

Juan J. Hidalgo

Guía Rápida

TRANSDENS

versión 0.996

BORRADOR - 6 de septiembre de 2011

Índice general

Índice general	I
Índice de figuras	III
Nomenclatura	VI
Introducción	VII
I Ecuaciones	1
1 Flujo	3
1.1. Balance de masa de fluido	3
1.2. Expresiones para la densidad	3
1.3. Almacenamiento	4
1.4. Flujo másico	5
1.5. Ley de Darcy	6
1.6. Fuentes y sumideros	6
1.7. Ecuación de flujo	7
1.8. Condiciones de contorno	7
2 Transporte de Solute	9
2.1. Balance de masa de soluto	9
2.2. Flujo másico advectivo	9
2.3. Difusión y dispersión	10
2.4. Adsorción-Desorción	10
2.5. Reacciones de primer orden	11
2.6. Fuentes y sumideros	11
2.7. Retardo	12
2.8. Ecuación de transporte de soluto	12

3	Transporte de Calor	13
3.1.	Balance de energía	13
3.2.	Flujo Advectivo	13
3.3.	Flujo Conductivo	14
3.4.	Conductividad Térmica del Medio Poroso	14
3.5.	Flujo Dispersivo	14
3.6.	Fuentes y Sumideros de Energía	14
3.7.	Ecuación de Transporte de Calor	15
3.8.	Formulación unificada de transporte de soluto y calor	16
II	USO	17
4	Entrada de datos	19
4.1.	Archivo DIM	19
4.2.	Archivo GRI	27
4.3.	Archivo PAR	27
4.4.	Archivo TIM	30
5	Recomendaciones de uso	33
5.1.	Almacenamiento de las matrices y solver	33
5.2.	Difusión en la matriz	33
5.3.	Esquema Iterativo	33
5.4.	Fuentes de soluto en la ecuación de flujo	36
5.5.	Gestión de tiempos y régimen de las ecuaciones	36
5.6.	Malla	37
5.7.	Parámetros de convergencia	37
5.8.	Parámetros de zona en archivo PAR y transporte de calor	37
5.9.	Posproceso	37
5.10.	Problema inverso	38
5.11.	Problemas simultáneos o sucesivos	38
5.12.	Reacciones de primer orden	38
5.13.	Recarga	38
5.14.	Retardo	38
5.15.	Viscosidad	38
5.16.	Zona no saturada	39
6	Código	41
6.1.	Parches	41
6.2.	IFLAGS	41

Índice de figuras

4.1. Tarjeta A3.3. Opciones del problema.	21
4.2. Tarjeta A5.1. Opciones de transformación logarítmica.	21
4.3. Tarjetas A9.1 y A9.2. Peso para cada tipo de parámetro.	21
4.4. Tarjeta A9.3. Parametros de convergencia del problema directo.	23
4.5. Esquema iterativo.	24
4.6. Parametros de WATSOLVE.	27
4.7. Tarjeta B1.3. Nueva condición de goteo.	27
4.8. Tarjeta C1.2. Coeficientes de nudo de la nueva condición de goteo.	28
4.9. Parámetro de zona de la nueva condición de goteo y propiedades del agua.	30
4.10. Tarjeta D1.1. Interpolación de los tiempos de cálculo.	31
5.1. Esquema iterativo para un problema con densidad variable resuelto con el método de Picard.	34
5.2. Esquema iterativo para un problema con densidad variable resuelto con el método de Newton.	35
5.3. Esquema iterativo para un problema con densidad variable resuelto con el método de Picard y flujo no lineal resuelto con el método de Newton.	35
5.4. Esquema iterativo que permite el cambio de Picard a Newton.	36
5.5. Archivo TIM para un problema transitorio.	37

Nomenclatura

Letras latinas

C	Concentración de soluto	kg/m ³	ML ⁻³
C_w	Calor específico /capacidad calorífica del fluido	J/kg K	EM ⁻¹ K ⁻¹
\mathbf{g}	Vector gravedad	m/s ²	LT ⁻²
g	Módulo del vector gravedad	m/s ²	ML ⁻²
H_f	Nivel externo	m	L
h	Nivel piezométrico	m	L
\mathbf{j}	Flujo másico	kg m/s	MLT ⁻¹
\mathbf{K}	Conductividad hidráulica	m/s	LT ⁻¹
k	Permeabilidad intrínseca	m ²	L ²
k_d	Coefficiente de distribución	??	??
k'_d	Coefficiente de distribución para fracción másica	??	??
k_r	Permeabilidad relativa	-	-
M_F	Masa de fluido	kg	M
P	Presión del fluido	Pa	ML ⁻¹ T ⁻¹
P_0	Presión de referencia del fluido	Pa	ML ⁻¹ T ⁻¹
\mathbf{q}	Velocidad de Darcy	m/s	LT ⁻¹
r	Caudal de fluido por unidad de volumen de acuífero	m ³ /s	L ³ T ⁻¹
r	Caudal másico de entrada/salida	kg m/s	MLT ⁻¹
S_w	Índice de saturación	-	-
S_0	Coefficiente de almacenamiento	m ⁻¹	L ⁻¹
S_{0P}	Coefficiente de almacenamiento específico	Pa ⁻¹	M ⁻¹ L ² T
T	Temperatura del fluido	K	K
t	Tiempo	s	T

T_O	Temperatura de referencia del fluido	K	K
V_F	Volumen de fluido de fluido	kg	M
V_P	Volumen de poros	m ³	L ³
z	Elevación	m	L

Letras griegas

α	Compresibilidad ???	??	??
α_s	Rock capacity	??	??
β_P	Compresibilidad del fluido	Pa ⁻¹	M ⁻¹ LT
β_ω	Coficiente de ???	-	-
β_T	Coficiente de ???	K ⁻¹	-1
γ	Potencia disipada por unidad de masa	J/kg s	EM ⁻¹ T ⁻¹
λ	Coficiente de reacciones de primer orden	1/s	T ⁻¹
λ_T	Conductividad térmica equivalente.	J/mKs	EMT ⁻¹ K ⁻¹ S ⁻¹
μ	Viscosidad dinámica	Pa.S	ML ⁻¹ T ⁻²
∇z	Vector unitario en la dirección de la gravedad y sentido contrario		
ω	Fracción másica (masa de soluto / masa de fluido)	-	-
ω_0	Fracción másica de referencia	-	-
ω^*	Fracción másica de la fuente/sumidero	-	-
ϕ	Porosidad $\equiv \frac{V_P}{V_T}$	-	-
ρ	Densidad de fluido	kg/m ³	$\frac{M_F}{V_F}$
ρ_d	Densidad seca	kg/m ³	ML ⁻³
ρ^*	Densidad de la fuente/sumidero	kg/m ³	ML ⁻³
σ'	Tensión o esfuerzos ???	??	??
Θ	Contenido volumétrico de agua $\equiv S_w \phi$	-	-

Introducción

TRANSDENS es un programa de simulación que resuelve las ecuaciones de flujo y transporte en un medio poroso. TRANSDENS está basado en TRANSIN 4 por tanto, esta guía debe tomarse como un complemento al manual de de TRANSIN 4.

