

CAPÍTULO 6. CONVECCIÓN HÚMEDA

da) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\bar{T} = 52^{\circ}$ C, $\Delta T = 11,7^{\circ}$ C, $t = 0,00933t_c$. Figura 6.14: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquier-







Figura 6.16: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquier-da) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\overline{T} = 53.5^{\circ}$ C, $\Delta T = 11,0^{\circ}$ C, $t = 0,00819t_c$.

que la sobredensidad generada por la creciente cantidad de agua líquida permite la desestabilización de su frontera inferior.

Estos rasgos notables, al igual que el tamaño de los vórtices más pequeños (alrededor de 1 cm) y las velocidades típicas (del orden de las decenas de cm/s), se hallan en concordancia con observaciones experimentales [1, 7, 21, 22].

Otra característica notable, visible en todas las figuras 6.5 a 6.16, y que es relevante para los rasgos mencionados anteriormente, es que el campo de concentración de agua es mucho más difuso que el de temperatura. Esto se explica porque, si bien la difusividad de la concentración λ y la difusividad de la temperatura por debajo de la saturación μ_{-} son comparables, la difusividad de la temperatura por encima de la saturación μ_{+} llega a ser más de un orden de magnitud menor que ambas, debido a que la presencia de agua líquida hace a una parcela mucho más difícil de calentar o enfriar. Las regiones sobresaturadas tienden entonces a permanecer aproximadamente isotérmicas, mientras difunden grandes cantidades de agua a las parcelas circundantes, sobresaturándolas a su vez en un efecto de cascada que distribuye la concentración de agua con una eficiencia mucho mayor que la temperatura.

6.2.6. Flujo térmico y de masa

Consistentemente con la deducción de las ecuaciones de transporte de calor (3.26) y de concentración (3.31), las corrientes difusivas de calor (sensible) y de concentración de agua se definen respectivamente como

$$\mathbf{j}_h = -K\nabla T,\tag{6.2}$$

$$\mathbf{j}_w = -D\nabla q,\tag{6.3}$$

donde de acuerdo a la aproximación de Boussinesq trataremos la conductividad térmica K, la densidad ρ y el coeficiente de difusión D como constantes, iguales a sus respectivos valores en el estado de referencia.

De acuerdo al modelo del Capítulo 3, en una frontera con CC de contacto térmico perfecto todo el calor sensible que la atraviesa se deposita en ella. La tasa de transferencia de calor sensible a través de una frontera es

$$Q_s = -K \int_A \nabla T \cdot d\mathbf{s},\tag{6.4}$$

donde $d\mathbf{s}$ es el diferencial de área normal y A es el área de la frontera. El flujo térmico es entonces

$$J_s = \frac{Q_s}{A}.\tag{6.5}$$

Tomando en cuenta que en 2D la frontera es unidimensional, y realizando la cadena de transformaciones de adimensionalización de la Sección 3.2,



Figura 6.17: Flujo térmico J numérico por calor sensible (azul), latente (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 20^{\circ}$ C, $\Delta T = 2,3^{\circ}$ C, en función del tiempo.

tendremos para el flujo térmico (por calor sensible) a través de la cubierta izquierda (x = 0) del destilador

$$J_s = \frac{K\Delta T}{H} \frac{1}{\ell'_z} \int_0^{\ell'_z} \partial_{x'} (\tau + \theta) |_{x'=0} dz', \qquad (6.6)$$

donde H es la altura del destilador, ℓ'_z es la longitud de la cubierta izquierda x' = 0, y hemos vuelto a primar las variables adimensionales para impedir confusiones.

Encontramos ahora, sin embargo, un serio problema: el flujo térmico a través de una región de sección triangular, con la base caliente y el techo frío, es una integral divergente. Ello es debido a que las fronteras fría y caliente convergen en el ángulo, de modo que aún en el estado conductivo el gradiente térmico diverge allí. La contribución convectiva será en cambio finita, ya que el ángulo es una zona de estancamiento.

Obviamente este problema no se presenta en la práctica por multitud de razones (la cubierta del destilador no apoya directamente sobre el agua, por



Figura 6.18: Rendimiento numérico por condensación de vapor (azul), deposición de gotas (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\overline{T} = 20^{\circ}$ C, $\Delta T = 2,3^{\circ}$ C, en función del tiempo.

ejemplo), pero debemos encontrar una forma de evitarlo matemáticamente. Notemos que numéricamente, al estar los campos discretizados sobre la grilla directa no tendremos una divergencia, pero igualmente las contribuciones a J_s de regiones cercanas al ángulo estarán "contaminadas" por una contribución conductiva dominante.

La solución que implementamos consiste en limitar la integral de línea en (6.6) a la porción central del techo, lejos de las posibles zonas de estancamiento, reescribiendo

$$J_s = \frac{K\Delta T}{H} \frac{1}{\ell_z'/2} \int_{\ell_z'/4}^{3\ell_z'/4} \partial_{x'} (\tau + \theta)|_{x'=0} dz'.$$
(6.7)

El coeficiente de transferencia térmica por calor sensible se define entonces como

$$h_s = \frac{J_s}{\delta T}.\tag{6.8}$$

donde δT es la diferencia media de temperatura entre la frontera $(T = T_c)$ y el fluido lejos de ella $(T \sim \overline{T})$, de modo que $\delta T = -\Delta T/2$.



Figura 6.19: Flujo térmico J numérico por calor sensible (azul), latente (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 35^{\circ}$ C, $\Delta T = 9.6^{\circ}$ C, en función del tiempo.

El coeficiente de transferencia de masa, por su parte, se define como

$$k_c = \frac{Q_w}{A\delta q},\tag{6.9}$$

donde

$$Q_w = -D \int \nabla q \cdot d\mathbf{s} \tag{6.10}$$

es la tasa de transferencia de concentración a través de la frontera, y δq es la diferencia media de concentración entre la frontera $(q = q_c)$ y el fluido lejos de ella $(q \sim \bar{q})$, de modo que $\delta q = -\Delta q/2$. La corriente de concentración de agua puede a su vez separarse en una contribución \mathbf{j}_{ℓ} debida al agua líquida, y otra \mathbf{j}_v debida al vapor. Siguiendo el mismo tratamiento definimos los coeficientes de transferencia de masa total k_c , de vapor $k_{c,v}$ y de agua



Figura 6.20: Rendimiento numérico por condensación de vapor (azul), deposición de gotas (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 35^{\circ}$ C, $\Delta T = 9.6^{\circ}$ C, en función del tiempo.

líquida $k_{c,l}$ como

$$k_c = \frac{2D}{H} \frac{1}{\ell'_z/2} \int_{\ell'_z/4}^{3\ell'_z/4} \partial_{x'}(\tau + \chi)|_{x'=0} dz', \qquad (6.11)$$

$$k_{c,v} = \frac{2D}{H} \frac{1}{\ell'_z/2} \int_{\ell'_z/4}^{3\ell'_z/4} \partial_{x'} (\tau + \xi)|_{x'=0} dz', \qquad (6.12)$$

$$k_{c,l} = k_c - k_{c,v}.$$
 (6.13)

donde hemos definido el campo de concentración de vapor

$$\xi(\mathbf{r}, t) = \min\left[\chi(\mathbf{r}, t), \theta(\mathbf{r}, t)\right]. \tag{6.14}$$

Ahora bien, de acuerdo al modelo desarrollado en la Sección 3.2, el agua que fluiría por difusión a través de una frontera se deposita en ella. Podemos calcular entonces la tasa de condensación de vapor V, la tasa de deposición



Figura 6.21: Flujo térmico J numérico por calor sensible (azul), latente (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 52^{\circ}$ C, $\Delta T = 11,7^{\circ}$ C, en función del tiempo.

total de agua W y la tasa de deposición de agua líquida U como

$$V = q_s \rho k_{c,v} \qquad (\text{kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}), \qquad (6.15)$$

$$W = q_s \rho k_c \qquad (\mathrm{kg}\,\mathrm{m}^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}),$$
 (6.16)

$$U = W - V. \tag{6.17}$$

Por otra parte, el vapor de agua que condensa en la frontera deposita allí su calor latente. Tendremos entonces una segunda contribución J_l al flujo de calor en la forma de flujo de calor latente

$$J_l = l_v V. \tag{6.18}$$

El flujo de calor total será entonces

$$J_t = J_s + J_l. \tag{6.19}$$

Si quisiéramos definir un coeficiente de transferencia térmica por calor latente, sin embargo, sería difícil justificar una definición como $h_l = J_l/\delta T$,



Figura 6.22: Rendimiento numérico por condensación de vapor (azul), deposición de gotas (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\overline{T} = 52^{\circ}$ C, $\Delta T = 11,7^{\circ}$ C, en función del tiempo.

ya que es fácil imaginar situaciones en que tal definición es patentemente incorrecta: Por ejemplo si la base y la cubierta están a la misma temperatura con la base saturada pero la cubierta subsaturada, tendremos evaporación en la base y condensación en la cubierta con la consiguiente transferencia de calor latente entre ambas, a diferencia de temperatura cero, simplemente por gradiente de concentración (por supuesto la base debe entregar calor y la cubierta eliminarlo, pero ello no necesita que sus temperaturas sean distintas). Otro caso es el enfriamiento evaporativo (por ejemplo en el proceso de transpiración), donde una atmósfera caliente pero seca puede enfriar una superficie húmeda aunque ésta esté más fría que ella.

No intentaremos entonces dar una definición de h_l que tenga sentido, sino que convertiremos los datos experimentales [1] de coeficiente de transferencia térmica a flujo de calor (total), y los compararemos con la predicción numérica. Aunque el coeficiente de transferencia de masa no sufre los mismos problemas, en este caso no tenemos disponibles resultados experimentales al respecto, por lo que la comparación se hará entre resultados numéricos y experimentales [4] de rendimiento de agua destilada.

Por brevedad sólo presentaremos una muestra representativa de los resul-

tados para flujo térmico y rendimiento de agua destilada. Las figuras 6.17 a 6.22 muestran los valores de flujo y rendimiento para las temperaturas indicadas al pié de cada una. En todos los casos puede observarse un transitorio donde la cubierta del destilador inicialmente se enfría, sobre todo por evaporación, para sufrir luego un pico de calentamiento.

Por ejemplo para $\overline{T} = 35^{\circ}$ C, $\Delta T = 9.6^{\circ}$ C (figura 6.19) el enfriamiento alcanza su máximo para $t \sim 0.00025t_c$, y el calentamiento para $t \sim 0.0005t_c$. Comparando con el campo de temperatura mostrado en la figura 6.4, vemos que el pico de enfriamiento corresponde a los tiempos en que la intrusión de la burbuja caliente y húmeda ascendente fuerza al fluido más frío y seco, que inicialmente se hallaba en la cúspide, a descender por el interior de la cubierta (recuérdese que el fluido es incompresible). El pico de calentamiento en cambio, corresponde al tiempo en que dicha burbuja toma contacto con la cubierta, invirtiendo la situación. Tras este transitorio el flujo térmico entra rápidamente en régimen, y ya no presenta rasgos notorios para $t > 0.002t_c$. Se encuentra disponible una animación [90] de este caso, la que muestra los campos de temperatura, concentración, humedad relativa y velocidad en la misma disposición que en la figura 6.9, para t desde cero hasta $0,01t_c$ a intervalos de 10^{-5} y a 5 cuadros por segundo, lo que corresponde aproximadamente a la evolución en tiempo real del sistema. Se recomienda su visualización, ya que resulta de gran ayuda para la comprensión de la dinámica.

También en todos los casos puede observarse que la contribución del calor latente al flujo térmico es dominante. Asimismo la mayor parte del rendimiento de agua destilada corresponde a condensación de vapor, aunque a las temperaturas más altas la deposición de gotas es también significativa.

Otro rasgo notable es la gran variabilidad temporal tanto del flujo térmico como del rendimiento en el estado de régimen. Este rasgo se corresponde bién con lo observado en los experimentos [1]. Esta variabilidad se debe al paso por la región de la cubierta donde se calcula el flujo y el rendimiento, de parcelas de fluido con grandes diferencias de temperatura y concentración de agua, y es por lo tanto intrínseca.

Todos los rasgos mencionados para los resultados de flujo térmico y rendimiento de agua mostrados en las figuras 6.17 a 6.22 son genéricos, repitiéndose también para los casos no mostrados aquí.

La figura 6.23 muestra los valores experimentales [1] y numéricos de flujo térmico total J_t para los valores de \overline{T} y ΔT simulados. Los valores numéricos mostrados allí se obtienen haciendo estadística de los valores instantáneos en estado de régimen (en todos los casos para $t \ge 0,002t_c$). Debe notarse que las barras de error de los resultados numéricos representan principalmente su variabilidad intrínseca en el estado de régimen, de modo que estadísticas sobre tiempos más largos difícilmente las disminuyan; otro tanto ocurre con los valores experimentales. El acuerdo entre los valores experimentales y numéricos es bueno, aunque no excelente. A temperaturas bajas el modelo



Figura 6.23: Flujo térmico total J experimental (azul) y numérico (rojo) para convección húmeda en la celda triangular, en función de la temperatura de referencia \overline{T} . Ambos valores se muestran con barras de error de una desviación standard; las cajas azules indican el rango de variación de los datos experimentales.

parece tender a sobreestimar el flujo térmico, mientras que lo subestima a temperaturas intermedias. El peor desacuerdo ocurre alrededor de $\bar{T} =$ 40°C, donde el valor numérico es menor que el experimental en ~ 60 W m⁻², un defecto del 27%. Debemos destacar que por debajo de los 25°C el flujo térmico (experimental) a través de la cubierta cae bajo el error de medición, e incluso puede ser negativo [1], circunstancia que no está contemplada en el modelo numérico. Los puntos experimentales para $\bar{T} = 18$ °C y $\bar{T} = 20$ °C deben entonces tomarse con cierta cautela.

La figura 6.24 muestra los valores experimentales [4] y numéricos de rendimiento para los valores de \overline{T} y ΔT simulados. Nuevamente los valores numéricos mostrados se obtienen haciendo estadística de los valores instantáneos en estado de régimen, y están discriminados en la contribución por condensación de vapor (azul), deposición de gotas (rojo) y total (negro). El acuerdo entre ambos es muy bueno, aunque los valores tanto experimentales



Figura 6.24: Rendimiento de agua destilada experimental (verde) y numérico (vapor en azul, gotas en rojo, total en negro) para convección húmeda en la celda triangular. Los valores numéricos se muestran con barras de error de una desviación standard.

como numéricos presentan una variabilidad relativamente grande.

6.2.7. Números de Nusselt y Sherwood

El número de Nusselt es una de las cantidades adimensionales más utilizadas y convenientes para comparar resultados de transferencia térmica entre diversos experimentos y simulaciones. Una de sus definiciones usuales es

$$Nu = \frac{hL}{K},$$
(6.20)

donde h es el coeficiente de transferencia térmica, L es una longitud característica y K es la conductividad térmica del fluido. Un problema con esta definición es que la elección de L es en cierta medida arbitraria, pero en nuestro caso lo decisivo es que no tenemos una definición razonable de h. Sin embargo podemos recurrir a la definición alternativa

$$Nu = \frac{Flujo \ térmico \ convectivo}{Flujo \ térmico \ conductivo}, \tag{6.21}$$

donde el numerador es el flujo térmico a través del sistema en el estado convectivo, mientras el denominador es el flujo en el estado conductivo ($\mathbf{u} = 0$) del mismo sistema *con las mismas CC*. Evidentemente esta definición es inaplicable en la práctica a un sistema que, como el destilador, presenta convección espontánea para cualquier diferencia de temperatura finita. Sin embargo numéricamente disponemos del estado conductivo del sistema, que es justamente el que hemos adoptado como CI.

Notemos que en este caso la divergencia del flujo térmico en la celda triangular no constituye un problema insalvable, ya que la misma se presenta tanto en el numerador como en el denominador, y en principio es posible cancelarla. Sin embargo cualquier procedimiento de este tipo aún haría que la contribución divergente dominase ambos términos, y siendo ésta de origen conductivo en ambos, obtendríamos siempre Nu = 1.

Adoptaremos entonces el mismo procedimiento que para el cálculo precedente del flujo térmico, representado por la ecuación (6.7). En ese caso el número de Nusselt que estaremos definiendo será hasta cierto punto *local*, y los valores obtenidos pueden variar según los detalles de la región de la frontera elegida para el cálculo del calor transmitido, pero ello es inevitable con un sistema como el presente.

Otro problema es que el flujo térmico contiene en nuestro caso contribuciones por transporte de calor sensible y latente. Debemos entonces definir diferentes números de Nusselt según el fenómeno que nos interese describir. Adoptaremos aquí las definiciones

$$Nu_{s}(t) = \frac{J_{s}(t)}{J_{s}(0)}, \qquad Nu_{l}(t) = \frac{J_{l}(t)}{J_{l}(0)}, \qquad Nu_{t}(t) = \frac{J_{t}(t)}{J_{t}(0)}, \tag{6.22}$$

donde los subíndices indican por calor sensible (s), latente (l) y total (t).

Dado que los números de Nusselt definidos así dependen del tiempo, y que el inicio de cada simulación presenta un transitorio notable (ver figuras 6.17 a 6.22), en la práctica esperaremos a que el sistema entre en régimen y de allí en adelante tomaremos un promedio temporal. Las definiciones quedan entonces

$$\mathrm{Nu}_{s} = \frac{\langle J_{s}(t) \rangle_{\mathrm{régimen}}}{J_{s}(0)}, \qquad \mathrm{Nu}_{l} = \frac{\langle J_{l}(t) \rangle_{\mathrm{régimen}}}{J_{l}(0)}, \qquad \mathrm{Nu}_{t} = \frac{\langle J_{t}(t) \rangle_{\mathrm{régimen}}}{J_{t}(0)},$$
(6.23)

donde en todos los casos hemos considerado que el estado de régimen ya se ha alcanzado a $t = 0.002t_c$. Debe notarse que $Nu_t \neq Nu_s + Nu_l$.

La figura 6.25 muestra los valores de los números de Nusselt obtenidos en las simulaciones: Nu_s en azul, Nu_l en rojo y Nu_t en negro. Los puntos correspondientes a Nu_l resultan imperceptibles por coincidir casi exactamente con los de Nu_t, debido a la pequeñez relativa del flujo de calor sensible frente al de calor latente. Sin embargo Nu_s es consistentemente más alto que los otros dos.



Figura 6.25: Número de Nusselt por calor sensible (azul), latente (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular.

Es difícil, si no imposible, encontrar en la literatura algún ejemplo con el que establecer comparaciones; sin embargo un trabajo reciente [87] indica que para convección de Rayleigh-Bénard seca 2D, el número de Nusselt para $R \sim 10^8$ y $\Gamma = 1$ es de entre 28 y 34 (celda cuadrada y con CC *no-slip* horizontales y *frees-slip* verticales). La gran diferencia entre estos valores y los presentados aquí tiene en principio dos orígenes: la diferente geometría y CC, y la presencia de agua. Aparte del efecto organizador de la circulación general mencionado en la Sección 6.2.5, que produce una situación menos turbulenta que en una celda de Rayleigh-Bénard, la geometría triangular también introduce un número de Rayleigh "efectivo" menor, ya que éste varía como el cubo de la altura y sobre buena parte de la celda triangular ésta es apreciablemente menor que H, la altura en la cúspide. Por su parte la presencia de agua hace al sistema mucho más eficiente para transportar calor en el estado conductivo: si bién la difusión de vapor de agua es lenta, su gran calor latente hace que en el estado conductivo el flujo térmico sea entre 45 y 90 veces mayor que el del correspondiente sistema seco, dependiendo de T y ΔT .



Figura 6.26: Número de Sherwood por vapor (azul) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular.

El número de Sherwood es el equivalente al de Nusselt pero para difusión de masa en lugar de calor. La definición usual es

$$Sh = \frac{k_c L}{D},\tag{6.24}$$

donde k_c es el coeficiente de transferencia de masa, L es una longitud característica y D es la difusividad de masa. Aparte de adolecer de la misma arbitrariedad que Nu en la elección de L, esta definición se encuentra con la misma dificultad que su equivalente (6.20) debido a que el estado conductivo también presenta una corriente difusiva de masa divergente, y por las mismas razones: el gradiente de concentración diverge en los ángulos entre el techo y la base de la celda. Recurrimos entonces a la definición alternativa

$$Sh = \frac{Flujo \ de \ masa \ convectivo}{Flujo \ de \ masa \ conductivo}, \qquad (6.25)$$

que tras un tratamiento completamente equivalente nos lleva a

$$\mathrm{Sh}_{v} = \frac{\langle k_{c,v}(t) \rangle_{\mathrm{régimen}}}{k_{c,v}(0)}, \qquad \mathrm{Sh}_{l} = \frac{\langle k_{c,l}(t) \rangle_{\mathrm{régimen}}}{k_{c,l}(0)}, \qquad \mathrm{Sh}_{t} = \frac{\langle k_{c,t}(t) \rangle_{\mathrm{régimen}}}{k_{c,t}(0)}, \tag{6.26}$$

donde los subíndices indican condensación de vapor (v), deposición de líquido (l) y total (t), y como antes consideramos que el estado de régimen ya se ha alcanzado a $t = 0.002t_c$. Debe notarse que $\text{Sh}_t \neq \text{Sh}_v + \text{Sh}_l$.

La figura 6.26 muestra los valores de los números de Sherwood obtenidos en las simulaciones: Sh_v en azul y Sh_t en negro. No se muestran valores de Sh_l debido a que la pequeñez de $k_{c,l}(0)$ ($\lesssim 10^{-10}$) en el estado conductivo hace que ante la menor deposición de gotas éste tome valores absurdamente altos, claramente carentes de significado físico. En cuanto a comparaciones con la literatura, ha sido imposible hallar resultados publicados en este contexto.

6.2.8. Espectros de energía cinética

La energía cinética $E(\mathbf{k})$ contenida en el modo de número de onda \mathbf{k} puede definirse (salvo constantes de proporcionalidad) como

$$E(\mathbf{k}) \propto |\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k})|^2$$
, (6.27)

pero a menudo es de interés eliminar la información direccional y definir

$$E(k) = \int_0^{2\pi} E(\mathbf{k}) \, k \, d\theta_k \,, \qquad (6.28)$$

donde asumimos que estamos en dimensión dos, y θ_k es el ángulo polar en el plano (k_x, k_z) . Un cálculo aproximado de esta cantidad puede realizarse mediante un simple algoritmo de bineado sobre la grilla conjugada, que no describiremos aquí.

En dimensión tres y para turbulencia homogénea y estacionaria, el conocido resultado de Kolmogorov [91, 92] afirma que

$$E(k) \propto k^{-5/3} \tag{6.29}$$

debido a la cascada de energía que la transfiere de los vórtices mayores a los menores. Sin embargo en dimensión dos la situación es diferente [93, 94, 95], con una cascada inversa que transfiere energía de la escala del forzamiento hacia escalas mayores con exponente $-\frac{5}{3}$, y una cascada directa hacia las escalas menores con exponente -3:

$$E(k) \propto k^{-3}.\tag{6.30}$$

No es nuestra intención aquí proceder a un estudio extensivo de la turbulencia en nuestro modelo de destilador, que excedería largamente los alcances de esta Tesis. Simplemente mostraremos algunos espectros de energía cinética e intentaremos ver cuál, si alguna, de estas cascadas se manifiesta.



Figura 6.27: Espectros de energía para convección húmeda en la celda triangular a $\overline{T} = 35^{\circ}$ C y $\Delta T = 9.6^{\circ}$ C, a tiempos $t = 0.00025t_c$ (arriba izquierda), $t = 0.0005t_c$ (arriba derecha), $t = 0.001t_c$ (abajo izquierda) y $t = 0.002t_c$ (abajo derecha), sobre una grilla de 512×512 puntos. Las pendientes de las rectas de ajuste (en rojo) son -4.69, -3.91, -4.13 y -4.22, en el mismo orden.

La figura 6.27 muestra los espectros de energía cinética durante el comienzo de la convección para $\overline{T} = 35^{\circ}$ C y $\Delta T = 9,6^{\circ}$ C, para los mismos tiempos mostrados en la figura 6.4. Puede verse que a $t = 0,00025t_c$ hay relativamente poca energía en los modos de número de onda grande, pero con mucha dispersión; el ascenso de la burbuja central produce aún un flujo relativamente ordenado, pero a escalas pequeñas ya comienzan a aparecer estructuras. A $t = 0,00050t_c$ la energía de las estructuras menores ha aumentado en casi dos órdenes de magnitud; este es el tiempo en que la burbuja impacta la cúspide y se dispersa. A $t = 0,001t_c$ las estructuras menores han disminuido su energía al rango que conservarán en adelante. Finalmente a $t = 0,002t_c$ el transitorio inicial ha concluido, el sistema ha entrado en régimen, y tenemos un espectro de energía que podemos considerar típico. Puede observarse la presencia de una población separada de estructuras pequeñas con energías mayores. Fenómenos como este son transitorios y recurrentes, y corresponden a la generación de multitud de vórtices pequeños en la estela de uno mayor que asciende o desciende, o alrededor del extremo de columnas ascendentes o descendentes (*vortex shedding*).

