

Introducción a la Computación Científica de Alto Rendimiento

Proyecto: Solución de la ecuación de difusión

Kevin Steven Cortés Rincón* kcortes@unal.edu.co

*Departamento de ingeniería mecánica y mecatrónica, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá

I. INTRODUCCIÓN

El proyecto realizado para el primer módulo del curso *introducción a la computación científica de alto rendimiento* es la implementación del método de volúmenes finitos (FVM por sus siglas en Inglés) para solucionar la ecuación de difusión en un problema de conducción de calor en una placa rectangular en estado estacionario.

Ahora bien, el flujo de trabajo llevado a cabo es:

- Discretización a mano de la ecuación de difusión.
- Programación de la malla.
- Programación de las propiedades físicas y del término fuente.
- Programación de las condiciones de frontera.
- Programación de la etapa de procesamiento: La solución del sistema de ecuaciones se realizó mediante el método iterativo de Gauss - Seidel.
- Programación de la etapa de posprocesamiento: Obtención de las gráficas que muestran los resultados.

Cada vez que se obtuvo avances los archivos y casos fueron subidos a un repositorio de GitHub cuyo enlace es: https://github.com/KevinCortesR/Proyecto_ICCAR.git

Por otra parte, para comprobar el funcionamiento de los códigos realizados se hizo la implementación de un caso con solución analítica. Una vez comprobados, se solucionó el problema de interés y se analizaron los resultados.

II. PROBLEMA DE INTERÉS

Se tiene una placa plana como se muestra a continuación:

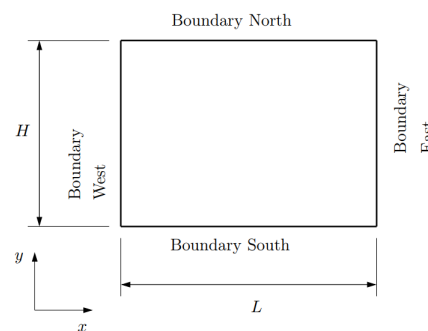


Figura 1: Geometría de la placa: $L = 3$ m y $H = 2$ m

Para esta placa se tienen las siguientes condiciones de frontera, conductividad térmica y término fuente:

Frontera	Condición
Norte	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$ (adiabática)
Sur	$T = -5 + 20 \left(\frac{x}{L}\right)^2 + 20 \sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right)$
Oeste	$T = -5^\circ\text{C}$
Este	$T = 15^\circ\text{C}$
Conduct.	$\kappa = 2 \left(2,5 - \frac{x}{L}\right) \text{ W/m} \cdot ^\circ\text{C}$
Fuente	$B = 100$

La ecuación de difusión que rige el problema es la siguiente:

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) + B \quad (1)$$

II-A. Discretización

A continuación, se muestra la discretización la ecuación (1); aunque se deja en la forma genérica, es decir en términos de ϕ y Γ . En primera instancia, al integrar sobre el volumen se obtuvo:

$$0 = \int_V \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] dV + \int_V B dV \quad (2)$$

Para evitar lidiar con la segunda derivada, se hizo uso del teorema de la divergencia de Gauss para un campo vectorial arbitrario C :

$$\int_V (\nabla \cdot C) dV = \int_S (C \cdot \hat{n}) dS \quad (3)$$

Aplicando el teorema a la ecuación (2) y suponiendo un término fuente B constante se tuvo:

$$0 = \int_S \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \hat{n}_x + \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \hat{n}_y \right] dS + BV \quad (4)$$

Para una celda interior P , los vectores normales en función de sus celdas vecinas al norte, sur, este y oeste tomaron valores como se muestra en la siguiente figura:

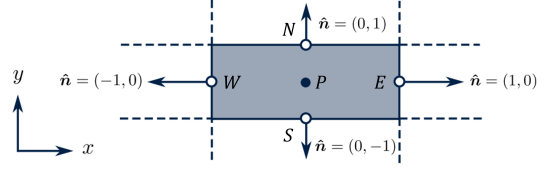


Figura 2: Vectores normales en direcciones norte (N), sur (S), este (E) y oeste (W) para una celda 2D

