

Modelización y Simulación Numérica de un Destilador Solar

Ivana Carola Ramos

*Tesis presentada para acceder al grado de
Doctor en Física*

*Facultad de Matemática, Astronomía y Física
Universidad Nacional de Córdoba*

*Director: Dr. Carlos Bruno Briozzo
Codirector: Dra. Irene Judith De Paul*



MMXV



Esta obra está licenciada bajo la Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual
2.5 Argentina. Para ver una copia de esta licencia, visita
<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/2.5/ar/>

*A Serafín, mi hijo, mi amor,
desde el principio mi motivación e inspiración
para trabajar cada día y llegar al objetivo final.
Gracias por haber hecho que este trabajo
haya sido realizado con todo el amor que te tengo.*

Agradecimientos

El primer y más grande de los agradecimientos para el Dr. Carlos Briozzo, director de este trabajo, por su paciencia, dedicación, apoyo y entusiasmo en todo momento. Gracias por ayudarme y ocuparse, más de la cuenta muchas veces. También a su Sra. y sus hijos, gracias y sepan disculpar el tiempo robado estos años.

A la Dra. Irene De Paul, quien desde Salta brindó su apoyo y ayuda para lo que fuese necesario, gracias por preocuparse por mi y alentarme a seguir y no bajar los brazos.

A mi hijo Serafín que tenía no más de dos meses cuando empecé el doctorado y aprendió a tener paciencia, aguantar mis momentos de preocupación, escuchar ensayos de seminarios y muchas veces escuchar la lectura de un texto científico en lugar de un cuento para niños.

A mis padres, Eva y Alberto, y a mis hermanas por aliviar mi tarea de madre para poder estudiar. Un agradecimiento muy especial a mi mamá por su ayuda, su apoyo y por acompañarme siempre.

A mi comisión de doctorado y al personal de postgrado de la Facultad de Matemática, Astronomía y Física.

A mis compañeros de oficina (231–232), Alba, Lucas, Pablo, Nirvana, Ana, Carla, Leo, Fede, Ivan, Tabatha, Andrés, Marco y Mauricio, por la buena onda, por prestar su PC para realizar simulaciones, por arreglarme la PC, por alguna palabra de ánimo de vez en cuando, por el café, por cuidarlo a Serafín quizás alguna vez, por simplemente escuchar a veces, muchas gracias chicos, hicieron que la tarea sea más amena.

A mi gran amiga Fernanda, por escucharme y por su paciencia durante todo el doctorado.

A todos los que de alguna forma ayudaron, MUCHAS GRACIAS...

Índice general

1. Introducción	1
2. Análisis de datos experimentales	5
2.1. Experimentos y análisis inicial	5
2.1.1. Dispositivo y protocolo experimental	5
2.1.2. Análisis inicial de datos	8
2.2. Reanálisis de los datos	10
2.2.1. EEMD de las series de h y r	12
2.2.2. Dependencia de h con r	15
2.2.3. Reconstrucción de la dinámica de h	20
2.2.4. Espectros de Hilbert de h	26
2.3. Recapitulación	37
3. Modelo termohidrodinámico	39
3.1. Modelo termodinámico	40
3.1.1. Presión de saturación	41
3.1.2. Fracción molar y factor de aumento	41
3.1.3. Mezclas y factor de compresibilidad	41
3.1.4. Mixing ratio y humedad específica	42
3.1.5. Densidad	42
3.1.6. Coeficiente de expansión térmica	43
3.1.7. Coeficiente de expansión másico	43
3.1.8. Capacidad calórica específica a presión constante	44
3.1.9. Viscosidad cinemática y dinámica	44
3.1.10. Conductividad y difusividad térmica	46
3.1.11. Difusividad de masa	46
3.2. Modelo hidrodinámico	46
3.2.1. Transporte de materia	47
3.2.2. Transporte de momento	48
3.2.3. Transporte de calor	49
3.2.4. Transporte de concentración	49
3.2.5. El sistema de ecuaciones	50
3.2.6. La aproximación de Boussinesq	50

ÍNDICE GENERAL

3.2.7. Perfiles de referencia	52
3.2.8. Desarrollo alrededor de los perfiles de referencia	55
3.2.9. Ecuaciones WOB adimensionales	56
3.2.10. Ecuaciones WOB bajo y sobre la saturación	58
3.2.11. Celda rectangular	61
3.2.12. Celda triangular	62
4. Método Pseudoespectral	63
4.1. Grillas, discretización y DFT	64
4.2. Discretización de operadores	67
4.3. Convoluciones y la regla 2/3	69
4.4. Ecuación de Poisson	70
4.4.1. Celda rectangular	73
4.4.2. Celda triangular	76
4.4.3. Costo computacional	79
4.5. Ecuaciones WOB, celda rectangular	79
4.6. Ecuaciones WOB, celda triangular	81
4.7. Integración temporal	85
5. Convección seca	87
5.1. Celda rectangular	87
5.1.1. Resolución temporal	87
5.1.2. Resolución espacial	88
5.1.3. Escalas y parámetros	89
5.1.4. Resultados	90
5.2. Celda cuadrada	97
5.3. Celda triangular	100
6. Convección húmeda	105
6.1. Celda rectangular	105
6.2. Celda triangular	108
6.2.1. Ciclo diario experimental	108
6.2.2. Ecuaciones, CC y resolución	110
6.2.3. Escalas y parámetros	111
6.2.4. Condiciones iniciales	112
6.2.5. Fenomenología	113
6.2.6. Flujo térmico y de masa	127
6.2.7. Números de Nusselt y Sherwood	136
6.2.8. Espectros de energía cinética	140
7. Discusión y perspectivas	143
7.1. Discusión de los resultados	143
7.1.1. Análisis de datos	143
7.1.2. Simulación numérica	144

7.2. Crítica del modelo y el método	146
7.2.1. Modelo termodinámico	146
7.2.2. Modelo hidrodinámico	147
7.2.3. Método pseudoespectral	147
7.3. Perspectivas futuras	148
A. Modelo termodinámico	151
A.1. Presión de saturación	151
A.2. Fracción molar y factor de aumento	153
A.3. Mezclas y factor de compresibilidad	154
A.4. Mixing ratio	156
A.5. Humedad específica	156
A.6. Densidad	157
A.6.1. Aire seco y vapor de agua	157
A.6.2. Aire húmedo	158
A.6.3. Aire mojado	159
A.6.4. ρ a través de la curva de saturación	159
A.6.5. ρ en función de la concentración	159
A.7. Coeficiente de expansión térmica	160
A.7.1. Aire seco	160
A.7.2. Aire húmedo	161
A.7.3. Aire mojado	161
A.7.4. α a través de la curva de saturación	164
A.7.5. α en función de la concentración	164
A.8. Coeficiente de expansión másico	164
A.8.1. Aire húmedo	165
A.8.2. Aire mojado	166
A.8.3. β a través de la curva de saturación	166
A.9. Capacidad calórica específica	167
A.9.1. Aire seco	167
A.9.2. Vapor de agua	168
A.9.3. Aire húmedo	169
A.9.4. Agua líquida	170
A.9.5. Aire mojado	170
A.9.6. c_p a través de la curva de saturación	172
A.9.7. c_p en función de la concentración	173
A.9.8. Calor latente específico del agua	173
A.10. Viscosidad cinemática	174
A.10.1. Generalidades	174
A.10.2. Aire seco	176
A.10.3. Vapor de agua	176
A.10.4. Aire húmedo	176
A.10.5. Aire mojado	179
A.10.6. ν a través de la curva de saturación	182

ÍNDICE GENERAL

A.10.7. ν en función de la concentración	182
A.10.8. Una aproximación relevante	182
A.10.9. Selección del modelo	183
A.11. Conductividad térmica	184
A.11.1. Aire seco	185
A.11.2. Vapor de agua	185
A.11.3. Aire húmedo	186
A.11.4. Aire mojado	188
A.11.5. K a través de la curva de saturación	188
A.11.6. K en función de la concentración	188
A.11.7. Difusividad térmica	189
A.12. Difusividad de masa	189
A.13. Coeficientes en el estado de referencia	190
A.14. Linealización de la humedad específica	191
B. Ecuación de Laplace	197
B.1. Celda rectangular	197
B.2. Celda cuadrada	204

Índice de figuras

2.1. Esquema del destilador	6
2.2. Fotografía del destilador	7
2.3. Series de temperaturas	9
2.4. Series de h	10
2.5. EMD de h , configuración 1	13
2.6. EMD de h , configuración 2	14
2.7. h rápido y lento, configuración 1	15
2.8. h rápido y lento, configuración 2	16
2.9. EMD de r , configuración 1	17
2.10. r rápido y lento, configuración 1	18
2.11. EMD de r , configuración 2	19
2.12. r rápido y lento, configuración 2	20
2.13. h vs. r , configuración 1	21
2.14. h vs. r , configuración 2	21
2.15. h vs. r_s , configuración 1	22
2.16. h vs. r_s , configuración 2	23
2.17. Reconstrucción de r_s , h , h_s y h_f , configuración 1	25
2.18. Reconstrucción de r_s , h , h_s y h_f , configuración 2	26
2.19. Reconstrucción de IMF 1 a 6, configuración 1	27
2.20. Reconstrucción de IMF 1 a 6, configuración 2	28
2.21. Reconstrucción normalizada de IMF 1 a 6, configuración 1	29
2.22. Reconstrucción normalizada de IMF 1 a 6, configuración 2	30
2.23. Espectro de Fourier de h , configuración 1	31
2.24. Espectro de Fourier de h , configuración 2	31
2.25. Espectros de Hilbert de h , configuración 1	32
2.26. Espectros de Hilbert de h , configuración 2	34
2.27. IAS de h , configuración 1	35
2.28. IAS de h , configuración 2	36
4.1. Celda triangular real e imagen	82
4.2. Simetrías de la velocidad	83
5.1. Convección seca, celda rectangular, $R_T = 5R_c$	91

ÍNDICE DE FIGURAS

5.2. Convección seca, celda rectangular, $R_T = 50R_c$	92
5.3. Convección seca, celda rectangular, $R_T = 500R_c$	93
5.4. Convección seca, celda rectangular, $R_T = 5000R_c$	94
5.5. Convección seca, celda rectangular, $R_T = 50000R_c$	95
5.6. Convección seca, celda rectangular, $R_T = 500000R_c$	96
5.7. Convección seca, celda rectangular, grilla subdimensionada	97
5.8. Convección seca, celda cuadrada, $R_T = 5R_c$	98
5.9. Convección seca, celda cuadrada, $R_T = 5000R_c$	99
5.10. Convección seca, celda cuadrada, $R_T = 500000R_c$	100
5.11. Convección seca, celda triangular, $R_T = 5R_c$	101
5.12. Convección seca, celda triangular, $R_T = 500000R_c$	102
5.13. Solución de la ecuación de Laplace, celda triangular	103
6.1. Convección húmeda, celda rectangular, $\bar{T} = 18^\circ\text{C}$	106
6.2. Convección seca y húmeda, celda rectangular, $\bar{T} = 54^\circ\text{C}$	107
6.3. Ciclo diario de \bar{T} y ΔT	109
6.4. Inicio de onvección humeda, $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$	112
6.5. Celda triangular húmeda, $T = 18^\circ\text{C}$	115
6.6. Celda triangular húmeda, $T = 20^\circ\text{C}$	116
6.7. Celda triangular húmeda, $T = 25^\circ\text{C}$	117
6.8. Celda triangular húmeda, $T = 30^\circ\text{C}$	118
6.9. Celda triangular húmeda, $T = 35^\circ\text{C}$	119
6.10. Celda triangular húmeda, $T = 40^\circ\text{C}$	120
6.11. Celda triangular húmeda, $T = 45^\circ\text{C}$	121
6.12. Celda triangular húmeda, $T = 48,2^\circ\text{C}$	122
6.13. Celda triangular húmeda, $T = 50^\circ\text{C}$	123
6.14. Celda triangular húmeda, $T = 52^\circ\text{C}$	124
6.15. Celda triangular húmeda, $T = 52,6^\circ\text{C}$	125
6.16. Celda triangular húmeda, $T = 53,5^\circ\text{C}$	126
6.17. Flujo térmico numérico a $\bar{T} = 20^\circ\text{C}$	128
6.18. Rendimiento numérico a $\bar{T} = 20^\circ\text{C}$	129
6.19. Flujo térmico numérico a $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$	130
6.20. Rendimiento numérico a $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$	131
6.21. Flujo térmico numérico a $\bar{T} = 52^\circ\text{C}$	132
6.22. Rendimiento numérico a $\bar{T} = 52^\circ\text{C}$	133
6.23. Flujo térmico numérico vs. experimental	135
6.24. Rendimiento numérico vs. experimental	136
6.25. Número de Nusselt	138
6.26. Número de Sherwood	139
6.27. Espectros de energía, $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$	141
A.1. Modelos de p_s	152
A.2. Factor de aumento	154
A.3. Factor de compresibilidad	155

ÍNDICE DE FIGURAS

A.4. Modelo de c_p para aire seco	167
A.5. Modelo de c_p para vapor	169
A.6. Modelo de l_v para agua	173
A.7. Modelo de η para aire seco	175
A.8. Modelo de η para vapor	177
A.9. Modelo de K para aire seco	184
A.10. Modelo de K para vapor	186
A.11. Humedad específica de saturación q_s	192
A.12. Linealización óptima de q_s	194

ÍNDICE DE FIGURAS

Índice de tablas

6.1. Parámetros de control	110
A.1. Coeficientes del modelo de $p_s(T)$	152
A.2. Coeficientes del modelo de $f(T, p)$	154
A.3. Coeficientes del modelo de $z_m(N_v, T)$	155
A.4. q bajo y sobre la saturación	157
A.5. Coeficientes del modelo de $c_{p,d}$	167
A.6. Coeficientes del modelo de $c_{p,v}$	169
A.7. Coeficientes del modelo de η_d	175
A.8. Coeficientes del modelo de η_v	177
A.9. Coeficientes del modelo de K_d	184
A.10. Coeficientes del modelo de K_v	186
A.11. Coeficientes del modelo de D	189

ÍNDICE DE TABLAS

Capítulo 1

Introducción

El noroeste argentino (NOA), junto con otras varias regiones del país, es hogar de un número de comunidades relativamente aisladas, sin fácil acceso a transporte terrestre o fuentes de energía tradicionales. Un problema particularmente crítico es la escasez de agua apta para consumo humano, ya que muchas veces la escasa agua disponible en esta zona árida presenta minerales disueltos que la hacen no potable. La solución obvia es la destilación del agua disponible; sin embargo esto es muy costoso en términos energéticos, tanto que el costo energético de bombear un litro de agua desde una fuente subterránea (aún de apreciable profundidad), resulta despreciable frente al de destilarla por evaporación. Por ello se impone el uso de una fuente de energía abundante, barata y disponible *in situ*. Siendo el NOA una región con gran insolación, el uso de la energía solar resulta el más adecuado.

Existen muchos diseños de destiladores solares, pero en esencia todos ellos se reducen a una batea de fondo oscuro y cubierta transparente. Llenada parcialmente de agua, la radiación solar calienta el fondo de la batea, lo que a su vez calienta el agua. El transporte de calor hacia la superficie libre de ésta se produce por conducción y, principalmente, por convección. El enfriamiento de la superficie libre se produce principalmente por evaporación, y el transporte de aire saturado hacia la tapa de la batea por convección. En la cubierta, relativamente fría por su contacto con la atmósfera circundante, se produce la condensación del vapor; el agua condensada se desliza a lo largo de la cubierta inclinada hacia canaletas ubicadas a los lados de la batea, donde es recogida por goteo.

Resulta evidente de lo anterior que, como sistema físico, un destilador solar es un sistema termodinámico abierto, fuera de equilibrio y complejo en su dinámica: el régimen de transporte convectivo en el aire, la eficiencia de la condensación en la cubierta, las condiciones de contorno impuestas por los laterales de la batea y la temperatura del aire circundante, etc., influyen en su rendimiento. Es entonces difícil *a priori* decidir si un diseño dado será eficiente, o cómo modificar uno existente para aumentar su eficiencia.

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

Sin embargo, por motivos obvios deseáramos maximizar la eficiencia manteniendo a la vez un diseño simple y económico.

A este respecto la construcción de modelos experimentales resulta crucial, ya que permiten estudiar la influencia de diferentes aspectos de diseño sobre el rendimiento, en un ambiente controlado con escasos factores de confusión. Hace ya varios años se construyó en la Universidad Nacional de Salta (UNSa) un modelo experimental de destilador solar de batea, el cual permite simular las condiciones de funcionamiento de campo controlando la temperatura del agua de la batea, y midiendo a la vez varios parámetros de interés como la temperatura del agua, la temperatura interna y externa del vidrio de la cubierta, la temperatura ambiente y el rendimiento de agua destilada. También puede cambiarse la geometría de la cubierta, a fin de estudiar la influencia de distintos ángulos de inclinación de la misma.

Con este modelo se han llevado a cabo desde entonces numerosos experimentos, tanto en condiciones de funcionamiento estático como simulando el ciclo diario de calentamiento y enfriamiento real. Fue sobre estos últimos que la autora de la presente Tesis realizó su Trabajo Final de Licenciatura, participando tanto en la adquisición de datos como en el posterior análisis de los mismos.

El análisis de los datos recogidos en esas experiencias mostró que, llegado a un cierto punto del ciclo de calentamiento, el destilador variaba de manera notoria y relativamente súbita su comportamiento, lo que se manifestaba como una intensificación apreciable de la transferencia térmica y del rendimiento. Se llegó a la conclusión de que se estaba en presencia de dos regímenes de funcionamiento diferentes, en uno de los cuales la transferencia térmica convectiva sobre la cubierta resulta apreciablemente mayor que la esperada.

Experiencias de visualización de flujos mostraron que el ambiente en el interior del destilador era una mezcla de aire, vapor y gotas de agua, sometida a una fuerte turbulencia de origen convectivo, sugiriendo que los resultados obtenidos estaban relacionados probablemente a procesos de tipo caótico producidos por el flujo turbulento del aire y vapor en el interior del destilador. Esta hipótesis fue parcialmente confirmada por un subsecuente análisis de series temporales del coeficiente de transferencia térmica, que mostró que sus exponentes de Lyapunov tomaban alternadamente valores positivos y negativos, confirmando tentativamente el carácter caótico del funcionamiento del destilador. La disponibilidad de datos comparables para dos geometrías diferentes de la cubierta permitió también determinar que la misma tenía una influencia apreciable sobre este fenómeno.

Sin embargo, estos resultados no eran para nada suficientes para establecer criterios de control que permitieran optimizar el funcionamiento de un destilador haciendo uso de las características caóticas, concluyéndose que para ello era necesario un estudio más detallado tanto de los datos disponibles como de la dinámica interna del destilador. En esta Tesis pretendemos

justamente llevar a cabo dicho estudio.

Comenzaremos en el Capítulo 2 repasando los resultados experimentales y su primer análisis, para luego realizar un nuevo análisis más detallado mediante técnicas especialmente adaptadas al estudio de series temporales no estacionarias y provenientes de una dinámica no-lineal. Concluiremos que la comprensión de la fenomenología requiere el desarrollo de un modelo termohidrodinámico del interior del destilador, lo bastante detallado para capturar los aspectos esenciales de su dinámica, y la simulación numérica del mismo, plan que procederemos a desarrollar en los Capítulos siguientes.

En el Capítulo 3 desarrollaremos primero un modelo termodinámico de la mezcla de aire, vapor y gotitas de agua que llena el destilador, y calcularemos las funciones y coeficientes termodinámicos necesarios para describir los procesos que allí se desarrollan, los que en todos los casos serán considerados isobáricos. A continuación procederemos a desarrollar un modelo hidrodinámico basado en el anterior, el que incluirá el efecto fundamental de la transición de fase agua-vapor sobre los procesos de transporte. Dada la complejidad del problema, decidiremos formular sólo un modelo 2D.

En el Capítulo 4 desarrollaremos el método de resolución numérica de las ecuaciones hidrodinámicas. Optaremos por un método pseudoespectral basado en la transformada de Fourier. Su adaptación a las condiciones de contorno no-libres del problema a tratar, y el desarrollo de un resolvidor ultra-rápido para la ecuación de Poisson asociada, serán expuestos en detalle, así como la definición de las grillas directa y conjugada, la discretización de operadores y el tratamiento de una geometría triangular.

En el Capítulo 5 pondremos a prueba diversos aspectos del método pseudoespectral en el terreno mucho más simple de la convección seca. Procederemos aumentando gradualmente la dificultad desde el clásico problema de convección de Rayleigh–Bénard en una celda rectangular lateralmente periódica, pasando por una celda cuadrada cerrada, hasta la celda triangular que modela la geometría del destilador. Podremos así en cada caso validar secciones separadas del código en un caso donde, al menos en principio, tenemos resultados conocidos con los que comparar.

En el Capítulo 6 acoplaremos al código hidrodinámico el modelo termodinámico desarrollado en el Capítulo 3, procediendo al modelado de convección húmeda. Nuevamente procederemos en orden creciente de complejidad desde una celda rectangular hasta la celda triangular. En ese punto procederemos a simular en detalle el funcionamiento del modelo experimental de destilador en diversos momentos a lo largo del ciclo diario de calentamiento. Estudiaremos la fenomenología y la compararemos con observaciones directas correspondientes a una de las geometrías ensayadas experimentalmente. También calcularemos el flujo térmico y el rendimiento de destilado y los compararemos con los correspondientes resultados experimentales. Finalmente expondremos brevemente resultados sobre los números de Nusselt y de Sherwood y sobre el espectro de energía cinética.

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

Concluiremos en el Capítulo 7 haciendo una crítica de los aspectos tanto positivos como negativos del desarrollo realizado, discutiendo cuáles son los logros alcanzados y cuáles son las mejoras posibles, y concluiremos exponiendo algunas perspectivas de desarrollos futuros.

Debido a su extensión y aridez, y en bien de una lectura más tersa y amena de esta Tesis, los detalles técnicos y matemáticos tanto del modelo termodinámico como de algunas partes del método pseudoespectral han sido removidos del texto principal y son expuestos en los Apéndices A y B, respectivamente.

Capítulo 2

Análisis de datos experimentales

En este capítulo presentaremos una breve recapitulación de algunos experimentos realizados con un modelo de laboratorio del destilador solar, describiendo el dispositivo experimental, los protocolos de medición y los conjuntos de datos adquiridos; repasaremos también el análisis de datos inicial realizado sobre dos series experimentales particulares. Estos datos y su primer análisis forman parte de la Tesina de Licenciatura en Física [1] de la autora de la presente Tesis, titulada *Estudio de sistemas dinámicos aplicado a la intensificación de la transferencia térmica caótica en un destilador*.

Posteriormente procederemos a un reanálisis de las mismas series de datos experimentales por métodos que, en nuestra opinión, son más adecuados e informativos para el estudio de series temporales provenientes de fenómenos no-lineales y no-estacionarios.

2.1. Experimentos y análisis inicial

Haremos aquí una revisión de los resultados experimentales y el análisis de datos realizado inicialmente [1]. No pretendemos reproducir exhaustivamente lo allí realizado, sino solamente exponer aquellas partes que serán necesarias en lo que sigue. Primero se presentará una descripción del dispositivo experimental y los datos recogidos para luego describir el análisis realizado y sus conclusiones.

2.1.1. Dispositivo y protocolo experimental

El destilador solar tipo batea con cubierta a dos aguas, es un dispositivo de uso extendido en el ámbito de las energías renovables para suministrar agua potable a poblaciones aisladas que cuentan con agua no apta para consumo humano. Las características de su comportamiento térmico-

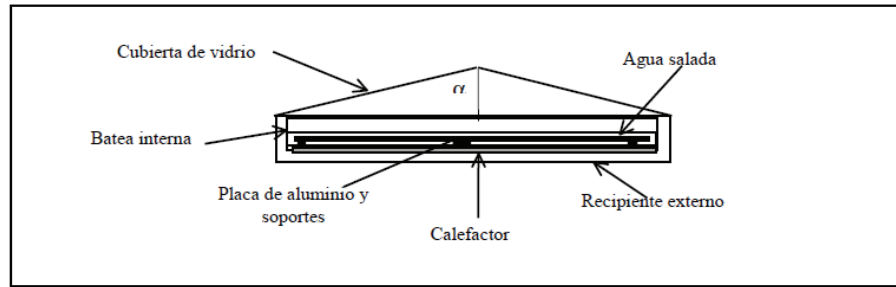


Figura 2.1: Esquema del modelo de laboratorio de destilador utilizado en los experimentos. (Tomado de [1].)

fluidodinámico eran poco conocidas y los modelos computacionales desarrollados para predecir su rendimiento [2, 3] no reproducían bien los resultados experimentales. Esto dio origen a una serie de trabajos orientados a lograr un más completo conocimiento de los procesos involucrados en su funcionamiento con el fin de optimizar su producción y los modelos predictivos [4]–[20].

Motivado por esta situación, se construyó un modelo de laboratorio a escala real cuya geometría y condiciones térmicas de funcionamiento pueden variarse de manera controlada, procurando determinar la influencia de los distintos parámetros que intervienen en el proceso sobre la productividad del destilador. Un esquema del modelo se muestra en la figura 2.1, y una fotografía del mismo en la figura 2.2.

En la serie de experimentos que nos concierne se ensayaron dos geometrías, con la pendiente de la cubierta formando un ángulo α (ver figura 2.1) de 20° y 45° , variando la temperatura del agua en la batea en el rango normal de trabajo de un destilador solar en condiciones de campo. Se midió el volumen destilado y la temperatura del agua y de la superficie interna y externa de la cubierta en varios puntos empleando termocuplas. Se establecieron correlaciones de productividad, número de Rayleigh, número de Nusselt y coeficiente de transferencia térmica con la temperatura del agua. Los ensayos se realizaron con distintas condiciones de calentamiento, tanto estacionario como periódico simulando el ciclo diario de calentamiento solar.

Experiencias de visualización de flujos [21, 22] mostraron que el ambiente en el interior del destilador es una mezcla de aire, vapor y gotas de agua, sometida a una fuerte turbulencia de origen convectivo. La figura 2.2, tomada de una de dichas experiencias, permite apreciar una columna ascendente y turbulenta de aire sobresaturado y gotitas de agua sobre el centro de la batea.