TD resuelve la ecuación de flujo

$$\rho \frac{\partial \Theta}{\partial h_f} \frac{\partial h_f}{\partial t} + \rho \Theta \beta_\omega \frac{\partial \omega}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) + \rho^* r, \quad (1)$$

la ecuación de transporte de soluto

$$\rho(\Theta + \alpha_s) \frac{\partial \omega}{\partial t} = -\rho \mathbf{q} \cdot \nabla \omega + \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \nabla \omega) - \lambda \rho (\Theta + \alpha_s) \omega + \rho^* r (\omega^* - \omega) \quad (2)$$

y la ecuación de transporte de energía

$$(\rho \Theta + \frac{\rho_d C_d}{C_w}) \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho \mathbf{q} \cdot \nabla T + \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \nabla T) + \rho^* r (T^* - T). \quad (3)$$

donde la ley de Darcy se escribe en términos del nivel equivalente de agua dulce

$$\mathbf{q} = -\frac{\mu_f}{\mu} \mathbf{K} \left(\nabla h_f + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right) \quad (4)$$

Los detalles de las ecuaciones implementadas pueden encontrarse en los capítulos 1, 2 y 3

La entrada de datos de TRANSDENS está basada en la de TRANSIN 4. Salvo que se use la nueva condición de contorno de transporte, TRANSIN 4 leerá la entrada de datos de TRANSDENS sin ningún problema. Evidentemente, el problema que resuelva será diferente. El capítulo 4 contiene las diferencias respecto de la entrada de datos de TRANSIN 4 que contienen los archivos de TRANSDENS.

El uso de TRANSDENS puede ser complicado si no se es cuidadoso. El capítulo 5 describe el uso de TRANSDENS. Se enfatiza la interacción entre las diferentes opciones y las diferencias respecto de TRANSIN 4.

Finalmente, el capítulo 6 describe detalles del código que pueden ser de interés para usuarios avanzados.

Parte I

Ecuaciones

Capítulo 1

Flujo

1.1. Balance de masa de fluido

Realizamos el balance de la masa de fluido por volumen de acuífero.

$$M_F = \rho S_w \phi = \rho \Theta. \quad (1.1)$$

Así tenemos

$$\rho \Theta = \frac{M_F}{V_F} \cdot \frac{V_F}{V_P} \cdot \frac{V_P}{V_T} = \frac{M_F}{V_T}. \quad (1.2)$$

El balance se puede expresar como

$$\frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} + \rho r, \quad (1.3)$$

donde \mathbf{j} representa los flujos másicos de fluido presentes en el sistema.

1.2. Expresiones para la densidad

TRANSDENS considera que la densidad sólo depende de la variable de transporte (fracción másica o temperatura), según una ley exponencial

$$\rho = \rho_0 e^{\beta_\omega(\omega - \omega_0)} \quad (1.4)$$

De donde

$$\beta_\omega = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial \omega} \quad (1.5)$$

1.3. Almacenamiento

Se define el coeficiente de almacenamiento específico, S_{0P} , como el volumen de fluido por unidad de masa que se libera (o absorbe) cuando la presión cambia una unidad, es decir,

$$S_{0P} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial (\phi \rho)}{\partial P} \quad (1.6)$$

La forma habitual de definir el almacenamiento, cuando se trabaja con niveles piezométricos, es

$$S_0 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi \rho}{\partial h_f} \quad (1.7)$$

La relación entre ambos coeficientes es

$$\frac{S_{0P}}{S_0} = \frac{\frac{1}{\rho} \frac{\partial (\phi \rho)}{\partial P}}{\frac{1}{\rho} \frac{\partial (\phi \rho)}{\partial h_f}} = \frac{\partial h_f}{\partial P} \quad (1.8)$$

Como

$$h_f = \frac{P}{\rho_0 g} + z \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial h_f}{\partial P} = \frac{1}{\rho_0 g} \quad (1.10)$$

Entonces

$$S_{0P} = S_0 \frac{1}{\rho_0 g} \quad (1.11)$$

Volviendo al balance de masa de fluido, desarrollamos el término de la derivada temporal con el objeto de expresarlo en términos de derivadas parciales de la presión respecto del tiempo.

$$\frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial t} = \frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial t} \quad (1.12)$$

En cuanto a la derivada respecto de ω

$$\frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial \omega} = \Theta \frac{\partial \rho}{\partial \omega} = \rho \beta_\omega \Theta \quad (1.13)$$

En cuanto a la derivada respecto de P tenemos

$$\frac{\partial (\rho \Theta)}{\partial P} = \frac{\partial (\rho S_w \phi)}{\partial P} = S_w \frac{\partial (\rho \phi)}{\partial P} + \rho \phi \frac{\partial (S_w)}{\partial P} \quad (1.14)$$

El término del grado de saturación se puede calcular a partir de la curva de retención. En cambio, el término que implica a la porosidad y la densidad requiere alguna manipulación. Recordemos las definiciones de la compresibilidad del fluido y del suelo, β_P y α respectivamente.

$$\beta_P = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P} \quad (1.15)$$

$$\alpha = \frac{1}{V_T} \frac{\partial V_T}{\partial \sigma'} \quad (1.16)$$

(nótese que $dP = -d\sigma'$ en la definición de α).

Por otro lado

$$\frac{\partial \phi}{\partial P} = \frac{(1-\phi)}{V_T} \frac{\partial V_T}{\partial P} = (1-\phi)\alpha \quad (1.17)$$

Así pues,

$$\frac{\partial (\rho\phi)}{\partial P} = \rho \frac{\partial \phi}{\partial P} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial P} = \rho(1-\phi)\alpha + \rho\phi\beta_P \quad (1.18)$$

Teniendo en cuenta la definición de S_{0P} (1.6)

$$S_{0P} = (1-\phi)\alpha + \phi\beta_P \quad (1.19)$$

Finalmente, la derivada de $\rho\Theta$ respecto del tiempo, se puede escribir como

$$\frac{\partial (\rho\Theta)}{\partial t} = (S_w\rho S_{0P} + \rho\phi \frac{\partial S_w}{\partial P}) \frac{\partial P}{\partial t} + \Theta\rho\beta_\omega \frac{\partial \omega}{\partial t} \quad (1.20)$$

O bien, si se utilizan el nivel

$$\frac{\partial (\rho\Theta)}{\partial t} = \rho(S_w S_S + \phi \frac{\partial S_w}{\partial h_f}) \frac{\partial h_f}{\partial t} + \rho\beta_\omega\Theta \frac{\partial \omega}{\partial t} \quad (1.21)$$

1.4. Flujo másico

Examinamos ahora el término \mathbf{j} correspondiente al flujo másico que hay en el sistema. En este caso, el único flujo másico que se debe considerar es el resultante del movimiento del agua a través del acuífero. Se trata de un flujo másico advectivo. Este tipo de flujo se representa de la forma

$$\mathbf{j} = X\mathbf{v} \quad (1.22)$$

donde X es la magnitud transportada a la velocidad \mathbf{v} .

En el caso que nos ocupa, la magnitud que se transporta es la masa de fluido por unidad de volumen de acuífero $\rho\Theta$, lo cual nos lleva a escribir

$$\mathbf{j} = \rho\Theta\mathbf{v} \quad (1.23)$$

Sin embargo, esta forma de representar el flujo másico, aunque correcta desde un punto de vista formal, tiene algunos inconvenientes. En primer lugar, la aparición de dos magnitudes además de la velocidad puede inducir a error en cuanto a lo que se transporta (se podría llegar a pensar que se transporta porosidad, lo cual es ridículo). Por otro lado, la dificultad que plantea la medida de \mathbf{v} y su difícil interpretación, desaconseja el uso de esta expresión. La forma correcta de escribir el flujo másico advectivo es utilizar la velocidad de Darcy.

1.5. Ley de Darcy

La ley de Darcy en términos de presiones se escribe:

$$\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu}(\nabla P + \rho g \nabla z) = -\frac{\mathbf{k}k_r}{\mu}(\nabla P - \rho \mathbf{g}) \quad (1.24)$$

y en términos de nivel equivalente

$$\mathbf{q} = -\frac{\mu_0}{\mu} \mathbf{K}(\nabla h_f + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z) \quad (1.25)$$

donde

$$\mathbf{K} = \frac{\mathbf{k}k_r \rho_0 g}{\mu_0} \quad (1.26)$$

La relación entre \mathbf{v} y \mathbf{q} es

$$\mathbf{q} = \phi \mathbf{v} \quad (1.27)$$

Por tanto escribimos el flujo másico advectivo como:

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{q} \quad (1.28)$$

Las unidades son de masa por unidad de superficie y tiempo, como corresponde a un flujo másico. Si examinamos su divergencia:

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) \quad (1.29)$$

que tiene unidades de masa de fluido por unidad de volumen y tiempo. Esta definición es coherente con el resto de los términos del balance.