No hemos observado nada cualitativa ni cuantitativamente diferente en una cantidad de espectros que hemos estudiado. La aparición de la población secundaria de estructuras pequeñas y energéticas y la estabilización del espectro general en una ley de potencias con exponente ligeramente por debajo de -4 se repiten para todas las temperaturas y tiempos, excepto para $\bar{T} = 18^{\circ}$ C y $\bar{T} = 20^{\circ}$ C, donde lo escaso de los datos (debido al reducido tamaño de grilla) impide tener una estadística mínimamente confiable. El exponente de las leyes de potencia observadas, significativamente menor a -3, es probablemente debido [93] tanto a disipación a las escalas más grandes del sistema, como a la presencia de grandes vórtices coherentes, los que pueden observarse en los campos de velocidad de las figuras 6.5 a 6.12. Podemos ahora responder a una pregunta formulada en la Sección 2.2.4: si bien hay turbulencia, esta no es ni homogénea ni estacionaria.

Capítulo 7

Discusión y perspectivas

En este capítulo final presentaremos un resumen y discusión de los principales resultados obtenidos en esta Tesis, tanto en el análisis de los datos experimentales como en la simulación numérica del destilador. Procederemos también a una crítica del modelo termohidrodinámico desarrollado y del método pseudoespectral implementado, deteniéndonos en lo que consideramos sus principales falencias y logros. Finalmente plantearemos la posibilidad de varios desarrollos futuros, los que discutiremos brevemente.

7.1. Discusión de los resultados obtenidos

Repasaremos aquí los aspectos que consideramos más relevantes de los resultados obtenidos en esta Tesis, resumiendo en un mismo lugar consideraciones que en muchos casos ya hemos hecho en los pasajes pertinentes. Sin embargo creemos que una presentación unificada de los mismos puede aportar una perspectiva global que, de otra manera, estaría ausente.

7.1.1. Análisis de los datos experimentales

El reanálisis de los datos experimentales disponibles [1] realizado en la Sección 2.2 mostró no sólo que, efectivamente, éstos contenían información relevante sobre la dinámica interna del destilador a la que el análisis previo no había permitido acceder, sino que las técnicas de análisis usuales eran propensas a dar en ocasiones resultados más confusos que esclarecedore.

La EMD de las series experimentales para $h \ y \ r$ permitió tener una visión de su evolución temporal más sencilla, y a la vez más informativa, que la proporcionada por el análisis de Fourier. En particular permitió obtener un parámetro de control r_s "limpio" de sus factores dinámicos intrínsecos e incontrolables, y permitió separar la dinámica del coeficiente de transferencia térmica h en una parte lenta h_s esclavizada a r_s , y una rápida h_f determinada principalmente por los detalles de la dinámica interna del destilador. Se consiguió determinar así que el comportamiento "anómalo" de h estaba ligado a la segunda pero no a la primera, y sugiriendo que se debía a situaciones de particular desorden de las estructuras convectivas.

La obtención de un parámetro de control limpio también permitió una reconstrucción adecuada de la dinámica de h, para el cual fué crítico el uso de la HHT. Ésta mostró que el comportamiento "anómalo" de h_f estaba ligado a un fenómeno de coherencia de fase de las componentes rápidas sobre los distintos ciclos del forzamiento, sugiriendo que para esos valores del forzamiento se daba un cambi del régimen convectivo dentro del destilador.

La construcción de espectros de Hilbert de h mostró que el espectro de Fourier daba información confusa sobre su dinámica, descomponiendo la oscilación diaria, completamente periódica pero anarmónica, en una serie de picos a baja frecuencia; también mostró que el espectro de potencia esencialmente caía a cero a frecuencias superiores a ~ 50 día⁻¹, haciendo sospechar que las colas largas en los espectros de Fourier eran debidas al mismo fenómeno, actuando sobre las oscilaciones más rápidas. Esto sugirió que la estructura presentada por el espectro de Fourier de h, que parecería típico de un sistema caótico, era en buena parte un artificio debido a dicho fenómeno. Los espectros de Hilbert también mostraron la presencia de intermitencia y sugirireon la presencia, durante los periodos de gran actividad, de estructuras convectivas con un amplio rango de escalas temporales y, presumiblemente, espaciales.

La construcción de espectros instantáneos a partir del HAS permitió determinar que éstos sólo presentaban comportamientos de ley de potencia intermitentemente y sobre rangos de frecuencia limitados. Junto con lo anterior esto sugirió que si existía turbulencia, ésta no era homogénea ni estacionaria, sino intermitente.

En conjunto, consideramos que el reanálisis de los datos experimentales proveyó información valiosa ausente en el análisis inicial, a la vez que demostró la utilidad de las herramientas de análisis elegidas.

7.1.2. Simulación numérica del destilador

En la simulación numérica del destilador se utilizó un modelo termohidrodinámico simplificado que, sin embargo, parece capturar las características esenciales de la convección húmeda con transición de fase líquido-vapor. No se simuló el ciclo diario experimental de calentamiento y enfriamiento, sino sólo una docena de puntos a lo largo del mismo, para la configuración del destilador con ángulo de la cubierta de 45°. La geometría, la escala y las condiciones de contorno de la celda de simulación se eligieron tan similares a las del destilador real como fué posible sin una complicación exagerada del modelo.

La fenomenología observada en las simulaciones coincide, dentro de lo que es posible apreciar visualmente, con la observada en los experimentos correspondientes [1] y en experiencias de visualización de flujos [22]. Un rasgo sobresaliente que, de acuerdo a esto, es bien reproducido en las simulaciones, es la presencia persistente de un esquema de circulación general donde aire frío desciende por dentro de las alas de la cubierta, circula sobre la batea hacia el centro de la misma, y allí asciende como una columna sobresaturada hacia el vértice de la cubierta. Otro es la formación, bajo el vértice de la cubierta, de una burbuja fría y húmeda que va creciendo hasta desestabilizarse y crear corrientes descendentes súbitas. Un tercero es la variabilidad temporal de las mediciones simuladas de flujo térmico y rendimiento de agua destilada, que coincide cualitativamente, en amplitud y frecuencia, con la de los datos experimentales.

La predicción numérica del flujo térmico guarda una buena correspondencia con los valores experimentales, aunque a las temperaturas intermedias de funcionamiento el modelo subestima hasta en un 25 % el rendimiento. Esto puede deberse a dos factores: por un lado el modelo es 2D, mientras el flujo en el destilador real es, obviamente, tridimensional; por otro lado no hemos simulado el ciclo de calentamiento real, sino situaciones de calentamiento estacionario en varios puntos a lo largo del mismo. Dado que el desacuerdo es notable sobre todo alrededor de $\bar{T} = 40^{\circ}$ C, que es aproximadamente donde el coeficiente de transferencia térmico h experimental presenta su comportamiento "anómalo" (ver figuras 2.3 y 2.4), es posible que ambas circunstancias se conjuguen: si bajo un forzamiento gradualmente creciente o decreciente los patrones convectivos reales presentan una transición relativamente súbita a esos valores de \bar{T} , la circulación real 3D puede ser allí notablemente diferente de la simulada en 2D.

La predicción numérica del rendimiento de agua destilada guarda una correspondencia aún mejor con los valores experimentales, aunque debemos notar que éstos tienen una dispersión notable que puede enmascarar hasta cierto punto algún desacuerdo. Debe notarse que este resultado es esencial si se pretende utilizar el modelo numérico desarrollado para predecir la influencia sobre el rendimiento de cambios en los parámetros de diseño.

El cálculo de los números de Nusselt y de Sherwood puso en evidencia problemas fundamentales a la hora de definirlos para un sistema con la geometría del destilador, debido a la divergencia de los gradientes térmico y de concentración en los ángulos entre la cubierta y la batea. La definición adoptada para el cálculo numérico salva estos problemas, pero al costo de definir estos números de manera, hasta cierto punto, local, por los que los valores reportados deben ser considerados con un cierto grado de escepticismo. Los valores de Nu obtenidos numéricamente son bastante menores (en un factor entre dos y tres) que los hallados para convección seca 2D en circunstancias tan semejantes como pudimos hallar en la literatura. Sin embargo esto puede explicarse, al menos cualitativamente, por el efecto ordenador del patrón de circulación general discutido más arriba, por la diferente geometría que resulta en una altura efectiva (y un número de Rayleigh) considerablemente menor, y por el hecho de que el estado de referencia para el cálculo de Nu corresponde a un sistema que transporta mucho más eficientemente el calor que su equivalente seco.

Por último los espectros de energía cinética calculados muestran, tras la entrada en régimen del sistema, una ley de potencia con un exponente sensiblemente menor al correspondiente al de la cascada directa 2D, que sin embargo puede explicarse por la presencia de disipación a las escalas más grandes del sistema y de grandes vórtices coherentes, que en este caso formarían parte del patrón de circulación general mencionado. Los espectros muestran evidencia, asimismo, de *vortex shedding* intermitente por parte de estructuras convectivas mayores.

7.2. Crítica del modelo termohidrodinámico y el método pseudoespectral

Resaltaremos aquí los que son, a nuestro criterio, los principales puntos fuertes y débiles del proceso de modelado del destilador, tanto físico como numérico, desarrollado en esta Tesis. Consideramos que esta discusión es esencial para poner de relieve cuáles son los aspectos menos confiables del modelo obtenido, y poder corregirlos en un futuro, así como para destacar cuáles son sus aciertos.

7.2.1. Crítica del modelo termodinámico

El modelo termodinámico desarrollado en el Apéndice A, y resumido en la Sección 3.1, es a nuestro entender bastante sencillo, más allá de las apariencias debidas a lo trabajoso de sus detalles. En su mayor parte puede ser obtenido por métodos elementales de cálculo termodinámico, con solo prestar cierta atención a la consistencia de los procesos modelados con las hipótesis subyacentes.

Una limitación seria de este modelo, aunque no en el contexto del uso al que lo aplicamos en esta Tesis, es que todas las funciones y coeficientes termodinámicos obtenidos lo han sido, exclusivamente, para procesos isobáricos. Si bien esto es adecuado a la descripción del destilador solar, o de cualquier otro proceso que se desarrolle en una celda pequeña y no herméticamente cerrada a la atmósfera circundante, sería deseable contar con un modelo más general aplicable, por ejemplo, a procesos adiabáticos o isotérmicos. Creemos sin embargo que éstos casos pueden ser desarrollados en su mayoría, sin gran dificultad, con la guía de la deducción presentada aquí.

Uno de los puntos más cuestionables, donde a nuestro entender el lector debe ejercer una saludable dosis de excepticismo, es el tratamiento del aerosol de gotas de agua en la deducción de los coeficientes de viscosidad dinámica (Apéndice A.10) y de conducción térmica (Apéndice A.11). Si bien ninguno de los argumentos allí expuestos es patentemente falso, incluyen una cantidad de hipótesis ad hoc que pueden no ser válidas en contextos aún ligeramente diferentes del presente.

Somos conscientes también de que el modelo formulado ha dejado fuera muchos aspectos que sería interesante incluir, como la interacción detallada del vapor y las gotas con la película líquida interior a la cubierta, la coalescencia de gotas y los efectos de tensión superficial. En la mayoría de los casos hemos intentado argumentar la razonabilidad de las aproximaciones adoptadas, las que son parte inevitable del proceso simplificatorio de modelado de un entorno físico tan complejo.

Por otra parte, consideramos que los buenos resultados de las simulaciones numéricas en cuanto a reproducir cualitativa y cuantitativamente el funcionamiento de un destilador real, dan testimonio del buen desempeño de este modelo en su limitado campo de aplicación.

7.2.2. Crítica del modelo hidrodinámico

El modelo hidrodinámico desarrollado en la Sección 3.2 intenta seguir en lo posible las ideas fundamentales de la aproximación de Boussinesq, es decir que todos los coeficientes termodinámicos pueden ser aproximados por sus valores en un cierto estado de referencia, salvo en el término de flotación. En el contexto presente esto presenta la complicación adicional de que varios de ellos son discontínuos a través de la curva de saturación. Sin embargo los trabajos que nos inspiraron a seguir esta línea [46, 49, 52], pese a nuestras críticas sobre algunos aspectos puntuales, muestran que este desarrollo es viable.

Indudablemente muchas de las aproximaciones realizadas, como la incompresibilidad del fluido, el despreciar los términos de difusión cruzada entre calor y concentración, o el ignorar el calor producido por disipación viscosa, pueden no ser adecuadas en un contexto general. Sin embargo creemos que en el contexto presente no restan validez al modelo formulado.

El aspecto más positivo del modelo hidrodinámico es, a nuestro entender, que pese a todas las simplificaciones introducidas, aún toma en cuenta los efectos esenciales de la transición de fase líquido-vapor, y del consiguiente calor latente, a través del modelo termodinámico subyacente. Nuevamente, a nuestro criterio la buena reproducción cualitativa y cuantitativa del funcionamiento del destilador real, es prueba de que el modelo es razonable.

7.2.3. Crítica del método pseudoespectral

El método pseudoespectral seleccionado en esta Tesis, basado en la transformada discreta de Fourier compleja, posee un conjunto particular de ventajas y desventajas cuando se lo compara con otras alternativas. Entre las desventajas cabe mencionar la dificultad de aplicarlo a un problema con condiciones de contorno que, a diferencia de lo habitual, no son libres. Ello nos obligó a desarrollar una cantidad de modificaciones *ad hoc* que resultan hasta cierto punto engorrosas. Además, el método (por definición) sólo es aplicable a geometrías en principio rectangulares, con condiciones de contorno periódicas.

Sin embargo, eligiendo adecuadamente el conjunto de variables hidrodinámicas conseguimos transformar esta desventaja en una ventaja, ya que las condiciones de contorno homogéneas de Dirichlet que obedecen los campos adimensionales son automáticamente periódicas. Esto nos permitó ajustar condiciones de contorno en una frontera, y conseguir automáticamente su ajuste en la frontera opuesta, lo que nos dió la libertad de producir soluciones capaces de ajustar condiciones de contorno de Cauchy.

Estas últimas resultaron esenciales para lo que es, a nuestro criterio, uno de los mayores logros del método adoptado: la resolución esencialmente analítica de la ecuación de Laplace necesaria para imponer la condición de incompresibilidad (ver Apéndice B). El tratamiento de esta última mediante una descomposición de Helmholtz en la Sección 4.4, con la consiguiente desaparición del campo de presión, es otro de los logros del método pseudoespectral. Por otro lado uno de sus mayores defectos es la dificultad a la hora de imponer las condiciones de contorno a la solución de la ecuación de Laplace en la celda cuadrada, que nos obligó a recurrir a un método iterativo y aproximado. Sin embargo recientemente hemos conseguido avances en esta dirección aprovechando las simetrías impuestas por el método de las imágenes de la Sección 4.6, que nos dan esperanza de resolver este problema en un futuro próximo.

Por último debemos decir que, si bien para la configuración del destilador utilizada en las simulaciones hemos conseguido adaptar el método pseudoespectral con relativa facilidad tanto a la geometría como a unas condiciones de contorno razonablemente realistas, simular por ejemplo la configuración con la cubierta a 20°, o inponer condiciones de contacto térmico imperfecto, resultaría bastante más difícil.

7.3. Perspectivas de desarrollos futuros

Finalizaremos esta discusión presentando algunas líneas posibles de desarrollo futuro que, a nuestro criterio, resultan viables y de interés.

En primer lugar deseamos resaltar que los buenos resultados del modelo numérico, en cuanto a reproducir los resultados experimentales para el flujo térmico y, sobre todo, para el rendimiento de agua destilada, indican que el modelo tiene poder predictivo. Podremos entonces aplicarlo para prever el resultado de diversas modificaciones del diseño del destilador. El que las simulaciones se hayan realizado en esta etapa inicial para condiciones de funcionamiento estacionario es un defecto subsanable fácilmente: sabiendo ahora que aún para condiciones iniciales extremadamente lejos del equilibrio como las utilizadas en la Sección 6.2 el sistema entra en régimen a lo sumo a $t = 0,002t_c$ (entre treinta y cuarenta segundos de tiempo de evolución simulado), podemos diseñar un ciclo diario "comprimido" de calentamiento y enfriamiento de pocas decenas de minutos en lugar de 24 horas, lo que permitiría simularlo en un tiempo razonable. Las modificaciones necesarias en los códigos ya desarrollados son menores y sencillas de implementar, y esta será una de las primeras tareas a realizar tras la finalización de esta Tesis.

Sin embargo para tener cierta libertad en la elección en las modificaciones de diseño a ensayar, primero necesitaremos flexibilizar el modelo, por ejemplo para admitir otras geometrías con ángulo de la cubierta distinto de 45°. Esta puede parecer una propuesta dudosa a primera vista, ya que basándose el método en la transformada de Fourier discreta parecería estar restringido a celdas y grillas rectangulares. Sin embargo éstas no son sino un caso particular (el más sencillo) de redes de Bravais, de amplio uso en cristalografía y física del sólido. Las mismas técnicas utilizadas en difracción por una red cristalina pueden entonces adaptarse para formular un par transformadaantitransformada adaptado a una grilla anisotrópica y no-ortogonal en una celda por ejemplo romboidal, que aplicando el mismo método de las imágenes de la Sección 4.6 nos permitirían tratar una celda triangular de ángulo en principio arbitrario. De las extensiones mayores del modelo, esta es a nuestro criterio la que deberíamos estudiar en primer término.

La segunda extensión mayor del modelo actual es pasar de 2D a 3D. Esta extensión es sencilla en principio, ya que se dispone de versiones 3D de la FFT en el paquete usado en el código 2D actual, y el resto del código pseudoespectral debería ser sencillo de reescribir. Sin embargo el proceso de solución analítica de la ecuación de Laplace (Apéndice B) deberá ser desarrollado nuevamente, y la descomposición de Helmholtz (Sección 4.4) extendida a 3D, debiendo posiblemente descomponerse la componente transversal de los campos en componentes poloidales y toroidales. El aspecto no trivial de la extensión a 3D es el aumento del tiempo de cómputo, lo que requerirá invertir un esfuerzo considerable en la paralelización del código a fin de ser ejecutado en un *cluster*. Por ello se ensayará primero todos los demás desarrollos en 2D a fin de determinar si la extensión a 3D es realmente necesaria.

Apéndice A

Modelo termodinámico

En este apéndice desarrollaremos un modelo termodinámico adecuado para el estudio del transporte covectivo de aire húmedo, tanto por debajo como por encima de la saturación. En particular, desarrollaremos expresiones para los coeficientes termodinámicos que necesitamos en las simulaciones numéricas, como ser densidad, capacidad calórica específica, conductividad térmica o viscosidad.

Adoptaremos la nomenclatura de aire h úmedo para la mezcla de aire y vapor de agua, como es usual; sin embargo, para distinguirla de la mezcla de aire, vapor y gotas de agua líquida que encontramos por encima de la saturación, llamaremos a ésta última *aire mojado*, reservando el nombre de aire húmedo para la mezcla no saturada. También llamaremos rango de interés al rango de temperaturas y presiones típicamente encontradas durante el funcionamiento del destilador [1], aproximadamente 20°C $\leq T \leq 60°$ C y 600 mb $\leq p \leq 1000$ mb.

El modelo se construirá principalmente en base a dos referencias. La primera es el clásico libro de J. V. Iribarne y W. L. Godson [39], que utilizaremos como guía general, y al que muchas veces nos referiremos simplemente como Iribarne. La segunda es un trabajo bastante reciente de P. T. Tsilingiris [40], al que a menudo nos referiremos simplemente como Tsilingiris. Este trabajo proporciona modelos precisos para una variedad de coeficientes termodinámicos del aire seco, el vapor de agua y el aire húmedo, construidos en base al ajuste de una gran cantidad de datos experimentales. Por ese motivo, en general preferiremos usar los modelos de Tsilingiris, siempre que haya uno disponible.

A.1. Presión de saturación

De acuerdo a la ec. (IV.52) (p. 67) de Iribarne [39], una buena aproximación para la presión de saturación de vapor de agua bajo condiciones

Tabla A.1: Coeficientes de la ecuación (A.3) para p_s .

E_0	0,7073034146	E_3	$-4,662575642 \times 10^{-5}$
E_1	$-2,703615165 imes 10^{-2}$	E_4	$1,034693708 imes 10^{-6}$
E_2	$4{,}360882110\times10^{-3}$		



Figura A.1: Comparación de los modelos para la presión de saturación p_s .

atmosfericas ususales es

$$p_s(T) = 10^{\left(9,4041 - \frac{2354}{T}\right)}$$
mb = $e^{\left(21,654 - \frac{5420}{T}\right)}$ mb. (A.1)

Una segunda aproximación, más precisa, conocida como fórmula de Magnus, es dada en la ec. (IV.53) (p. 68), como

$$p_s(T) = 10^{\left(23,5470 - 4,9283\log T - \frac{2937,4}{T}\right)} \text{mb} = \frac{10^{\left(23,5470 - \frac{2937,4}{T}\right)}}{T^{4,9283}} \text{mb}.$$
 (A.2)

En ambas expresiones T está en K.

Por otro lado Tsilingiris [40], en base a un ajuste de numerosos datos experimentales, algunos mucho más recientes, propone la expresión polinomial

$$p_s(T) = (E_0 + E_1 t + E_2 t^2 + E_3 t^3 + E_4 t^4) \text{ kPa},$$
 (A.3)

donde

$$t = T + 273,15 \tag{A.4}$$

está en °C; los valores numéricos de los coeficientes se muestran en la Tabla A.1.

La figura A.1 compara las tres expresiones en el rango de interés. La primera (A.1) y segunda (A.2) fórmulas de Iribarne se muestran en negro y azul respectivamente, y en rojo la de Tsilingiris (A.3). Notando que el último término en la fórmula de Tsilingiris es $\leq 10^{-4}$ incluso para t = 100 °C, y que es por mucho más reciente que las fórmulas de Iribarne e incluye más datos experimentales, presumimos que es la más precisa de las tres (Tsilingiris afirma una precisión de 1,5 % a 25°C y 0,2 % a 100°C). Adoptaremos entonces la expresión (A.3).

A.2. Fracción molar y factor de aumento

La fracción molar de vapor de agua N_v en una mezcla no saturada de aire seco y vapor de agua, considerados como gases ideales, sería

$$N_v = \frac{n_v}{n_d + n_v} = \frac{p_v}{p}, \qquad (A.5)$$

donde n_v y n_d son los números de moles de vapor y de aire seco, p_v es la presión parcial de vapor, y $p = p_d + p_v$ es la presión (total), siendo p_d la presión parcial de aire seco. Para gases reales, Tsilingiris [40] muestra que la expresión correspondiente puede escribirse como

$$N_v = f(T, p) \frac{p_v}{p}.$$
 (A.6)

donde f(T, p) es el factor de aumento (enhancement factor), debido a la interacción de las moléculas en la mezcla de gases reales, para el que propone el modelo

$$\ln f(T,p) = \left(A_0 + A_1 t + A_2 t^2 + A_3 t^3 - \exp\left(B_0 + B_1 t + B_2 t^2 + B_3 t^3\right)\right) \times \left(1 - \frac{p_s(T)}{p}\right). \quad (A.7)$$

Los valores numéricos de los coeficientes de este modelo se muestran en la Tabla A.2. Debe notarse que en la expresión correspondiente a la ec. (A.7) Tsilingiris [40] escribe por error T en lugar de t en las expresiones polinomiales, lo que hemos corregido aquí.

Tabla A.2: Coeficientes de la ecuación (A.7) para f(T, p).

A_0	$3,53624 \times 10^{-4}$	$B_0 -1,07588 \times 10^1$
A_1	$2,93228 \times 10^{-5}$	$B_1 = 6,32529 \times 10^{-2}$
A_2	$2,\!61474 imes 10^{-7}$	$B_2 -2,53591 \times 10^{-4}$
A_3	$8,57538 imes 10^{-9}$	$B_3 = 6,33784 \times 10^{-7}$



Figura A.2: Factor de aumento f(T, p) dado por (A.7).

La figura A.2 muestra el factor de aumento en el rango de interés. Vemos que para nuestros propósitos podemos poner con confianza

$$f\left(T,p\right) = 1\tag{A.8}$$

con un error menor que 0,4%.

