

Figura 2.20: Espacios de reconstrucción (h_i, \bar{h}_i, ϕ) de las IMF 1 a 6 ($i = 1, \dots, 6$ de izquierda a derecha y de arriba a abajo) para la configuración 2.

2.2. REANÁLISIS DE LOS DATOS

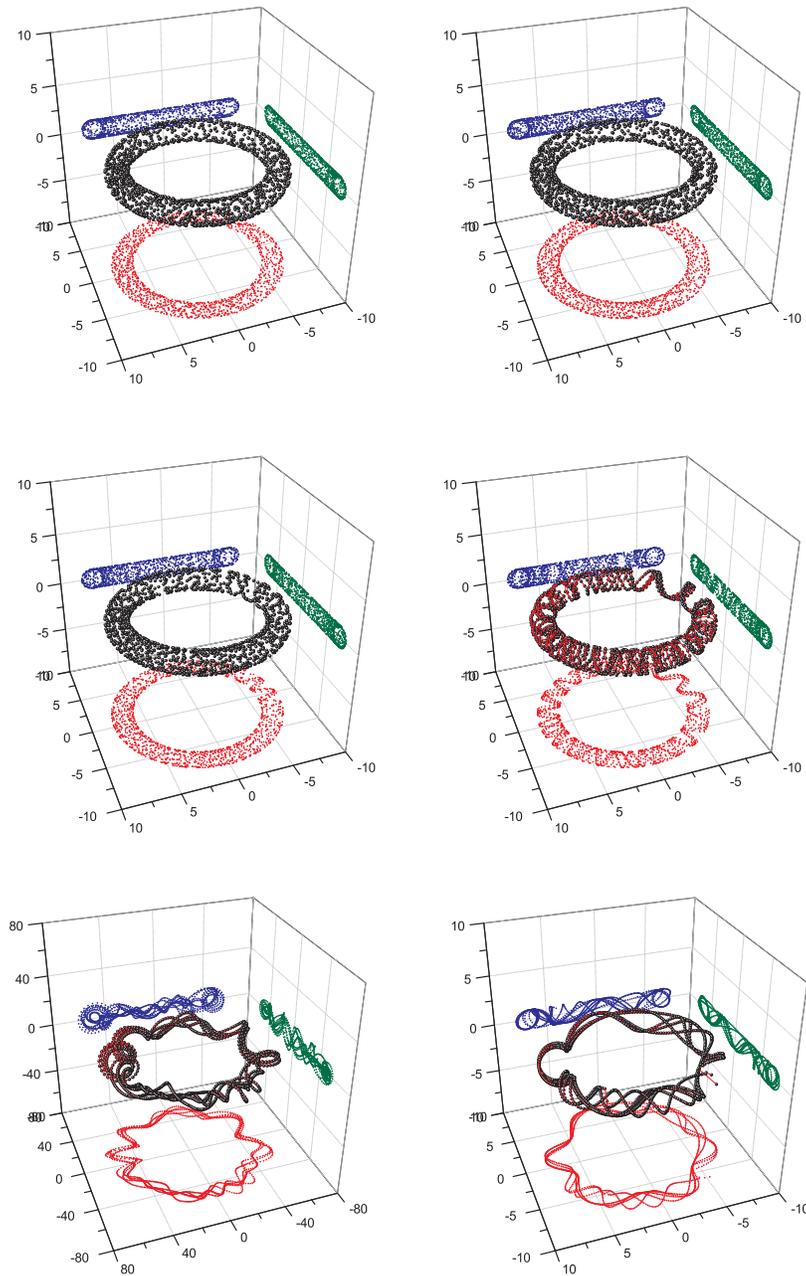


Figura 2.21: Espacios de reconstrucción normalizados (h_i, \bar{h}_i, ϕ) de las IMF 1 a 6 ($i = 1, \dots, 6$ de izquierda a derecha y de arriba a abajo) para la configuración 1.

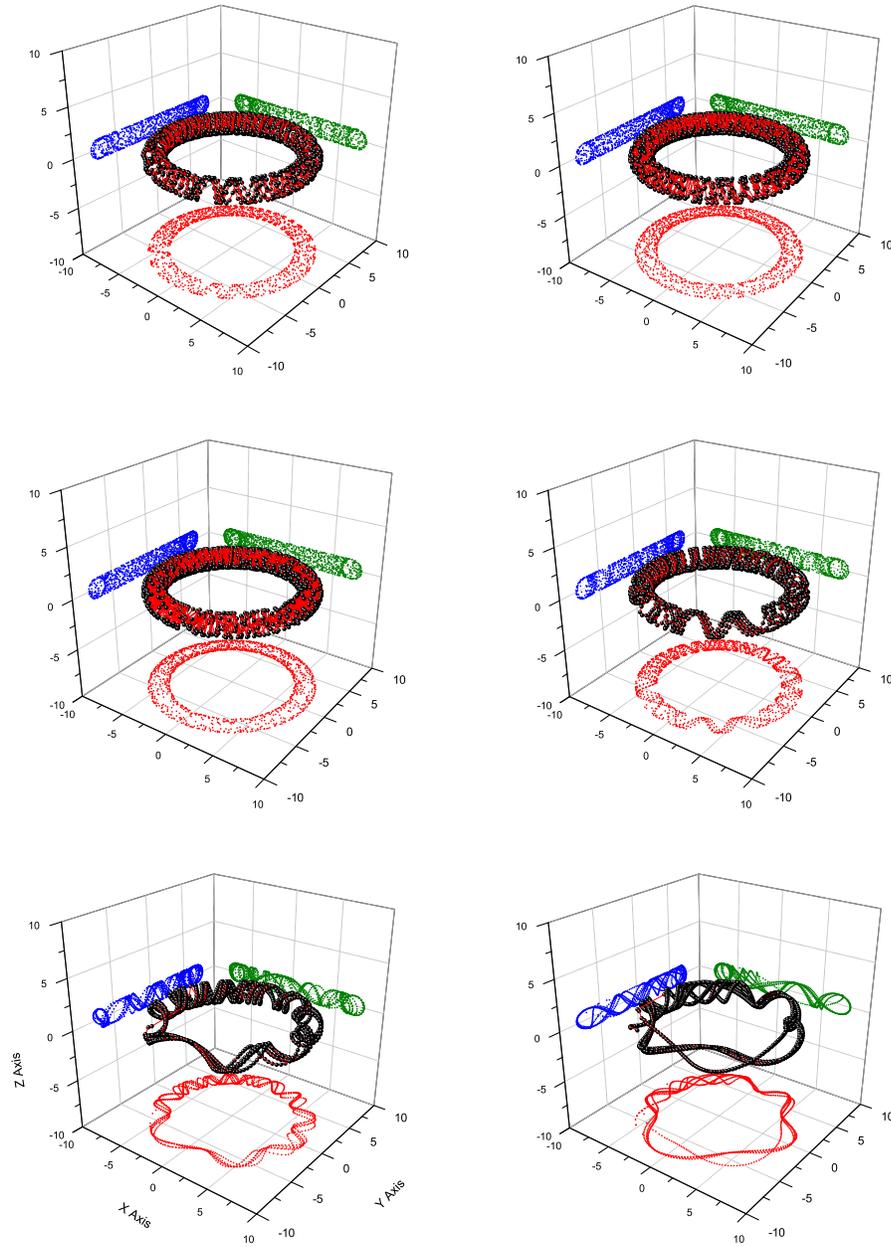


Figura 2.22: Espacios de reconstrucción normalizados (h_i, \bar{h}_i, ϕ) de las IMF 1 a 6 ($i = 1, \dots, 6$ de izquierda a derecha y de arriba a abajo) para la configuración 2.

2.2. REANÁLISIS DE LOS DATOS

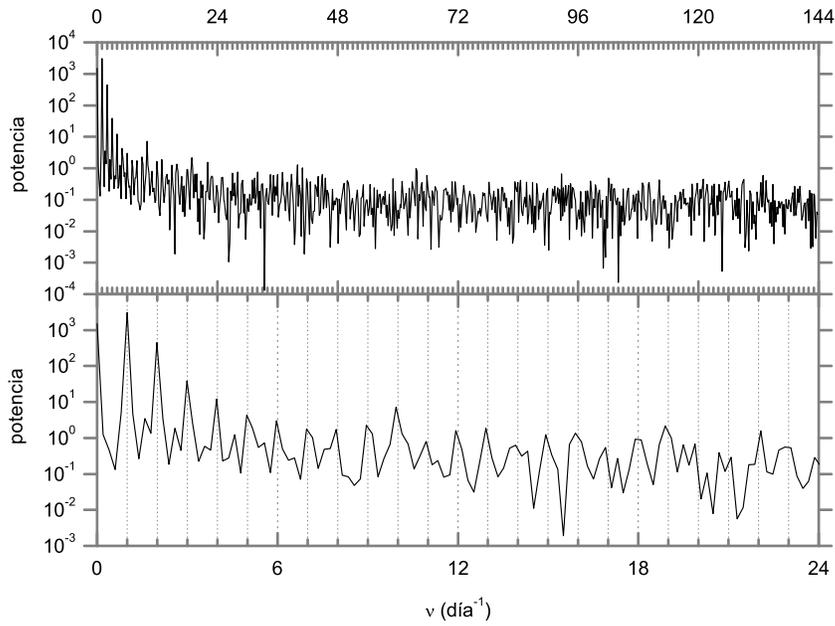


Figura 2.23: Espectro de potencia de Fourier de h en la configuración 1 (arriba), y detalle a bajas frecuencias (abajo.)

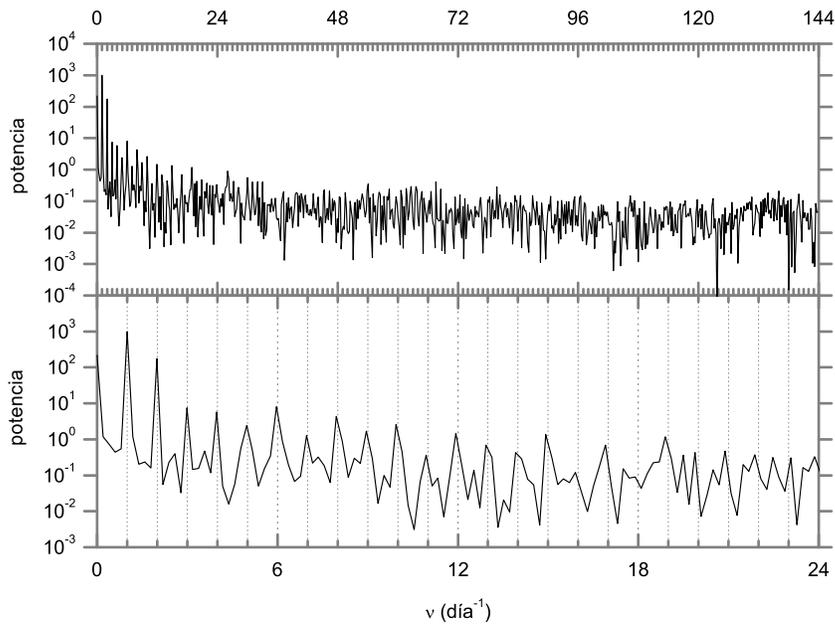


Figura 2.24: Espectro de potencia de Fourier de h en la configuración 2 (arriba), y detalle a bajas frecuencias (abajo.)

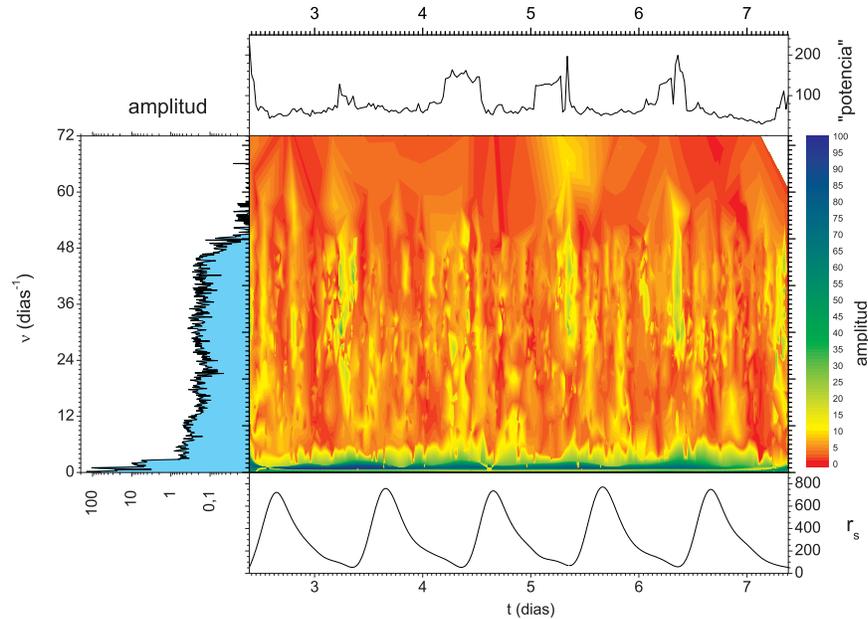


Figura 2.25: Espectro de potencias de Hilbert (HPS, panel central), marginal (HMS, panel izquierdo) e instantáneo (IES, panel superior) para h en la configuración 1. El panel inferior muestra la componente lenta r_s del parámetro de control.

Un problema adicional (aunque relacionado al anterior) del enfoque tradicional (FPS) es que en nuestro caso estamos obteniendo un espectro de h que agrupa comportamientos posiblemente muy diversos, correspondientes a distintas fases del ciclo del forzamiento. Este problema es típico del análisis de series temporales no-estacionarias. Una posible solución es realizar un espectrograma mediante transformadas de Fourier parciales sobre ventanas temporales, pero este resultaría de baja resolución tanto temporal como en frecuencias debido a que el ciclo del forzamiento contiene un número pequeño de muestras (288) y, para obtener cierta resolución temporal sobre él, las ventanas deberían ser de una o dos horas, conteniendo sólo entre 12 y 24 muestras.

Por otro lado, la EMD de h contiene relativamente pocos modos, que son de amplitud y frecuencia variable. Esto sugiere estudiar el espectro de h a través de la HHT [24], que proporciona su espectro de Hilbert [36] (HPS, análogo al espectrograma), su espectro marginal (HMS, análogo al de Fourier) y también un espectro de energía instantáneo (IES), además de ser relativamente insensible a los problemas antes mencionados.

En el panel central de la figura 2.25 (en escala de color) se muestra el espectro de Hilbert de amplitudes de h para la configuración 1. Allí puede

apreciarse la intermitencia de los modos de frecuencias altas, que tienden a excitarse justo antes y justo después de que r_s alcance su máximo (el panel inferior muestra el parámetro de control r_s), así como la complejidad de su estructura en tiempo y frecuencia. Es de destacar la alta resolución conseguida tanto en frecuencias como en tiempo, características de este método. El panel izquierdo muestra el espectro marginal, que presenta características cualitativamente similares al de Fourier, aunque debe notarse que este es un espectro de amplitudes, no de potencia. Una diferencia con el FPS es que el HMS presenta un pico aislado a la frecuencia característica de la dinámica secular, 1 día^{-1} , sin ningún armónico apreciable; otra es que el HMS cae prácticamente a cero por encima de $\approx 50 \text{ día}^{-1}$, lo que hace sospechar que la “cola” larga del FPS por encima de esa frecuencia está compuesta exclusivamente por armónicos de oscilaciones no-lineales con frecuencias características más bajas. Finalmente, en el panel superior se muestra el IES, que representa la amplitud (cuadrática) de h en función del tiempo. Debe tenerse precaución a la hora de interpretar físicamente estos resultados (así como el FPS), ya que debe recordarse que h es un coeficiente de transferencia térmica y no, como es usual en el estudio de series temporales de turbulencia, una velocidad o diferencia de velocidades al cuadrado (energía cinética).

La figura 2.26 muestra el mismo análisis para la serie de h correspondiente a la configuración 2. Se repite el comportamiento intermitente de los modos de frecuencias altas, que se excitan antes y después del máximo de r_s , aunque para este caso las zonas de amplitud grande a frecuencias altas están mucho más localizadas, lo que da la idea de un proceso más ordenado. El espectro marginal (HMS), a la izquierda, muestra de nuevo un pico aislado a la frecuencia característica, y se hace casi cero más allá de $\approx 50 \text{ día}^{-1}$.

A este respecto, cabe preguntarse qué relación tiene el espectro de potencia (sea FPS o HMS) del coeficiente de transferencia térmica h en función de la frecuencia, con otros más usuales en estudio de flujos turbulentos, como por ejemplo el FPS de la velocidad en función del número de onda, para el que en particular existen resultados teóricos bien conocidos como la ley de potencias $-5/3$ de Kolmogorov. Hasta donde sabemos, en este problema existen hasta la fecha pocos avances y muchos interrogantes; sin embargo, trabajos recientes [37] parecen confirmar que las series temporales de h guardan estrecha correlación con las de velocidades del flujo, por lo que sería de esperar que presenten características similares. En particular, si el flujo presenta algo similar a turbulencia “bien desarrollada” (estacionaria y homogénea), el FPS o el HMS de h deberían presentar, en algún rango de frecuencias, un comportamiento de ley de potencias característico. Sin embargo, tanto el FPS como el HMS están mezclando contribuciones espectrales correspondientes a todos los valores del parámetro de control a lo largo de su ciclo diario. Para poner de manifiesto estas leyes de escala, si las hay, deberíamos estudiar espectros “instantáneos” a diversos tiempos,

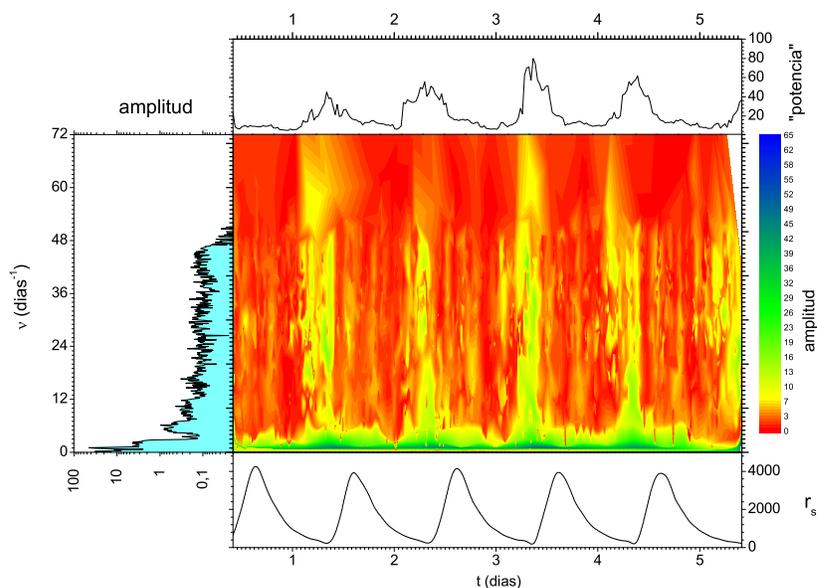


Figura 2.26: Espectro de potencias de Hilbert (HPS, panel central), marginal (HMS, panel izquierdo) e instantáneo (IES, panel superior) para h en la configuración 2. El panel inferior muestra la componente lenta r_s del parámetro de control.

lo cual es difícil y poco preciso con el formalismo de Fourier; sin embargo, usando el HAS podemos obtener estos espectros instantáneos tomando una sección transversal del mismo a tiempo constante, que si bien debe ser de espesor finito para tener una estadística razonable, puede ser mucho más angosta que una vetana móvil de Fourier.

En las figuras 2.27 y 2.28 se muestran algunas de las 120 secciones de 1 hora de espesor tomadas de los HAS de las figuras 2.25 y 2.26, respectivamente. Puede apreciarse que en casi ningún caso el espectro “instantáneo” presenta un comportamiento de ley de potencias, aunque sea aproximado, si bien a algunos tiempos parece hacerlo en ciertos rangos reducidos de frecuencias. Esto sugiere que, si estamos en presencia de turbulencia, ésta no se manifiesta a todo tiempo, es decir no es estacionaria y probablemente tampoco homogénea; en cambio, sí parece existir turbulencia intermitente, caracterizada por “estallidos” de actividad relativamente localizados en tiempo y frecuencia (veáanse los HAS de las figuras 2.25 y 2.26).