Los resultados obtenidos con calentamiento periódico permitieron no sólo caracterizar el funcionamiento en estado estacionario sino que mostraron un

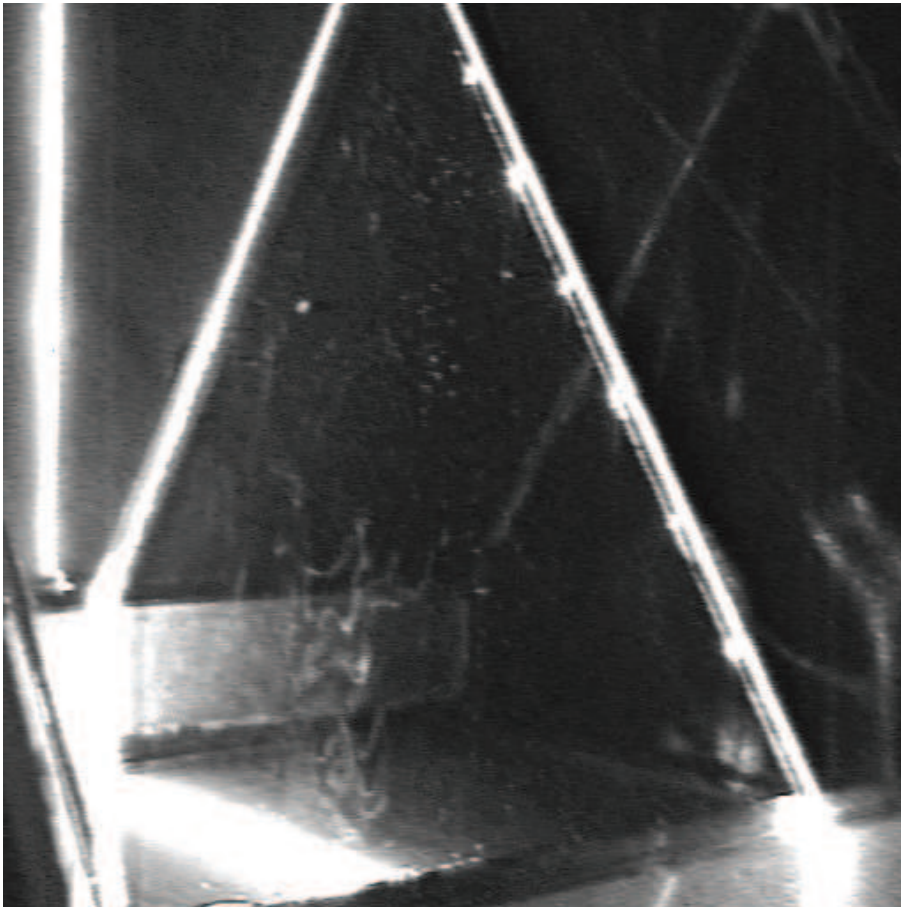


Figura 2.2: Fotografía del modelo de laboratorio de destilador utilizado en los experimentos, tomada de una experiencia de visualización de flujo. Nótese la columna sobresaturada ascendente sobre el centro de la batea. (Tomado de [1].)

fenómeno hasta ese momento no observado, cual es la intensificación de la transferencia térmica convectiva que se manifiesta en valores significativamente altos del coeficiente de transferencia térmica h . Estos primeros resultados sugirieron que el origen de este fenómeno se encuentra en procesos de tipo caótico producidos por el flujo turbulento del aire y vapor en el interior de destilador.

Sin embargo para confirmar estos resultados y poder relacionar la intensificación de la transferencia térmica a parámetros constructivos, se requería caracterizar los procesos caóticos a partir del análisis de las series temporales medidas.

2.1.2. Análisis inicial de datos

En [1] se realizó un extensivo análisis de los datos experimentales correspondientes a dos geometrías con pendientes del techo de la cubierta formando ángulos de 20° y 45° (de ahora en más configuración 1 y configuración 2, respectivamente). Presentaremos aquí sólo un breve resumen de los resultados obtenidos, que no pretende ser completo.

La temperatura del agua de la batea se varió en el rango normal de trabajo de un destilador a lo largo del ciclo diario de calentamiento solar, durante cinco días consecutivos, aunque también se realizaron ensayos con calentamiento estacionario. Los principales datos recogidos fueron volumen destilado (a intervalos de 10 min), y temperatura del agua y de la superficie interna y externa de la cubierta en dos puntos (mediante termocuplas, a intervalos de 5 min).

Para cada configuración se calculó el coeficiente de transferencia térmica h como

$$h = \frac{K}{e} \frac{T_{\text{int}} - T_{\text{ext}}}{T_{\text{vapor}} - T_{\text{int}}}, \quad (2.1)$$

donde K es la conductividad térmica del vidrio de la cubierta, e su espesor, T_{int} y T_{ext} las temperaturas interna y externa del vidrio, respectivamente, y T_{vapor} la temperatura media del fluido en el interior, la cual se calcula como un promedio entre la temperatura del agua y la temperatura media del techo.

La figura 2.3 muestra el comportamiento térmico del destilador (temperatura del vidrio por dentro y por fuera, temperatura del agua y temperatura ambiente) para ambas configuraciones. En primer lugar se puede observar la repetibilidad de las secuencias diarias de medidas. La diferencia más notable entre los resultados para una y otra serie es que para la configuración 1 el agua alcanza mayor temperatura máxima que para la configuración 2.

La evolución temporal de h se muestra en la figura 2.4, y evidencia que el máximo no coincide exactamente con la hora de mayor temperatura del agua (existe un pequeño lapso de tiempo de diferencia entre estos máximos), que en la experiencia es la hora de mayor producción del destilador. Este

2.1. EXPERIMENTOS Y ANÁLISIS INICIAL

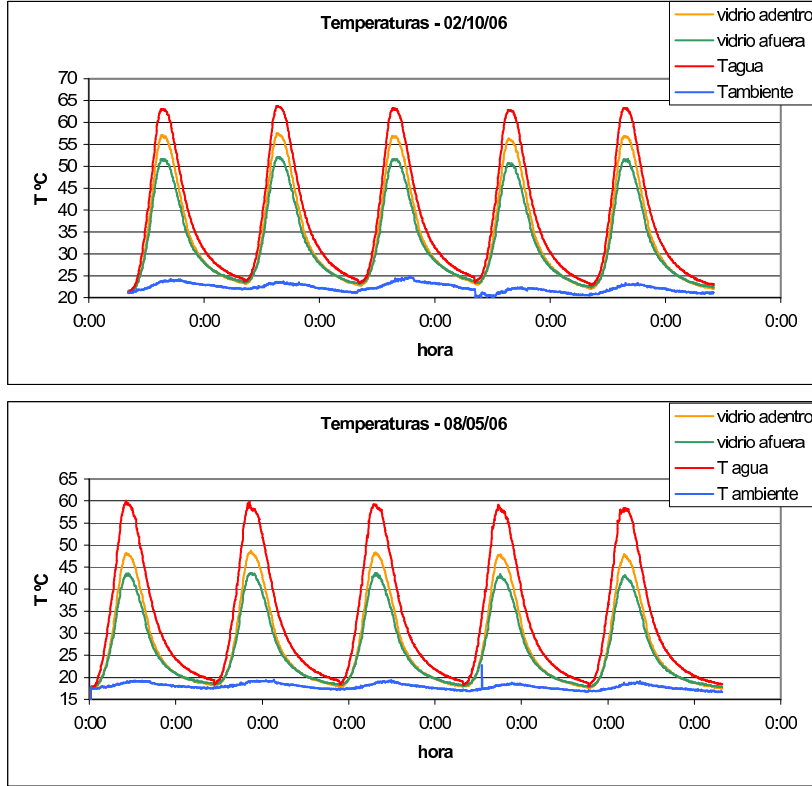


Figura 2.3: Series temporales de temperaturas para las configuraciones 1 (arriba) y 2 (abajo). (Tomado de [1].)

comportamiento se repite para las dos geometrías ensayadas, a lo largo de toda la semana. Además es notable la diferencia de alturas entre los máximos de ambas series, siendo para la configuración 1 casi el triple que para la 2.

El análisis de Fourier de las series de h (no mostrado aquí, ver figuras 2.23 y 2.24) mostró un espectro donde predominan las frecuencias bajas con contribuciones armónicas de orden superior. El análisis de h en función del parámetro de control

$$r = \frac{R - R_c}{R_c} \quad (2.2)$$

donde R es el número de Rayleigh y R_c su valor crítico (tampoco mostrado aquí, ver figuras 2.13 y 2.14) pareció indicar la presencia de bifurcaciones así como rangos de acumulación y de carencia de valores de h . En la serie correspondiente a los datos de la configuración 1 pareciera haber dos bifurcaciones en tanto que para la configuración 2 sólo parece haber una.

Se calcularon también los exponentes de Lyapunov de h (no mostrados aquí) hallándose que estos no presentaban valores positivos en la configura-

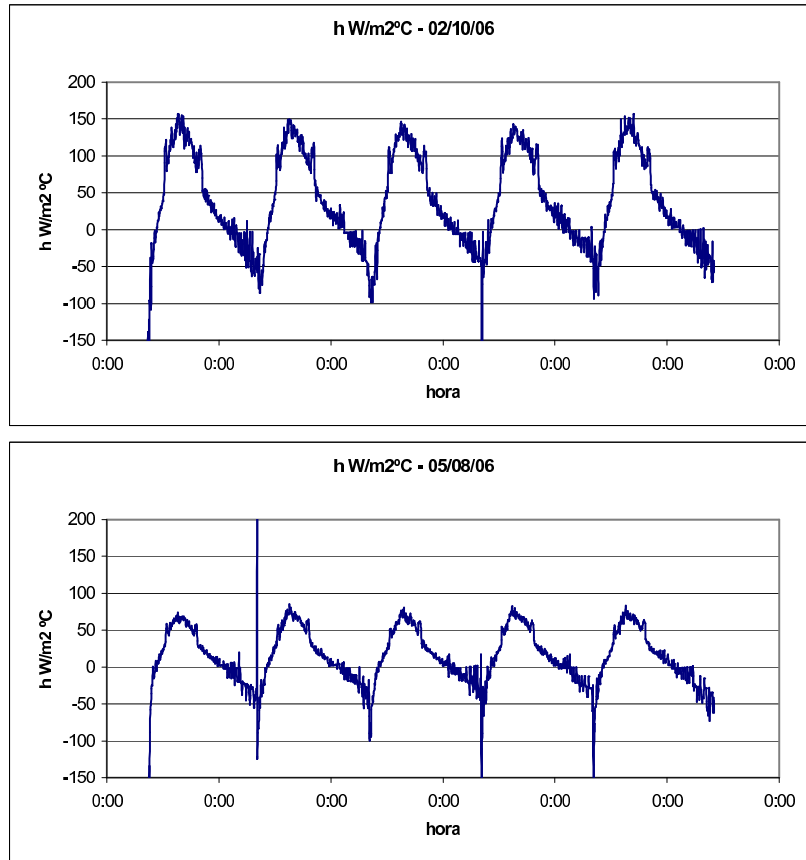


Figura 2.4: Series temporales de coeficiente de transferencia térmica h para las configuraciones 1 (arriba) y 2 (abajo). (Tomado de [1].)

ción 1, pero sí para la configuración 2.

De acuerdo a este análisis se concluyó en esa ocasión [1], que había evidencia suficiente del carácter caótico del funcionamiento del destilador, según los criterios para determinar experimentalmente la presencia de caos [23]. Además se consideró que había evidencia de la influencia de la geometría sobre este comportamiento. Dicha evidencia se juzgó insuficiente, sin embargo, para establecer criterios de control que permitieran optimizar el funcionamiento del destilador haciendo uso de estos fenómenos.

2.2. Reanálisis de los datos experimentales

La primera tarea durante el desarrollo de esta Tesis consistió en reanalizar los datos experimentales disponibles [1], ya que se consideró que estos podían contener información relevante sobre la dinámica interna del destilador, no

accesible mediante las técnicas de análisis empleadas anteriormente.

El análisis de Fourier presupone que el proceso subyacente es lineal y estacionario, y para estos casos proporciona excelentes resultados. Sin embargo cuando tratamos con fenómenos transitorios o intermitentes, o la dinámica subyacente es fundamentalmente no lineal, los resultados, en particular el espectro de potencia de Fourier (FPS), pueden ser confusos. Algunos de estos problemas, en particular el de la no-estacionariedad, pueden aliviarse recurriendo a *windowing* o a descomposiciones en *wavelets*, pero ello sacrifica resolución espectral a cambio de resolución temporal. Dado que las series de h constan de sólo 288 valores diarios, esta característica se consideró indeseable.

Existe sin embargo un método relativamente reciente [24] que puede tratar con señales de amplitud y frecuencia variables sin sacrificar resolución en el dominio de tiempo ni en el de frecuencia, conocido como Descomposición en Modos Empíricos (EMD), y empleado generalmente en asociación con la Transformada de Hilbert–Huang (HHT). Este método ha tenido una aceptación entusiasta en la comunidad de geociencias, donde ha hallado numerosas aplicaciones [25, 26, 27, 28], pero desgraciadamente es aún poco conocido en otros ámbitos. No pretenderemos dar aquí más que una somera idea de su funcionamiento, y recomendamos al lector interesado remitirse al excelente artículo de Huang y colaboradores [24].

Una señal $x(t)$ es una *rotación propia* si ninguno de los máximos locales de $x(t)$ es negativo, ninguno de sus mínimos es positivo, y si su valor medio local es (cercano a) cero. En ese caso se puede construir una *señal conjugada* $y(t)$ como su transformada de Hilbert,

$$y(t) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x(s)}{t-s} ds, \quad (2.3)$$

donde P indica la parte principal de la integral impropia. La *señal compleja* $z(t) = x(t) + iy(t)$ es entonces una función analítica, que descompuesta en forma polar

$$z(t) = A(t)e^{i\theta(t)} \quad (2.4)$$

proporciona inmediatamente una amplitud $A(t)$, una fase $\theta(t)$ y una frecuencia $\omega(t)$ *instantáneas* [29] como

$$A(t) = \sqrt{x^2(t) + y^2(t)}, \quad \theta(t) = \arctan\left(\frac{y(t)}{x(t)}\right), \quad \omega(t) = \frac{d\theta(t)}{dt}. \quad (2.5)$$

Por supuesto la gran mayoría de las señales *no* son rotaciones propias, pero la EMD provee un medio de descomponer una señal en una suma de rotaciones propias, llamadas sus *funciones modales intrínsecas* (IMF) [30], que *sí* lo son. Las IMF son señales oscilatorias de amplitud y frecuencia variables que se construyen por un proceso iterativo partiendo solamente de la señal original.

Presentaremos a continuación un nuevo análisis de las series temporales de coeficiente de transferencia térmica h y parámetro de control r por EMD y HHT. Específicamente el algoritmo que se emplea es el de EMD por Ensemble (EEMD) [31, 32], ya que produce mejores resultados en cuanto a separación de frecuencias y mucho menor mezcla de modos que el análisis por EMD “simple”.

2.2.1. EEMD de las series de h y r

La figura 2.5 muestra la EMD completa de la serie temporal de h correspondiente a la configuración 1, y la figura 2.6 la muestra para la configuración 2. En ambos casos puede apreciarse media docena de modos “rápidos” (IMF 1 a 6), con frecuencias medias que van desde aproximadamente el doble de la frecuencia de Nyquist del muestreo ($0,1 \text{ min}^{-1}$) hasta una frecuencia de alrededor $1/3 \text{ hs}^{-1}$ y amplitudes relativamente pequeñas, y que resumen la dinámica “fluctuante” debida a los diversos modos convectivos de la mezcla aire-vapor en el destilador. Le siguen, para ambas configuraciones, un modo con frecuencia semi-diurna (IMF 7) y uno con frecuencia diurna (IMF 8), de amplitudes mucho mayores, que corresponden a la dinámica global esclavizada a la modulación diurna del parámetro de control, impuesta por el protocolo experimental; estas amplitudes son mayores para la configuración 2. Finalmente se observan tres modos “lentos” de amplitudes intermedias (IMF 9, 10 y 11), que dan cuenta de la dinámica lenta debida a variaciones graduales en los parámetros ambientales no controlados.

En la figura 2.7 se muestra, para la configuración 1, la descomposición de h en una componente “lenta” h_s obtenida sumando las IMF 7 a 11, y una componente “rápida” h_f obtenida sumando las IMF 1 a 6. La componente lenta se muestra superpuesta a la serie experimental, lo que pone de manifiesto las buenas propiedades de separación de escalas temporales de la descomposición. Lo mismo se muestra en la figura 2.8 para la configuración 2.

Las figuras 2.9 y 2.10 son análogas a las figuras 2.5 y 2.7, respectivamente pero corresponden a la serie temporal del parámetro de control r en la configuración 1. Puede parecer extraño que el parámetro de control muestre componentes “rápidas”, pero debe recordarse que r se define en base a la temperatura del agua de la batea y a la temperatura interna del techo del destilador, que por necesidades del diseño experimental no son cantidades directamente controladas. La cantidad bajo control experimental directo es la temperatura de la base de la batea, por lo que r posee su propia dinámica, sólo parcialmente bajo control. De todas maneras, puede apreciarse que la amplitud de las componentes “rápidas” (IMF 1 a 6) e incluso “lentas” (IMF 9 a 12) de r es mucho menor que la de sus componentes semidiurna (IMF 7) y sobre todo diurna (IMF 8), por lo que en principio es correcto considerarlo un parámetro de control. Las figuras 2.11 y 2.12 son análogas para el parámetro de control r correspondiente a la configuración 2, donde se obtienen 11 IMF

2.2. REANÁLISIS DE LOS DATOS

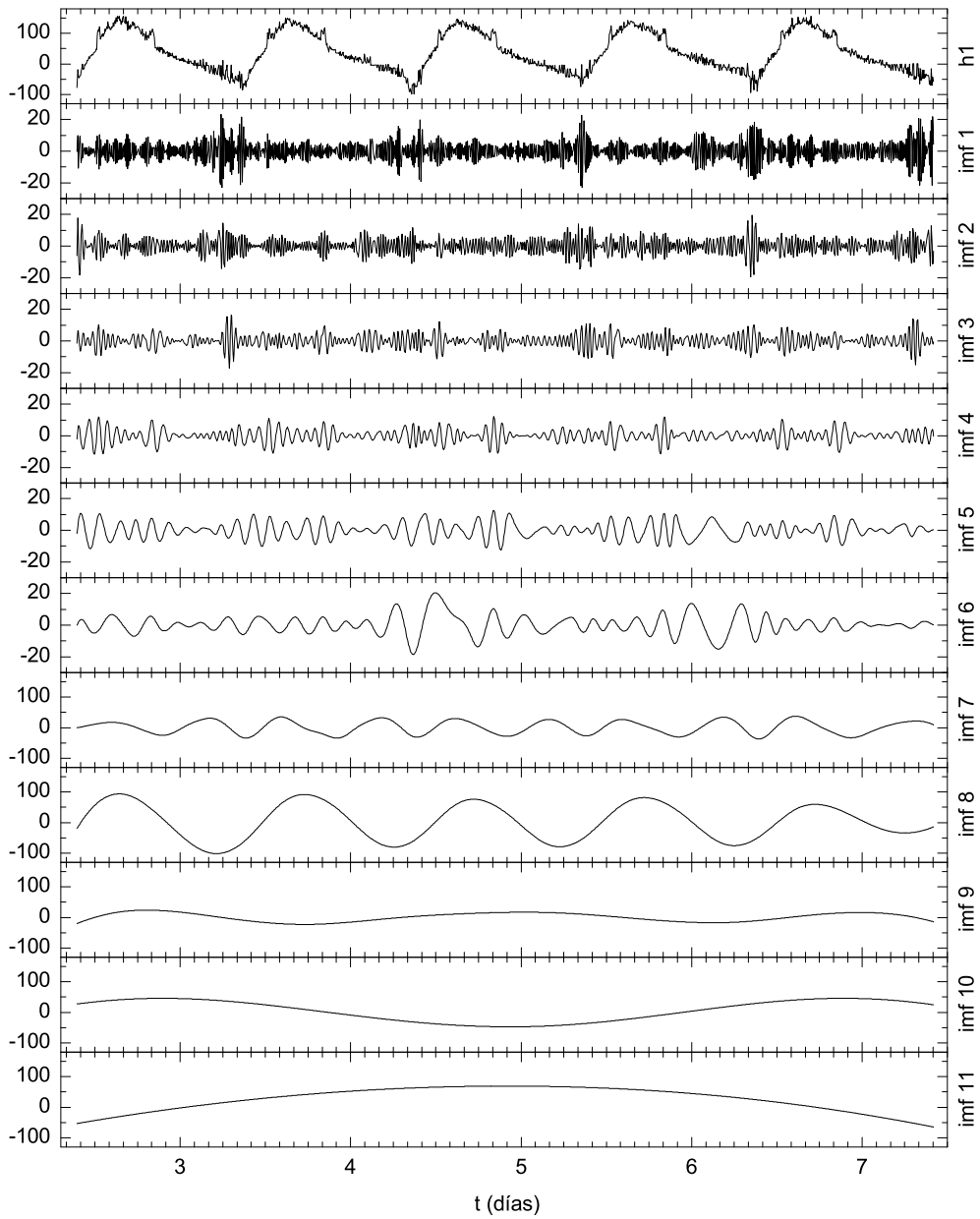


Figura 2.5: EMD para la serie temporal de h de la configuración 1.

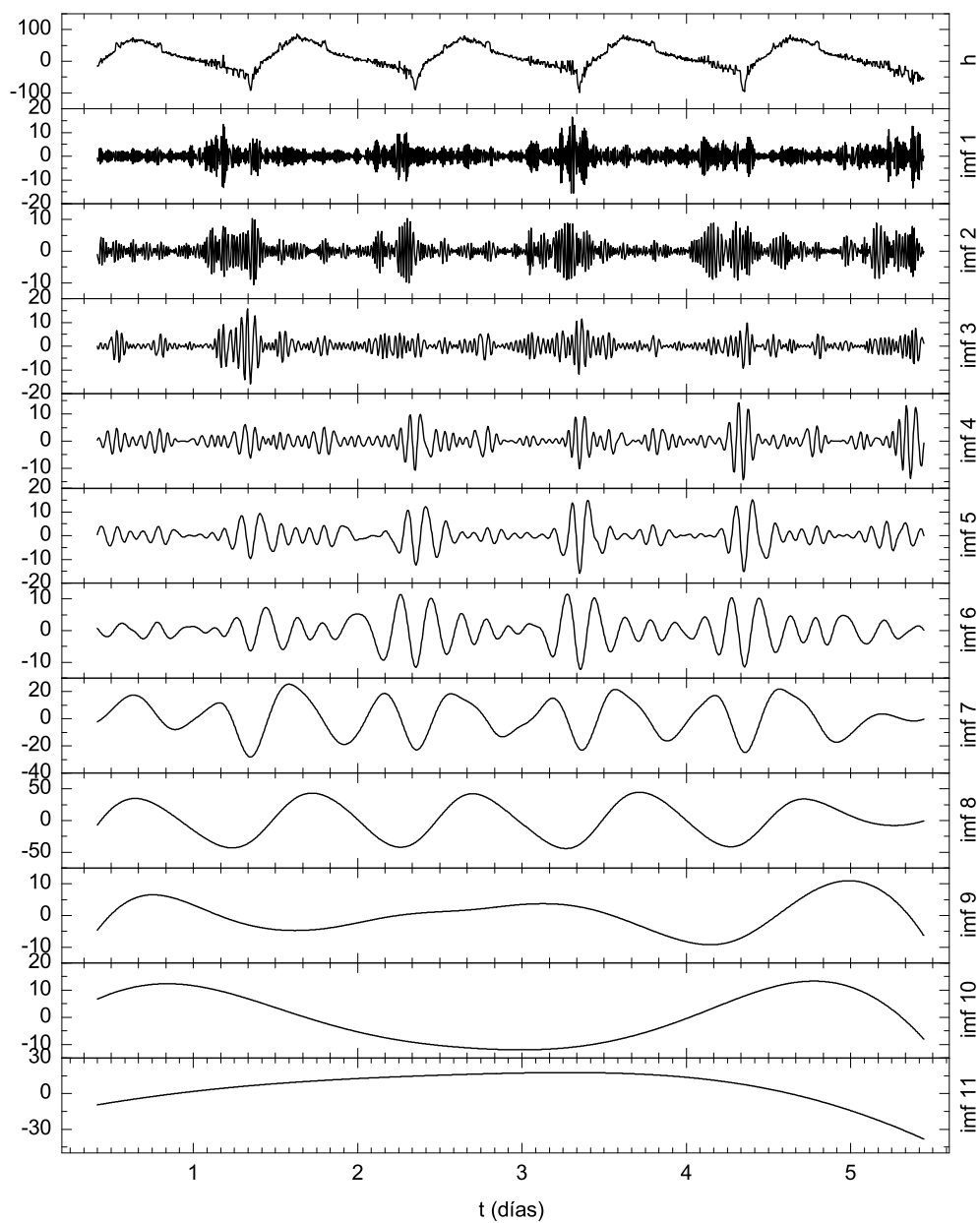


Figura 2.6: EMD para la serie temporal de h de la configuración 2.

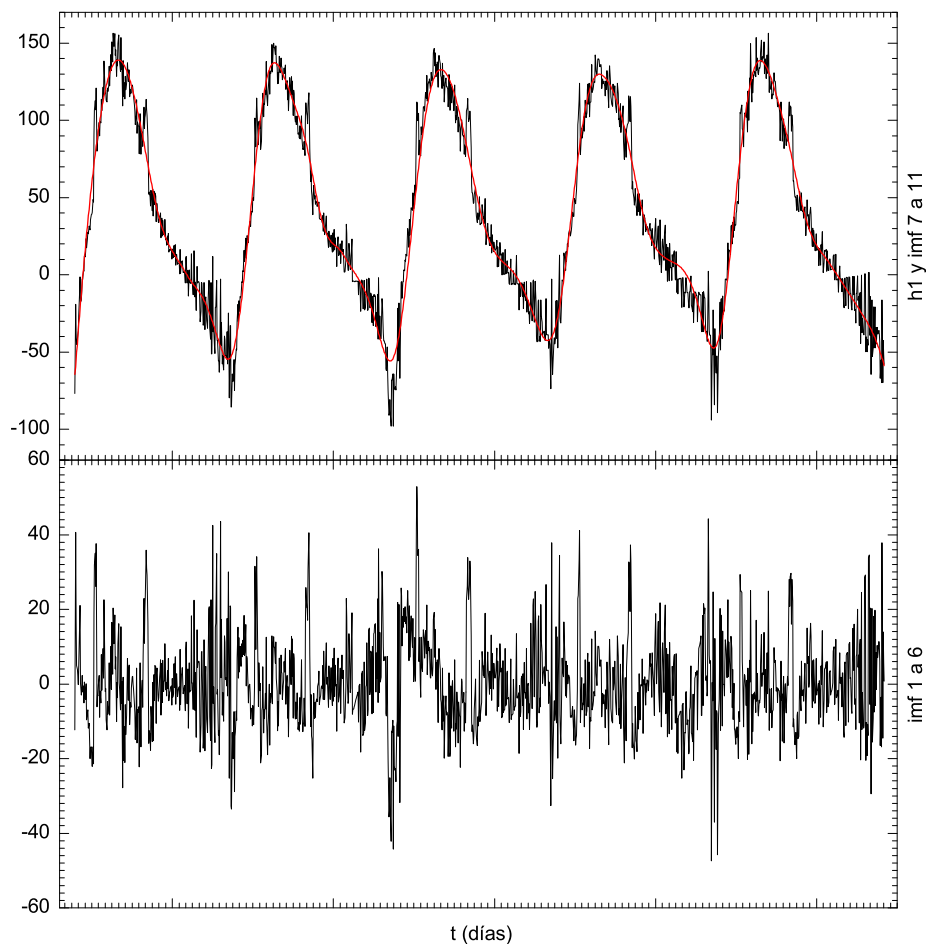


Figura 2.7: Componentes rápida (abajo) y lenta (arriba, en rojo) de h , para la configuración 1. Se muestra también la serie original (arriba, en negro).

y se distinguen entre las componentes “rápidas” las IMF 1 a 5, mientras las IMF 6 a 11 constituyen la dinámica “lenta”.