A.3. Mezclas y factor de compresibilidad

La densidad de la mezcla binaria de aire seco y vapor de agua, considerados como gases ideales, sería

$$\rho = \frac{M_d p_d + M_v p_v}{RT},\tag{A.9}$$

 $K_1 = 0.104 \times 10^{-14} \,\mathrm{Pa}^{-2}$

($C_2 = -0.147184 \times 10^{-8} \mathrm{Pa}^{-1}$			K_2	$K_2 = -0.335297 \times 10^{-17} \mathrm{Pa}^{-2}$			
($C_3 = 17$	$34,29 \mathrm{K}^{-1}$		K_3	$3645,09{ m K}^{-1}$			
	1,000							
$z_m(N_v,T)$	0,999							
	0,998							
	0,997							
	0,996							
	0,995 20		30	40	50	 [60		
				t (°C)				

Tabla A.3: Coeficientes de la ecuación (A.12) para $z_m(N_v, T)$.

 $0.7 \times 10^{-8} \,\mathrm{Pa}^{-1}$

 C_1

Figura A.3: Factor de compresibilidad $z_m(N_v, T)$ dado por (A.11).

donde M_d y M_v son las masas molares del aire seco y el vapor de agua, respectivamente, y R es la constante universal de los gases ideales. Para gases reales Tsilingiris muestra que la expresión correspondiente puede escribirse como

$$\rho = \frac{1}{z_m \left(N_v, T\right)} \frac{M_d p_d + M_v p_v}{RT},\tag{A.10}$$

donde $z_m(N_v, T)$ es el factor de compresibilidad para la mezcla de gases reales, para el que propone el modelo

$$z_m(N_v, T) = 1 + Ap_s(T) + Bp_s^2(T)$$
, (A.11)

donde

$$A = C_1 + C_2 e^{C_3/T}, \quad B = K_1 + K_2 e^{K_3/T}.$$
 (A.12)

Los valores numéricos de los coeficientes se muestran en la Tabla A.3.

La figura A.3 muestra el factor de compresibilidad en el rango de interés. Podemos ver que para nuestros propósitos es suficiente tomar

$$z_m(N_v, T) = 1$$
, (A.13)

con un error menor que 0.5 %.

A.4. Mixing ratio

Siguiendo a Iribarne [39], Sec. IV.11, por debajo de la saturación definimos la tasa de mezcla (mixing ratio) r como

$$r = \frac{m_v}{m_d} = \frac{\varepsilon p_v}{p_d} = \frac{\varepsilon p_v}{p - p_v}, \qquad (A.14)$$

donde m_v y m_d son respectivamente las masas de vapor y de aire seco en una dada parcela, y

$$\varepsilon = \frac{R_d}{R_v} = 0,62199 \tag{A.15}$$

es el cociente entre las constantes específicas de los gases R_d para aire seco, y R_v para vapor. A la saturación tenemos el *mixing ratio* de saturación

$$r_s(T,p) = \frac{\varepsilon p_s(T)}{p - p_s(T)}.$$
(A.16)

Ahora bien, por encima de la saturación queremos seguir definiendo el *mixing ratio* como el cociente entre la masa de agua y la masa de aire seco, pero ahora la masa de agua se compone de vapor saturado y agua líquida, de modo que tendremos

$$r = \frac{m_w}{m_d} = \frac{m_{v,s} + m_\ell}{m_d} = r_s + \frac{m_\ell}{m_d},$$
(A.17)

donde m_w es la masa de agua en la parcela, $m_{v,s}$ la masa de vapor saturado y m_ℓ la masa de agua líquida. Vemos entonces que por encima de la saturación, ya no tendremos una expresión para r que pueda escribirse sólo en términos de presiones, sino que debemos especificar también el contenido de agua líquida.

En cuanto a la nomenclatura, usaremos el nombre en inglés, que es la convención usual.

A.5. Humedad específica

Siguiendo a Iribarne, Sec. IV.11, por debajo de la saturación definimos la humedad específica como

$$q = \frac{m_v}{m_d + m_v} = \frac{r}{1+r} = \frac{\varepsilon p_v}{p - (1-\varepsilon) p_v}.$$
 (A.18)

Tabla A.4: Fracciones de masa por debajo y por encima de la saturación.

fracción de masa	aire	vapor	líquido
no saturado	1-q	q	0
saturado	1-q	q_s	$q - q_s$

A la saturación tenemos la humedad específica de saturacion

$$q_s(T,p) = \frac{r_s(T,p)}{1 + r_s(T,p)} = \frac{\varepsilon p_s(T)}{p - (1 - \varepsilon) p_s(T)}.$$
 (A.19)

En el modelo hidrodinámico tratamos a q como una *concentración* y escribimos una ecuación de advección-difusión para ella, de modo que por encima de la saturación querremos definir q como la fracción (de masa) del sistema (parcela) que consiste de *agua*, no sólo de vapor. Por ello por encima de la saturación definimos

$$q = \frac{m_w}{m_d + m_w} = \frac{r}{1 + r},$$
 (A.20)

que tiene la misma expresión que antes en términos del mixing ratio.

Notemos que por debajo de la saturación la concentración (fracción de masa) de vapor de agua es simplemente q, mientras que por encima de la saturación es q_s . Análogamente, la concentración de agua líquida es 0 por debajo de la saturación y $q - q_s$ por encima de la saturación. La Tabla A.4 clarifica los diferentes casos.

A.6. Densidad

Calcularemos primero el coeficiente más "simple", la densidad ρ , trabajando en orden creciente de complejidad.

A.6.1. Aire seco y vapor de agua

Para un gas perfecto simple (aire seco o vapor de agua) podemos calcular la densidad a una dada presión p y temperatura T simplemente invocando la ley de los gases perfectos

$$pV = mRT \tag{A.21}$$

y poniendo

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{p}{RT}.$$
 (A.22)

A.6.2. Aire húmedo

Ahora queremos conocer la densidad ρ_m del aire húmedo a una presión total p y temperatura T. Tratando ambos, aire seco y vapor de agua, como gases perfectos, tenemos

$$p_d V = m_d R_d T, \quad p_v V = m_v R_v T, \tag{A.23}$$

donde p_d y p_v son la presiones parciales para aire seco y vapor de agua, respectivamente. Notemos que cuando escribimos la ley de los gases perfectos en términos de las presiones parciales, la temperatura T y volumen total Vson *los mismos* en ambas ecuaciones. Esto es porque las presiones parciales estan definidas como la presión que una dada componente de la mezcla tendría si estuviera sola en el mismo volumen y a la temperatura común [39]. Tenemos también las reglas de adición de presiones y masas

$$p = p_d + p_v, \quad m = m_d + m_v,$$
 (A.24)

y las definiciones del mixing ratio r y la constante ε ,

$$r = \frac{m_v}{m_d}, \quad \frac{R_v}{R_d} = \frac{1}{\varepsilon}.$$
 (A.25)

Si ahora sumamos las leyes de gases perfectos de las componentes tendremos

$$pV = (m_d R_d + m_v R_v) T, \qquad (A.26)$$

y si ésta debe ser la ley de gases perfectos para la mezcla, debemos definir la constante específica de los gases para la mezcla como

$$R = \frac{m_d R_d + m_v R_v}{m} = (1 - q) R_d + q R_v = \frac{R_d + r R_v}{1 + r} = R_d \frac{1 + r/\varepsilon}{1 + r} \quad (A.27)$$

de modo de obtener

$$pV = mRT. \tag{A.28}$$

Ahora la densidad del aire húmedo ρ_m puede calcularse simplemente de la ley de los gases perfectos para la mezcla, como

$$\rho_m = \frac{m}{V} = \frac{p}{RT} = \frac{(1+r)p}{(R_d + rR_v)T}.$$
 (A.29)

Esta expresión resulta muy conveniente, ya que entonces la densidad de aire húmedo saturado se escribe simplemente como

$$\rho_s = \frac{(1+r_s)\,p}{(R_d + r_s R_v)\,T}\,.$$
(A.30)

A.6.3. Aire mojado

Para aire mojado, tenemos aire húmedo saturado más una masa m_{ℓ} de gotas de agua líquida. El imixing ratio es ahora

$$r = r_s + \frac{m_\ell}{m_d} \tag{A.31}$$

y la masa total es

$$m = m_d + m_{v,\text{sat}} + m_\ell = (1+r) m_d$$
, (A.32)

pero el volumen total V y la presión total p son las mismas (en muy buena aproximación) que para aire húmedo saturado, ya que la contribución del agua líquida a la presión y al volumen es despreciable; el único efecto de su presencia es mantener $p_v = p_s(T)$. La ley de los gases perfectos para la fase gaseosa sigue siendo

$$pV = (m_d + m_v) RT, \tag{A.33}$$

pero ahora la densidad debe calcularse como

$$\rho_w = \frac{m_d + m_{v,\text{sat}} + m_\ell}{V} = \frac{(1+r)\,m_d p}{(m_d + m_v)\,RT} = \frac{(1+r)\,p}{(R_d + r_s R_v)\,T}\,.$$
 (A.34)

A.6.4. Densidad a través de la curva de saturación

Comparando las expresiones anteriores para la densidad por debajo, a y por encima de la saturación, podemos escribirlas de manera unificada como

$$\rho = \frac{1+r}{R_d + \min(r, r_s) R_v} \frac{p}{T}.$$
 (A.35)

Vemos que ρ será continua a través de la curva de saturación, pero su derivada será discontínua.

A.6.5. Densidad en función de la concentración

Los resultados anteriores pueden ser reescritos fácilmente en términos de la humedad específica (fracción de masa de agua), como sigue: por debajo de la saturación

$$\rho = \frac{1}{(1-q)R_d + qR_v} \frac{p}{T},$$
(A.36)

y por encima

$$\rho = \frac{1 - q_s}{1 - q} \frac{1}{(1 - q_s)R_d + q_s R_v} \frac{p}{T}.$$
(A.37)
A.7. Coeficiente de expansión térmica

Ahora deduciremos expresiones para los coeficientes de expansión térmica α_d para aire seco, α_m para aire húmedo no saturado, y α_w para aire mojado.

En lo que sigue necesitaremos el calor latente de vaporización l_v a diferentes presiones y temperaturas. Tsilingiris [40] no provee un modelo para él; Iribarne [39], Ap. I (p. 246) proporciona una tabla de valores experimentales, de la cual podemos ver que, por ejemplo,

$$l_v = 2,4062 \times 10^6 \text{ J kg}^{-1} \tag{A.38}$$

a $t = 40^{\circ}$ C. Sin embargo a partir de la misma tabla vemos que l_v cambia hasta un 3 % entre los 20°C y los 50°C, así que más adelante desarrollaremos un modelo más preciso.

A.7.1. Aire seco

El aire seco cerca de la presión y temperatura ambiente se comporta muy aproximadamente como un gas perfecto, por lo tanto lo trataremos como tal.

El sistema a considerar es una masa m_d de aire seco, inicialmente a temperatura T y presión p. Este sistema es llevado, a presión y masa constantes, a una temperatura $T + \delta T$. De Iribarne [39], Cap. I, ec. (9), tenemos

$$pV = m_d R_d T, \tag{A.39}$$

donde $R_d = 287,05 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (Iribarne p. 13) es la constante específica de los gases para aire seco. Diferenciando a presión y masa constantes,

$$p\delta V = m_d R_d \delta T, \tag{A.40}$$

es decir

$$\delta V = \frac{m_d R_d}{p} \delta T. \tag{A.41}$$

El nuevo volumen es

$$V + \delta V = V \left(1 + \frac{m_d R_d}{pV} \delta T \right) \tag{A.42}$$

o, usando la ley de los gases perfectos,

$$V + \delta V = V \left(1 + \frac{\delta T}{T} \right). \tag{A.43}$$

Si escribimos el nuevo volumen como

$$V + \delta V = V \left(1 + \alpha_d \delta T\right) \tag{A.44}$$

es inmediato que el coeficiente de expansión térmica para aire seco es

$$\alpha_d = \frac{1}{T} \,, \tag{A.45}$$

que es un resultado bien conocido.

A.7.2. Aire húmedo

El aire húmedo no saturado cerca de la temperatura y presión ambientes también se comporta de forma muy aproximada a la de un gas perfecto (ver por ejemplo [39], Cap. IV.10), y nuevamente lo trataremos como tal.

El sistema que consideramos ahora consiste de masas m_d de aire seco y m_v de vapor de agua (homogéneamente mezclados y por debajo de la saturación), inicialmente a temperatura T y presión total $p = p_d + p_v$, donde p_d y p_v son las presiones parciales del aire seco y del vapor de agua, respectivamente. Este sistema es llevado a una nueva temperatura $T + \delta T$ a presión total, masa y composición constantes. La ley de los gases queda escrita ahora como ([39], Cap. IV.11)

$$pV = mRT, \tag{A.46}$$

con

$$m = m_d + m_v \tag{A.47}$$

la masa total y

$$R = \frac{m_d R_d + m_v R_v}{m}, \qquad (A.48)$$

donde $R_v = 461,5 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ([39], p. 70) es la constante específica de los gases para el vapor de agua. Es evidente por inspección que, a pesar de estas complejidades agregadas, el coeficiente de expansión térmica será otra vez el de un gas perfecto, esto es

$$\alpha_m = \frac{1}{T} \,, \tag{A.49}$$

con la misma aproximación con que el aire húmedo se aproxime a un gas perfecto.

A.7.3. Aire mojado

El aire húmedo sobresaturado es un sistema bicomponente (aire y agua), bifase (gas y líquido) que consiste de una mezcla (idealmente homogénea) de aire seco, vapor de agua y gotas de agua líquida. Algunas aproximaciones bien justificadas [39] son:

- La presión de equilibrio del vapor de agua no está influenciada por la presencia de aire seco.
- La presión de equilibrio del vapor de agua no está influenciada por el tamaño de las gotas (esto presume que las gotas submicrométricas no son dominantes), de modo que a este respecto toda el agua presente puede ser considerada como un solo cuerpo con una interfase plana con la fase gas.
- La difusión de aire en el agua puede ser despreciada.

• El volumen de la fase líquida es pequeño comparado con el volumen total, y puede ser despreciado. Lo mismo vale para sus cambios de volumen.

Con todo esto en mente, ahora consideramos un sistema compuesto por una masa m_d de aire seco, una masa m_v de vapor de agua, y una masa m_ℓ de agua líquida; la masa total de agua es entonces $m_w = m_v + m_\ell$. El sistema está inicialmente a temperatura T y presión total p, y el vapor de agua está en equilibrio de saturación con la fase líquida. El sistema es entonces llevado a una temperatura $T + \delta T$, a la misma presión total y a equilibrio de saturación, y manteniendo constantes la masa de aire seco y la masa total de agua. Dado un volumen inicial V, queremos calcular el nuevo volumen $V + \delta V$. Se asume que el entorno entrega o absorbe todo el calor y el trabajo necesarios para todos los procesos involucrados.

Los estados de equilibrio termodinámico inicial y final son:

- **Estado inicial:** Una masa m_d de aire seco que ocupa un volumen V a la presión parcial p_d y temperatura T; una masa m_v de vapor de agua que ocupa el mismo volumen V a la presión parcial p_v y temperatura T; y una masa m_ℓ de agua líquida que ocupa un volumen despreciable a temperatura T.
- Estado final: Una masa $m_d + \delta m_d$ de aire seco ocupando un volumen $V + \delta V$ a la presión parcial $p_d + \delta p_d$ y temperatura $T + \delta T$; una masa $m_v + \delta m_v$ de vapor de agua ocupando el mismo volumen $V + \delta V$ a presión parcial $p_v + \delta p_v$ y temperatura $T + \delta T$; y una masa $m_\ell + \delta m_\ell$ de agua líquida ocupando un volumen despreciable a temperatura $T + \delta T$.

Las restricciones sobre este proceso son:

- La masa de aire seco es constante: $\delta m_d = 0$.
- La masa total $m_w = m_v + m_\ell$ de vapor de agua es constante: $\delta m_v + \delta m_\ell = 0$.
- La presión total $p = p_d + p_v$ de la fase gas es constante: $\delta p_d + \delta p_v = 0$.
- El vapor de agua está en equilibrio de saturación con el agua líquida a lo largo de todo el proceso, de modo que de la ley de Clausius-Clapeyron

$$p_v = p_s(T) \quad \Rightarrow \quad \delta p_v = \frac{l_v p_s(T)}{R_v T^2} \delta T.$$
 (A.50)

• La masa de agua evaporada mantiene el *mixing ratio* al valor de saturación a lo largo de todo el proceso:

$$r = \frac{m_v}{m_d} = r_s\left(T\right) = \frac{\varepsilon p_s\left(T\right)}{p - p_s\left(T\right)} = \varepsilon \frac{p_v}{p_d} \quad \Rightarrow \quad m_v = \varepsilon \frac{p_v}{p_d} m_d \quad (A.51)$$

de modo que

$$\delta m_{v} = \varepsilon \left(\frac{\delta p_{v}}{p_{d}} - \frac{p_{v}\delta p_{d}}{p_{d}^{2}}\right) m_{d} = \varepsilon \left(1 + \frac{p_{v}}{p_{d}}\right) \frac{\delta p_{v}}{p_{d}} m_{d}$$
$$= \varepsilon \left(1 + \frac{p_{s}\left(T\right)}{p - p_{s}\left(T\right)}\right) \frac{p_{s}\left(T\right)}{p - p_{s}\left(T\right)} \frac{m_{d}l_{v}}{R_{v}T^{2}} \delta T$$
$$= \left(\varepsilon + r_{s}\left(T\right)\right) r_{s}\left(T\right) \frac{m_{d}l_{v}}{R_{d}T^{2}} \delta T.$$
(A.52)

Tratando el aire húmedo como un gas perfecto tenemos

$$pV = m_g RT, \tag{A.53}$$

donde $m_g = m_d + m_v$ es la masa de la fase gas. Entonces

$$(p_d + p_v) V = (m_d R_d + m_v R_v) T.$$
 (A.54)

Tomando la variación de esta ecuación, a primer orden, obtenemos

$$(\delta p_d + \delta p_v) V + (p_d + p_v) \delta V = (\delta m_d R_d + \delta m_v R_v) T + (m_d R_d + m_v R_v) \delta T,$$
(A.55)

que usando las restricciones sobre el proceso, puede ser reescrito en la forma

$$p\delta V = \delta m_v R_v T + (m_d R_d + m_v R_v) \delta T$$

= $(\varepsilon + r_s) r_s \frac{m_d l_v}{R_d T^2} \delta T R_v T + (m_d R_d + m_v R_v) \delta T$
= $\left[(\varepsilon + r_s) r_s \frac{m_d l_v}{pV\varepsilon} + 1 \right] \frac{pV}{T} \delta T.$ (A.56)

Entonces

$$\delta V = \left[\left(\varepsilon + r_s \right) r_s \frac{m_d l_v}{p V \varepsilon} + 1 \right] \frac{V}{T} \delta T.$$
 (A.57)

Pero

$$p_d V = m_d R_d T, \tag{A.58}$$

de modo que

$$\frac{m_d}{pV} = \frac{1}{pV} \frac{p_d V}{R_d T} = \frac{p_d}{p} \frac{1}{R_d T} = \frac{p - p_v}{p} \frac{1}{R_d T} = \frac{p - p_s}{p} \frac{1}{R_d T} = \frac{\varepsilon p_s}{r_s p} \frac{1}{R_d T}.$$
(A.59)

Luego

$$\delta V = \left[(\varepsilon + r_s) \frac{p_s}{p} \frac{l_v}{R_d T} + 1 \right] \frac{V}{T} \delta T, \qquad (A.60)$$

y usando

$$r_s = \frac{\varepsilon p_s}{p - p_s} \quad \Rightarrow \quad p_s = \frac{r_s}{\varepsilon + r_s} p \tag{A.61}$$

finalmente obtenemos

$$\delta V = \left(1 + \frac{l_v r_s}{R_d T}\right) \frac{V}{T} \delta T.$$
(A.62)

Ahora podemos calcular el nuevo volumen, que resulta

$$V + \delta V = V \left[1 + \left(1 + \frac{l_v r_s}{R_d T} \right) \frac{1}{T} \delta T \right].$$
 (A.63)

Si lo escribimos como

$$V + \delta V = V \left(1 + \alpha_w \delta T \right) \tag{A.64}$$

vemos que el coeficiente de expansión térmica a presión constante para aire mojado es

$$\alpha_w = \left(1 + \frac{l_v r_s}{R_d T}\right) \frac{1}{T} = \left(1 + \frac{l_v r_s}{R_d T}\right) \alpha_m.$$
(A.65)

A.7.4. Coeficiente de expansión térmica a través de la curva de saturación

Agrupando las expresiones precendentes, podemos unificarlas como

$$\alpha = \frac{1}{T} \left[1 + \Theta \left(r - r_s \right) \frac{l_v r_s}{R_d T} \right]$$
(A.66)

donde Θ es la función escalón de Heaviside. Vemos claramente que α es discontínua a través de la curva de saturación.

A.7.5. Coeficiente de expansión térmica en función de la concentración

En términos de q en lugar de r, tenemos

$$\alpha = \frac{1}{T} \left[1 + \Theta \left(q - q_s \right) \frac{q_s}{1 - q_s} \frac{l_v}{R_d T} \right].$$
(A.67)

A.8. Coeficiente de expansión másico

Acabamos de mostrar que la densidad del aire húmedo y del aire mojado dependen de la composición a través del *mixing ratio* r, de modo que un cambio de composición a temperatura y presión constante puede resultar en un cambio de densidad y por lo tanto de flotabilidad (*buoyancy*). Vamos a deducir entonces expresiones para el cambio de volumen de una parcela cuando su composición cambia.

A.8.1. Aire húmedo

Para aire húmedo tenemos

$$\rho = \frac{1+r}{R_d + rR_v} \frac{p}{T},\tag{A.68}$$

de modo que manteniendo constantes $p \ge T$

$$\delta \rho = \left(\frac{1}{R_d + rR_v} - \frac{(1+r)R_v}{(R_d + rR_v)^2}\right) \frac{p}{T} \delta r$$
$$= \rho \left(\frac{1}{1+r} - \frac{R_v}{R_d + rR_v}\right) \delta r \,. \tag{A.69}$$

Escribiendo la nueva densidad en la forma

$$\rho + \delta \rho = \rho \left(1 - \beta \delta r \right) \,, \tag{A.70}$$

0

$$\delta \rho = -\beta \rho \delta r \,, \tag{A.71}$$

vemos que el coeficiente de expansión másico β_m para aire húmedo es

$$\beta_m = \frac{R_v}{R_d + rR_v} - \frac{1}{1+r} = \frac{1}{\varepsilon + r} - \frac{1}{1+r} = \frac{1-\varepsilon}{(\varepsilon + r)(1+r)} > 0. \quad (A.72)$$

La positividad de β_m corresponde al hecho bien conocido de que el aire húmedo (subsaturado) es mas ligero (menos denso) que el aire seco a la misma temperatura y presión, debido a que el vapor de agua tiene un peso molecular más pequeño que el del aire seco. El aire húmedo tiene entonces flotabilidad positiva respecto del aire seco a la misma temperatura y presión.

El cálculo puede ser reformulado, si es necesario, en términos de q. Por debajo de la saturación tenemos

$$\rho = \frac{1}{(1-q)R_d + qR_v} \frac{p}{T},$$
(A.73)

luego

$$\delta\rho = -\frac{-R_d + R_v}{\left((1-q)\,R_d + qR_v\right)^2} \frac{p}{T} \delta q = \frac{R_d - R_v}{\left(1-q\right)R_d + qR_v} \rho \delta q \tag{A.74}$$

у

$$\beta_m = -\frac{R_d - R_v}{(1 - q)R_d + qR_v} = \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon + (1 - \varepsilon)q} = \frac{1}{1 - q} \left(\frac{1}{\varepsilon + (1 - \varepsilon)q} - 1\right) > 0.$$
(A.75)

A.8.2. Aire mojado

Por encima de la saturación tenemos

$$\rho = \frac{1+r}{R_d + r_s R_v} \frac{p}{T} \,, \tag{A.76}$$

así que ahora, manteniendo constantes $p \ge T$, obtenemos

$$\delta\rho = \frac{1}{R_d + r_s R_v} \frac{p}{T} \delta r = \frac{1}{1+r} \frac{1+r}{R_d + r_s R_v} \frac{p}{T} \delta r = \rho \frac{1}{1+r} \delta r \,, \qquad (A.77)$$

donde hemos usado que r_s depende sólo de T y p (y no de r). El coeficiente de expansión másico del aire mojado resulta entonces

$$\beta_w = -\frac{1}{1+r} < 0. \tag{A.78}$$

Esto es consistente con el hecho de que cualquier incremento del agua total por encima de la saturación incrementa la cantidad de gotas de agua, que tienen un volumen despreciable (en buena aproximación), pero no cambia la densidad de la fase gas, que permanece saturada. La mezcla total resulta así más densa. Esto es, el aire mojado tiene flotabilidad negativa respecto del aire saturado a la misma temperatura y presión.