A modo de referencia, en las figuras 2.27 y 2.28 se muestran también las líneas correspondientes a dos leyes de escala: las líneas rojas corresponden a $v^{-5/3}$, las azules a $v^{-5/12}$. La primera es la ley de Kolmogorov, y es lo

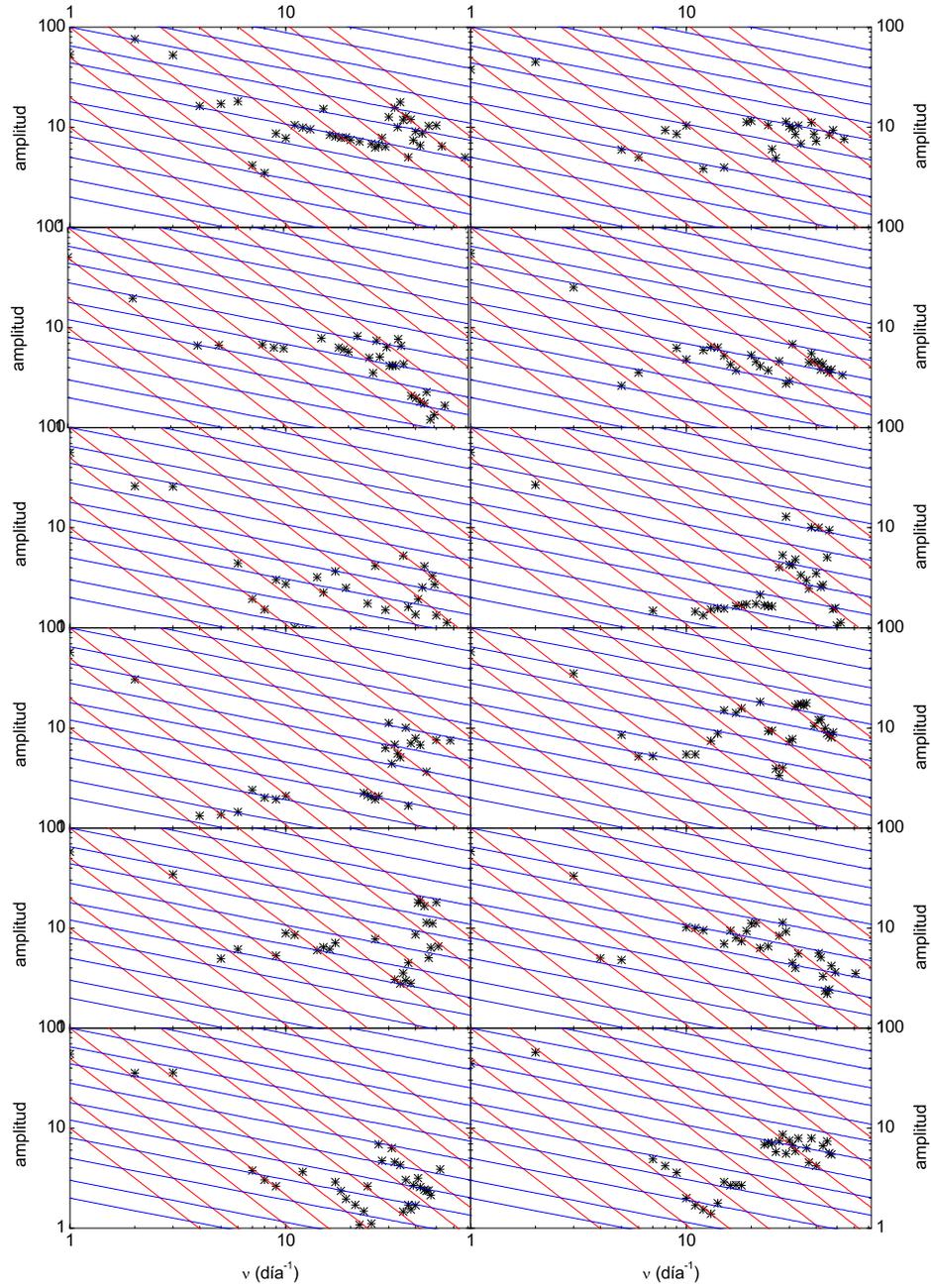


Figura 2.27: Espectros instantáneos de amplitud (IAS) de 1 hora de espesor para h en la configuración 1 (las escalas son logarítmicas en ambos ejes).

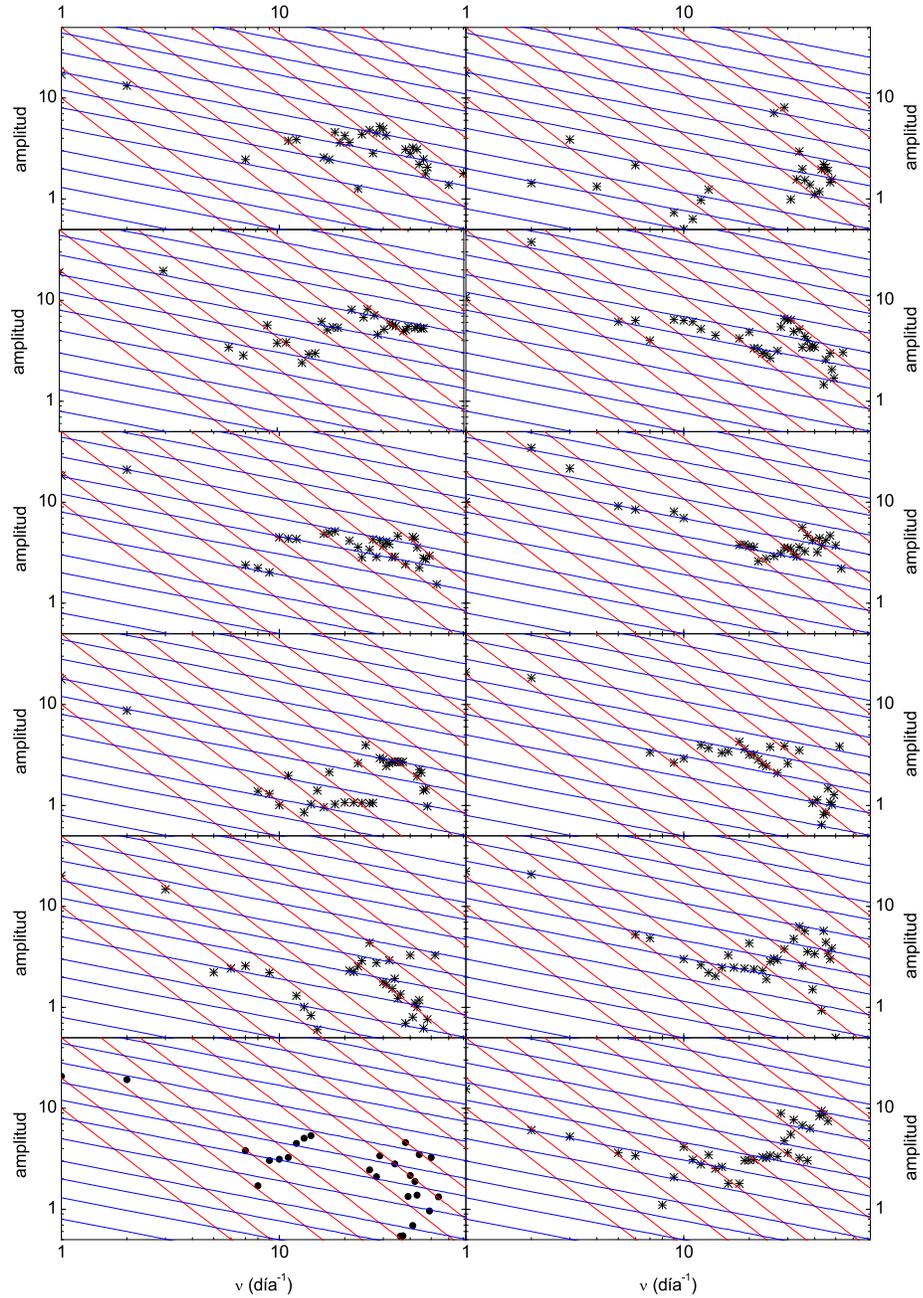


Figura 2.28: Espectros instantáneos de amplitud (IAS) de 1 hora de espesor para h en la configuración 2 (las escalas son logarítmicas en ambos ejes).

que esperaríamos ver si estuviéramos graficando energía (cinética) del flujo vs. número de onda. La segunda es sugerida por trabajos recientes [37, 38] donde se propone que las fluctuaciones de h debidas a un flujo turbulento varían como

$$\Delta h_{\text{Turb}} = \frac{\kappa}{\sqrt{\pi \alpha \frac{\Gamma}{u_{\text{rms}}}}}$$

donde κ es la conductividad térmica del fluido, α su difusividad térmica, Γ es la escala de las estructuras de flujo corriente arriba, y u_{rms} es el valor RMS de las fluctuaciones de velocidad corriente arriba. Si u_{rms} sigue la ley de Kolmogorov, entonces, la ley de potencias para h contendría información sobre la distribución de escalas de las estructuras del flujo, y en particular si éstas son de tamaño aproximadamente constante obtendríamos $\Delta h_{\text{Turb}} \propto \nu^{-5/12}$.

2.3. Recapitulación

Si algo dejan en claro los análisis llevados a cabo en este capítulo, es que el proceso de convección húmeda en el interior del destilador contiene probablemente muchos detalles que el sólo análisis de series temporales de coeficiente de transferencia térmica u otras similares simplemente no puede recuperar, por más que ese análisis se realice con las mejores herramientas disponibles. Los experimentos de visualización de flujo son lo más aproximado a un “mapa” del campo de velocidades, pero aún así la información que proveen es mayormente cualitativa, y no proveen información directa de otras cantidades importantes como la distribución de temperatura o el contenido de agua.

Es indudable que necesitamos una herramienta que provea información directa de los campos de velocidad, temperatura y humedad dentro del destilador con una alta resolución espacial y temporal. Es también evidente que tal planteo es sumamente dificultoso, si no imposible, desde el punto de vista experimental.

Esto nos lleva al eje principal de esta Tesis: desarrollar una simulación numérica de la termohidrodinámica dentro del destilador, lo suficientemente precisa para responder a las cuestiones que han surgido hasta ahora. Ese planteo será desarrollado en los Capítulos subsiguientes.

CAPÍTULO 2. ANÁLISIS DE DATOS EXPERIMENTALES

Capítulo 3

Modelo termohidrodinámico

En este capítulo mostraremos cómo se construyen los modelos termohidrodinámicos para la convección de aire seco y aire húmedo en diversas geometrías. Estos modelos constan de una parte termodinámica, que determina los coeficientes de transporte del fluido en cuestión, y de una parte hidrodinámica, que determina las ecuaciones de transporte de masa, momento, energía y concentración. Los modelos se completan especificando la geometría de la celda donde se desarrolla la convección, y las condiciones de contorno en las fronteras de la misma.

El fluido en el interior de un destilador solar es, como hemos dicho en el Capítulo 2, una mezcla de aire seco, vapor de agua y gotitas de agua líquida. Este fluido es calentado desde abajo por su contacto con una capa de agua líquida caliente, y enfriado desde arriba por su contacto con el techo sólido del destilador. Además, en ambas superficies el fluido puede intercambiar vapor y/o agua con el medio frontera. Tenemos entonces un sistema termohidrodinámico de dos componentes (aire seco y agua) y dos fases (agua líquida y vapor), fuera del equilibrio y con condiciones de contorno (CC) complicadas. Es evidente que será necesario asumir diversas simplificaciones para reducir el problema a uno tratable numéricamente.

Los procesos de deducción de estas simplificaciones, y las hipótesis incorporadas en ellos, son esenciales para la comprensión de los alcances y limitaciones del modelo que construiremos. Sin embargo, en el caso del modelo termodinámico su exposición en detalle sería larga y engorrosa. Por ello hemos preferido dar aquí una exposición sucinta, aunque completa en lo conceptual, dejando los aspectos técnicos y matemáticos detallados del modelo termodinámico para el Apéndice A. En el caso del modelo hidrodinámico, en cambio, la deducción es más breve pero a la vez más interconectada, e incluye multitud de detalles de importancia que creemos necesario llevar a la atención del lector. Por ello el modelo hidrodinámico será desarrollado completamente en este capítulo.

3.1. Modelo termodinámico

En esta sección expondremos expresiones para las funciones y los coeficientes termodinámicos que necesitaremos en las simulaciones numéricas, como ser densidad, capacidad calórica específica, conductividad térmica o viscosidad. Estas expresiones se construyen principalmente en base a dos referencias. La primera es el clásico libro de J. V. Iribarne y W. L. Godson [39]. La segunda es un trabajo bastante reciente de P. T. Tsilingiris [40], que proporciona modelos precisos para una variedad de coeficientes termodinámicos del aire seco, el vapor de agua y el aire húmedo, construidos en base a ajustar una gran cantidad de datos experimentales. Por ese motivo, en general preferiremos usar los modelos de Tsilingiris, siempre que haya uno disponible.

Una hipótesis fundamental a lo largo de toda esta sección será la de que, en una dada parcela (pequeña) de fluido, la mezcla de aire seco, vapor de agua y (si la hay) agua líquida, es *homogénea*; en el caso de agua líquida esto significa que tenemos un fino aerosol de gotitas de agua homogéneamente mezclado con la fase gas. Una segunda hipótesis es que en una dada parcela, las componentes del fluido (aire y agua) se hallan en *equilibrio termodinámico* a la temperatura T y la presión (total) p de la parcela. Una tercera hipótesis es que en una dada parcela, las fases del fluido (vapor de agua y agua líquida) se hallan en *equilibrio de saturación* siempre que haya agua líquida presente. Estas hipótesis se asumen válidas a lo largo de cualquier proceso (infinitesimal) que sufra la parcela, y se hallan bien justificadas en el contexto de la termodinámica atmosférica [39].

Una cuarta hipótesis se basa en la escasa extensión vertical del destilador solar [1] (menos de 1 m en todos los casos) y en su carácter de envoltura abierta, es decir, no cerrada herméticamente respecto a la atmósfera circundante. Si bien las aberturas de la envoltura son pequeñas, de modo que pueden despreciarse en cuanto a las CC de contacto térmico, son lo bastante grandes para permitir una ecualización de presiones casi instantánea con la atmósfera exterior, y la escasa altura de la celda garantiza así que el diferencial de presión a través de la misma es despreciable. Asumiremos entonces que todos los procesos son *isobáricos*, desarrollándose siempre a la presión p de la atmósfera exterior.

Debemos aclarar aquí una cuestión de nomenclatura: si bien en la literatura se aplica el nombre de aire húmedo a cualquier mezcla de aire y agua, sea que contenga sólo vapor o también agua líquida, como veremos en nuestro caso ambas situaciones llevan a valores bastante diferentes de algunos coeficientes termodinámicos. Restringiremos entonces la nomenclatura de *aire húmedo* para designar una mezcla de aire y vapor de agua por debajo de la saturación; para la mezcla de aire, vapor y gotas de agua líquida que encontramos por encima de la saturación, usaremos la designación de *aire mojado*.

Debemos definir también lo que llamaremos el *rango de interés*, que es el rango de temperaturas y presiones que es dable observar en el interior del destilador [1]. En nuestro caso tendremos $20^\circ\text{C} \lesssim T \lesssim 60^\circ\text{C}$ y $600 \text{ mb} \lesssim p \lesssim 1000 \text{ mb}$.

3.1.1. Presión de saturación

La presión de saturación p_s del vapor de agua disuelto en aire seco es, en muy buena aproximación, dependiente sólo de la temperatura [39]. Adoptaremos para ella el modelo polinomial [40]

$$p_s(T) = (E_0 + E_1t + E_2t^2 + E_3t^3 + E_4t^4) \text{ kPa}, \quad (3.1)$$

donde $t = T + 273,15$ está en $^\circ\text{C}$; los valores numéricos de los coeficientes se muestran en la Tabla A.1.

3.1.2. 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 es [40]

$$N_v = f(T, p) \frac{p_v}{p}, \quad (3.2)$$

donde p_v es la presión parcial de vapor, $p = p_d + p_v$ es la presión (total), p_d es la presión parcial de aire seco, y $f(T, p)$ es el *factor de aumento* (*enhancement factor*), debido a la interacción de las moléculas en la mezcla de gases reales. El factor de aumento sigue un modelo complejo (ver Apéndice A.2) cuyo comportamiento se muestra en la figura A.2, donde podemos ver que en el rango de interés podemos tomar $f(T, p) = 1$ con un error $< 0,4\%$, lo que consideramos suficiente para nuestros propósitos.

3.1.3. Mezclas y factor de compresibilidad

La densidad de una mezcla no saturada de aire seco y vapor de agua puede escribirse [40]

$$\rho = \frac{1}{z_m(N_v, T)} \frac{p}{RT} \left(M_d \frac{p - p_v}{p} + M_v \frac{p_v}{p} \right), \quad (3.3)$$

donde M_d y M_v son las masas molares del aire seco y el vapor, respectivamente, y $z_m(N_v, T)$ es el *factor de compresibilidad* debido de nuevo a interacciones moleculares en la mezcla de gases reales. Este factor sigue nuevamente un modelo complejo (ver Apéndice A.3) cuyo comportamiento se muestra en la figura A.3, donde podemos ver que en el rango de interés podemos tomar $z_m(N_v, T) = 1$ con un error $< 0,5\%$, lo que de nuevo consideramos suficiente.

3.1.4. Mixing ratio y humedad específica

La *tasa de mezcla* (*mixing ratio*) r y la *humedad específica* q son dos cantidades adimensionales que cuantifican el contenido de agua de una parcela, y se definen como [39]

$$r = \frac{\text{masa de agua}}{\text{masa de aire seco}}, \quad q = \frac{\text{masa de agua}}{\text{masa de la parcela}}. \quad (3.4)$$

Ambas cantidades están relacionadas por

$$q = \frac{r}{1+r}, \quad r = \frac{q}{1-q}. \quad (3.5)$$

Expresiones detalladas para ambas cantidades por debajo y por encima de la saturación se muestran en las Secciones A.4 y A.5. En lo que sigue generalmente expresaremos los coeficientes termodinámicos en términos del *mixing ratio*, ya que las expresiones resultan más simples. Sin embargo, la cantidad de interés en el modelo hidrodinámico será la humedad específica, ya que representa directamente una concentración (la de la especie agua).

De particular interés para el modelo hidrodinámico es el valor de estas cantidades en condiciones de saturación, que puede expresarse sencillamente en función de la presión de saturación (3.1) como

$$r_s = \frac{\varepsilon p_s}{p - p_s}, \quad q_s = \frac{\varepsilon p_s}{p - (1 - \varepsilon)p_s}, \quad (3.6)$$

donde $\varepsilon = R_d/R_v = 0,62199$ es el cociente entre las constantes específicas de los gases R_d (aire seco) y R_v (vapor).

En cuanto a la nomenclatura, en el caso de r nos referiremos a él por su nombre en inglés, ya que este parece ser el uso aceptado.

3.1.5. Densidad

En el rango de interés, la densidad tanto del aire seco como del vapor de agua pueden aproximarse muy bien por las de gases ideales [39] y, en vista de que tomaremos el factor de compresibilidad igual a la unidad, lo mismo ocurre para su mezcla, es decir para el aire húmedo [40]. Todas ellas pueden entonces deducirse por métodos elementales. Para aire mojado (ver Sección A.6) asumiremos que el volumen de la fase agua resulta despreciable, y lo mismo su contribución a la presión total.

La expresión resultante, válida tanto por debajo como por encima de la saturación, es

$$\rho = \frac{1+r}{R_d + \min(r, r_s)} \frac{p}{R_v T}. \quad (3.7)$$

Notemos que ρ es continua a través de la curva de saturación, con derivada discontinua.

3.1.6. Coeficiente de expansión térmica

Nuevamente, en el rango de interés el aire seco, el vapor de agua y el aire húmedo se comportan muy aproximadamente como gases ideales [39], de modo que sus respectivos coeficientes de expansión térmica son $\alpha = 1/T$.

Para el aire mojado, en cambio, el efecto del cambio de fase del agua y del correspondiente calor latente resulta fundamental. Despreciando efectos como la tensión superficial de las gotas (lo que es correcto si las gotas submicrométricas no son dominantes) y la difusión del aire en agua (ver Sección A.7), y calculando el cambio de volumen total de una parcela al calentarse a presión total constante y manteniendo la condición de saturación (lo que implica evaporación, que absorbe gran parte del calor y produce un gran incremento de volumen), finalmente llegamos a la expresión

$$\alpha = \frac{1}{T} \left[1 + \Theta(r - r_s) \frac{l_v r_s}{R_d T} \right], \quad (3.8)$$

donde Θ es la función escalón de Heaviside.

Esta expresión, válida tanto por debajo como por encima de la saturación, muestra claramente que α es discontinuo a través de la curva de saturación. De hecho, por debajo de ella α es el de un gas perfecto. Debe notarse que la contribución por encima de la discontinuidad es directamente proporcional al calor latente específico de vaporización del agua, l_v .

3.1.7. Coeficiente de expansión másico

El aire seco y el vapor de agua difieren considerablemente en su peso molecular, siendo el del aire casi un 50% mayor [39]. Es de esperar entonces que si la composición de una parcela cambia, su densidad también lo haga.

En la Sección A.8 calculamos el cambio de densidad de una parcela al cambiar el *mixing ratio* o la humedad específica, a presión (total) y temperatura constantes, llegando a la expresión

$$\beta = \frac{1}{1+r} \left(\Theta(r_s - r) \frac{1+r}{\varepsilon+r} - 1 \right) = \frac{1}{1-q} \left(\frac{\Theta(q_s - q)}{\varepsilon + (1-\varepsilon)q} - 1 \right), \quad (3.9)$$

válida tanto por encima como por debajo de la saturación, de donde resulta evidente que β es discontinuo a través de la curva de saturación.

Debe notarse que por debajo de la saturación tenemos $\beta > 0$, debido a que un aumento en la proporción de vapor disminuye la densidad debido a su menor peso molecular, aumentando el volumen específico. Por otro lado, por encima de la saturación tenemos $\beta < 0$, ya que todo aumento en la proporción de agua se convierte en agua *líquida*, que al tener un volumen despreciable aumenta la densidad. El motivo para dar en este caso también la expresión en términos de q es que, siendo ésta directamente la concentración de la especie agua, el resultado resulta más fácil de interpretar físicamente,

en el sentido que podemos pensar a β como la derivada del volumen respecto a la concentración, así como α es su derivada respecto a la temperatura.

