dado que se trata de un problema 1D, donde la solución no demanda un alto número de operaciones, el método de Thomas no varía significativamente el tiempo de cómputo al disminuir el tamaño de las celdas.

Tabla 3.1: Comparación de tiempos de cómputo (segundos) y número de iteraciones para los algoritmos de Thomas, Gauss Seidel y SOR para el código de conducción 1D.

Solucionador	Thomas	GS		SOR	
	t_c	t_c	N. iter	t_c	N. iter
10	0.078	0.062	73	0.062	73
20	0.062	0.062	278	0.062	278
100	0.062	2.37	6497	2.37	6497
200	0.062	13.23	25107	13.23	25107
1000	0.094	1519.06	571728	1519.06	571728

Por otro lado, los métodos iterativos requieren de la realización de varios ciclos antes de llegar a la respuesta y se evidencia que al disminuir mucho el tamaño de las celdas el número de ciclos y el tiempo de cómputo aumentan considerablemente en comparación con el método de Thomas. Dado que el parámetro de relajación utilizado fue de $\alpha = 1$ la aplicación del método SOR es equivalente a utilizar el método Gauss-Seidel, lo cual se refleja en los resultados obtenidos.

Al aplicar el criterio **2.59** para encontrar el parámetro óptimo del método SOR se encontró que para este valor, el código no convergía. Por lo que para calcular el parámetro de relajación óptimo se realizaron varias pruebas con diferentes parámetros, encontrando que el parámetro de relajación óptimo para este caso es $\alpha = 1,0$. En la Figura **3.11** se observa que para parámetros mayores o menores a 1 la solución requiere de un mayor número de ciclos antes de converger al resultado final, mientras que para un parámetro de relajación de $\alpha = 1,1$ el código se aleja aún más de la solución. Dado que la selección del parámetro de relajación también depende del número de nodos de la malla estos resultados son válidos para una malla de 10×10 .

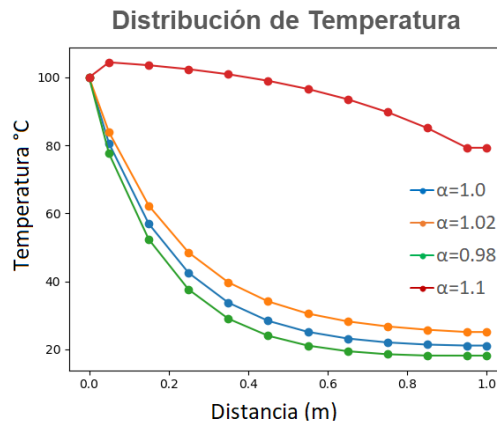


Figura 3.3: Resultados del solucionador SOR en función del parámetro de relajación.

Método Multimalla: Para el caso de conducción 1D usando un método multimalla, se da solución al ejemplo 7.5 de (Versteeg H. K., 2007), cuya geometría se describe en la Figura **3.4** y cuenta con los siguientes parámetros: longitud de la barra $L = 1$ m, área de la sección transversal $A = 0,01$ m², conductividad térmica $k = 5 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$, fuente de calor $g = 20 \frac{\text{kW}}{\text{m}^3}$ y condiciones de frontera $T_A = 100$ °C y $T_B = 500$ °C. La Ecuación diferencial que define este sistema está dada por la Ecuación **3.4** y su solución analítica por la Ecuación **3.5**. En la Figura **3.5** puede observarse el perfil de temperaturas obtenido.

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + g = 0 \quad (3.4) \quad T = \left[\frac{T_B - T_A}{L} + \frac{g}{2k}(L - x) \right] x + T_A \quad (3.5)$$

Al comparar los resultados entregados por los esquemas multimalla V,W y F para una malla 1D de 64 nodos (ver Figura **3.6a**), se encontró que no existe una diferencia significativa en el comportamiento del residual de estos tres esquemas, adicionalmente, el tiempo de cómputo los métodos W y F presentan tiempos muy cercanos y apenas una variación de unas décimas de segundo respecto del esquema V (ver Tabla **3.2**). Por otro lado, si se observa una diferencia significativa de estos tres esquemas en comparación con el FMG, el cual presentó el menor tiempo de cómputo de los 4 y una reducción más acelerada

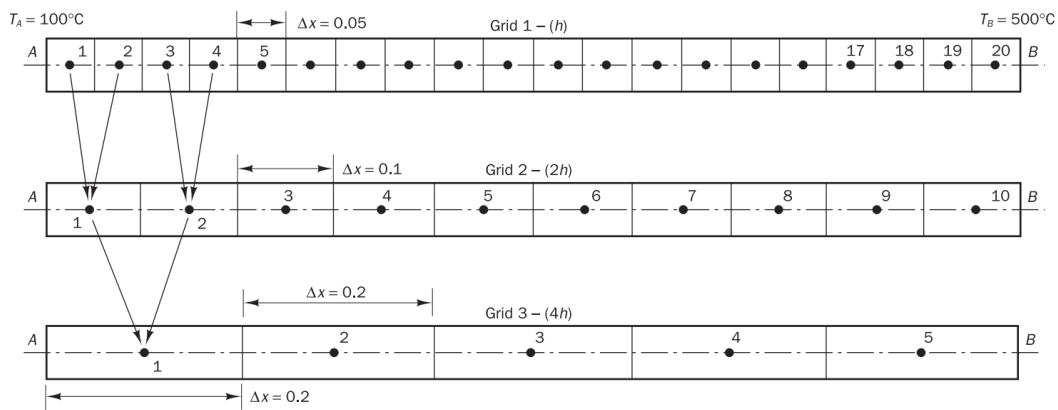


Figura 3.4: Geometría del problema de conducción 1D usando un algoritmo multimalla (Versteeg H. K., 2007).

del residual.

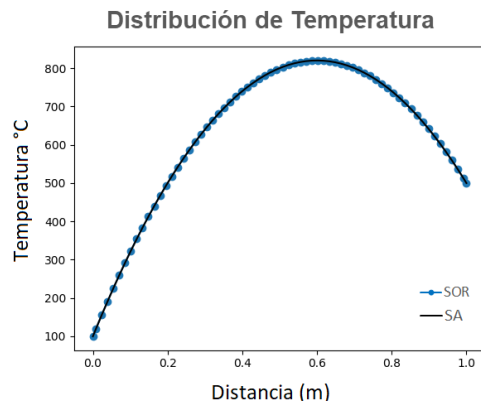
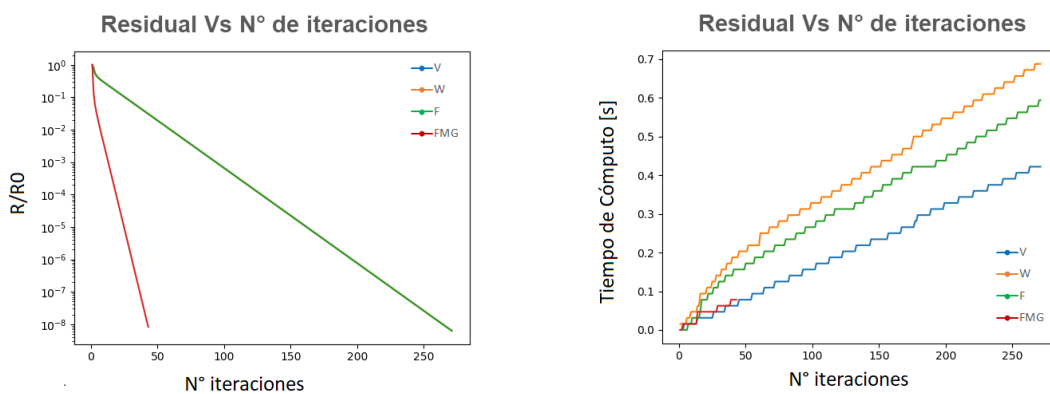


Figura 3.5: Perfil de temperaturas del código de conducción 1D para una malla de 64 nodos.



(a) Residual normalizado (R/R_0) en función del número de iteraciones.

(b) Tiempo de cómputo en función del número de iteraciones.