Teniendo lo anterior en mente y sabiendo que el término difusivo debe ser igual a la suma de los flujos en las fronteras con celdas vecinas ($\int_S \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \hat{n}_j \right] dS = F_N + F_S + F_E + F_W$), pudo usarse el esquema de diferenciación central (CDS) para obtener:

$$F_e = \Gamma_e \frac{\phi_e - \phi_p}{x_E - x_P} \Delta y \quad ; \quad F_w = -\Gamma_w \frac{\phi_p - \phi_w}{x_P - x_W} \Delta y$$

$$F_n = \Gamma_n \frac{\phi_n - \phi_p}{y_N - y_P} \Delta x \quad ; \quad F_s = -\Gamma_s \frac{\phi_p - \phi_s}{y_P - y_S} \Delta x$$

La ecuación (4) fue reescrita de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \frac{\Gamma_e \Delta y}{x_E - x_P} \phi_e + \frac{\Gamma_w \Delta y}{x_P - x_W} \phi_w + \frac{\Gamma_n \Delta x}{y_N - y_P} \phi_n \\ & + \frac{\Gamma_s \Delta x}{y_P - y_S} \phi_s - \frac{\Gamma_e \Delta y}{x_E - x_P} \phi_p - \frac{\Gamma_w \Delta y}{x_P - x_W} \phi_p \\ & - \frac{\Gamma_n \Delta x}{y_N - y_P} \phi_p - \frac{\Gamma_s \Delta x}{y_P - y_S} \phi_p + q_\phi \Delta x \Delta y = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Si se agrupa en coeficientes (a_i) para cada celda vecina, se reescribe la ecuación de la siguiente manera:

$$a_E \phi_e + a_W \phi_w + a_N \phi_n + a_S \phi_s - \underbrace{(a_E + a_W + a_N + a_S)}_{a_P} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y \quad (6)$$

La ecuación (6) corresponde a la discretización general cuando una celda está rodeada por vecinas

en todas las direcciones, es decir que se trata de la discretización para las **celdas internas**.

Para las celdas que tienen una o más fronteras en su vecindad, se realizó la discretización correspondiente; a continuación se muestra para cada celda que tiene condiciones de frontera:

Para la **frontera norte**, en este caso tipo Neumann ($\partial T / \partial y = 0$), el coeficiente a_N no aporta ni en las celdas vecinas ni en el coeficiente a_P y el flujo establecido por la condición de frontera Neumann pasa a contribuir al lado conocido (en este caso es cero).

$$a_E \phi_e + a_W \phi_w + a_S \phi_s - \underbrace{(a_E + a_W + a_S)}_{a_{P1}} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y \quad (7)$$

En la **frontera sur** de tipo Dirichlet, el coeficiente a_S no contribuye únicamente en las celdas vecinas pero si contribuye en el lado conocido.

$$a_E \phi_e + a_W \phi_w + a_N \phi_n - \underbrace{(a_E + a_W + a_N + a_S)}_{a_P} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y - a_S \phi_s \quad (8)$$

Para la **frontera este**, que también es tipo Dirichlet, ocurre algo análogo al caso de la frontera sur pero con el coeficiente a_E .

$$a_W \phi_w + a_N \phi_n + a_S \phi_s - \underbrace{(a_E + a_W + a_N + a_S)}_{a_P} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y - a_E \phi_e \quad (9)$$

Y de igual forma ocurre con la **frontera oeste** y el coeficiente a_W .

$$a_E \phi_e + a_N \phi_n + a_S \phi_s - \underbrace{(a_E + a_W + a_N + a_S)}_{a_P} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y - a_W \phi_w \quad (10)$$

En las celdas de las esquinas se tienen dos condiciones de frontera simultáneamente, y es por

ello que sus efectos se combinan. Para el caso de la **celda noroeste** se obtuvo:

$$a_E \phi_e + a_W \phi_w + a_S \phi_s - \underbrace{(a_E + a_W + a_S)}_{a_{P1}} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y - a_W \phi_w \quad (11)$$

En el caso de la **celda noreste** se logró:

$$a_W \phi_w + a_N \phi_n + a_S \phi_s - \underbrace{(a_E + a_W + a_S)}_{a_{P1}} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y - a_E \phi_e \quad (12)$$