3.1.8. Capacidad calórica específica a presión constante

A diferencia de en otras propiedades, el aire seco, y más aún el vapor de agua, se apartan considerablemente del comportamiento de gas ideal en lo que hace a su capacidad calórica específica [39]. En ambos casos usaremos modelos polinomiales [40] para calcularlas en función de la temperatura. La capacidad calórica para el aire húmedo puede calcularse a partir de ellas por métodos elementales (ver Apéndice A.9).

También necesitaremos un modelo para la capacidad calórica específica del agua líquida $c_{p,\ell}$, pero éstos escasean en la literatura. En el Apéndice A.9 construimos un modelo polinomial de cuarto orden por ajuste a datos experimentales confiables [39] dentro del rango de interés.

Para el aire mojado, calculamos el calor absorbido por una parcela al aumentar su temperatura manteniendo constantes su presión (total) y composición (proporción de agua) a lo largo de la curva de saturación. Nuevamente, la presencia de agua líquida resulta de importancia fundamental, ya que gran parte del calor absorbido se emplea en evaporarla. Considerando el calor absorbido por el cambio de fase y por el calentamiento de las diversas componentes, y el trabajo de expansión isobárica de la parcela, llegamos a la expresión

$$c_p = \frac{c_{p,d} + r c_{p,v}}{1 + r} + \frac{\Theta (r - r_s)}{1 + r} \times \left[(r - r_s) (c_{p,\ell} - c_{p,v}) + (\varepsilon + r_s) r_s \left(\frac{l_v^2}{R_d T^2} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{R_d}{r_s} + \frac{l_v}{T} \right) \right) \right], \quad (3.10)$$

donde $c_{p,d}$, $c_{p,v}$ y $c_{p,\ell}$ son las capacidades calóricas específicas del aire seco, el vapor y el agua líquida, respectivamente, y l_v es el calor latente específico de vaporización del agua. Resulta inmediato de esta expresión que c_p es discontinuo a través de la curva de saturación.

Como beneficio adicional del modelo polinomial desarrollado para $c_{p,\ell}$, y usando la relación $dl_v/dT = c_{p,v} - c_{p,\ell}$, obtenemos un modelo polinomial para l_v (ver el final del Apéndice A.9).

3.1.9. Viscosidad cinemática y dinámica

A diferencia de los coeficientes termodinámicos ya calculados, en el caso de la viscosidad dinámica su expresión para mezclas de gases no puede obtenerse simplemente por argumentos termodinámicos (macroscópicos) a partir de las viscosidades de los gases puros. La apelación a argumentos y resultados de la teoría cinética resulta insoslayable en este caso, debido a la

influencia de detalles microscópicos como las secciones eficaces de colisión, los caminos libres medios y la polaridad de las moléculas. De hecho, estos aspectos tienen tanta influencia que ni siquiera para gases puros los resultados de la teoría cinética elemental son confiables, particularmente para el vapor de agua. Por ello se debe recurrir a modelos semiempíricos que incluyen el ajuste a datos experimentales.

Para el aire seco y el vapor de agua disponemos de buenos modelos polinomiales [40] de la viscosidad dinámica η . A partir de ellos la viscosidad dinámica del aire húmedo puede calcularse mediante un modelo de mezclas que incluye efectos de interacción entre las componentes (ver Apéndice A.10).

No hemos encontrado en la literatura modelos que tomen en cuenta la presencia de gotitas de agua líquida y sus consecuencias para la viscosidad del aire. Teniendo en cuenta que estamos asumiendo que las gotas submicrométricas no son dominantes (para despreciar efectos de tensión superficial) y que las gotas mayores a unos cientos de micrones son escasas (pues nuestro modelo no intenta incluir precipitación), en el Apéndice A.10 desarrollamos un modelo bastante elemental, donde consideramos a las gotas como “moléculas” muy grandes y masivas de una tercera especie gaseosa. Estimando los coeficientes de mezcla mediante argumentos de escala, y usando argumentos de teoría cinética para descartar posibles efectos de colisiones inelásticas entre las tres especies sobre la distribución de velocidades, concluimos provisionalmente que la contribución de las gotas a la viscosidad dinámica de la fase gas debería ser despreciable.

Llegamos así a la expresión

$$\eta = \frac{R_d + \min(r, r_s) R_v}{1 + r} T \left[\frac{\varepsilon \eta_d}{\varepsilon + \min(r, r_s) \Phi_{dv}} + \frac{\min(r, r_s) \eta_v}{\varepsilon \Phi_{vd} + \min(r, r_s)} \right], \quad (3.11)$$

donde η_d y η_v son las viscosidades dinámicas del aire seco y el vapor de agua, respectivamente, y

$$\Phi_{dv} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_d}{\eta_v} \right)^{1/2} \varepsilon^{1/4} \right]^2}{[8(1 + \varepsilon^{-1})]^{1/2}}, \quad \Phi_{vd} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_v}{\eta_d} \right)^{1/2} \varepsilon^{-1/4} \right]^2}{[8(1 + \varepsilon)]^{1/2}} \quad (3.12)$$

son los coeficientes de mezcla. De allí la viscosidad cinemática ν puede obtenerse simplemente como

$$\nu = \frac{\eta}{\rho}. \quad (3.13)$$

Podemos observar que tanto η como ν son continuas a través de la curva de saturación, con derivada discontinua.

3.1.10. Conductividad y difusividad térmica

Al igual que en el caso de la viscosidad cinemática, y por los mismos motivos, la conductividad térmica de una mezcla de gases no puede obtenerse simplemente por argumentos termodinámicos a partir de las conductividades de los gases puros.

Para los gases puros nuevamente disponemos de buenos modelos polinomiales [40] para su conductividad térmica K . A partir de ellos la conductividad del aire húmedo se construye mediante un modelo de mezcla similar al de la viscosidad (ver Apéndice A.11).

Para aire mojado, los mismos argumentos de escala y de teoría cinética que usamos para la viscosidad, nos permiten concluir provisoriamente que la presencia de gotitas de agua líquida debería tener una influencia despreciable sobre la conductividad. Obtenemos así la expresión

$$K = \frac{\varepsilon K_d}{\varepsilon + \text{mín}(r, r_s) \Phi_{dv}} + \frac{\text{mín}(r, r_s) K_v}{\varepsilon \Phi_{vd} + \text{mín}(r, r_s)}, \quad (3.14)$$

donde K_d y K_v son las conductividades térmicas del aire seco y del vapor de agua, respectivamente, y Φ_{dv} y Φ_{vd} son los mismos coeficientes de mezcla (3.12) que para la viscosidad. De esta expresión podemos calcular la difusividad térmica como

$$\kappa = \frac{K}{\rho c_p}. \quad (3.15)$$

Podemos ver que en este caso la conductividad térmica es continua a través de la curva de saturación, con derivada discontinua; sin embargo κ resulta discontinua debido a la discontinuidad de c_p .

3.1.11. Difusividad de masa

El último de los coeficientes termodinámicos que necesitaremos es el de difusividad de masa D , que describe la difusión del vapor de agua en aire. En el Apéndice A.12 mostramos un modelo polinomial en la temperatura [41, 42] basado en el ajuste a los mejores datos disponibles [43] a una presión de 1 atm, y lo extendemos trivialmente añadiendo la dependencia de la presión predicha por la teoría cinética para difusividades, esto es, inversa con la presión.

3.2. Modelo hidrodinámico

En esta sección deduciremos el sistema de ecuaciones hidrodinámicas que usaremos para describir la mezcla de aire, vapor y gotas de agua que llena el destilador. La deducción se hará para una geometría genérica, de modo de poder aplicarla posteriormente a celdas de diversas formas (rectangular, cuadrada y triangular). La deducción también se hará de forma que las

ecuaciones para convección “seca” (es decir, sin vapor ni gotas) puedan ser recuperadas con facilidad.

El punto de partida son las ecuaciones generales de transporte de masa, momento, energía y concentración tal como son deducidas en el conocido libro de mecánica de fluidos de Landau y Lifshitz [44], cuyas definiciones, hipótesis e incluso notación adoptaremos, y al que nos referiremos muchas veces simplemente como Landau. Guiándonos por la misma referencia, procederemos a continuación a realizar la serie de simplificaciones conocidas como la aproximación de Boussinesq, para obtener las ecuaciones de Oberbeck–Boussinesq. En cuanto al tratamiento de las ecuaciones de Oberbeck–Boussinesq (OB) en presencia de un campo gravitatorio uniforme y un forzamiento térmico constante, y en particular su adimensionalización, nos guiaremos por el trabajo fundamental de M. C. Cross y P. C. Hohenberg [45], al que nos referiremos a menudo simplemente como Cross y Hohenberg. Sin embargo debemos notar que este último comete varios errores en la deducción de las ecuaciones OB, los cuales notaremos (y corregiremos) en lo que sigue.

La idea general es llegar a un sistema de ecuaciones lo más sencillo posible que, pese a ello, capture las características fundamentales de la convección húmeda, en particular los efectos presumiblemente importantes de la transición de fase líquido-vapor del agua. Este objetivo, y el proceso seguido para alcanzarlo, está inspirado en trabajos recientes en esa dirección [46, 47, 48, 49, 50, 51, 52] que llamaron nuestra atención sobre esa posibilidad, y que retoman una antigua idea de C. S. Bretherton [53, 54]. Sin embargo debemos decir que el sistema de ecuaciones que alcanzaremos finalmente presentará pocas pero significativas diferencias con el que se utiliza en dichos trabajos. Las causas y consecuencias de las mismas serán discutidas más adelante.

En la parte final de esta sección particularizaremos el sistema de ecuaciones obtenido para dos geometrías de nuestro interés: una celda de Rayleigh–Bénard rectangular, y una celda triangular que corresponde a la geometría del destilador en la configuración 2 del Capítulo 2. En ambos casos también particularizaremos las ecuaciones al caso de convección seca, considerablemente más sencillo. Debemos adelantar que, salvo el caso más complejo de convección húmeda en una celda triangular, los demás casos sólo tienen la intención de actuar como instancias de prueba para diferentes secciones del código numérico que implementaremos en el Capítulo 4.

3.2.1. Transporte de materia

Comenzamos con la ecuación que describe el transporte de materia (o ecuación de continuidad) en su forma más general, que tomamos de Landau [44] ec. (1.2), p. 2,

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.16)$$

donde ∂_t es notación abreviada para la derivada (parcial) respecto al tiempo, ρ es la densidad del fluido y \mathbf{u} su velocidad. Esta ecuación puede reescribirse como

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.17)$$

Para un fluido incompresible ρ es constante por definición, de modo que

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \rho = 0 \quad (3.18)$$

y la ecuación de continuidad se reduce a

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.19)$$

3.2.2. Transporte de momento

De acuerdo a Landau [44] ec. (15.5), p. 48, la forma más general de esta ecuación para un fluido en un campo gravitatorio uniforme es

$$\rho (\partial_t + u_k \partial_k) u_i = -\partial_i P + \partial_k [\eta (\partial_k u_i + \partial_i u_k - \frac{2}{3} \delta_{ik} \partial_j u_j)] + \partial_i (\zeta \partial_j u_j) - \rho g_i, \quad (3.20)$$

donde u_i son las componentes Cartesianas de la velocidad, ∂_i es la derivada (parcial) respecto a la i -ésima coordenada, y adoptamos la convención de suma sobre índices repetidos. Aquí η y ζ son los coeficientes de viscosidad, P es la presión y \mathbf{g} es (menos) la aceleración gravitatoria, que consideraremos uniforme pero generalizaremos a una orientación arbitraria,

$$\mathbf{g} = g_i \mathbf{e}_i, \quad (3.21)$$

de modo de permitirnos elegir libremente la orientación del sistema de coordenadas. Nótese que la ecuación correspondiente (8.1a), p. 962 de Cross y Hohenberg [45] enuncia incorrectamente el lado izquierdo de (3.20) como $(\partial_t + u_k \partial_k) (\rho u_i)$; esta forma es correcta sólo si el fluido es incompresible.

Si los coeficientes de difusión cambian poco sobre la extensión del fluido, sea porque su dependencia con la temperatura y la presión es débil, o bien porque estas últimas cambian poco, pueden ser extraídos de las derivadas, y la ecuación se reduce a la ec. (15.6) de Landau [44],

$$\rho (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + (\zeta + \frac{1}{3} \eta) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) - \rho \mathbf{g}. \quad (3.22)$$

Si además el fluido es incompresible, tendremos simplemente

$$\rho (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \eta \nabla^2 \mathbf{u} - \rho \mathbf{g}. \quad (3.23)$$

3.2.3. Transporte de calor

Según Landau [44] ec. (49.5), p. 185, la forma más general de esta ecuación es

$$\rho T (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) s = \nabla \cdot (K \nabla T) + \eta \partial_k u_i (\partial_k u_i + \partial_i u_k - \frac{2}{3} \delta_{ik} \partial_j u_j) + \zeta (\nabla \cdot \mathbf{u})^2, \quad (3.24)$$

donde T es la temperatura del fluido, K es su conductividad térmica y s es su entropía específica.

Si el fluido es incompresible esta ecuación se reduce a [44] ec. (50.1), p. 188,

$$\rho c_p (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla \cdot (K \nabla T) + \eta \partial_k u_i (\partial_k u_i + \partial_i u_k - \frac{2}{3} \delta_{ik} \partial_j u_j), \quad (3.25)$$

donde c_p es la capacidad calórica específica a presión constante del fluido.

Una simplificación adicional resulta si las velocidades son pequeñas comparadas con la del sonido (régimen subsónico extremo) y si además la conductividad térmica varía poco sobre la extensión del fluido, llevando a [44] ec. (50.2), p. 189,

$$\rho c_p (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) T = K \nabla^2 T + \eta (\partial_k u_i + \partial_i u_k)^2. \quad (3.26)$$

Nótese que la correspondiente ec. (8.1b) de Cross y Hohenberg [45] es incorrecta en tres sentidos: en primer lugar, enuncia el lado izquierdo como una ecuación para T en lugar de s , sin haber requerido primero la condición de incompresibilidad; en segundo lugar, enuncia el lado izquierdo como $(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) (C_p T)$, con un coeficiente C_p dentro de la derivada material; y en tercer lugar, afirma que este coeficiente es la capacidad calórica *específica* del fluido, cuando en realidad $C_p = \rho c_p$.

3.2.4. Transporte de concentración

Nuestro fluido consiste en una mezcla de aire seco y agua (vapor y gotitas líquidas) con una concentración

$$q = \frac{\rho_w}{\rho}, \quad (3.27)$$

donde ρ_w es la densidad (total) de agua y $\rho = \rho_d + \rho_w$ es la densidad total de la mezcla. Considerando este fluido como una mezcla binaria tenemos [44] ec. (57.3), p. 220,

$$\rho (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) q = -\nabla \cdot \mathbf{i}, \quad (3.28)$$

donde \mathbf{i} es la densidad de flujo difusivo. De acuerdo a [44] ecs. (58.11–12), p. 224, y despreciando los posibles términos de difusión cruzada entre calor y concentración en base a los argumentos en [55], obtenemos

$$\mathbf{i} = -\rho D \nabla q, \quad (3.29)$$

donde D es el coeficiente de difusión másico (o de masa). Consistentemente se asume [44] que la difusión de la concentración tampoco introduce términos difusivos cruzados en la ecuación de transporte de calor. Con esto la ecuación de transporte de concentración se escribe

$$\rho (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) q = \nabla \cdot (\rho D \nabla q). \quad (3.30)$$

Nuevamente, si la densidad y el coeficiente de difusión cambian poco sobre la extensión del fluido, pueden ser extraídos fuera de las derivadas, y obtenemos la expresión simplificada

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) q = D \nabla^2 q. \quad (3.31)$$

3.2.5. El sistema de ecuaciones

Es conveniente coleccionar, para referencia futura, las formas generales de las ecuaciones de transporte. Obtenemos así el sistema

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \rho = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.32)$$

$$\rho (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot \sigma - \rho \mathbf{g}, \quad (3.33)$$

$$\rho T (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) s = \nabla \cdot (K \nabla T), \quad (3.34)$$

$$\rho (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) q = \nabla \cdot (\rho D \nabla q), \quad (3.35)$$

donde

$$\sigma_{ij} = \eta \left[\partial_i u_j + \partial_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k u_k \right] + \zeta \delta_{ij} \partial_k u_k, \quad (3.36)$$

$$(\nabla \cdot \sigma)_i = \partial_k \left[\eta (\partial_k u_i + \partial_i u_k - \frac{2}{3} \delta_{ik} \partial_j u_j) \right] + \partial_i (\zeta \partial_j u_j). \quad (3.37)$$

Nótese que todos los coeficientes en los lados izquierdos de estas ecuaciones ocurren *fuera* de las derivadas materiales, en contraste con las expresiones en [45]. Debe notarse también que, pese a su supuesto carácter general, estas ecuaciones ya incorporan ciertas aproximaciones, ya que estamos despreciando el calor producido por la disipación viscosa, los posibles términos difusivos cruzados entre calor y concentración, y las fluctuaciones térmicas de los diversos campos.

3.2.6. La aproximación de Boussinesq

Si todos los parámetros cambian poco sobre la extensión del fluido, y éste se asume incompresible, las ecuaciones (3.32–3.35) se simplifican notablemente, y el sistema adopta la forma

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.38)$$

$$\rho (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \eta \nabla^2 \mathbf{u} - \rho \mathbf{g}, \quad (3.39)$$

$$\rho c_p (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) T = K \nabla^2 T, \quad (3.40)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) q = D \nabla^2 q. \quad (3.41)$$

3.2. MODELO HIDRODINÁMICO

En este sistema las variables (termo)dinámicas son la densidad ρ , la velocidad \mathbf{u} , la temperatura T , la presión P y la concentración de agua q . Los parámetros son la viscosidad de corte o dinámica η , la capacidad calorífica específica a presión constante c_p , la conductividad térmica K , el coeficiente de difusión másica D y la aceleración gravitacional \mathbf{g} . Para tener un sistema de ecuaciones cerrado deberíamos además adjuntar la dependencia de η , c_p , K y D con T , ρ y q , y una ecuación de estado por ejemplo en la forma $P = P(T, \rho, q)$. Y, por supuesto, para resolver ese sistema deberemos especificar condiciones iniciales (CI) y condiciones de contorno (CC) adecuadas para todos los campos.

Vamos a asumir ahora que P , T y q están cerca, en todo punto y a todo tiempo, de ciertos valores fijos de referencia \bar{P} , \bar{T} y \bar{q} , y escribiremos

$$\begin{aligned} P &= \bar{P} + P', \\ T &= \bar{T} + T', \\ q &= \bar{q} + q'. \end{aligned} \tag{3.42}$$

Los valores de los parámetros se tomarán como fijos en aquellos correspondientes a \bar{P} , \bar{T} y \bar{q} . Asumiremos además una dependencia lineal de la densidad con la temperatura y la composición

$$\rho = \bar{\rho} [1 - \alpha T' - \beta q'] \tag{3.43}$$

alrededor del valor de referencia $\bar{\rho} = \rho(\bar{T}, \bar{q})$, introduciendo los coeficientes de expansión térmica α y másica β , que consistentemente asumiremos constantes y fijos en sus valores para \bar{P} , \bar{T} y \bar{q} . Incluso esta dependencia de la densidad será descartada en todos los términos excepto en el término de flotación (*buoyancy*) $-\rho\mathbf{g}$.

Con todas estas consideraciones las ecuaciones (3.38–3.41) quedan

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \tag{3.44}$$

$$\bar{\rho}(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P' + \bar{\eta} \nabla^2 \mathbf{u} + \bar{\rho} \alpha T' \mathbf{g} + \bar{\rho} \beta q' \mathbf{g}, \tag{3.45}$$

$$\bar{\rho} \bar{c}_p (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) T' = \bar{K} \nabla^2 T', \tag{3.46}$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) q' = \bar{D} \nabla^2 q', \tag{3.47}$$

donde el término constante $-\bar{\rho}\mathbf{g}$ en la segunda ecuación ha sido absorbido en el gradiente de la presión ∇P . Nótese que esto puede ser hecho independientemente de la orientación del campo gravitacional, siempre que éste sea uniforme. Por conveniencia en lo que sigue definiremos la intensidad gravitacional g y el vector unidad “vertical” \mathbf{e}_g por

$$\mathbf{g} = g\mathbf{e}_g. \tag{3.48}$$

Definiendo la difusividad viscosa (o viscosidad cinemática) $\nu = \bar{\eta}/\bar{\rho}$ y la difusividad térmica $\kappa = \bar{K}/(\bar{\rho}\bar{c}_p)$, y descartando las barras en \bar{D} y $\bar{\rho}$ por

simplicidad, llegamos a

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.49)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla (P'/\rho) + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \alpha g T' \mathbf{e}_g + \beta g q' \mathbf{e}_g, \quad (3.50)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) T' = \kappa \nabla^2 T', \quad (3.51)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) q' = D \nabla^2 q'. \quad (3.52)$$

Estas son las ecuaciones de Oberbeck–Boussinesq “mojadas” (WOB, por *Wet Oberbeck–Boussinesq*) dimensionales, para una geometría aún no especificada.