Figura 3.6: Residual y tiempo de cómputo en función del número de iteraciones para los diferentes esquemas multimalla en una malla de 64 nodos.

En la Tabla **3.2** se puede comparar el rendimiento del código usando los diferentes esquemas multimallas, para mallas con diferentes número de nodos.

Tabla 3.2: Comparación de tiempos de cómputo(segundos) para los esquemas multimalla V,W y F.

nx=ny	V	W	F	FMG
16	0.143	0.063	0.074	0.076
64	0.270	0.239	0.234	0.219
256	10.069	8.984	8.978	7.719
512	100.31	89.31	98.17	77.53

3.2. Conducción 2D

Este código da solución al ejemplo 7.2 de (**Versteeg H. K., 2007**). Se establecen los siguientes parámetros: dimensión de la placa $x = 0,3$ m, $y = 0,4$ m y $z = 1$ cm, conductividad térmica $k = 1000 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$, flujo en la frontera oeste $f_{west} = 500 \frac{\text{kW}}{\text{m}^2}$, la frontera norte se encuentra a 100 °C y la frontera este y sur se encuentran aisladas. La Ecuación diferencial **3.6** representa la Ecuación del sistema y sus condiciones de frontera están dadas por: $T_n = 100$ °C, $T_w = T_0 + \frac{flux}{2k} dx$, y para las fronteras aisladas $\frac{\partial T_e}{\partial x} = 0$ y $\frac{\partial T_s}{\partial y} = 0$.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + g = 0 \quad (3.6)$$

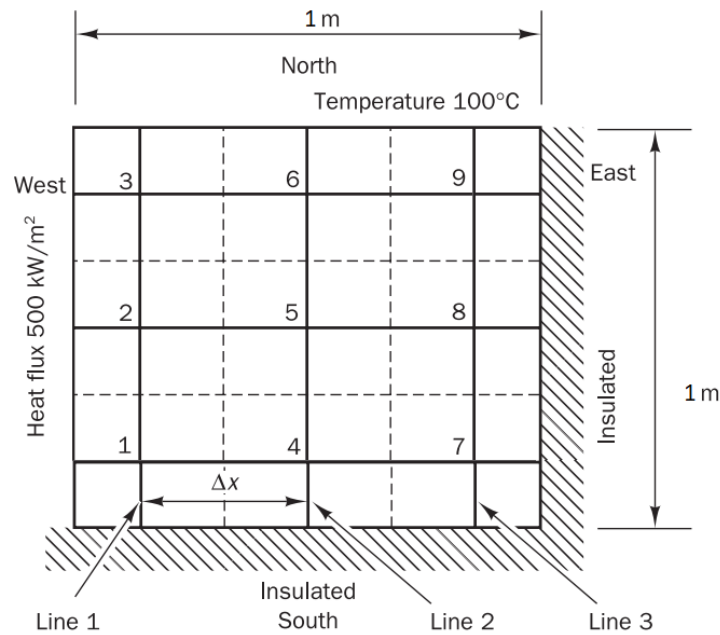
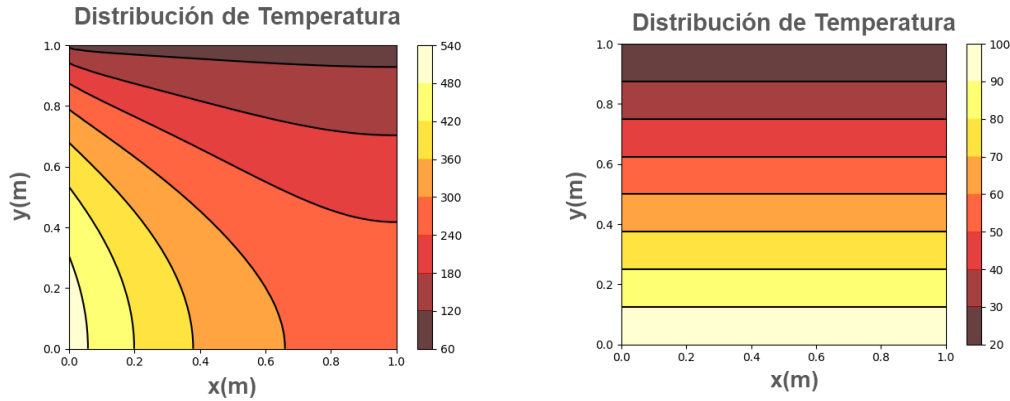


Figura 3.7: Geometría del problema de conducción 2D. Modificado de (**Versteeg H. K., 2007**).

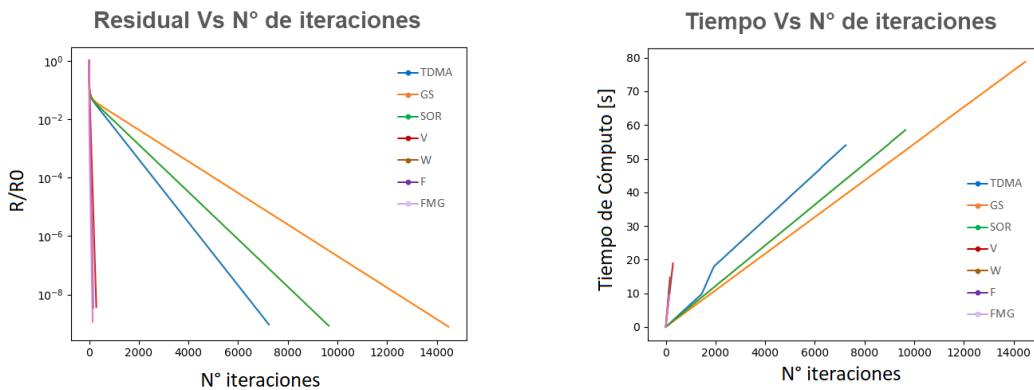
La distribución de temperaturas en el problema de conducción 2D para una placa con sus fronteras este y oeste aisladas y con un gradiente de temperatura en la dirección $N-S$, es una distribución horizontal y uniforme de isotermas las cuales pueden visualizarse en la Figura 3.8b. Por otro lado, la distribución de temperaturas para el problema inicialmente planteado, se puede observar en la Figura 3.8a donde las condiciones de frontera y el flujo de calor en la cara oeste, generan una redistribución de las isotermas.



(a) Distribución de temperaturas de la placa especificada en el problema. (b) Distribución de temperaturas de una placa con: fronteras este y oeste aisladas y con temperatura de 100 °C en la base y 20 °C en la frontera norte.

Figura 3.8: Distribución de temperaturas de una placa de dimensiones $\Delta x = 1,0 \text{ m}, \Delta y = 1,0 \text{ m}$ y $\Delta z = 0,01 \text{ m}$

La Figura 3.9a muestra una marcada diferencia entre los resultados entregados por los métodos tradicionales de una sola malla y los esquemas multimalla. En estos últimos, se observa una disminución más acelerada del residual, lo que a su vez acelera la convergencia del código y disminuye drásticamente los tiempos de cómputo 3.9b.



(a) Comparación en el decaimiento del residual normalizado (R/R_0). (b) Comparación del tiempo de cómputo (segundos).

Figura 3.9: Residual y tiempo de cómputo para los métodos tradicionales de una sola malla de 64×64 nodos y los esquemas multimalla con solucionador SOR.

Posteriormente, se analizó el comportamiento de los métodos multimalla en función de su número de prolongaciones y restricciones. Para los ciclos V,W y F, los cuales parten de

una aproximación inicial en la malla más fina, su tendencia es a disminuir el tiempo de cómputo a medida que aumenta el número de restricciones hasta alcanzar un mínimo, el cual se estabiliza y no cambia significativamente aun al aumentar el número de restricciones. Para el caso del FMG cuya aproximación inicial es calculada en el nivel de malla más grueso, nuevamente su tendencia es a disminuir cuando se aumenta el número de prolongaciones, no obstante, al alcanzar el valor mínimo su tendencia es a crecer si se sigue aumentando el número de prolongaciones. La Figura 3.10 muestra tendencias similares para dos mallas de diferentes número de nodos. En la Tabla 3.3 se pueden consultar los resultados para una malla de 64×64 nodos.