2.2.2. Dependencia de h con r

Como mencionamos en la Sección 2.1.2 ya se había realizado inicialmente [1] un análisis del comportamiento de h como función del parámetro de control r , el que es reproducido aquí en la figura 2.13 para la serie correspondiente a la configuración 1, y en la figura 2.14 para la configuración 2. El resultado que allí se muestra parece sugerir la presencia de una bifurcación, así como la posible existencia de histéresis.

Sin embargo la EMD de r que se ha obtenido sugiere fuertemente que

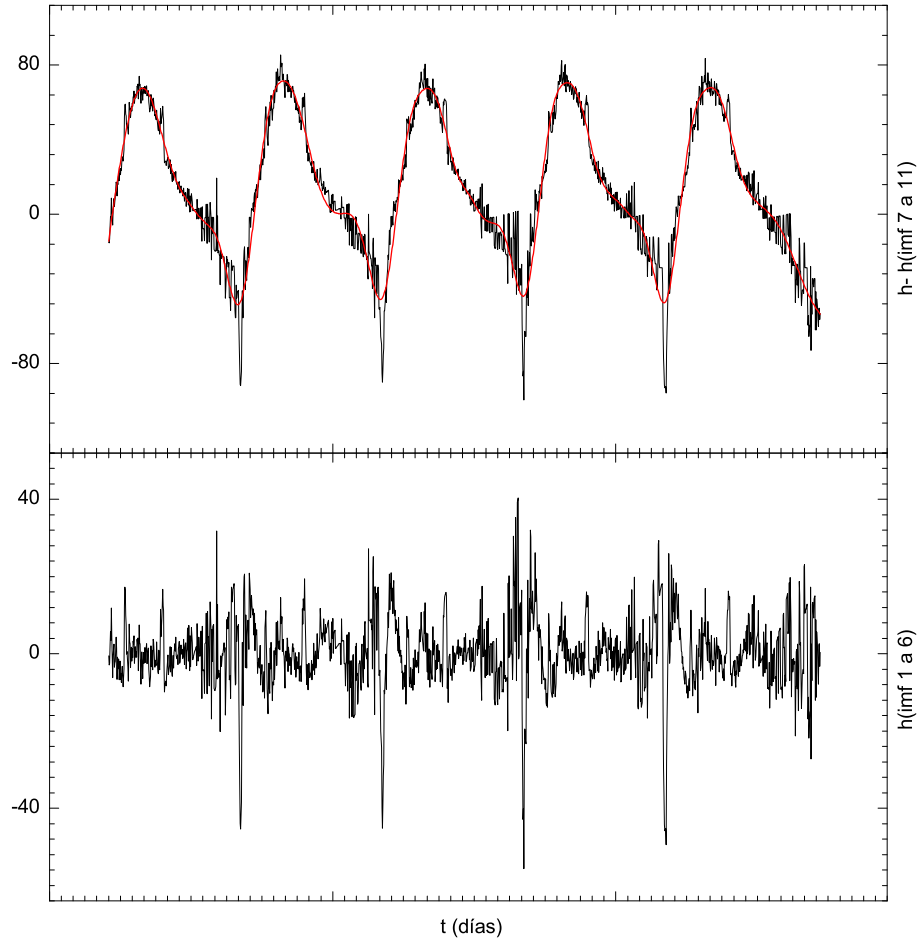


Figura 2.8: Componentes rápida (abajo) y lenta (arriba, en rojo) de h , para la configuración 2. Se muestra también la serie original (arriba, en negro).

deberíamos tomar como parámetro de control sólo la componente “lenta” r_s de r (ver figuras 2.10 y 2.12), ya que las componetes “rápidas” representan esencialmente su contaminación por factores ambientales incontrolables. Similarmente, la EMD realizada para h sugiere la conveniencia de analizar por separado la dependencia de sus componentes “lenta” h_s y “rápida” h_f en función de r_s .

El resultado para la configuración 1 se muestra en la figura 2.15. En el panel superior puede verse que tomar r_s en lugar de r muestra que, si hay bifurcación, hay dos en lugar de una, y sin histéresis. El panel central muestra que la dependencia de h_s con r_s es prácticamente determinista y continua, sin bifurcaciones ni histéresis, consistentemente con la imagen de que la dinámica secular de h está completamente esclavizada al forzamiento.

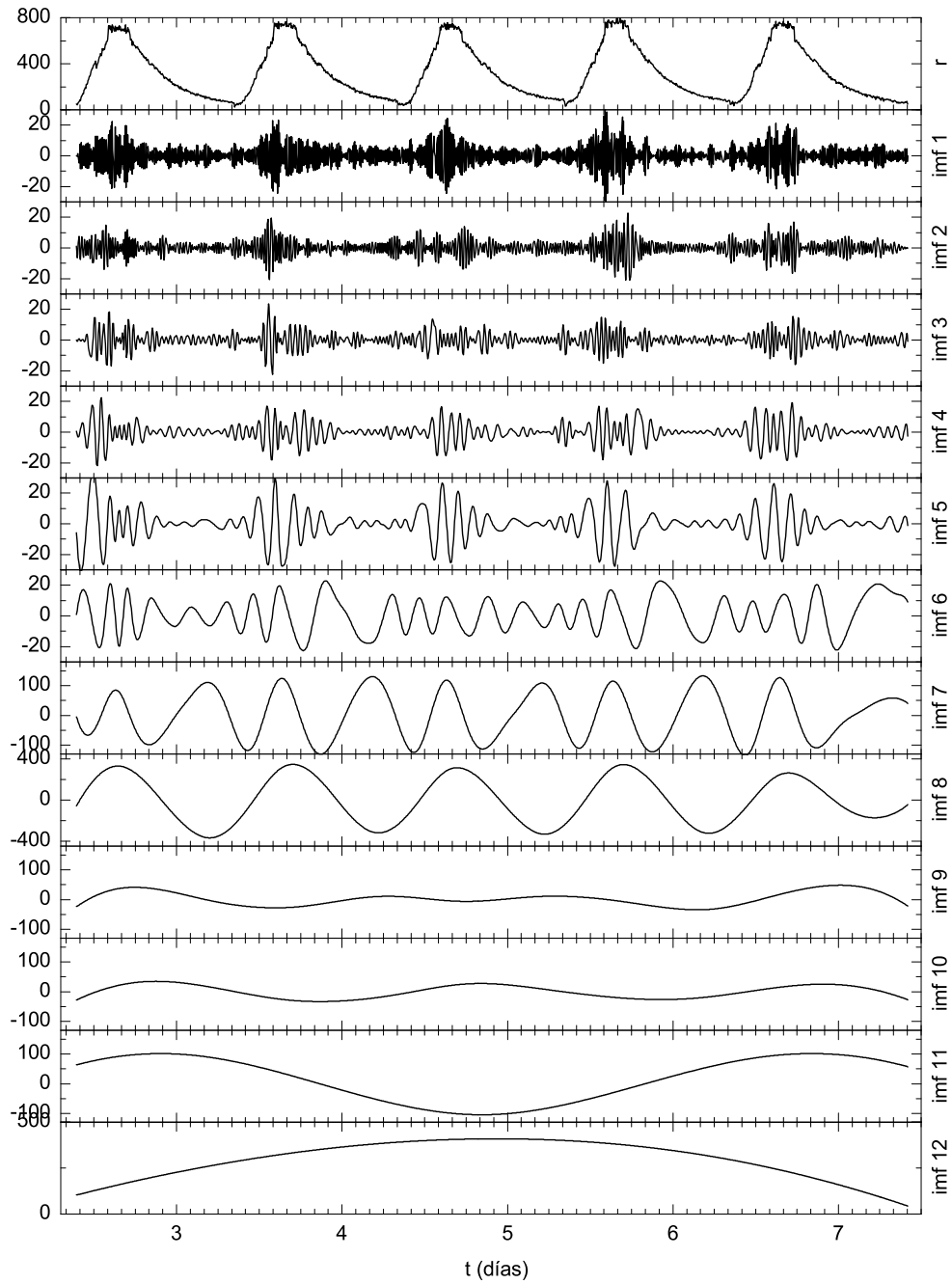


Figura 2.9: EMD para la serie temporal de r , configuración 1.

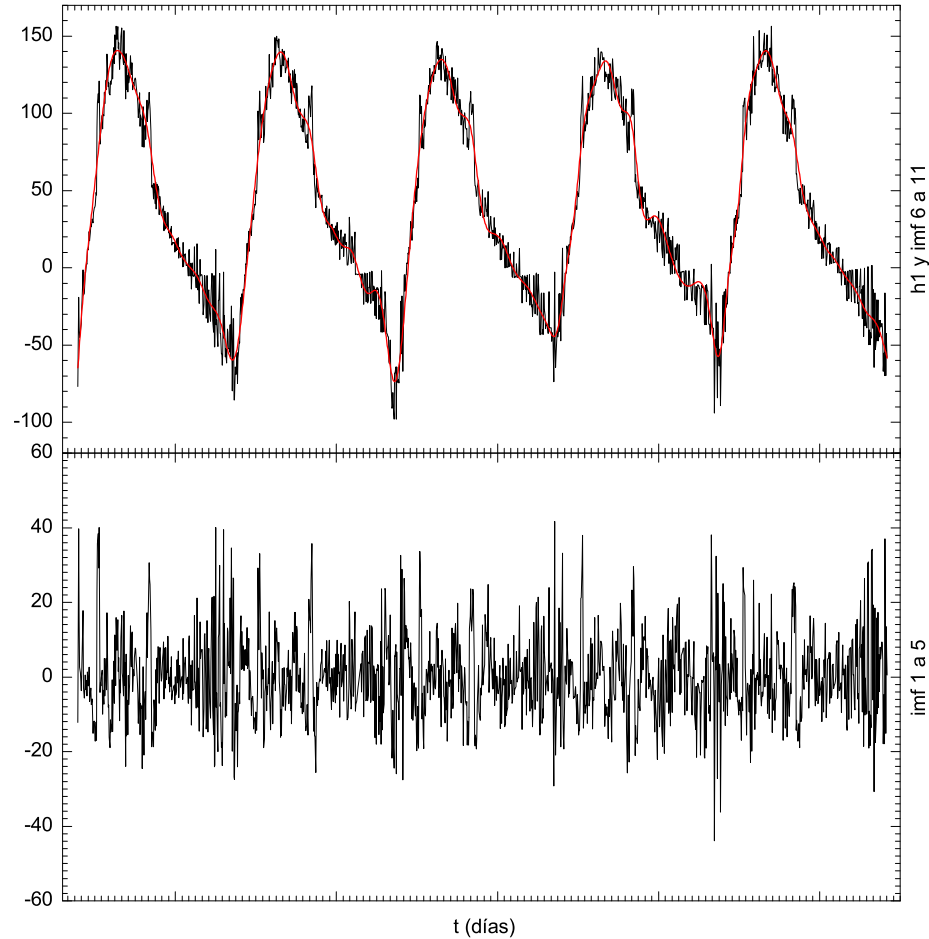


Figura 2.10: Componentes rápida (abajo) y lenta (arriba, en rojo) de r , para la configuración 1. Se muestra también la serie original (arriba, en negro).

Finalmente, el panel inferior muestra que la dinámica rápida de h consiste de dos regímenes bien diferenciados: para casi todos los valores de r , h_f muestra una dispersión de valores relativamente reducida y simétrica alrededor de cero; pero en el rango aproximado $400 < r_s < 450$ sus valores saltan bruscamente al rango $20 < h_f < 40$. Esto induce a sospechar que para ese rango de valores de r_s ocurre un cambio de régimen hidrodinámico en la circulación del aire interior al destilador: el rango de valores “anómalo” de h_f estaría evidenciando el fuerte desorden en la estructura convectiva durante la transición del régimen correspondiente a r pequeño al correspondiente a r grande o viceversa.

Esto mismo se muestra para la configuración 2 en la figura 2.16, donde, aunque también ocurre un salto de los valores de h para valores intermedios

2.2. REANÁLISIS DE LOS DATOS

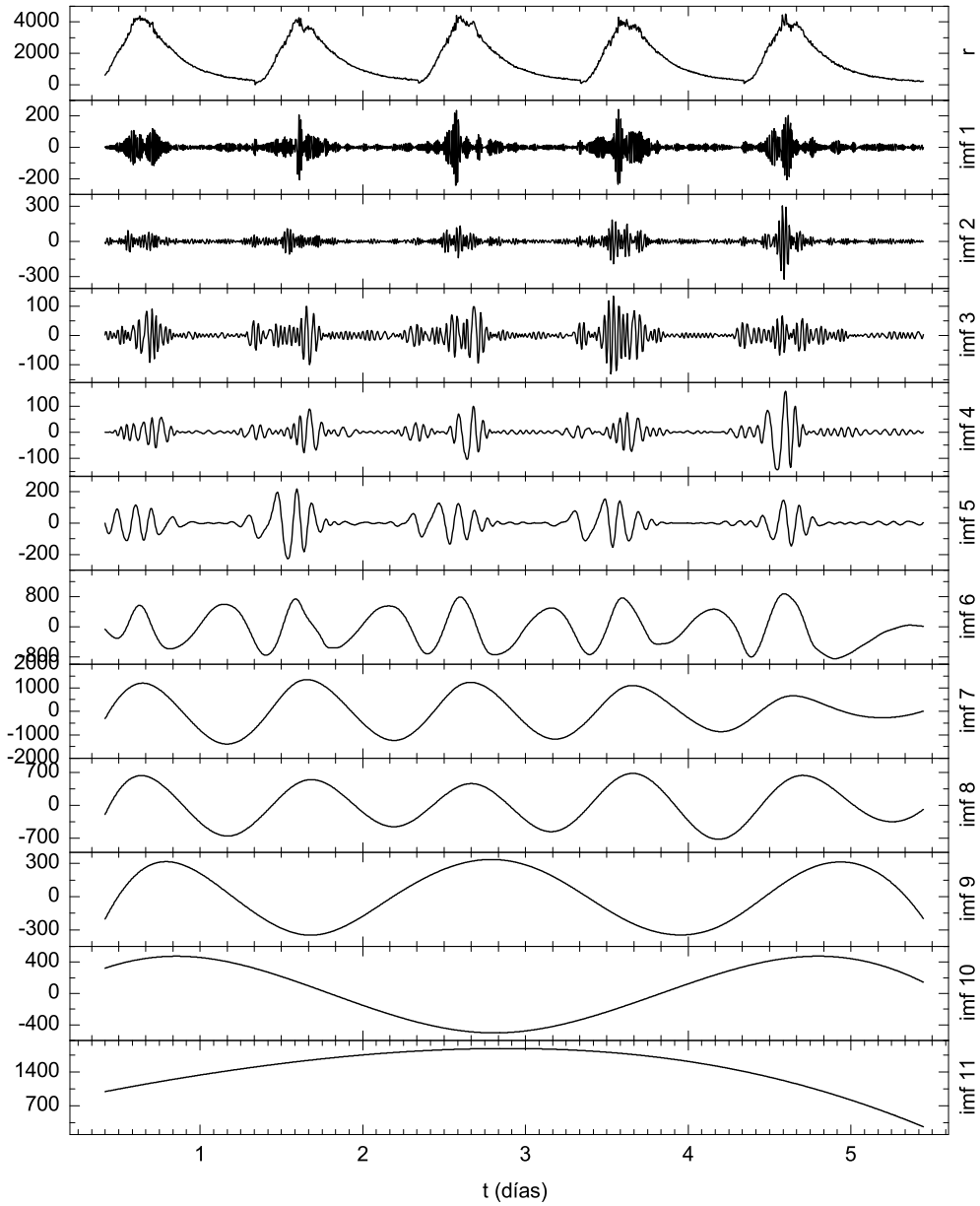


Figura 2.11: EMD para la serie temporal de r , configuración 2.

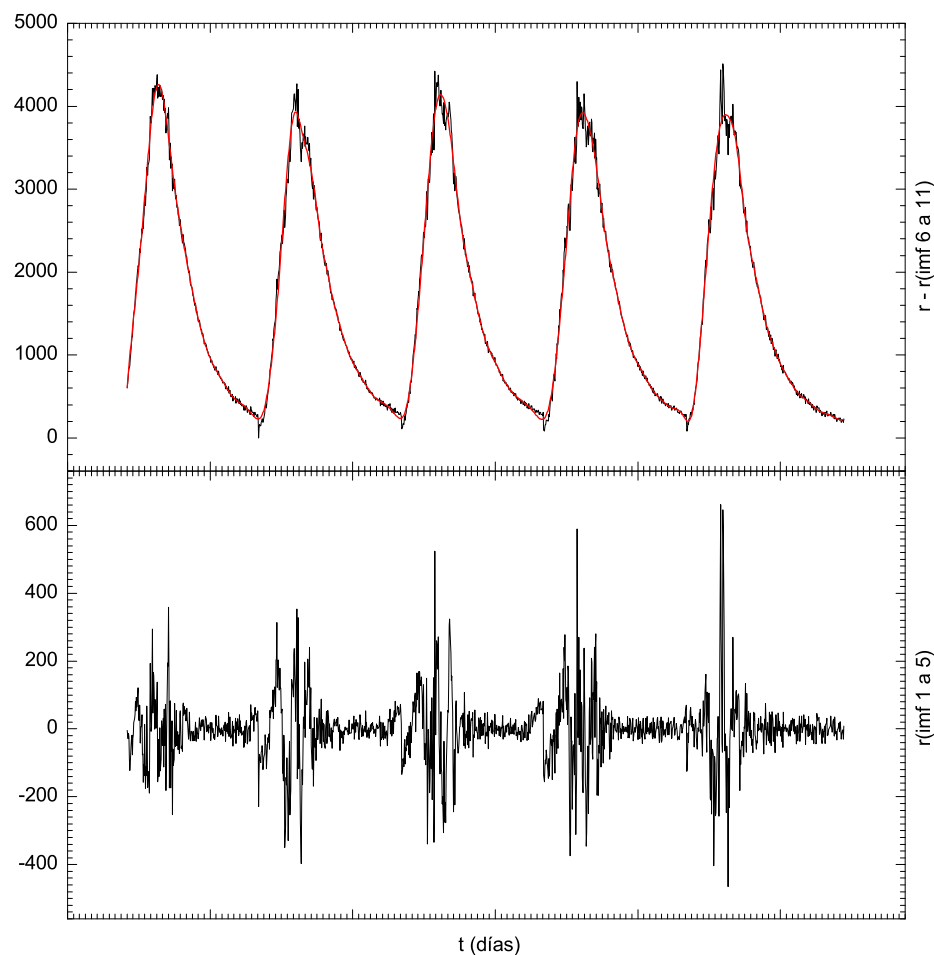


Figura 2.12: Componentes rápida (abajo) y lenta (arriba, en rojo) de r , para la configuración 2. Se muestra también la serie original (arriba, en negro).

de r , este no es tan pronunciado, lo que hace sospechar que debido a la geometría del destilador este cambio en el régimen de circulación del aire interior del destilador es menos “violento” y más “ordenado”.

2.2.3. Reconstrucción de la dinámica de h

El paso siguiente en la comprensión de la evolución de h en el tiempo es la reconstrucción de la dinámica. También inicialmente [1] se había realizado una reconstrucción de la dinámica tanto de h como de r por el método de Ruelle–Takens. Sin embargo el Teorema de Takens [33] es válido rigurosamente para sistemas autónomos, mientras que en este caso estamos tratando con un sistema forzado periódicamente. Trabajos recientes [34, 35]

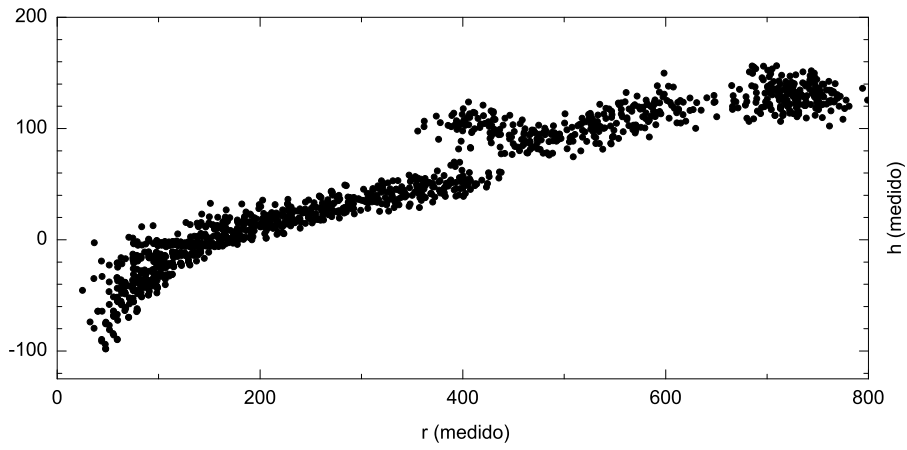


Figura 2.13: Coeficiente de transferencia térmica h en función del parámetro de control r , en la configuración 1.

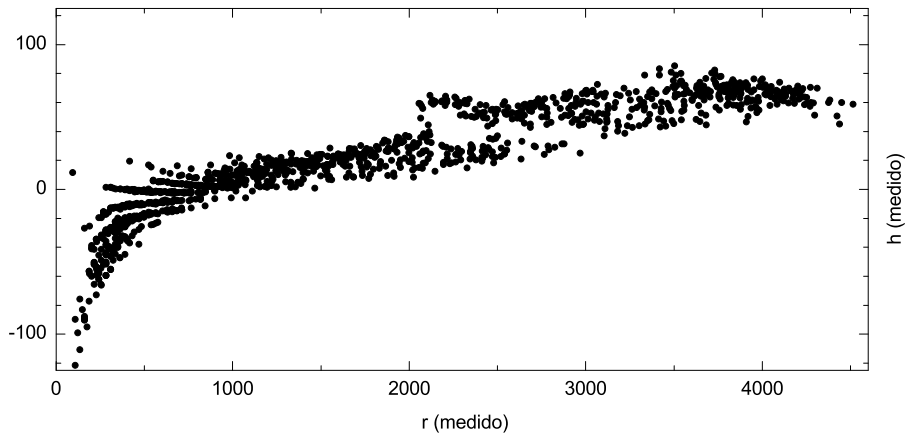


Figura 2.14: Coeficiente de transferencia térmica h en función del parámetro de control r , en la configuración 2.

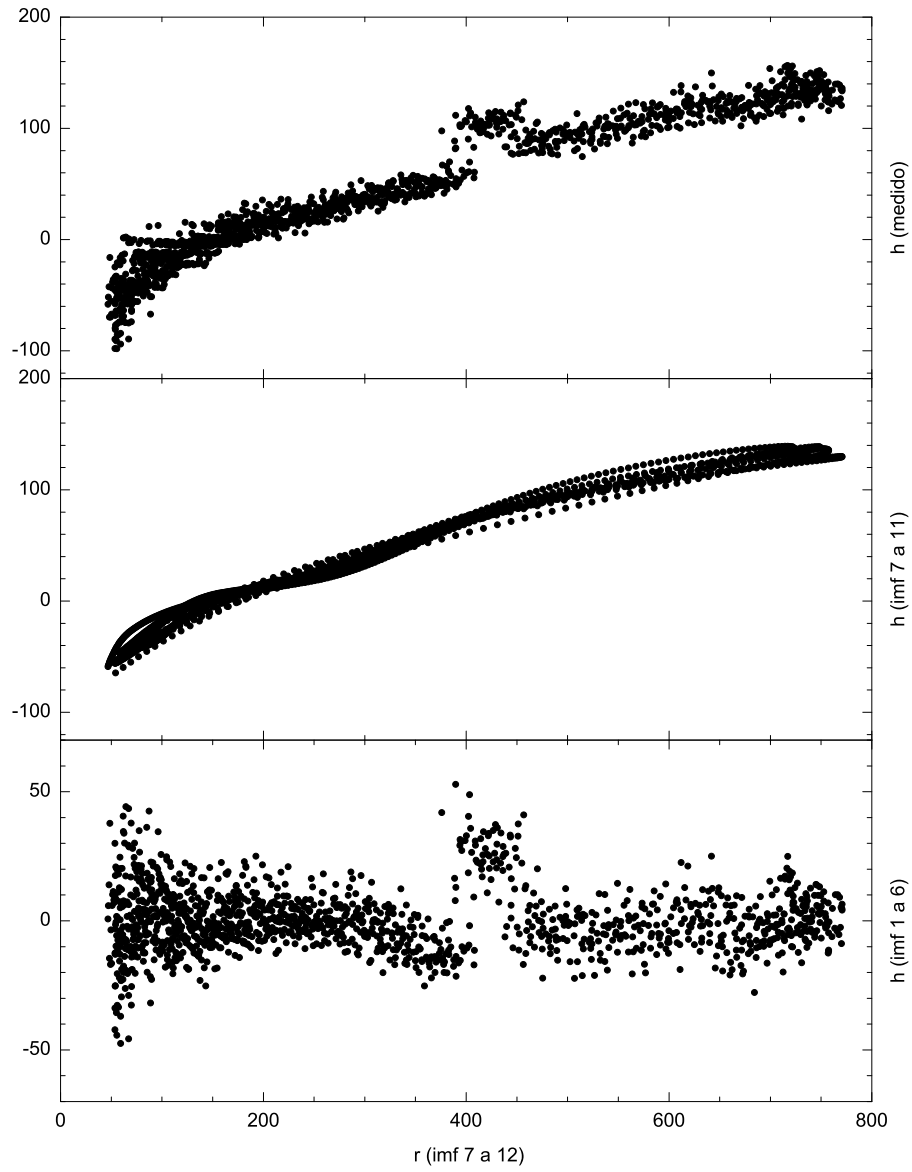


Figura 2.15: Coeficiente de transferencia térmica h medido (arriba) y sus componentes lenta h_s (centro) y rápida h_f (abajo), en función de la componente lenta r_s del parámetro de control, para la configuración 1.