Este cálculo puede también ser reformulado en términos de q. Por encima de la saturación tenemos

$$\rho = \frac{1 - q_s}{(1 - q_s) R_d + q_s R_v} \frac{1}{1 - q}, \qquad (A.79)$$

de modo que

$$\delta \rho = \frac{1 - q_s}{(1 - q_s) R_d + q_s R_v} \frac{1}{(1 - q)^2} \delta q = \rho \frac{1}{1 - q} \delta q$$
(A.80)

у

$$\beta_w = -\frac{1}{1-q} < 0. \tag{A.81}$$

A.8.3. Coeficiente de expansión másico a través de la curva de saturación

Las expresiones anteriores pueden ser unificadas en la forma

$$\beta = \frac{1}{1+r} \left(\Theta \left(r_s - r \right) \frac{1+r}{\varepsilon + r} - 1 \right)$$
$$= \frac{1}{1-q} \left(\Theta \left(q_s - q \right) \frac{1}{\varepsilon + (1-\varepsilon) q} - 1 \right).$$
(A.82)

Así vemos que β es discontínua a través de la curva de saturación.

c_{d0}	1,03409	c_{d3}	$-0,4970786 \times 10^{-9}$	9
c_{d1}	$-0,284887 \times 10^{-3}$	c_{d4}	$0,1077024 \times 10^{-1}$	12
c_{d2}	$0,7816818 \times 10^{-6}$			
1010 +				
1				
1				
1009				
1				
1				
1008 -				
1				
1				
1007 -				
1				
1				
1006				
1				
1				
1005 +		+ + + + + + + + + + + + + + + + + + + +		• • •
20	30	40	50	
		t (°C)		

Tabla A.5: Coeficientes de la ecuación (A.85) para $c_{p,d}.$

Figura A.4: Capacidad calórica específica a presión constante para aire seco $c_{p,d}$ dada por (A.85).

A.9. Capacidad calórica específica a presión constante

Otra cantidad que necesitamos es la capacidad calórica específica del aire húmedo (aire seco + vapor de agua no saturado) y del aire mojado (aire saturado + gotas de agua líquida). Otra vez procederemos en orden creciente de complejidad.

A.9.1. Aire seco

Consideremos una masa m_d de aire seco calentado a presión constante p desde una temperatura T hasta una temperatura $T + \delta T$. Siguiendo a Iribarne [39], Cap. II (p. 20), el calor δQ_d absorbido en el proceso puede ser escrito como

$$\delta Q_d = c_{p,d} m_d \delta T. \tag{A.83}$$

Tratando siempre el aire seco como un gas perfecto diatómico, obtenemos de [39] Cap. II.5 (p. 25)

$$c_{p,d} = \frac{7}{2} R_d = 1005 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$$
. (A.84)

Sin embargo Tsilingiris [40], en base al ajuste de numerosos datos experimentales, propone el modelo polinomial

$$c_{p,d} = \left(c_{d0} + c_{d1}T + c_{d2}T^2c_{d3}T^3 + c_{d4}T^4\right) \times 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad (A.85)$$

cuyos coeficientes se muestran en la Tabla A.5.

La figura A.4 muestra los valores de esta expresión en el rango de interés. Vemos que, para nuestros propositos, podríamos adoptar el valor constante

$$c_{p,d} = 1008,5 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$$
 (A.86)

con un error no mayor que el 0,2%. Sin embargo, a la luz de lo que veremos que ocurre con $c_{p,v}$, y dado el uso que le daremos posteriormente en la Sección A.9.8, consideramos mejor conservar el polinomio de Tsilingiris.

A.9.2. Vapor de agua

Consideremos una masa m_v de vapor de agua calentada a presión constante p desde una temperatura T hasta una temperatura $T + \delta T$. El calor δQ_v absorbido en el proceso puede ser escrito como

$$\delta Q_v = c_{p,v} m_v \delta T. \tag{A.87}$$

Tratando el vapor de agua como un gas perfecto (ver [39] Cap. IV.10, p. 70) compuesto de moléculas no lineales triatómicas (en consecuencia con seis grados de libertad), obtenemos el valor aproximado

$$c_{p,v} = 4R_v = 1870 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1},$$
 (A.88)

aunque éste depende ligeramente de la temperatura y la presión (ver [39] Tabla IV-5, p. 77). Tsilingiris, nuevamente en base al ajuste de numerosos datos experimentales, propone en cambio el modelo polinomial

$$c_{p,v} = \left(c_{v0} + c_{v1}t + c_{v2}t^2\right) \times 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$$
(A.89)

cuyos coeficientes se muestran en la Tabla A.6. La figura A.5 muestra los valores de esta expresión en el rango de interés. Vemos que la adopción de un valor fijo

$$c_{p,v} = 1895 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1} \tag{A.90}$$

introduciría un error de hasta 2,5 %. Conservaremos entonces el polinomio de Tsilingiris.

$c_{v0} = 1.8$ $c_{v1} = -2.5$	$\frac{6910989}{78421578 \times 10^{-4}}$	c_{v2}	$1,941058941 \times$	10^{-5}
1950				<u>, , , , , , , , , , , , , , , , , , , </u>
1925				
5 1900 - 				
1875				
1850 1 850 2 0	30	40 + (°C)	50	60

Tabla A.6: Coeficientes de la ecuación (A.89) para $c_{p,v}$.

Figura A.5: Capacidad calórica específica a presión constante para vapor de agua $c_{p,v}$ dada por (A.89).

A.9.3. Aire húmedo

Consideremos ahora una masa m_d de aire seco y una masa m_v de vapor de agua, uniformemente mezcladas y calentadas a presión constante p desde una temperatura T hasta una temperatura $T + \delta T$. El calor δq_m absorbido por unidad de masa de esta mezcla será (ver [39] Cap. IV.12, p. 77)

$$\delta q_m = m_d \delta q_d + m_v \delta q_v = (1 - q) \,\delta q_d + q \delta q_v \,, \tag{A.91}$$

donde q es la humedad específica. Entonces, de [39], ec. (IV.87) (p. 77) tendremos

$$c_{p,m} = \left[1 + \left(\frac{c_{p,v}}{c_{p,d}} - 1\right)q\right]c_{p,d} = \left[1 + \left(\frac{c_{p,v}}{c_{p,d}} - 1\right)\frac{r}{1+r}\right]c_{p,d}, \quad (A.92)$$

pero esta expresión resulta innecesariamente complicada si usamos los modelos de Tsilingiris para $c_{p,d}$ y $c_{p,v}$. Podemos en cambio poner el calor total absorbido como

$$\delta Q_m = (m_d c_{p,d} + m_v c_{p,v}) \, \delta T = (c_{p,d} + r c_{p,v}) \, m_d \delta T = \frac{c_{p,d} + r c_{p,v}}{1+r} m_m \delta T,$$
(A.93)

donde

$$m_m = m_d + m_v = (1+r) m_d$$
 (A.94)

es la masa total de aire húmedo. Entonces tendremos

1

$$c_{p,m} = \frac{c_{p,d} + rc_{p,v}}{1+r},$$
 (A.95)

y a la saturación simplemente resultará

$$c_{p,s} = \frac{c_{p,d} + r_s c_{p,v}}{1 + r_s} \,. \tag{A.96}$$

A.9.4. Agua líquida

En este caso debemos basarnos directamente en los resultados experimentales. De [39], Ap. I (p.246) tenemos muy aproximadamente $c_{p,\ell} = 4178$ J kg⁻¹ K⁻¹ a 40°C y casi constante desde T = 20°C hasta T = 60°C dentro de un 0,2 %. Podríamos entonces tomar simplemente el valor promedio

$$c_{p,\ell} = 4180 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1} \tag{A.97}$$

Pero podemos obtener una aproximación mucho mejor, ajustando los datos de [39], Ap. I, (p. 246) por un polinomio. Usando solamente los datos de 0° C a 50° C obtenemos

$$c_{p,\ell} = 4217,93007 - 3,84429t + 0,15212t^{2} - 0,00292t^{3} + 2,23776 \times 10^{-5}t^{4} \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$$
(A.98)

con un error absoluto menor que 0,3 J kg⁻¹ K⁻¹ (que es un 0,01 %) sobre este rango. Sin embargo, probablemente no sería prudente extrapolar este modelo mucho más allá de dicho rango.

A.9.5. Aire mojado

Ahora consideramos un sistema que consiste de aire húmedo saturado y gotas de agua homogéneamente mezclados, calentado a presión constante p desde una temperatura T hasta una temperatura $T + \delta T$. Los estados termodinámicos inicial y final, y el proceso, serán los mismos que en la derivación precedente del coeficiente de expansión térmica (ver Sección A.7). En particular, la masa de agua líquida evaporada a lo largo del proceso será

$$\delta m_v = (\varepsilon + r_s) r_s \frac{m_d l_v}{R_d T^2} \delta T \tag{A.99}$$

y el calor absorbido por este proceso de evaporación será

$$\delta Q_l = l_v \delta m_v = (\varepsilon + r_s) r_s \frac{m_d l_v^2}{R_d T^2} \delta T.$$
(A.100)

El calor absorbido total tendrá también una contribución del calentamiento del aire húmedo saturado

$$\delta Q_s = c_{p,s} \left(m_d + m_v \right) \delta T = \frac{c_{p,d} + r_s c_{p,v}}{1 + r_s} \left(1 + r_s \right) m_d = \left(c_{p,d} + r_s c_{p,v} \right) m_d$$
(A.101)

y una contribución del calentamiento del agua líquida

$$\delta Q_{\ell} = c_{p,\ell} m_{\ell} \delta T. \tag{A.102}$$

Así el calor absorbido como energía interna de la parcela, a primer orden en todas las variaciones, será

$$\delta Q_U = \left[\left(c_{p,d} + r_s c_{p,v} \right) + c_{p,\ell} \frac{m_\ell}{m_d} + \left(\varepsilon + r_s \right) r_s \frac{l_v^2}{R_d T^2} \right] m_d \delta T \qquad (A.103)$$

Ahora, habiendo agua líquida presente, el mixing ratio adopta la forma

$$r = r_s + \frac{m_\ell}{m_d},\tag{A.104}$$

de donde

$$\frac{m_\ell}{m_d} = r - r_s \tag{A.105}$$

y consecuentemente

$$\delta Q_U = \left[(c_{p,d} + r_s c_{p,v}) + c_{p,\ell} (r - r_s) + (\varepsilon + r_s) r_s \frac{l_v^2}{R_d T^2} \right] m_d \delta T. \quad (A.106)$$

Por otro lado, la masa total del sistema es

$$m_w = m_d + m_v + m_\ell = m_d + r_s m_d + (r - r_s) m_d = (1 + r) m_d$$
, (A.107)

de donde

$$m_d = \frac{m_w}{1+r} \tag{A.108}$$

у

$$\delta Q_U = \left[(c_{p,d} + r_s c_{p,v}) + c_{p,\ell} (r - r_s) + (\varepsilon + r_s) r_s \frac{l_v^2}{R_d T^2} \right] \frac{m_w \delta T}{1 + r}, \quad (A.109)$$

que puede ser reescrita como

$$\delta Q_U = \left[(c_{p,d} + rc_{p,v}) + (r - r_s) (c_{p,\ell} - c_{p,v}) + (\varepsilon + r_s) r_s \frac{l_v^2}{R_d T^2} \right] \frac{m_w \delta T}{1 + r}.$$
(A.110)

Por otra parte, tendremos otra contribución δQ_W al calor absorbido, correspondiente a la energía entregada por la parcela al entorno como trabajo de expansión isobárica. De la expresión (A.62) para el cambio de volumen de la parcela, este trabajo será

$$\delta Q_W = p \delta V = \left(1 + \frac{l_v r_s}{R_d T}\right) \frac{p V}{T} \delta T, \qquad (A.111)$$

que empleando la ley de los gases ideales (A.26) para la mezcla aire-vapor, la expresión (A.27) para la correspondiente constante específica y las relaciones de masas (A.105) y (A.108) para las componentes de la parcela, puede reescribirse como

$$\delta Q_W = \left(1 + \frac{l_v r_s}{R_d T}\right) \frac{1 + r_s/\varepsilon}{1 + r} R_d m_w \delta T.$$
(A.112)

Sumando ambas contribuciones y dividiendo por $m_w \delta T$, la capacidad calórica específica del aire mojado a presión constante resulta

$$c_{p,w} = \left[(c_{p,d} + rc_{p,v}) + (r - r_s) (c_{p,\ell} - c_{p,v}) + (\varepsilon + r_s) r_s \left(\frac{l_v^2}{R_d T^2} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{R_d}{r_s} + \frac{l_v}{T} \right) \right) \right] \frac{1}{1+r}, \quad (A.113)$$

donde hay dependencias adicionales (implícitas) del valor de la presión y la temperatura a través de r_s , las capacidades calóricas específicas y el calor latente específico.

Los valores de c_p justo por debajo y por encima de la saturación son necesarios en el modelo hidrodinámico. Justo por debajo de la saturación tenemos

$$c_p^- = c_{p,s} = \frac{c_{p,d} + r_s c_{p,v}}{1 + r_s},$$
 (A.114)

mientras que justo por encima tenemos

$$c_p^+ = c_p^- \left[1 + \frac{(\varepsilon + r_s) r_s}{c_{p,d} + r_s c_{p,v}} \left(\frac{l_v^2}{R_d T^2} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{R_d}{r_s} + \frac{l_v}{T} \right) \right) \right].$$
(A.115)

A.9.6. Capacidad calórica específica a traves de la curva de saturación

Comparando las expresiones para c_p por debajo, a y por encima de la saturación, éstas pueden ser unificadas en la expresión

$$c_p = \frac{c_{p,d} + rc_{p,v}}{1+r} + \frac{\Theta(r-r_s)}{1+r} \times \left[(r-r_s)\left(c_{p,\ell} - c_{p,v}\right) + \left(\varepsilon + r_s\right)r_s\left(\frac{l_v^2}{R_dT^2} + \frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{R_d}{r_s} + \frac{l_v}{T}\right)\right) \right].$$
(A.116)

Vemos entonces que c_p es discontínuo a través de la curva de saturación.



Figura A.6: Calor latente específico de vaporización del agua l_v dado por (A.123).

A.9.7. Capacidad calórica específica en función de la concentración

Por brevedad omitiremos la expresión general, y sólo daremos las expresiones justo por debajo y por encima de la saturación,

$$c_{p}^{-} = (1 - q_{s}) c_{p,d} + q_{s} c_{p,v} , \qquad (A.117)$$

$$c_p^+ = c_p^- + \left(\varepsilon + \frac{q_s}{1 - q_s}\right) q_s \left(\frac{l_v^2}{R_d T^2} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{1 - q_s}{q_s} R_d + \frac{l_v}{T}\right)\right).$$
(A.118)

A.9.8. Calor latente específico del agua

Estamos ahora en condiciones de formular un modelo para el calor latente específico de vaporización del agua. Tenemos de Iribarne [39], Ap. I (p. 246) el valor de referencia

$$l_v = 2,4062 \times 10^6 \text{ J kg}^{-1} \tag{A.119}$$

a 40°C. También de [39] Cap. IV.9 (pp. 68–69) tenemos

$$\frac{dl_v}{dt} = c_{p,v} - c_{p,\ell} \,. \tag{A.120}$$

173

Usando para $c_{p,v}$ el modelo de Tsilingiris [40]

$$c_{p,v} = 1869,10989 - 0.2578421578t + 0.01941058941t^2 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}, \text{ (A.121)}$$

y para $c_{p,\ell}$ nuestro modelo,

$$c_{p,\ell} = 4217,93007 - 3,84429t + 0,15212t^2 - 0,00292t^3 + 2,23776 \times 10^{-5}t^4 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad (A.122)$$

una simple integración término a término y el uso del valor de referencia a 40° C resultan en la expresión

$$l_v(T) = 2498704,276 - 2348,82018t + 1,793223921t^2 - 0,0442364702t^3 + 0,00073t^4 - 4,47552 \times 10^{-6}t^5 \text{ J kg}^{-1}.$$
(A.123)

La figura A.6 muestra los valores de esta expresión en el rango de interés. Comparando con los datos en Iribarne vemos que el error de este modelo es menor al 0,05% sobre dicho rango. De modo que el modelo es bueno, pero su precisión no puede ser garantizada más allá del rango $0^{\circ}C-50^{\circ}C$

A.10. Viscosidad cinemática

A diferencia de los coeficientes precedentes, las viscosidades cinemática y dinámica de las mezclas de gases no pueden ser derivadas de las de los gases puros por medios "termodinámicos" que sólo involucren el *mixing ratio*, sino que dependen también de aspectos de la teoría cinética como las secciones eficaces de las colisiones moleculares. En lo que sigue seguiremos el usual enfoque semiempírico.

A.10.1. Generalidades

La teoria cinética de los gases predice que para un gas ideal simple la viscosidad cinemática es

$$\nu = \frac{1}{2}\bar{u}\lambda \tag{A.124}$$

donde \bar{u} es la velocidad media (térmica) de los átomos o moléculas del gas y λ es su camino libre medio. Notemos que \bar{u} depende de la temperatura pero es independiente de la densidad ρ del gas, mientras que λ escalea como ρ^{-1} . Así el valor de la viscosidad dinámica

$$\eta = \rho \nu \tag{A.125}$$

resulta independiente de la densidad y por tanto de la presión p, pero depende de la temperatura T.



Tabla A.7: Coeficientes de la ecuación (A.128) para η_d .

Figura A.7: Viscosidad dinámica del aire seco η_d dada por (A.128).

Una aproximación bastante buena a la viscosidad dinámica η de una mezcla binaria se obtiene considerándola como una solución ideal:

$$\eta = \frac{1}{\frac{\chi_a}{\eta_a} + \frac{\chi_b}{\eta_b}},\tag{A.126}$$

donde χ_a y χ_b son las fracciones molares de las dos componentes (y por lo tanto $\chi_a + \chi_b = 1$). Esta relación puede ser escrita más convenientemente como

$$\frac{1}{\eta} = \frac{\chi_a}{\eta_a} + \frac{\chi_b}{\eta_b} \tag{A.127}$$

Sin embargo no proseguiremos por este camino, ya que como veremos enseguida la no-idealidad del aire seco y sobre todo del vapor de agua son, a este respecto, grandes.

A.10.2. Aire seco

Tsilingiris [40], como siempre en base a una cantidad de resultados experimentales, da la expresión polinomial

$$\eta_d = \left(\eta_{d0} + \eta_{d1}T + \eta_{d2}T^2 + \eta_{d3}T^3 + \eta_{d4}T^4\right) \times 10^{-6} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad (A.128)$$

cuyos coeficientes se listan en la Tabla A.7.

La figura A.7 muestra los valores de esta expresión en el rango de interés. Podemos ver que la variación de η_d en ese rango es apreciable (un 10%).

A.10.3. Vapor de agua

Una expresión de ley de potencia para la viscosidad dinámica del vapor de agua ha sido dada por J. F. Crifo [96] en unidades cgs, como

$$\eta_v = B \left(\frac{T}{T_0}\right)^n \text{ g cm}^{-1} \text{ s}^{-1}, \qquad (A.129)$$

donde

$$B = (9,25 \pm 0,35) \times 10^{-5}, \quad n = 1,10 \pm 0,02, \quad T_0 = 300 \text{ K.}$$
 (A.130)

Substituyendo las constantes y convirtiendo a unidades MKS tenemos

$$\eta_v = 1,743 \times 10^{-8} T^{1,1} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}.$$
 (A.131)

Otra vez, una mejor aproximación es provista por Tsilingiris [40], que da

$$\eta_v = (\eta_{v0} + \eta_{v1}t) \times 10^{-6} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}, \qquad (A.132)$$

pero se debe tener cuidado ya que los coeficientes en [40] son demasiado grandes en un factor 10; los coeficientes correctos se muestran en la Tabla A.8.

La figura A.8 muestra los valores de la ley de potencia y del modelo de Tsilingiris. Vemos que los dos modelos difieren al menos por 2,5% sobre nuestro rango de interés. En lo que sigue adoptaremos el modelo de Tsilingiris.

A.10.4. Aire húmedo

Como siempre vamos a considerar el aire como un gas perfecto. En este caso lo pensamos como una mezcla binaria de dos gases perfectos, aire seco y vapor de agua. Mayormente por motivos de comparación vamos a trabajar con dos modelos de viscosidad dinámica de mezclas, uno formulado por Davidson [97] en 1993, y el otro el provisto por Tsilingiris [40]. La deducción de ambos modelos es larga y trabajosa, por lo que sugerimos al lector interesado consultar estos trabajos y las referencias proporcionadas en ellos.



Tabla A.8: Coeficientes de la ecuación (A.132) para η_v .

Figura A.8: Viscosidad dinámica del vapor de agua η_v dada por (A.131) y (A.132).

Usando la ec. (30) de Davidson [97] tenemos

$$\frac{1}{\eta} = \frac{y_d^2}{\eta_d} + \frac{y_v^2}{\eta_v} + 2\frac{y_d y_v}{\sqrt{\eta_d \eta_v}} \left(\frac{2\sqrt{M_d M_v}}{M_d + M_v}\right)^{0,375}$$
(A.133)

donde

$$y_d = \frac{N_d \sqrt{M_d}}{N_d \sqrt{M_d} + N_v \sqrt{M_v}}, \quad y_v = \frac{N_v \sqrt{M_v}}{N_d \sqrt{M_d} + N_v \sqrt{M_v}}$$
(A.134)

son las llamadas "fracciones de momentum" para aire seco y vapor, respectivamente. Aquí N_i son las fracciones molares y M_i los pesos moleculares del aire seco y del vapor de agua. Notemos que todos los términos que incluyen pesos moleculares no cambian si éstos se reemplazan por las masas μ_i de las moléculas correspondientes. Notemos también que las fracciones de momento y_i son adimensionales. Los pesos moleculares para aire seco y vapor de agua son ([39] Ap. I, p. 245, [40])

$$M_d = 28,9635 \text{ g mol}^{-1}, \quad M_v = 18,015 \text{ g mol}^{-1}.$$
 (A.135)

Para un mixing ratio dado, las fracciones molares pueden obtenerse de las relaciones

$$r = \frac{m_v}{m_d} = \frac{N_v M_v}{N_d M_d} = 0,62199 \frac{N_v}{N_d} = \varepsilon \frac{N_v}{N_d}, \qquad N_v + N_d = 1, \qquad (A.136)$$

y resultan

$$N_d = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + r}, \quad N_v = \frac{r}{\varepsilon + r}.$$
 (A.137)

También, usando $M_v = \varepsilon M_d$ resulta

$$y_d = \frac{\varepsilon\sqrt{M_d}}{\varepsilon\sqrt{M_d} + r\sqrt{\varepsilon}M_d} = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon} + r}, \quad y_v = \frac{r\sqrt{M_v}}{\varepsilon\sqrt{M_d} + r\sqrt{M_v}} = \frac{r}{\sqrt{\varepsilon} + r}$$
(A.138)

у

$$\left(\frac{2\sqrt{M_d M_v}}{M_d + M_v}\right)^{0.375} = \left(\frac{2\sqrt{\varepsilon}}{1+\varepsilon}\right)^{0.375} = 0.98958 .$$
(A.139)

Substituyendo estas expresiones tenemos

$$\frac{1}{\eta} = \frac{\varepsilon}{\eta_d} + \frac{r^2}{\eta_v} + 1.979 \, 2 \frac{\sqrt{\varepsilon}r}{\sqrt{\eta_d \eta_v}} \,. \tag{A.140}$$

Por otro lado, Tsilingiris [40] propone para la viscosidad dinámica de la mezcla la expresión

$$\eta = \frac{N_d \eta_d}{N_d \Phi_{dd} + N_v \Phi_{dv}} + \frac{N_v \eta_v}{N_d \Phi_{vd} + N_v \Phi_{vv}}.$$
 (A.141)

La expresión general de los coeficientes Φ_{ij} para mezclas multicomponentes, que necesitaremos más adelante, es

$$\Phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_i}{\eta_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)\right]^{1/2}}.$$
 (A.142)

En nuestro caso particular tendremos entonces

$$\Phi_{dd} = \Phi_{vv} = 1 \tag{A.143}$$

у

$$\Phi_{dv} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_d}{\eta_v}\right)^{1/2} \left(\frac{M_v}{M_d}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_d}{M_v}\right)\right]^{1/2}}, \quad \Phi_{vd} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_v}{\eta_d}\right)^{1/2} \left(\frac{M_d}{M_v}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_v}{M_d}\right)\right]^{1/2}}.$$
(A.144)

Usando $N_d = \varepsilon/(\varepsilon + r), \, N_v = r/(\varepsilon + r)$ y $M_v = \varepsilon M_d,$ resulta

$$\eta = \frac{\varepsilon \eta_d}{\varepsilon + r \Phi_{dv}} + \frac{r \eta_v}{\varepsilon \Phi_{vd} + r}, \qquad (A.145)$$

con

$$\Phi_{dv} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_d}{\eta_v}\right)^{1/2} \varepsilon^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \varepsilon^{-1}\right)\right]^{1/2}}, \quad \Phi_{vd} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_v}{\eta_d}\right)^{1/2} \varepsilon^{-1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \varepsilon\right)\right]^{1/2}}.$$
 (A.146)

Notemos que a la saturación Φ_{dv} y Φ_{vd} conservan las mismas expresiones, mientras que η queda expresado como

$$\eta = \frac{\varepsilon \eta_d}{\varepsilon + r_s \Phi_{dv}} + \frac{r_s \eta_v}{\varepsilon \Phi_{vd} + r_s}.$$
 (A.147)

A.10.5. Aire mojado

En este caso tenemos aire húmedo más un fino aerosol de gotas de agua líquida, cuyo tamaño en principio varía desde el micrón hasta el centenar de micrones, aproximadamente. Aquí introduciremos una aproximación reconocidamente rústica, consistente en considerar el aerosol de gotas como un tercer gas, constituido por "moléculas" (las gotas) muy grandes y pesadas.