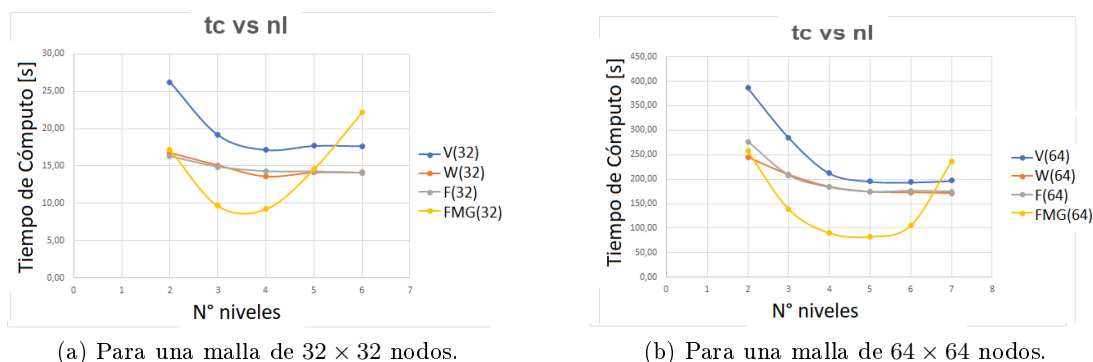


Figura 3.10: Tiempo de cómputo en función del número de prolongaciones y restricciones para los diferentes esquemas multimalla.

Tabla 3.3: Tiempos de cómputo para los métodos multimalla 2D en función del número de niveles de malla, con una resolución de 64×64 nodos.

nl	V	W	F	FMG
2	386.41	244.99	276.71	257.57
3	285.36	209.38	208.48	139.39
4	212.57	184.63	183.68	90.46
5	195.68	174.16	174.32	82.87
6	193.85	172.93	176.11	105.73
7	197.04	171.26	174.77	236.32

En la Tabla 3.4 se puede comparar el rendimiento del programa para los diferentes solucionadores implementados. Aquí los resultados son consistentes con los obtenidos para el caso de conducción 1D. El algoritmo de Thomas presenta el menor tiempo para los solucionadores tradicionales seguido por el método SOR y Gauss-Seidel. En este caso el método SOR tiene una convergencia más acelerada que el método de Gauss-Seidel para un parámetro de relajación de 1.2.

De los esquemas multimalla, el FMG presenta el menor tiempo de cómputo para cada una de las mallas utilizadas, seguido por los métodos W y F y por último el ciclo V. Al aplicar la relación 2.60 para el cálculo del parámetro de relajación óptimo del método SOR para una malla de 64×64 nodos, se encontró que este era de 1.9 el cual es una muy buena aproximación y ayudó a acelerar aún más la convergencia del código. Los resultados obtenidos utilizando este parámetro de relajación pueden ser consultados en la misma

tabla para los valores marcados con asterisco(*). De aquí se evidencian los beneficios en la implementación de los métodos SOR y multimalla, pasando de tiempos de cómputo de 1203,74 s para el Gauss-Seidel o 743,85 s para el algoritmo de Thomas a tiempos de 153,21 s para el método SOR e incluso de 19,92 s en la combinación del método SOR con el esquema multimalla FMG.

Tabla 3.4: Comparación de tiempos de cómputo (segundos) para los métodos tradicionales de una sola malla y los esquemas multimalla en 2D, para 3 niveles de malla.

nx=ny	Thomas	GS	SOR	V	W	F	FMG
16	4.01	5.29	3.39	1.68	1,29	1.72	1.09
32	49.90	88.19	61.25	19.15	15.07	14,87	9.64
64	743.85	1203.74	891.28	285.36	209.38	208.48	139.39
64*	—	—	153.21	46.84	27.50	39.34	19.92

3.3. Advección-difusión 1D

Para el caso de advección-difusión se desarrolló el ejemplo 5.1 de (**Versteeg H. K., 2007**) que cuenta con la definición de los siguientes parámetros: longitud $L = 1\text{m}$, densidad del fluido $\rho = 1 \text{ Kg/m}^3$, coeficiente de difusividad $\Gamma = 0,1 \frac{\text{Kg}}{\text{ms}}$ y condiciones de frontera $\phi_0 = 1$ y $\phi_L = 0$. Las Ecuaciones diferenciales que definen este sistema están dadas por las Ecuaciones 3.7 y 3.8.

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (3.7) \quad \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \quad (3.8)$$

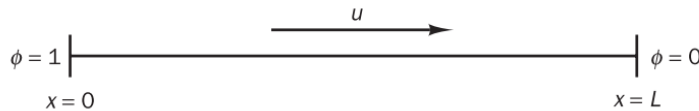
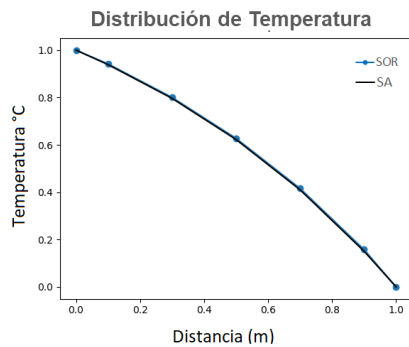


Figura 3.11: Geometría del problema de advección-difusión 1D (**Versteeg H. K., 2007**).

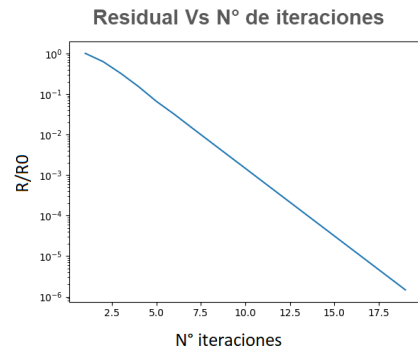
$$\phi(x) = \frac{2,7183 - e^x}{1,7183} \quad (3.9) \quad \phi(x) = 1 + \frac{1 - e^{25x}}{7,2x10^{10}} \quad (3.10)$$

Se analizan dos casos, el primero para una velocidad de flujo $u = 0,1 \text{ m/s}$ y luego para $u = 2,5 \text{ m/s}$ cuyas soluciones analíticas están dadas por las Ecuaciones 3.9 y 3.10 respectivamente. Los resultados obtenidos para los dos casos con sus residuales correspondientes se presentan en la Figura 3.12. Aquí, se observa que el residual decae apropiadamente para el caso 1 y el caso 2 con un tamaño de celdas de $\Delta x = 0,05 \text{ m}$, mientras que para el caso 2 con un tamaño de celda mayor, $\Delta x = 0,2 \text{ m}$ el residual diverge y la respuesta se aleja del resultado teórico. Esto guarda coherencia con los resultados predichos en (**Versteeg H. K., 2007**), donde se muestra que para que el esquema de diferencias centradas cumpla con las propiedades de *Boundedness* y *Transportiveness*, se debe cumplir con la condición de que el número de Péclet sea menor a dos $F_e/D_e = P_e < 2$.

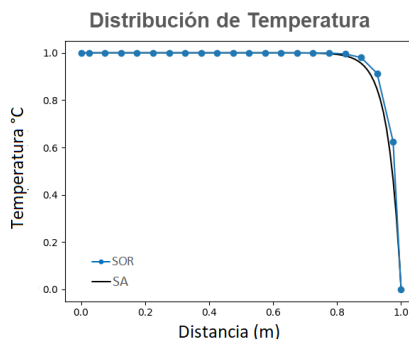
Para el caso 2, el número de Péclet establece la condición $\delta x < \frac{2\Gamma}{\rho u}$ que restringe la longitud de las celdas a un tamaño $\delta x < 0,08$. Al no cumplirse esta condición, con un tamaño de celda $\Delta x = 0,2$ m, se obtienen resultados inestables que divergen de la solución real (Figuras 3.12e y 3.12f). Estas dificultades pueden ser solucionadas al utilizar un tamaño de celda adecuado como se hizo para $\Delta x = 0,05$ m o mediante la implementación de un esquema diferente para calcular las propiedades de las caras de las celdas, como se mencionó en el apartado 2.3.4. En la Figura 3.14, por ejemplo, se puede apreciar la diferencia entre la implementación de los esquemas de diferencias centradas y el “Upwind”.