3.2.7. Perfiles de referencia

Vamos a investigar ahora la existencia y propiedades de las soluciones de las ecuaciones WOB dimensionales (3.49–3.52) correspondientes a velocidad nula y temperatura, presión y concentración independientes del tiempo. Debemos resolver entonces

$$0 = -\nabla (P'/\rho) + g \alpha T' \mathbf{e}_g + g \beta q' \mathbf{e}_g, \quad (3.53)$$

$$0 = \kappa \nabla^2 T', \quad (3.54)$$

$$0 = D \nabla^2 q'. \quad (3.55)$$

Vamos a buscar soluciones en el interior de una celda de forma no especificada, pero para la cual se puede definir una “altura” H y, si es necesario, una “anchura” L .

Comenzaremos resolviendo la ecuación de Laplace (3.54) para T' . Asumiremos que las CC son del tipo de “contacto térmico perfecto”, es decir, la temperatura está especificada en la frontera. Vamos a asumir además que en todos los puntos de la frontera la temperatura T se halla entre una dada temperatura “caliente” T_h y otra dada temperatura “fría” $T_c < T_h$. Como temperatura de referencia tomaremos

$$\bar{T} = \frac{T_h + T_c}{2} = T_c + \frac{\Delta T}{2}, \quad (3.56)$$

y definiremos la diferencia de temperaturas

$$\Delta T = T_h - T_c. \quad (3.57)$$

Ninguna información adicional acerca de las CC para T' será asumida por ahora. La solución de la ecuación de Laplace puede entonces escribirse como

$$T'_0(x, z) = \tau(x, z) \Delta T \quad (3.58)$$

o

$$T_0(x, z) = \bar{T} + \tau(x, z) \Delta T, \quad (3.59)$$

donde $\tau(x, z)$ es la solución adimensional de la misma ecuación de Laplace sobre la misma celda pero con las CC reescaladas de modo que caigan entre $-\frac{1}{2}$ (“fría”) y $\frac{1}{2}$ (“caliente”). Por ahora no especificaremos en más detalle esta solución. Nuestro perfil de referencia de temperatura será entonces (3.59).

Ahora resolveremos la ecuación de Laplace (3.55) para q' . Asumiremos que las CC son del tipo de “pared húmeda” es decir, el contenido de agua de una parcela de aire en contacto con una pared se iguala al valor de saturación a la temperatura de la pared. Asumimos entonces aire húmedo saturado en la frontera, es decir

$$q(x, z) = q_s(T_0(x, z)) \quad (3.60)$$

sobre la frontera. Definiendo

$$\bar{q} = q_s(\bar{T}) \quad (3.61)$$

y recordando que por (3.42)

$$q = \bar{q} + q', \quad (3.62)$$

vemos que

$$q'(x, z) = q(x, z) - \bar{q} = q_s(\bar{T} + \tau(x, z) \Delta T) - q_s(\bar{T}) \quad (3.63)$$

sobre la frontera. Asumiendo además que la concentración de saturación de vapor de agua es *lineal en la temperatura* (ver Apéndice A.14), en la forma

$$q_s(T) = q_s(\bar{T}) + (T - \bar{T}) \frac{\Delta q}{\Delta T}, \quad (3.64)$$

tenemos por (3.63)

$$\begin{aligned} q'(x, z) &= q_s(\bar{T}) + (\bar{T} + \tau(x, z) \Delta T - \bar{T}) \frac{\Delta q}{\Delta T} - q_s(\bar{T}) \\ &= \tau(x, z) \Delta q \end{aligned} \quad (3.65)$$

sobre la frontera. Vemos que por consistencia debemos definir

$$\Delta q = q_s(T_h) - q_s(T_c) = q_h - q_c. \quad (3.66)$$

La solución de la ecuación de Laplace (3.55) puede escribirse entonces

$$q'_0(x, z) = \tau(x, z) \Delta q \quad (3.67)$$

o

$$q_0(x, z) = \bar{q} + \tau(x, z) \Delta q, \quad (3.68)$$

donde $\tau(x, z)$ es la misma solución adimensional de la ecuación de Laplace que en (3.59). Este es entonces nuestro perfil de referencia de concentración.

Notemos que la concentración de saturación linealizada (3.64) evaluada sobre el perfil de referencia de temperatura (3.59) resulta en todo punto

$$q_s(T_0(x, z)) = q_0(x, z), \quad (3.69)$$

que es precisamente el perfil de referencia de concentración (3.68). Es decir, asumir que la concentración de saturación es lineal en la temperatura y que tenemos aire húmedo saturado en la frontera, hace que el perfil de referencia de concentración sea, punto a punto, idéntico a la concentración de saturación evaluada sobre el perfil de referencia de temperatura. Los perfiles de referencia constituyen entonces un *perfil conductivo saturado estático*. Debe notarse sin embargo que en realidad, no podemos tener una solución verdaderamente estática: dado que existe un gradiente de concentración mantenido por las CC, existirá un flujo estacionario de materia (agua, en este caso) por difusión, exactamente como existe un flujo difusivo estacionario de calor. Los perfiles de referencia son estáticos sólo en el sentido de que no hay flujos macroscópicos (es decir, advectivos).

Finalmente, debemos resolver la ecuación para el campo de presión

$$\nabla(P'/\rho) = g\alpha T'_0 \mathbf{e}_g + g\beta q'_0 \mathbf{e}_g = [\alpha\Delta T + \beta\Delta q] \tau(x, z) g \mathbf{e}_g. \quad (3.70)$$

Eligiendo por el momento $\mathbf{e}_g = \mathbf{e}_z$ (lo que siempre puede hacerse pues representa una simple reorientación del sistema de coordenadas), ésta se reescribe en 3D y en coordenadas Cartesianas como

$$\frac{\partial P'}{\partial x} = 0, \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial P'}{\partial y} = 0, \quad (3.72)$$

$$\frac{\partial P'}{\partial z} = [\alpha\Delta T + \beta\Delta q] \tau(x, y, z) g. \quad (3.73)$$

De las primeras dos ecuaciones vemos inmediatamente que P' no puede depender de x ni de y . Pero de la tercera ecuación vemos que P' debe depender de x e y si τ lo hace. Este es un hecho bien conocido: el perfil de presión para un estado estático en un campo gravitatorio (uniforme) debe ser *hidrostático*, con la presión una función sólo de la profundidad; pero esto es posible sólo si la temperatura y la concentración están estratificadas horizontalmente en el estado estático. Si bien existen CC que llevan a esta situación aún para una celda irregular, éste no es el caso general, y en particular no será el caso para la celda triangular de la Sección 3.2.12. En el caso general esto significa que *no existe solución estática* de las ecuaciones WOB (3.49–3.52).

La inexistencia de soluciones estáticas para una geometría y/o CC generales no significa, sin embargo, que los perfiles de referencia estáticos de temperatura y concentración sean inútiles. Por el contrario, éstos proveen

un estado de referencia muy conveniente para las soluciones dinámicas, y en particular permiten la homogeneización de sus CC. Por otra parte, la libertad de absorber cualquier gradiente puro en el término de presiones de (3.50) sigue existiendo, y en algunos casos podrá aprovecharse para simplificar las ecuaciones o facilitar su resolución numérica.

3.2.8. Desarrollo alrededor de los perfiles de referencia

Vamos a asumir ahora que a lo largo de la evolución dinámica del sistema, las presiones, temperaturas y concentraciones permanecen, en todo punto y a todo tiempo, cerca de sus respectivos perfiles de referencia. Si bien éste es el procedimiento usual [45], es bueno recordar que ésta es una aproximación no controlada y, en principio, su validez debería ser verificada *a posteriori*. Escribimos entonces

$$P'(\mathbf{r}, t) = P'_0(\mathbf{r}) + P''(\mathbf{r}, t), \quad (3.74)$$

$$T'(\mathbf{r}, t) = T'_0(\mathbf{r}) + T''(\mathbf{r}, t), \quad (3.75)$$

$$q'(\mathbf{r}, t) = q'_0(\mathbf{r}) + q''(\mathbf{r}, t), \quad (3.76)$$

donde el perfil de referencia de presión P'_0 se dejará por ahora indeterminado, y los de temperatura y concentración vendrán dados por (3.59) y (3.68), respectivamente. Substituyendo en las ecuaciones WOB dimensionales (3.49–3.52) tendremos

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.77)$$

$$\begin{aligned} (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\nabla (P'_0/\rho + P''/\rho) + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \\ &\quad + g\alpha (T'_0 + T'') \mathbf{e}_g + g\beta (q'_0 + q'') \mathbf{e}_g, \end{aligned} \quad (3.78)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) (T'_0 + T'') = \kappa \nabla^2 (T'_0 + T''), \quad (3.79)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) (q'_0 + q'') = D \nabla^2 (q'_0 + q''). \quad (3.80)$$

Usando que $\nabla^2 T'_0 = 0$ y $\partial_t T'_0 = 0$ en la ecuación de transporte de calor (3.79), y usando que $\nabla^2 q'_0 = 0$ y $\partial_t q'_0 = 0$ en la ecuación de transporte de concentración (3.80), el sistema toma la forma

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.81)$$

$$\begin{aligned} (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\nabla [(P'_0 + P'')/\rho] + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \\ &\quad + g [\alpha (T'_0 + T'') + \beta (q'_0 + q'')] \mathbf{e}_g, \end{aligned} \quad (3.82)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) T'' = -\mathbf{u} \cdot \nabla T'_0 + \kappa \nabla^2 T'', \quad (3.83)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) q'' = -\mathbf{u} \cdot \nabla q'_0 + D \nabla^2 q''. \quad (3.84)$$

Tomando CC *no-slip* para \mathbf{u} (es decir, $\mathbf{u} = 0$ en la frontera), todas las variables dinámicas de este sistema tendrán CC homogéneas de Dirichlet.

3.2.9. Ecuaciones WOB adimensionales

El sistema de ecuaciones WOB dimensionales (3.81–3.84) con CC homogéneas de Dirichlet tiene siete parámetros: ν , g , α , β , ρ , κ y D . Además involucra el tiempo t y las coordenadas \mathbf{r} como variables independientes, y las velocidades \mathbf{u} , la temperatura T'' , la concentración q'' y la presión P'' como variables dependientes. Es evidente entonces que su complejidad debe reducirse en lo posible, y la adimensionalización es el procedimiento usual para conseguirlo [45].

En general, cuando se reescalan las variables para obtener ecuaciones adimensionales somos libres de elegir algunas de ellas (dependientes o independientes) como “fundamentales”, y las demás como “derivadas”. El proceso de adimensionalización de [45], que es el que seguiremos, toma tiempo, longitud y temperatura como magnitudes fundamentales, y aquí agregaremos a ellas la concentración. Vamos a escalear longitudes con la longitud característica H (la “altura” de la celda), tiempos con el tiempo característico de difusión térmica $t_c = H^2/\kappa$, temperaturas con la diferencia de temperaturas característica ΔT , y concentraciones con la diferencia de concentraciones característica Δq . Sin embargo debemos tener en mente que la difusividad térmica κ es diferente para aire húmedo y mojado (ver Apéndice A.13), así que deberemos elegir *una* de ellas en la definición de la escala de tiempos, ya que no debemos definir un reescalo dependiente del estado. Para facilitar la reducción de los resultados generales al caso de aire seco, elegimos el valor κ_- correspondiente a aire húmedo. Definimos entonces coordenadas, tiempos, temperaturas y concentraciones adimensionales como

$$\mathbf{r}' = \frac{1}{H}\mathbf{r}, \quad t' = \frac{\kappa_-}{H^2}t, \quad \theta = \frac{1}{\Delta T}T'', \quad \chi = \frac{1}{\Delta q}q''. \quad (3.85)$$

Esto impone

$$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial (t'H^2/\kappa_-)} = \frac{\kappa_-}{H^2} \frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\kappa_-}{H^2} \partial_{t'}, \quad (3.86)$$

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial}{\partial (\mathbf{r}'H)} = \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} = \frac{1}{H} \nabla', \quad (3.87)$$

y en consecuencia

$$\mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \frac{\kappa_-}{H^2} H \frac{\partial \mathbf{r}'}{\partial t'} = \frac{\kappa_-}{H} \frac{\partial \mathbf{r}'}{\partial t'} = \frac{\kappa_-}{H} \mathbf{u}'. \quad (3.88)$$

Substituyendo (3.85–3.88) en el sistema (3.81–3.84) *por debajo de la saturación*, usando los perfiles de referencia (3.58) y (3.67) y simplificando,

tendremos

$$0 = \nabla' \cdot \mathbf{u}', \quad (3.89)$$

$$\begin{aligned} (\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \mathbf{u}' &= \frac{\nu}{\kappa_-} \nabla'^2 \mathbf{u}' + \frac{gH^3}{\kappa_-^2} [\alpha_- \Delta T (\tau + \theta) + \beta_- \Delta q (\tau + \chi)] \mathbf{e}_g \\ &\quad - \frac{H^2}{\kappa_-^2} \nabla' [(P'_0 + P'') / \rho], \end{aligned} \quad (3.90)$$

$$(\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \theta = -\mathbf{u}' \cdot \nabla' \tau + \nabla'^2 \theta, \quad (3.91)$$

$$(\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \chi = -\mathbf{u}' \cdot \nabla' \tau + \frac{D}{\kappa_-} \nabla'^2 \chi. \quad (3.92)$$

Definiendo ahora los números de Rayleigh térmico y másico por debajo de la saturación como

$$R_{T-} = \frac{g\alpha_- \Delta T H^3}{\kappa_- \nu}, \quad R_{M-} = \frac{g\beta_- \Delta q H^3}{\kappa_- \nu}, \quad (3.93)$$

poniendo

$$p_0 = \frac{H^2}{\kappa_- \nu} (P'_0 / \rho), \quad p = \frac{H^2}{\kappa_- \nu} (P'' / \rho), \quad (3.94)$$

y definiendo los números de Prandtl y de Lewis por debajo de la saturación

$$\sigma_- = \frac{\nu}{\kappa_-}, \quad \lambda_- = \frac{\kappa_-}{D}, \quad (3.95)$$

tenemos el sistema

$$0 = \nabla' \cdot \mathbf{u}', \quad (3.96)$$

$$\begin{aligned} \sigma_-^{-1} (\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \mathbf{u}' &= \nabla'^2 \mathbf{u}' + [R_{T-} (\tau + \theta) + R_{M-} (\tau + \chi)] \mathbf{e}_g \\ &\quad - \nabla' (p_0 + p), \end{aligned} \quad (3.97)$$

$$(\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \theta = -\mathbf{u}' \cdot \nabla' \tau + \nabla'^2 \theta, \quad (3.98)$$

$$(\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \chi = -\mathbf{u}' \cdot \nabla' \tau + \lambda_-^{-1} \nabla'^2 \chi. \quad (3.99)$$

Por otro lado, substituyendo (3.85–3.88) en el sistema (3.81–3.84) *por encima de la saturación*, usando los perfiles de referencia (3.58) y (3.67) y simplificando, tendremos

$$0 = \nabla' \cdot \mathbf{u}', \quad (3.100)$$

$$\begin{aligned} (\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \mathbf{u}' &= \frac{\nu}{\kappa_-} \nabla'^2 \mathbf{u}' + \frac{gH^3}{\kappa_-^2} [\alpha_+ \Delta T (\tau + \theta) + \beta_+ \Delta q (\tau + \chi)] \mathbf{e}_g \\ &\quad - \frac{H^2}{\kappa_-^2} \nabla' [(P'_0 + P'') / \rho], \end{aligned} \quad (3.101)$$

$$(\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \theta = -\mathbf{u}' \cdot \nabla' \tau + \frac{\kappa_+}{\kappa_-} \nabla'^2 \theta, \quad (3.102)$$

$$(\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \chi = -\mathbf{u}' \cdot \nabla' \tau + \frac{D}{\kappa_-} \nabla'^2 \chi. \quad (3.103)$$

Definiendo ahora los números de Rayleigh térmico y másico por encima de la saturación como

$$R_{T+} = \frac{g\alpha_+\Delta TH^3}{\kappa_-\nu}, \quad R_{M+} = \frac{g\beta_+\Delta qH^3}{\kappa_-\nu}, \quad (3.104)$$

y usando de nuevo (3.94) y (3.95), tenemos ahora el sistema

$$0 = \nabla' \cdot \mathbf{u}', \quad (3.105)$$

$$\begin{aligned} \sigma_-^{-1} (\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \mathbf{u}' &= \nabla'^2 \mathbf{u}' + [R_{T+}(\tau + \theta) + R_{M+}(\tau + \chi)] \mathbf{e}_g \\ &\quad - \nabla' (p_0 + p), \end{aligned} \quad (3.106)$$

$$(\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \theta = -\mathbf{u}' \cdot \nabla' \tau + \frac{\kappa_+}{\kappa_-} \nabla'^2 \theta, \quad (3.107)$$

$$(\partial_{t'} + \mathbf{u}' \cdot \nabla') \chi = -\mathbf{u}' \cdot \nabla' \tau + \lambda_-^{-1} \nabla'^2 \chi. \quad (3.108)$$

3.2.10. Ecuaciones WOB bajo y sobre la saturación

Las ecuaciones WOB adimensionales fueron obtenidas bajo la hipótesis de que todos los coeficientes son aproximadamente constantes en toda la extensión del fluido. Sin embargo para la mezcla aire-agua, si bien ρ , η , K y D son aproximadamente los mismos para aire húmedo y mojado, hemos visto que α , β y c_p tienen discontinuidades finitas a través de la curva de saturación (ver Apéndice A.13). Pese a ello, revisando las correspondientes deducciones en Landau [44] y en las Secciones 3.2.1 a 3.2.4, podemos ver que el sistema de ecuaciones dimensionales (3.44)–(3.47) sigue siendo válido. Debemos notar que en dichas ecuaciones todas las cantidades discontinuas aparecen *fuera* de las derivadas, de modo que sus discontinuidades no introducen términos de superficie. De allí en adelante el resto del desarrollo precedente se mantiene sin cambios.

La discontinuidad de α , β y c_p a través de la curva de saturación, y el régimen de trabajo típico del destilador que queremos simular, sugieren fuertemente que deberíamos tomar como valores de referencia para los coeficientes continuos aquellos a la presión \bar{P} y temperatura \bar{T} de referencia, y a la correspondiente concentración de saturación $\bar{q} = q_s(\bar{T})$; los coeficientes discontinuos, en cambio, deberían ser evaluados justo por debajo y por encima de esta concentración de saturación. Descartando las primas en todas las variables, podemos entonces reescribir los sistemas de ecuaciones WOB adimensionales (3.96)–(3.99) y (3.105)–(3.108) para este fluido de manera unificada como

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.109)$$

$$\begin{aligned} \sigma^{-1} (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= \nabla^2 \mathbf{u} + [R_T(\tau + \theta) + R_M(\tau + \chi)] \mathbf{e}_g \\ &\quad - \nabla (p_0 + p), \end{aligned} \quad (3.110)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \theta = -\mathbf{u} \cdot \nabla \tau + \mu \nabla^2 \theta, \quad (3.111)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \chi = -\mathbf{u} \cdot \nabla \tau + \lambda \nabla^2 \chi, \quad (3.112)$$

donde hemos definido

$$\sigma = \sigma_- = \frac{\nu}{\kappa_-} = \frac{\eta \rho c_p^-}{\rho K} = \frac{\eta c_p^-}{K}, \quad (3.113)$$

$$\lambda = \lambda_-^{-1} = \frac{D}{\kappa_-} = \frac{D \rho c_p^-}{K}, \quad (3.114)$$

$$\mu_- = 1, \quad (3.115)$$

$$\mu_+ = \frac{\kappa_+}{\kappa_-} \equiv \frac{K}{\rho c_p^+} \frac{\rho c_p^-}{K} = \frac{c_p^-}{c_p^+}, \quad (3.116)$$

y

$$(\mu, R_T, R_M) = \begin{cases} (\mu_-, R_{T-}, R_{M-}), & q(\mathbf{r}, t) < q_s(T(\mathbf{r}, t)), \\ (\mu_+, R_{T+}, R_{M+}), & q(\mathbf{r}, t) > q_s(T(\mathbf{r}, t)). \end{cases} \quad (3.117)$$

Si repasamos las sucesivas transformaciones aplicadas al campo q , vemos que

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\Delta q} q''(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\Delta q} [q'(\mathbf{r}, t) - q'_0(\mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{\Delta q} [q(\mathbf{r}, t) - q_s(\bar{T}) - \tau(\mathbf{r}) \Delta q], \end{aligned} \quad (3.118)$$

de modo que definiendo

$$\begin{aligned} \chi_s(T(\mathbf{r}, t)) &= \frac{1}{\Delta q} q_s''(T(\mathbf{r}, t)) = \frac{1}{\Delta q} [q_s'(T(\mathbf{r}, t)) - q'_0(\mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{\Delta q} [q_s(T(\mathbf{r}, t)) - q_s(\bar{T}) - \tau(\mathbf{r}) \Delta q] \end{aligned} \quad (3.119)$$

y comparando ambas expresiones, vemos que la condición

$$q(\mathbf{r}, t) \leq q_s(T(\mathbf{r}, t)) \quad (3.120)$$

es equivalente a

$$\chi(\mathbf{r}, t) \leq \chi_s(T(\mathbf{r}, t)). \quad (3.121)$$

Ahora, usando

$$q_s(T) = q_s(\bar{T}) + (T - \bar{T}) \frac{\Delta q}{\Delta T} \quad (3.122)$$

en (3.119), tenemos

$$\chi_s(T(\mathbf{r}, t)) = \frac{1}{\Delta q} \left[(T(\mathbf{r}, t) - \bar{T}) \frac{\Delta q}{\Delta T} - \tau(\mathbf{r}) \Delta q \right] = \frac{T(\mathbf{r}, t) - \bar{T}}{\Delta T} - \tau(\mathbf{r}), \quad (3.123)$$

y repasando las sucesivas transformaciones aplicadas al campo T , vemos que

$$\begin{aligned}\theta(\mathbf{r}, t) &= \frac{T''(\mathbf{r}, t)}{\Delta T} = \frac{T'(\mathbf{r}, t) - T'_0(\mathbf{r})}{\Delta T} \\ &= \frac{(T(\mathbf{r}, t) - \bar{T}) - \tau(\mathbf{r}) \Delta T}{\Delta T} = \frac{T(\mathbf{r}, t) - \bar{T}}{\Delta T} - \tau(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (3.124)$$

Tenemos entonces un resultado notable,

$$\chi_s(T(\mathbf{r}, t)) \equiv \theta(\mathbf{r}, t), \quad (3.125)$$

de donde vemos que

$$q(\mathbf{r}, t) \leq q_s(T(\mathbf{r}, t)) \quad \Leftrightarrow \quad \chi(\mathbf{r}, t) \leq \theta(\mathbf{r}, t). \quad (3.126)$$

Esta última equivalencia simplifica notablemente el uso de la condición de selección (3.117) en los cálculos numéricos, ya que podemos elegir el caso que corresponda simplemente comparando los campos adimensionales $\chi(\mathbf{r}, t)$ y $\theta(\mathbf{r}, t)$, que forman parte del sistema (3.109)–(3.112), sin necesidad de construir punto a punto y en cada paso de integración los campos $q(\mathbf{r}, t)$ y $T(\mathbf{r}, t)$.