1.6. Fuentes y sumideros

Los términos fuente/sumidero vienen expresados como el caudal de fluido por unidad de volumen de acuífero, r , multiplicado por la densidad de dicho fluido, ρ^* .

1.7. Ecuación de flujo

Obtenemos la ecuación de flujo haciendo uso de las derivadas anteriormente desarrolladas y de la ley de Darcy:

$$\rho \frac{\partial \Theta}{\partial h_f} \frac{\partial h_f}{\partial t} + \rho \Theta \beta \omega \frac{\partial \omega}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\rho \frac{\mu_0}{\mu} \mathbf{K} \left(\nabla h_f + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right) \right] + \rho^* r \quad (1.30)$$

1.8. Condiciones de contorno

$$\text{Nivel prescrito} \equiv h_f(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = f(\mathbf{x}, \mathbf{t}) \quad (1.31)$$

$$\text{Flujo másico prescrito} \equiv \rho^* r(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = f(\mathbf{x}, \mathbf{t}) \quad (1.32)$$

$$\text{Goteo} \equiv \rho^* r(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \rho^* \alpha (h_f - H_f) \quad (1.33)$$

Capítulo 2

Transporte de Solute

2.1. Balance de masa de soluto

Realizamos el balance de masa de soluto por unidad de volumen de acuífero. Para ello utilizamos como variable de estado la fracción másica de soluto, ω , que se define como:

$$\omega = \frac{M_S}{M_F} \quad (2.1)$$

Por tanto la masa de soluto por unidad de volumen de acuífero se expresa como

$$M_F = \rho \Theta \omega \quad (2.2)$$

A continuación tratamos cada uno de los términos que aparecen en el balance por separado.

2.2. Flujo másico advectivo

El flujo másico advectivo viene dado por el término

$$\mathbf{j}_{adv} = \rho \omega \mathbf{q} \quad (2.3)$$

$$[\mathbf{j}_{adv}] = \frac{M_F}{V_F} \cdot \frac{M_S}{M_F} \cdot \frac{V_F}{V_T} \cdot \frac{L}{T} = \frac{M}{L^2 T} \quad (2.4)$$

(En el análisis dimensional se ha utilizado que $\mathbf{q} = \phi \mathbf{v}$).

La divergencia de este flujo másico tiene las unidades adecuadas

$$[\nabla \cdot \mathbf{j}_{adv}] = \frac{M}{L^3 T} \quad (2.5)$$

2.3. Difusión y dispersión

En esta sección se explica el término difusivo-dispersivo

$$\rho D \nabla \omega \quad (2.6)$$

Pendiente...

2.4. Adsorción-Desorción

El término de adsorción-desorción S se representa a través de la masa de soluto adsorbida por unidad de masa de suelo.

$$S = \frac{M_S}{M_{\text{Suelo}}} \quad (2.7)$$

Entendiendo por suelo lo que resta después de extraer el agua a un volumen de acuífero (sólido y poros). La cantidad de soluto retenida viene dada por la isoterma de adsorción. Es una relación entre la concentración de soluto en el agua y la cantidad de soluto adsorbida. Si la isoterma es lineal

$$S = k_d C \quad (2.8)$$

Donde C es la concentración de soluto.

$$C = \frac{M_S}{M_{\text{Fluido}}} \quad (2.9)$$

La constante k_d es el llamado coeficiente de distribución.

$$[k_d] = \frac{[S]}{[C]} = \frac{M_{\text{Suelo}}}{M_{\text{Suelo}}} \cdot \frac{M_{\text{Fluido}}}{M_S} = \frac{M_{\text{Fluido}}}{M_{\text{Suelo}}} \quad (2.10)$$

Así pues tendremos

$$\rho_d \frac{\partial S}{\partial t} = \rho_d k_d \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.11)$$

Donde aparece ρ_d , densidad seca, ya que el balance se realiza por unidad de volumen de acuífero.

$$\rho_d = \frac{M_{\text{Suelo}}}{V_T} \quad (2.12)$$

Finalmente, resta expresar la masa adsorbida en términos de la fracción másica de soluto. Para ello utilizamos la relación existente entre ésta última y la concentración.

$$C = \rho \omega \quad (2.13)$$

Por tanto, el término que debe aparecer en el balance de masa es

$$\rho_d \frac{\partial S}{\partial t} = \rho \rho_d k_d \frac{\partial \omega}{\partial t} \quad (2.14)$$

Donde se han despreciado las variaciones de densidad.

Cómo la variable de estado es la fracción másica, se puede contemplar la posibilidad de reescribir la isoterma de adsorción de la siguiente manera

$$S = k'_d \omega \quad (2.15)$$

donde ahora el coeficiente de distribución es distinto. En el balance de masa deberemos incluir

$$\frac{\rho_d}{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\rho_d}{\rho} k'_d \frac{\partial \omega}{\partial t} \quad (2.16)$$

La relación entre ambos coeficientes de distribución es:

$$k_d = \frac{k'_d}{\rho} \quad (2.17)$$

2.5. Reacciones de primer orden

Las reacciones de primer orden vienen gobernadas por la ley

$$M = M_0 e^{-\lambda t} \quad (2.18)$$

En este caso $M = \rho \Theta \omega$, por lo tanto, obtenemos

$$\rho \Theta \omega = \rho_0 \Theta \omega_0 e^{-\lambda t} \quad (2.19)$$

El término correspondiente para el balance de masa se obtiene derivando respecto del tiempo.

$$\frac{\partial (\rho \Theta \omega)}{\partial t} = -\lambda \rho_0 \Theta \omega_0 e^{-\lambda t} = -\lambda \rho \Theta \omega \quad (2.20)$$

2.6. Fuentes y sumideros

Los términos fuente/sumidero presentes en el sistema viene representados por el término

$$\rho^* r \omega^* \quad (2.21)$$

Donde ρ^* y ω^* son la densidad y fracción másica de la fuente/sumidero. Las dimensiones son coherentes con las propuestas para el balance.

$$[\rho^* r \omega^*] = \frac{M_F}{L^3} \cdot \frac{L^3}{L^3 T} \cdot \frac{M_S}{M_F} = \frac{M_S}{L^3 T} \quad (2.22)$$

2.7. Retardo

Si agrupamos todos los términos que están multiplicando a la derivada temporal, obtenemos:

$$\rho\Theta\left(1 + \frac{\rho_d k'_d}{\rho\Theta}\right) \quad (2.23)$$

Desarrollando

$$\rho\Theta\left(1 + \frac{\rho_d k'_d}{\rho\Theta}\right) = \rho\Theta + \rho_d k'_d \quad (2.24)$$

teniendo en cuenta que $k'_d = k_d \rho$ se tiene

$$\rho\Theta + \rho_d k'_d = \rho\Theta + \rho \rho_d k_d \quad (2.25)$$

Llamando $\alpha_s = \rho_d k_d$, “rock capacity”, escribimos el término que multiplica a la derivada temporal como

$$\rho\Theta + \rho \alpha_s = \rho(\Theta + \alpha_s) \quad (2.26)$$

2.8. Ecuación de transporte de soluto

Finalmente, la ecuación de transporte queda

$$\frac{\partial [\rho(\Theta + \alpha_s)\omega]}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{q} \omega) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \nabla \omega) - \lambda \rho [\Theta + \alpha_s] \omega + \rho^* r \omega^* \quad (2.27)$$