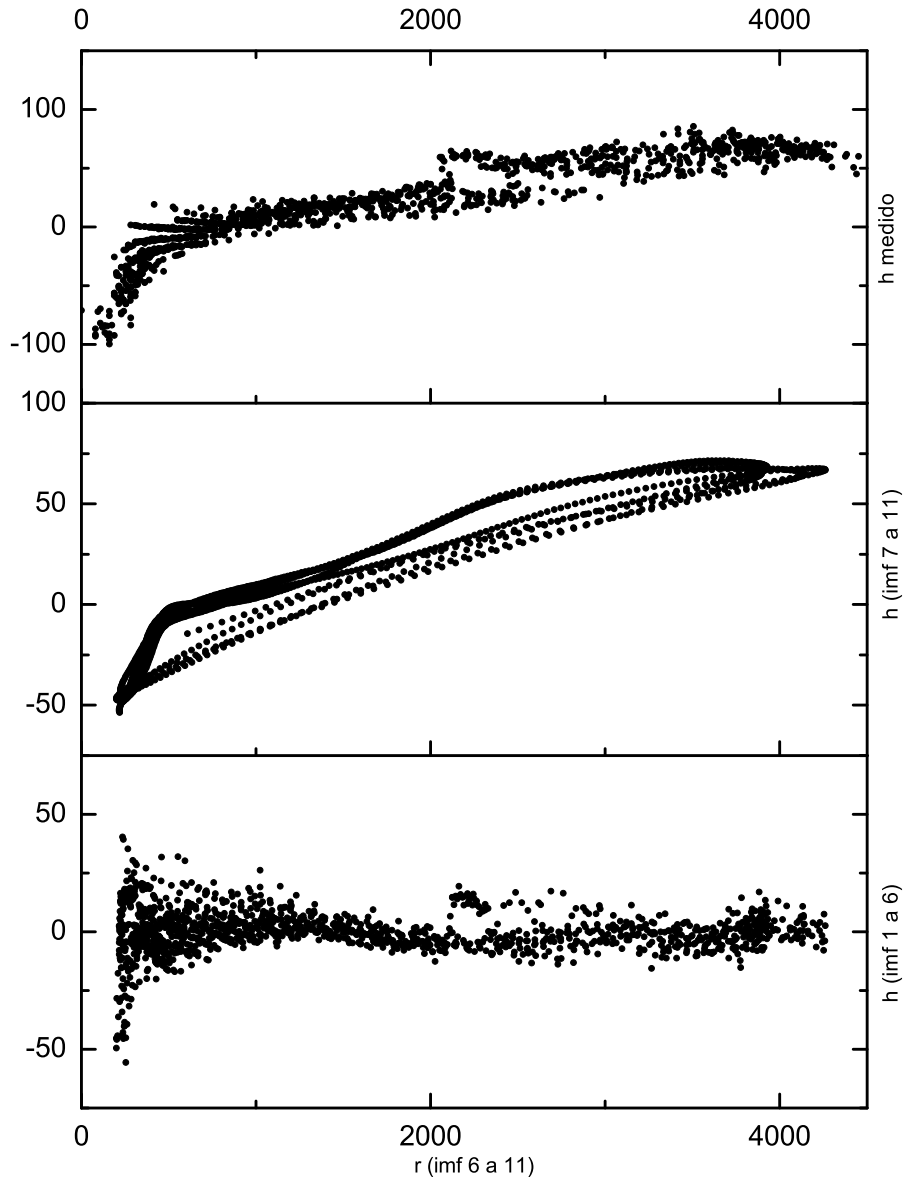


Figura 2.16: Coeficiente de transferencia térmica h medido (arriba) y sus componentes lenta h_s (centro) y rápida h_f (abajo), en función de la componente lenta r_s del parámetro de control, para la configuración 2.

han mostrado que en ese caso un buen espacio de reconstrucción para una dada variable dinámica x es (x, v_x, ϕ) , donde v_x es la velocidad de la variable x y ϕ es la fase del forzamiento (que por supuesto debe tomarse módulo 2π).

En nuestro caso, la reconstrucción de la dinámica de h debe hacerse entonces en el espacio $(h, dh/dt, \phi)$. Sin embargo la presencia de modos de variación muy rápida (hasta frecuencias cercanas a la de Nyquist) hace que el cálculo de dh/dt sea propenso a errores numéricos grandes, y su mitigación mediante filtrado eliminaría información relevante sobre la dinámica a escalas temporales cortas. En este punto es útil reemplazar dh/dt por (menos) su transformada de Hilbert \bar{h} , lo que da un espacio de reconstrucción topológicamente equivalente, mientras que el cálculo de \bar{h} es mucho menos susceptible a errores numéricos. Por otro lado, la fase del forzamiento se identifica con la fase del parámetro de control r_s , calculada como el ángulo de fase de la señal analítica formada por r_s y su transformada de Hilbert. Para visualizar correctamente el espacio de reconstrucción (h, \bar{h}, ϕ) se recurre al siguiente artificio: en un sistema de coordenadas cilíndricas (ρ, ϕ, z) se toma $\rho = \rho_0 + \bar{h}$ (con ρ_0 mayor que la amplitud de \bar{h}), ϕ igual a la fase de r_s , y $z = h$.

En las figuras 2.17 y 2.18 se muestran los espacios de reconstrucción (r_s, \bar{r}_s, ϕ) (éste como referencia, para poder comparar la amplitud y fase del forzamiento con los demás), (h, \bar{h}, ϕ) , (h_s, \bar{h}_s, ϕ) y (h_f, \bar{h}_f, ϕ) , correspondientes a ambas configuraciones. La esclavización de h_s a r_s resulta evidente comparando los paneles izquierdos. En los paneles derechos se evidencia el rango de valores “anómalo” de h_f , y cómo éste corresponde a valores intermedios de r_s , prácticamente opuestos en fase; también puede apreciarse que a los valores mínimos de r_s corresponde la dinámica más “ruidosa” de h .

Un análisis más detallado del comportamiento “anómalo” de h_f requiere reconstruir la dinámica para cada modo rápido por separado. Esta reconstrucción se muestra en la figura 2.19 para la configuración 1 y en la figura 2.20 para la configuración 2. En ambos casos puede apreciarse que la mayor parte de la variabilidad de h_f cerca del mínimo de r_s se debe a los modos más rápidos (h_1, h_2 y h_3). También se aprecia que los modos más lentos (h_3, h_4, h_5 y h_6) muestran amplitudes notablemente mayores para valores intermedios de r_s correspondientes a los valores “anómalos” de h_f ; en la misma región la dinámica de estos modos parece ser particularmente coherente en fase sobre los cinco períodos de r_s medidos, aunque esta característica resulta parcialmente oscurecida por las variaciones de amplitud.

Para poner de manifiesto la presencia de coherencia de fase, en las figuras 2.21 y 2.22 se presentan los mismos espacios de reconstrucción de las figuras 2.19 y 2.20 pero normalizando la amplitud de cada modo a $A_i = (h_i^2 + \bar{h}_i^2)^{1/2}$. Puede apreciarse que la fase de los modos h_3, h_4, h_5 y h_6 es notablemente coherente sólo a valores intermedios de r_s , correspondientes al rango de valores “anómalos” de h_f .

La coherencia de fase y el aumento de amplitud de los modos $h_3, h_4,$

2.2. REANÁLISIS DE LOS DATOS

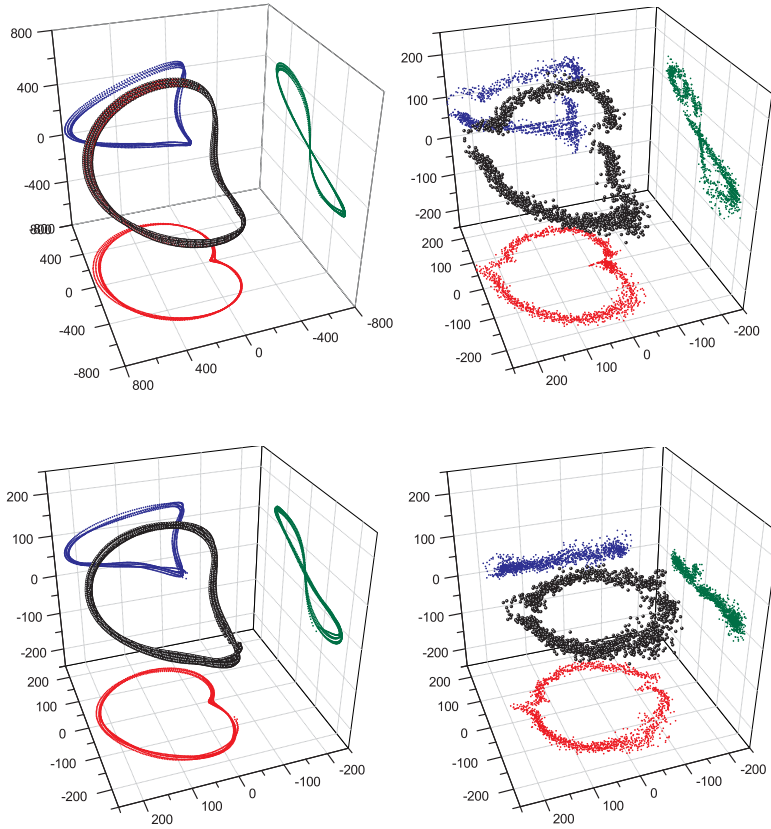


Figura 2.17: Espacios de reconstrucción (r_s, \bar{r}_s, ϕ) (arriba izquierda), (h, \bar{h}, ϕ) (arriba derecha), (h_s, \bar{h}_s, ϕ) (abajo izquierda) y (h_f, \bar{h}_f, ϕ) (abajo derecha), para la configuración 1.

h_5 y h_6 , de la configuración 1, estaría indicando entonces que el rango de r correspondiente a los valores “anómalos” de h_f aparecen en el flujo, en cada ciclo del forzamiento, estructuras dinámicas similares en escala temporal y espacial, pero de amplitud mayor a la de las estructuras presentes durante el resto del ciclo. Durante el resto del ciclo, para valores de r ya sea mayores o menores al antes mencionado, las estructuras dinámicas presentes en el flujo son más estables, mostrando oscilaciones de menor amplitud y mucho menos coherentes. Esto sería consistente con la imagen mencionada antes de un cambio de régimen entre dos configuraciones del flujo relativamente estables.

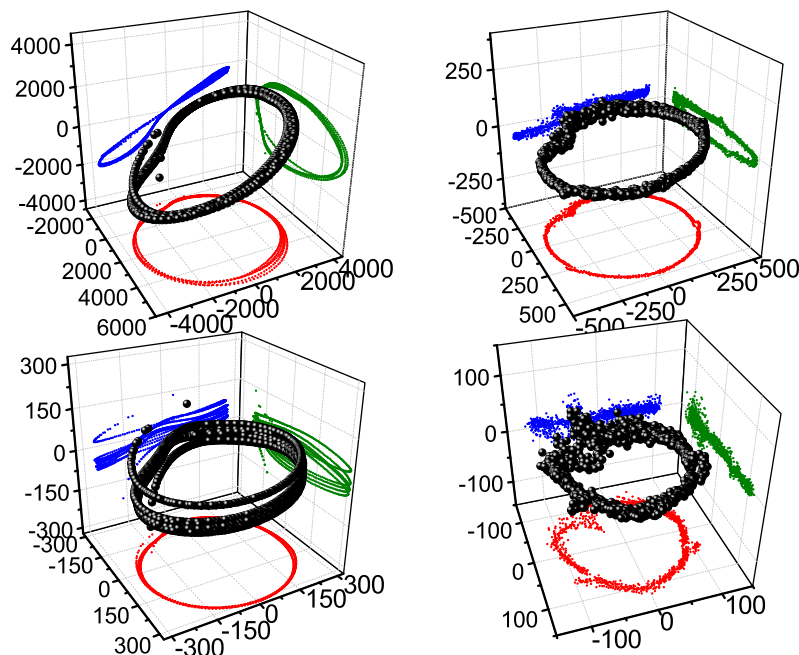


Figura 2.18: Espacios de reconstrucción (r_s, \bar{r}_s, ϕ) (arriba izquierda), (h, \bar{h}, ϕ) (arriba derecha), (h_s, \bar{h}_s, ϕ) (abajo izquierda) y (h_f, \bar{h}_f, ϕ) (abajo derecha), para la configuración 2.

2.2.4. Espectros de Hilbert de h

Para obtener alguna información sobre las características dinámicas del flujo a diferentes regímenes, en el sentido de si este es caótico, turbulento o (multi)periódico, la herramienta usual es el espectro de potencia de Fourier (FPS) de la señal medida. Un análisis del FPS de las series temporales de h ya había sido realizado inicialmente [1], y los espectros de potencia correspondientes se muestran aquí en las figuras 2.23 y 2.24.

A primera vista el espectro guarda semejanza con el típico de sistemas turbulentos o caóticos, particularmente en la región de frecuencias bajas ($\nu < 24 \text{ día}^{-1}$); sin embargo, el detalle de dicha región muestra que este comportamiento es principalmente aparente, debido a la serie de picos en los armónicos de 1 día^{-1} , que son debidos a la dinámica secular impuesta por el forzamiento. El problema proviene de que, si bien la dinámica secular de h es periódica con período de un día, esta oscilación es fuertemente anarmónica (véanse las figuras 2.7 y 2.8), lo que ocasiona una proliferación de picos en los armónicos de su frecuencia fundamental.

2.2. REANÁLISIS DE LOS DATOS

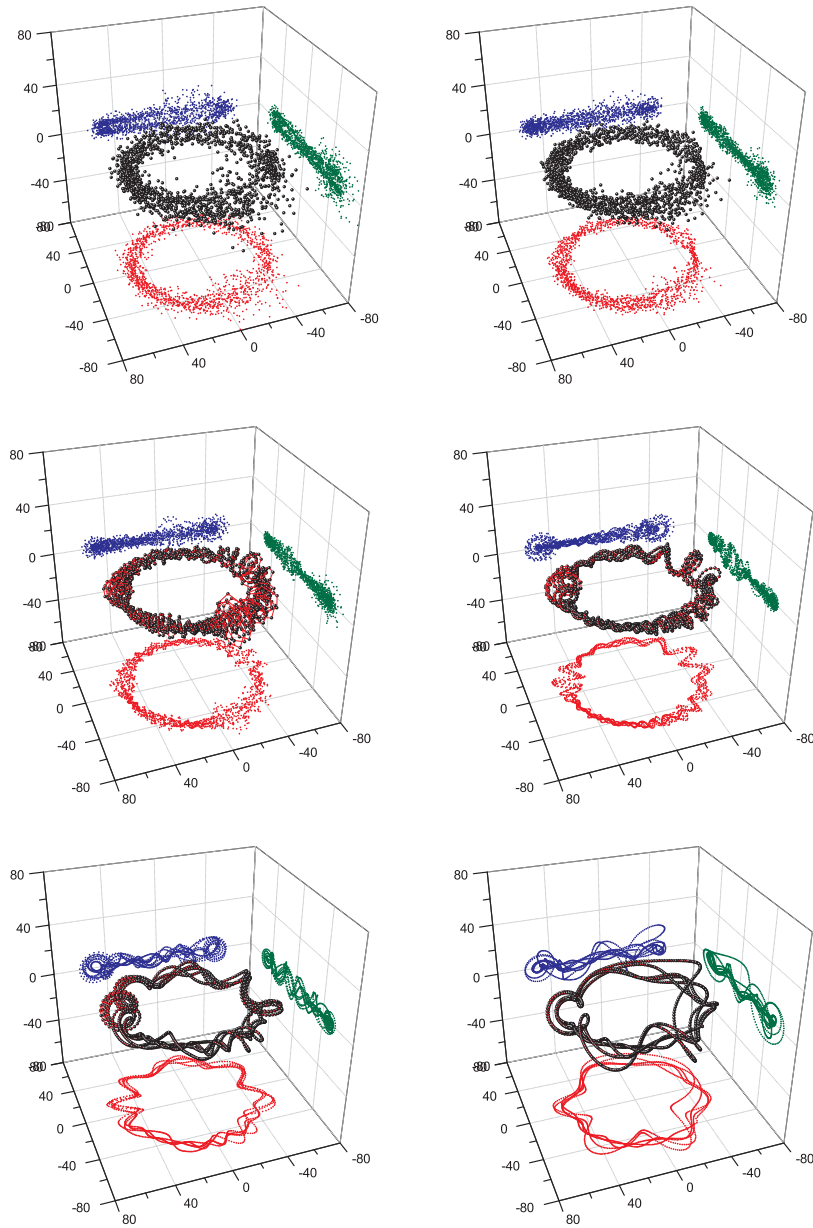


Figura 2.19: Espacios de reconstrucción (h_i, \bar{h}_i, ϕ) de las IMF 1 a 6 ($i = 1, \dots, 6$ de izquierda a derecha y de arriba a abajo) para la configuración 1.

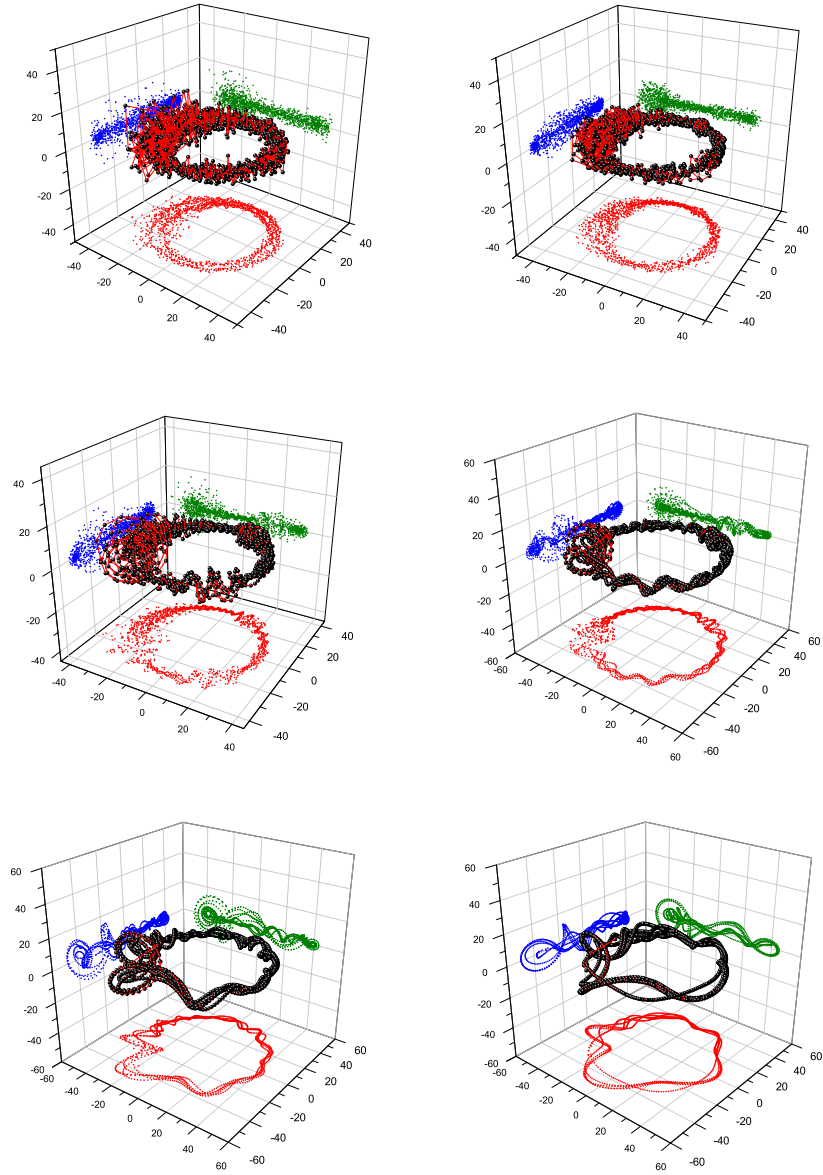


Figura 2.20: Espacios de reconstrucción (h_i, \bar{h}_i, ϕ) de las IMF 1 a 6 ($i = 1, \dots, 6$ de izquierda a derecha y de arriba a abajo) para la configuración 2.

2.2. REANÁLISIS DE LOS DATOS

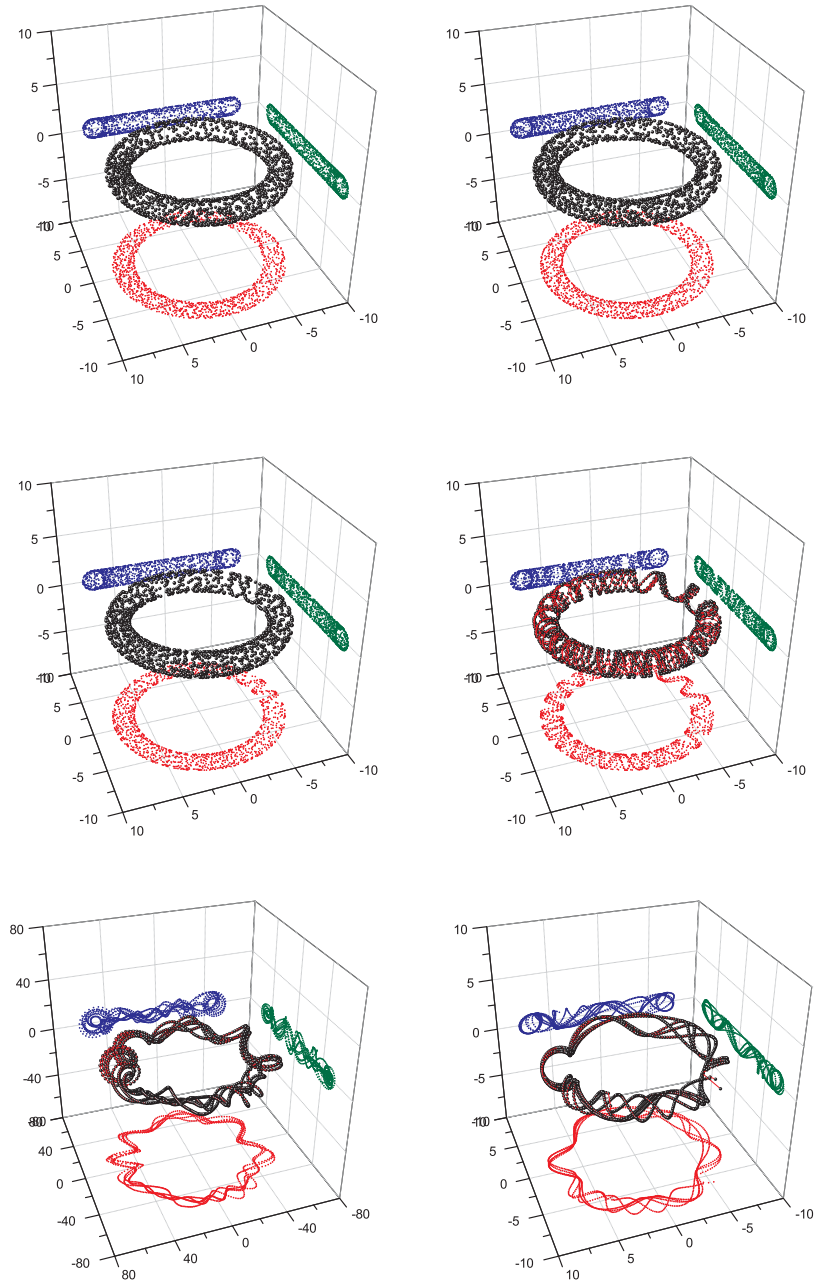


Figura 2.21: Espacios de reconstrucción normalizados (h_i, \bar{h}_i, ϕ) de las IMF 1 a 6 ($i = 1, \dots, 6$ de izquierda a derecha y de arriba a abajo) para la configuración 1.

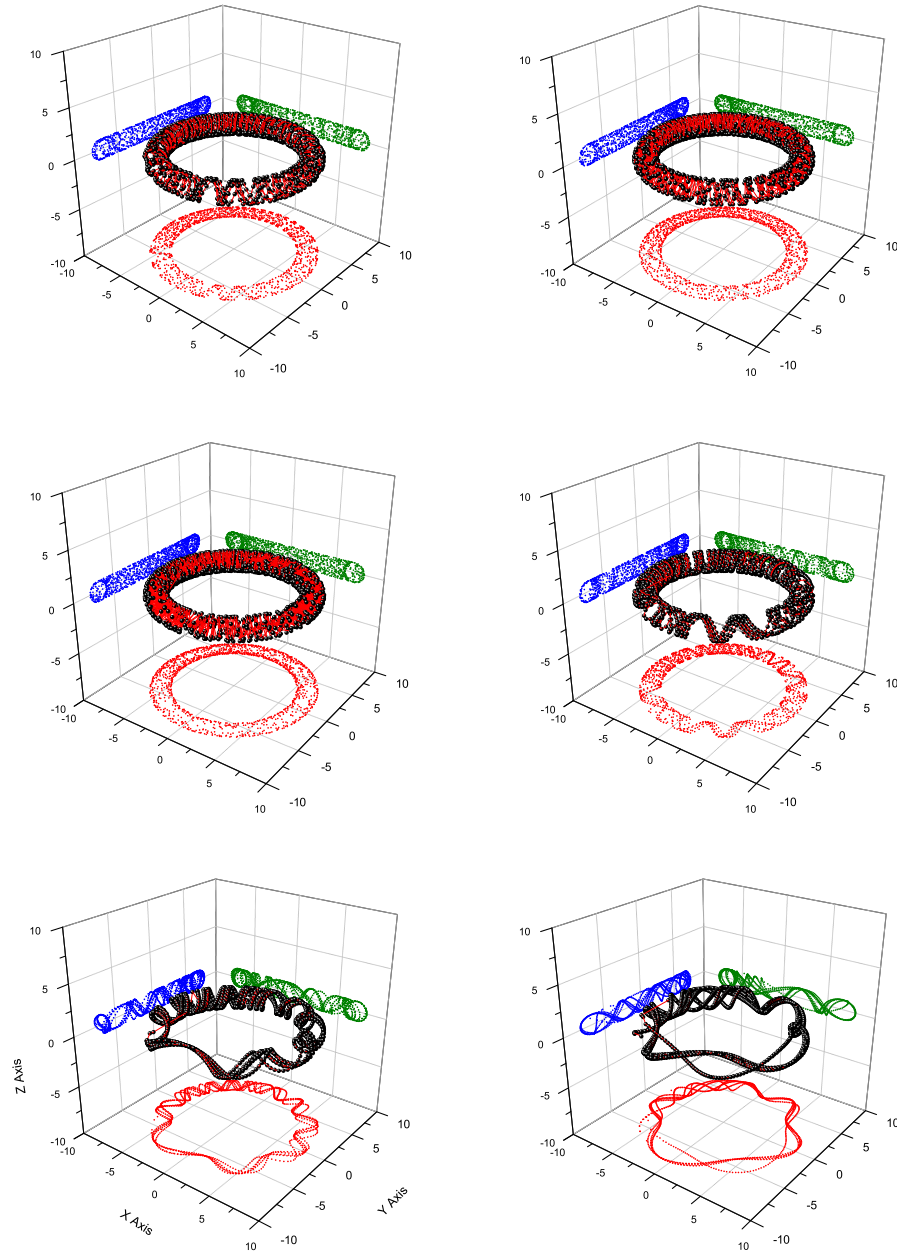


Figura 2.22: Espacios de reconstrucción normalizados (h_i, \bar{h}_i, ϕ) de las IMF 1 a 6 ($i = 1, \dots, 6$ de izquierda a derecha y de arriba a abajo) para la configuración 2.