A modo de comentario general, debemos decir que el sistema (3.109)–(3.112) presenta algunas diferencias no triviales con el propuesto por otros autores [46, 47, 49] y que nos sirviera de inspiración. Por una parte, el modelo de estos autores utiliza difusividades idénticas (y unitarias) en las ecuaciones correspondientes a (3.111) y (3.112), mientras que de lo que precede es evidente que no existe *ningún* reescalo de tiempos y longitudes que permita este resultado. Es conocido [41] que bajo condiciones normales *en la atmósfera* la difusividad del vapor de agua es cercana a la unidad, $\lambda \sim 1$; sin embargo en nuestro caso, usando los modelos del Apéndice A, tenemos por ejemplo a 1000 mb y 60°C que

$$\kappa_- \simeq 2,489 \times 10^{-5}, \quad D \simeq 3 \times 10^{-5}, \quad (3.127)$$

de modo que si bien numéricamente $\lambda = D/\kappa_- \simeq 1,205$ está cerca de la unidad, no lo está lo bastante para que esta aproximación sea buena. Aún si para condiciones de la atmósfera esta aproximación fuera buena, estos autores no dicen que sea una aproximación, sino que introducen este valor sin discusión, hecho que hemos rastreado hasta el trabajo inicial [52] en que se basan todos los posteriores. La segunda diferencia con el modelo de estos autores es que su ecuación equivalente a (3.110) no contiene efectos de flotación debidos a concentración, es decir, su coeficiente de dilatación másica β es nulo. En nuestro caso estos efectos son importantes y no podemos despreciarlos; pero aunque en condiciones de la atmósfera fueran despreciables, estos autores de nuevo lo asumen sin argumentación ni explicación alguna.

3.2.11. Celda rectangular

Vamos a particularizar aquí el sistema de ecuaciones WOB (3.109)–(3.112) a la celda rectangular definida por

$$0 \leq x \leq L, \quad -\frac{H}{2} \leq z \leq \frac{H}{2}, \quad (3.128)$$

con el vector campo gravitacional \mathbf{g} dirigido hacia abajo,

$$\mathbf{g} = g\mathbf{e}_z. \quad (3.129)$$

La temperatura “caliente” T_h será asignada a la base $z = -H/2$, y la temperatura “fría” al techo $z = H/2$. Las CC en $x = 0$ y $x = L$, cuando sean necesitadas, se asumirán periódicas y libres. En este caso ocurren varias simplificaciones notables, algunas de las cuales producen cambios cualitativos en las soluciones posibles.

La primera simplificación es que ahora las ecuaciones estáticas (3.53)–(3.55) admiten una solución *hidrostática*, ya que las soluciones de (3.54) y (3.55) corresponden a perfiles de temperatura y concentración estratificados horizontalmente. La solución de estas ecuaciones es sencilla de obtener, y arroja

$$T'_0(z) = -\frac{z}{H}\Delta T, \quad (3.130)$$

$$q'_0(z) = -\frac{z}{H}\Delta q, \quad (3.131)$$

$$P'_0(z) = -(\alpha\Delta T + \beta\Delta q)\frac{\rho g}{2H}z^2. \quad (3.132)$$

El estado quiescente es entonces una solución posible y, de hecho, es estable para diferencias de temperatura y concentración lo suficientemente bajas. Para convección seca se recupera así el resultado clásico de Rayleigh, que para CC rígidas (*no-slip*) en la base y el techo y celda lateralmente infinita, lleva al conocido valor crítico $R_c = 1708$ para la inestabilidad de Rayleigh–Bénard [56].

La segunda simplificación es que, dado que los perfiles estacionarios de concentración y temperatura son ahora lineales (en z), los términos que los contienen en las ecuaciones WOB pueden calcularse de antemano y adoptan también formas sencillas. En particular, esto hace que en la ecuación de transporte de momento (3.110) algunos términos adopten la forma de gradientes puros, y puedan ser absorbidos en el término de presión. Un cálculo simple de realizar nos lleva al sistema

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.133)$$

$$\sigma^{-1}(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla^2\mathbf{u} + (R_T\theta + R_M\chi)\mathbf{e}_z - \nabla p, \quad (3.134)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla)\theta = u_z + \mu\nabla^2\theta, \quad (3.135)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla)\chi = u_z + \lambda\nabla^2\chi, \quad (3.136)$$

donde aún siguen siendo válidas las definiciones (3.113)–(3.117).

Si además la convección es seca, es decir, asumimos $q = 0$ en todo lugar y a todo tiempo, por una parte ya no tendremos una ecuación de evolución para el campo χ , y por otra su valor deberá tomarse cero en las demás ecuaciones. Obtenemos así el sistema

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.137)$$

$$\sigma^{-1} (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla^2 \mathbf{u} + R_T \theta \mathbf{e}_z - \nabla p, \quad (3.138)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \theta = u_z + \mu \nabla^2 \theta, \quad (3.139)$$

donde además todos los coeficientes son constantes, para cualquier valor de los campos. Este es el sistema de ecuaciones de Oberbeck–Boussinesq “standard” [45].

3.2.12. Celda triangular

Ahora vamos a particularizar el sistema de ecuaciones WOB (3.109)–(3.112) a la celda en forma de triángulo rectángulo definida por

$$0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq z \leq L, \quad x \leq z, \quad (3.140)$$

con el vector campo gravitacional \mathbf{g} dirigido hacia la base de la celda,

$$\mathbf{g} = -\frac{g}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_x + \frac{g}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_z. \quad (3.141)$$

La temperatura “caliente” T_h será asignada a la base $x = z$, y la temperatura “fría” a los techos $x = 0$ y $z = H$.

No ocurre ninguna simplificación notable en el caso de convección húmeda, y en particular no existe solución hidrostática para las ecuaciones estáticas (3.53)–(3.55), salvo el hecho de que ahora el perfil estático adimensional τ puede explicitarse; su obtención en este caso será detallada en el Capítulo 4. Sí debemos destacar que la ausencia de una solución hidrostática prohíbe la aparición de una inestabilidad convectiva del tipo de Rayleigh–Bénard; en el caso presente, existirá convección para todo ΔT y Δq finitos, no importa cuán pequeños.

Para el caso de convección seca, nuevamente desaparecerá la ecuación para el campo χ , y este (o $\tau + \chi$) deberá asumirse nulo en las demás ecuaciones. Obtenemos entonces el sistema

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (3.142)$$

$$\sigma^{-1} (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla^2 \mathbf{u} + R_T (\tau + \theta) \mathbf{e}_g - \nabla (p_0 + p), \quad (3.143)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \theta = -\mathbf{u} \cdot \nabla \tau + \mu \nabla^2 \theta, \quad (3.144)$$

donde nuevamente todos los coeficientes son constantes, para cualquier valor de los campos.

Capítulo 4

Método Pseudoespectral

En este capítulo discutiremos los detalles del método numérico elegido para integrar numéricamente las ecuaciones WOB del Capítulo 3.

En el campo de la fluidodinámica numérica existen multitud de métodos [57, 58], cada uno con sus ventajas y desventajas, y no es nuestra intención aquí proceder a un análisis detallado de ellos. Sin embargo el método a elegir debía satisfacer ciertos requisitos mínimos, entre ellos que los códigos disponibles fueran lo suficientemente simples de comprender en sus detalles para modificarlos con confianza si ello era requerido. Dada la complejidad del problema a tratar, que incluye un flujo de dos componentes y dos fases cuyo modelo termodinámico debimos en parte desarrollar por nuestra cuenta, la mayoría de los métodos parecían requerir una inversión desproporcionada de tiempo de estudio y desarrollo antes de llegar a un código viable y confiable, que a su vez requeriría tiempos de cómputo probablemente muy grandes.

En este aspecto una serie de trabajos recientes [46, 47, 49] nos convenció de que un método pseudoespectral [59] era la elección correcta. Estos métodos son en principio sencillos de programar, y permiten alcanzar una resolución espacial lo bastante alta para simular turbulencia de manera directa (y no a través de modelos de sub-grilla), con un costo computacional comparativamente modesto. Estos métodos se basan en representar las ecuaciones hidrodinámicas en un dominio conjugado, relacionado con el dominio directo por una transformada integral (en el caso continuo) o su correspondiente versión discreta. La transformada se elige de manera que en el dominio conjugado los operadores diferenciales se reduzcan en lo posible a operadores algebraicos locales. En nuestro caso la transformada discreta será la Transformada Discreta de Fourier (DFT), y el dominio conjugado el de número de onda. Una ventaja de esta elección es la disponibilidad de buenos códigos de Transformada Rápida de Fourier (FFT). Esto es de importancia porque los términos no lineales (productos de campos) en el dominio directo se mapean a convoluciones en el dominio conjugado, que en un método espectral se calcularían en el mismo. En un método *pseudoespectral* estas convoluciones se

calculan volviendo al dominio directo, donde los productos de campos son *locales*, y retornando luego al dominio conjugado.

Procederemos ahora a detallar, paso a paso, la construcción de las grillas directa y conjugada, la discretización de operadores sobre ellas, y terminaremos dando la versión discretizada de las ecuaciones WOB que integraremos numéricamente.

4.1. Grillas, discretización y DFT

Vamos a definir aquí las grillas en coordenadas y en número de onda que usaremos en las simulaciones numéricas, la forma de discretizar funciones sobre ellas, y los detalles de la transformada de Fourier discreta (DFT) que utilizaremos para pasar de una a otra.

Consideremos un dominio computacional $0 \leq x \leq L$, $0 \leq z \leq H$. Notemos que el origen $x = 0$, $z = 0$ es definido de esta forma por convención y comodidad, y puede ser cambiado (por ejemplo a $z = -H/2$) más adelante, sin pérdida de generalidad. Nos referiremos a x como la coordenada *horizontal*, y a z como la *vertical*, nomenclatura que es convencional y no pretende tener correlato físico.

Sobre este dominio definimos una grilla discreta regular, la grilla coordenada (o directa), por

$$\mathbf{x}_{nm} = (x_n, z_m) = (n\Delta x, m\Delta z), \quad n = 0, \dots, N-1, \quad m = 0, \dots, M-1, \quad (4.1)$$

con

$$\Delta x = \frac{L}{N}, \quad \Delta z = \frac{H}{M}.$$

Dada una función $u(x, z)$ definida en este dominio, sus valores discretos en los puntos de grilla se definen como

$$u_{nm} = u(x_n, z_m). \quad (4.2)$$

El par transformada-antitransformada DFT *convencional* viene dado por

$$u_{nm} = \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{M-1} \bar{u}_{pq} e^{-i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{x}_{nm}}, \quad (4.3)$$

$$\bar{u}_{pq} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} u_{nm} e^{i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{x}_{nm}}, \quad (4.4)$$

con la grilla número de onda (o conjugada) *convencional* definida como

$$\mathbf{k}_{pq} = (k_{x,p}, k_{z,q}) = (p\Delta k_x, q\Delta k_z), \quad p = 0, \dots, N-1, \quad q = 0, \dots, M-1, \quad (4.5)$$

con

$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{L}, \quad \Delta k_z = \frac{2\pi}{H}. \quad (4.6)$$

Notemos que la DFT convencional asume implícitamente la periodicidad de la función u en x y z :

$$u_{nm} = u_{n \bmod N, m \bmod M}. \quad (4.7)$$

Debemos advertir que la anterior no es exactamente la definición de la DFT adoptada en muchos trabajos, por ejemplo en [60]: los factores de normalización se hallan aquí en la segunda ecuación, en lugar de la primera. Sin embargo ésta es la definición implementada por las rutinas de DFT que emplearemos, el paquete FFTE de Daisuke Takahashi [61]. Esta elección es además consistente con la obtenida truncando la definición usual de una *serie* de Fourier,

$$u(x, z) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \hat{u}_{rs} e^{-i2r\pi x/L} e^{-i2s\pi z/H}, \quad (4.8)$$

$$\hat{u}_{rs} = \frac{1}{L} \int_0^L dx \frac{1}{H} \int_0^H dz e^{i2r\pi x/L} e^{i2s\pi z/H} u(x, z), \quad (4.9)$$

ya que entonces, si aproximamos las integrales por las correspondientes sumas de Riemann truncadas, obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{u}_{rs} &\simeq \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{N-1} \Delta x e^{i2r\pi x_n/L} \frac{1}{H} \sum_{m=0}^{M-1} \Delta z e^{i2s\pi z_m/H} u(x_n, z_m) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} u_{nm} e^{i\mathbf{k}_{rs} \cdot \mathbf{x}_{nm}} \\ &= \bar{u}_{rs}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Esto implica que la DFT (finita) $\{\bar{u}_{rs}\}$ de un campo discretizado $\{u_{nm}\}$, es idéntica al conjunto (infinito) de coeficientes de Fourier $\{\hat{u}_{rs}\}$ del campo contínuo $u(x, z)$, truncado a la frecuencia de Nyquist.

Es sabido [60] que las rutinas numéricas de transformada rápida de Fourier (FFT) que implementan el par (4.3)–(4.4) devuelven la DFT de una función u en un orden donde los números de onda $k_0, \dots, k_{N/2-1}$ vienen primero, el valor central corresponde tanto a $k_{N/2}$ como a $-k_{N/2}$ (que son uno y el mismo), y los restantes elementos corresponden a $-k_{N/2-1}, \dots, -k_{-1}$. Si bien este orden es considerado “canónico”, a la hora de implementar algoritmos es mucho más sencillo e intuitivo para el programador, y menos propenso a error, tener ordenados los números de onda como $-k_{N/2}, \dots, k_0, \dots, k_{N/2}$, con los valores extremos identificados: $\tilde{u}_{-N/2} = \tilde{u}_{N/2}$. Análogamente, si bien sabemos que al asumir periodicidad, implícitamente incorporada en

la DFT (4.3)–(4.4), debemos identificar u_N (si lo hubiera) con u_0 , a la hora de procesar datos es mucho más conveniente tener una grilla coordinada donde estos “límites superiores” estén representados explícitamente.

El primer paso para implementar este enfoque es definir las *grillas simétricas* directa y conjugada como

$$\mathbf{x}_{nm} = (x_n, z_m) = (n\Delta x, m\Delta z), \quad n = 0, \dots, N, \quad m = 0, \dots, M, \quad (4.11)$$

$$\mathbf{k}_{pq} = (k_{x,p}, k_{z,q}) = (p\Delta k_x, q\Delta k_z), \quad p = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}, \quad q = -\frac{M}{2}, \dots, \frac{M}{2}, \quad (4.12)$$

con

$$\Delta x = \frac{L}{N}, \quad \Delta z = \frac{H}{M}, \quad \Delta k_x = \frac{2\pi}{L}, \quad \Delta k_z = \frac{2\pi}{H}. \quad (4.13)$$

Ambas grillas tienen ahora un punto más en cada dirección, y los “nuevos” puntos contienen información redundante. Debemos redefinir entonces las operaciones de suma de funciones discretizadas sobre cada una, para no contar estos puntos dos veces. Definiremos para ello los operadores suma “simétricos” como

$$\sum_{n=0}^N u_n = \frac{1}{2}u_0 + \sum_{n=0}^{N-1} u_n + \frac{1}{2}u_N, \quad (4.14)$$

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} \tilde{u}_p = \frac{1}{2}\tilde{u}_{-N/2} + \sum_{p=-N/2+1}^{N/2-1} \tilde{u}_p + \frac{1}{2}\tilde{u}_{N/2}. \quad (4.15)$$

Nótese que estas definiciones se construyen de modo que, por ejemplo, si por algún motivo debiéramos sumar una función u_n tal que $u_N \neq u_0$, automáticamente se promedian los valores extremos, que es el valor al que convergería una *serie* de Fourier en una discontinuidad. En lo que sigue, a menos de nota explícita en contrario, usaremos siempre los operadores suma simétricos, y si no hay riesgo de confusión, los escribiremos simplemente como operadores suma usuales.

Podemos ahora definir el par transformada-antitransformada “simétrico” simplemente como

$$u_{nm} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{u}_{pq} e^{-i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{x}_{nm}}, \quad (4.16)$$

$$\tilde{u}_{pq} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N \frac{1}{M} \sum_{m=0}^M u_{nm} e^{i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{x}_{nm}}, \quad (4.17)$$

donde debemos notar que, gracias a la definición de los operadores suma simétricos, los factores de normalización no han cambiado. Debemos destacar que este par transformada-antitransformada no se emplea en los algoritmos numéricos, sino sólo en el cálculo analítico de DFTs (ver por ejemplo

el Apéndice B). Numéricamente, para tomar una antitransformada la función discretizada sobre la grilla conjugada simétrica es reempaquetada en el orden canónico, se antitransforma con FFT, y se desempaqueta a la grilla directa simétrica; el procedimiento para tomar una transformada es exactamente el inverso. Los algoritmos de empaquetado y desempaquetado, aún en 2 y 3D, son triviales, y no serán expuestos aquí. En nuestra experiencia, el uso de los operadores suma simétricos y de las grillas simétricas introduce cierto *overhead* computacional, pero este es pequeño y en la práctica resulta imperceptible.

Notaremos finalmente que con las definiciones precedentes las fórmulas de inversión usuales siguen siendo válidas, y las listaremos aquí para referencia futura:

$$\delta_{nn'} = \frac{1}{N} \sum_{p=-N/2}^{N/2} e^{-ik_{x,p}(x_n-x_{n'})}, \quad \delta_{mm'} = \frac{1}{M} \sum_{q=-M/2}^{M/2} e^{-ik_{z,q}(z_m-z_{m'})}, \quad (4.18)$$

$$\delta_{pp'} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N e^{i(k_{x,p}-k_{x,p'})x_n}, \quad \delta_{qq'} = \frac{1}{M} \sum_{m=0}^M e^{i(k_{z,q}-k_{z,q'})z_m}, \quad (4.19)$$

donde, como haremos en adelante, los operadores suma se asumen simétricos.

4.2. Discretización de operadores

Debemos decidir ahora cómo elegiremos discretizar operadores diferenciales continuos. Comenzaremos con un ejemplo ilustrativo.

La discretización de ∇^2 a menor orden en la grilla coordenada es [60]

$$(\nabla^2 u)_{nm} = \frac{u_{n+1,m} - 2u_{nm} + u_{n-1,m}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{n,m+1} - 2u_{nm} + u_{n,m-1}}{(\Delta z)^2}. \quad (4.20)$$

Aplicando la DFT (4.16) tendremos

$$(\nabla^2 u)_{nm} = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-M/2}^{M/2} e^{-i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{x}_{nm}} \widetilde{(\nabla^2 u)}_{pq} \quad (4.21)$$

con

$$\widetilde{(\nabla^2 u)}_{pq} = 2 \left[\frac{\cos(k_{x,p}\Delta x) - 1}{(\Delta x)^2} + \frac{\cos(k_{z,q}\Delta z) - 1}{(\Delta z)^2} \right] \tilde{u}_{pq}. \quad (4.22)$$

Por otro lado, si primero expresamos $u(x, z)$ como una *serie* de Fourier, tendremos *exactamente*

$$\nabla^2 u(x, z) = - \sum_{r=-\infty}^{\infty} \sum_{s=-\infty}^{\infty} e^{-i2r\pi x/L} e^{-i2s\pi z/H} \left(\left(2\pi \frac{r}{L}\right)^2 + \left(2\pi \frac{s}{H}\right)^2 \right) \hat{u}_{rs}, \quad (4.23)$$

y si ahora evaluamos en (x_n, z_m) y truncamos a la frecuencia de Nyquist obtenemos

$$(\nabla^2 u)_{nm} = (\nabla^2 u)(x_n, z_m) = - \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-M/2}^{M/2} e^{-i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{x}_{nm}} k_{pq}^2 \tilde{u}_{pq}, \quad (4.24)$$

de modo que ahora

$$\widetilde{(\nabla^2 u)}_{pq} \simeq -k_{pq}^2 \tilde{u}_{pq}, \quad (4.25)$$

donde $k_{pq}^2 = k_{x,p}^2 + k_{z,q}^2$.