Restando la ecuación de flujo multiplicada por ω :

$$\rho(\Theta + \alpha_s) \frac{\partial \omega}{\partial t} = -\rho \mathbf{q} \cdot \nabla \omega + \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \nabla \omega) - \lambda \rho [\Theta + \alpha_s] \omega + r(\rho^* \omega^* - \rho \omega) \quad (2.28)$$

Capítulo 3

Transporte de Calor

3.1. Balance de energía

Energía del fluido por unidad de volumen de acuífero:

$$\rho \Theta C_F T = \frac{M_F}{V_F} \cdot \frac{V_F}{V_T} \cdot \frac{E}{M_F K} \cdot K = \frac{E}{V_T} \quad (3.1)$$

Energía del sólido por unidad de volumen de acuífero:

$$(1 - \phi) \rho_s C_d T = \rho_d C_d T = \frac{M_s}{V_s} \cdot \frac{V_s}{V_T} \cdot \frac{E}{M_s K} \cdot K = \frac{E}{V_T} \quad (3.2)$$

3.2. Flujo Advectivo

El flujo de energía por advección viene dado por

$$\mathbf{j}_{adv} = \rho C_F \mathbf{q} T \quad (3.3)$$

$$[\mathbf{j}_{adv}] = \frac{M_F}{V_F} \cdot \frac{E}{M_F K} \cdot \frac{V_F L}{V_T T} \cdot K = \frac{EL}{V_F T} \quad (3.4)$$

Tomando la divergencia de \mathbf{j}_{adv} :

$$[\nabla \cdot \mathbf{j}_{adv}] = \frac{EL}{V_F T} \quad (3.5)$$

3.3. Flujo Conductivo

La ley de Fourier establece que el flujo por unidad de superficie y tiempo es igual a

$$\mathbf{j}_{\text{cond}} = -\lambda_T \nabla T \quad (3.6)$$

$$[\mathbf{j}_{\text{cond}}] = \frac{E}{LTK} \cdot \frac{K}{L} = \frac{E}{L^2 T} \quad (3.7)$$

Su divergencia

$$[\nabla \cdot \mathbf{j}_{\text{cond}}] = \frac{E}{L^3 T} \quad (3.8)$$

3.4. Conductividad Térmica del Medio Poroso

La conductividad térmica en TRANSSENS es una magnitud escalar de unidades

$$[\lambda_T] = \frac{E}{L \cdot T \cdot K} \quad (3.9)$$

TRANSSENS representa la conductividad térmica del medio poroso mediante un modelo de conducción en paralelo

$$\lambda_T = \phi S_w \lambda_w + (1 - \phi) \lambda_s \quad (3.10)$$

Se trata de una ponderación por volúmenes. Este modelo supone que la conducción de calor se realiza a la vez por la matriz sólida y el fluido con igual velocidad.

3.5. Flujo Dispersivo

$$\mathbf{j}_{\text{disp}} = \rho C_F \mathbf{D}' \nabla T \quad (3.11)$$

Donde \mathbf{D}' es el tensor de dispersión. Dado que es un fenómeno debido al movimiento de agua, \mathbf{D}' es el mismo que el de transporte de soluto.

3.6. Fuentes y Sumideros de Energía

Flujo externo :

$$\rho^* q C_F T^* = \frac{M_F}{V_F} \cdot \frac{V_F}{T V_T} \cdot \frac{E}{M_F K} \cdot K = \frac{E}{V_T T} \quad (3.12)$$

Fuente de calor sobre el fluido :

$$\rho\Theta\gamma_0^f = \frac{M_F}{V_F} \cdot \frac{V_F}{V_T} \cdot \frac{E}{M_F T} = \frac{E}{V_T T} \quad (3.13)$$

Fuente de calor sobre el sólido :

$$(1 - \phi)\rho_s\gamma_0^s = \rho_d\gamma_0^s \quad (3.14)$$

3.7. Ecuación de Transporte de Calor

El balance queda

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\Theta C_F T + \rho_d C_d T)}{\partial t} = & -\nabla \cdot (\rho C_F \mathbf{q} T) + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \\ & + \nabla \cdot (\rho C_F \mathbf{D}' \nabla T) + \rho^* r C_F T^* + \rho\Theta\gamma_0^f + \rho_d\gamma_0^s \end{aligned} \quad (3.15)$$

Restando la ecuación de flujo multiplicada por $C_F T$, es decir,

$$C_F T \frac{\partial(\rho\Theta)}{\partial t} = -C_F T \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) + \rho r C_F T \quad (3.16)$$

Se obtiene

$$\begin{aligned} \rho\Theta \frac{\partial(C_F T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_d C_d T)}{\partial t} = & -\rho \mathbf{q} \nabla(C_F T) + \nabla \cdot (\lambda_T \nabla T) + \\ & + \nabla \cdot (\rho C_F \mathbf{D}' \nabla T) + r C_F (\rho^* T^* - \rho T) + \rho\Theta\gamma_0^f + \rho_d\gamma_0^s \end{aligned} \quad (3.17)$$

Ordenando un poco los términos

$$\begin{aligned} \rho C_F \left[\Theta + \frac{\rho_d C_d}{\rho C_F} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = & -\rho C_F \mathbf{q} \nabla T + C_F \nabla \cdot \left[\rho \left(\frac{\lambda_T}{\rho C_F} + \mathbf{D}' \right) \nabla T \right] + \\ & + r C_F (\rho^* T^* - \rho T) + \rho\Theta\gamma_0^f + \rho_d\gamma_0^s \end{aligned} \quad (3.18)$$

Si llamamos

$$\mathbf{D} = \frac{\lambda_T}{\rho C_F} + \mathbf{D}' \quad (3.19)$$

Entonces tenemos

$$\begin{aligned} \rho C_F \left[\Theta + \frac{\rho_d C_d}{\rho C_F} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = & -\rho C_F \mathbf{q} \nabla T + C_F \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \nabla T) + \\ & + r C_F (\rho^* T^* - \rho T) + \rho\Theta\gamma_0^f + \rho_d\gamma_0^s \end{aligned} \quad (3.20)$$

Se puede simplificar dividiendo por C_F

$$\begin{aligned} \rho \left[\Theta + \frac{\rho_d C_d}{\rho C_F} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = & -\rho \mathbf{q} \nabla T + \nabla \cdot (\rho \mathbf{D} \nabla T) + r(\rho^* T^* - \rho T) + \\ & + \frac{\rho}{C_F} \Theta \gamma_0^f + \frac{\rho_d}{C_F} \gamma_0^s \end{aligned} \quad (3.21)$$

Cuando la densidad se considera constante, la ecuación anterior se puede simplificar dividiendo por ρ , escribiendo así

$$\begin{aligned} \left[\Theta + \frac{\rho_d C_d}{\rho_0 C_F}\right] \frac{\partial T}{\partial t} = & -\mathbf{q}\nabla T + \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla T) + r(T^* - T) + \\ & + \frac{1}{C_F}\Theta\gamma_0^f + \frac{\rho_d}{\rho_0 C_F}\gamma_0^s \end{aligned} \quad (3.22)$$

donde se ha usado que $\rho = \rho^* = \rho_0$. Nótese que la densidad de referencia no se simplifica en toda la ecuación y que aparece en los términos de almacenamiento, conducción (dentro de \mathbf{D}) y fuente de calor todos ellos referentes al sólido.