En el modelo de mezcla de Davidson [97] tendríamos entonces las fracciones de momentum

$$y_i = \frac{N_i \sqrt{M_i}}{N_d \sqrt{M_d} + N_v \sqrt{M_v} + N_\ell \sqrt{M_\ell}}, \qquad (A.148)$$

donde el índice *i* corresponde a aire seco (*d*), vapor(*v*) y gotas (ℓ), siendo N_{ℓ} la "fracción molar" y M_{ℓ} el "peso molecular" de las gotas. Ahora, para una dada masa m_{ℓ} de agua líquida tenemos $m_{\ell} = N_{\ell}M_{\ell}$, así que por ejemplo

$$N_{\ell}\sqrt{M_{\ell}} = \frac{m_{\ell}}{\sqrt{M_{\ell}}} \lll \frac{m_v}{\sqrt{M_v}} = N_v\sqrt{M_v}, \qquad (A.149)$$

ya que $M_{\ell} \gg M_v$ o M_d , pero las masas de las distintas componentes son comparables. De este modo y_d e y_v deberían ser aproximadamente las mismas que para aire húmedo, mientras que $y_{\ell} \ll 1$. También tendremos

$$\left(\frac{2\sqrt{M_d M_\ell}}{M_d + M_\ell}\right)^{0,375} \ll 1, \quad \left(\frac{2\sqrt{M_v M_\ell}}{M_v + M_\ell}\right)^{0,375} \ll 1.$$
(A.150)

Los términos que involucran agua líquida en la fórmula de viscosidad de mezclas de Davidson serán

$$\frac{y_{\ell}^2}{\eta_{\ell}} + 2\frac{y_d y_{\ell}}{\sqrt{\eta_d \eta_{\ell}}} \left(\frac{2\sqrt{M_d M_{\ell}}}{M_d + M_{\ell}}\right)^{0,375} + 2\frac{y\ell y_v}{\sqrt{\eta_\ell \eta_v}} \left(\frac{2\sqrt{M_\ell M_v}}{M_\ell + M_v}\right)^{0,375}.$$
 (A.151)

Usando que y_ℓ escalea como $1/\sqrt{M_\ell}$ para un dado valor de $m_\ell,$ estos términos escalean como

$$\frac{y_{\ell}^2}{\eta_{\ell}} \propto \frac{1}{M_{\ell}\eta_{\ell}},$$

$$2\frac{y_d y_{\ell}}{\sqrt{\eta_d \eta_{\ell}}} \left(\frac{2\sqrt{M_d M_{\ell}}}{M_d + M_{\ell}}\right)^{0,375} \propto \frac{1}{M_{\ell}^{0,1875}\sqrt{M_{\ell}\eta_{\ell}}},$$

$$2\frac{y\ell y_v}{\sqrt{\eta_{\ell}\eta_v}} \left(\frac{2\sqrt{M_{\ell} M_v}}{M_{\ell} + M_v}\right)^{0,375} \propto \frac{1}{M_{\ell}^{0,1875}\sqrt{M_{\ell}\eta_{\ell}}}.$$
(A.152)

Por otro lado, para un gas de esferas rígidas un conocido resultado de la teoria cinética afirma que [98]

$$\eta = \frac{2}{3d^2} \sqrt{\frac{mkT}{\pi^3}}, \qquad (A.153)$$

donde m es la masa y d el diámetro de las esferas; para esferas de densidad dada y constante ρ tendremos

$$m = \rho \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d}{2}\right)^3 = \frac{1}{6} \pi d^3 \rho \quad \Longrightarrow \quad d = \left(\frac{6m}{\pi\rho}\right)^{1/3}, \tag{A.154}$$

de modo que

$$\eta = \frac{2}{3} \left(\frac{\pi\rho}{6m}\right)^{2/3} \sqrt{\frac{mkT}{\pi^3}} \propto m^{-\frac{1}{6}}.$$
 (A.155)

En nuestra imagen del aerosol de gotas como un "gas" de moléculas muy pesadas, y en la medida en que el modelo de esferas rígidas sea aplicable, el escaleo de su viscosidad dinámica con el "peso molecular" de las gotas debería ser aproximadamente el mismo:

$$\eta_{\ell} = M_{\ell}^{-\frac{1}{6}}.$$
 (A.156)

Entonces los términos que involucran agua líquida en la fórmula de viscosidad de las mezclas deberían escalear de acuerdo a

$$\frac{y_{\ell}^2}{\eta_{\ell}} \propto \frac{1}{M_{\ell} M_{\ell}^{-\frac{1}{6}}} = M_{\ell}^{-\frac{5}{6}},$$

$$2\frac{y_{d}y_{\ell}}{\sqrt{\eta_{d}\eta_{\ell}}} \left(\frac{2\sqrt{M_{d}M_{\ell}}}{M_{d} + M_{\ell}}\right)^{0,375} \propto \frac{1}{M_{\ell}^{0,1875}\sqrt{M_{\ell}M_{\ell}^{-\frac{1}{6}}}} = M_{\ell}^{-0,60417},$$

$$2\frac{y\ell y_{v}}{\sqrt{\eta_{\ell}\eta_{v}}} \left(\frac{2\sqrt{M_{\ell}M_{v}}}{M_{\ell} + M_{v}}\right)^{0,375} \propto \frac{1}{M_{\ell}^{0,1875}\sqrt{M_{\ell}M_{\ell}^{-\frac{1}{6}}}} = M_{\ell}^{-0,60417}.$$
 (A.157)

La conclusión es que incluso para gotas submicrométricas, su contribución a la viscosidad dinámica debería ser despreciable, ya que sus pesos moleculares son al menos nueve órdenes de magnitud superiores a los de las demás componentes. Entonces la viscosidad dinámica del aire mojado debería ser aproximadamente

$$\frac{1}{\eta} = \frac{\varepsilon}{\eta_d} + \frac{r_s^2}{\eta_v} + 2\left(\frac{2\sqrt{\varepsilon}}{1+\varepsilon}\right)^{0,375} \frac{\sqrt{\varepsilon}r_s}{\sqrt{\eta_d\eta_v}},\qquad(A.158)$$

que es la misma expresión que para aire húmedo, pero evaluada a la saturación.

En el modelo de Tsilingiris tendríamos

$$\eta = \frac{N_d \eta_d}{N_d \Phi_{dd} + N_v \Phi_{dv} + N_\ell \Phi_{d\ell}} + \frac{N_v \eta_v}{N_d \Phi_{vd} + N_v \Phi_{vv} + N_\ell \Phi_{v\ell}} + \frac{N_\ell \eta_\ell}{N_d \Phi_{\ell d} + N_v \Phi_{\ell v} + N_\ell \Phi_{\ell \ell}} \quad (A.159)$$

 \cos

$$\Phi_{\ell\ell} = 1 \tag{A.160}$$

у

$$\Phi_{d\ell} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_d}{\eta_\ell}\right)^{1/2} \left(\frac{M_\ell}{M_d}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_d}{M_\ell}\right)\right]^{1/2}}, \qquad \Phi_{\ell d} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_\ell}{\eta_d}\right)^{1/2} \left(\frac{M_d}{M_\ell}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_\ell}{M_\ell}\right)^{1/2} \left(\frac{M_\ell}{M_\nu}\right)^{1/4}\right]^2}, \qquad \Phi_{\ell v} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_\ell}{\eta_v}\right)^{1/2} \left(\frac{M_v}{M_\ell}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_v}{M_\ell}\right)\right]^{1/2}}, \qquad \Phi_{\ell v} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_\ell}{\eta_v}\right)^{1/2} \left(\frac{M_v}{M_\ell}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_v}{M_\ell}\right)\right]^{1/2}}.$$
(A.161)

La viscosidad del "gas de gotas" debería escalear otra vez como $\eta_\ell = M_\ell^{-1/6}$, y tendríamos $N_\ell \propto M_\ell^{-1}$ ya que la masa de agua líquida es finita. Entonces los términos de acople escalearán como

$$\Phi_{d\ell} \propto M_{\ell}^{2/3}, \quad \Phi_{\ell d} \propto M_{\ell}^{-1/2}, \quad \Phi_{v\ell} \propto M_{\ell}^{2/3}, \quad \Phi_{\ell v} \propto M_{\ell}^{-1/2}, \quad (A.162)$$

y las contribuciones a la viscosidad dinámica de la mezcla como

$$\frac{N_{\ell}\eta_{\ell}}{N_{d}\Phi_{\ell d} + N_{v}\Phi_{\ell v} + N_{\ell}\Phi_{\ell \ell}} \propto M_{\ell}^{-2/3},$$

$$\frac{N_{v}\eta_{v}}{N_{d}\Phi_{v d} + N_{v}\Phi_{v v} + N_{\ell}\Phi_{v \ell}} \simeq \frac{N_{v}\eta_{v}}{N_{d}\Phi_{v d} + N_{v}\Phi_{v v}},$$

$$\frac{N_{d}\eta_{d}}{N_{d}\Phi_{d d} + N_{v}\Phi_{d v} + N_{\ell}\Phi_{d \ell}} \simeq \frac{N_{d}\eta_{d}}{N_{d}\Phi_{d d} + N_{v}\Phi_{d v}}.$$
(A.163)

Vemos entonces que también para el modelo de Tsilingiris, la viscosidad dinámica del aire mojado es muy aproximadamente la misma del aire húmedo saturado, para cualquier $r > r_s$ razonable.

A.10.6. Viscosidad cinemática a través de la curva de saturación

De la relación

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} \tag{A.164}$$

y los resultados precedentes, vemos que en el modelo de Davidson podemos escribir aproximadamente

$$\nu = \frac{R_d + \min(r, r_s) R_v}{1 + r} \frac{T}{p} \frac{1}{\frac{\varepsilon}{\eta_d} + \frac{\min^2(r, r_s)}{\eta_v} + 2\left(\frac{2\sqrt{\varepsilon}}{1 + \varepsilon}\right)^{0.375} \frac{\sqrt{\varepsilon}\min(r, r_s)}{\sqrt{\eta_d \eta_v}}}{(A.165)}$$

donde podríamos usar por ejemplo las aproximaciones $\eta_d = 4,093 \times 10^{-7} T^{2/3}$ y $\eta_v = 1,743 \times 10^{-8} T^{1,1}$. Podemos ver que ν es continuo a través de la curva de saturación, con derivada discontinua.

En el modelo de Tsilingiris tendremos

$$\nu = \frac{R_d + \min(r, r_s) R_v}{1 + r} \frac{T}{p} \left[\frac{\varepsilon \eta_d}{\varepsilon + \min(r, r_s) \Phi_{dv}} + \frac{\min(r, r_s) \eta_v}{\varepsilon \Phi_{vd} + \min(r, r_s)} \right],$$
(A.166)

y de nuevo ν resulta continuo a través de la curva de saturación, con derivada discontinua.

A.10.7. Viscosidad cinemática en función de la concentración

Por breve dad daremos sólo la expresión para condiciones de saturación, que en términos de q en lugar de r resulta

$$\nu = \left[\left(1 - q\right) R_d + q R_v \right] \frac{T}{p} \left[\frac{\left(1 - q_s\right) \varepsilon \eta_d}{\left(1 - q_s\right) \varepsilon + q_s \Phi_{dv}} + \frac{q_s \eta_v}{\left(1 - q_s\right) \varepsilon \Phi_{vd} + q_s} \right].$$
(A.167)

A.10.8. Una aproximación relevante

Las fórmulas de Davidson y de Tsilingiris para viscosidad de las mezclas asumen en su deducción colisiones elásticas entre moléculas de todos los gases en la mezcla, o al menos asumen que las transferencias de momento lineal entre moléculas son estadísticamente las mismas que si las colisiones fueran elásticas. Aunque esto es razonable para aire y vapor, para gotas de agua esta hipótesis debe ser justificada, al menos aproximadamente. Proponemos lo siguiente:

- **Colisión aire-gota:** Recordemos que venimos despreciando la solubilidad del aire en agua. Esto significa que las moléculas de aire que chocan con gotas de agua, o bien rebotan inmediatamente o bien son transitoriamente adsorbidas en la superficie y después liberadas. En ambos casos las moléculas de aire salientes son "emitidas" estadísticamente en condiciones de equilibrio termondinámico, en el sentido de tener una distribución de velocidad de Maxwell–Boltzman a la temperatura de equilibrio. De modo que en este caso la hipótesis está bien justificada en el sentido de la transferencia de momento efectiva.
- **Colisión vapor-gota:** En este caso las moléculas de agua que chocan pueden integrarse a la gota por condensación, pero bajo la hipótesis de que tenemos aire húmedo saturado se debe liberar una cantidad igual de moléculas a la fase gas, otra vez en condiciones de equilibrio termodinámico. Para aire húmedo no saturado, en cambio, ambos procesos no se balancean, pero debemos tener presente que en nuestro modelo termodinámico sólo consideramos la presencia de gotas si estamos por encima de la saturación. En cuanto al crecimiento de gotas por condensación, este proceso está dominado por efectos de tensión superficial, que en general estamos despreciando. De modo que la hipótesis vuelve a estar bien justificada en este caso, o al menos es consistente con las limitaciones de nuestro modelo.
- **Colisión gota-gota:** Excepto por coalescencia de gotas, también en este caso la colisión entre gotitas puede ser inelástica, pero en promedio esto no debería alterar su distribución de velocidades de Maxwell– Boltzman, sino por otra razón que su equilibrio termodinámico con las otras componentes (vapor y aire). La prevalencia de la coalescencia en colisiones entre gotitas puede descartarse sobre la base de la estabilidad relativa de nieblas y nubes que estamos asumiendo implícitamente: si la coalescencia fuera un proceso dominante, o al menos importante, llegaríamos rápidamente a condiciones de precipitación, que están mucho más allá del alcance pretendido por nuestro modelo.

A.10.9. Selección del modelo

Como puede verse las expresiones para la viscosidad resultantes del modelo de Tsilingiris son más "simétricas" y algo más sencillas de calcular que las de Davidson, además de ser presumiblemente más precisas. Pero también resulta conveniente su similitud estructural con las expresiones equivalentes para conductividad térmica, que obtendremos en la Sección siguiente. Por todo ello adoptaremos el modelo de Tsilingiris.

Tabla A.9: Coeficientes de la ecuación (A.171) para K_d .

K_{d0}	$-2,276501 \times 10^{-3}$	K_{d3}	$1,73550646 \times 10^{-10}$
K_{d1}	$1,2598485 \times 10^{-4}$	K_{d4}	$-1,066657 \times 10^{-13}$
K_{d2}	$-1,\!4815235\times10^{-7}$	K_{d5}	$2,\!47663035 imes 10^{-17}$



Figura A.9: Conductividad térmica del aire seco K_d dada por (A.172) y (A.171).

A.11. Conductividad térmica

De nuevo trataremos al aire seco, el vapor de agua y el aire húmedo como gases perfectos. En este caso la teoria cinética dice que

$$K = \frac{15}{4} \frac{R^*}{M} \eta \left[\frac{4}{15} \frac{c_p M}{R^*} + \frac{1}{3} \right] = \eta \left(c_p + \frac{5}{4} \frac{R^*}{M} \right) = \eta \left(c_p + \frac{5}{4} R \right)$$
(A.168)

donde R^* es la contante universal de los gases, M el peso molecular, y $R = R^*/M$ es la constante especifica de los gases; c_p y η son la capacidad calórica específica (a presión constante) y la visosidad dinámica, respectivamente.

A.11.1. Aire seco

En este caso tenemos

$$c_{p,d} = \frac{R_d}{R_d^*} C_{p,d} = \frac{R_d}{R_d^*} \frac{7}{2} R_d^* = \frac{7}{2} R_d = 1005 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}, \qquad (A.169)$$

que insertado en la expresión general de teoria cinética da

$$K_d = \frac{19}{4} \eta_d R_d. \tag{A.170}$$

Sin embargo Tsilingiris [40], de nuevo en base a ajustar numerosos resultados experimentales, propone un modelo polinomial más preciso (debe notarse que su fórmula tiene un factor espúreo 10^{-3} , corregido aquí), dado por

$$K_d = K_{d0} + K_{d1}T + K_{d2}T^2 + K_{d3}T^3 + K_{d4}T^4 + K_{d5}T^5$$
 W m⁻¹ K⁻¹, (A.171)

cuyos coeficientes se listan en la Tabla A.9.

La figura A.9 muestra los valores de esta expresión, que como puede verse varía un 10% en el rango de interés. Por comparación, mostramos en la misma figura la expresión de teoria cinética

$$K_d = \frac{19}{4} \eta_d R_d = 5.580754338 \times 10^{-4} T^{\frac{2}{3}} \mathrm{W m}^{-1} \mathrm{K}^{-1}.$$
 (A.172)

Vemos que esta última difiere en un 4% del modelo de Tsilingiris, que es el que usaremos en adelante.

A.11.2. Vapor de agua

En este caso

$$c_{p,v} = 4R_v = 1870 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$$
(A.173)

y la expresión general de la teoria cinética da

$$K_v = \frac{21}{4} \eta_v R_v. \tag{A.174}$$

Otra vez Tsilingiris provee un modelo más preciso,

$$K_v = \left(K_{v0} + K_{v1}t + K_{v2}t^2\right) \times 10^{-3} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}, \qquad (A.175)$$

cuyos coeficientes listamos en la Tabla A.10. La figura A.10 muestra los valores de esta expresón. Vemos que la conductividad térmica del vapor de agua varía un 10% dentro del rango de interés. Comparando con la expresión de la teoría cinética

$$K_v = \frac{21}{4} \eta_v R_v = 5.464760847 \times 10^{-5} T^{1.1} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$$
(A.176)

vemos de la misma figura que ésta difiere en un 50 %. Este es un error muy grande y probablemente se debe a que la expresión de teoría cinética no tiene en cuenta los fuertes efectos de polaridad del vapor de agua. En adelante usaremos el polinomio de Tsilingiris.

Tabla A.10: Coeficientes de la ecuación (A.175) para K_v .

K_{v0}	$1,761758242 \times 10^{1}$	K_{v2}	$1,663336663 \times 10^{-4}$
K_{v1}	$5,558941059 imes 10^{-2}$		



Figura A.10: Conductividad térmica del vapor de agua K_v dada por (A.176) y (A.175).

A.11.3. Aire húumedo

Como antes, consideraremos el aire húmedo como un gas perfecto, en este caso como una mezcla binaria de dos gases perfectos, aire seco y vapor. Principalmente por motivos de comparación vamos a trabajar con dos modelos de conductividad térmica de mezclas, uno propuesto por Mason y Saxena en 1958 [99], y el otro el adoptado por Tsilingiris [40]. De nuevo la deducción de estos modelos es larga y trabajosa, y sugerimos al lector interesado consultar estos trabajos y las referencias citadas en ellos.

Usando las ecuaciones (20-22) de [99] tenemos

$$K = \frac{K_d}{1 + G_{dv} \frac{N_v}{N_d}} + \frac{K_v}{1 + G_{vd} \frac{N_d}{N_v}}$$
(A.177)

donde, usando su ec.(2)

$$G_{dv} = \frac{1,065}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{M_d}{M_v}}} \left[1 + \sqrt{\frac{\eta_d}{\eta_v}} \left(\frac{M_v}{M_d} \right)^{1/4} \right]^2,$$

$$G_{vd} = \frac{1,065}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{M_v}{M_d}}} \left[1 + \sqrt{\frac{\eta_v}{\eta_d}} \left(\frac{M_d}{M_v} \right)^{1/4} \right]^2.$$
 (A.178)

Como en la derivación de la viscosidad, usaremos $N_d = \varepsilon/(\varepsilon + r)$, $N_v = r/(\varepsilon + r)$ y $M_v = \varepsilon M_d$, y las expresiones de teoría cinética $K_d = 19\eta_d R_d/4$ y $K_v = 21\eta_v R_v/4$, para obtener

$$K = \frac{1}{4} \left(\frac{19\eta_d R_d}{1 + G_{dv} \frac{r}{\varepsilon}} + \frac{21\eta_v R_v}{1 + G_{vd} \frac{\varepsilon}{r}} \right)$$
(A.179)

 con

$$G_{dv} = \frac{1,065}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon^{-1}}} \left[1 + \varepsilon^{1/4} \sqrt{\frac{\eta_d}{\eta_v}} \right]^2,$$

$$G_{vd} = \frac{1,065}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon}} \left[1 + \varepsilon^{-1/4} \sqrt{\frac{\eta_v}{\eta_d}} \right]^2.$$
 (A.180)

El modelo presentado por Tsilingiris [40] es también tomado de [99], pero tras discutir diversas contribuciones se elige para el prefactor en (A.178) el valor unidad, llegando a la expressión

$$K = \frac{N_d K_d}{N_d \Theta_{dd} + N_v \Theta_{dv}} + \frac{N_v K_v}{N_d \Theta_{vd} + N_v \Theta_{vv}}$$
(A.181)

con

$$\Theta_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_i}{\eta_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)\right]^{1/2}}.$$
 (A.182)

Se obtiene entonces

$$\Theta_{dd} = \Theta_{vv} = 1 \tag{A.183}$$

у

$$\Theta_{dv} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_d}{\eta_v}\right)^{1/2} \left(\frac{M_v}{M_d}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_d}{M_v}\right)\right]^{1/2}}, \quad \Theta_{vd} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_v}{\eta_d}\right)^{1/2} \left(\frac{M_d}{M_v}\right)^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{M_v}{M_d}\right)\right]^{1/2}},$$
(A.184)

expresiones completamente equivalentes a las de los coeficientes de mezcla para la viscosidad. Esto tiene la ventaja de reducir el cálculo de los coeficientes de mezcla a una única instancia, común a la viscosidad y la conductividad. Usando nuevamente $N_d = \varepsilon/(\varepsilon + r)$, $N_v = r/(\varepsilon + r)$ y $M_v = \varepsilon M_d$ obtenemos

$$K = \frac{\varepsilon K_d}{\varepsilon + r\Theta_{dv}} + \frac{rK_v}{\varepsilon\Theta_{vd} + r}$$
(A.185)

у

$$\Theta_{dv} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_d}{\eta_v}\right)^{1/2} \varepsilon^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \varepsilon^{-1}\right)\right]^{1/2}}, \quad \Theta_{vd} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_v}{\eta_d}\right)^{1/2} \varepsilon^{-1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \varepsilon\right)\right]^{1/2}}.$$
 (A.186)

A la saturación simplemente tendremos

$$K = \frac{\varepsilon K_d}{\varepsilon + r_s \Theta_{dv}} + \frac{r_s K_v}{\varepsilon \Theta_{vd} + r_s}.$$
 (A.187)

Por los mismos motivos expresados al final de la Sección precedente, trabajaremos en adelante con el modelo de Tsilingiris.

A.11.4. Aire mojado

Dada la similitud con el modelo de viscosidad, podemos seguir el mismo razonamiento para concluir que para aire mojado la conductividad térmica es aproximadamente la misma que la de aire húmedo saturado.

A.11.5. Conductividad térmica a través de la curva de saturación

De las derivaciones precedentes concluimos que Θ_{dv} y Θ_{vd} tienen la misma expresión por abajo y por encima de la saturación, mientras que

$$K = \frac{\varepsilon K_d}{\varepsilon + \min(r, r_s) \Theta_{dv}} + \frac{\min(r, r_s) K_v}{\varepsilon \Theta_{vd} + \min(r, r_s)}, \qquad (A.188)$$

siendo así continua con derivada discontinua.