Notando que a longitudes de onda grandes

$$\cos(k_{x,p}\Delta x) \simeq 1 - \frac{1}{2}k_{x,p}^2 (\Delta x)^2, \quad (4.26)$$

$$\cos(k_{z,q}\Delta z) \simeq 1 - \frac{1}{2}k_{z,q}^2 (\Delta z)^2, \quad (4.27)$$

vemos que

$$2 \left[\frac{\cos(k_{x,p}\Delta x) - 1}{(\Delta x)^2} + \frac{\cos(k_{z,q}\Delta z) - 1}{(\Delta z)^2} \right] \xrightarrow{k \rightarrow 0} -k_{pq}^2, \quad (4.28)$$

así que en este límite ambas discretizaciones coinciden. Sin embargo, es claro que la segunda discretización es más precisa, sobre todo a longitudes de onda cortas; de hecho, es *exacta* hasta la truncación a la frecuencia de Nyquist, impuesta por la discretización en el dominio de coordenadas.

Podemos dar una idea cuantitativa de la diferencia entre ambas discretizaciones como sigue: Si comparamos los valores de ambos lados de (4.28), vemos que ya para $k_{x,p}\Delta x = 1/3$ y/o $k_{z,q}\Delta z = 1/3$ (lo que corresponde aproximadamente a $p = N/20$ o $q = M/20$) su diferencia supera 10^{-3} . Para una grilla de tamaño $N = 512$ como las que usaremos más adelante, esto significa $p \simeq 25$. Por lo tanto, si queremos que a longitudes de onda cortas (del orden del espaciamiento de grilla) la primera discretización dé resultados que no difieran en más de 10^{-3} de los de la segunda, deberemos tomar una grilla 25 veces más fina en cada dirección, con un costo computacional más de 600 veces mayor. Esta situación puede mejorarse tomando discretizaciones en la grilla directa que incluyan más puntos, pero rápidamente se llega al punto en que el incremento del costo computacional debido a esta estrategia supera su disminución debida al uso de una grilla más gruesa.

La alta precisión de la discretización (4.25) es el hecho que se describe al decir que un método espectral tiene *resolución espectral completa*. Ésta se debe a que efectivamente, la discretización de los operadores por DFT aprovecha la información de *todos* los puntos de grilla. Una discretización equivalente sobre la grilla directa sería evidentemente inmanejable. Debemos destacar además que, gracias a las propiedades de la DFT, tomar derivadas

espaciales en la grilla conjugada es una operación puramente *local*, que involucra sólo el producto punto a punto del campo \mathbf{k}_{pq} y el campo a derivar \tilde{u}_{pq} . Esto la hace una operación $\mathcal{O}(\mathcal{N})$, donde \mathcal{N} es el número de puntos de la grilla. Combinado con la rapidez del algoritmo FFT para pasar de una grilla a otra, y la estrategia de reducir al mínimo la cantidad de estos pasajes, esto hace que la elección sea clara.

Nuestra elección de discretización para los operadores diferenciales puede resumirse entonces como sigue:

$$(\partial_x u)_{nm} \xrightarrow{\text{DFT}} -ik_{x,p} \tilde{u}_{pq}, \quad (4.29)$$

$$(\partial_z u)_{nm} \xrightarrow{\text{DFT}} -ik_{z,q} \tilde{u}_{pq}, \quad (4.30)$$

donde la extensión a operadores de orden superior es inmediata. Consistentemente, en las integraciones numéricas a desarrollar en lo que sigue, dado un campo u discretizado a u_{nm} en la grilla coordenada, el algoritmo para obtener la discretización de sus derivadas seguirá siempre el esquema

$$u_{nm} \xrightarrow{\text{DFT}} \tilde{u}_{pq} \rightarrow -ik_{x,p} \tilde{u}_{pq} \xrightarrow{\text{DFT}^{-1}} (\partial_x u)_{nm}. \quad (4.31)$$

4.3. Convolutiones y la regla 2/3

Si el sistema de ecuaciones diferenciales parciales a resolver fuera *lineal*, los resultados de la Sección 4.2 serían todo lo que necesitamos. Sin embargo las derivadas materiales presentes en las ecuaciones OB o WOB introducen términos *no-lineales* de la forma $\mathbf{u} \cdot \nabla \theta$, por ejemplo. Su tratamiento será discutido en esta sección.

Dados dos campos escalares u y v discretizados en la grilla directa, la discretización de su producto en la misma grilla es simplemente

$$(uv)_{nm} = u_{nm} v_{nm}, \quad (4.32)$$

que es nuevamente una operación local, con costo $\mathcal{O}(\mathcal{N})$. Sin embargo, la idea del método pseudoespectral es justamente integrar las ecuaciones en la grilla conjugada, donde las derivadas espaciales son precisas y locales. Pero

$$(uv)_{nm} \xrightarrow{\text{DFT}} (u * v)_{pq}, \quad (4.33)$$

es decir, en la grilla conjugada el producto es una convolución, una operación no-local de costo $\mathcal{O}(\mathcal{N}^2)$.

La solución es, por supuesto, aprovechar la velocidad de la FFT: si tenemos \tilde{u}_{pq} y \tilde{v}_{pq} en la grilla conjugada, y queremos su convolución, implementamos el algoritmo

$$\left. \begin{array}{l} \tilde{u}_{pq} \xrightarrow{\text{DFT}^{-1}} u_{nm} \\ \tilde{v}_{pq} \xrightarrow{\text{DFT}^{-1}} v_{nm} \end{array} \right\} u_{nm} v_{nm} \rightarrow (uv)_{nm} \xrightarrow{\text{DFT}} (u * v)_{pq}, \quad (4.34)$$

cuyo costo es $\mathcal{O}(\mathcal{N} \log_2 \mathcal{N})$. El problema con esta estrategia es que el proceso de convolución, sin importar por que medio lo realicemos, introduce *aliasing* en el resultado: los extremos de número de onda corto de las funciones generan contribuciones que son reintroducidas, por la periodicidad implícita de la DFT, en las longitudes de onda cortas del resultado [62, 63], y pueden originar severas inestabilidades numéricas.

Aunque ha habido avances recientes en esta área [64, 65], de lejos el método menos costoso y más sencillo de implementar computacionalmente es la llamada *regla 2/3* [62]. Esta consiste en generar versiones modificadas de las funciones a convolucionar, aplicándoles un filtro pasa-bajo que elimina los números de onda superiores a $2/3$ del máximo; la convolución se realiza entonces utilizando las versiones filtradas de las funciones. Nuestro algoritmo de convolución quedaría entonces

$$\left. \begin{array}{l} \tilde{u}_{pq} \xrightarrow{2/3} \tilde{u}_{pq}^{(2/3)} \xrightarrow{\text{DFT}^{-1}} u_{nm} \\ \tilde{v}_{pq} \xrightarrow{2/3} \tilde{v}_{pq}^{(2/3)} \xrightarrow{\text{DFT}^{-1}} v_{nm} \end{array} \right\} u_{nm} v_{nm} \rightarrow (uv)_{nm} \xrightarrow{\text{DFT}} (u * v)_{pq} . \quad (4.35)$$

Nótese que el costo computacional introducido por esta estrategia es prácticamente nulo, ya que sólo implica asignaciones (a cero), no productos.

Esta implementación de la regla $2/3$ tiene sin embargo un problema: si partimos de dos campos \tilde{u}_{pq} y \tilde{v}_{pq} sobre la grilla conjugada, cuyas versiones u_{nm} y v_{nm} sobre la grilla directa satisfacen CC homogéneas, en general las antitransformadas de los campos $\tilde{u}_{pq}^{(2/3)}$ y $\tilde{v}_{pq}^{(2/3)}$ filtrados con la regla $2/3$ *no satisfacen* estas CC, porque el filtrado elimina contribuciones de número de onda grande que son esenciales para ello, y por lo tanto el campo $(uv)_{nm}$, que también debería satisfacerlas, no lo hará. La solución que implementamos consiste en filtrar con la regla $2/3$ usual, antitransformar y generar $(uv)_{nm}$ como antes, pero antes de transformar reimponer las CC homogéneas a $(uv)_{nm}$ en la grilla directa. Este proceso reintroduce ciertas contribuciones de número de onda grande, pero lo hace *después* de realizada la convolución, en lugar de antes, y reintroduce *solamente* las contribuciones necesarias para garantizar las CC, es decir aquellas que tienen significado físico. Nótese que el mismo procedimiento puede utilizarse con CC inhomogéneas. Es de destacar que este problema no aparece cuando se trabaja con CC periódicas libres, ya que la mera periodicidad está garantizada por la estructura de la DFT.

En adelante siempre que hagamos referencia a la regla $2/3$, deberá entenderse que se trata de esta versión modificada. El costo computacional agregado por este procedimiento sigue siendo despreciable, ya que nuevamente sólo implica asignaciones.

4.4. Ecuación de Poisson

Si se repasa las ecuaciones OB o WOB obtenidas al final del Capítulo 3, se verá que en todas ellas la ecuación de transporte de momento contiene

el campo de presión, y sin embargo ninguna incluye una ecuación de evolución para él. El motivo es que, al asumir la incompresibilidad del fluido, la ecuación de transporte de masa ha dejado de ser una ecuación de evolución, para convertirse en la relación constitutiva

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4.36)$$

que garantiza la incompresibilidad del fluido. La ecuación de transporte de momento, que en todos los casos tiene la forma

$$\partial_t \mathbf{u} = \sigma (\mathbf{f} - \nabla p), \quad (4.37)$$

con diversas formas particulares para \mathbf{f} según el caso, no garantiza por sí misma la condición de incompresibilidad. Tomando su divergencia tenemos

$$\partial_t \nabla \cdot \mathbf{u} = \sigma \nabla \cdot (\mathbf{f} - \nabla p), \quad (4.38)$$

de modo que imponer incompresibilidad a todo tiempo equivale a pedir

$$\nabla^2 p = \nabla \cdot \mathbf{f}. \quad (4.39)$$

En principio, esta ecuación de Poisson para p deberá ser resuelta, con las CC adecuadas, en cada paso de la integración temporal, y el gradiente de su solución empleado en la ecuación de transporte de momento.

Evidentemente esta tarea puede aumentar en gran medida el costo computacional, por lo que mitigar esta posibilidad ha sido objeto de interés, llevando a la construcción de *resolvedores rápidos de Poisson* (FPS, por *fast Poisson solvers*) [66, 67, 68, 69, 70, 71, 72]. Los mejores FPS tienen un costo $\mathcal{O}(\mathcal{N} \log_2 \mathcal{N})$, pero esto se aplica sólo si la discretización empleada es (4.28) (y las CC son homogéneas, para aquellos basados en la transformada seno discreta); caso contrario su desempeño puede ser bastante peor. En lo que sigue vamos a mostrar cómo podemos construir un *resolvedor ultra-rápido de Poisson* (UFPS) cuyo costo es $\mathcal{O}(\mathcal{N})$. Por simplicidad, la discusión estará restringida al caso 2D.

Recordemos primero la *descomposición de Helmholtz*, que surge del Teorema homónimo [73] que afirma que bajo CC adecuadas, todo campo vectorial puede ser descompuesto en una parte irrotacional (o *longitudinal*) más una solenoidal (o *transversal*). Dado un campo vectorial \mathbf{f} y su transformada de Fourier $\tilde{\mathbf{f}}$, en 2D y en el espacio libre (es decir omitiendo términos de superficie) podemos representar esta descomposición como

$$\tilde{\mathbf{f}} = \tilde{\mathbf{f}}_{\parallel} + \tilde{\mathbf{f}}_{\perp}, \quad (4.40)$$

donde

$$\tilde{\mathbf{f}}_{\parallel} = (\tilde{\mathbf{f}} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \hat{\mathbf{k}}, \quad \tilde{\mathbf{f}}_{\perp} = (\tilde{\mathbf{f}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') \hat{\mathbf{k}}' \quad (4.41)$$

son las proyecciones de $\tilde{\mathbf{f}}$ en la dirección de los vectores unitarios

$$\hat{\mathbf{k}} = \frac{(k_x, k_z)}{\sqrt{k_x^2 + k_z^2}}, \quad \hat{\mathbf{k}}' = \frac{(-k_z, k_x)}{\sqrt{k_x^2 + k_z^2}}. \quad (4.42)$$

De este modo las componentes longitudinal y transversal de $\tilde{\mathbf{f}}$ son, respectivamente, sus componentes radial y angular en un sistema de coordenadas polares planas en el espacio conjugado.

Ahora bien, el gradiente ∇p del campo de presión es puramente longitudinal, ya que en el espacio conjugado se expresa $-i\mathbf{k}\tilde{p}$. La condición

$$\nabla \cdot (\mathbf{f} - \nabla p) = 0, \quad (4.43)$$

necesaria para preservar la incompresibilidad de \mathbf{u} , es equivalente a imponer que el campo $\mathbf{f} - \nabla p$ sea puramente transversal, es decir

$$(\mathbf{f} - \nabla p)_{\parallel} = \mathbf{f}_{\parallel} - \nabla p = 0, \quad (4.44)$$

donde hemos usado que $(\nabla p)_{\parallel} \equiv \nabla p$. Vemos así que el *único* efecto de ∇p es cancelar la componente longitudinal de \mathbf{f} ; su componente transversal, en cambio, no puede ser afectada por ∇p , cuya componente transversal es nula. La ecuación (4.37) puede ser reescrita entonces como

$$\partial_t \mathbf{u} = \sigma \mathbf{f}_{\perp}, \quad (4.45)$$

sin hacer mención al campo de presión.

Sin embargo, simples experimentos numéricos bastan para probar que $\sigma \mathbf{f}_{\perp}$ *no cumple* las CC que debería, que para CC independientes del tiempo son las mismas que cumple \mathbf{u} . La ecuación (4.40) nos muestra el por qué: las CC son satisfechas por $\mathbf{f}_{\parallel} + \mathbf{f}_{\perp}$, pero no necesariamente por \mathbf{f}_{\parallel} o \mathbf{f}_{\perp} por separado. Sin embargo, reescribiendo la definición de \mathbf{f}_{\perp} como

$$(k_x^2 + k_z^2) \tilde{\mathbf{f}}_{\perp} = (-k_z, k_x) (-k_z f_x + k_x f_z) \quad (4.46)$$

y antitransformando al espacio directo, vemos que \mathbf{f}_{\perp} como lo hemos definido es sólo una *solución particular* (la solución principal o de espacio libre) de la ecuación de Poisson (vectorial)

$$\nabla^2 \mathbf{f}_{\perp} = \mathcal{F}^{-1} \{(-k_z, k_x) (-k_z f_x + k_x f_z)\} \quad (4.47)$$

y, como con toda solución particular, no podemos ajustar sus CC. Para ello necesitamos la *solución general* de esta ecuación de Poisson, que podemos conseguir sumando la solución general de la correspondiente ecuación homogénea

$$\nabla^2 \mathbf{f}_{\perp} = 0, \quad (4.48)$$

que es una ecuación de Laplace (también vectorial).

Vamos a redefinir entonces \mathbf{f}_\perp de la siguiente forma:

$$\mathbf{f}_\perp = \mathbf{v} + \mathbf{w}, \quad (4.49)$$

con

$$\tilde{\mathbf{v}} = (-k_z, k_x) \frac{-k_z f_x + k_x f_z}{k_x^2 + k_z^2} \quad (4.50)$$

y

$$\nabla^2 \mathbf{w} = 0, \quad (4.51)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{w} = 0. \quad (4.52)$$

La última condición surge de exigir que $\nabla \cdot \mathbf{f}_\perp = 0$ y recordar que $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ por construcción. Las CC que debe satisfacer \mathbf{w} pueden deducirse de las que satisface \mathbf{u} , que para las ecuaciones OB o WOB de la Sección 3.2 son homogéneas. Recordando que la condición de incompresibilidad para \mathbf{u} debe cumplirse incluso en la frontera, obtenemos

$$\mathbf{w} = -\mathbf{v}, \quad \nabla \cdot \mathbf{w} = -\nabla \cdot \mathbf{v} \quad \text{sobre la frontera.} \quad (4.53)$$

La forma detallada de estas CC depende de la geometría de la celda, de modo que pasaremos ahora a considerar los casos particulares de nuestro interés, la celda rectangular y la celda triangular.

4.4.1. Celda rectangular

En el caso de la celda rectangular, las CC en la dirección horizontal son periódicas (libres), y su cumplimiento estará garantizado para cualquier solución obtenida mediante el uso de DFT. En cuanto a las CC en la dirección vertical, la periodicidad de las funciones discretizadas sobre la grilla directa, obtenidas por DFT inversa de sus versiones en la grilla conjugada, garantiza que las CC en $z = 0$ y $z = H$ serán las mismas, de modo que sólo consideraremos las primeras.

Comenzaremos reescribiendo (4.51) y (4.52) explícitamente en términos de las componentes Cartesianas de \mathbf{w} :

$$\nabla^2 w_x = 0. \quad (4.54)$$

$$\nabla^2 w_z = 0, \quad (4.55)$$

$$\partial_x w_x + \partial_z w_z = 0. \quad (4.56)$$

Las CC para w_x y w_z son

$$w_x(x, z = 0) = -v_x(x, z = 0), \quad (4.57)$$

$$w_z(x, z = 0) = -v_z(x, z = 0), \quad (4.58)$$

$$\partial_z w_z(x, z = 0) = -\partial_z v_z(x, z = 0), \quad (4.59)$$

donde la última ecuación surge de imponer la segunda CC de (4.53) y notar que $\partial_x w_x(x, 0) = -\partial_x v_x(x, 0)$ está garantizado por (4.54).

Reescribiremos por conveniencia (4.50) como

$$\tilde{v}_{x,pq} = -k_{z,q}\tilde{v}_{pq}, \quad \tilde{v}_{z,pq} = k_{x,p}\tilde{v}_{pq}, \quad (4.60)$$

donde hemos definido el campo escalar

$$\tilde{v}_{pq} = \frac{-k_{z,q}\tilde{f}_{x,pq} + k_{x,p}\tilde{f}_{z,pq}}{k_{z,pq}^2 + k_{x,pq}^2}. \quad (4.61)$$

Las ecuaciones (4.54) y (4.55) son ecuaciones de Laplace, cuya solución general se deduce analíticamente en el Apéndice B. Comencemos por escribir $\tilde{w}_{z,pq}$ como una solución de la ecuación de Laplace con CC laterales periódicas, usando (B.35):

$$\tilde{w}_{z,pq} = a_p\tilde{C}_{pq} + b_p\tilde{S}_{pq}, \quad (4.62)$$

donde a_p y b_p deben ser determinados, y \tilde{C}_{pq} y \tilde{S}_{pq} son matrices $(N+1) \times (M+1)$ dadas por (B.36) y (B.37). Reescribamos la condición de divergencia nula (4.52) de \mathbf{w} en la grilla conjugada como

$$(-ik_{x,p})\tilde{w}_{x,pq} + (-ik_{z,q})\tilde{w}_{z,pq} = 0. \quad (4.63)$$

Entonces podemos escribir

$$\tilde{w}_{x,pq} = -\frac{(-ik_{z,q})}{(-ik_{x,p})} \left(a_p\tilde{C}_{pq} + b_p\tilde{S}_{pq} \right), \quad (4.64)$$

donde no nos preocuparemos por el momento de la posible singularidad en $p = 0$. Notemos que $\tilde{w}_{z,pq}$ tiene por definición la forma de una solución de la ecuación de Laplace con CC horizontales periódicas y CC verticales de Dirichlet (4.58) que definirán el valor de los coeficientes a_p ; y que $\tilde{w}_{x,pq}$ también tiene esa forma, con CC verticales de Dirichlet (4.57) que definirán los valores de los coeficientes b_p . Imponiendo esas CC en la grilla conjugada como se describe en el Apéndice B.1 tendremos

$$\sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{w}_{z,pq} = a_p \sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{C}_{pq} = \sum_{q=-M/2}^{M/2} -\tilde{v}_{z,pq}, \quad (4.65)$$

$$\sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{w}_{x,pq} = -\frac{b_p}{k_{x,p}} \sum_{q=-M/2}^{M/2} k_{z,q}\tilde{S}_{pq} = \sum_{q=-M/2}^{M/2} -\tilde{v}_{x,pq} \quad (4.66)$$

que pueden resolverse para a_p y b_p como

$$a_p = -\frac{\sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{v}_{z,pq}}{\sum_{q=-M/2}^{M/2} \tilde{C}_{pq}}, \quad (4.67)$$

$$b_p = -\frac{k_{x,p} \sum_{q=-M/2}^{M/2} -\tilde{v}_{x,pq}}{\sum_{q=-M/2}^{M/2} k_{z,q}\tilde{S}_{pq}} = -\frac{\sum_{q=-M/2}^{M/2} k_{z,q}\tilde{v}_{z,pq}}{\sum_{q=-M/2}^{M/2} k_{z,q}\tilde{S}_{pq}}, \quad (4.68)$$

donde en el último paso hemos usado la condición de divergencia nula de \mathbf{v} para poner $-k_{x,p}\tilde{v}_{x,pq} = k_{z,q}\tilde{v}_{z,pq}$. Substituyendo en (4.62) tenemos

$$\tilde{w}_{z,pq} = -\tilde{c}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} \tilde{v}_{z,pq'} - \tilde{s}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} k_{z,q'} \tilde{v}_{z,pq'}, \quad (4.69)$$

donde hemos usado la definición (B.54) de las matrices normalizadas \tilde{c}_{pq} y \tilde{s}_{pq} . Usando ahora (4.60) resulta

$$\tilde{w}_{z,pq} = -k_{x,p} \left(\tilde{c}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} \tilde{v}_{pq'} + \tilde{s}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} k_{z,q'} \tilde{v}_{pq'} \right), \quad (4.70)$$

y usando (4.64) obtenemos también

$$\tilde{w}_{x,pq} = k_{z,q} \left(\tilde{c}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} \tilde{v}_{pq'} + \tilde{s}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} k_{z,q'} \tilde{v}_{pq'} \right), \quad (4.71)$$

de donde la posible singularidad en $p = 0$ ha desaparecido.