En las dos celdas inferiores hay dos condiciones Dirichlet aplicadas. Para el caso de la **celda sureste** se llegó a:

$$a_E \phi_e + a_N \phi_n - \underbrace{(a_E + a_W + a_N + a_S)}_{a_P} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y - a_S \phi_s - a_W \phi_w \quad (13)$$

Y finalmente para la **celda suroeste**:

$$a_W \phi_w + a_N \phi_n - \underbrace{(a_E + a_W + a_N + a_S)}_{a_P} \phi_p = -q_\phi \Delta x \Delta y - a_S \phi_s - a_E \phi_e \quad (14)$$

Así pues las ecuaciones (6) a (14) corresponden a las discretizaciones para los nueve tipos de celdas que hay en el dominio computacional (internas, con una y con dos condiciones de frontera).

III. PROBLEMA CON SOLUCIÓN ANALÍTICA

El problema con solución analítica se lleva a cabo en el mismo dominio, pero con condiciones de frontera diferentes, por lo que el código y la discretización cambia ligeramente.

Frontera	Condición
Norte	$T = 150^\circ\text{C}$
Sur	$T = 15^\circ\text{C}$
Oeste	$T = 15^\circ\text{C}$
Este	$T = 15^\circ\text{C}$
Conduct.	$\kappa = 1$
Fuente	$B = 0$

Este problema tiene la solución analítica dada por:

$$T_{adimensional}(x, y) = \frac{2}{\pi} \cdot \sum_{n_{impar}}^{\infty} \frac{\sinh(n\pi x/H)}{\sinh(n\pi L/H)} \cdot \sin\left(\frac{n\pi y}{H}\right) \quad (15)$$

Para darle dimensiones de °C se realizó el siguiente procedimiento:

$$T(x, y) = (T_{max} - T_{min}) \cdot T_{adimensional}(x, y) + T_{min} \quad (16)$$

IV. MÉTODO ITERATIVO GAUSS-SEIDEL

Se escogió el método iterativo de Gauss-Seidel para la implementación en código ya que es intuitivo y fácil de escribir en código.

El método tiene el siguiente flujo para resolver el sistema matricial $[A][\phi] = [Q]$ con n incógnitas y n ecuaciones:

- Hacer una estimación inicial para todas las incógnitas ϕ_i^0 .
- Resolver la primera ecuación del sistema de ecuaciones para obtener ϕ_1^1 .
- Resolver la segunda ecuación del sistema de ecuaciones teniendo en cuenta a ϕ_1^1 para llegar a un valor de ϕ_2^1 .
- Resolver la ecuación m -ésima teniendo en cuenta los nuevos valores de las $m-1$ incógnitas anteriores hasta completar las n ecuaciones.
- Calcular el residual de la siguiente forma:

$$R = \sum^n |q_\phi - (a_P \phi_P + \sum_j^{vecinos} a_j \phi_j)| \quad (17)$$

- Normalizar el residual dividiéndolo entre un flujo característico, así

$$F = \sum^n |a_P \phi_P| \quad (18)$$

- Comparando el residual normalizado con el criterio de convergencia ϵ se obtiene:

$$\frac{R}{F} \leq \epsilon \quad (19)$$

Si esta desigualdad es verdadera no realice más iteraciones pues el método convergió, si es falsa vuelva al segundo ítem de esta lista ya que el método no ha convergido.

Como métodos de salida del algoritmo se tiene:

- Que el residual normalizado sea menor al criterio de convergencia.
- Que la diferencia entre el residual normalizado de la iteración anterior y el residual normalizado de la iteración actual sea menor que 1×10^{-9} y mayor que 0.
- Que al haber pasado 1000 iteraciones y si el residual normalizado de la iteración anterior es menor que el de la iteración actual. Dado que se decidió utilizar los métodos de salida del método anteriormente mencionados no se usó ninguna librería en particular para el mismo.