2.2. REANÁLISIS DE LOS DATOS

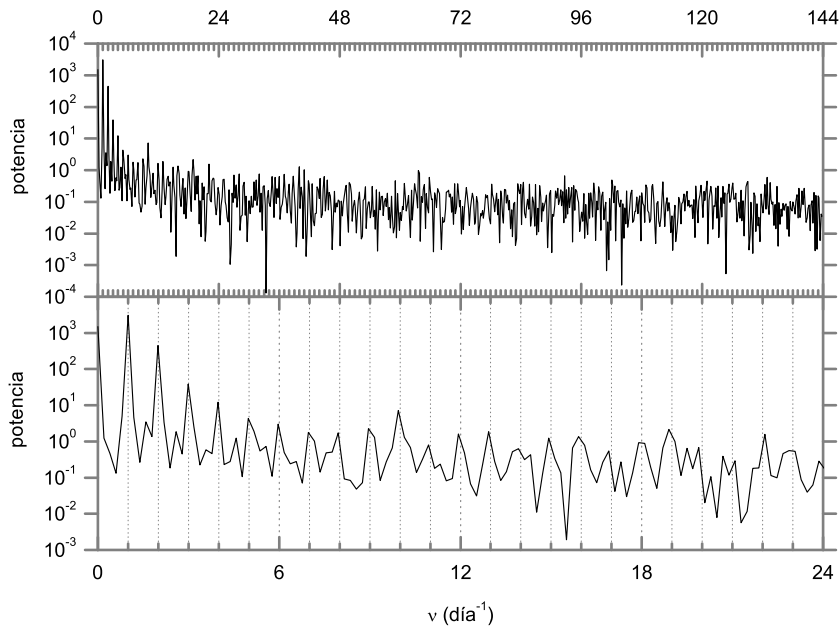


Figura 2.23: Espectro de potencia de Fourier de h en la configuración 1 (arriba), y detalle a bajas frecuencias (abajo.)

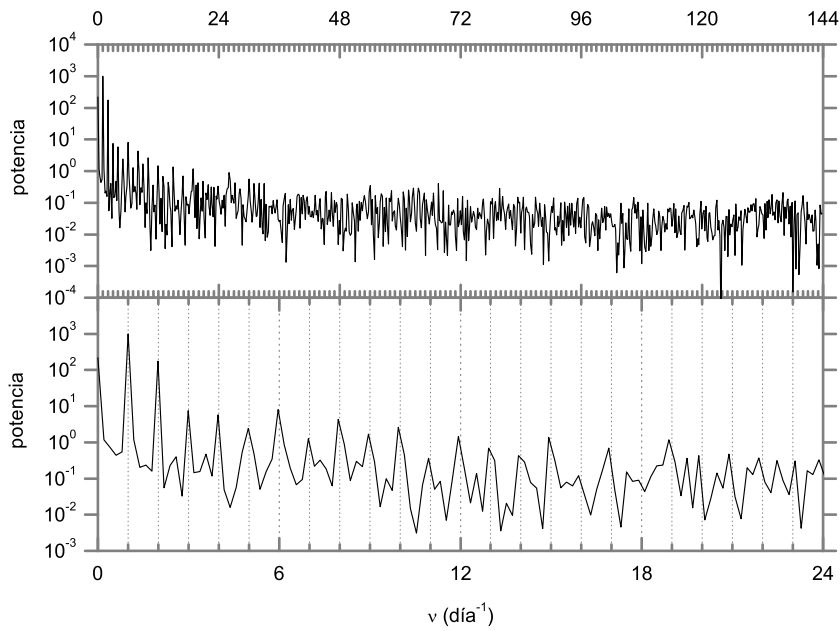


Figura 2.24: Espectro de potencia de Fourier de h en la configuración 2 (arriba), y detalle a bajas frecuencias (abajo.)

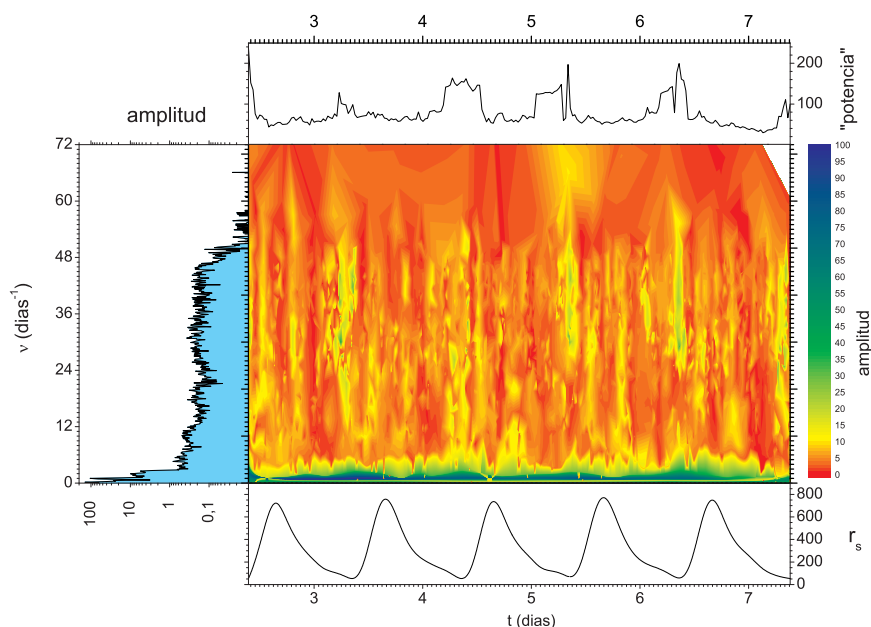


Figura 2.25: Espectro de potencias de Hilbert (HPS, panel central), marginal (HMS, panel izquierdo) e instantáneo (IES, panel superior) para h en la configuración 1. El panel inferior muestra la componente lenta r_s del parámetro de control.

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,

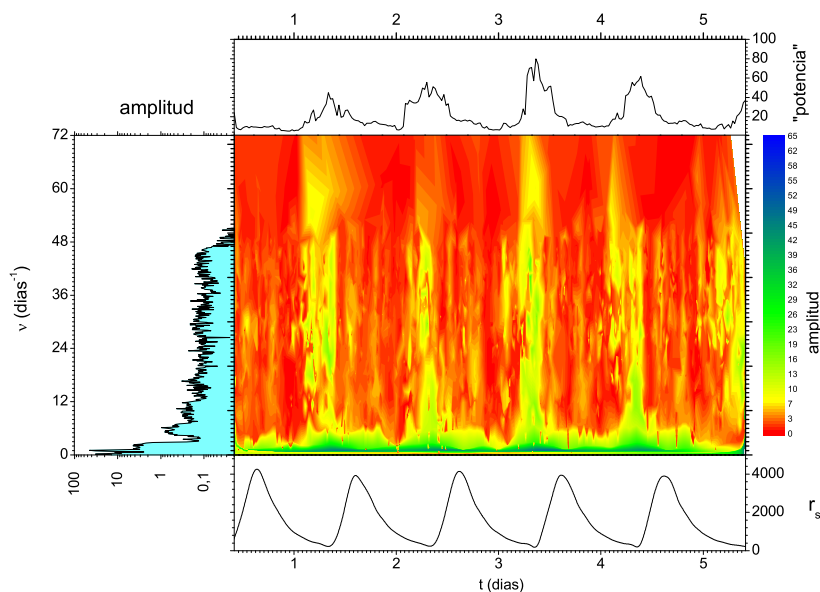


Figura 2.26: Espectro de potencias de Hilbert (HPS, panel central), marginal (HMS, panel izquierdo) e instantáneo (IES, panel superior) para h en la configuración 2. El panel inferior muestra la componente lenta r_s del parámetro de control.

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 (veánse 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

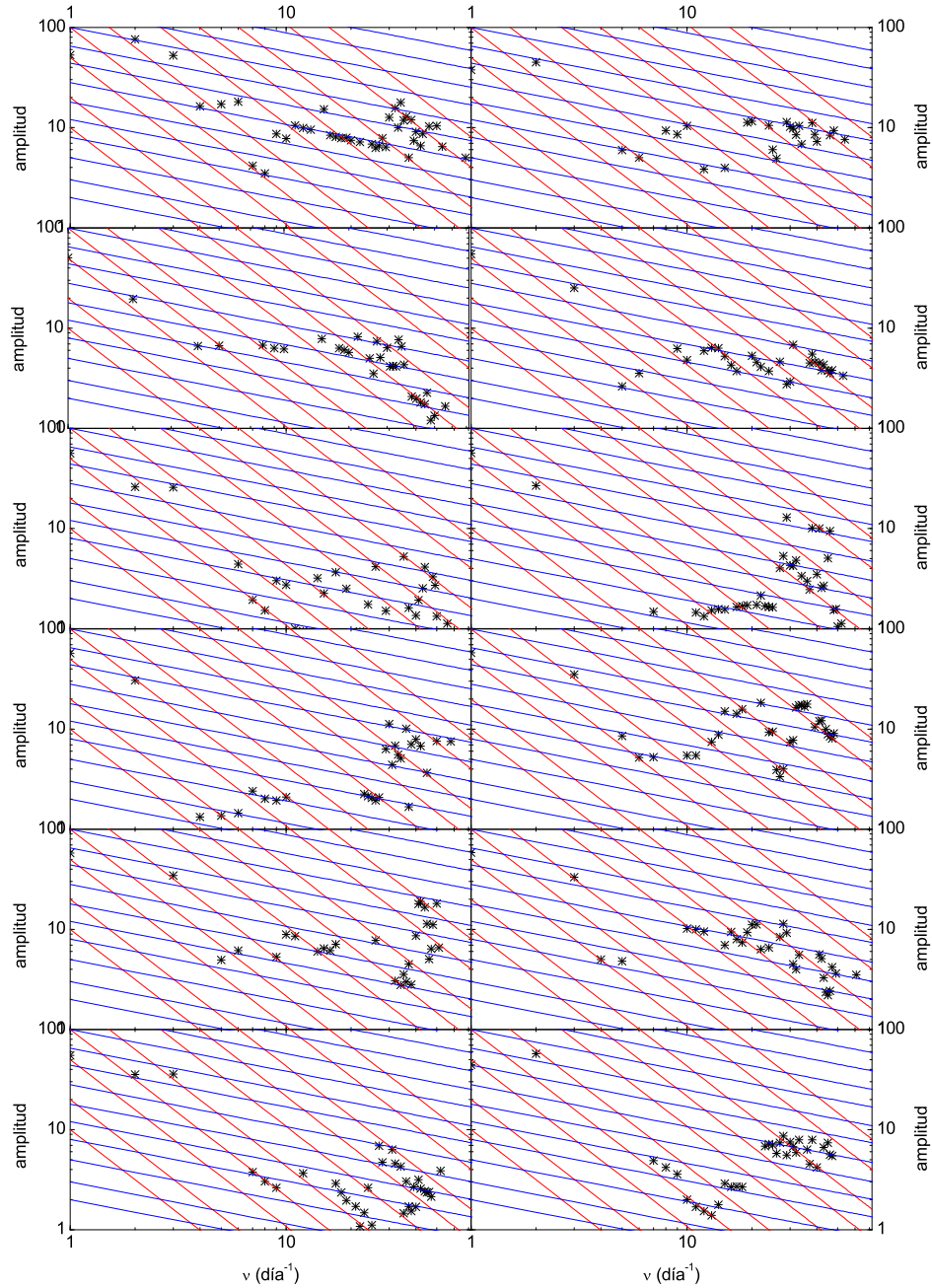


Figura 2.27: Espectros instantáneos de amplitud (IAS) de 1 hora de espesor para h en la configuración 1 (las escalas son logarítmicas en ambos ejes).

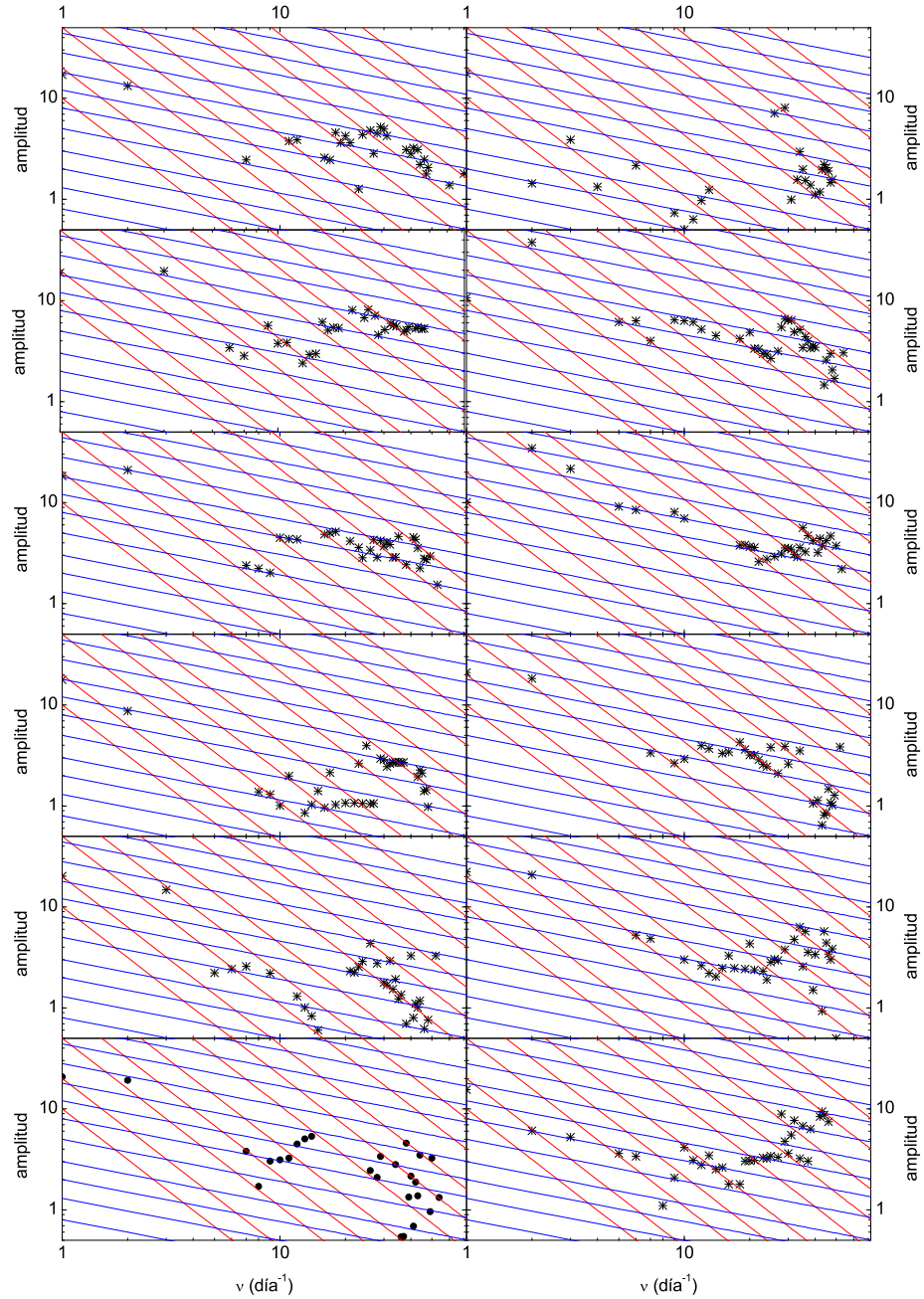


Figura 2.28: Espectros instantáneos de amplitud (IAS) de 1 hora de espesor para h en la configuración 2 (las escalas son logarítmicas en ambos ejes).

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

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

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 determinadsos 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).

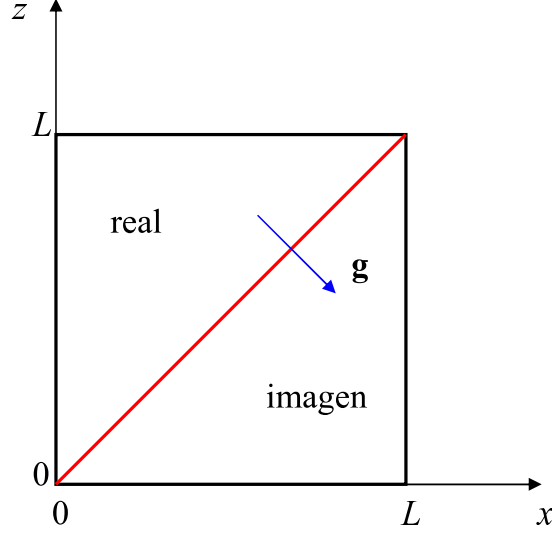


Figura 4.1: Obtención de las celdas triangulares real e imagen por división de la celda cuadrada a lo largo de su diagonal principal $z = x$ (en rojo). El campo gravitatorio \mathbf{g} se muestra en azul.

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

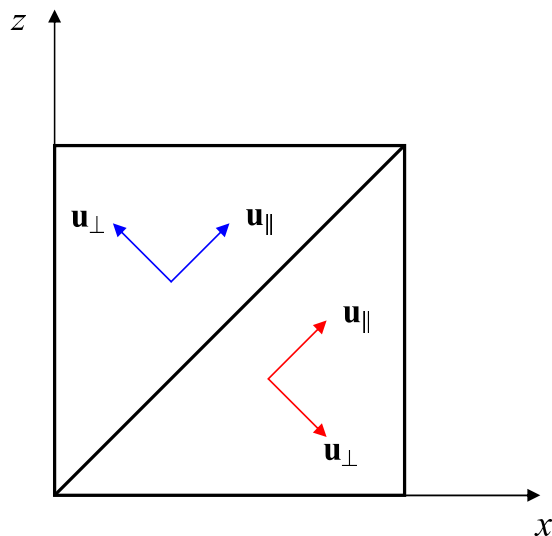


Figura 4.2: Simetrías obedecidas por el campo de velocidad por reflexión de la celda triangular real a la imagen.

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

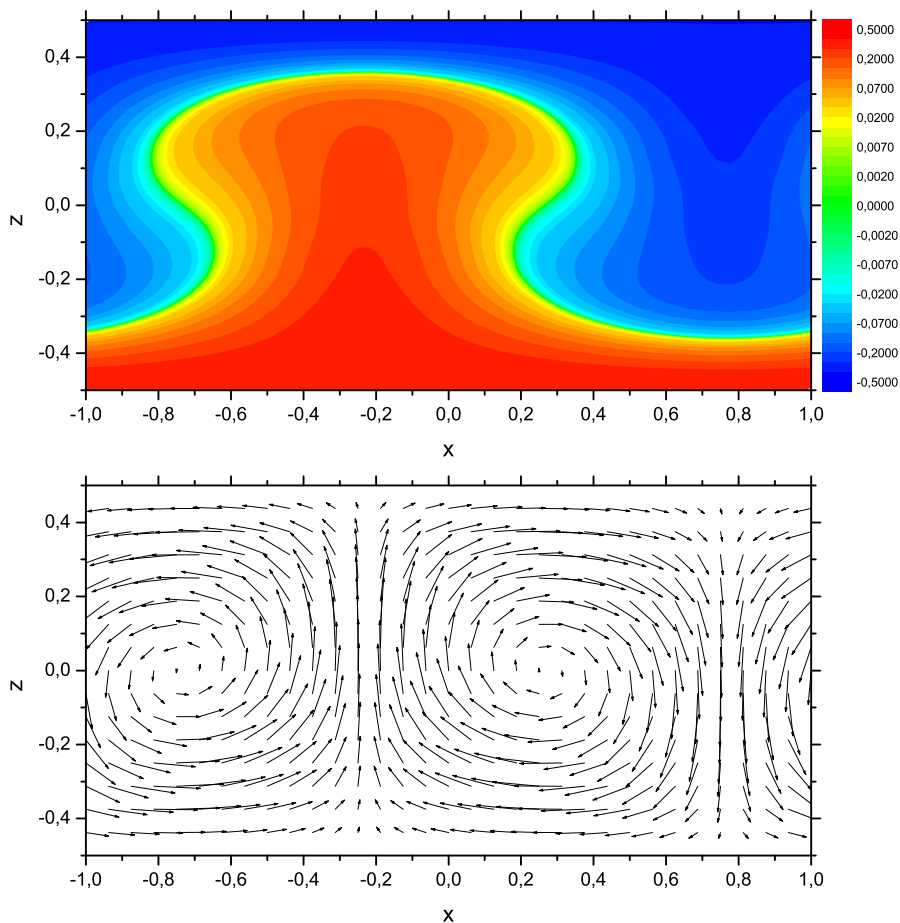


Figura 5.1: Campos de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección seca en la celda rectangular a $R_T = 5R_c$ y $t = t_c$ sobre una grilla de 32×16 puntos.

débiles el tiempo de arranque de la convección puede ser muy largo. En la práctica no se observó inestabilidad a $R_T \leq 1,5R_c$ para tiempos de corrida $t \leq 2t_c$.

A bajo R_T se alcanza un estado de régimen estacionario consistente en dos vórtices contrarrotantes, en tiempos $\sim t_c$ o menores. Este tiempo cae rápidamente al crecer R_T , hasta $\sim 0,1t_c$ a $R_T \sim 1000R_c$ (ver figuras 5.1 a 5.3).

Alrededor de $R_T \sim 5000R_c$ estos vórtices desarrollan oscilaciones laterales, y aparecen las primeras “estructuras secundarias” (pequeños vórtices) cerca de la base de las columnas ascendentes y descendentes (ver figura 5.4). Todavía existe un estado de régimen ordenado, pero ya no es estacionario sino oscilatorio.

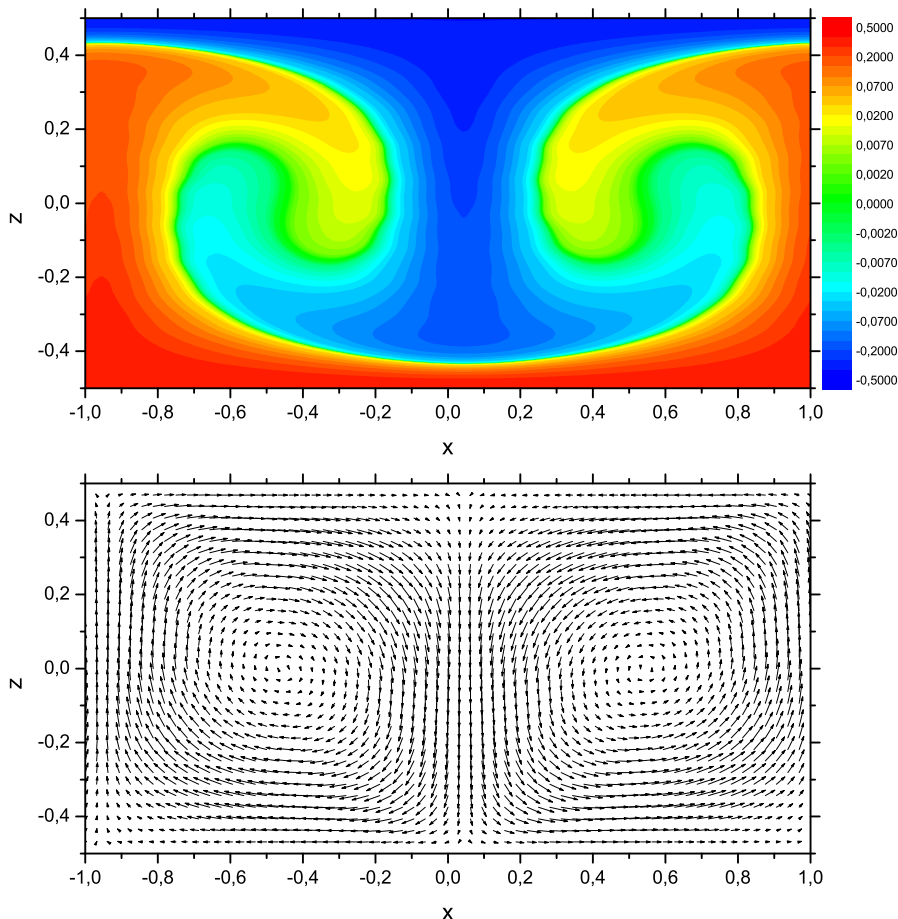


Figura 5.2: Campos de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección seca en la celda rectangular a $R_T = 50R_c$ y $t = t_c$ sobre una grilla de 64×32 puntos.

Por encima de $R_T \sim 5000R_c$ el estado de régimen se vuelve desordenado y aperiódico, y consiste ahora en columnas y vórtices intermitentes con un amplio rango de tamaños. Si se deja correr las simulaciones un tiempo largo, se hace evidente que el sistema ya no alcanzará un estado de régimen ordenado ni (multi)periódico. A medida que R_T crece el estado de régimen se torna cada vez más desordenado, dando lugar a una proliferación de estructuras convectivas cada vez más pequeñas (ver figura 5.5).