3.8. Formulación unificada de transporte de soluto y calor

Las ecuaciones de transporte de soluto y calor obtenidas son

$$\rho(\Theta + \alpha_s) \frac{\partial \omega}{\partial t} = -\rho\mathbf{q} \cdot \nabla \omega + \nabla \cdot (\rho\mathbf{D}\nabla \omega) - \lambda_T \rho[\Theta + \alpha_s]\omega + r(\rho^* \omega^* - \rho\omega) \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \left(\rho\Theta + \frac{\rho_d C_d}{C_F}\right) \frac{\partial T}{\partial t} = & -\rho\mathbf{q}\nabla T + \nabla \cdot (\rho\mathbf{D}\nabla T) + r(\rho^* T^* - \rho T) + \\ & + \frac{\rho}{C_F}\Theta\gamma_0^f + \frac{\rho_d}{C_F}\gamma_0^s \end{aligned} \quad (3.24)$$

El tensor \mathbf{D} en cada caso toma una forma distinta

$$\mathbf{D}_{soluto} = \Theta\mathbf{D}_m + \mathbf{D}' \quad (3.25)$$

$$\mathbf{D} = \frac{\lambda_T}{\rho C_F} + \mathbf{D}' = \frac{\Theta\lambda_w + (1 - \phi)\lambda_s}{\rho C_F} + \mathbf{D}' \quad (3.26)$$

donde, en dos dimensiones

$$D_{ij} = \alpha_T \|\mathbf{q}\| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{q}\|} \quad (i, j = x, y), \quad (3.27)$$

Pese a la similitud de las ecuaciones, notamos que en cada caso la dependencia de \mathbf{D} respecto de las variable de estado es distinta.

Parte II

USO

Capítulo 4

Entrada de datos

Los archivos de entrada de TRANSDENS se basan en los de TRANSIN 4. Los siguientes añadidos son necesarios.

4.1. Archivo DIM

Dimensiones

Se añade una entrada tras la tarjeta A3.3 (es decir justo antes de DIMENSIONS, ver figura 4.1) que contiene información sobre el tipo de almacenamiento y problema que se va a resolver:

- ISPAR

Significado: Elige el tipo de almacenamiento de las matrices.

Formato: I5

Valor: 0 Almacenamiento en banda; 1 almacenamiento vacío

Observaciones: Si se elige la opción de almacenamiento vacío, sólo se puede usar el solver iterativo (IDRECT = 0).

- IDRECT

Significado: Tipo de solver para resolver el sistema de ecuaciones.

Formato: I5

Valor: 1 Solver directo; 0 Solver iterativo

Observaciones: Si se usa el solver iterativo hay que rellenar la tarjeta con los parámetros de WATSOLVE.

■ IODENS

Significado: Indica si hay densidad variable.

Formato: I5

Valor: 1 Densidad variable; 0 Densidad constante

Observaciones: Si el problema es de densidad variable hay que rellenar las tarjetas referentes a los parámetros de convergencia y el esquema de resolución.

■ ITPTVAR

Significado: Indica el tipo de problema de transporte.

Formato: I5

Valor: 0 soluto; 1 calor.

Observaciones: Si el problema es de transporte de calor, la viscosidad dependerá de la temperatura. No hay opción para mantenerla constante.

■ IOCONSRC

Significado: Incluye en la ecuación de flujo las fuentes de masa asociadas a las condiciones de contorno de transporte que implican entrada de soluto sin entrada de agua.

Formato: I5

Valor: 0 No se incluyen; 1 se incluyen.

Observaciones: No usar cuando se resuelve transporte de calor. Las derivadas asociadas a estos flujos no están programadas. Puede dar problemas si se usa el método de Newton o resuelve problema inverso.

Opciones de calibración logarítmica y pesos

TRANSDENS incluye una nueva condición de contorno en transporte llamada provisionalmente “goteo de concentración”. El coeficiente de goteo asociado se puede calibrar de la misma manera que el resto de parámetros. Las opciones de transformación logarítmica (tarjeta A5.1) y los pesos de la contribución a la función objetivo (tarjeta A9.1) incluyen dos nuevas variables asociadas al nuevo parámetro. Las variables nuevas son IOLGCLK (I5, figura 4.2) y XLAMCLK (F10, figura 4.3).

```

PRT_OPTIONS
  2  2  0
%IEQT  INV  TRS  CNSF  RTS  CNST  IVAR  ILAM  IDIM  IFLI  ITLI  FOBJ  IPRH
  3  -1  1  1  1  1  0  0  2  0  0  0  0
%DENSITY DEPENDENT OPTIONS
% ISPAR  IDRECT  IODENS  ITPTVAR  IOCONSRC
  0  1  1  0  0
DIMENSIONS

```

Figura 4.1: Tarjeta A3.3. Opciones del problema.

```

LOG_ESTIMATION_OPTIONS
% TRA  STG  ARR  CHP  QQP  ALF  DSP  DFM  POR  LAM  CRD  COE  PRG  CHUM  IOLGCLK
  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1

```

Figura 4.2: Tarjeta A5.1. Opciones de transformación logarítmica.

```

WEIGHTING_PARAMETERS
%  XLAMTRA  XLAMSTG  XLAMARR  XLAMCHP  XLAMQQP  XLAMALF  XLAMPRGF
  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00
%  XLAMDSP  XLAMDFM  XLAMPOR  XLAMFOD  XLAMCRD  XLAMCOE  XLAMPRGT  XLAMCLK
  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00  1.0E+00

```

Figura 4.3: Tarjetas A9.1 y A9.2. Peso para cada tipo de parámetro.

Opciones de salida

TRANSDENS escribe la velocidad de Darcy en un archivo con formato UCD. Para activar la escritura la variable IOWVD (tarjeta A3.6) debe ser mayor que cero. Las velociades se escriben cada IOWVD tiempos.

Parámetros de convergencia

Cuando hay densidad variable, hay que indicar los parámetros de convergencia. Estos parámetros están en la tarjeta DIRECT_PROB_CONV_PARAMETERS (Figura 4.4). No son nuevos, pero los describimos aquí por comodidad. Los parámetros se repiten para flujo y transporte. Los más importantes son:

- DRELMXFL / DRELMXTR

Significado: Maximo cambio relativo entre iteraciones

Formato: F10

Valor: 10^{30}

Observaciones: Este criterio no se usa. Se recomienda ponerlo muy grande para evitar comportamientos no deseados.

■ DABSMXFL / DABSMXTR

Significado: Maximo cambio entre iteraciones

Formato: F10

Valor: 10^{-3} para niveles y 10^{-5} para concentraciones debería bastar.

Observaciones: No tomar los valores sugeridos como si fueran palabra de Dios.

■ RESIDMXF / RESIDMXT

Significado: Residuo máximo

Formato: F10

Valor: Dificil de precisar.

Observaciones: El residuo tiene un valor dependiente del problema. Por tanto, es difícil decir a priori qué valor es grade o pequeño. Se recomienda poner muy pequeño y obligar al programa a converger por el cambio entre iteraciones.

■ DHITMX / DCITMX

Significado: Maximo cambio permitido en el método de Newton.

Formato: F10

Valor: 10^{30}

Observaciones: Poner muy grande.

Esquema iterativo

El esquema iterativo aparecen bajo la etiqueta ITERATIVE_SCHEME (Figura 4.5). Se establece un esquema iterativo para flujo, transporte y el sistema acoplado. Se hace así para permitir iterar en no linealidades propias de flujo o transporte que sean independientes de la densidad variable (por ejemplo, flujo no saturado o transporte con adsorción no lineal).

■ ITERCHNGFL / ITERCHNGTR / ITERCHNGGL

DIRECT_PROB_CONV_PARAMETERS								
%	FCTNCV	FCTDEC	FCTINC	FCTDVNR	MINCAT	CRITRAP		
	1.5	0.5	1.5	1.0	5	0		
%flow								
%DRELMXFL	DABSMXFL	RESIDMXF	ZEROF	DHITMX	MXNRF	IOPINITH	IOWNRFL	
1.0E+30	1.0E-05	1.0E-05	1.0E-19	1.0E+30	6	0	9	
%transport								
%DRELMXTR	DABSMXTR	RESIDMXT	ZEROT	DCITMX	MXNRRT	IOPINITC	IOWNRTR	
1.0E+30	1.0E-05	1.0E-05	1.0E-19	1.0E+30	6	0	9	

Figura 4.4: Tarjeta A9.3. Parametros de convergencia del problema directo.