Estos resultados pueden reescribirse de forma más compacta como

$$\tilde{w}_{x,pq} = -k_{z,q} \tilde{w}_{pq}, \quad \tilde{w}_{z,pq} = k_{x,p} \tilde{w}_{pq}, \quad (4.72)$$

donde hemos introducido el campo escalar \tilde{w}_{pq} , que en este caso adopta la forma

$$\tilde{w}_{pq} = -\tilde{c}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} \tilde{v}_{pq'} - \tilde{s}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} k_{z,q'} \tilde{v}_{pq'}. \quad (4.73)$$

Podemos poner así el campo transversal \mathbf{f}_\perp dado por (4.49), discretizado en la grilla conjugada, explícitamente en la forma del rotor

$$\tilde{f}_{\perp x,pq} = -k_{z,q} \tilde{f}_{\perp,pq}, \quad \tilde{f}_{\perp z,pq} = k_{x,p} \tilde{f}_{\perp,pq} \quad (4.74)$$

del campo escalar definido por

$$\tilde{f}_{\perp,pq} = \tilde{v}_{pq} - \tilde{c}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} \tilde{v}_{pq'} - \tilde{s}_{pq} \sum_{q'=-M/2}^{M/2} k_{z,q'} \tilde{v}_{pq'} \quad (4.75)$$

a partir del escalar \tilde{v}_{pq} dado por (4.61). Esta expresión pone de manifiesto la transversalidad de \mathbf{f}_\perp , y simplifica su cálculo. Este campo discretizado, por construcción, satisface CC horizontales periódicas y verticales homogéneas de Dirichlet y, lo que es de destacar, satisface además la CC vertical de *Neumann*

$$\partial_z f_{\perp,z} |_{z=0} = 0, \quad (4.76)$$

aunque no la hemos impuesto explícitamente. Este último hecho, que es prueba de la consistencia del método desarrollado, es difícil de demostrar analíticamente. Sin embargo, se verifica numéricamente que, en toda circunstancia,

$$\sum_{q=-M/2}^{M/2} (-ik_{z,q}) \tilde{f}_{\perp z,pq} = 0 \quad (4.77)$$

a precisión de máquina.

Es interesante notar también que la expresión (4.75), junto con las definiciones (4.61) del campo escalar \tilde{v}_{pq} y (4.73) del campo escalar \tilde{w}_{pq} , nos permite reformular el problema de ajustar las CC en una forma más simple, ya que ahora resulta evidente que este último campo escalar ajusta las CC de Cauchy

$$w(x, z = 0) = -v(x, z = 0), \quad (4.78)$$

$$\partial_z w(x, z = 0) = -\partial_z v(x, z = 0). \quad (4.79)$$

Podemos reducir entonces el problema a la resolución de una ecuación de Laplace *escalar*

$$\nabla^2 w = 0 \quad (4.80)$$

para el campo w , con las CC (4.78) y (4.79) determinadas por el campo escalar v . Este hecho nos permitirá simplificar el ajuste de las CC en la celda triangular.

4.4.2. Celda triangular

Como se verá en la Sección 4.6, la construcción de la celda triangular se realiza a partir de una celda cuadrada, por un método de imágenes que garantiza el cumplimiento automático de las CC deseadas en la base de la celda triangular. Basta entonces para nuestros propósitos saber cómo ajustar las CC (4.53) sobre la frontera de una celda cuadrada.

En el caso de la celda cuadrada las CC tanto en la dirección horizontal como en la vertical son periódicas pero no libres. La periodicidad de nuevo garantiza que las CC en $z = 0$ y $z = L$ son idénticas, como lo son las CC en $x = 0$ y $x = L$ (recordemos que al ser la celda cuadrada $H = L$, por lo que los usaremos indistintamente), de modo que escribiremos

$$w_x(x, z = 0) = -v_x(x, z = 0), \quad (4.81)$$

$$w_z(x, z = 0) = -v_z(x, z = 0), \quad (4.82)$$

$$\partial_z w_z(x, z = 0) = -\partial_z v_z(x, z = 0), \quad (4.83)$$

$$w_x(x = 0, z) = -v_x(x = 0, z), \quad (4.84)$$

$$w_z(x = 0, z) = -v_z(x = 0, z), \quad (4.85)$$

$$\partial_x w_x(x = 0, z) = -\partial_x v_x(x = 0, z). \quad (4.86)$$

También adoptaremos, como en el Apéndice B.2, grillas directa y conjugada isotrópicas. De aquí en adelante el procedimiento para ajustar las CC es similar al desarrollado en la Sección precedente, por lo que sólo lo presentaremos esquemáticamente, salvo en lo que difiera del anterior.

Las definiciones (4.61) del campo escalar \tilde{v}_{pq} y (4.73) del campo escalar \tilde{w}_{pq} quedan inalteradas. Las CC para \tilde{w}_{pq} dadas anteriormente por (4.78) y (4.79) son ahora

$$w(x, z = 0) = -v(x, z = 0), \quad (4.87)$$

$$\partial_z w(x, z = 0) = -\partial_z v(x, z = 0), \quad (4.88)$$

$$w(x = 0, z) = -v(x = 0, z), \quad (4.89)$$

$$\partial_x w(x = 0, z) = -\partial_x v(x = 0, z). \quad (4.90)$$

Deberemos poner \tilde{w}_{pq} en la forma (B.73) de la solución general de la ecuación de Laplace,

$$\tilde{w}_{pq} = a_p C_{pq} + b_p S_{pq} + \bar{a}_q \bar{C}_{pq} + \bar{b}_q \bar{S}_{pq} + a_{00} K_{pq} + a_{10} X_{pq} + a_{01} Z_{pq} + a_{11} Q_{pq}, \quad (4.91)$$

donde las matrices $(N + 1) \times (N + 1)$ vienen dadas por (B.74)–(B.81), y los coeficientes serán determinados por las CC. En estas expresiones $a_0 = \bar{a}_0 = b_0 = \bar{b}_0 = 0$, y las matrices \bar{C}_{pq} , \bar{S}_{pq} y X_{pq} son las transpuestas de C_{pq} , S_{pq} y Z_{pq} , respectivamente. Las ecuaciones resultantes de imponer las CC (4.87)–(4.90) toman la forma general (B.89)–(B.92) con los coeficientes \tilde{A}_p , \tilde{B}_p , $\tilde{\tilde{A}}_p$, $\tilde{\tilde{B}}_p$ dados en este caso por

$$\sum_{q=-N/2}^{N/2} \tilde{w}_{pq} = - \sum_{q=-N/2}^{N/2} \tilde{v}_{pq} = \tilde{A}_p, \quad (4.92)$$

$$\sum_{q=-N/2}^{N/2} k_q \tilde{w}_{pq} = - \sum_{q=-N/2}^{N/2} k_q \tilde{v}_{pq} = i \tilde{B}_p, \quad (4.93)$$

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} \tilde{w}_{pq} = - \sum_{p=-N/2}^{N/2} \tilde{v}_{pq} = \tilde{\tilde{A}}_q, \quad (4.94)$$

$$\sum_{p=-N/2}^{N/2} k_p \tilde{w}_{pq} = - \sum_{p=-N/2}^{N/2} k_p \tilde{v}_{pq} = i \tilde{\tilde{B}}_q, \quad (4.95)$$

donde la isotropía de las grillas nos permite omitir los índices x o z en los números de onda (ya que para todo p , $k_{x,p} = k_{z,p} = k_p$).

El sistema de ecuaciones (4.92)–(4.95) para los coeficientes a_p , b_p , \bar{a}_q , \bar{b}_q , a_{00} , a_{01} , a_{10} y a_{11} , es un sistema lineal inhomogéneo de dimensión $4N$ que, a diferencia de lo que ocurría con la celda rectangular, 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 esta matriz de coeficientes es altamente singular. Pese a ello, experimentos numéricos reiterados mostraron claramente que para la clase de inhomogeneidades \tilde{A}_p , \tilde{B}_p , \tilde{A}_q y \tilde{B}_q dada por (4.92)–(4.95) 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 $\mathcal{O}(N)$. 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. Como aproximación inicial tomamos la solución que resulta de considerar 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, tal como se hizo para la celda rectangular. 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 en todas las simulaciones que hemos realizado. Con esta aproximación $\tilde{w}_{pq}^{(0)}$ calculamos una primera aproximación al campo transversal escalar

$$\tilde{f}_{\perp,pq}^{(0)} = \tilde{v}_{pq} - \tilde{w}_{pq}^{(0)}. \quad (4.96)$$

Este campo es transversal por construcción, pero no ajusta exactamente las CC, aunque sí las ajusta bastante mejor que \tilde{v}_{pq} . La construcción de aproximaciones sucesivas es directa pero engorrosa en los detalles, y dejaremos su descripción para el Apéndice B.2.

En todas las simulaciones hidrodinámicas que hemos realizado la convergencia resultó rápida, bastando a lo sumo cinco iteraciones para obtener una solución con un error máximo relativo $\lesssim 10^{-4}$, más que suficiente para nuestros propósitos. Consistentemente con la precedente interpretación física, 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} .

4.4.3. Costo computacional

El número de puntos de grilla en la celda rectangular es $\mathcal{N} = (N + 1) \times (M + 1)$, donde en nuestras simulaciones habitualmente $N = 2M$. Para la celda triangular trabajaremos en realidad sobre una celda cuadrada cuyas grillas tendrán $\mathcal{N} = (N + 1)^2$ puntos. En ambas grillas el término más costoso de calcular es el campo escalar \tilde{v}_{pq} , que según (4.61) involucra tres productos por punto de grilla (los campos como k_{pq}^2 , su inversa, etc. se precomputan y almacenan, por supuesto), y es por tanto $\mathcal{O}(\mathcal{N})$. El ajuste de las CC para \tilde{w}_{pq} es $\mathcal{O}(N)$ tanto para la celda cuadrada como para la celda rectangular. Para la celda cuadrada, si bien el método iterativo introduce una carga computacional adicional, su tamaño está acotado, y cada iteración sigue siendo una operación $\mathcal{O}(\mathcal{N})$.

En resumen, el costo del método escala *linealmente* con el tamaño de grilla, siendo $\mathcal{O}(\mathcal{N})$ para la celda rectangular y a lo sumo $\mathcal{O}(5\mathcal{N})$ para la celda cuadrada. Si bien el factor 5 puede parecer grande, basta notar que un método con costo $\mathcal{O}(\mathcal{N} \log_2 \mathcal{N})$, que es el costo de los mejores FPS, dejaría de ser competitivo para $\mathcal{N} > 5$, es decir sobre grillas 8×8 o mayores, sacrificando además la resolución espectral completa. Para las mayores grillas empleadas en este trabajo $\mathcal{N} \sim 2^{19}$, lo que hace al método presentado aquí cuatro veces más rápido sin sacrificio de resolución.

4.5. Ecuaciones WOB discretizadas en la celda rectangular

Mostraremos aquí la construcción de la versión discretizada de las ecuaciones WOB (3.133)–(3.136) sobre la grilla conjugada. Recordemos primero que la ecuación de transporte de masa (3.133) no es una ecuación dinámica sino una relación constitutiva, cuyo tratamiento numérico ya hemos expuesto en lo que antecede, así como el del término de presión en (3.134), que de ahora en más no escribiremos explícitamente.

Para comenzar reescribiremos las ecuaciones (3.134)–(3.136) como

$$\partial_t u_x = - \left[\partial_x (u_x u_x) - \partial_z (u_x u_z) + \sigma \nabla^2 u_x \right]_{\perp}, \quad (4.97)$$

$$\partial_t u_z = - \left[\partial_x (u_x u_z) - \partial_z (u_z u_z) + \sigma \nabla^2 u_z + \sigma (R_T \theta + R_M \chi) \right]_{\perp}, \quad (4.98)$$

$$\partial_t \theta = -\partial_x (u_x \theta) - \partial_z (u_z \theta) + u_z + \mu \nabla^2 \theta, \quad (4.99)$$

$$\partial_t \chi = -\partial_x (u_x \chi) - \partial_z (u_z \chi) + u_z + \lambda \nabla^2 \chi, \quad (4.100)$$

donde hemos hecho uso de (3.133) para dejar los operadores derivada fuera de los términos no-lineales, y por lo tanto fuera de las convoluciones que aparecerán al transformar a la grilla conjugada. Los corchetes con el subíndice

\perp indican que se debe tomar la parte transversal de los respectivos campos por el método de Sección 4.4.

La discretización de estas ecuaciones sobre la grilla directa usando las reglas de las Secciones 4.2 y 4.3 resulta en

$$\partial_t u_{x,nm} = - [(\partial_x (u_x u_x))_{nm} - (\partial_z (u_x u_z))_{nm} + \sigma (\nabla^2 u_x)_{nm}]_{\perp}, \quad (4.101)$$

$$\begin{aligned} \partial_t u_{z,nm} = & - [(\partial_x (u_x u_z))_{nm} - (\partial_z (u_z u_z))_{nm} + \sigma (\nabla^2 u_z)_{nm} \\ & + \sigma ((R_T \theta)_{nm} + (R_M \chi)_{nm})]_{\perp}, \end{aligned} \quad (4.102)$$

$$\partial_t \theta_{nm} = - (\partial_x (u_x \theta))_{nm} - (\partial_z (u_z \theta))_{nm} + u_{z,nm} + (\mu \nabla^2 \theta)_{nm}, \quad (4.103)$$

$$\partial_t \chi_{nm} = - (\partial_x (u_x \chi))_{nm} - (\partial_z (u_z \chi))_{nm} + u_{z,nm} + \lambda (\nabla^2 \chi)_{nm}, \quad (4.104)$$

donde la forma de agrupar los términos con R_T , R_M y μ toma en cuenta que, en cada paso de integración temporal, éstos serán *campos* (dicotómicos) con diferentes valores en diferentes puntos, y al tomar DFT los términos que los contienen se convertirán en convoluciones. Esto tiene efectos indeseados, entre ellos dejar operadores diferenciales dentro de las convoluciones, lo que desearíamos evitar por simplicidad.

Expondremos aquí una alternativa que ejemplificaremos con el tratamiento de la ecuación (4.103). Esta puede reescribirse

$$\partial_t \theta_{nm} = \begin{cases} \partial_t \theta_{nm}^-, & \chi_{nm} < \theta_{nm}, \\ \partial_t \theta_{nm}^+, & \chi_{nm} > \theta_{nm}, \end{cases} \quad (4.105)$$

definiendo

$$\partial_t \theta_{nm}^- = - (\partial_x (u_x \theta))_{nm} - (\partial_z (u_z \theta))_{nm} + u_{z,nm} + \mu^- (\nabla^2 \theta)_{nm}, \quad (4.106)$$

$$\partial_t \theta_{nm}^+ = - (\partial_x (u_x \theta))_{nm} - (\partial_z (u_z \theta))_{nm} + u_{z,nm} + \mu^+ (\nabla^2 \theta)_{nm}, \quad (4.107)$$

donde ahora, en cada ecuación, los campos μ^- y μ^+ son *constantes*. Transformando a la grilla número de onda tendremos

$$\partial_t \tilde{\theta}_{pq}^- = ik_{x,pq} (\tilde{u}_x * \tilde{\theta})_{pq} + ik_{z,pq} (\tilde{u}_z * \tilde{\theta})_{pq} + \tilde{u}_{z,pq} - \mu^- k_{pq}^2 \tilde{\theta}_{pq}, \quad (4.108)$$

$$\partial_t \tilde{\theta}_{pq}^+ = ik_{x,pq} (\tilde{u}_x * \tilde{\theta})_{pq} + ik_{z,pq} (\tilde{u}_z * \tilde{\theta})_{pq} + \tilde{u}_{z,pq} - \mu^+ k_{pq}^2 \tilde{\theta}_{pq}, \quad (4.109)$$

Debemos entonces evolucionar *dos* ecuaciones en la grilla conjugada, en lugar de una. Sin embargo todos los términos de ambas pueden calcularse *una* vez, ya que son los mismos, con la sola excepción de la multiplicación de $k_{pq}^2 \tilde{\theta}_{pq}$ por μ^- o μ^+ . En cada paso de integración temporal los campos $\partial_t \tilde{\theta}_{pq}^-$ y $\partial_t \tilde{\theta}_{pq}^+$ deben ser antitransformados a la grilla directa, se construye el campo $\partial_t \tilde{\theta}_{pq}$ como su combinación (4.105), y el resultado es nuevamente transformado a la grilla conjugada. Una ventaja de este esquema es que en cada paso de integración temporal tendremos de todas formas los campos χ_{nm} y θ_{nm} en la grilla directa, con lo que asignaciones como (4.105) tienen bajo costo. Por

otro lado, este esquema emplea dos DFT inversas y una directa, el mismo número que el enfoque “tradicional”. Haciendo abuso de notación, y para ahorrar escritura en el sistema de ecuaciones, denotaremos un “término de convolución” obtenido con este esquema como

$$k_{pq}^2(\tilde{\mu} \odot \tilde{\theta})_{pq} \quad (4.110)$$

y escribiremos una única ecuación de evolución para el campo $\tilde{\theta}_{pq}$.

Usando nuevamente las reglas de las Secciones 4.2 y 4.3, la versión de las ecuaciones WOB discretizadas en la grilla conjugada resulta entonces

$$\partial_t \tilde{u}_{x,pq} = [ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_x)_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_z)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \tilde{u}_{x,pq}]_{\perp}, \quad (4.111)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{u}_{z,pq} = [ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_z)_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{u}_z)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \tilde{u}_{z,pq} \\ + \sigma(\tilde{R}_T \odot \tilde{\theta})_{pq} + \sigma(\tilde{R}_M \odot \tilde{\chi})_{pq}]_{\perp}, \end{aligned} \quad (4.112)$$

$$\partial_t \tilde{\theta}_{pq} = ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{\theta})_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{\theta})_{pq} + \tilde{u}_{z,pq} - k_{pq}^2(\tilde{\mu} \odot \tilde{\theta})_{pq}, \quad (4.113)$$

$$\partial_t \tilde{\chi}_{pq} = ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{\chi})_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{\chi})_{pq} + \tilde{u}_{z,pq} - \lambda k_{pq}^2 \tilde{\chi}_{pq}, \quad (4.114)$$

donde debe entenderse (aquí y en adelante) que en cada paso de integración temporal, una vez construidos $\partial_t \tilde{u}_{x,pq}$ y $\partial_t \tilde{u}_{z,pq}$, son reemplazados por su parte transversal obtenida según las reglas de la Sección 4.4.

El procedimiento empleado en el caso de las ecuaciones OB (3.137)–(3.139) para convección seca es el mismo, sólo que la complicación introducida por los campos dicotómicos desaparece. Obtenemos entonces

$$\partial_t \tilde{u}_{x,pq} = [ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_x)_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_z)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \tilde{u}_{x,pq}]_{\perp}, \quad (4.115)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{u}_{z,pq} = [ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_z)_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{u}_z)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \tilde{u}_{z,pq} \\ + \sigma(\tilde{R}_T * \tilde{\theta})_{pq}]_{\perp}, \end{aligned} \quad (4.116)$$

$$\partial_t \tilde{\theta}_{pq} = ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{\theta})_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{\theta})_{pq} + \tilde{u}_{z,pq} - k_{pq}^2(\tilde{\mu} * \tilde{\theta})_{pq}, \quad (4.117)$$

La integración temporal de este y todos los sistemas de ecuaciones utilizados en este trabajo se realiza mediante un algoritmo de Runge-Kutta–Cash–Karp de quinto orden con control de paso adaptativo [60], que es flexible y robusto, y será discutido en más detalle en la Sección 4.7.

4.6. Ecuaciones WOB discretizadas en la celda triangular

Para las simulaciones sobre la celda triangular definiremos primero los campos sobre una celda cuadrada $[0, L] \times [0, L]$ con CC homogéneas para u_x , u_z , θ y χ sobre los cuatro lados, y por lo tanto periódicas. La celda triangular de la Sección 3.2.12 se obtiene dividiendo el cuadrado a lo largo de su diagonal principal $z = x$, lo que deja dos triángulos rectángulos, la *celda real* para $z > x$ y la *celda imagen* para $z < x$ (ver figura 4.1).