Finalmente, a $R_T \sim 5 \times 10^5 R_c \sim 10^9$, la diferencia de temperatura ha alcanzado unos 65°C . Debe notarse que la diferencia de temperatura es aquí unas cinco veces mayor que la más alta que alcanzaremos en el Capítulo 6; ello es intencional, ya que la convección húmeda tiende a ser más intensa que la seca al mismo ΔT . Los vórtices más pequeños disminuyen

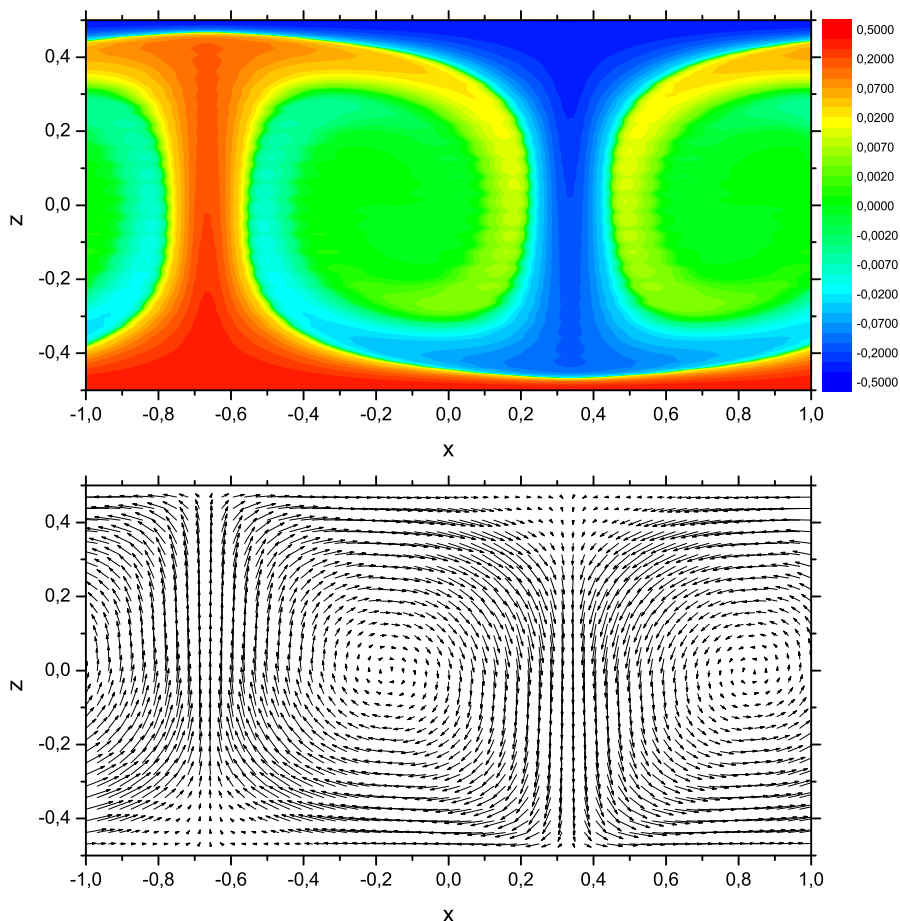


Figura 5.3: Campos de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección seca en la celda rectangular a $R_T = 500R_c$ y $t = 0,25t_c$ sobre una grilla de 128×64 puntos (en velocidades decimada a 64×32 puntos).

hasta alrededor de 1 cm y las velocidades típicas son del orden de 1 m/s (ver figura 5.6), en concordancia con resultados conocidos [56]. El tiempo necesario para alcanzar este estado desde el estado inicial conductivo es bastante corto, del orden de $0,001t_c$ o aproximadamente unos 10 a 12 segundos.

El espaciamiento de grilla necesario para correr cada simulación se muestra al pie de las correspondientes figuras, y en todos los casos es consistente con el requerimiento de resolver la capa límite, lo que en nuestra experiencia se consigue cuando ésta tiene un espesor de entre cinco y diez puntos de grilla. En la figura 5.7 se muestra el campo de temperatura resultante de correr la misma simulación de la figura 5.6 pero sobre una grilla intencionalmente subdimensionada, con el doble de espaciamiento (la mitad de puntos) en cada dirección. La presencia de una inestabilidad en damero resulta evidente,

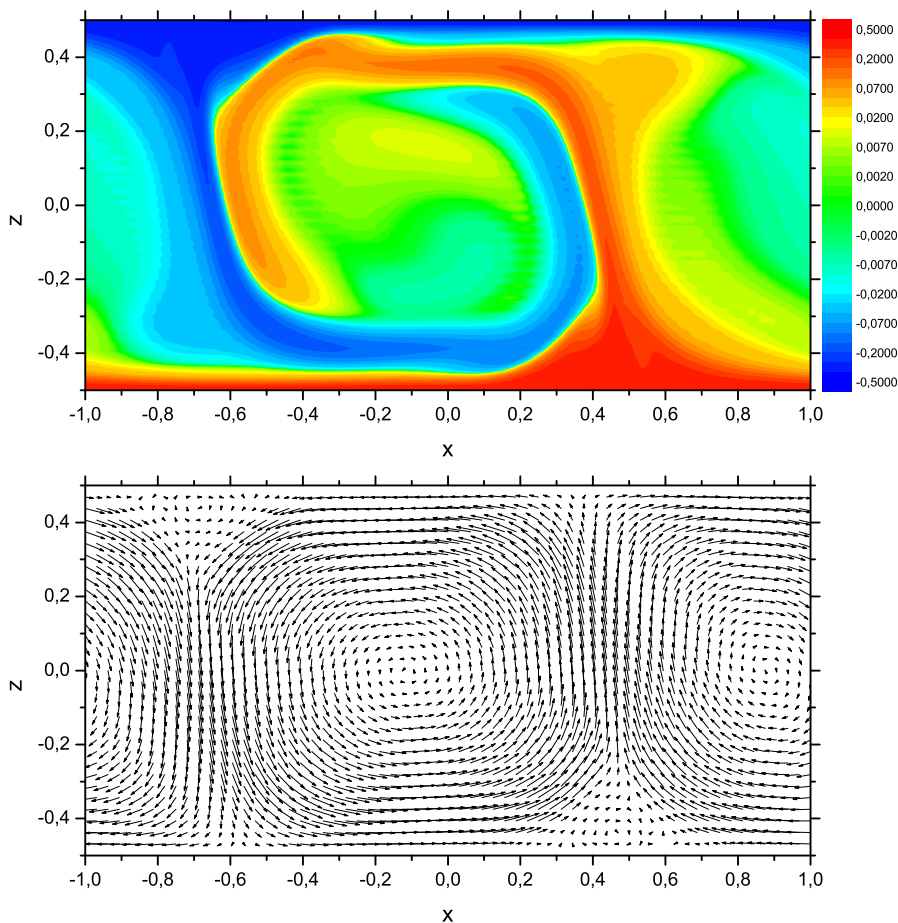


Figura 5.4: Campos de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección seca en la celda rectangular a $R_T = 5000R_c$ y $t = 0,05t_c$ sobre una grilla de 192×96 puntos (en velocidades decimada a 64×32 puntos).

y sin embargo la simulación no sólo siguió corriendo sino que, aparte de su evidente distorsión por la inestabilidad, el campo de temperatura es cualitativamente similar al de la simulación bien resuelta. Ello muestra claramente la estabilidad y robustez del código desarrollado.

En todos los casos se verificó que la incompresibilidad del campo de velocidad era mantenida esencialmente a precisión de máquina. Para ello se calculó el campo $\nabla \cdot \mathbf{u}$ y se lo comparó, tanto punto a punto como en valor RMS sobre la celda, con el campo de vorticidad $\nabla \times \mathbf{u}$, obteniendo en ambos casos

$$\frac{|\nabla \cdot \mathbf{u}|}{|\nabla \times \mathbf{u}|} \sim 10^{-16}, \quad (5.10)$$

que está al nivel del ε de máquina en precisión doble, la que empleamos en

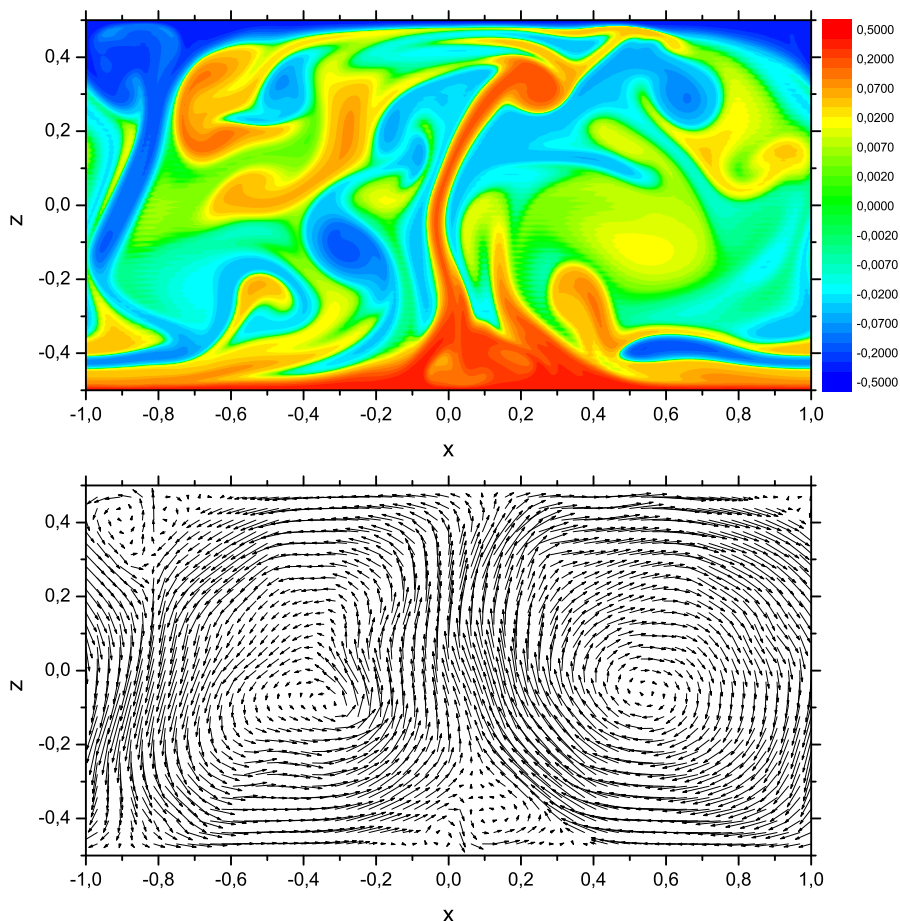


Figura 5.5: Campos de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección seca en la celda rectangular a $R_T = 50000R_c$ y $t = 0,01t_c$ sobre una grilla de 384×192 puntos (en velocidades decimada a 64×32 puntos).

todas las simulaciones. De igual forma se verificó que los algoritmos respetaban las CC con la misma precisión. Para ello se monitorearon los valores de los campos sobre las fronteras $z = 0$ y $z = H$ de la celda, comparándolos con los valores RMS de los campos en el interior, con el mismo resultado. Esto muestra que tanto el procedimiento de eliminación del término de presión desarrollado en la Sección 4.4, como el procedimiento de resolución de la ecuación de Laplace desarrollado en el Apéndice B.1, no sólo son correctos, sino que resuelven los respectivos problemas sin introducir ningún error más allá del inevitable por la naturaleza numérica de la implementación (es decir, que ambos métodos son analíticamente *exactos*).

Debemos destacar que el código desarrollado es además notablemente rápido. Todas las simulaciones de este capítulo fueron corridas sobre un úni-

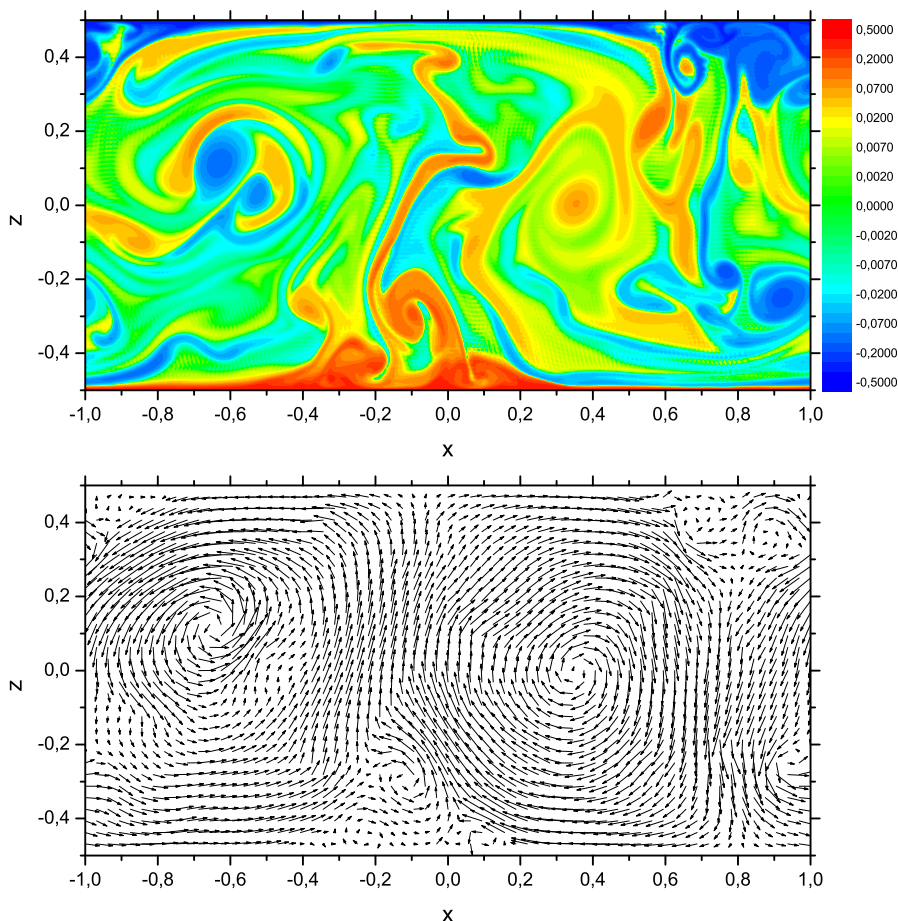


Figura 5.6: Campos de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección seca en la celda rectangular a $R_T = 500000R_c$ y $t = 0,002t_c$ sobre una grilla de 512×256 puntos (en velocidades decimada a 64×32 puntos).

co núcleo de un procesador Pentium D con velocidad de reloj de 3GHz, sin ninguna optimización. Incluso omitimos en esta primera etapa optimizaciones del código de implementación relativamente trivial, tales como aparear las FFT de funciones reales mediante un algoritmo como el 2FFT [60], que prácticamente duplicaría la velocidad, pues el tiempo de cómputo está dominado por las llamadas a la FFT. Pese a estas desventajas, la simulación mostrada en la figura 5.6, con una grilla de 512×256 puntos, corrió a un factor de compresión $\lesssim 10^3$, es decir menos de 1000s de tiempo de CPU por cada segundo de tiempo de evolución simulado. Pruebas recientes de un código moderadamente optimizado, sobre un único núcleo virtual (de cuatro) de un procesador Intel I3 a 3.5GHz, mostraron un desempeño unas diez veces superior.

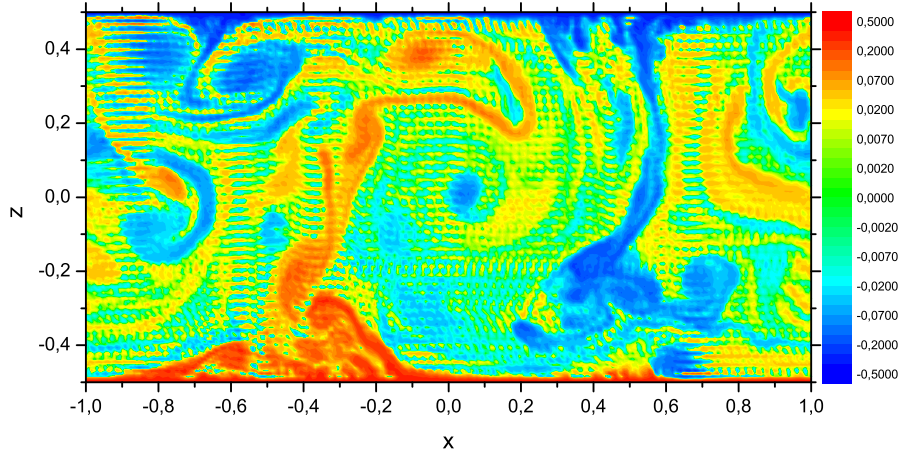


Figura 5.7: Campo de temperatura para convección seca en la celda rectangular a $R_T = 500000R_c$ y $t = 0,002t_c$ sobre una grilla subdimensionada de 256×128 puntos.

Dados los resultados mostrados aquí, en esta etapa los consideramos una validación suficiente del código desarrollado. Pasamos entonces a probar las modificaciones necesarias para implementar convección seca, primero en una celda cuadrada con CC homogéneas en los cuatro lados, y luego en una celda triangular.

5.2. Celda cuadrada

Las simulaciones de convección seca en una celda cuadrada constituyen un paso intermedio, cuyo objetivo es esencialmente poner a prueba la solución de la ecuación de Laplace por el método desarrollado en el Apéndice B.2. El sistema de ecuaciones a resolver es todavía el sistema WOB (3.137)–(3.139), pero sobre una grilla cuadrada (isotrópica) $N \times N$. Las CC para velocidad y temperatura son homogéneas de Dirichlet en los cuatro lados de la celda cuadrada. Para el campo de velocidad esto corresponde a CC *no-slip*. Para el campo de temperatura las CC son las de contacto térmico perfecto con la base (caliente), el techo (fría) y las paredes verticales, que mantienen un gradiente de temperatura uniforme entre estos dos extremos y pueden pensarse como conductores térmicos perfectos.

Esta última elección, que puede parecer algo extraña, tiene la intención de mantener como solución estacionaria el perfil conductivo *hidrostático* de la Sección 4.5, y no introducir complicaciones adicionales que dificulten la comparación con el caso precedente. Recuérdese que no pretendemos simular aquí un dado problema realista, sino poner a prueba únicamente la solución

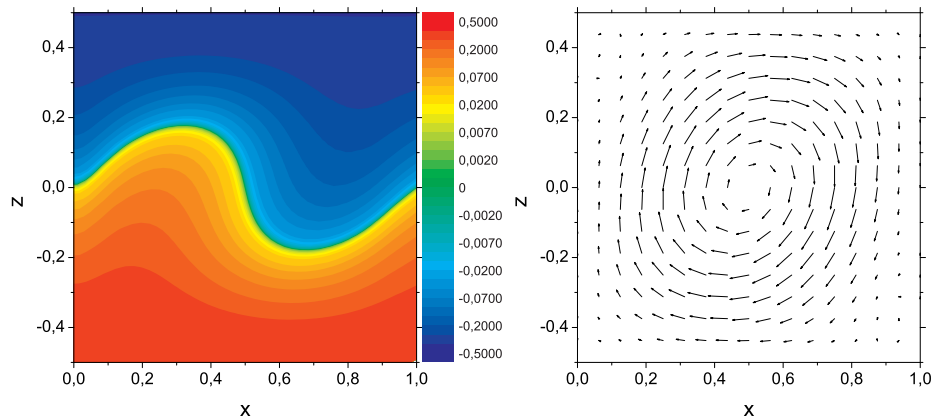


Figura 5.8: Campos de velocidad y temperatura para convección seca en la celda cuadrada a $R_T = 5R_c$ y $t = 2,0t_c$ sobre una grilla de 16×16 puntos.

de la ecuación de Laplace. Las elecciones de resolución temporal y espacial, y las escalas y parámetros, son también los mismos de la Sección 5.1, por los mismos motivos. En particular, el ancho y alto de la celda son ahora ambos de 0,5 m.

Las figuras 5.8 a 5.10 muestran, para una selección de los casos simulados, los campos de velocidad y temperatura para los valores de R_T y los tiempos indicados al pie de cada una, con la misma elección de escalas y colores de la Sección 5.1, y tienen aquí un propósito simplemente ilustrativo. Pese a ello es interesante notar la diferencia con los correspondientes patrones convectivos de dicha Sección, que muestra la influencia decisiva de cambiar la razón de aspecto y las CC laterales. También es interesante la comparación de la fenomenología con uno de los pocos ejemplos que hemos hallado en la literatura [86], con el que presenta gran similitud.

A diferencia del caso precedente, y por las razones discutidas en la Sección 4.4.2, en este caso ya no esperamos que el método desarrollado mantenga la homogeneidad de las CC con exactitud, pero sí que, por construcción (ver Apéndice B.2), preserve la incompresibilidad del campo de velocidad. Efectivamente, en todos los casos simulados se verificó que la incompresibilidad era mantenida esencialmente a precisión de máquina, calculando como antes el campo $\nabla \cdot \mathbf{u}$ y comparándolo, punto a punto y en valor RMS, con el campo de vorticidad $\nabla \times \mathbf{u}$, y obteniendo en ambos casos

$$\frac{|\nabla \cdot \mathbf{u}|}{|\nabla \times \mathbf{u}|} \sim 10^{-16}. \quad (5.11)$$

En cambio, si bien el campo de temperatura respeta las CC a precisión de máquina, como era de esperar, el campo de velocidad las viola, es decir, difiere de cero. La magnitud de esta violación va típicamente de $\sim 10^{-4}$ en

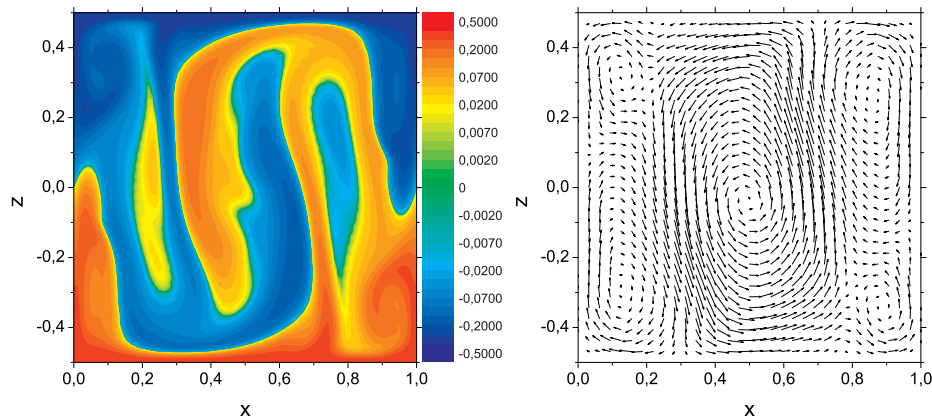


Figura 5.9: Campos de velocidad y temperatura para convección seca en la celda cuadrada a $R_T = 5000R_c$ y $t = 0,05t_c$ sobre una grilla de 96×96 puntos (en velocidades decimada a 32×32 puntos).

las esquinas a $\sim 10^{-8}$ en el centro de los lados, respecto del valor RMS de la velocidad en el interior de la celda. Esto es consecuencia del procedimiento de resolución de la ecuación de Laplace desarrollado en el Apéndice B.2, que en este caso es sólo aproximado.

El hecho de violar la CC de velocidad nula puede generar cierta incomodidad desde el punto de vista físico, ya que después de todo suponemos que las fronteras son rígidas e impenetrables a la materia. Más allá de que esta violación sea comparable o menor que la precisión con que estamos calculando los valores punto a punto de los campos (debido a las inexactitudes del modelo), esta objeción puede salvarse por el simple procedimiento de imponer, tras cada paso de integración temporal, CC homogéneas al campo de velocidad, asignando a cero sus valores sobre la frontera en la grilla directa. La consecuencia previsible es que entonces aparece una violación de la condición de incompresibilidad, de la misma magnitud, en el interior de la celda pero cerca de la frontera. Sin embargo resulta más intuitivo y tolerable, desde un punto de vista físico, interpretar que el fluido simulado no es exactamente incompresible, que pensar que las paredes simuladas no son exactamente rígidas.

En la práctica adoptamos el procedimiento de reimponer las CC homogéneas al campo de velocidad en la grilla directa, tras cada paso de integración temporal, trasladando así la inexactitud de las CC a la divergencia del mismo.

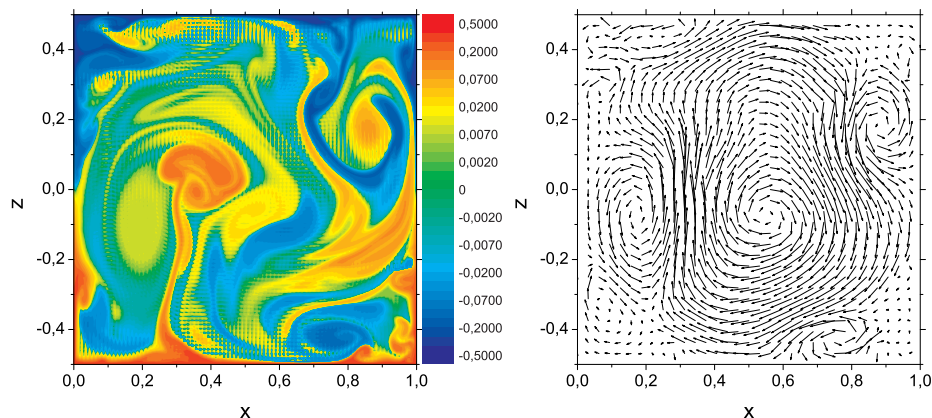


Figura 5.10: Campos de velocidad y temperatura para convección seca en la celda cuadrada a $R_T = 500000R_c$ y $t = 0,002t_c$ sobre una grilla de 256×256 puntos (en velocidades decimada a 32×32 puntos).

5.3. Celda triangular

Las simulaciones de convección seca en una celda triangular constituyen otro paso intermedio, cuyo objetivo es poner a prueba el método de las imágenes desarrollado en la Sección 4.6 y la solución de la ecuación de Laplace para el campo adimensional τ obtenida allí. El sistema de ecuaciones a resolver es el sistema WOB (3.142)–(3.144), sobre una grilla cuadrada (isotrópica) $N \times N$ e imponiendo las condiciones de simetría (4.118)–(4.121) respecto a la diagonal $x = z$; las ecuaciones discretizadas en la grilla conjugada son el sistema (4.136)–(4.138). Las CC para velocidad y temperatura son homogéneas de Dirichlet en los cuatro lados de la celda cuadrada; sobre la diagonal son homogéneas de Dirichlet para temperatura y velocidad normal, y de Neumann para velocidad tangencial. Para el campo de velocidad esto corresponde a CC *no-slip* en los cuatro lados de la celda, y *free-slip* en la diagonal. Para el campo de temperatura las CC son las de contacto térmico perfecto con todas las fronteras.

Las CC *free-slip* para velocidad sobre la diagonal (la base de la celda triangular) son consecuencia directa del método de las imágenes; pueden parecer poco realistas para convección seca, o al menos inconsistentes, ya que en las demás fronteras tenemos CC *no-slip*. Sin embargo, como ya hemos dicho no es nuestra intención en este caso modelar un sistema realista, sino sólo poner a prueba partes del código desarrollado. Además, estas CC serán realistas para convección húmeda [77], como se discutirá en la Sección 6.2.