A.11.6. Conductividad térmica en función de la concentración

Nuevamente, por brevedad sólo presentamos el resultado a saturación, que es

$$K = \frac{(1-q_s)\varepsilon K_d}{(1-q_s)\varepsilon + q_s\Theta_{dv}} + \frac{q_s K_v}{(1-q_s)\varepsilon\Theta_{vd} + q_s}.$$
 (A.189)

Tabla A.11: Coeficientes de la ecuación (A.193) para D.

D_0	$-2,8118 \times 10^{-1}$	D_2	$1,6779 \times 10^{-5}$
D_1	$4,5383 \times 10^{-3}$		

A.11.7. Difusividad térmica

La difusividad térmica está definida como [40]

$$\kappa = \frac{K}{\rho c_p}.\tag{A.190}$$

La expresión que se obtiene de substituir los resultados para K, ρ y c_p es complicada y no demasiado útil, de modo que la omitiremos. Sólo notaremos aquí que κ es evidentemente discontinua a través de la curva de saturación, debido a la discontinuidad de c_p .

A.12. Difusividad de masa

El vapor de agua difunde en aire húmedo de acuerdo al coeficiente de difusividad de masa D. Para este coeficiente podríamos, como siempre, usar simplemente la expresión de la teoria cinética. Sin embargo, Nellis y Klein [41] afirman que hay una diferencia significativa (aproximadamente un 15%) entre estas expresiones y los mejores datos disponibles, los de Bolz y Tuve [43], y dan un ajuste por regresión de estos datos como

$$D = -2,775 \times 10^{-6} + 4,479 \times 10^{-8}T + 1,656 \times 10^{-10}T^2 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (A.191)$$

donde T está en K.

Aunque no lo dicen explícitamente, del ejemplo 9.2.1 de Nellis y Klein [41] es claro que este ajuste es para una presión de 1 atm (esto es, 1,01325 × 10^5 Pa); y también a partir de las expresiones obtenidas de la teoria cinética es claro que D, como toda difusividad, debería depender de la presión como p^{-1} . Por lo tanto adoptaremos el modelo

$$D = \left(-2,775 \times 10^{-6} + 4,479 \times 10^{-8}T + 1,656 \times 10^{-10}T^2\right) \times \frac{1,01325 \times 10^5}{p}$$
(A.192)

 $\operatorname{con} p$ en Pa. Absorbiendo el factor de conversión en los coeficientes, el modelo queda

$$D = (D_0 + D_1 T + D_2 T^2) p^{-1} m^2 s^{-1}, \qquad (A.193)$$

para T en K y p en Pa (para mb, tenemos que multiplicar por 10^{-2}). Los coeficientes se listan en la Tabla A.11.

A.13. Coeficientes en el estado de referencia

Para el modelo hidrodinámico de la Sección 3.2 necesitamos los coeficientes termodinámicos evaluados a una dada presión p y temperatura T (estado de referencia), a la saturación para aquellos continuos a través de la curva de saturación, o justo por debajo (subíndice –) y por encima (subíndice +) de la saturación para aquellos discontinuos. Los listamos aquí como funciones del *mixing ratio* de saturación r_s en el estado de referencia, ya que estas expresiones resultan más simples. Los valores en función de la concentración de saturación q_s pueden obtenerse simplemente substituyendo

$$r_s = \frac{q_s}{1 - q_s}.\tag{A.194}$$

En lo que sigue asumimos que todas las funciones y modelos son evaludos en el estado de referencia, con p en Pa y T en K, y usamos en todas partes unidades MKS.

Expansión térmica:

$$\alpha_{-} = \frac{1}{T}, \qquad \alpha_{+} = \frac{1}{T} \left(1 + \frac{l_v r_s}{R_d T} \right).$$
(A.195)

Expansión másica:

$$\beta_{-} = \frac{1}{\varepsilon + r_s} - \frac{1}{1 + r_s}, \qquad \beta_{+} = -\frac{1}{1 + r_s}.$$
 (A.196)

Calor específico:

$$c_{p-} = \frac{c_{p,d} + r_s c_{p,v}}{1 + r_s}, \qquad c_{p+} = c_{p-} + \frac{\varepsilon + r_s}{1 + r_s} \frac{l_v^2 r_s}{R_d T^2}.$$
 (A.197)

Densidad:

$$\rho = \frac{1+r_s}{R_d + r_s R_v} \frac{p}{T}.$$
(A.198)

Viscosidad cinemática:

$$\nu = \frac{\eta}{\rho}.\tag{A.199}$$

Viscosidad dinámica:

$$\eta = \frac{\varepsilon \eta_d}{\varepsilon + r_s \Phi_{dv}} + \frac{r_s \eta_v}{\varepsilon \Phi_{vd} + r_s}.$$
 (A.200)

Conductividad térmica:

$$K = \frac{\varepsilon K_d}{\varepsilon + r_s \Phi_{dv}} + \frac{r_s K_v}{\varepsilon \Phi_{vd} + r_s}.$$
 (A.201)

Coeficientes de mezcla:

$$\Phi_{dv} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_d}{\eta_v}\right)^{1/2} \varepsilon^{1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \varepsilon^{-1}\right)\right]^{1/2}}, \qquad \Phi_{vd} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_v}{\eta_d}\right)^{1/2} \varepsilon^{-1/4}\right]^2}{\left[8\left(1 + \varepsilon\right)\right]^{1/2}}.$$
(A.202)

Difusividad térmica:

$$\kappa_{-} = \frac{K}{\rho c_{p-}}, \qquad \kappa_{+} = \frac{K}{\rho c_{p+}}.$$
(A.203)

Difusividad de masa:

$$D = (D_0 + D_1 T + D_2 T^2) p^{-1}.$$
 (A.204)

$$D_0 = -2.8118 \times 10^{-1}, \quad D_1 = 4.5383 \times 10^{-3}, \quad D_2 = 1.6779 \times 10^{-5}.$$

A.14. Linealización de la humedad específica de saturación

En el modelo hidrodinámico que desarrollamos en la Sección 3.2, utilizamos una aproximación lineal a la humedad específica de saturación $q_s(T)$ como función de la temperatura, la cual simplifica notablemente tanto las ecuaciones de convección húmeda como el diseño de los algoritmos numéricos para integrarlas. Es sabido que la no linealidad de q_s tiene algunas consecuencias importantes en la atmósfera terrestre [39], pero éstas se manifiestan principalmente en la formación de frentes climáticos, es decir en la dinámica de la mesoescala; y aún así esta aproximación ha sido considerada aceptable en trabajos recientes sobre convección húmeda en la atmósfera [46, 47, 49]. Dada la escala mucho más reducida del interior de un destilador solar, no prevemos que esta aproximación deje de lado caracteríticas fundamentales de su dinámica.

Pese a esto, consideramos deseable que la aproximación lineal que empleemos reproduzca con la mayor fidelidad posible la verdadera dependencia de q_s con T. Sobre el rango de temperaturas de nuestro interés, que es aproximadamente 20°C–60°C, $q_s(T)$ muestra una curvatura notable, como se muestra en la figura A.11. A primera vista esto parece indicar que ninguna aproximación lineal estará exenta de serios errores en el valor de q_s . Sin embargo, al desarrollar el modelo hidrodinámico de convección húmeda en la Sección 3.2 vemos que en una dada situación las temperaturas dentro del destilador estarán limitadas al rango mucho más estrecho $\overline{T} \pm \Delta T/2$ entre las temperaturas de la base y el techo, rango que, como se muestra en la Sección 6.2, en el peor de los casos es menor a los 12°C. Por lo tanto una primera mejora en vista a mitigar los errores de una aproximación lineal, es



Figura A.11: Humedad específica de saturación q_s .

construir en cada caso una aproximación limitada al correspondiente rango de temperaturas.

La linealización usual de una función alrededor de un valor dado de su argumento se limita a desarrollarla en serie de potencias alrededor de ese valor, y truncar al primer orden. Sin embargo en un caso como el presente, en que la curvatura de $q_s(T)$ es monótona, ello hace que los errores (residuos) sean relativamente grandes y del mismo signo (en este caso positivos), siendo nulos sólo para $T = \overline{T}$. Es deseable entonces realizar otra linealización, una que minimice los errores sobre un intervalo dado. Esa es la idea que desarrollaremos a continuación.

Consideremos una función f(x) desarrollada en serie de potencias, por simplicidad digamos alrededor de cero,

$$f(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 + \cdots$$
 (A.205)

donde

$$a = f(0), \quad b = f'(0), \quad c = \frac{1}{2}f''(0), \quad d = \frac{1}{6}f'''(0).$$
 (A.206)

Supongamos que queremos aproximarla por una linealización

$$f_{\rm lin}\left(x\right) = A_{\rm lin} + B_{\rm lin}x\tag{A.207}$$

sobre el intervalo simétrico

$$-\delta \le x \le \delta, \tag{A.208}$$

con A_{lin} y B_{lin} elegidos para minimizar el residuo de cuadrados mínimos

$$R = \int_{-\delta}^{\delta} (f(x) - f_{\text{lin}}(x))^2 dx.$$
 (A.209)

Entonces debemos tener

$$0 = \frac{\partial R}{\partial A_{\text{lin}}} = \int_{-\delta}^{\delta} -2\left(f\left(x\right) - f_{\text{lin}}\left(x\right)\right) dx$$
$$= -4\delta \left[a + \frac{1}{3}c\delta^{2} + \dots - A_{\text{lin}}\right]$$
(A.210)

у

$$0 = \frac{\partial R}{\partial B_{\text{lin}}} = \int_{-\delta}^{\delta} -2x \left(f\left(x\right) - f_{\text{lin}}\left(x\right)\right) dx$$
$$= -4\delta^3 \left[\frac{1}{3}b + \frac{1}{5}d\delta^2 + \dots - \frac{1}{3}B_{\text{lin}}\right], \qquad (A.211)$$

de donde es inmediato que

$$A_{\rm lin} = a + \frac{1}{3}c\delta^2 + \dots = f(0) + \frac{1}{6}f''(0)\delta^2 + \dots$$
 (A.212)

$$B_{\rm lin} = b + \frac{3}{5}d\delta^2 + \dots = f'(0) + \frac{1}{10}f'''(0)\,\delta^2 + \dots \tag{A.213}$$

Este tipo de linealización minimiza entonces los errores en el intervalo $[-\delta, \delta]$ en el sentido de cuadrados mínimos. Podemos ver que si truncamos el desarrollo de f a primer orden, recuperamos la linealización usual, $A_{\text{lin}} = a$ y $B_{\text{lin}} = b$, pero órdenes más altos del desarrollo proveen correcciones a estos coeficientes; en nuestro caso truncaremos a tercer orden. También podemos ver que los mismos resultados se extienden trivialmente a un desarrollo centrado en otro valor, con un itervalo simétrico alrededor del mismo.

Para la humedad relativa de saturación, el desarrollo estará centrado en una temperatura de referencia \bar{T} , y el intervalo será $\bar{T} \pm \Delta T/2$. Escribiendo

$$q_s = \frac{r_s}{1+r_s} = \frac{\varepsilon}{(1-\varepsilon)} \frac{(1-\varepsilon) p_s}{p - (1-\varepsilon) p_s}$$
(A.214)

y definiendo

$$n_s = (1 - \varepsilon)p_s, \qquad m_s = \frac{n_s}{p - n_s}, \qquad q_s = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon}m_s, \qquad (A.215)$$



Figura A.12: Humedad específica de saturación y linealización óptima para $\bar{T} = 54^{\circ}$ C, $\Delta T = 12^{\circ}$ C, p = 1000 mb.

es sencillo obtener la recursión

$$m'_{s} = \frac{n'_{s} (1 + m_{s})}{p - n_{s}},$$

$$m''_{s} = \frac{n''_{s} (1 + m_{s}) + 2n'_{s}m'_{s}}{p - n_{s}},$$

$$m'''_{s} = \frac{n'''_{s} (1 + m_{s}) + 3n''_{s}m'_{s} + 3n'_{s}m''_{s}}{p - n_{s}},$$
(A.216)

donde $n_s^{(i)} = (1 - \varepsilon)p_s^{(i)}$, y de donde las derivadas de q_s se obtienen simplemente multiplicando por $\varepsilon/(1 - \varepsilon)$. Las derivadas de p_s se obtienen simplemente derivando el modelo polinomial (A.3) y evaluando a $T = \overline{T}$. Tendremos así la linealización

$$q_{s,\text{lin}}(T) = \left(q_s(\bar{T}) + \frac{(\Delta T)^2}{24}q_s''(\bar{T})\right) + \left(q_s'(\bar{T}) + \frac{(\Delta T)^2}{40}q_s'''(\bar{T})\right)(T - \bar{T}),$$
(A.217)

óptima sobre el intervalo $\bar{T} \pm \Delta T/2$.

La figura A.12 muestra la humedad específica de saturación para $\overline{T} = 54^{\circ}$ C y $\Delta T = 12^{\circ}$ C, con p = 1000 mb. Este caso es ligeramente peor que el peor de los que encontramos en la aplicación del modelo hidrodinámico.

También muestra la correspondiente linealización óptima (A.217). Vemos que aún en este caso el error máximo apenas llega al 3%, mientras que el error máximo de la linealización usual llega al 6%.

Podríamos obtener también la linealización óptima del mixing ratio de saturación p_s sobre un dado intervalo, pero lo omitiremos ya que no hacemos un uso directo del mismo en el modelo hidrodinámico. Debe además recordarse que la relación entre p_s y q_s es no lineal, por lo que las linealizaciones de una no pueden obtenerse sencillamente de la otra.
Apéndice B

Ecuación de Laplace

En este Apéndice mostraremos cómo obtener analíticamente la solución general de la ecuación de Laplace en un dominio rectangular, discretizada sobre la grilla número de onda. Trataremos solamente dos casos de nuestro interés: el de una celda rectangular con condiciones de contorno (CC) dadas (no-libres) en la base y la tapa, y periódicas (libres) en los lados; y el de una celda cuadrada con CC dadas (no-libres) en los cuatro lados.

B.1. Celda rectangular

Comenzamos buscando una solución general analítica del problema

$$\nabla^2 u = 0, \quad 0 \le x \le L, \quad 0 \le z \le H. \tag{B.1}$$

Notemos primero que el problema

$$\nabla^2 u = 0 \tag{B.2}$$

en un dominio infinito puede resolverse con facilidad por separación de variables: proponiendo

$$u(x,z) = X(x)Z(z)$$
(B.3)

sustituyendo, y dividiendo por XZ, obtenemos

$$\frac{X''}{X} = -\frac{Z''}{Z} = -\lambda^2, \tag{B.4}$$

donde λ es una constante de separación, que puede ser compleja. Para cualquier valor no nulo de λ , entonces, existen soluciones de la forma

$$e^{\pm i\lambda x}e^{\pm\lambda z},$$
 (B.5)

y para $\lambda=0$ tenemos las cuatro soluciones

 $1, \quad x, \quad z, \quad xz.$ (B.6)

La solución general tendrá entonces la forma

$$u(x,z) = \sum_{\lambda} c_{\lambda} e^{-i\lambda x} e^{-\lambda z} + a_{00} + a_{10}x + a_{01}z + a_{11}xz, \qquad (B.7)$$

donde c_{λ} son constantes (posiblemente complejas).

Si las CC laterales son periódicas, es decir pedimos u(L, z) = u(0, z), es claro que debemos tomar $a_{10} = a_{11} = 0$ y $\lambda = 2\pi r/L$ con r entero. Esto reduce la solución a la forma

$$u(x,z) = \sum_{r} c_r e^{-i2\pi r x/L} e^{-2\pi r z/L} + a_{00} + a_{01} z.$$
(B.8)

Tendremos además que ajustar CC aún no especificadas en z = 0 y z = H. Por comodidad futura vamos a recombinar las exponenciales reales en funciones con paridad definida respecto al plano medio horizontal z = H/2, poniendo

$$u(x,z) = \sum_{r} e^{-i2\pi r x/L} \left[a_r \cosh\left(2\pi \frac{r}{L}\left(z - \frac{H}{2}\right)\right) + b_r \sinh\left(2\pi \frac{r}{L}\left(z - \frac{H}{2}\right)\right) \right] + a_{01}\left(z - \frac{H}{2}\right), \quad (B.9)$$

donde hemos reemplazado $a_{01}z$ por una función lineal impar respecto a z = H/2 y hemos absorbido la constante resultante $a_{01}H/2$, y la constante a_{00} , en a_0 .

Aún no hemos definido el rango del índice r. Vamos a hacerlo ahora, al discretizar u(x, z) sobre la grilla coordenada, definiendo

$$u_{nm} = u(x_n, z_m), \qquad n = 0, \dots, N, \qquad m = 0, \dots, M.$$
 (B.10)

Consistentemente, restringimos el rango de r a la correspondiente grilla número de onda (simétrica), poniendo

$$u_{nm} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} e^{-ik_{x,p}x_n} \left(a_p \cosh\left(k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right) + b_p \sinh\left(k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right) + a_{01}\left(z_m - \frac{H}{2}\right). \quad (B.11)$$

Es decir, restringimos r de modo de limitar los números de onda a (la mitad de) la frecuencia de Nyquist.

Ahora vamos a reescribir este campo discretizado en la forma de una transformada discreta de Fourier (DFT) inversa,

$$u_{nm} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{u}_{pq} e^{-ik_{x,p}x_n} e^{-ik_{z,q}z_m},$$
 (B.12)

para lo cual necesitaremos calcular las DFTs

$$\cosh\left(k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right) = \sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{C}_{pq} e^{-ik_{z,q}z_m},\tag{B.13}$$

$$\sinh\left(k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right) = \sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{S}_{pq} e^{-ik_{z,q}z_m}, \quad (B.14)$$

$$\left(z_m - \frac{H}{2}\right) = \sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{L}_{pq} e^{-ik_{z,q}z_m},$$
 (B.15)

que usando las fórmulas de inversión "simétricas" (4.18) y (4.19), podemos reescribir como

$$\tilde{C}_{pq} = \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M} e^{ik_{z,q}z_m} \cosh\left(k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right), \quad (B.16)$$

$$\tilde{S}_{pq} = \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M} e^{ik_{z,q}z_m} \sinh\left(k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right), \quad (B.17)$$

$$\tilde{L}_{pq} = \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M} e^{ik_{z,q}z_m} \left(z_m - \frac{H}{2} \right).$$
(B.18)

Notemos que \tilde{L}_{pq} es independiente del índice p. Debe recordarse, aquí y en adelante, que salvo nota en contrario todos los operadores suma son los operadores "simétricos" definidos por (4.14) y (4.15), y el par transformadaantitransformada es también el "simétrico" definido por (4.16) y (4.17).

En el caso de \tilde{C}_{pq} el argumento de la suma es par en z_m , de modo que en términos de sumas *usuales* tendremos

$$\begin{split} M\tilde{C}_{pq} &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{M-1} e^{ik_{z,q} z_m} \left(e^{k_{x,p} \left(z_m - \frac{H}{2} \right)} + e^{-k_{x,p} \left(z_m - \frac{H}{2} \right)} \right) \\ &= \frac{1}{2} e^{-k_{x,p} \frac{H}{2}} \sum_{m=0}^{M-1} e^{(ik_{z,q} + k_{x,p}) z_m} + \frac{1}{2} e^{k_{x,p} \frac{H}{2}} \sum_{m=0}^{M-1} e^{(ik_{z,q} - k_{x,p}) z_m} \\ &= \frac{1}{2} e^{-k_{x,p} \frac{H}{2}} \sum_{m=0}^{M-1} \left(e^{(ik_{z,q} + k_{x,p}) \frac{H}{M}} \right)^m + \frac{1}{2} e^{k_{x,p} \frac{H}{2}} \sum_{m=0}^{M-1} \left(e^{(ik_{z,q} - k_{x,p}) \frac{H}{M}} \right)^m \\ &= \frac{1}{2} e^{-k_{x,p} \frac{H}{2}} \frac{e^{k_{x,p} H} - 1}{e^{(ik_{z,q} + k_{x,p}) \frac{H}{M}} - 1} + \frac{1}{2} e^{k_{x,p} \frac{H}{2}} \frac{e^{-k_{x,p} H} - 1}{e^{(ik_{z,q} - k_{x,p}) \frac{H}{M}} - 1} \\ &= \sinh \left(k_{x,p} \frac{H}{2} \right) \left(\frac{1}{e^{(ik_{z,q} + k_{x,p}) \frac{H}{M}} - 1} - \frac{1}{e^{(ik_{z,q} - k_{x,p}) \frac{H}{M}} - 1} \right) \\ &= \frac{\sinh \left(k_{x,p} \frac{H}{2} \right) \sinh \left(k_{x,p} \frac{H}{M} \right)}{\cosh \left(k_{x,p} \frac{H}{M} \right) - \cos \left(k_{z,q} \frac{H}{M} \right)}, \end{split}$$
(B.19)

donde hemos usado que $e^{ik_{z,q}H} = 1$ y

$$\frac{1}{e^{ib+a}-1} - \frac{1}{e^{ib-a}-1} = \frac{\sinh a}{\cosh a - \cos b}.$$
 (B.20)

Para el caso particular p = q = 0 tenemos en cambio

$$M\tilde{C}_{00} = \sum_{m=0}^{M-1} e^{ik_{z,0}z_m} \cosh\left(k_{x,0}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right) = \sum_{m=0}^{M-1} 1 = M.$$
(B.21)

Para el caso de \tilde{S}_{pq} el argumento de la suma es impar en z_m , de modo que las contribuciones en ambos extremos de la suma simétrica se cancelan mutuamente; tenemos así, en términos de sumas *usuales*, que

$$M\tilde{S}_{pq} = \sum_{m=1}^{M-1} e^{ik_{z,q}z_m} \sinh\left(k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{M-1} e^{ik_{z,q}z_m} \left(e^{k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)} - e^{-k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)}\right) + \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{2} e^{-k_{x,p}\frac{H}{2}} \sum_{m=0}^{M-1} \left(e^{(ik_{z,q} + k_{x,p})\frac{H}{M}}\right)^m - \frac{1}{2} e^{k_{x,p}\frac{H}{2}} \sum_{m=0}^{M-1} \left(e^{(ik_{z,q} - k_{x,p})\frac{H}{M}}\right)^m$$

$$+ \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right).$$
(B.22)

Procediendo como en el caso anterior,

$$\begin{split} M\tilde{S}_{pq} &= \frac{1}{2}e^{-k_{x,p}\frac{H}{2}}\frac{e^{k_{x,p}H} - 1}{e^{(ik_{z,q} + k_{x,p})\frac{H}{M}} - 1} - \frac{1}{2}e^{k_{x,p}\frac{H}{2}}\frac{e^{-k_{x,p}H} - 1}{e^{(ik_{z,q} - k_{x,p})\frac{H}{M}} - 1} \\ &+ \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right) \\ &= \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right)\left(\frac{1}{e^{(ik_{z,q} + k_{x,p})\frac{H}{M}} - 1} + \frac{1}{e^{(ik_{z,q} - k_{x,p})\frac{H}{M}} - 1} + 1\right) \\ &= -\frac{i\sin\left(k_{z,q}\frac{H}{M}\right)\sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right)}{\cosh\left(k_{x,p}\frac{H}{M}\right) - \cos\left(k_{z,q}\frac{H}{M}\right)}, \end{split}$$
(B.23)

donde como antes usamos que $e^{ik_{z,q}H}=1\ {\rm y}$

$$\frac{1}{e^{ib+a}-1} + \frac{1}{e^{ib-a}-1} + 1 = -\frac{i\sin b}{\cosh a - \cos b}.$$
 (B.24)

Este resultado corresponde al caso $p \neq 0.$ Par
ap=0,como $k_{x,0}=0$ tenemos en cambio

$$MS_{0q} = 0 \tag{B.25}$$

Finalmente, para el caso de \tilde{L}_{pq} el argumento de la suma es nuevamente impar, de modo que en términos de sumas usuales tenemos

$$M\tilde{L}_{pq} = \sum_{m=0}^{M-1} e^{ik_{z,q}z_m} \left(z_m - \frac{H}{2} \right) - \left(-\frac{H}{2} \right)$$

$$= \frac{H}{M} \sum_{m=0}^{M-1} m \left(e^{ik_{z,q}} \frac{H}{M} \right)^m - \frac{H}{2} \sum_{m=0}^{M-1} \left(e^{ik_{z,q}} \frac{H}{M} \right)^m + \frac{H}{2}$$

$$= \frac{H}{e^{ik_{z,q}} \frac{H}{M} - 1} + \frac{H}{2}$$

$$= -i\frac{H}{2} \frac{\sin\left(k_{z,q} \frac{H}{M}\right)}{1 - \cos\left(k_{z,q} \frac{H}{M}\right)}.$$
 (B.26)

donde hemos usado que

$$\sum_{m=0}^{M-1} m a^m = a^M M \frac{1}{a-1} + a \frac{1-a^M}{(a-1)^2}, \qquad \sum_{m=0}^{M-1} a^m = \frac{a^M - 1}{a-1}, \qquad (B.27)$$

y que

$$\frac{1}{e^{ia} - 1} + \frac{1}{2} = -i\frac{1}{2}\frac{\cos a/2}{\sin a/2} = -\frac{i}{2}\frac{\sin a}{1 - \cos a}.$$
 (B.28)