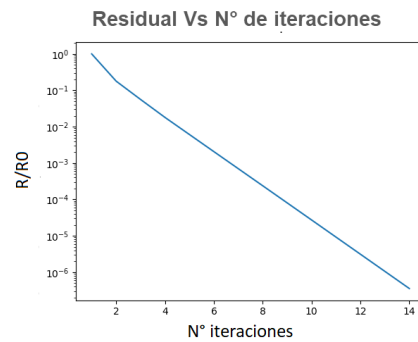
(a) Caso 1: Perfil de temperaturas con $u = 0,1$ m/s y $\Delta x = 0,2$ m



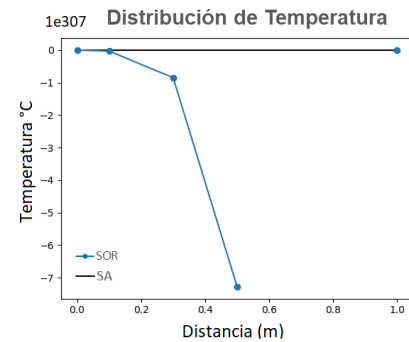
(b) Caso 1: Residual normalizado (R/R_0) con $u = 0,1$ m/s y $\Delta x = 0,2$ m



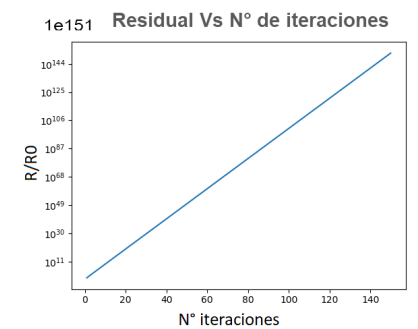
(c) Caso 2: Perfil de temperaturas con $u = 2,5$ m/s y $\Delta x = 0,05$ m



(d) Caso 2: Residual normalizado (R/R_0) con $u = 2,5$ m/s y $\Delta x = 0,05$ m



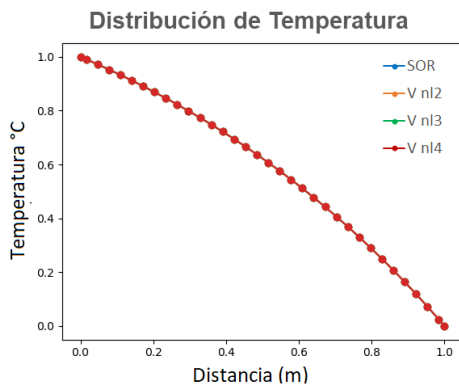
(e) Caso 2: Perfil de temperaturas con $u = 2,5$ m/s y $\Delta x = 0,2$ m



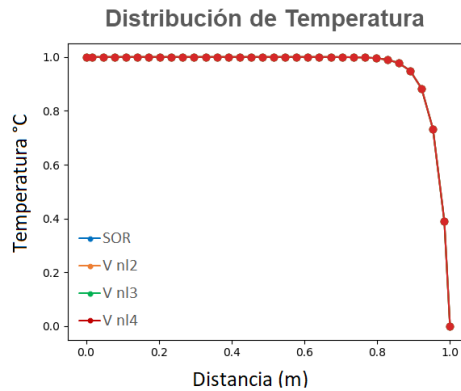
(f) Caso 2: Residual normalizado (R/R_0) con $u = 2,5$ m/s y $\Delta x = 0,2$ m

Figura 3.12: Dos casos para el problema de advección-difusión 1D.

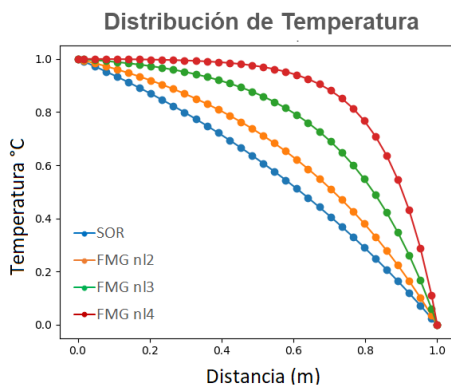
Por una lado se tiene que el esquema de diferencias centradas entrega una solución más cercana a la solución analítica y que el residual presenta una reducción más acelerada dado su nivel de segundo orden de exactitud, no obstante para tamaños de malla que no sean adecuados, el método puede ser inestable y presentar oscilaciones espurias como se observa en la Figura 3.14. Por el contrario, el esquema “Upwind” aunque presenta una solución menos exacta, con una velocidad de convergencia menor, posee una mayor estabilidad ya que no se presentan estas oscilaciones artificiales.



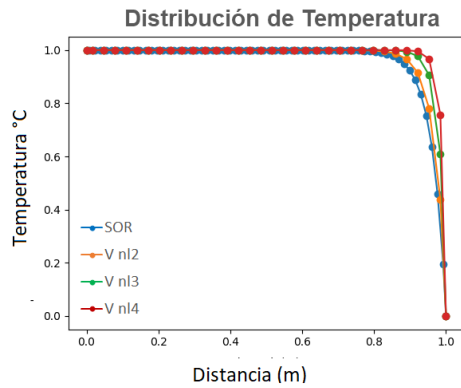
(a) Caso 1 para 2,3 y 4 prolongaciones del esquema V.



(b) Caso 2 para 2,3 y 4 prolongaciones del esquema V.



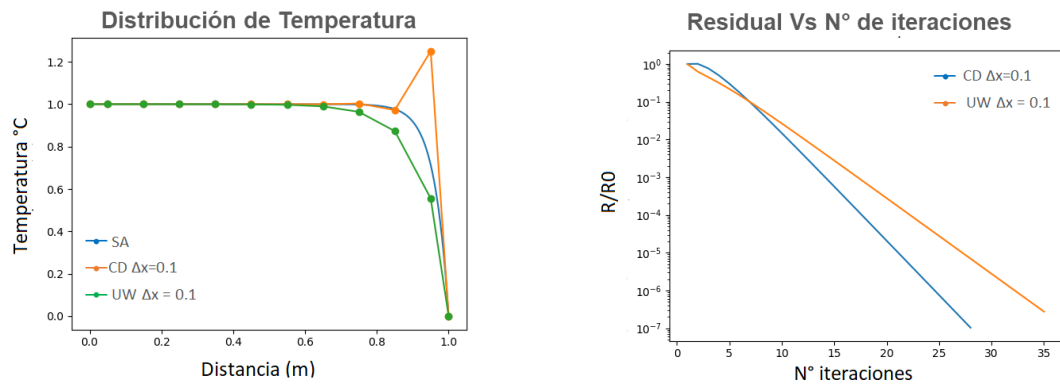
(c) Caso 1 para 2,3 y 4 prolongaciones del esquema FMG.



(d) Caso 2 para 2,3 y 4 prolongaciones del esquema FMG.

Figura 3.13: Aplicación de los esquemas multimalla V y FMG para los casos 1 y 2 en una malla de 32 nodos.

Al implementar los esquemas multimalla, se puede observar en las Figuras 3.13a y 3.13b que para los casos de advección-difusión mencionados previamente, los esquemas V, W y F cumplen con las condiciones necesarias de estabilidad para diferentes número de restricciones y con tamaños de malla que cumplan con la condición $Pe < 2$, sin embargo, este no es el caso para el método FMG. Dado que este parte de una solución inicial desde mallas más gruesas, la cual debe ser interpolada hacia niveles de malla más finos, es necesario cumplir con esta condición para todos los niveles de malla, con el fin de evitar una propagación del error hacia niveles de mallas superiores y evitar una falsa difusión (Figuras 3.13c y 3.13d).



(a) Perfil de temperaturas.