Las elecciones de resolución temporal y espacial, y los parámetros, son los mismos de la Sección 5.1, y por los mismos motivos. Las escalas, en cambio, se han elegido para corresponder al tamaño del destilador real; en

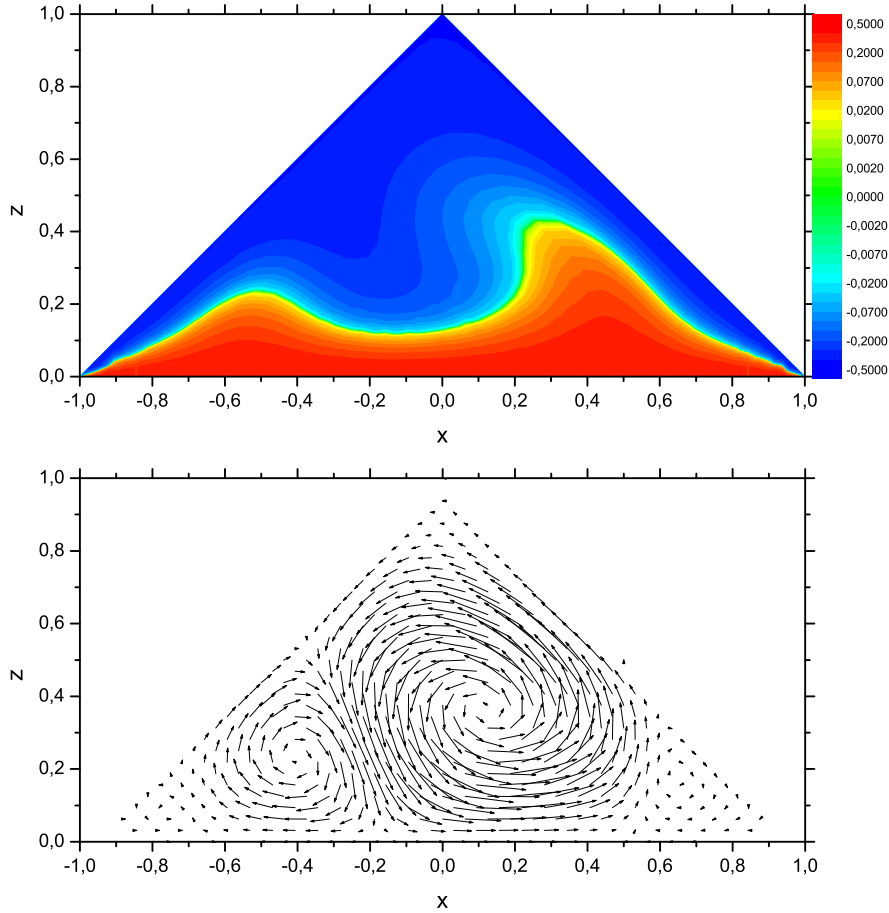


Figura 5.11: Campos de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección seca en la celda triangular a $R_T = 5R_c$ y $t = 2t_c$ sobre una grilla de 32×32 puntos.

particular, el alto de la celda triangular es ahora 0,65 m, con lo que el “alto” y “ancho” de la celda cuadrada son ambos de $\sqrt{2} \times 0,65$ m.

Las figuras 5.11 y 5.12 muestran, para dos de los casos simulados, los campos de velocidad y temperatura para los valores de R_T y los tiempos indicados al pie de cada una, con la misma elección de escalas y colores de la Sección 5.1, y tienen como en la Sección 5.2 un propósito simplemente ilustrativo. Pese a ello es interesante notar la diferencia con los correspondientes patrones convectivos de dichas Secciones, que muestra la influencia del cambio de geometría y de las CC inferiores. En particular puede apreciarse en la figura 5.12 que la distribución de temperaturas es más homogénea y más fría que para los casos comparables en las celdas cuadrada y rectangular. Ello es debido a que ahora la superficie fría (los “techos” de la celda) es mayor

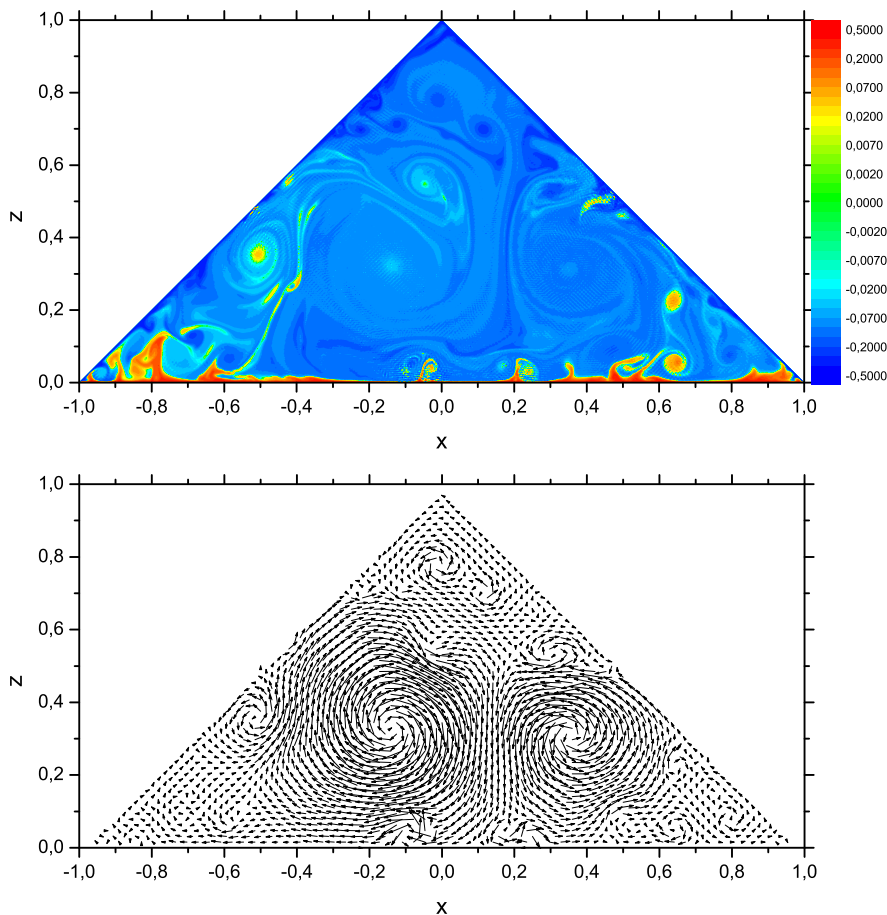


Figura 5.12: Campos de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección seca en la celda triangular a $R_T = 500000R_c$ y $t = 0,0015t_c$ sobre una grilla de 512×512 puntos (en velocidades decimada a 64×64 puntos).

que la caliente (la base) en un factor $\sqrt{2}$, y a que las CC *free-slip* en la base facilitan la aparición de estructuras convectivas más organizadas que transportan el calor con mayor eficiencia, las que se manifiestan como dos grandes vórtices en el campo de velocidades. En convección de Rayleigh–Bénard con CC horizontales *free-slip* y laterales periódicas, éstas estructuras se manifiestan como *flujo zonal* [87] (dos capas superpuestas de flujo horizontal en direcciones opuestas), y al contrario que aquí, *disminuyen* el transporte de calor.

Al igual que en la Sección 5.2, y por las razones discutidas en la Sección 4.4.2, las CC homogéneas para el campo de velocidad no son mantenidas con exactitud en los “techos” de la celda triangular, aunque sí se verifica la condición de incompresibilidad a precisión de máquina. Las CC *free-slip* en

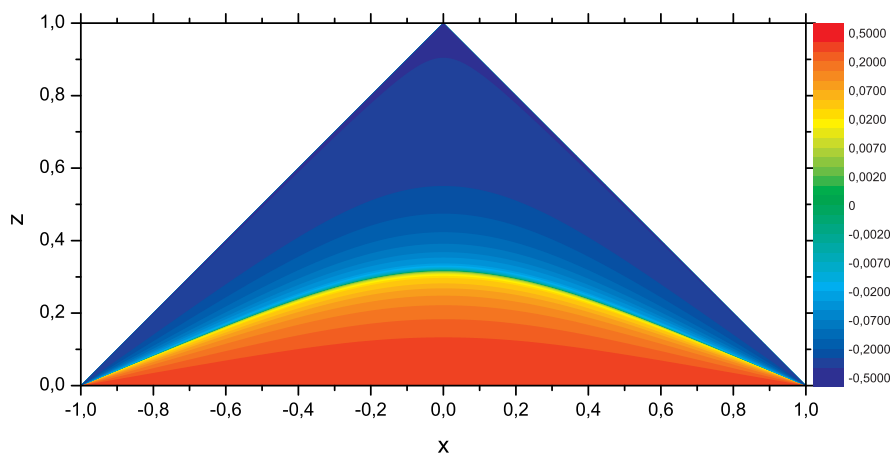


Figura 5.13: Campo de temperatura adimensional τ correspondiente al perfil conductivo adimensional en la celda triangular, sobre una grilla de 512×512 puntos.

la base, en cambio, se verifican con la anulaci3n en la frontera a precisi3n de m1quina, de la velocidad normal y de la derivada normal de la velocidad tangencial. Ello era de esperar dadas las simetrías impuestas al campo de velocidad en la celda cuadrada por el m3todo de las im1genes de la Secci3n 4.6. Como en la Secci3n precedente, adoptamos el procedimiento de reimponer las CC homog3neas al campo de velocidad en la grilla directa tras cada paso de integraci3n temporal (y generamos as3 una leve violaci3n de la incompresibilidad), pero *s3lo en las fronteras de la celda cuadrada*; las CC en la base de la celda triangular, que queremos que sean *free-slip* cuando simulemos convecci3n h3meda, no son alteradas.

La soluci3n obtenida en la Secci3n 4.6 para la ecuaci3n de Laplace del campo adimensional τ se muestra en la figura 5.13. Puede apreciarse a simple vista que satisface las CC requeridas, $\tau = \frac{1}{2}$ en la base y $\tau = -\frac{1}{2}$ en los techos, y num3ricamente se verifica que lo hace a precisi3n de m1quina. Esto era de esperar ya que a diferencia de las soluciones de la ecuaci3n de Laplace obtenidas en cada paso de integraci3n por el m3todo iterativo de la Secci3n 4.4.2, esta soluci3n se obtiene de manera anal3tica, y es por lo tanto *exacta*.

Este perfil conductivo de temperatura fu3 el utilizado como CI en todas las simulaciones de convecci3n seca en la celda triangular. Debe notarse que estas CI ser3an dif3ciles de implementar en la pr1ctica. Sin embargo tienen dos ventajas: por un lado permiten un r1pido inicio de la etapa convectiva, ya que el perfil conductivo no es hidrost1tico; y por otro proveen de un estado conductivo de referencia que resultar1 muy 3til en la Secci3n 6.2 para la definici3n y c1lculo de los n3meros de Nusselt [88] y Sherwood [89].

La inexistencia de un perfil conductivo hidrostático hace innecesario en este caso desestabilizar la condición inicial; sin embargo, para evitar que la simetría bilateral de la celda triangular origine patrones convectivos con un sesgo sistemático, igualmente se sumó al perfil conductivo un campo de fluctuaciones Gaussianas de amplitud comparable a la del ruido térmico [44] para construir la CI de las simulaciones.

Capítulo 6

Convección húmeda

En este capítulo mostraremos los resultados de aplicar el método pseudo-espectral del Capítulo 4 a las ecuaciones de Oberbeck–Boussinesq para convección húmeda en una celda rectangular (3.133)–(3.136) y triangular (3.109)–(3.112). Destacamos nuevamente que, si bien el primer problema es de interés por sí mismo, no es parte de los objetivos de esta Tesis, y sólo lo hemos utilizado como otro paso de prueba para los códigos numéricos desarrollados.

6.1. Celda rectangular

Las simulaciones de convección húmeda en una celda rectangular constituyen un último paso intermedio, cuyo objetivo es esencialmente poner a prueba el funcionamiento del modelo termodinámico desarrollado en el Apéndice A y expuesto resumidamente en la Sección 3.1. El sistema de ecuaciones a resolver es el sistema WOB (3.133)–(3.136), sobre una grilla $N \times (N/2)$ análoga a la de la Sección 5.1. Las CC para velocidad, temperatura y concentración de agua son periódicas libres en los lados y homogéneas en la base y el techo. Para el campo de velocidad estas últimas corresponden a CC *no-slip*; para el campo de temperatura a contacto térmico perfecto con la base (caliente) y el techo (frío); y para la concentración de agua, a equilibrio de saturación con cada interfase, a la temperatura correspondiente.

Las elecciones de resolución temporal y espacial, y las escalas, son también los mismos de la Sección 5.1, y por los mismos motivos. En particular, el ancho y alto de la celda son de 1 m y 0,5 m, respectivamente.

Una diferencia fundamental con el caso de convección seca es que ahora tenemos dos parámetros de control, la temperatura de referencia \bar{T} y la diferencia de temperatura ΔT ; para convección seca sólo teníamos ΔT , ya que el aire seco se trataba como gas ideal, y todas sus propiedades se asumían a 25°C. Esto amplía el espacio de parámetros a explorar, pero debe recordarse que no pretendemos realizar un estudio de este caso de por sí,

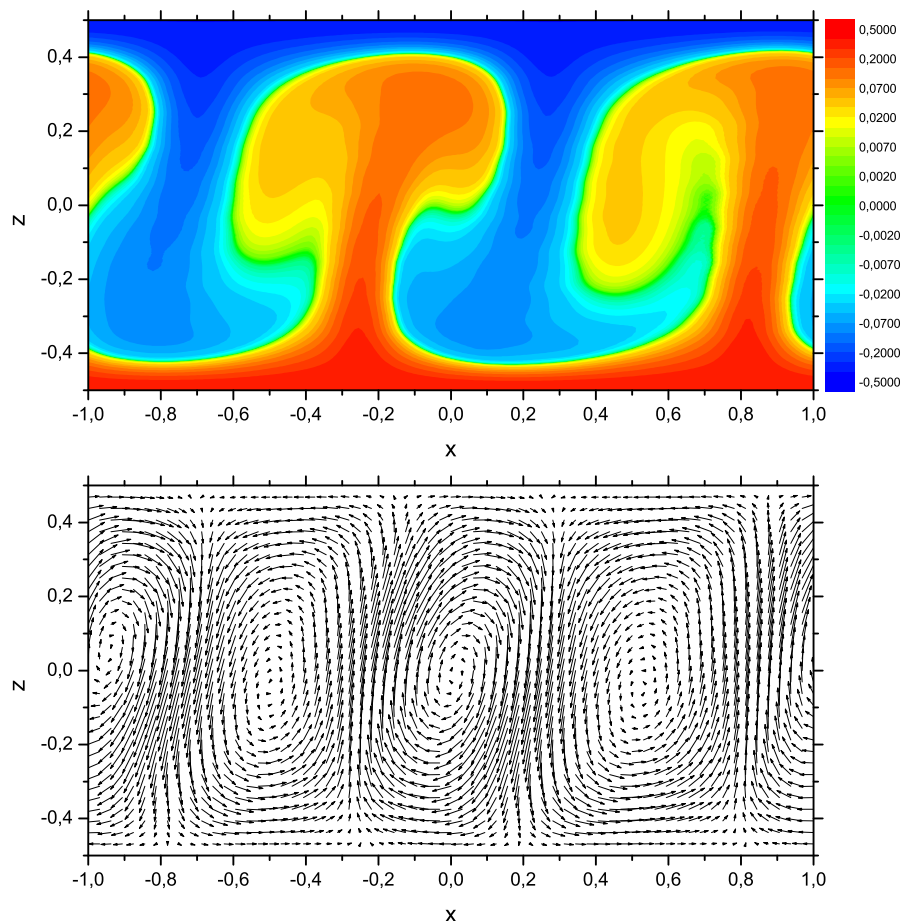


Figura 6.1: Campo de temperatura (arriba) y velocidad (abajo) para convección húmeda en la celda rectangular a $\bar{T} = 18^\circ\text{C}$, $\Delta T = 0,005^\circ\text{C}$ y $t = 0,3t_c$ sobre una grilla de 64×32 puntos.

sino sólo como un caso de prueba para el modelo termodinámico. Por ello presentaremos resultados solamente para un par de casos que consideramos relevantes a este propósito. Debe notarse también que todos los coeficientes termodinámicos ya no toman valores fijos, sino que para cada simulación son calculados usando el modelo termodinámico de la Sección 3.1.

En cuanto a comparaciones con la literatura, si bien hay disponibles diversos resultados [46, 47, 49, 50, 51] éstos corresponden a convección tridimensional en condiciones típicas de la atmósfera terrestre. La gran diferencia con las condiciones dentro del destilador, que son mucho más calientes y húmedas, y la diferente dimensionalidad de las simulaciones, hacen que toda comparación resulte en el mejor de los casos cualitativa.

La figura 6.1 muestra los campos de temperatura y velocidad a $t =$

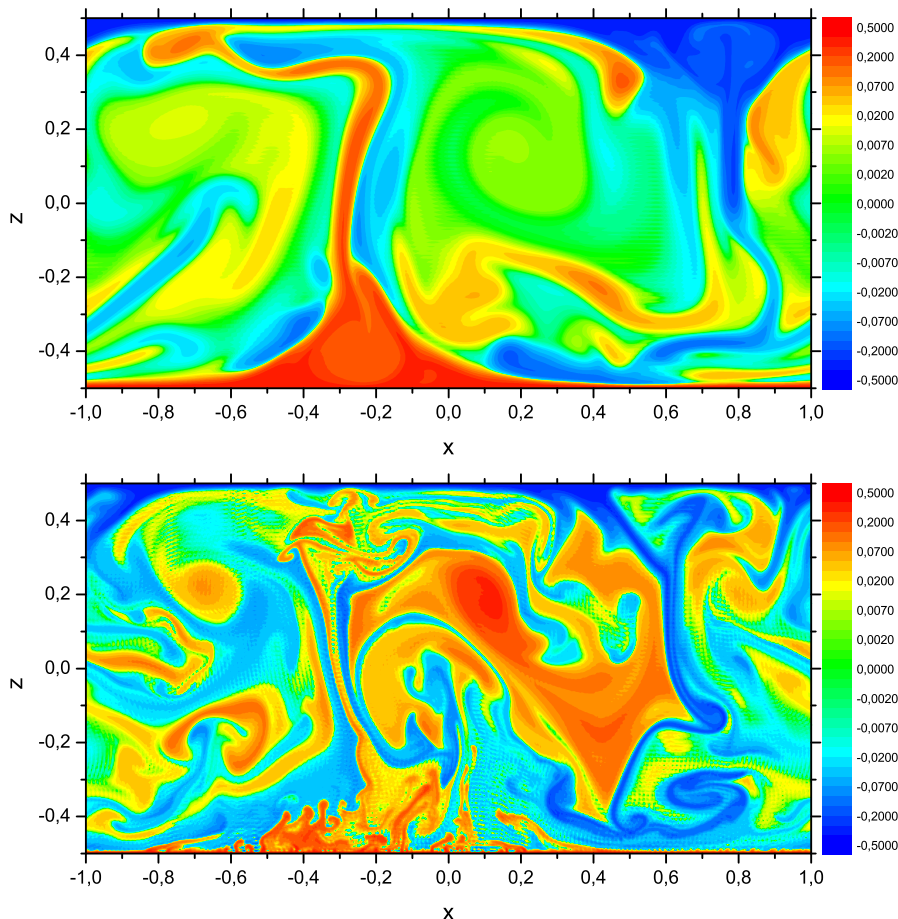


Figura 6.2: Campo de temperatura para convección seca (arriba) y húmeda (abajo) en la celda rectangular a $\bar{T} = 54^\circ\text{C}$, $\Delta T = 12^\circ\text{C}$ y $t = 0,01t_c$ sobre una grilla de 512×256 puntos.

$0,3t_c$ (en estado de régimen) para convección húmeda con $\bar{T} = 18^\circ\text{C}$ y $\Delta T = 0,005^\circ\text{C}$. Estos valores corresponden a $R_{T-} \sim 0,8 \times 10^5 \sim 47R_c$ y $R_{T+} \sim 10^5 \sim 58R_c$, y fueron seleccionados por ser un caso directamente comparable con el de convección seca para $R = 50R_c$, que se muestra en la figura 5.2, en un régimen estacionario y ordenado. Resulta evidente la influencia de la humedad sobre los patrones convectivos, que en este régimen sabemos [46] que debería manifestarse en un notable estrechamiento lateral (aproximadamente en un factor 2) de las columnas ascendentes y descendentes y de los vórtices asociados; nótese a este respecto que en convección húmeda la celda contiene cuatro columnas (dos ascendentes y dos descendentes) y cuatro vórtices, exactamente el doble que para convección seca. Este efecto es entonces bien reproducido por nuestro modelo.

En la figura 6.2 se muestra el campo de temperatura para $\bar{T} = 54^\circ\text{C}$ y $\Delta T = 12^\circ\text{C}$, valores similares a los más elevados que encontraremos en las simulaciones de la Sección 6.2. Las dos imágenes corresponden al resultado de evolucionar hasta $t = 0,01t_c$, sobre una grilla de 512×256 puntos, y partiendo de exactamente la misma condición inicial, el sistema seco y el húmedo. Como puede apreciarse, si bien las principales estructuras convectivas (una gran columna ascendente de base ancha situada aproximadamente en $x = -0,2$, $z = -0,5$ y una descendente con base en $x = 0,7$, $z = 0,5$) están presentes en ambos casos e incluso guardan cierta similaridad, la estructura es mucho más rica para convección húmeda. En particular la base de la columna ascendente, que para convección seca es esencialmente una gran zona caliente indiferenciada, en convección húmeda se ha fragmentado en una multitud de columnas más pequeñas, lo que muestra la inestabilidad mucho mayor introducida por la presencia de agua y el gran calor latente liberado o absorbido en sus transiciones de fase [46].

Si bien se realizaron varios experimentos numéricos adicionales sobre la línea de los ya expuestos, todos con resultados satisfactorios, la escasez de situaciones comparables en la literatura conocida por nosotros impide avanzar mucho más por esta vía. Una validación completa del modelo termohidrodinámico del Capítulo 3 deberá esperar entonces hasta la Sección 6.2, donde compararemos los resultados de las simulaciones con resultados experimentales.

6.2. Celda triangular

Llegamos aquí a la serie de simulaciones que constituyen el objetivo central de esta Tesis: modelar numéricamente la termohidrodinámica en el interior de un destilador solar de batea, con un grado de detalle que permita reproducir los resultados experimentales obtenidos con un modelo de laboratorio [1]. Procederemos entonces a explicar en detalle los experimentos numéricos realizados y los resultados obtenidos.

6.2.1. Ciclo diario experimental

En los experimentos realizados con el modelo de laboratorio, se intentó reproducir el ciclo diario de calentamiento y enfriamiento de un destilador en condiciones de campo [1]. Para ello el agua de la batea fue calentada según un protocolo periódico de 24 hs, a lo largo de cinco días consecutivos. En el panel superior de la figura 6.3 se muestran los valores de \bar{T} y ΔT experimentales, promediados sobre los cinco ciclos diarios a fin de disminuir el ruido inherente a las mediciones. De allí extraeremos los valores de los parámetros de control para las simulaciones numéricas.

Una primera serie de experimentos numéricos mostró que simular el ciclo completo con una resolución temporal aceptable llevaría varios años de

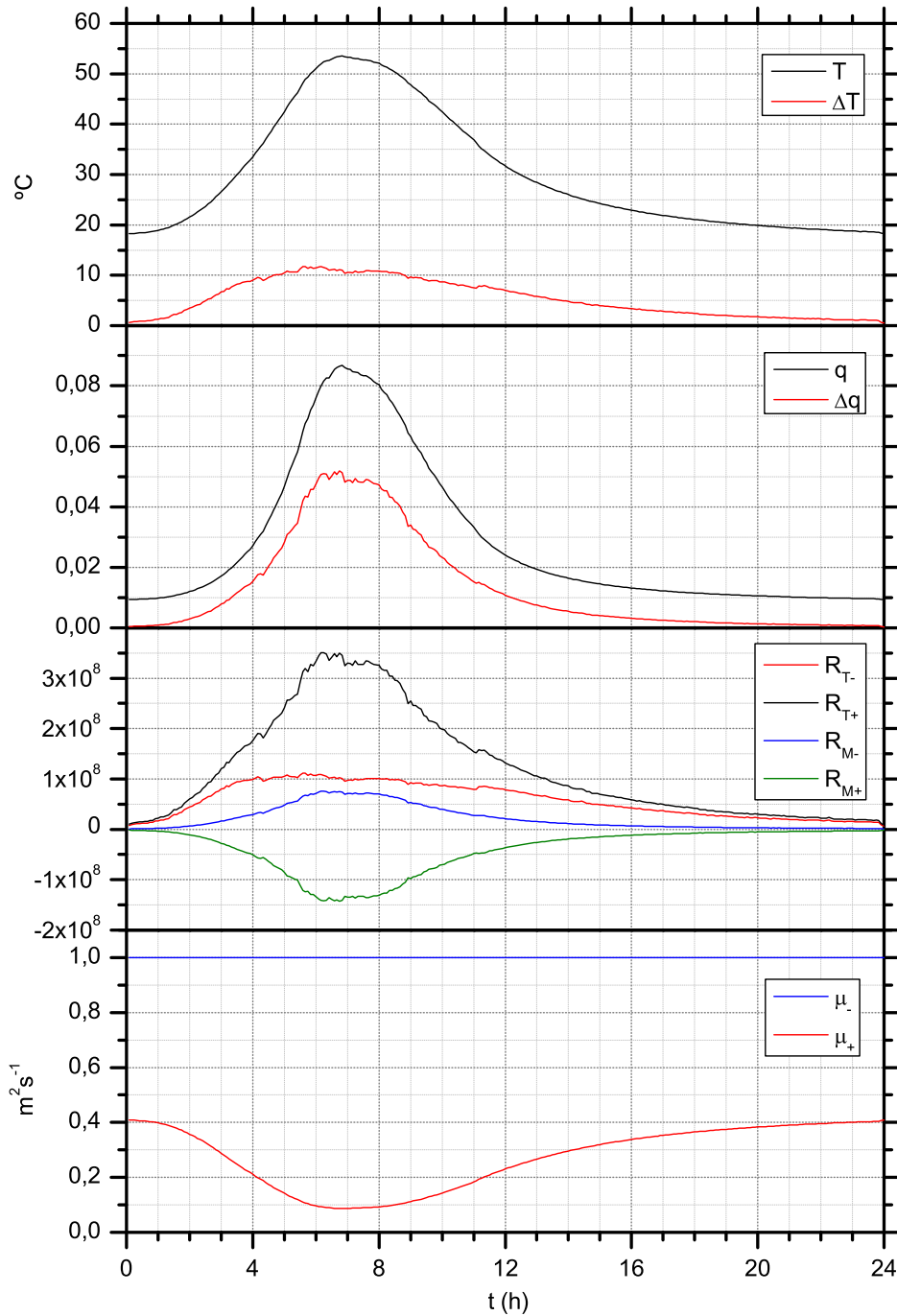


Figura 6.3: Ciclo diario de los parámetros y coeficientes de las ecuaciones WOB para convección húmeda en la celda triangular. De arriba a abajo: \bar{T} y ΔT en $^{\circ}\text{C}$; q y Δq ; R_{T-} , R_{T+} , R_{M-} y R_{M+} ; μ_- y μ_+ en $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$; en función de t en horas (con cero arbitrario).

CAPÍTULO 6. CONVECCIÓN HÚMEDA

Tabla 6.1: Parámetros de control, tamaños de grilla y valores de q , Δq , R_{T-} , R_{T+} , R_{M-} y R_{M+} y μ_+ para las simulaciones de convección húmeda en la celda triangular ($\mu_- = 1$ por definición).