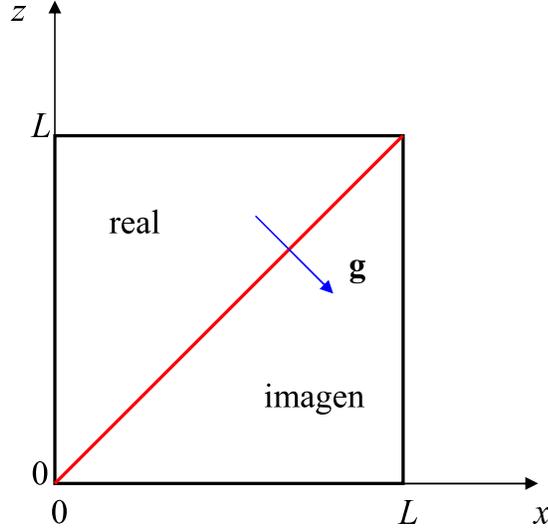


Figura 4.1: Obtención de las celdas triangulares real e imagen por división de la celda cuadrada a lo largo de su diagonal principal $z = x$ (en rojo). El campo gravitatorio \mathbf{g} se muestra en azul.

Para imponer CC sobre la base de la celda real procedemos por el método de las imágenes. Los campos u_x^i , u_z^i , θ^i y χ^i en la celda imagen se obtienen por reflexión de los campos u_x^r , u_z^r , θ^r y χ^r en la celda real, respecto de la diagonal principal, en la forma

$$u_x^i(x, z) = u_z^r(z, x), \quad (4.118)$$

$$u_z^i(x, z) = u_x^r(z, x), \quad (4.119)$$

$$\theta^i(x, z) = -\theta^r(z, x). \quad (4.120)$$

$$\chi^i(x, z) = -\chi^r(z, x). \quad (4.121)$$

Nótese que la imagen del punto (x, z) por reflexión respecto de la diagonal principal, es el punto (z, x) . La regla de reflexión para los campos θ y χ hace que estos sean *impares* respecto de la diagonal principal, garantizando CC homogéneas sobre ella.

La regla de reflexión para el campo de velocidades \mathbf{u} hace que su componente \mathbf{u}_\perp perpendicular a la diagonal principal se refleje de manera *impar* respecto a ella, dando también CC homogéneas; mientras que la componente \mathbf{u}_\parallel tangencial a la diagonal principal resulta *par* respecto a ella (ver figura 4.2) y por lo tanto no queda especificada, pero su derivada normal $\partial_\perp \mathbf{u}_\parallel$ resulta *impar* y debe anularse; esto genera CC *free-slip* para \mathbf{u} sobre la diagonal principal, que es la base de la celda triangular real.

La aparición de CC *free-slip* para el campo de velocidades en la base de la celda triangular puede parecer simplemente un artificio del método de las

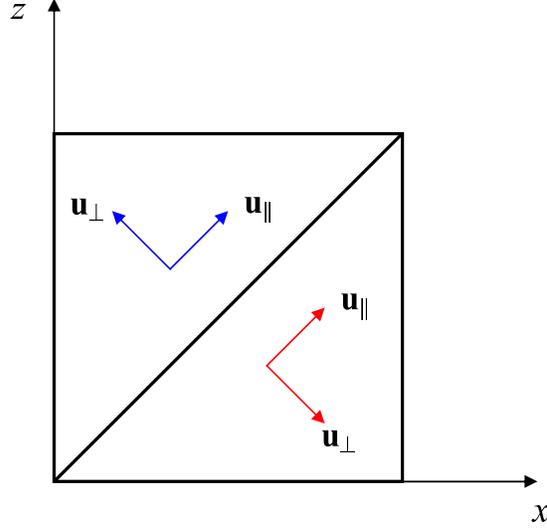


Figura 4.2: Simetrías obedecidas por el campo de velocidad por reflexión de la celda triangular real a la imagen.

imágenes, y por lo tanto indeseable. Sin embargo debemos recordar que la base del destilador solar es una batea con agua, por lo que la base de nuestra celda, lejos de ser una pared rígida, es una interfase fluido-fluido, donde esta CC resulta mucho más razonable [77] que una CC *no-slip*.

Notemos que dado un campo vectorial \mathbf{u} que pueda escribirse como el rotor de un campo escalar (como ser \mathbf{f}_\perp de la Sección 4.4), en la forma $\mathbf{u} = (-\partial_z, \partial_x) u$, la regla de reflexión impondrá

$$\partial_z u^i(x, z) = -\partial_x u^r(z, x), \quad (4.122)$$

$$\partial_x u^i(x, z) = -\partial_z u^r(z, x), \quad (4.123)$$

y por lo tanto

$$u^i(x, z) = -u^r(z, x), \quad (4.124)$$

es decir, el escalar u debe ser *impar* respecto a la diagonal principal, como los campos θ y χ .

Para convección húmeda en la celda triangular no hay una versión simplificada de las ecuaciones WOB (3.109)–(3.112), de modo que partiremos de ellas. Los pasos para construir la versión discretizada de las ecuaciones WOB sobre la grilla conjugada en la celda cuadrada son completamente análogos a los seguidos en la Sección 4.5, de modo que mostraremos simplemente el

resultado final

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{u}_{x,pq} = & \left[ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_x)_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{u}_x)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \tilde{u}_{x,pq} \right. \\ & \left. + e_x \sigma [(\tilde{R}_T \odot (\tilde{\tau} + \tilde{\theta}))_{pq} + (\tilde{R}_M \odot (\tilde{\tau} + \tilde{\chi}))_{pq}] \right]_{\perp}, \end{aligned} \quad (4.125)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{u}_{z,pq} = & \left[ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_z)_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{u}_z)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \tilde{u}_{z,pq} \right. \\ & \left. + e_z \sigma [(\tilde{R}_T \odot (\tilde{\tau} + \tilde{\theta}))_{pq} + (\tilde{R}_M \odot (\tilde{\tau} + \tilde{\chi}))_{pq}] \right]_{\perp}, \end{aligned} \quad (4.126)$$

$$\partial_t \tilde{\theta}_{pq} = ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * (\tilde{\tau} + \tilde{\theta}))_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * (\tilde{\tau} + \tilde{\theta}))_{pq} - k^2(\tilde{\mu} \odot \tilde{\theta})_{pq}, \quad (4.127)$$

$$\partial_t \tilde{\chi}_{pq} = ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * (\tilde{\tau} + \tilde{\chi}))_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * (\tilde{\tau} + \tilde{\chi}))_{pq} - \lambda k_{pq}^2 \tilde{\chi}_{pq}. \quad (4.128)$$

Aquí el campo gravitacional apunta hacia la base de la celda triangular de acuerdo a (3.141) (ver figura 4.1), lo que se toma en cuenta definiendo

$$e_x = \mathbf{g} \cdot \mathbf{e}_x = -\frac{g}{\sqrt{2}}, \quad e_z = \mathbf{g} \cdot \mathbf{e}_z = \frac{g}{\sqrt{2}}. \quad (4.129)$$

En estas ecuaciones también interviene la solución adimensional de la ecuación de Laplace τ , definida en la Sección 3.2.7, que corresponde a CC

$$\tau(0, z) = \tau(x, H) = -\frac{1}{2}, \quad \tau(x, x) = \frac{1}{2}. \quad (4.130)$$

Para construirla primero definimos el campo auxiliar

$$\tau' = \tau - \frac{1}{2}, \quad (4.131)$$

que satisface las CC

$$\tau'(0, z) = \tau'(x, H) = -1, \quad \tau'(x, x) = 0. \quad (4.132)$$

Extendido antisimétricamente a la celda cuadrada, este campo satisface las CC

$$\tau'(0, z) = \tau'(x, H) = -1, \quad \tau'(H, z) = \tau'(x, 0) = 1. \quad (4.133)$$

Esta solución de la ecuación de Laplace sobre la celda cuadrada se construye ajustando a las CC la solución general (B.73) por los métodos del Apéndice B.2. Discretizada sobre la grilla conjugada, esta solución tiene la forma

$$\tilde{\tau}'_{pq} = \frac{2}{H} [\bar{S}_{p0}(\delta_{0q} - c_{pq}) - (\delta_{p0} - \bar{c}_{pq})S_{0q}], \quad (4.134)$$

donde, en términos de las matrices definidas en el Apéndice B.2, c_{pq} y \bar{c}_{pq} son

$$c_{pq} = \frac{C_{pq}}{\sum_{q'=-N/2}^{N/2} C_{pq'}} \quad (4.135)$$

y su transpuesta, respectivamente. Este campo se antitransforma a la grilla directa, se le suma $\frac{1}{2}$, y se transforma nuevamente a la grilla conjugada para obtener $\tilde{\tau}_{pq}$. Por supuesto esta operación se realiza una única vez, durante la inicialización de las simulaciones.

El procedimiento a seguir en el caso de las ecuaciones (3.142)–(3.144) para convección seca en la celda triangular es el mismo, salvo que ya no tenemos la complicación introducida por los campos dicotómicos, y el campo de concentración χ desaparece. Se obtiene entonces

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{u}_{x,pq} = & \left[ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_x)_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{u}_x)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \tilde{u}_{x,pq} \right. \\ & \left. + e_x \sigma R_T(\tilde{\tau}_{pq} + \tilde{\theta}_{pq}) \right]_{\perp}, \end{aligned} \quad (4.136)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{u}_{z,pq} = & \left[ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * \tilde{u}_z)_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * \tilde{u}_z)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \tilde{u}_{z,pq} \right. \\ & \left. + e_z \sigma R_T(\tilde{\tau}_{pq} + \tilde{\theta}_{pq}) \right]_{\perp}, \end{aligned} \quad (4.137)$$

$$\partial_t \tilde{\theta}_{pq} = ik_{x,pq}(\tilde{u}_x * (\tilde{\tau} + \tilde{\theta}))_{pq} + ik_{z,pq}(\tilde{u}_z * (\tilde{\tau} + \tilde{\theta}))_{pq} - \mu k^2 \tilde{\theta}_{pq}. \quad (4.138)$$

Para finalizar, queremos recordar una vez más que los campos u_x , u_z , θ y χ sólo tienen significado físico evaluados en la celda triangular real. Su extensión a la celda cuadrada introduce una carga computacional extra, en principio en un factor 2. Sin embargo, ello nos permite aplicar a este caso el método pseudoespectral aquí expuesto, y en particular hacer uso de FFT, por lo que consideramos que está plenamente justificado.

4.7. Integración temporal

Los sistemas de ecuaciones WOB discretizadas sobre la grilla conjugada obtenidos en las Secciones 4.5 y 4.6 son sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas, cuyo número puede superar los dos millones para las grillas más finas del Capítulo 6. Es evidente que el algoritmo de integración temporal a utilizar debe ser estable, robusto y presentar una aceptable relación entre precisión y costo computacional.

Basados en experiencias previas con problemas similares [78], era sabido que un algoritmo de Runge–Kutta–Cash–Karp de quinto orden con control de paso adaptativo [60] resulta adecuado para este tipo de problemas. Se disponía además de códigos fuente ya depurados y extensivamente probados, contruidos a partir de los expuestos en [60], y utilizables en el presente problema con modificaciones mínimas. Por estos motivos seleccionamos este método para la integración temporal de todos los sistemas de ecuaciones utilizados en este trabajo.

Es de destacar que una de las consecuencias favorables de elegir un integrador de paso adaptativo (además de optimizar el tiempo de integración), es que la condición de Courant–Friedrichs–Lewy [79, 80] (CFL) en general no necesita ser impuesta por separado. Si bien se monitorea su cumplimiento a lo largo de la integración, salvo escasas excepciones el mismo integrador

CAPÍTULO 4. MÉTODO PSEUDOESPECTRAL

mantiene el paso de integración por debajo del impuesto por la condición CFL, simplemente por exigir su convergencia.

Capítulo 5

Convección seca

En este capítulo mostraremos los resultados de aplicar el método pseudo-espectral del Capítulo 4 a las ecuaciones de Oberbeck–Boussinesq para convección seca en una celda rectangular (3.137)–(3.139) y triangular (3.142)–(3.144). Debemos destacar nuevamente que, si bien estos problemas son de interés por sí mismos, no son parte de los objetivos de esta Tesis, y sólo los hemos utilizado como pasos de prueba para los códigos numéricos desarrollados.

5.1. Celda rectangular

El sistema de ecuaciones WOB (3.137)–(3.139) para convección seca en una celda rectangular con CC laterales periódicas corresponde a una de las formulaciones clásicas del problema de convección de Rayleigh–Bénard [56], para el cual se dispone de fuentes relativamente abundantes con las que comparar nuestros resultados. Además su planteo es mucho más simple que otras versiones de las ecuaciones WOB que trataremos en esta Tesis. Por ello fue seleccionado para las primeras pruebas del método pseudoespectral desarrollado en el Capítulo 4, y será el único, salvo el de convección húmeda en la celda triangular, que expondremos con cierto detalle.

5.1.1. Resolución temporal

Uno de los detalles que se debió atender al comenzar las simulaciones fue el de la precisión a exigir al integrador temporal de la Sección 4.7, ya que los tiempos de integración crecen rápidamente al aumentar ésta. En este aspecto, y considerando que algunas partes del modelo termodinámico subyacente (ver Apéndice A) no garantizan resultados más precisos que algunos puntos porcentuales (por ejemplo la linealización óptima de la concentración de saturación del Apéndice A.14), que hay aspectos del sistema real que ni siquiera hemos intentado modelar (como la coalescencia de gotas o los efectos

de interdifusión), y que la aproximación de Boussinesq en sí misma introduce fuentes adicionales de inexactitud, no pareció tener sentido ser demasiado exigentes.

Se debe tener en mente además que el mismo hecho de discretizar los operadores diferenciales espaciales sobre una grilla introduce un mínimo de error. La resolución espectral completa del método pseudoespectral garantiza que dicho error será despreciable para números de onda menores que la frecuencia de Nyquist, pero no más allá: ningún campo, ni sus derivadas espaciales, estará mejor representado que su desarrollo en serie de Fourier truncado a ese número de onda.

Sin embargo la consideración de más peso es el propósito de las simulaciones a realizar. Este no es obtener una descripción detallada del flujo al nivel de reproducir resultados experimentales equivalentes en cuanto a que los campos de velocidad, temperatura y concentración sean los mismos en todo punto y a todo tiempo para una simulación y un experimento con exactamente las mismas condiciones iniciales y de contorno; más allá de que no se dispone de los datos experimentales correspondientes, tratándose de un sistema muy probablemente caótico ello sería imposible en principio. Nuestro objetivo es, en cambio, reproducir correctamente la termohidrodinámica del sistema real en un sentido *estadístico*, en el sentido de que cantidades como el coeficiente de transferencia térmica, el rendimiento de agua destilada o los espectros de energía cinética correspondan a los de un sistema real equivalente.

Realizamos entonces una breve serie de experimentos numéricos con convección seca en la celda cuadrada, para diversos valores de la temperatura de referencia \bar{T} y de la diferencia de temperatura ΔT , exigiendo al integrador temporal precisiones relativas de 10^{-2} a 10^{-5} . Notablemente, por debajo de 10^{-3} no se observaron cambios apreciables en la evolución de los campos (velocidad y temperatura, en este caso) sobre intervalos de tiempo razonables (de unos pocos segundos) partiendo de la misma condición inicial. Adoptamos entonces una precisión relativa de 10^{-3} como nuestro standard para la integración temporal.

5.1.2. Resolución espacial

Es sabido que una grilla subresuelta, es decir con un espaciado demasiado grande, puede producir serias inexactitudes en la integración de ecuaciones hidrodinámicas, e incluso desestabilizar la integración temporal debido al crecimiento de modos espúreos, como ocurre en el caso de la inestabilidad en damero (*checkerboard instability*) (ver por ejemplo [81]). Por otro lado una grilla demasiado fina desperdicia esfuerzo de cómputo. Es difícil predecir cuál será el espaciado óptimo para una grilla, salvo el criterio de que la capa límite debe estar bien resuelta. Sin embargo, experimentos numéricos mostraron una propiedad notable del método numérico desarrollado: ante

una grilla subdimensionada, si bien se manifiesta la inestabilidad en damero, que aparece como una “pixelación” notable en el campo de temperaturas, ésta se mantiene acotada (*quenched*); ejemplos de este comportamiento serán mostrados en la Sección 5.1.4. La integración continua, y aunque los resultados sean cuantitativamente inexactos, siguen siendo cualitativamente útiles.

Este comportamiento nos permitió determinar por ensayo y error el tamaño de grilla, y desarrollar una comprensión aproximada del necesario en cada caso, el que resulta siempre compatible con el criterio de resolver adecuadamente la capa límite. Los tamaños de grilla utilizados en cada caso se mostrarán en la Sección 5.1.4.

5.1.3. Escalas y parámetros

Falta aún determinar un tamaño razonable para la celda rectangular en la que correremos las simulaciones. Por simplicidad, y ya que resulta de un tamaño aproximado al del destilador real, elegimos una celda de $H = 0,5$ m de altura y $L = 1,0$ m de ancho, es decir con relación de aspecto $\Gamma = 2$. El sistema (3.137)–(3.139) será resuelto sobre una grilla rectangular $N \times (N/2)$. Las CC para velocidad y temperatura serán homogéneas de Dirichlet en la base y el techo, y periódicas libres en los lados. Para el campo de velocidad esto corresponde a CC *no-slip* en la base y el techo, y para el campo de temperatura a CC de contacto térmico perfecto.

Los valores de los parámetros que intervienen en las ecuaciones (3.137)–(3.139) se eligieron por simplicidad como los de aire seco a 25°C de temperatura, y son [39]

$$\sigma = 0,713, \quad (5.1)$$

$$\nu = 1,511 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \quad (5.2)$$

$$\kappa = 2,1192 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \quad (5.3)$$

$$\alpha = 3,43 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}, \quad (5.4)$$

$$\mu = 1, \quad (5.5)$$

$$g = 9,8 \text{ m s}^{-2}. \quad (5.6)$$

El número de Rayleigh térmico R_T , el tiempo característico t_c , y la velocidad característica v_c resultan entonces

$$R_T = 1,3122 \times 10^7 \Delta T \text{ (K)}, \quad (5.7)$$

$$t_c = 11797 \text{ s}, \quad (5.8)$$

$$v_c = 4,2384 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-1}. \quad (5.9)$$

Es importante tener en cuenta que la temperatura de referencia \bar{T} no interviene en las ecuaciones WOB para convección seca salvo a través de los parámetros, donde por simplicidad la consideramos fija. En este caso ésta es

una buena aproximación, ya que las propiedades del aire seco varían lentamente con la temperatura alrededor de los 25°C, y es la práctica usual [56] en el tratamiento de la convección de Rayleigh-Bénard. El único parámetro de control será entonces ΔT , a través del número de Rayleigh R_T .

Debe notarse que el tiempo característico es extremadamente largo (más de tres horas). Sin embargo, este es el tiempo característico de difusión vertical; las escalas de tiempo sobre las que se desarrollará la convección son mucho más cortas, sobre todo a R_T alto. También hay que notar que a diferencias de temperatura razonables los números de Rayleigh serán grandes; para dar una idea, el número de Rayleigh crítico $R_c = 1708$ corresponde a una diferencia de temperatura de sólo $1,3 \times 10^{-4}$ K. Igualmente las escalas de velocidades son muy pequeñas: una velocidad de 1 m s^{-1} es de aproximadamente $2,5 \times 10^4$ en unidades adimensionales.

5.1.4. Resultados

Las figuras 5.1 a 5.6 muestran los campos de temperatura y velocidad para convección seca en la celda rectangular, para una selección de los casos simulados. El tiempo al que mostramos los campos corresponde aproximadamente, en cada caso, al necesario para la entrada en régimen del sistema, es decir para que desaparezca la memoria de las condiciones iniciales (CI). Por claridad, en todas las figuras el campo de velocidades se muestra sobre una grilla de a lo sumo 64×32 puntos, decimando la grilla original si ésta es mayor. El campo de temperatura, en cambio, se muestra a resolución completa. Debe notarse que el campo de temperatura mostrado es $\tau + \theta$, para facilitar la interpretación. La escala de colores va de azul ($\tau + \theta = -\frac{1}{2}$, fría) a rojo ($\tau + \theta = \frac{1}{2}$, caliente), y no es uniforme sino logarítmica tanto en sentido creciente como decreciente a partir de $\tau + \theta = 0$; esta elección pretende facilitar la visualización de las estructuras convectivas que involucran temperaturas apenas por encima y por debajo de cero, que con una escala lineal resultarían imperceptibles. Los ejes coordenados se hallan etiquetados en unidades adimensionales, normalizadas al alto de la celda.

En todos los casos las CI corresponden a velocidad nula y temperatura igual al perfil conductivo (3.130). A este campo de temperatura se le adiciona (sólo en las CI) un campo de fluctuaciones Gaussianas de amplitud similar a la del ruido térmico [44] a fin de aleatorizar la desestabilización del perfil conductivo, y evitar que los patrones de convección que se formen dependan de algún sesgo numérico sistemático.

La fenomenología observada es interesante y se corresponde con la conocida [56, 82, 83, 84, 85].

Para $R_T < R_c$ el estado conductivo es estable. Para una celda lateralmente infinita y CC no-slip la estabilidad debería perderse a $R_T = R_c$, pero es sabido que el umbral de inestabilidad crece para celdas finitas a medida que la razón de aspecto disminuye, y por otra parte para inestabilidades