(b) Comportamiento del residual.

Figura 3.14: Comparación de los esquemas de diferencias centradas y el “Upwind” para una longitud de las celdas de $\Delta x = 0,1$.

3.4. Advección-difusión 2D

Aquí se analiza un caso similar al de advección-difusión 1D, pero extendido a 2D. Como se observa en la Figura 3.15, las fronteras este y oeste se encuentran aisladas, mientras que las fronteras norte y sur se encuentran a una temperatura fija. A diferencia del problema de conducción 2D, en este caso no existe un flujo de calor hacia el sistema, por lo que la distribución de las isotermas es asociada principalmente al transporte convectivo generado por el gradiente de temperatura.

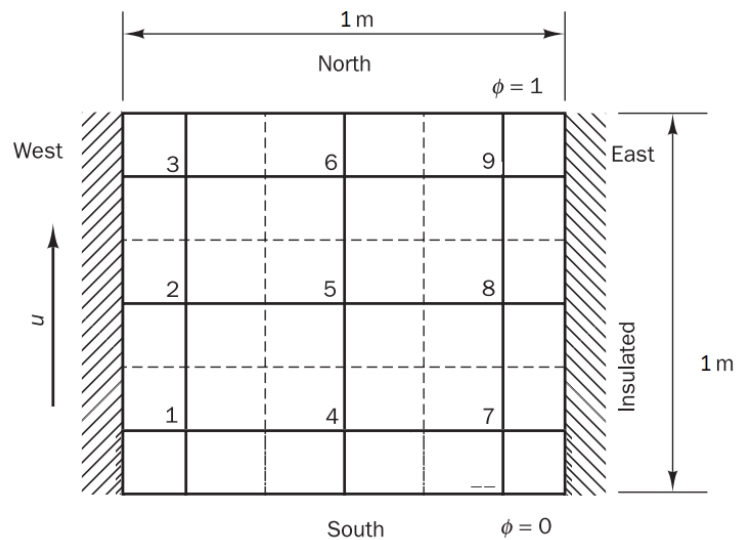


Figura 3.15: Geometría del problema de advección-difusión 2D. Modificado de (Versteeg H. K., 2007).

En la implementación de los esquemas multimalla nuevamente se observa que el método V presenta mejores tiempos en comparación con el método SOR (Ver Tabla 3.5), mientras que el FMG presenta una falsa difusión para los tamaños de malla estudiados.

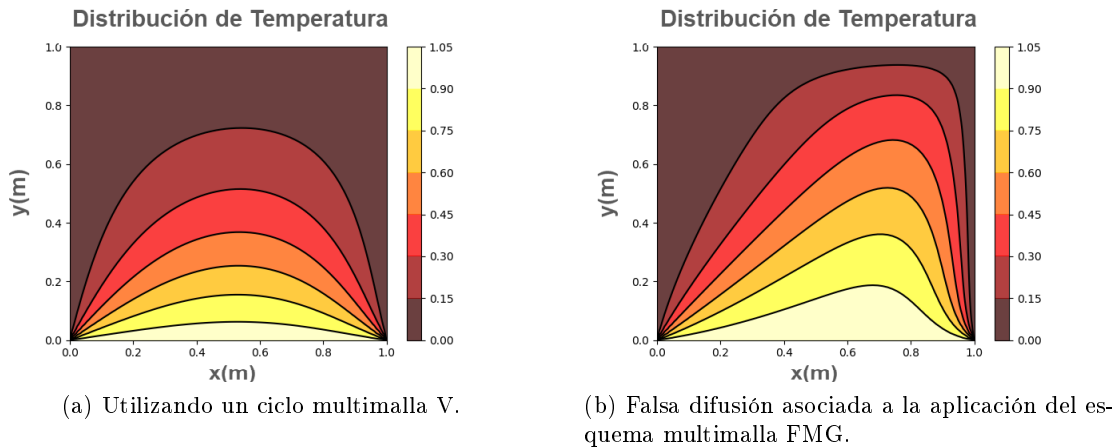


Figura 3.16: Perfil de temperaturas para el fenómeno de advección difusión 2D usando un método multimalla V y FMG.

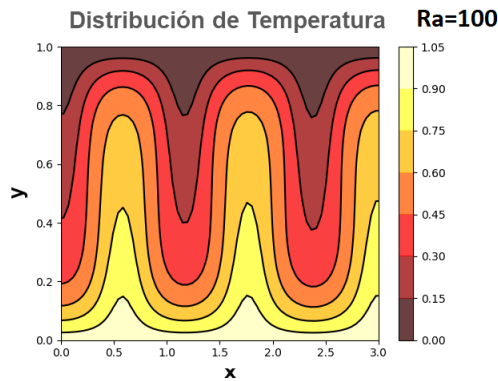
Tabla 3.5: Comparación de tiempos de cómputo (segundos) para el método SOR de una malla y el esquema multimalla V en el problema de advección-difusión 2D.

nx=ny	SOR	V
16	0.39	0.28
32	4.81	2.38
64	77.48	26.22

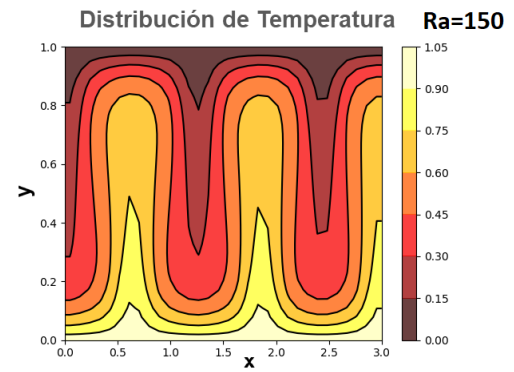
3.5. Convección natural 2D

Para el análisis del problema de convección natural, se compararon los resultados entregados por el método SOR de una sola malla, con el esquema multimalla V de 2 niveles. Esto se realizó para 2 diferentes números de Rayleigh $R = 100$ y 150 y para diferentes tamaños de celda. En la Figura 3.17 se muestran las salidas del código de convección natural para la función de temperatura, la función de corriente y el número de Nusselt para una malla de 32×32 nodos y para un total de 8000 pasos temporales. Los resultados obtenidos por los métodos multimalla para la función de temperatura y la función de corriente, exhiben un comportamiento consistente con los entregados por el método SOR y los reportados por (Guerrero, 2017).

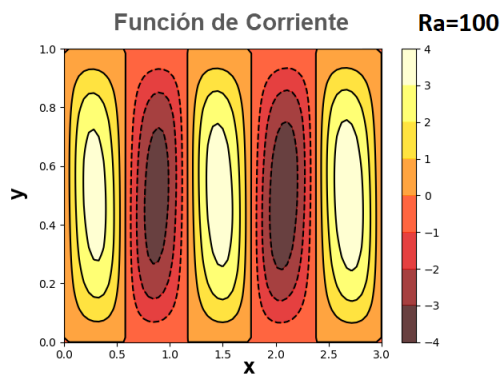
Esto se evidencia de manera más detallada en el número de Nusselt global para los diferentes pasos de tiempo. Esta magnitud permite apreciar la evolución temporal de los diferentes códigos. En las Figuras 3.17e y 3.17f se puede comparar el comportamiento del número de Nusselt global para los números de Rayleigh $R_a = 100$ y $R_a = 150$. En estas, se observa que la convección se está llevando a cabo, en términos generales, de manera equivalente en los tres códigos; iniciando la convección y encontrando su punto de estabilidad en periodos de tiempos semejantes. Estos resultados a su vez, permiten validar el funcionamiento del código multimalla.



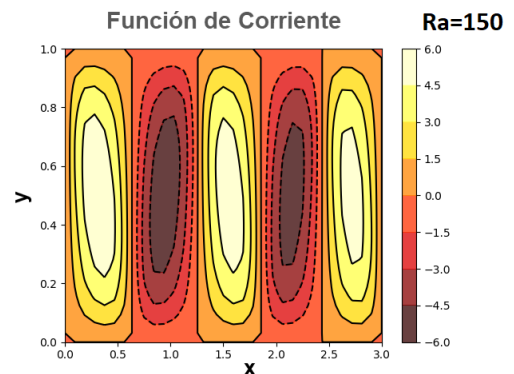
(a) Campo de temperaturas para un número de Rayleigh de 100.