Este resultado corresponde al caso $q \neq 0.$ En el caso q = 0, de nuevo por tener $k_{z,0} = 0,$ tendremos

$$M\tilde{L}_{p0} = 0. \tag{B.29}$$

Resumiendo, hemos mostrado que la solución general del problema (B.1) con CC periódicas en la dirección horizontal, discretizada sobre la grilla coordenada, es

$$u_{nm} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-M/2}^{M/2} e^{-ik_{x,p}x_n} e^{-ik_{z,q}z_m} \left(a_p \tilde{C}_{pq} + b_p \tilde{S}_{pq} + \delta_{p,0} a_{01} \tilde{L}_{pq} \right),$$
(B.30)

 con

$$\tilde{C}_{pq} = \begin{cases} \frac{1}{M} \frac{\sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{M}\right) \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right)}{\cosh\left(k_{x,p}\frac{H}{M}\right) - \cos\left(k_{z,q}\frac{H}{M}\right)}, & (p,q) \neq (0,0), \\ 1, & (p,q) = (0,0), \end{cases}$$
(B.31)

$$\tilde{S}_{pq} = \begin{cases} -\frac{1}{M} \frac{i \sin\left(k_{z,q} \frac{H}{M}\right) \sinh\left(k_{x,p} \frac{H}{2}\right)}{\cosh\left(k_{x,p} \frac{H}{M}\right) - \cos\left(k_{z,q} \frac{H}{M}\right)}, & p \neq 0, \\ 0, & p = 0, \end{cases}$$
(B.32)

$$\tilde{L}_{pq} = \begin{cases} -\frac{1}{M} \frac{i \sin\left(k_{z,q} \frac{H}{M}\right) \frac{H}{2}}{1 - \cos\left(k_{z,q} \frac{H}{M}\right)}, & q \neq 0, \\ 0, & q = 0. \end{cases}$$
(B.33)

Podemos simplificar la notación notando que el término $\delta_{p,0} \tilde{L}_{pq}$ puede ser absorbido en \tilde{S}_{pq} como caso particular para p = 0. La solución discretizada sobre la grilla coordenada queda entonces

$$u_{nm} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-M/2}^{M/2} e^{-ik_{x,p}x_n} e^{-ik_{z,q}z_m} \left(a_p \tilde{C}_{pq} + b_p \tilde{S}_{pq} \right), \qquad (B.34)$$

o equivalentemente, la solución discretizada sobre la grilla número de onda queda

$$\tilde{u}_{pq} = a_p \tilde{C}_{pq} + b_p \tilde{S}_{pq}, \tag{B.35}$$

con

$$\tilde{C}_{pq} = \begin{cases} \frac{1}{M} \frac{\sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{M}\right) \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right)}{\cosh\left(k_{x,p}\frac{H}{M}\right) - \cos\left(k_{z,q}\frac{H}{M}\right)}, & (p,q) \neq (0,0), \\ 1, & (p,q) = (0,0), \end{cases}$$
(B.36)
$$\tilde{S}_{pq} = \begin{cases} -\frac{1}{M} \frac{i \sin\left(k_{z,q}\frac{H}{M}\right) \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right)}{\cosh\left(k_{x,p}\frac{H}{M}\right) - \cos\left(k_{z,q}\frac{H}{M}\right)}, & p \neq 0, \\ -\frac{1}{M} \frac{i \sin\left(k_{z,q}\frac{H}{M}\right)\frac{H}{2}}{1 - \cos\left(k_{z,q}\frac{H}{M}\right)}, & p = 0, q \neq 0, \\ 0, & (p,q) = (0,0). \end{cases}$$
(B.37)

Notemos que \tilde{C}_{pq} y \tilde{S}_{pq} son matrices $(N + 1) \times (M + 1)$ que, para un dado tamaño de grilla, necesitan calcularse sólo una vez.

Veamos ahora cómo podemos ajustar CC en z = 0 y z = H usando estas expresiones. Supongamos primero que debemos ajustar CC de Dirichlet

$$u_{n0} = A_n, \qquad n = 0, \dots, N - 1,$$
 (B.38)

$$u_{nM} = A'_n, \qquad n = 0, \dots, N - 1.$$
 (B.39)

Pero recordando que debemos tener periodicidad en la dirección vertical, vemos que debemos tener $A'_n = A_n$, es decir, la periodicidad impone que las CC sean *periódicas* (en este caso en z), aunque no impone ninguna otra restricción (como ser, homogeneidad). Ambas CC son entonces idénticas, y se reducen a una sola, que usando (B.34) podemos escribir

$$u_{n0} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} e^{-ik_{x,p}x_n} \sum_{q=-M/2}^{M/2} \left(a_p \tilde{C}_{pq} + b_p \tilde{S}_{pq} \right) = \sum_{p=-N/2}^{N/2} e^{-ik_{x,p}x_n} \tilde{A}_p = A_n,$$
(B.40)

donde hemos introducido la DFT unidimensional \tilde{A}_p de la inhomogeneidad A_n . Notando que \tilde{S}_{pq} es impar en el índice q, vemos que

$$\sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{S}_{pq} = 0, \tag{B.41}$$

y usando la unicidad de la DFT obtenemos

$$a_p \sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{C}_{pq} = \tilde{A}_p,$$
 (B.42)

que puede invertirse inmediatamente para obtener

$$a_p = \frac{\tilde{A}_p}{\sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{C}_{pq}}.$$
 (B.43)

Notemos que la CC de Dirichlet sólo ha determinado los coeficientes a_p de (B.34). Supongamos ahora que debemos ajustar CC de Neumann

$$(\partial_z u)_{n0} = B_n, \qquad n = 0, \dots, N-1,$$
 (B.44)

$$(\partial_z u)_{nM} = B'_n, \qquad n = 0, \dots, N-1,$$
 (B.45)

donde $(\partial_z u)_{nm}$ es la discretización de $\partial_z u$ en la grilla coordenada. De nuevo la periodicidad en z impone que $B'_n = B_n$, de modo que ambas CC son idénticas y se reducen a una sola. Recordando que en la discretización de los operadores diferenciales por DFT

$$(\partial_z u)_{nm} \xrightarrow{\text{DFT}} -ik_{z,q}\tilde{u}_{pq},$$
 (B.46)

y usando (B.34), esta CC puede reescribirse

$$(\partial_z u)_{n0} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} e^{-ik_{x,p}x_n} \sum_{q=-M/2}^{M/2} (-ik_{z,q}) \left(a_p \tilde{C}_{pq} + b_p \tilde{S}_{pq} \right)$$
$$= \sum_{p=-N/2}^{N/2} e^{-ik_{x,p}x_n} \tilde{B}_p = B_n, \quad (B.47)$$

donde hemos introducido la DFT unidimensional \tilde{B}_p de la inhomogeneidad B_n . Notando que \tilde{C}_{pq} es par en el índice q mientras que $k_{z,q}$ es impar, vemos que

$$\sum_{q=-M/2}^{M/2} k_{z,q} \tilde{C}_{pq} = 0, \tag{B.48}$$

y usando la unicidad de la DFT obtenemos

$$b_p \sum_{q=-M/2}^{M/2} (-ik_{z,q}) \,\tilde{S}_{pq} = \tilde{B}_p, \tag{B.49}$$

que puede invertirse inmediatamente para obtener

$$b_p = \frac{iB_p}{\sum_{q=-M/2}^{M/2} k_{z,q} \tilde{S}_{pq}}.$$
 (B.50)

Vemos que en este caso la CC de Neumann sólo ha determinado los coeficientes b_p de (B.34).

Notemos que hemos podido ajustar las CC dadas en la grilla coordenada, directamente en la grilla número de onda, aunque esto resulta más conveniente que sorprendente. Más de destacar es el hecho de que la solución (B.34) de (B.1) con CC periódicas en la dirección horizontal, es capaz de ajustar CC de Dirichlet y de Neumann *simultáneas*, esto es CC de Cauchy, sobre z = 0 y z = H a la vez. Ello se debe a que las CC en z = H, lejos de ser independientes de aquellas para z = 0, son exactamente las mismas, y aseguradas unas las otras se verifican automáticamente por la periodicidad en z; de modo que en realidad sólo estamos ajustando CC en z = 0 a la solución de una ecuación diferencial de segundo orden. Si exigimos las CC de Cauchy

$$u_{n0} = A_n, \qquad n = 0, \dots, N - 1,$$
 (B.51)

$$(\partial_z u)_{n0} = B_n, \qquad n = 0, \dots, N-1,$$
 (B.52)

la correspondiente solución en la grilla número de onda se escribirá

$$\tilde{u}_{pq} = \tilde{A}_p \frac{\tilde{C}_{pq}}{\sum_{q'=-M/2}^{M/2} \tilde{C}_{pq'}} + i\tilde{B}_p \frac{\tilde{S}_{pq}}{\sum_{q'=-M/2}^{M/2} k_{z,q'} \tilde{S}_{pq'}}.$$
(B.53)

Notemos que los cocientes en esta expresión son independientes de las CC y pueden, al igual que las matrices \tilde{C}_{pq} y \tilde{S}_{pq} , ser calculados de antemano. Podemos entonces simplificar la notación definiendo las "matrices normalizadas"

$$\tilde{c}_{pq} = \frac{\tilde{C}_{pq}}{\sum_{q'=-M/2}^{M/2} \tilde{C}_{pq'}}, \qquad \tilde{s}_{pq} = \frac{\tilde{S}_{pq}}{\sum_{q'=-M/2}^{M/2} k_{z,q'} \tilde{S}_{pq'}}, \qquad (B.54)$$

y reescribir la solución como

$$\tilde{u}_{pq} = \tilde{A}_p \tilde{c}_{pq} + i \tilde{B}_p \tilde{s}_{pq}. \tag{B.55}$$

Debemos destacar que el cálculo de la solución (B.53) a partir de los coeficientes \tilde{A}_p y \tilde{B}_p es una operación $\mathcal{O}(N)$.

B.2. Celda cuadrada

La solución general analítica del problema

$$\nabla^2 u = 0, \quad 0 \le x \le L, \quad 0 \le z \le L \tag{B.56}$$

tiene de nuevo la forma (B.7) con λ y c_{λ} complejos, pero por claridad es más conveniente en este caso asumir que λ es o bien real o bien imaginario puro, y escribir por separado ambas contribuciones. Tenemos así

$$u(x,z) = \sum_{\lambda} c_{\lambda} e^{-i\lambda x} e^{-\lambda z} + \sum_{\mu} d_{\mu} e^{-\mu x} e^{-i\mu z} + a_{00} + a_{10}x + a_{01}z + a_{11}xz,$$
(B.57)

donde ahora λ y μ son ambos reales, y c_{λ} , d_{μ} y a_{ij} son constantes posiblemente complejas. Como estamos buscando una solución periódica en $0 \le x \le L$, $0 \le z \le L$, restringiremos μ y λ a los valores

$$\lambda = 2\pi \frac{r}{L}, \quad \mu = 2\pi \frac{s}{L} \tag{B.58}$$

 $\operatorname{con} r$ y s enteros, y escribiremos

$$u(x,z) = \sum_{r} c_{r} e^{-i2\pi r x/L} e^{-2\pi r z/L} + \sum_{s} d_{s} e^{-2\pi s x/L} e^{-i2\pi s z/L} + a_{00} + a_{10}x + a_{01}z + a_{11}xz.$$
 (B.59)

Como antes, vamos a recombinar las exponenciales reales y funciones lineales en funciones de paridad definida respecto del plano medio horizontal z = L/2 o vertical x = L/2, según sea el caso. Obtenemos así

$$u(x,z) = \sum_{r \neq 0} e^{-i2\pi r x/L} \left[a_r \cosh\left(2\pi \frac{r}{L} z'\right) + b_r \sinh\left(2\pi \frac{r}{L} z'\right) \right] + \sum_{s \neq 0} e^{-i2\pi s z/L} \left[\bar{a}_s \cosh\left(2\pi \frac{s}{L} x'\right) + \bar{b}_s \sinh\left(2\pi \frac{s}{L} x'\right) \right] + a_{00} + a_{10} x' + a_{01} z' + a_{11} x' z',$$
(B.60)

donde por brevedad hemos definido

$$x' = x - \frac{L}{2}, \qquad z' = z - \frac{L}{2}$$
 (B.61)

y hemos usado que los términos correspondientes a r = 0 y s = 0 son

$$a_0 \cosh(0) + b_0 \sinh(0) = a_0$$
, $\bar{a}_0 \cosh(0) + b_0 \sinh(0) = \bar{a}_0$, (B.62)

que pueden absorberse en a_{00} , para excluir estos valores de las sumas.

Vamos a definir ahora el rango de los índices r y s discretizando u(x, z) sobre la grilla coordenada como

$$u_{nm} = u\left(x_n, z_m\right) \tag{B.63}$$

205

y restringiéndolos consistentemente al escribir

$$u_{nm} = \sum_{\substack{p=-N/2\\p\neq 0}}^{N/2} e^{-ik_p x_n} \left[a_p \cosh\left(k_p z'_m\right) + b_p \sinh\left(k_p z'_m\right) \right] \\ + \sum_{\substack{q=-N/2\\q\neq 0}}^{N/2} e^{-ik_q z_m} \left[\bar{a}_q \cosh\left(k_q x'_n\right) + \bar{b}_q \sinh\left(k_q x'_n\right) \right] \\ + a_{00} + a_{10} x'_n + a_{01} z'_m + a_{11} x'_n z'_m, \tag{B.64}$$

donde hemos definido

$$x'_{n} = x_{n} - \frac{L}{2}, \qquad z'_{m} = z_{m} - \frac{L}{2}.$$
 (B.65)

La reescritura de este campo discretizado en la forma

$$u_{nm} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} \tilde{u}_{pq} e^{-ik_p x_n} e^{-ik_q z_m}$$
(B.66)

requiere el cálculo de las DFTs

$$\cosh\left(k_{p}z'_{m}\right) = \sum_{q=-N/2}^{N/2} C_{pq}e^{-ik_{q}z_{m}}, \quad \sinh\left(k_{p}z'_{m}\right) = \sum_{q=-N/2}^{N/2} S_{pq}e^{-ik_{q}z_{m}}$$
(B.67)

para $p \neq 0$,

$$\cosh(k_q x'_n) = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \bar{C}_{pq} e^{-ik_p x_n}, \quad \sinh(k_q x'_n) = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \bar{S}_{pq} e^{-ik_p x_n}$$
(B.68)

para $q \neq 0, y$

$$1 = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} K_{pq} e^{-ik_p x_n} e^{-ik_q z_m},$$
(B.69)

$$x'_{n}z'_{m} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} Q_{pq}e^{-ik_{p}x_{n}}e^{-ik_{q}z_{m}},$$
 (B.70)

$$x'_{n} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} X_{pq} e^{-ik_{p}x_{n}} e^{-ik_{q}z_{m}}, \qquad (B.71)$$

$$z'_{m} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} Z_{pq} e^{-ik_{p}x_{n}} e^{-ik_{q}z_{m}}.$$
 (B.72)

Los resultados obtenidos en la Sección B.1 pueden adaptarse fácilmente para calcular las DFT (B.67)–(B.72). Las expresiones más sencillas se obtienen para una grilla isotrópica, es decir con $\Delta x = \Delta z$. En ese caso los números de onda satisfacen $k_{x,p} \equiv k_{z,p}$ para todo valor del índice p, y podemos omitir los subíndices x y z. En definitiva, podemos expresar la solución general de (B.56), discretizada en la grilla número de onda, como

$$\tilde{u}_{pq} = a_p C_{pq} + b_p S_{pq} + \bar{a}_q \bar{C}_{pq} + \bar{b}_q \bar{S}_{pq} + a_{00} K_{pq} + a_{10} X_{pq} + a_{01} Z_{pq} + a_{11} Q_{pq} ,$$
(B.73)

 con

$$C_{pq} = \begin{cases} \frac{1}{N} \frac{\sinh\left(k_p \frac{L}{N}\right) \sinh\left(k_p \frac{L}{2}\right)}{\cosh\left(k_p \frac{L}{N}\right) - \cos\left(k_q \frac{L}{N}\right)}, & p \neq 0, \\ 0, & p = 0, \end{cases}$$
(B.74)

$$S_{pq} = \begin{cases} -\frac{i}{N} \frac{\sin\left(k_q \frac{L}{N}\right) \sinh\left(k_p \frac{L}{2}\right)}{\cosh\left(k_p \frac{L}{N}\right) - \cos\left(k_q \frac{L}{N}\right)}, & p \neq 0, \\ 0, & p = 0, \end{cases}$$
(B.75)

$$\bar{C}_{pq} = \begin{cases} \frac{1}{N} \frac{\sinh\left(k_q \frac{L}{N}\right) \sinh\left(k_q \frac{L}{2}\right)}{\cosh\left(k_q \frac{L}{N}\right) - \cos\left(k_p \frac{L}{N}\right)}, & q \neq 0, \\ 0, & q = 0, \end{cases}$$
(B.76)

$$\bar{S}_{pq} = \begin{cases} -\frac{i}{N} \frac{\sin\left(k_p \frac{L}{N}\right) \sinh\left(k_q \frac{L}{2}\right)}{\cosh\left(k_q \frac{L}{N}\right) - \cos\left(k_p \frac{L}{N}\right)}, & q \neq 0, \\ 0, & q = 0, \end{cases}$$
(B.77)

у

$$K_{pq} = \delta_{p,0}\delta_{q,0} , \qquad (B.78)$$

$$X_{pq} = \delta_{q,0} \begin{cases} -\frac{i}{N} \frac{\sin\left(k_p \frac{L}{N}\right) \frac{L}{2}}{1 - \cos\left(k_p \frac{L}{N}\right)}, & p \neq 0, \\ 0, & p = 0, \end{cases}$$
(B.79)

$$Z_{pq} = \delta_{p,0} \begin{cases} -\frac{i}{N} \frac{\sin\left(k_q \frac{L}{N}\right) \frac{L}{2}}{1 - \cos\left(k_q \frac{L}{N}\right)}, & q \neq 0, \\ 0, & q = 0, \end{cases}$$
(B.80)

$$Q_{pq} = \begin{cases} -\frac{1}{N^2} \frac{\sin\left(k_p \frac{L}{N}\right) \frac{L}{2}}{1 - \cos\left(k_p \frac{L}{N}\right)} \frac{\sin\left(k_q \frac{L}{N}\right) \frac{L}{2}}{1 - \cos\left(k_q \frac{L}{N}\right)}, & p \neq 0 \text{ y } q \neq 0, \\ 0, & p = 0 \text{ o } q = 0. \end{cases}$$
(B.81)

Es importante recordar que siempre, en estas expresiones,

$$a_0 = \bar{a}_0 = b_0 = b_0 = 0. \tag{B.82}$$

Notemos también que las matrices \bar{C}_{pq} , \bar{S}_{pq} y X_{pq} son las transpuestas de C_{pq} , S_{pq} y Z_{pq} , respectivamente.

Supongamos ahora que queremos ajustar CC en los cuatro lados de la celda cuadrada. Como antes, estas CC deberán ser periódicas, de modo que las CC en x = 0 y x = L sean idénticas entre sí, y las CC en z = 0 y z = L también. (Esto impone además la condición de que las CC en z = 0 sean periódicas en x y viceversa.) Podremos entonces, como antes, ajustar CC de Cauchy en, digamos, x = 0 y z = 0, que escribiremos en la forma

$$u_{n0} = A_n, \qquad n = 0, \dots, N - 1,$$
 (B.83)

$$(\partial_z u)_{n0} = B_n, \qquad n = 0, \dots, N - 1,$$
 (B.84)

$$u_{0m} = \bar{A}_m, \qquad m = 0, \dots, N - 1,$$
 (B.85)

$$(\partial_x u)_{0m} = \bar{B}_m, \qquad m = 0, \dots, N - 1.$$
 (B.86)

Introduciendo las DFT unidimensionales de estas CC

$$A_n = \sum_{p=-N/2}^{N/2} e^{-ik_p x_n} \tilde{A}_p, \qquad B_n = \sum_{p=-N/2}^{N/2} e^{-ik_p x_n} \tilde{B}_p, \qquad (B.87)$$

$$\bar{A}_m = \sum_{q=-N/2}^{N/2} e^{-ik_q z_m} \tilde{\bar{A}}_q, \qquad \bar{B}_m = \sum_{q=-N/2}^{N/2} e^{-ik_q z_m} \tilde{\bar{B}}_q, \qquad (B.88)$$

y utilizando como en la Sección B.1 la unicidad de la DFT, obtenemos las condiciones

$$a_p \sum_{q=-N/2}^{N/2} C_{pq} + \sum_{q=-N/2}^{N/2} \left(\bar{a}_q \bar{C}_{pq} + \bar{b}_q \bar{S}_{pq} \right) + a_{00} \delta_{p,0} + a_{10} X_{p0} = \tilde{A}_p ,$$
(B.89)

$$b_p \sum_{q=-N/2}^{N/2} k_q S_{pq} + \sum_{q=-N/2}^{N/2} k_q \left(\bar{a}_q \bar{C}_{pq} + \bar{b}_q \bar{S}_{pq} \right) + \left(a_{01} \delta_{p,0} + a_{11} X_{p0} \right) d = i \tilde{B}_p ,$$
(B.90)

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} (a_p C_{pq} + b_p S_{pq}) + \bar{a}_q \sum_{p=-N/2}^{N/2} \bar{C}_{pq} + a_{00} \delta_{q,0} + a_{01} Z_{0q} = \tilde{\bar{A}}_q ,$$
(B.91)

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} k_p \left(a_p C_{pq} + b_p S_{pq} \right) + \bar{b}_q \sum_{p=-N/2}^{N/2} k_p \bar{S}_{pq} + \left(a_{10} \delta_{q,0} + a_{11} Z_{0q} \right) d = i \tilde{B}_q,$$
(B.92)

donde hemos usado las paridades de las matrices respecto a sus índices y las relaciones

$$X_{pq} = X_{p0}\delta_{0,q}, \qquad Z_{pq} = \delta_{p,0}Z_{0q}, \qquad Q_{pq} = X_{p0}Z_{0q}, \qquad (B.93)$$

y hemos definido

$$d = \sum_{p=-N/2}^{N/2} k_p X_{p0} = \sum_{q=-N/2}^{N/2} k_q Z_{0q} .$$
(B.94)

El sistema de ecuaciones (B.89)–(B.92) para los coeficientes a_p , b_p , \bar{a}_q y \bar{b}_q (que son $4 \times (N-1)$ en número, ya que $a_0 = \bar{a}_0 = b_0 = \bar{b}_0 = 0$) más los cuatro coeficientes a_{00} , a_{01} , a_{10} y a_{11} , es un sistema lineal inhomogéneo de dimensión 4N. A diferencia de lo ocurrido en la Sección B.1, en este caso el sistema no es diagonal. Esto no representa en sí un problema, ya que la matriz de coeficientes del sistema es fija, y podríamos calcular su inversa una única vez. La dificultad reside en que la matriz de coeficientes del sistema (B.89)–(B.92) es altamente singular. Pese a ello, experimentos numéricos realizados con versiones de dimensión reducida de este sistema muestran claramente que para la clase de inhomogeneidades \tilde{A}_p , \tilde{B}_p , \tilde{A}_q y \tilde{B}_q encontrada en las simulaciones hidrodinámicas, el sistema es compatible (es decir, el vector de inhomogeneidades no tiene proyección sobre el subespacio nulo de la matriz de coeficientes).

Existen diversas técnicas para la resolución numérica de sistemas de este tipo. En principio lo ideal sería calcular una pseudoinversa [74] de la matriz de coeficientes, ya que la multiplicación del vector de inhomogeneidades por ella sería una operación $\mathcal{O}(\mathcal{N})$, aunque ya no $\mathcal{O}(N)$. Sin embargo nuevos experimentos numéricos mostraron que el espectro de la matriz de coeficientes contiene cantidad de autovalores muy similares, con autovectores casi degenerados. Dado que en las simulaciones llegamos a tener $N \sim 1000$, esta situación origina una gran pérdida de precisión numérica en el cálculo tanto de la pseudoinversa como de su producto con el vector de inhomogeneidades, por lo que este método debió ser descartado.