Significado: Número de iteraciones del primer método de linearización.

Formato: I5

Valor: 100

Observaciones: Si se necesitan más de 500 es que algo anda mal.

■ ITERCONVFL / ITERCONVTR

Significado: Número de iteraciones del segundo método. Equivale al número máximo de iteraciones.

Formato: I5

Valor: Poner igual a ITERCHNGFL / ITERCHNGTR

Observaciones:

■ NRITCTNFL

Significado: Permitir cambiar al método de Newton.

Formato: I5

Valor: 0 No; 1 Sí.

Observaciones: No operativo

■ MAXNUMDIVFL / MAXNUMDIVTR

Significado: Máximo número de veces que el método de Newton puede diverger (es decir, el incremento de la variable d estado entre iteraciones crece).

Formato: I5

Valor: 99999

Observaciones: Poner muy grande para evitar que una oscilación en el problema detenga la simulación.

- IDMET1FL / IDMET1TR / IDMET1GL

Significado: Método de linealización inicial.

Formato: I5

Valor: 0 No resolver (sólo calcular matrices), 1 Picard, 2 Newton

Observaciones: Ver comentarios sobre las combinaciones permitidas en el capítulo 5.

ITERATIVE_SCHEME				
% ITERCHNGFL	ITERCONVFL	NRITCTNFL	MAXNUMDIVFL	IDMET1FL
500	500	1	900	1
%ITERCHNGTR	ITERCONVTR	NRITCTNTR	MAXNUMDIVTR	IDMET1TR
500	500	1	900	1
%ITERCHNGGL	NRITMET2GL	IDMET1GL		
500	500	1		

Figura 4.5: Esquema iterativo.

Parámetros de WATSOLVE

Cuando se elige el solver iterativo y almacenamiento vacío debe rellenarse la tarjeta WATSOLVE PARAMETERS (figura 4.6). Los detalles del significado y funcionamiento del solver se pueden consultar en el manual de WATSOLVE.

- IWALGO

Significado: Identificador del primer algoritmo de resolución.

Formato: I5

Valor: 1:CGSTAB, 2:GMRES

Observaciones: Ninguna.

- IWNORTHSTART

Significado: Número inicial de vectores ortogonales.

Formato: I5

Valor: 10

Observaciones: Ninguna.

■ IWORTHMAX

Significado: Número máximo de vectores ortogonales.

Formato: I5

Valor: 19

Observaciones: Ninguna.

■ IWPLAN_B

Significado: Identificador de la estrategia alternativa.

Formato: I5

Valor: 0:Parar, 1:Cambiar a CGSTAB, 2:Incrementar el número de vectores ortogonales.

Observaciones: Se usa cuando no converge.

■ MAXNB

Significado: Número máximo de conexiones en un nudo.

Formato: I5

Valor: Según la malla.

Observaciones: Ninguna.

■ IPRECOND

Significado: Nivel de preconditionado de la matriz del sistema.

Formato: I5

Valor: 0-5

Observaciones: Ninguna.

■ MAXNBF

Significado: Número de conexiones en la matriz preconditionada.

Formato: I5

Valor: Según malla y preconditionado.

Observaciones: Ninguna.

■ RTWOTOL

Significado: Criterio de convergencia según el residuo euclidiano de la norma 2.

Formato: F10

Valor: 10^{-38}

Observaciones: Ninguna.

■ RMAXTOL

Significado: Criterio de convergencia según la norma infinito.

Formato: F10

Valor: 10^{-38}

Observaciones: Ninguna.

■ SMAXTOL

Significado: Criterio de escalado de la actualización de la solución según la norma infinito.

Formato: F10

Valor: 10^{-38}

Observaciones:

■ NITMAX

Significado: Número máximo de iteraciones.

Formato: I5

Valor: 300

Observaciones: Ninguna.

- IDETAIL

Significado: Detalle de la salida del solver.

Formato: I5

Valor: 0:Nada, 1:Resumen, 2:Completo.

Observaciones:

```

WATSOLVE PARAMETERS
%IWALGO  IWNORTHSTART  IWNORTHMAX  IWPLAN_B  MAXNB  IPRECOND  LEVEL  MAXNBF
      1    10    19    2    9    1    2    18
%  RTWOTOL  RMAXTOL  SMAXTOL  NITMAX  IDETAIL
%1FORMAT(3F10.0,2I5)
      1E-38    1E-38    1E-38  300    0

```

Figura 4.6: Parametros de WATSOLVE.

4.2. Archivo GRI

En el archivo GRI se añade una columna a la tarjeta B1.3 (figura 4.7) que contiene las condiciones de contorno para indicar la zona de “goteo de concentración”. Esta zona se indica tras la zona de difusión en la matriz con formato I5.

```

% CARD B1.3
%  N  BCOD  BTCO  CHP  CHPT  QQP  QQPT  ALF  ALFT  CON  CONT  DMT  CLK
      1    0    5    0    0    0    0    0    0    1    1    0    1
      2    0    0    0    0    0    0    0    0    0    0    0    0

```

Figura 4.7: Tarjeta B1.3. Nueva condición de goteo.

4.3. Archivo PAR

Coefficientes de nudo

En el archivo PAR hay que indicar el coeficiente de nudo de las zonas de “goteo de concentración”. Este coeficiente va tras el coeficiente de concentración externa transitorio con formato F9 (figura 4.8).

%	NODAL COEFFICIENTS							
%	N	CFCHP	CFCHPT	[...]	CFALFT	CFCON	CFCONT	CFCLK
	1	0.0	0.0	...	0.0	1.0	1.0	1.0
	2	0.0	0.0	...	0.0	1.0	1.0	1.0

Figura 4.8: Tarjeta C1.2. Coeficientes de nudo de la nueva condición de goteo (se han eliminado tres columnas).

Zona de “goteo de concentración”

El parámetro de zona de “goteo de concentración” se escribe tras las zonas de concentración externa. El formato es el mismo que el del resto de parámetros de zona (figura 4.9).

Propiedades del agua

Cuando se resuelve densidad variable es necesario incluir el vector gravedad (tarjeta c18, figura 4.9). Debe ser un vector unitario. Asimismo hay que incluir los parámetros propios de la densidad variable (figura 4.9). Al final del archivo. Estos parámetros son:

- DENSF

Significado: Densidad de referencia (ρ_0 en $\rho = \rho_0 e^{\beta_\omega(\omega - \omega_0)}$)

Formato: F10

Valor: 1000 kg/m³

Observaciones: Obligatorio cuando se resuelve transporte de calor tanto con densidad constante como variable.

- CZERO

Significado: Fracción másica de referencia (ω_0 en $\rho = \rho_0 e^{\beta_\omega(\omega - \omega_0)}$)

Formato: F10

Valor: 0

Observaciones: Usar 0. Obligatorio cuando se resuelve transporte de calor tanto con densidad constante como variable.

- BETA

Significado: Parámetro de la ley de densidad (β_ω en $\rho = \rho_0 e^{\beta_\omega(\omega - \omega_0)}$)

Formato: F10

Valor: Aproximadamente 0.7 en problemas de intrusión marina y $-0.375 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ en transportes de calor.

Observaciones: Ninguna.

■ VSICF

Significado: Viscosidad de referencia.

Formato: F10.

Valor: $10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$

Observaciones: Valor de la viscosidad del agua a 20°C.

■ TEMPF

Significado: Temperatura de referencia. Análogo a CZERO.

Formato: F10

Valor: Ningún valor recomendado.

Observaciones: Ninguna.