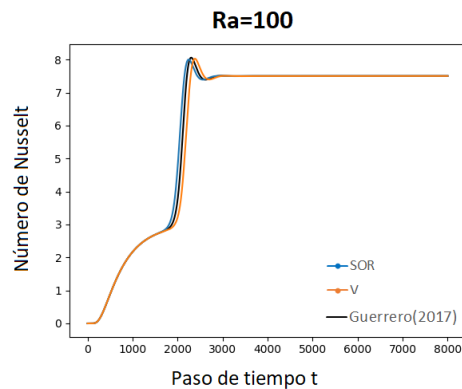
(b) Campo de temperaturas para un número de Rayleigh de 150.



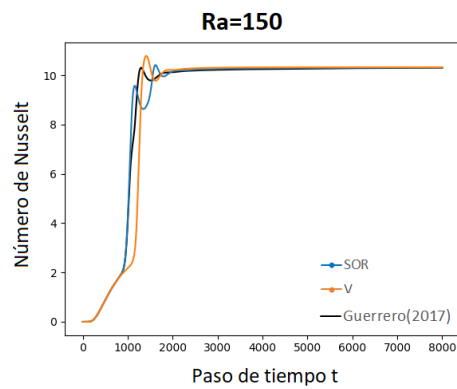
(c) Función de corriente para un número de Rayleigh de 100.



(d) Función de corriente para un número de Rayleigh de 150.



(e) Comparación del número de Nusselt usando el método SOR y el método multimalla para un número de Rayleigh de 100.

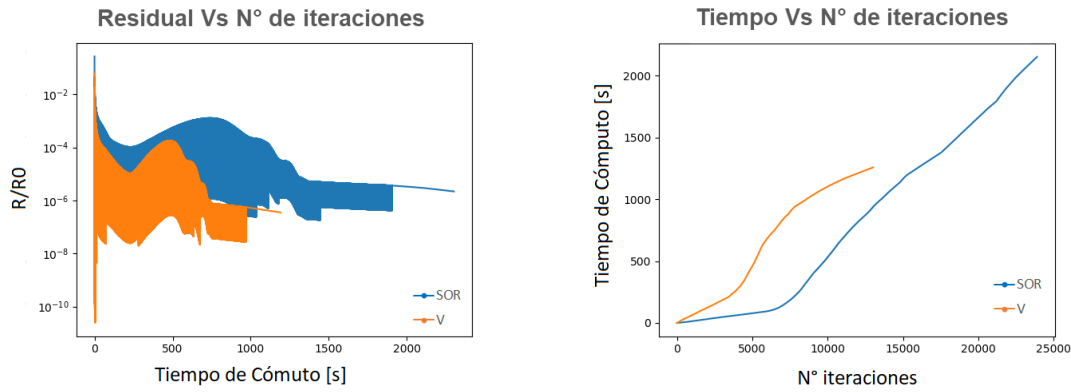


(f) Comparación del número de Nusselt usando el método SOR y el método multimalla para un número de Rayleigh de 150.

Figura 3.17: Salidas del código de convección natural.

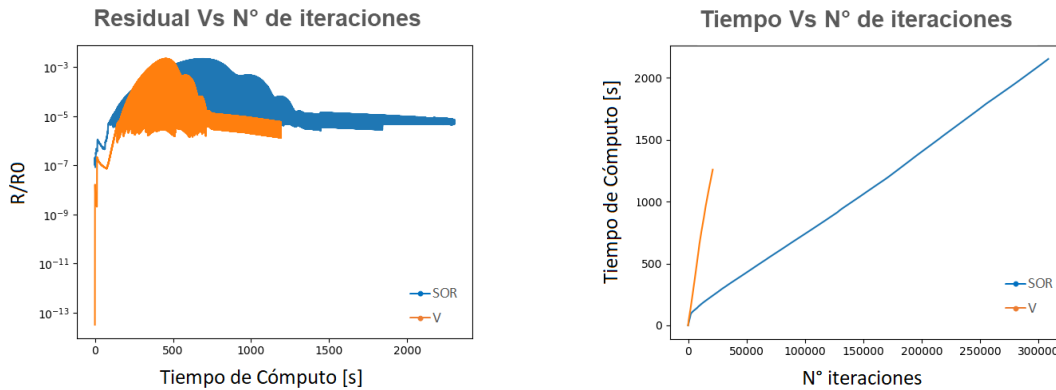
En la Figura 3.18 se puede comparar el comportamiento del residual y el tiempo de cómputo para la función de temperatura y la función de corriente al usar el método SOR de una sola malla y el método multimalla. Se puede apreciar que el método multimalla contribuye a reducir significativamente la magnitud del residual, tanto en la función de temperatura como en la función de corriente, lo que ayuda a que el código converja más rápido. Los tiempos de cómputo para diferentes tamaños de celda pueden ser consultados

en la Tabla 3.6 y en la Figura 3.19 se puede apreciar la diferencia entre el tiempo de cómputo para los métodos SOR y multimalla V.



(a) Comparación del residual para la función de temperatura.

(b) Comparación del tiempo de cómputo (segundos) para la función de temperatura.



(c) Comparación del residual para la función de corriente.

(d) Comparación del tiempo de cómputo (segundos) para la función de corriente.

Figura 3.18: Comparación del residual y tiempo de cómputo (segundos) entre el método SOR y el esquemas multimalla V para la función de temperatura y la función de corriente en una malla de 32×32 nodos.

Tabla 3.6: Comparación de tiempos (segundos) entre el método SOR de una sola malla y el esquema multimalla V para el problema de convección natural 2D y número de Rayleigh=100. El valor presentado con asterisco (*) corresponde a los resultados para un número de Rayleigh=150.

$n_x=n_y$	SOR	V
8	204.48	119.67
16	654.50	403.64
32	2152.47	1192.00
32*	4970.25	2144.70
50	4351.48	2944.00

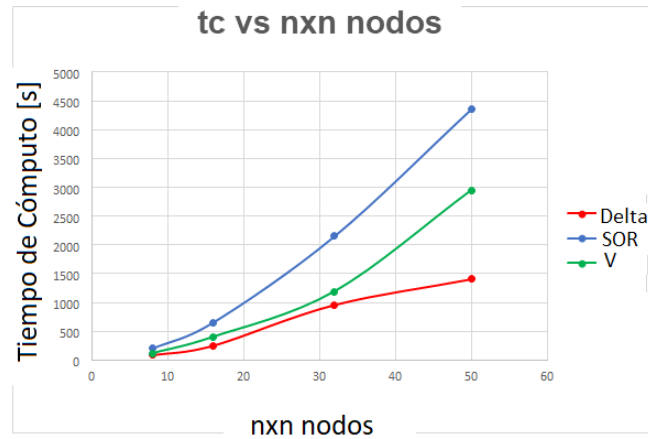


Figura 3.19: Tiempos de cómputo del método SOR y método multimalla en función del número de nodos.

Finalmente, en la Figura 3.20 se muestra la diferencia en el número de Nusselt Global para los códigos implementados en este trabajo (método SOR de una malla y el esquema multimalla) y los resultados reportados por (Guerrero, 2017). Esto se calculó mediante el promedio de la diferencia porcentual del número de Nusselt para los diferentes pasos de tiempo (Ecuación 3.11). La variación en la tendencia de la curva puede estar relacionada con la posibilidad de presentar diferentes configuraciones de celdas convectivas en el estado estacionario en función de parámetros como la resolución de la malla o el método de discretización (Guerrero F.J., 2018). No obstante es importante realizar un estudio más a detalle de como la evolución del algoritmo multimalla puede influir en la configuración final del estado estacionario.

$$Ng_{(dif)} = \sum_{i=1}^{itmax} \frac{|Ng_i - ng_i|}{Ng_i} \quad (3.11)$$

Donde $Ng_{(dif)}$, representa la diferencia porcentual media del número de Nusselt, $itmax$ el número máximo de pasos temporales, Ng el valor del número de Nusselt global reportado por (Guerrero, 2017) y ng el número de Nusselt calculado por los métodos implementados en este trabajo.