Decidimos entonces implementar un método de resolución iterativo [60], similar en cierta forma a los métodos de gradiente conjugado [75, 76] (que son relativamente inmunes a estos problemas), pero más directo y adaptado a la estructura particular de nuestro sistema. Reescribiendo el sistema (B.89)– (B.92) en la forma

$$a_p = \frac{\tilde{A}_p}{\sum_a C_{pq}} - \frac{\sum_q \left(\bar{a}_q \bar{C}_{pq} + \bar{b}_q \bar{S}_{pq} \right) + a_{00} \delta_{p,0} + a_{10} X_{p0}}{\sum_a C_{pq}},\tag{B.95}$$

$$b_p = \frac{i\tilde{B}_p}{\sum_q k_q S_{pq}} - \frac{\sum_q k_q \left(\bar{a}_q \bar{C}_{pq} + \bar{b}_q \bar{S}_{pq}\right) + (a_{01}\delta_{p,0} + a_{11}X_{p0}) d}{\sum_q k_q S_{pq}}, \quad (B.96)$$

$$\bar{a}_q = \frac{\bar{A}_q}{\sum_p \bar{C}_{pq}} - \frac{\sum_p \left(a_p C_{pq} + b_p S_{pq}\right) + a_{00} \delta_{q,0} + a_{01} Z_{0q}}{\sum_p \bar{C}_{pq}},\tag{B.97}$$

$$\bar{b}_q = \frac{i\tilde{B}_q}{\sum_p k_p \bar{S}_{pq}} - \frac{\sum_p k_p \left(a_p C_{pq} + b_p S_{pq}\right) + \left(a_{10} \delta_{q,0} + a_{11} Z_{0q}\right) d}{\sum_p k_p \bar{S}_{pq}}, \quad (B.98)$$

q =

donde hemos asumido que $p \neq 0$ en (B.95) y (B.96), y que $q \neq 0$ en (B.97) y (B.98), y comparando con (B.43) y (B.50), vemos que el primer término de los lados derechos corresponde a un caso "desacoplado", en que las CC horizontales (z = 0) y verticales (x = 0) se ajustan por separado, y para cada una se asume periodicidad (libre) en la otra dirección. Físicamente es de esperar que ésta sea una buena aproximación inicial, ya que en una simulación hidrodinámica donde la capa límite tiene un espesor de unos pocos puntos de grilla, el flujo instantáneo por ejemplo cerca de x = 0 no debería ser mayormente influido por el flujo cerca de z = 0 o z = L, salvo a una distancia de las esquinas comparable al espesor de la capa límite. Esta hipótesis ha sido comprobada mediante experimentos numéricos.

Debemos notar que esta aproximación inicial sólo determina valores para los coeficientes a_p , b_p , \bar{a}_q y \bar{b}_q ; en ella los coeficientes a_{00} , a_{01} , a_{10} y a_{11} se asumen nulos. Para calcularlos debemos retornar al sistema original (B.89)– (B.92) y evaluar los casos omitidos, p = 0 y q = 0, obteniendo

$$\sum_{q=-N/2}^{N/2} \left(\bar{a}_q \bar{C}_{0q} + \bar{b}_q \bar{S}_{0q} \right) + a_{00} = \tilde{A}_0 , \qquad (B.99)$$

$$\sum_{q=-N/2}^{N/2} k_q \left(\bar{a}_q \bar{C}_{0q} + \bar{b}_q \bar{S}_{0q} \right) + a_{01} \sum_{q=-N/2}^{N/2} k_q Z_{0q} = i \tilde{B}_0 , \qquad (B.100)$$

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} \left(a_p C_{p0} + b_p S_{p0} \right) + a_{00} = \tilde{\bar{A}}_0 , \qquad (B.101)$$

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} k_p \left(a_p C_{p0} + b_p S_{p0} \right) + a_{10} \sum_{p=-N/2}^{N/2} k_p X_{p0} = i \tilde{\bar{B}}_0, \qquad (B.102)$$

lo que determina a_{00} , a_{01} y a_{10} . Nótese que la primera y tercera ecuaciones determinan *ambas*, de forma independiente, el valor de a_{00} . La consistencia de ambas ecuaciones para las inhomogeneidades que encontramos en las simulaciones hidrodinámicas, ha sido verificada reiteradamente, y es un ejemplo de la consistencia del sistema (B.89)–(B.92). Para determinar a_{11} podemos por ejemplo multiplicar (B.90) por k_p y sumar sobre p, o multiplicar (B.92) por k_q y sumar sobre q, obteniendo

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} k_p \left(b_p S_{pq} + \bar{S}_{pq} \bar{b}_q \right) k_q + a_{11} d^2 = i \sum_{p=-N/2}^{N/2} k_p \tilde{B}_p, \quad (B.103)$$

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} k_p \left(b_p S_{pq} + \bar{S}_{pq} \bar{b}_q \right) k_q + a_{11} d^2 = i \sum_{q=-N/2}^{N/2} k_q \tilde{\bar{B}}_q \,. \tag{B.104}$$

Nuevamente ambas ecuaciones determinan independientemente a_{00} , y la reiterada consistencia entre ambas para las inhomogeneidades encontradas

r

en las simulaciones hidrodinámicas es otro ejemplo de la consistencia del sistema (B.89)-(B.92).

Con la aproximación así obtenida para los 4N coeficientes de (B.89)–(B.92), calculamos el segundo término de los lados derechos de (B.95)–(B.98) y con él una nueva aproximación a a_p , b_p , \bar{a}_q y \bar{b}_q , e iteramos el procedimiento. Los experimentos numéricos realizados muestran que la convergencia es rápida, bastando a lo sumo cinco iteraciones para obtener una solución con un error máximo relativo $\leq 10^{-4}$, más que suficiente para nuestros propósitos. Consistentemente con la interpretación física expuesta, la convergencia es fuertemente no-uniforme, siendo mucho más lenta cerca de las esquinas sobre un número de puntos de grilla consistente con el espesor observado de la capa límite; para puntos alejados de las esquinas el error relativo tras cinco iteraciones llega a ser tan bajo como 10^{-8} . Cada iteración sigue siendo una operación $\mathcal{O}(\mathcal{N})$.

Bibliografía

- I. C. Ramos, Estudio de Sistemas Dinámicos aplicado a la intensificación de transferencia térmica caótica en un destilador. Tesina de Grado para la Licenciatura en Física, Universidad Nacional de Salta (2009).
- [2] S. Esteban, M. Vilte, I. De Paul, & E. Hoyos, Comparación de resultados en destiladores con distintas pendientes: medidas de campo. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 5, 02.37–02.41 (2001).
- [3] M. N. A. Hawlander & K. C. Ng, An experimental study of solar stills. Int. Symposium on Thermal Applications of Solar Energy, Hakone, Japan (1985).
- [4] I. De Paul & D. Hoyos, Nature and fluiddynamic characteristics of the environment inside a basin type solar still. V Latin American and Caribbean Congress on Fluid Mechanics LACAFLUM 2001. Caracas, Venezuela. (2001).
- [5] I. De Paul & J. M. Quintana, Características del funcionamiento no estacionario de un destilador solar. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 6, 02.07–02.12 (2003).
- [6] I. De Paul & J. M. Quintana, Peculiaridades del funcionamiento no estacionario de un destilador solar. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 8, 03.01–03.06 (2004).
- [7] I. De Paul & y L. Saravia, Visualización de flujos aplicada al estudio del movimiento convectivo del aire húmedo en un destilador solar. Memorias del 40. Simposio Internacional sobre recientes avances en Mecánica y Física de Fluidos, Kuz, V., Gratton, R., Ferreri, J. C. (Editores), pp. 129–136, La Plata (1995).
- [8] I. De Paul, Transferencia de energía por convección natural en recintos cerrados empleando modelos a varias escalas. Tesis doctoral. Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta (2000).

- [9] I. De Paul, A new model of a basin-type solar still. Journal of Solar Energy Engineering 124 (3), 311–314 (2002).
- [10] I. De Paul, Coeficiente de transferencia convectiva h en el interior de un destilador tipo batea. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente. 4 (1), 03.27–03.32 (2000).
- [11] I. De Paul, Comparación del comportamiento térmico y producción de destiladores con distinta pendiente en las cubiertas en estado estacionario. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 5, 03.01– 03.06 (2001).
- [12] I. De Paul, Comportamiento de un destilador tipo batea con pendiente alta en las cubiertas. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 5, 03.07–03.12 (2001).
- [13] I. De Paul, Contenido de agua y productividad de un destilador tipo batea a alta temperatura. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 4 (1), 03.21–03.26 (2000).
- [14] I. De Paul, Destilador solar tipo batea de doble cubierta: funcionamiento y predicción de resultados. Energías Renovables y Medio Ambiente 8, 37–46. (2000).
- [15] I. De Paul, M. A. Perales, I. Ramos, J. Quintana, C. González, S. Gündel y B. Ramos, *Carácterísticas caóticas del funcionamiento de un destilador*. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 10, 03.07–03.13. (2006).
- [16] I. De Paul, I. Ramos, G. Araoz Espoz, C. González y G. Aguirre, Análisis de los Exponentes de Lyapunov asociados al funcionamiento de un destilador. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 12, 03.125–03.132 (2008).
- [17] I. De Paul, Análisis de la intensificación caótica de la transferencia térmica convectiva en un destilador. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 11, 03.17–03.23 (2007).
- [18] I. De Paul, Evidence of chaotic heat enhacement in a solar still. Applied Thermal Engineering 29 (8–9), 1840–1845 (2009). http://dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2008.09.006.
- [19] E. M. Del Campo, M. Sen y E. Ramos, Analysis of laminar natural convection in a triangle enclosure. Numerical Heat Transfer 13, 353– 372 (1988).
- [20] E. M. Del Campo, M. Sen y E. Ramos, Natural convection in a semielliptic cavity. Numerical Heat Transfer 12, 101–119 (1987).

- [21] I. De Paul & S. Esteban, Visualización de flujos en un destilador multietapa. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 6 (1), 02.07–02.12 (2002).
- [22] I. De Paul, comunicación personal.
- [23] Boccaletti, S., Gluckman, B. J., Kurths, J., Pecora, L. M., Meucci, R., Yordanov, O. Eds. *Eperimental Chaos*. Proceedings of the 8th. Experimental Chaos Conference, Italy, 2004. AIP Conference Proceedings 742, Melville, New York (2004)
- [24] N. E. Huang, Z. Shen, S. R. Long, M. C. Wu, H. H. Shih, Q. Zheng, N.-C. Yen, C. C. Tung, & H. H. Liu, *The empirical mode decomposition* and the Hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis. Proc. R. Soc. London A **454**, 903–995 (1998).
- [25] N. E. Huang & Z. Wu, A review on Hilbert-Huang transform: Method and its applications to geophysical studies. Reviews of Geophysics 46 (2), RG2006 (2008). DOI: 10.1029/2007RG000228
- [26] M. Dätig & T. Schlurmann, Performance and limitations of the Hilbert-Huang transformation (HHT) with an application to irregular water waves. Ocean Engineering 31, 1783–1834 (2004).
- [27] N. Fauchereau, G. G. S. Pegram, & S. Sinclair, Empirical Mode Decomposition on the sphere: application to the spatial scales of surface temperature variations. Hydrol. Earth Syst. Sci. 12, 933–941 (2008).
- [28] G. G. S. Pegram, M. C. Peel, & T. A. McMahon, Empirical mode decomposition using rational splines: an application to rainfall time series. Proc. R. Soc. A 464, 1483–1501 (2008). doi: 10.1098/rspa.2007.0311
- [29] N. E. Huang, Z. Wu, S. R. Long, K. C. Arnold, X. Chen, & K. Blank, It On instantaneous frequency. Advances in Adaptive Data Analysis 1 (2), 177–229 (2009).
- [30] G. Wang, X. Chen, F. Qiao, Z. Wu, & N. E. Huang, On Intrinsic Mode Functions. Advances in Adaptive Data Analysis 2 (3), 277–293 (2010).
- [31] Z. Wu & N. E. Huang, Ensemble empirical mode decomposition: a noise-assisted data analysis method. Advances in Adaptive Data Analysis 1, 1–41 (2009).
- [32] M. E. Torres, M. A. Colominas, G. Schlotthauer, & P. Flandrin, A complete ensemble empirical mode decomposition with adaptive noise. ICASSP 2011, 4144–4147 (2011). DOI: 10.1109/ICASSP.2011.5947265

- [33] F. Takens, Detecting strange attractors in turbulence. In D. A. Rand and L.-S. Young, Dynamical Systems and Turbulence. Lecture Notes in Mathematics 898, 366-381 Springer-Verlag (1981).
- [34] J. Stark, Delay embeddings for forced systems. I. Deterministic forcing.
 J. Nonlinear Sci. 9, 255–332 (1999).
- [35] H. G. Solari & M. A. Natiello, The topological reconstruction of forced oscillators. Chaos, Solitons, & Fractals 42, 2023–2034 (2009).
- [36] N. E. Huang, X. Chen, M.-T. Lo, & Z. Wu, On Hilbert spectral representation: a true timr-frequency representation for nonlinear and nonstationary data. Advances in Adaptive Data Analysis 3 (1,2), 63– 93 (2011). DOI: 10.1142/S1793536911000659
- [37] A. R. Gifford, The Physical Mechanism of Heat Transfer Augmentation in Stagnating Flows Subject to Freestream Turbulence and Related Studies. Mechanical Engineering Ph. D. Dissertation, Virginia Polytechnic Institute (2008).
- [38] A. C. Nix, T. E. Diller, & W. F. Ng, Experimental Measurements and Modeling of the Effects of Large-Scale Freestream Turbulence on Heat Transfer. ASME J. Turbomachinery 129, 542–550 (2007).
- [39] J. V. Iribarne & W. L. Godson, Atmospheric Thermodynamics, 2nd. ed., Reidel Publishing Co., Dordrecht (1981).
- [40] P. T. Tsilingiris, Thermophysical and transport properties of humid air at temperature range between 0° C and 100° C. Energy Conversion and Management 49, 1098–1110 (2008).
- [41] G. Nellis & S. Klein, *Heat Transfer*. Cambridge University Press (2008).
- [42] G. Nellis & S. Klein, *Heat Transfer*, extended chapter online: www.cambridge.org/us/engineering/author/nellisandklein/downloads /examples/example_9.2-1.pdf
- [43] R. E. Bolz & G. L. Tuve, CRC Handbook of tables for Applied Engineering Science, 2nd. ed. CRC Press Inc. (1976).
- [44] L. D. Landau & E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, 3rd. ed. Pergamon Press, 1966.
- [45] M. C. Cross & P. C. Hohenberg, Pattern formation outside of equilibrium. Rev. Mod. Phys. 65(3), 851–1112 (1993).

- [46] T. Weidauer, Numerical investigations of shallow moist convection. Ph. D. Thesis, Ilmenau University of Technology (2013). urn:nbn:de:gbv:ilm1-2013000050
- [47] T. Weidauer & Jörg Schumacher, Moist turbulent Rayleigh-Bénard convection with Neumann and Dirichlet boundary conditions. Phys. Fluids 24, 076604 (2012); doi: 10.1063/1.4737884
- [48] T. Weidauer, O. Pauluis, & J. Schumacher, Rayleigh-Bénard convection with phase changes in a Galerkin model. Phys. Rev. E 84, 046303 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevE.84.046303
- [49] O. Pauluis & J. Schumacher, Idealized moist Rayleigh-Bénard convection with piecewise linear equation of state. Commun. Math. Sci. 8 (1), 295–319 (2010).
- [50] T. Weidauer, O. Pauluis, & J. Schumacher, Cloud patterns and mixing properties in shallow moist Rayleigh-Bénard convection. New Journal of Physics 12 105002 (2010). doi:10.1088/1367-2630/12/10/105002
- [51] J. Schumacher & O. Pauluis, Buoyancy statistics in moist turbulent Rayleigh-Bénard convection. Journal of Fluid Mechanics 648 (4), 509– 519 (2010) DOI: 10.1017/S0022112010000030
- [52] O. Pauluis, Thermodynamic Consistency of the Anelastic Approximation for a Moist Atmosphere. J. Atmos. Sci. 65, 2719–2729 (2008). doi: http://dx.doi.org/10.1175/2007JAS2475.1
- [53] C. S. Bretherton, A Theory for Nonprecipitating Moist Convection between Two Parallel Plates. PartI: Thermodynamics and "Linear" Solutions. J. Atmos. Sci. 44 (14), 1809–1827 (1987).
- [54] C. S. Bretherton, A Theory for Nonprecipitating Moist Convection between Two Parallel Plates. PartII: Nonlinear Theory and Cloud Field Organization. J. Atmos. Sci. 45 (17), 2391–2415 (1988).
- [55] S. J. Linz & M. Lücke, Non-Oberbeck-Boussinesq effects and barodiffusion in binary mixtures with small thermodiffusion ratio Phys. Rev. A 36, 3505 (1987).
- [56] A. V. Getling, Rayleigh-Bénard Convection: Structures and Dynamics. World Scientific Pub. Co. Singapore (1998).
- [57] P. Wesseling, Principles of Computational Fluid Dynamics. Springer (2001).
- [58] J.H. Ferziger & M. Peric, Computational methods for Fluid Dynamics 3rd. ed. Springer (2013).

- [59] B. Fornberg, A Practical Guide to Pseudospectral Methods. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Cambridge University Press (1999).
- [60] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, & B. P. Flannery, *Numerical Recipes*, 2nded. Cambridge University Press, 1997.
- [61] D. Takahashi, FFTE: A Fast Fourier Transform Package. http://www.ffte.jp/
- [62] S. A. Orszag, On the Elimination of Aliasing in Finite-Difference Schemes by Filtering High-Wavenumber Components. J. Atm. Sci. 28, 1074 (1971).
- [63] G. S. Patterson & Steven A. Orszag, Spectral Calculations of Isotropic Turbulence: Efficient Removal of Aliasing Interactions. Phys. Fluids 14, 2538 (1971). doi: 10.1063/1.1693365
- [64] J. C. Bowman & M. Roberts, Efficient dealiased convolutions without padding. SIAM J. Sci. Comp. 33, 386 (2011).
- [65] T. Y. Hou & R. Li, Computing Nearly Singular Solutions Using Pseudo-Spectral Methods. J. Comp. Phys. 32 (2), 379–397 (2007). doi:10.1016/j.jcp.2007.04.014.
- [66] E. Braverman, M. Israeli, A. Averbuch & L. Vozovoi, A Fast 3D Poisson Solver of Arbitrary Order Accuracy. J. Comp. Phys. 144 (1), 109– 136 (1998). doi:10.1006/jcph.1998.6001
- [67] A. Shiferaw & R. C. Mittal, An Efficient Direct Method to Solve the Three Dimensional Poisson's Equation. Am. J. Comp. Math. 1, 285– 293 (2011).
- [68] Z. Ma, W. C. Chew, & L. Jiang, A novel fast solver for Poisson's equation with Neumann boundary condition. Progress In Electromagnetics Research 136, 195–209 (2013).
- [69] G. Pöplau & U. van Rienen, Multigrid Solvers for Poisson's Equation in Computational Electromagnetics. In Scientific Computing in Electrical Engineering, U. van Rienen, M. Günther, D. Hecht, eds., LNCSE 18, 169–176. Springer–Verlag, Berlin (2001).
- [70] H. Qian, Fast Poisson solvers for thermal analysis. ICCAD 2010, 698– 702. DOI: 10.1109/ICCAD.2010.5654249
- [71] V. Fuka, PoisFFT A Free Parallel Fast Poisson Solver. arXiv:1409.8116 (2014).

- [72] P. García-Risueño, J. Alberdi-Rodriguez, M. J. T. Oliveira, X. Andrade, M. Pippig, J. Muguerza, A. Arruabarrena, & A. Rubio, A survey of the parallel performance and accuracy of Poisson solvers for electronic structure calculations. J. of Comp. Chem. **35** (6), 427–444 (2014). DOI: 10.1002/jcc.23487
- [73] H. von Helmholtz, Über Integrale der hydrodynamischen Gleichungen, welche den Wirbelbewegungen entsprechen. Celles J. 55, 25 (1858).
- [74] A. Ben-Israel & T. N. E. Grenville, *Generalized Inverses*. Springer-Verlag, 2003. ISBN 0-387-00293-6.
- [75] Hazewinkel, Michiel, ed. (2001), Conjugate gradients, method of. Encyclopedia of Mathematics, Springer, ISBN 978-1-55608-010-4
- [76] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd. ed. SIAM Press, 2003.
- S. Dan, P. Pal, & K. Kumar, Low-Prandtl-number Rayleigh-Bénard convection with stress-free boundaries. Eur. Phys. J. B 87:278 (2014).
 DOI: 10.1140/epjb/e2014-50468-6
- [78] O. Osenda, C. B. Briozzo, & M. O. Cáceres, Noise and pattern formation in periodically driven Rayleigh-Bénard convection. Phys. Rev. E 57 (1), 412–427 (1998).
- [79] R. Courant, K.O. Friedrichs, & H. Lewy, Ueber die partiellen Differenzgleichungen der mathematische Physik. Math Ann. 100, 32–74 (1928).
- [80] S. K. Godunov & V. S. Ryaben'kii, The theory of difference schemes, North-Holland (1964).
- [81] U. Trottenberg, C. W. Oosterlee & A. Schüller, *Multigrid*. Academic Press (2001).
- [82] S. Paul, K. Kumar, M. K. Verma, D. Carati, A. K. De, & V. Eswaran, *Chaotic travelling rolls in Rayleigh–Bénard convection*. Pramana J. Phys. 74 (1), 75–82 (2010).
- [83] S. Kenieres & K. Hanjalic, Convective rolls and heat transfer in finite-length Rayleigh-Bénard convection: A twodimensional numerical study. Phys. Rev. E 62(6A) 7987 (2000). http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.62.7987
- [84] J. J. Niemela, L. Skrbek, K. R. Sreenivasan, & R. J. Donnelly, Turbulent convection at very high Rayleigh numbers. Nature 404, 837–840 (2000). doi:10.1038/35009036

- [85] R. Krishnamurti & L. N. Howard, Large-scale flow generation in turbulent convection. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 78 (4), 1981–1985 (1981).
- [86] G. Ahlers, S. Grossmann, & D. Lohse, Heat transfer & large-scale dynamics in turbulent Rayleigh-Bénard convection. Rev. Mod. Phys. 81, 503 (2009). http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.81.503
- [87] E. P. van der Poel, R. Ostilla–Mónico, R. Verzicco, & D. Lohse, Effect of velocity boundary conditions on the heat transfer and flow topology in two-dimensional Rayleigh–Bénard convection. Phys. Rev. E 90, 013017 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevE.90.013017
- [88] Y. A. Çengel, Heat Transfer: A Practical Approach (2nd. ed.) McGraw-Hill (2003).
- [89] J. R. Welty, G. L. Rorrer, & D. G. Foster, Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer, 6th. ed. Wiley, New Jersey (2014).
- [90] http://youtu.be/agqYNDiGjFA Para una versión de alta resolución contactarse con la autora.
- [91] A. N. Kolmogorov, The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. Proceedings of the USSR Academy of Sciences 30, 299–303 (1941). Traducción al inglés: Proc. R. Soc. A 434, 9–13 (1991).
- [92] A. N. Kolmogorov, Dissipation of Energy in the Locally Isotropic Turbulence. Proceedings of the USSR Academy of Sciences 32, 16–18 (1941). Traducción al inglés: Proc. R. Soc. A 434, 15–17 (1991).
- [93] B. H. Burgess, R. K. Scott, & T. G. Shepherd, Kraichnan-Leith-Batchelor similarity theory and two-dimensional inverse cascades. J. Fluid Mech. 767, 467–496 (2015).
- [94] C. V. Tran & J. C. Bowman, On the dual cascade in two-dimensional turbulence. Physica D: Nonlinear Phenomena 176 (3), 242–255 (2003).
- [95] C. V. Tran & J. C. Bowman, Robustness of the inverse cascade in two-dimensional turbulence. Phys. Rev. E, 69 (3), 036303 (2004).
- [96] J. F. Crifo, Inferences Concerning Water Vapour Viscosity and Mean Free Path at Low Temperatures. Astronomy and Astrophysics 223, No. OCT(I), P. 365 (1989).
- [97] T. A. Davidson, A Simple and Accurate Method for Calculating Viscosity of Gaseous Mixtures. Report of Investigations 9456, US Department of Interior - Bureau of Mines (1993).

- [98] J. H. Hildebrand, Viscosity of dilute gases and vapors. Proc. Natl. Acad. Sct. USA 73 (12), 4302–4303 (1976).
- [99] E. A. Mason & S. C. Saxena, Approximate Formula for the Thermal Conductivity of Gas Mixtures. Physics of Fluids (1958-1988) 1, 361 (1958); doi:10.1063/1.1724352