V. CÓDIGOS

Los dos casos resueltos en este proyecto cuentan con los mismos archivos de código:

- Malla.cpp: Este código tiene el dominio computacional y crea la malla sobre la que se va a trabajar con base en el número de celdas en x y y que se desea. También, tiene una función de refinamiento que permite hacer más fina la malla en secciones que el usuario considere que deberían tener más celdas.
- Propiedades.cpp: Este archivo recopila la información de la malla y crea el término fuente B y vector de κ ya que para el caso de interés esta varía con la posición en dirección x .
- Frontera_t0.cpp: En este archivo se recopila la información de la malla y definen las condiciones de frontera de cada caso. Si fuera necesario definir una condición inicial se haría en este archivo.
- Procesamiento.cpp: El código de este archivo empieza por definir la función que ensambla una matriz de coeficientes y términos independientes, definir la función del método Gauss-Seidel que barre la malla de izquierda a derecha desde la frontera sur hasta la frontera norte. En el main se recopila la información

de todos los archivos anteriores para pasarla por las funciones anteriormente mencionadas. Durante el procesamiento se muestra en la terminal la iteración y el correspondiente residual normalizado.

- **Posprocesamiento.py:** Se recopilan los resultados obtenidos en el archivo de procesamiento (Temperatura y Residual normalizado). En la terminal se muestran los vectores de x y y , también la última iteración y su residual normalizado y crea las gráficas de la malla, distribución de temperatura y residual normalizado en escala logarítmica en formato .eps.

Con el fin de poder trabajar con vectores y matrices a los que se les pueda modificar el número de elementos se hizo uso de la librería *vector* y para trabajar con los archivos en formato .dat se utilizó la librería *fstream*.

VI. RESULTADOS

VI-A. Caso con solución analítica

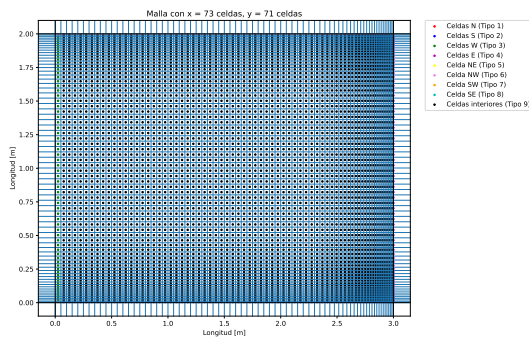


Figura 3: Malla utilizada para el caso con solución analítica

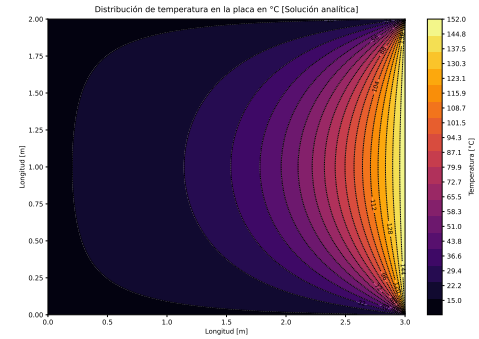


Figura 4: Distribución de temperatura con la solución analítica

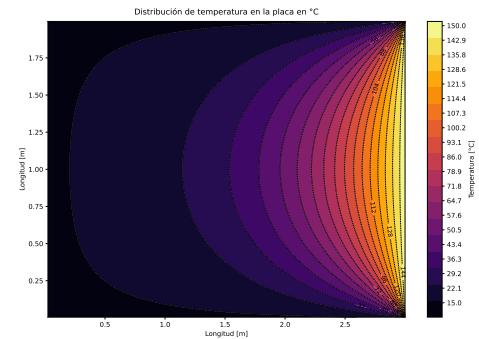


Figura 5: Distribución de temperatura con la solución numérica

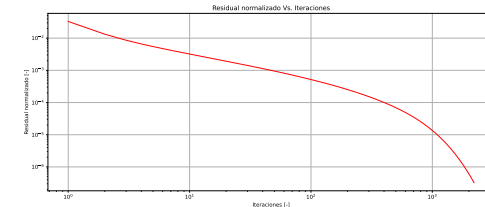


Figura 6: Residual normalizado de la solución numérica del caso con solución analítica

VI-B. Caso de interés

VII. CONCLUSIONES

VIII. BIBLIOGRAFÍA