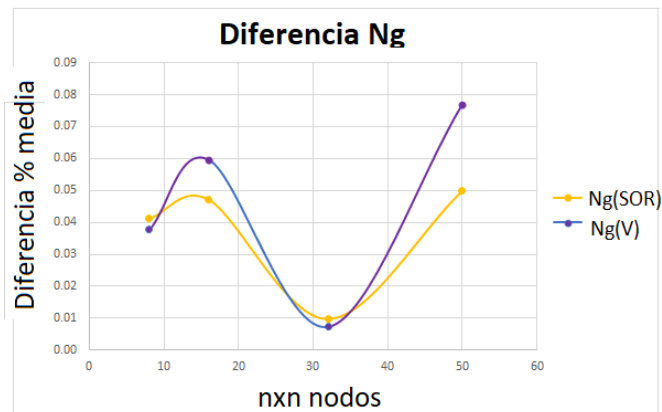


Figura 3.20: Diferencia porcentual del número de Nusselt para diferentes números de celdas.

Capítulo 4

Conclusiones

- Para poder seleccionar de manera adecuada un método numérico que resuelva un problema de la manera más óptima, es necesario considerar las características de los diferentes métodos como su estabilidad, su costo computacional, su exactitud, la velocidad de convergencia, el comportamiento del residual y particularmente para el método SOR, el parámetro de relajación. Además, se deben considerar las características de la malla que mejor se ajusten al modelo como el tipo de discretización, el tamaño de las celdas y el número de nodos.
- Al comparar los diferentes esquemas multimalla, se encontró que el método FMG presentó un menor tiempo de cómputo para los diferentes casos estudiados de conducción y advección-difusión, sin embargo, se debe tener cuidado con su implementación en procesos convectivos, ya que si no se garantiza el cumplimiento de las condiciones de “*Conservativeness*”, “*Boundedness*” y “*Transportiveness*”, se puede llegar a generar una falsa difusión o que el código diverja.
- Los métodos multimalla suponen la programación de códigos más robustos y complejos a comparación de los métodos directos e iterativos tradicionales, no obstante, estos poseen la gran ventaja de ayudar a reducir el error y acelerar la convergencia de los algoritmos. Esta característica puede ser de gran utilidad en la simulación de problemas de convección natural donde se demanda un alto costo de recursos computacionales.
- Si bien el método multimalla V entregó un mejor rendimiento en la simulación de convección natural en comparación con los métodos de una sola malla, es importante realizar un análisis más detallado para estudiar su comportamiento en función de las diferentes propiedades de la malla, así como la implementación de otros esquemas multimalla como el FMG, el cual podría entregar aún mejores resultados que el esquema V.

Apéndice A

Códigos implementados

Los códigos desarrollados en este trabajo pueden ser consultados en el enlace <https://github.com/cdquintero/CIPM>.

A.1. Conducción y advección-difusión

Los códigos de conducción y advección-difusión en 1D y 2D comparten una estructura similar. El diagrama de flujo **A.1** resume los pasos para la solución del problema y muestra la lógica seguida por el programa.

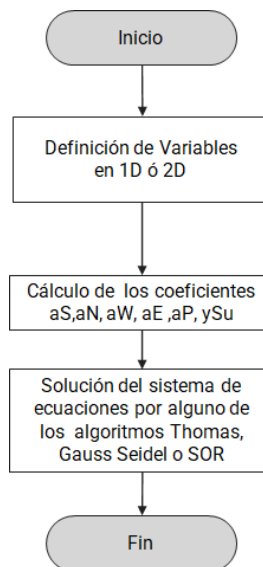


Figura A.1: Diagrama de flujo de para los códigos de conducción y advección-difusión en 1D y 2D.

Tabla A.1: Descripción de las funciones implementadas para los códigos de conducción y advección difusión en 1D y 2D.

Sección	Descripción
Inicio	Se definen las bibliotecas y se inicializan variables y arreglos.

Sección	Descripción
EcDiscreta	Se establecen las ecuaciones que definen cada uno de los coeficientes aP's en 1D y 2D.
Solver: Thomas, Gauss-Seidel, SOR	Se establecen las tres funciones de manera independiente. Cada una de estas recibe los coeficientes aP's calculados previamente, así como una condición inicial y devuelve la distribución de temperatura en condiciones de equilibrio, el residual y el número de iteraciones.
Boundaries	Se encarga de incluir las condiciones de frontera al vector de temperaturas.
Mallado	Crea el vector espacial que define el dominio del problema.
PlotT	Toma como parámetros de entrada el vector espacial y la distribución de temperaturas calculado previamente y grafica la distribución de temperaturas.
Programa principal	Desde el programa principal se hace el llamado de todas las funciones.

A.2. Convección natural

El código de convección natural se implementó de acuerdo al algoritmo (Ver figura **A.2**) establecido en (**Guerrero, 2017**). En este caso, se deben incorporar funciones independientes para la solución de la función de temperatura y la función de corriente. Adicionalmente, es necesario modificar el programa principal, incluyendo una serie de ciclos para la implementación del método de punto fijo y de los pasos temporales.

Tabla A.2: Descripción de las funciones utilizadas para el código de convección natural 2D.

Sección	Descripción
Inicio	Se definen las bibliotecas y se inicializan variables y arreglos.
FT	Se establecen las ecuaciones que definen los coeficientes aP's para la función de temperaturas.
FF	Se establecen las ecuaciones que definen los coeficientes aP's para la función de corriente.
Solver: SOR2D	Para este caso se implementó el método SOR en 2D con un parámetro de sobrerrelajación de $\alpha = 1,2$.
VField	Esta función calcula el campo de velocidades.
InterpolateToNodesUs	Interpola el vector de velocidades U en la componente x de las caras de las celdas.
InterpolateToNodesVs	Interpola el vector de velocidades V en la componente y de las caras de las celdas.
Nusselt	Calcula el número de Nusselt global al finalizar todos los pasos de tiempo.
Mallado	Crea el vector espacial que define el dominio del problema.
PlotUV	Grafica la función vectorial de velocidades en 2D.

Sección	Descripción
PlotT	Esta función permite graficar tanto la distribución de temperaturas como la función de corriente.
Programa principal	Desde el programa principal se ejecutan los ciclos iterativos del método punto fijo y los pasos temporales y se hace el llamado de todas las funciones.

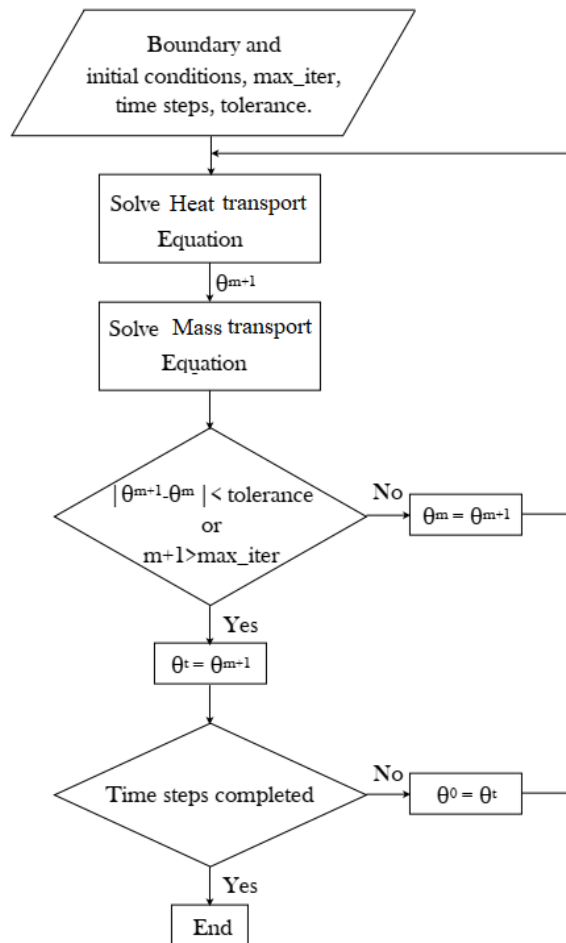


Figura A.2: Algoritmo iterativo del método punto fijo (Guerrero, 2017).