■ WTHERMCON

Significado: Conductividad térmica del agua.

Formato: F10

Valor: 0.58 J/msK

Observaciones: Obligatorio cuando se resuelve transporte de calor tanto con densidad constante como variable.

■ WSPECHEAT

Significado: Calor específico del agua.

Formato: F10

Valor: 4.18 kJ/kgK

Observaciones: Obligatorio cuando se resuelve transporte de calor tanto con densidad constante como variable.

%CONCENTRATION							
% NZ	COE	IV	STDEV	PRIOR	NFNL	NFT	
1	0.0100	0	0.0	0.0	0	0	
2	0.1000	0	0.0	0.0	0	0	
%CONCENTRATION LEAKAGE							
% NZ	CLK	IV	STCLK	PRIOR	NFNL	NFT	
1	0.05000	0	0.0	0.0	0	0	
%GRAVITY VECTOR							
	0.0	-1.0	0.0				
%WATER PROPERTIES							
%	DENSF	CZERO	BETA	VISCF	TEMPF	W THERMCON	WSPECHEAT
	1000.0	0.0	0.7	0.001e-6	20.0	0.58	4.18

Figura 4.9: Parámetro de zona de la nueva condición de goteo y propiedades del agua.

Correspondencia entre zonas de transporte de soluto y energía

Cuando se resuelve transporte de energía la estructura del archivo PAR no cambia. Sin embargo, algunos de los parámetros cambian de significado. La correspondencia es la siguiente:

- La difusión molecular pasa a ser la conductividad térmica del sólido.
- El retardo pasa a ser la capacidad calorífica del suelo ($\rho_d C_d$).
- La concentración externa pasa a ser temperatura externa.
- La entrada de masa pasa a ser potencia disipada. Se incluyen dentro de las zonas de concentración externa.

4.4. Archivo TIM

A partir de la versión 0.996, TRANSDENS es capaz de interpolar los huecos entre tiempos de cálculo en la misma manera que se interpolan las coordenadas y condiciones de contorno en el archivo GRI (figura 4.10). Los valores de KINT, DTMXDS y ISOLEQ toman el valor del tiempo menor. No se interpolan los valores de la función de tiempo.

%	N	TIME	KINT	DTMXDS	ISOLEQ			
	1	0.0	0	0.1	0	0	1	1
	2	0.1	0	0.1	0	0	1	1
	3	0.2	0	0.1	0	0	1	1
	4	0.3	0	0.1	0	0	1	1

%	N	TIME	KINT	DTMXDS	ISOLEQ			
	1	0.0	0	0.1	0	0	1	1
	4	0.3	0	0.1	0	0	1	1

Figura 4.10: Tarjeta D1.1. TRANSDENS interpola los valores de los tiempos de cálculo en el archivo TIM. Ambas entradas de datos son equivalentes.

Capítulo 5

Recomendaciones de uso

A continuación se describen algunos detalles importantes del funcionamiento de TRANSSENS.

5.1. Almacenamiento de las matrices y solver

Cuando se elija el almacenamiento vacío ($ISPAR = 1$) deberá elegirse forzosa-mente el solver iterativo ($IDRECT = 0$). Evidentemente, hay que dar los parámetros de WATSOLVE. No se puede usar el esquema iterativo cuando se resuelve el problema inverso.

5.2. Difusión en la matriz

TRANSSENS permite resolver problemas con difusión en la matriz sólo con densidad constante. Existe la posibilidad de que las últimas actualizaciones de TRANSSENS 4 no estén en TRANSSENS.

5.3. Esquema Iterativo

TRANSSENS permite elegir el método mediante el cual se desea linealizar las ecuaciones de flujo y transporte. Los métodos disponibles son el método de Picard y el método de Newton. TRANSSENS distingue entre los métodos a utilizar para la ecuación de flujo, transporte y el problema acoplado (el que hay cuando hay densidad variable). Esto quiere decir que las no linealidades inherentes a cada ecuación pueden resolverse de manera diferente a la no linealidad asociada a la densidad variable.

ITERATIVE_SCHEME				
% ITERCHNGFL	ITERCONVFL	NRITCTNFL	MAXNUMDIVFL	IDMET1FL
500	500	1	900	1
%ITERCHNGTR	ITERCONVTR	NRITCTNTR	MAXNUMDIVTR	IDMET1TR
500	500	1	900	1
%ITERCHNGGL	NRITMET2GL	IDMET1GL		
500	500	1		

Figura 5.1: Esquema iterativo para un problema con densidad variable resuelto con el método de Picard.

La filosofía de `TRANSDENS` es permitir iniciar el proceso iterativo con uno de los dos métodos y cambiar al otro tras un cierto número de iteraciones. El programa se detiene si se alcanza el máximo número de iteraciones y sin converger. El programa también se detiene si cuando se usa el método de Newton, el cambio en la variable de estado entre dos iteraciones crece un determinado número de veces seguidas.

En términos de las variables de `TRANSDENS` esto significa que se comienza a resolver el problema con el método `IDMET1FL` (sólo nombramos las variables de flujo), tras `ITERCHNGFL` iteraciones se cambia al otro método de linealización hasta alcanzar `ITERCONVFL` iteraciones. Si durante el proceso el método de Newton diverge `MAXNUMDIVFL` veces, el programa se detiene. `NRITCTNFL` indica al código que en algún momento puede usarse el método de Newton. Su utilidad es fundamentalmente para calcular las dimensiones de las matrices.

Un fallo en la versión actual del código hace que el número de divergencias no se ponga a cero al inicio de cada paso de tiempo por lo que en simulaciones largas es probable que `MAXNUMDIVFL` se exceda. Se recomienda poner este número a un valor muy alto para evitar problemas.

Ejemplo 1. Problema con densidad variable y método de Picard

Supongamos que se quiere resolver un problema con densidad variable utilizando sólo el método de Picard (figura 5.1). Esto significa que debemos decir al programa que resuelva flujo (`IDMET1FL = 1`), transporte (`IDMET1TR = 1`) y que compruebe la convergencia del problema acoplado (`IDMET1GL = 1`). Como no se desea que se cambie de método hacemos `ITERCHNGFL = ITERCONVFL`, `ITERCHNGTR = ITERCONVTR` y `ITERCHNGGL = NRITMET2GL`.

A pesar de que tanto flujo como transporte no tienen no linealidades intrínsecas, debe indicarse que utilizan el método de Picard. La opción `IDMET1FL = 0` (o `IDMET1TR = 0`) no es aplicable puesto que para que el problema acoplado use el método de Picard, deben resolverse las ecuaciones de flujo y transporte por separado.

```

ITERATIVE_SCHEME
% ITERCHNGFL  ITERCONVFL  NRITCTNFL  MAXNUMDIVFL  IDMET1FL
  500  500  1  900  0
%ITERCHNGTR  ITERCONVTR  NRITCTNTR  MAXNUMDIVTR  IDMET1TR
  500  500  1  900  0
%ITERCHNGGL  NRITMET2GL  IDMET1GL
  500  500  2

```

Figura 5.2: Esquema iterativo para un problema con densidad variable resuelto con el método de Newton.

```

ITERATIVE_SCHEME
% ITERCHNGFL  ITERCONVFL  NRITCTNFL  MAXNUMDIVFL  IDMET1FL
  700  700  1  900  2
%ITERCHNGTR  ITERCONVTR  NRITCTNTR  MAXNUMDIVTR  IDMET1TR
  500  500  1  900  1
%ITERCHNGGL  NRITMET2GL  IDMET1GL
  500  500  1

```

Figura 5.3: Esquema iterativo para un problema con densidad variable resuelto con el método de Picard y flujo no lineal resuelto con el método de Newton.