A.3. Métodos Multimalla

Para la creación del código multimalla fue necesario agregar una serie de funciones que permitiera realizar las restricciones y prolongaciones de los diferentes niveles de malla. A continuación, se explica brevemente cada una de las funciones que componen este código.

Para una mejor comprensión de la forma como trabaja este código, el diagrama de flujo A.3 muestra la lógica seguida por el programa.

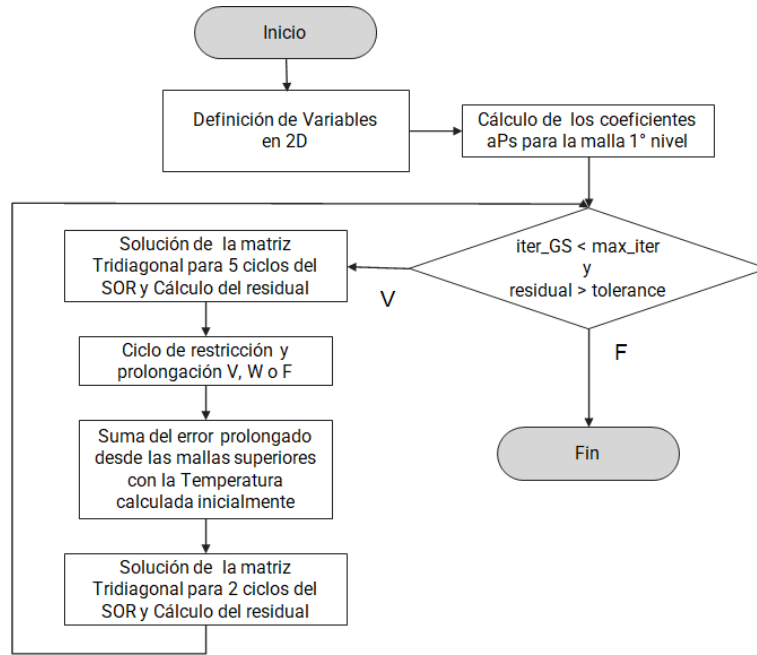


Figura A.3: Diagrama de flujo de para lo métodos multimalla V, W y F.

Tabla A.3: Descripción de las funciones utilizadas para los códigos multimalla.

Sección	Descripción
Inicio	Para una implementación simple y general del código mutimalla se optó por definir los coeficientes aPs y la temperatura como listas.
Parametros	Se encarga de crear vectores de diferentes tamaños necesarios para almacenar los diferentes parámetros y coeficientes aP's para cada nivel de malla. Cada uno de estos vectores se almacenan en una lista.
Residual	Para facilitar el cálculo del residual en los diferentes niveles se decidió crear una función aparte para el cálculo del residual dado que este proceso será necesario realizarlo en repetidas ocasiones y no sólo durante el llamado del solucionador.
Rnorm	Se encarga de normalizar y almacenar el vector residual.
Restriction	Calcula el vector residual para los ciclos multimalla V,W y F en niveles de malla más gruesos y lo almacena en una lista.
RestrictionFMG	Calcula el vector residual para el ciclo multimalla FMG en niveles de malla más gruesos y lo almacena en una lista.
Prolongation	Calcula el vector error para los ciclos multimalla V,W y F en niveles de malla más finos y lo almacena en una lista.
ProlongationFMG	Calcula el vector error para el ciclo multimalla FMG en niveles de malla más finos y lo almacena en una lista.
Interpolation y Prom	Estas funciones se encargan de promediar o de interpolar los valores de un vector según se necesite entre un nivel u otro.

Sección	Descripción
Cycle: V,W,F,FMG	Se establecen cada uno de estos ciclos por separado. En estas funciones se definen la secuencia de restricciones y prolongaciones que definen cada esquema multimalla.
Reverse	Invierte el orden de las listas para la implementación del método FMG.
MultimallaVWF	Implementa los ciclos multimalla V,W y F que parten de un nivel de malla más fino a uno más grueso.
MultimallaFMG	Implementa el ciclo FMG, el cual parte de un nivel de malla más grueso a uno más fino.
Programa principal	Desde el programa principal se hace el llamado de todas las funciones según el caso analizado: conducción, advección-difusión o convección natural.

Para implementación del método multimalla en el código de convección natural, fue necesario crear funciones de Prolongación y de Interpolación independientes para la función de corriente.

Bibliografía

- [1] AITHAL, S. Natural convection in a cubical cavity with a coaxial heated cylinder. *Elsevier*, 2017.
- [2] ALMEIDA P.R., F. J. Eliminacion gaussiana para sistemas de ecuaciones lineales. 1996. Notas de Clase.
- [3] BADRUDDIN I., Y. T., AZEEM. Heat transfer in porous media: A mini review. *Elsevier*, 2018.
- [4] BRASSINGTON F.C., Y. P. A proposed framework for hydrogeological conceptual modelling. *Water and Environment Journal*, 2009.
- [5] BRIGGS, W. A multigrid tutorial. 1999. Center for Applied Scientific Computing.
- [6] BRIGGS, W. A multigrid tutorial. 2019. Lawrence Livermore National Laboratory.
- [7] BUNDSCHUH J., S. M. *Introduction to the Numerical Modeling of Groundwater and Geothermal Systems*. CRC Press, 2010.
- [8] BURDEN R., F. J. *Numerical Analisis*. Cengage Learning, 2010.
- [9] BURDEN R.L., F. J. Iterative techniques in matrix algebra relaxation techniques for solving linear systems. 2011. Dublin City University.
- [10] CHENG, P. *Heat Transfer in Geothermal Systems*. Elsevier, 1979.
- [11] GEHRINGER M., L. V. *Geothermal Handbook: Planning and Financing Power Generation*. Energty Sector Management Assistance Program (ESMAP), 2012.
- [12] GERYA, T. *The multigrid method*. In *Introduction to Numerical Geodynamic Modelling*. Cambridge University Press, 2019.
- [13] GUERRERO, F. *Three-dimensional numerical models for free convection in porous enclosures heated from below*. Tesis Doctoral, University of Gasgow, 2017.
- [14] GUERRERO F.J., R. E., KARIMI N. Numerical modeling of multiple steady-state convective modes in a tilted porous medium heated from below. *ELSEVIER*, 2018.
- [15] HEWITT, D. Vigorous convection in porous media. *The Royal Society Publishing*, 2020.
- [16] JAYSAVAL P., K. S. T. B., SHANTSEV V. Fully anisotropic 3-d em modelling on a lebedev grid with a multigrid preconditioner. *Geophysical Journal International*, 2016.

-
- [17] KAVIANY, M. *Principles of Heat Transfer in Porous Media*. Springer, 1995.
- [18] KEPINSKA, B. Geothermal energy in human history, culture, and practices selected highlights. *The United Nations University*, 2003.
- [19] MANCHESTERCFDTEAM. All there is to know about different mesh types in cfd. 2018. The University of Mancheste.
- [20] MOECK, I. Catalog of geothermal play types based on geologic controls. *Elsevier*, 2013.
- [21] PIERSON, B. *An Introduction into Multigrid Method Fundamentals*. Tesis Doctoral, Ball State University, 2019.
- [22] SANCHEZ J., O. L., SANZ L. *Evaluacion del potencial de energia geotermica. Estudio Tecnico PER 2011-2020*. Instituto para la diversificacion y ahorro de la energia (IDAE)., 2011.
- [23] TANIGUCHI T., I. S. Estimation method of the optimun relaxation factor for the successive overrelaxation method. *Memoirs of the School o Engineering, Okayama University*, 1983.
- [24] VERSTEEG H. K., M. W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. Pearson, 2007.