Ejemplo 2. Problema con densidad variable y método de Newton

Para indicar a `TRANSDENS` que resuelva mediante el método de Newton el problema de densidad variable hay que decirle que sólo calcule las matrices de flujo y transporte ($IDMET1FL = IDMET1TR = 0$) y que utilice el método de Newton para el problema acoplado ($IDMET1GL = 2$). De nuevo indicamos que $ITERCHNGFL = ITERCONVFL$, $ITERCHNGTR = ITERCONVTR$ y $ITERCHNGGL = NRITMET2GL$ para evitar el cambio de método. La tarjeta completa puede verse en la figura 5.2

Ejemplo 3. Problema no lineal de flujo con densidad variable

Cuando flujo o transporte tiene no linealidades intrínsecas, es posible indicar a `TRANSDENS` que itere en la ecuación no lineal antes de pasar al problema acoplado. Esto puede ser útil cuando las no linealidades de una de las ecuaciones son más fuertes que las debidas a la densidad variable.

Supongamos que tenemos un problema de zona no saturada y densidad variable. En ese caso podemos decir a `TRANSDENS` que utilice el método de Newton para resolver las no linealidades de flujo, y Picard para las del problema acoplado. La tarjeta correspondiente se encuentra en la figura 5.3. Nótese que el número máximo de iteraciones de flujo es diferente del número máximo de iteraciones globales.

ITERATIVE_SCHEME				
% ITERCHNGFL	ITERCONVFL	NRITCTNFL	MAXNUMDIVFL	IDMET1FL
20	500	1	900	1
%ITERCHNGTR	ITERCONVTR	NRITCTNTR	MAXNUMDIVTR	IDMET1TR
20	500	1	900	1
%ITERCHNGGL	NRITMET2GL	IDMET1GL		
20	500	1		

Figura 5.4: Esquema iterativo que permite el cambio de Picard a Newton.

Ejemplo 4. Problema que permite cambiar de Picard a Newton

Si se desea cambiar de Picard a Newton entonces el número de iteraciones del primer método debe ser menor que el número total de iteraciones. La figura 5.4 muestra un ejemplo en el que se pasa al método de Newton tras 20 iteraciones del método de Picard.

Esquema iterativo y problema inverso

Si se desea resolver el problema inverso con densidad variable sólo puede usarse el método de Newton. Es decir, debe usarse $IDMET1FL = 0$, $IDMET1TR = 0$ y $IDMET1GL = 2$. No debe permitirse el cambio de método.

5.4. Fuentes de soluto en la ecuación de flujo

Esta opción ($IOCONSRC = 1$) sólo funciona correctamente cuando hay densidad variable y se utiliza el método de Picard. No funciona con el método de Newton ni cuando se resuelve el problema inverso.

5.5. Gestión de tiempos y régimen de las ecuaciones

En TRANSSENS y en TRANSIN 4 existe una incompatibilidad entre los archivos DIM y TIM. Para evitar sorpresas, se recomienda gestionar los regímenes de tiempos a través del archivo TIM y la variable ISOLEQ. Es decir, indicar en el archivo DIM que se resuelve flujo y transporte transitorios con condiciones iniciales prescritas y utilizar ISOLEQ para cambiar el régimen. Esto obliga a incluir siempre una zona de almacenamiento aunque se resuelva un estacionario.

Por ejemplo, para resolver un problema transitorio de densidad variable habría que usar $IOEQT = 3$, $IOTRS = 1$ y $IORTS = 1$ en el archivo DIM y un archivo TIM como el de la figura 5.5.

%	N	TIME	KINT	DTMXDS	ISOLEQ			
	1	0.0	1	0.0	0	0	0	0
	2	3.0	1	0.0	0	0	0	0

Figura 5.5: Archivo TIM para un problema transitorio.

5.6. Malla

TRANSDENS soporta elementos 1D, triángulos, cuadriláteros y toblones. Si se tiene una malla triangular con densidad variable, los triángulos deberán ser “triángulos en un medio 3D” (LTYPE = 10). Esto es necesario para que TRANSDENS proyecte el vector gravedad sobre cada elemento.

Los cuadriláteros deben tener ángulos rectos. Además, se recomienda que no sean muy elongados.

5.7. Parámetros de convergencia

Los criterios DRELMXFL y DRELMXTR no se utilizan para comprobar la convergencia. Sin embargo, puede afectar al esquema iterativo. Se recomienda poner un valor muy grande a estos criterios.

5.8. Parámetros de zona en archivo PAR y transporte de calor

Cuando se resuelve transporte de calor algunos de los parámetros de zona en el archivo PAR cambian de significado. La correspondencia es la siguiente:

- La difusión molecular pasa a ser la conductividad térmica del suelo.
- El retardo pasa a ser la capacidad calorífica del suelo ($\rho_d C_d$).
- La concentración externa pasa a ser temperatura externa.
- La entrada de masa pasa a ser potencia disipada. Se incluyen dentro de las zonas de concentración externa.

5.9. Posproceso

Se recomienda usar TD2VTK para el posproceso de la salida de TRANSDENS.

5.10. Problema inverso

Cuando se resuelve problema inverso con densidad variable sólo se puede elegir el almacenamiento en banda de las matrices y el solver directo (ISPAR = 0 y IDRECT = 1). Además, el esquema de resolución debe ser “Newton acoplado” (IDMET1FL = 0, IDMET1TR = 0 y IDMET1GL = 2).

El problema inverso geoestadístico está implementado en el código. Sin embargo, no contiene las últimas modificaciones de TRANSIN 4 ni ha sido probado.

5.11. Problemas simultáneos os sucesivos

Cuando se resuelven varios problemas simultáneos de transporte con densidad variable, TRANSDENS considera que el primer problema es el controla la densidad del fluido.

5.12. Reacciones de primer orden

Aunque está permitido, no tiene sentido incluir reacciones de primer orden cuando se resuelve transporte de calor.

5.13. Recarga

TRANSDENS permite especificar una recarga negativa para simular procesos de evaporación. Es decir, sale agua del sistema pero no soluto. Esta opción no debe usarse en problemas de transporte de calor ya que el comportamiento no es coherente con el balance de energía.

5.14. Retardo

En TRANSDENS el retardo se define de distinta manera que en TRANSIN 4. La relación entre ambos es la siguiente

$$R_{\text{TRANSDENS}} = \phi \times (R_{\text{TRANSIN 4}} - 1) \quad (5.1)$$

5.15. Viscosidad

TRANSDENS calcula la viscosidad en MPa·s. Por tanto, la viscosidad de referencia (VSICF) debe darse en estas mismas unidades. Esto no afecta al resto de la entrada de datos que puede estar en otras unidades, siempre y cuando sean coherentes.

La dependencia de la viscosidad con la temperatura está controlada por las variable IODENS y ITPTVAR. Es decir, siempre que se resuelva un problema de transporte de calor con densidad variable, la viscosidad también será variable.

Si se quiere mantener la viscosidad constante, hay que resolver un problema de transporte de soluto.

Si se quiere que la viscosidad varíe pero que la densidad sea constante hay que resolver un problema de transporte de calor y poner $BETA = 0$.

5.16. Zona no saturada

Cuando se resuelven problemas con zona no saturada hay que tener en cuenta que TRANSDENS trabaja con niveles equivalentes de agua dulce.

El funcionamiento con zona no saturada está pendiente de una verificación profunda.

Capítulo 6

Código

6.1. Parches

Hay diversos fragmentos de código en cerrados entre los comentarios `c-parche` y `c-fin-parche`. Estas etiquetas se usan principalmente para facilitar la búsqueda de opciones provisionales, fragmentos de código útiles para la depuración que no están asociados a ningún IFLAGS o comportamientos que difieren de los de TRANSIN 4.

Nadie llama a COMP DER DMT. Partición: IDIZPAR, IDINTAUx, IDIVARCK GS, (todos de IV). IDESTPARZ (de RV)

6.2. IFLAGS

...