\bar{T} °C	ΔT °C	N	q $\times 10^{-4}$	Δq $\times 10^{-4}$	R_{T+} $\times 10^6$	R_{T-} $\times 10^6$	R_{M+} $\times 10^6$	R_{M-} $\times 10^6$	μ_+ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
18.0	0.6	192	93.9	4.1	10.0	7.8	-1.6	0.9	0.41
20.0	2.3	256	106.4	17.6	38.6	29.4	-6.7	4.0	0.38
25.0	5.5	256	153.8	61.2	101.0	69.9	-21.9	13.0	0.31
30.0	8.6	384	215.9	116.1	152.6	94.5	-39.5	23.2	0.25
35.0	9.6	512	296.3	175.8	190.8	104.0	-56.9	33.0	0.20
40.0	10.0	512	406.8	241.6	220.8	103.4	-74.4	42.3	0.16
45.0	10.5	512	537.9	325.3	260.7	104.6	-96.0	53.5	0.13
48.2	11.7	512	650.1	421.0	312.7	111.7	-120.8	66.0	0.11
50.0	11.6	768	720.9	458.2	327.7	109.4	-129.5	70.0	0.10
52.0	11.4	768	815.9	510.4	350.4	107.5	-141.7	75.4	0.09
52.6	11.4	768	826.3	508.7	347.7	105.7	-141.0	74.8	0.09
53.5	11.0	768	867.8	512.5	345.0	101.3	-141.0	74.3	0.09

tiempo de procesamiento. Sin embargo los mismos experimentos mostraron que partiendo de una CI como la de la Sección 5.3, el sistema entraba en régimen en un tiempo varios órdenes de magnitud más corto (de menos de un minuto en todos los casos). Por ello decidimos seleccionar una serie de valores de los parámetros de control que juzgamos representativos de las condiciones en diferentes puntos del ciclo, y simular el comportamiento del destilador para cada uno, manteniendo en cada caso constantes los valores de dichos parámetros. Los valores seleccionados se muestran en la Tabla 6.1.

6.2.2. Ecuaciones, CC y resolución

En todos los casos las ecuaciones simuladas corresponden al sistema WOB (3.109)–(3.112), en una celda cuadrada de dimensiones $\ell \times \ell$. Las CC para los campos adimensionales de velocidad \mathbf{u} , temperatura θ y concentración χ son homogéneas de Dirichlet en los cuatro lados de esta celda.

La celda triangular y el campo gravitatorio son los descritos en la Sección 3.2.12, y los campos dentro de ella se obtienen por el método de las imágenes y usando las condiciones de simetría de la Sección 4.6, lo que da CC homogéneas de Dirichlet para velocidad normal, temperatura y concentración en la base de la celda triangular, y CC homogéneas de Neumann para velocidad tangencial.

El campo adimensional estacionario τ , solución de la ecuación de Laplace adimensional con CC $\tau = \frac{1}{2}$ en la base $z = x$ de la celda triangular y $\tau = -\frac{1}{2}$

en sus techos $x = 0$ y $z = \ell$, se construye analíticamente como se describe en la Sección 4.6.

Físicamente, las CC para el sistema así construido son: *no-slip* en los techos y *free-slip* en la base para velocidad; contacto térmico perfecto en la base (caliente, a temperatura $\frac{1}{2}$) y los techos (fríos, a temperatura $-\frac{1}{2}$) para temperatura; y equilibrio de saturación a la temperatura de la interfase para concentración. Las CC *free-slip* en la base de la celda triangular son consecuencia directa del uso del método de las imágenes. Sin embargo en este caso la base de la celda triangular es la superficie del agua de la batea, por lo que el contacto allí es entre dos fluidos, y no entre un fluido y una pared rígida. Estas CC, sin ser exactas, son entonces una aproximación mucho mejor a las CC reales [77] que las CC *no-slip*.

Discretizado sobre una grilla directa isotrópica $N \times N$, y representado en la grilla conjugada, el sistema de ecuaciones resultante es el (4.125)–(4.128). En cada caso el tamaño N de la grilla se elige de modo de obtener una buena resolución de la capa límite, pero no mucho más grande. Es decir, trabajamos lo más cerca posible de la resolución espacial óptima. Los tamaños resultantes para cada valor de los parámetros de control que simularemos se muestran en la Tabla 6.1.

Una breve serie de experimentos numéricos exigiendo al integrador temporal precisiones relativas de 10^{-2} a 10^{-5} , confirmó la validez en este caso del resultado discutido en la Sección 5.1.1. Adoptamos entonces como antes una precisión relativa de 10^{-3} como nuestro standard para la integración temporal.

6.2.3. Escalas y parámetros

El modelo de laboratorio del destilador [1] en la configuración 2 descrita en la Sección 2.1.2, tiene una base rectangular y un techo a dos aguas con ángulos de 45° . La altura de la cúspide sobre la base es $H = 0,65$ m, que será entonces la unidad de longitud en el proceso de adimensionalización de las ecuaciones WOB en la Sección 3.2.9, y es la unidad de longitud para las variables adimensionales. La longitud de la base será entonces $L = 1,30$ m.

Nótese que ninguna de estas dos cantidades es en este caso el lado ℓ de la celda cuadrada sobre la que discretizamos en la grilla directa. En cambio tendremos $\ell = \sqrt{2}H = 0,92$ m. Es decir, en variables adimensionales los lados de la celda cuadrada tienen longitud $\sqrt{2}$.

Los parámetros de control \bar{T} y ΔT son los únicos que podemos elegir libremente en este caso, aparte de la presión ambiente p . El modelo termodinámico de la Sección 3.1 provee los valores de todas las funciones y coeficientes termodinámicos a partir de ellos. Las expresiones relevantes de los coeficientes termodinámicos a la presión de saturación son las resumidas en el apéndice A.13, y la linealización óptima de la concentración de saturación q_s será la provista en el Apéndice A.14. El estado de referencia

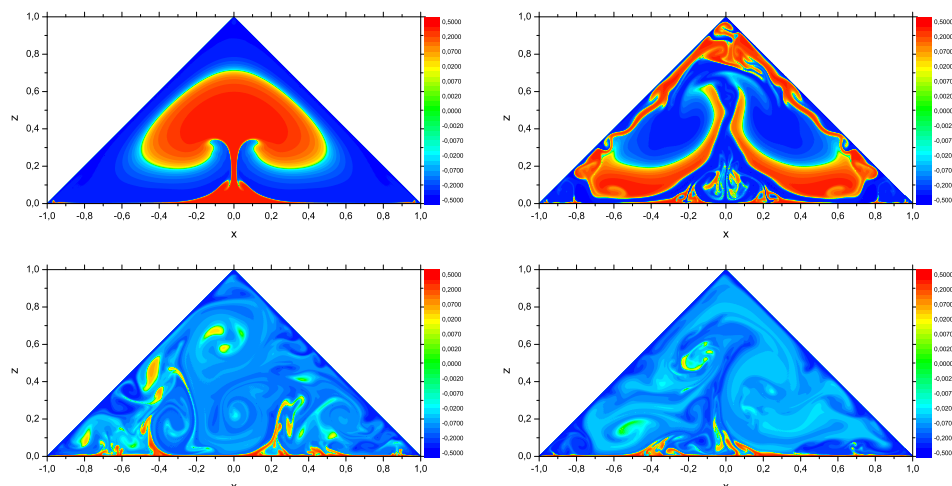


Figura 6.4: Campo de temperatura para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$ y $\Delta T = 9,6^\circ\text{C}$, a tiempos $t = 0,00025t_c$ (arriba izquierda), $t = 0,00050t_c$ (arriba derecha), $t = 0,00100t_c$ (abajo izquierda) y $t = 0,00200t_c$ (abajo derecha), sobre una grilla de 512×512 puntos.

será entonces, en todas las simulaciones, el *perfil conductivo saturado estático* descrito en la Sección 3.2.7.

No hemos elegido aún la presión ambiente p a la que realizaremos las simulaciones, y muchas de las funciones del modelo termodinámico dependen de ella. Extrañamente, aunque la ciudad de Salta se encuentra aproximadamente a 1200 m sobre el nivel del mar, en la fecha de realización del experimento (8 al 13 de mayo de 2006) la presión ambiente se mantuvo apenas por debajo de los 1000 mb [1, 22]. Realizaremos entonces todas nuestras simulaciones para una presión $p = 1000$ mb. Los valores resultantes de los coeficientes q , Δq , R_{T-} , R_{T+} , R_{M-} y R_{M+} y μ_+ para cada simulación se muestran en la Tabla 6.1; debe recordarse que $\mu_- = 1$ por definición.

Finalmente, diremos que para todos los valores seleccionados de los parámetros de control la escala de tiempos definida por el tiempo de difusión térmica vertical justo por debajo de la saturación $t_c = H^2/\kappa_-$, resulta aproximadamente la misma, ~ 19000 s. Este es un tiempo muy largo (más de cinco horas), pero debemos recordar que la dinámica convectiva se desarrolla sobre tiempos mucho más cortos, como veremos enseguida.

6.2.4. Condiciones iniciales

Las CI utilizadas en todas las simulaciones son las mismas, y corresponden al perfil conductivo saturado estacionario de la Sección 3.2.7. Dado que el perfil conductivo no es una solución hidrostática, esta CI resulta poco realista (y difícilmente realizable) desde un punto de vista físico. Sin embar-

go en las simulaciones tiene dos ventajas: por un lado garantiza un rápido comienzo de la corriente convectiva, como se muestra en la figura 6.4, que no se conseguiría partiendo desde CI más realistas como igualar inicialmente el campo de temperaturas a la CC “fría”; y por otra parte proveen un conveniente estado conductivo de referencia para el cálculo de los números de Nusselt [88] y Sherwood [89].

La inexistencia de un perfil conductivo hidrostático hace innecesario desestabilizar la condición inicial; sin embargo, para evitar que la simetría bilateral de la celda triangular origine patrones convectivos con un sesgo sistemático, igualmente se sumó al perfil conductivo un campo de fluctuaciones Gaussianas de temperatura, de amplitud comparable a la del ruido térmico [44] para construir la CI de las simulaciones.

6.2.5. Fenomenología

En las figuras 6.5 a 6.16 se muestran los campos de temperatura, contenido de agua, humedad relativa y velocidad para convección húmeda en la celda triangular, para los valores de \bar{T} , δT y t indicados al pie de cada una. Los tiempos son los finales de cada simulación, ya que algunas simulaciones aún estaban corriendo al momento de la escritura de esta Tesis, pero en todos los casos son bastante mayores al necesario para la entrada en régimen del sistema, es decir para que desaparezca la memoria de las CI.

Por claridad, en todas las figuras el campo de velocidades se muestra sobre una grilla de 64×64 puntos, decimando la grilla original. Los campos de temperatura, concentración y humedad relativa, en cambio, se muestran a resolución completa. En todos los casos los ejes coordenados se hallan etiquetados en unidades adimensionales, normalizadas al alto de la celda.

Debe notarse que el campo de temperatura mostrado es $\tau + \theta$, para facilitar la interpretación. La escala de colores va de azul (CC fría, $\tau + \theta = -\frac{1}{2}$) a rojo (CC caliente, $\tau + \theta = \frac{1}{2}$), 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. Análogamente, para el campo de concentración de agua se muestra $\tau + \chi$, y la escala de colores tiene un significado similar, con $\tau + \chi = -\frac{1}{2}$ correspondiente a saturación a la temperatura fría y $\tau + \chi = \frac{1}{2}$ a saturación a la temperatura caliente.

El campo de humedad relativa se define [39] como

$$h_R = \frac{q(1 - q_s)}{q_s(1 - q)} \quad (6.1)$$

y se calcula a partir de los campos θ , χ y τ de acuerdo a las transformaciones de adimensionalización de la Sección 3.2.9. Este campo no es una variable

dinámica en las simulaciones, y en realidad es redundante, pero su visualización es de gran ayuda en la interpretación fenomenológica. La escala de colores es nuevamente logarítmica en ambas direcciones a partir de $h_R = 1$, que corresponde a saturación, yendo de azul (aire seco, $h_R = 0$) a rojo (aire sobresaturado con la misma proporción de agua líquida que vapor, $h_R = 2$). Se ha añadido una delgada línea gris marcando el valor $h_R = 1$, que separa el aire sobresaturado donde las gotas de agua forman niebla, del aire claro subsaturado.

La fenomenología hallada es extremadamente rica en detalles, y una descripción completa sería casi imposible. Notaremos solamente algunos rasgos sobresalientes.

A temperaturas bajas (figuras 6.5 y 6.6) resulta evidente un estado de régimen mas o menos ordenado, consistente en dos vórtices contrarrotantes con una columna caliente, húmeda y sobresaturada ascendente en el centro. Si bien el estado de régimen se desordena a temperaturas mayores, este rasgo permanece en general invariante, y aunque a temperaturas altas (figuras 6.12 a 6.16) la columna central puede desaparecer transitoriamente, eventualmente vuelve a formarse. Correspondientemente, la dominancia de los vórtices principales disminuye al aumentar la temperatura, y a temperaturas altas pierden simetría y pueden llegar a desaparecer por completo para ser reemplazados transitoriamente por otras estructuras (ver por ejemplo la figura 6.13).

La persistencia de este esquema de circulación general puede explicarse cualitativamente por la geometría y las CC: los techos fríos e inclinados favorecen la formación de corrientes frías descendentes justo debajo de ellos, y la circulación que éstas inducen no se ve obstaculizada al llegar a la base, debido a las CC *free-slip*. Las columnas ascendentes incipientes son entonces arrastradas hacia el centro de la base, reuniéndose en una sola columna relativamente alta y estrecha que asciende aproximadamente hacia (y hasta) la cúspide, estableciendo una circulación general que se autorrefuerza.

Otro rasgo persistente y notable, sobre todo a temperaturas altas, es la formación de una “burbuja” estancada, fría y sobresaturada justo bajo la cúspide del techo. Esta burbuja tiende a crecer y eventualmente se desestabiliza, liberando columnas descendentes de aire frío y extremadamente sobresaturado, las que a veces caen directamente y otras deslizan por la cara interna del techo antes de desprenderse. Este fenómeno es visible sobre todo en el campo de humedad relativa (ver figuras 6.11, 6.12, 6.14, 6.15 y 6.16).

La presencia y dinámica de esta burbuja puede también entenderse cualitativamente como resultado de la formación de una zona de estancamiento justo bajo la cúspide debido a las CC *no-slip*. Esta región estancada es naturalmente muy fría, al estar en estrecho contacto con ambos techos, y es frecuentemente “empujada” desde abajo por la corriente ascendente caliente que, si bien no logra desplazarla, le transfiere por difusión cantidades apreciables de agua. La saturación de la burbuja va entonces aumentando hasta

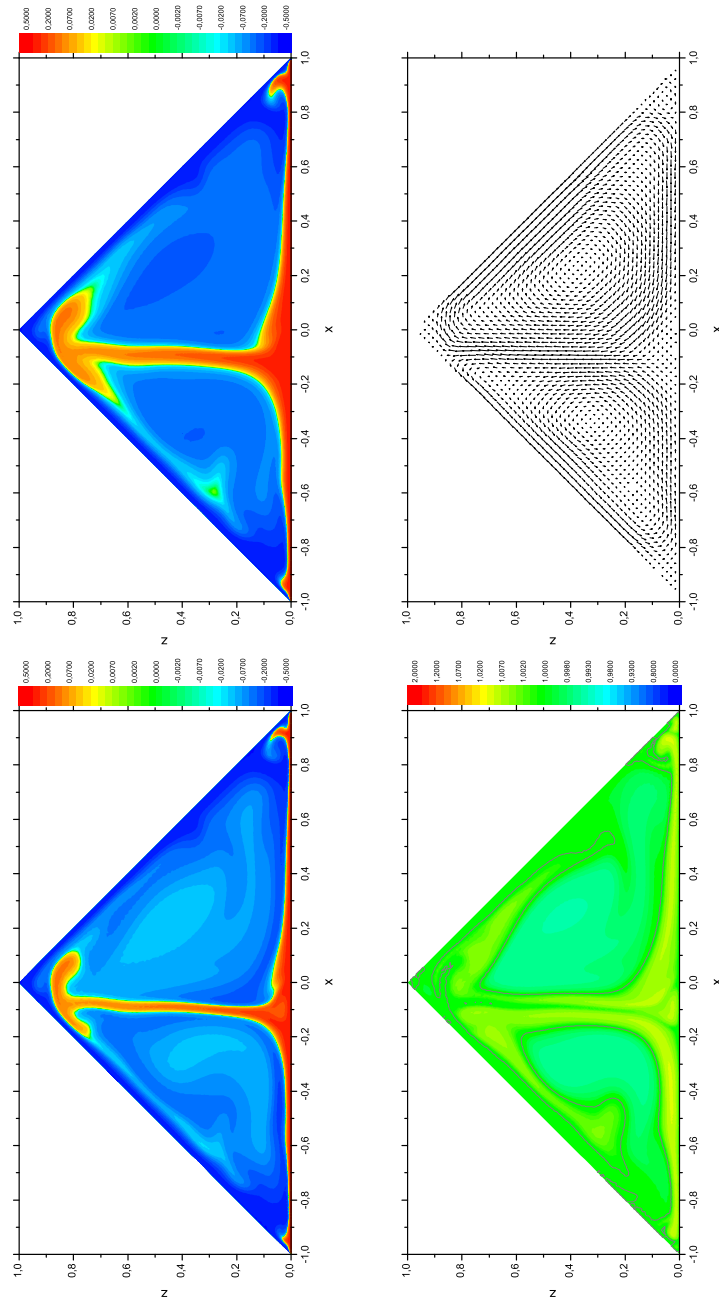


Figura 6.5: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\bar{T} = 18^\circ\text{C}$, $\Delta T = 0,6^\circ\text{C}$, $t = 0,01t_c$.

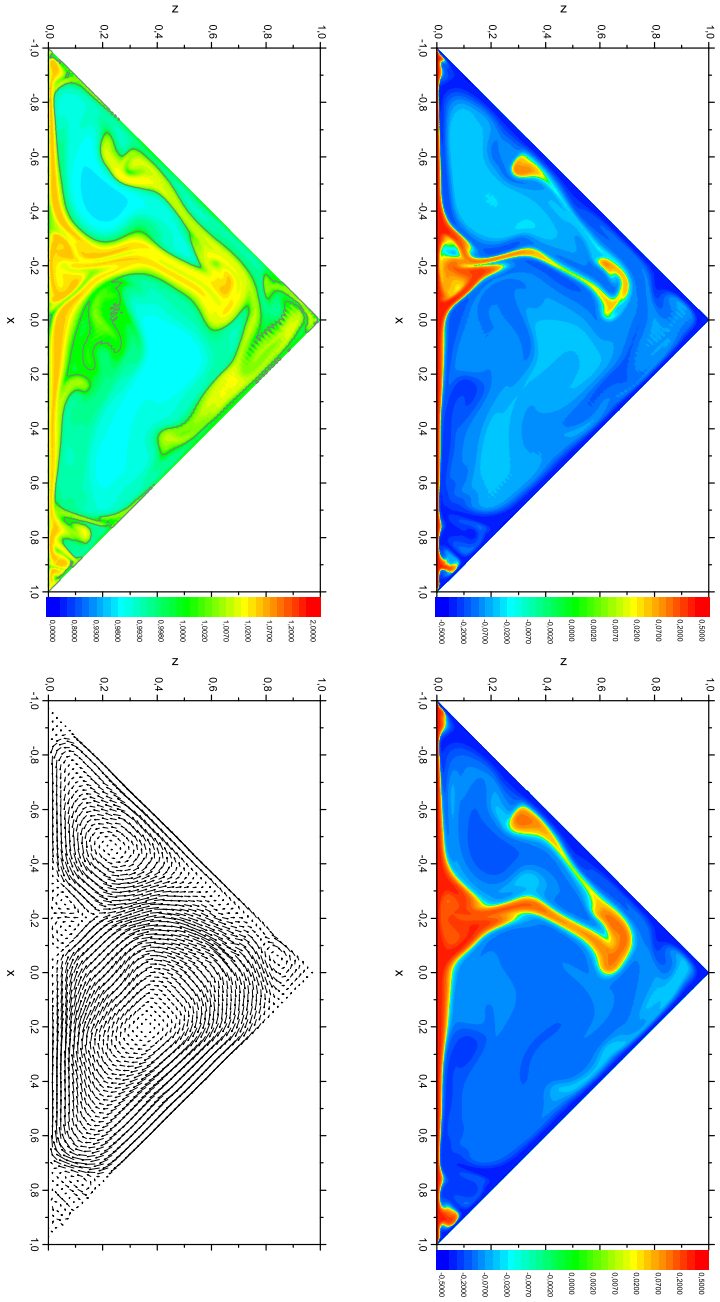


Figura 6.6: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $T = 20^\circ\text{C}$, $\Delta T = 2,3^\circ\text{C}$, $t = 0,01t_c$.

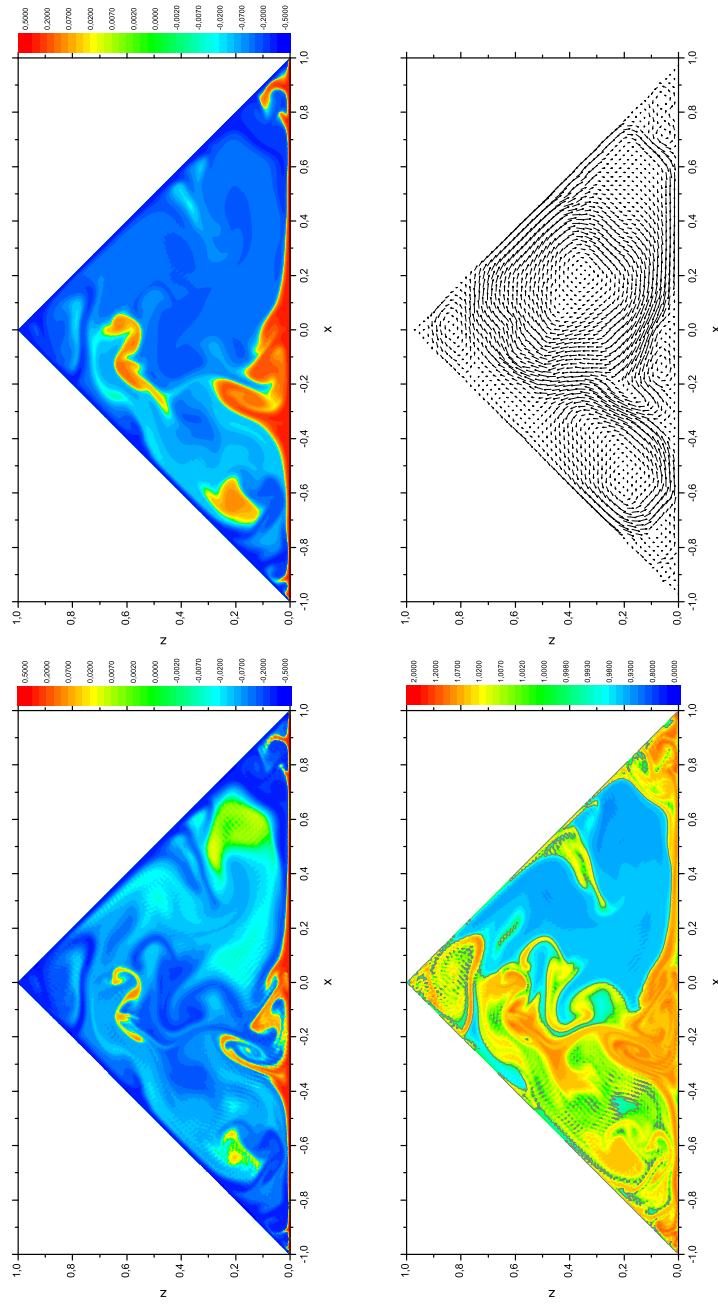


Figura 6.7: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\bar{T} = 25^\circ\text{C}$, $\Delta T = 5,5^\circ\text{C}$, $t = 0,01t_c$.

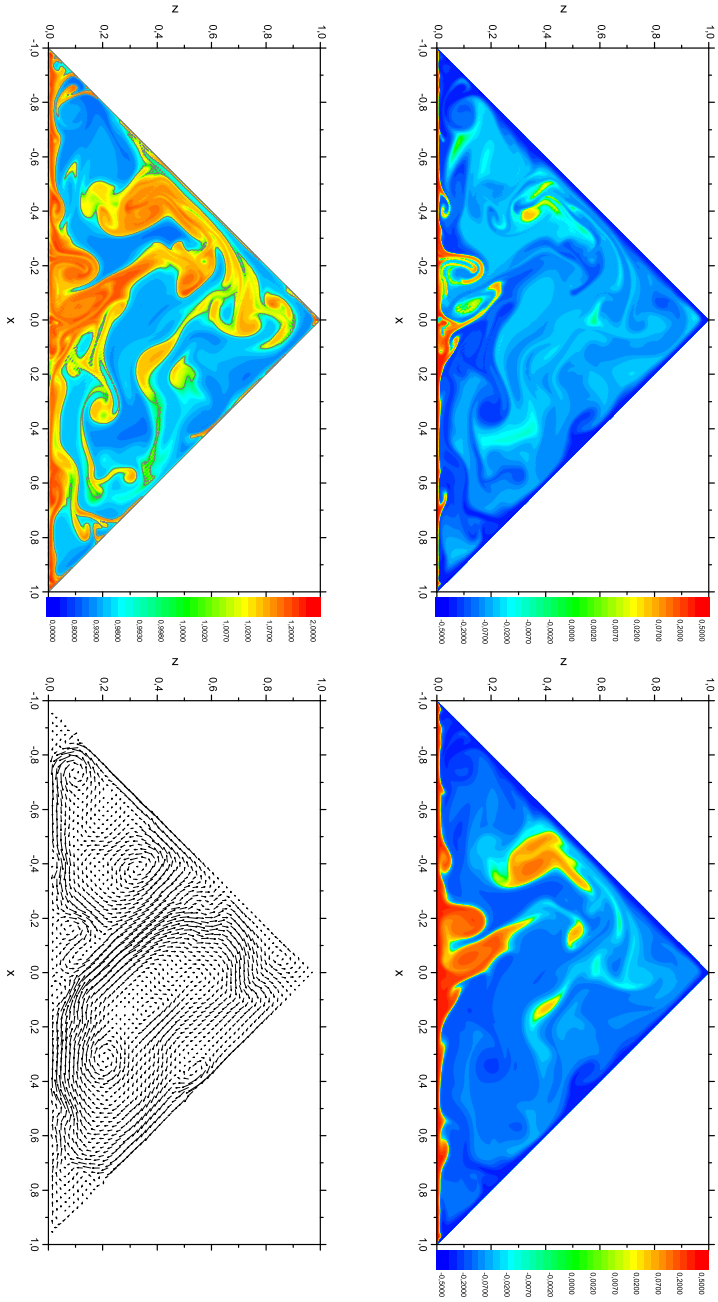


Figura 6.8: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $T = 30^\circ\text{C}$, $\Delta T = 8,6^\circ\text{C}$, $t = 0,01t_c$.

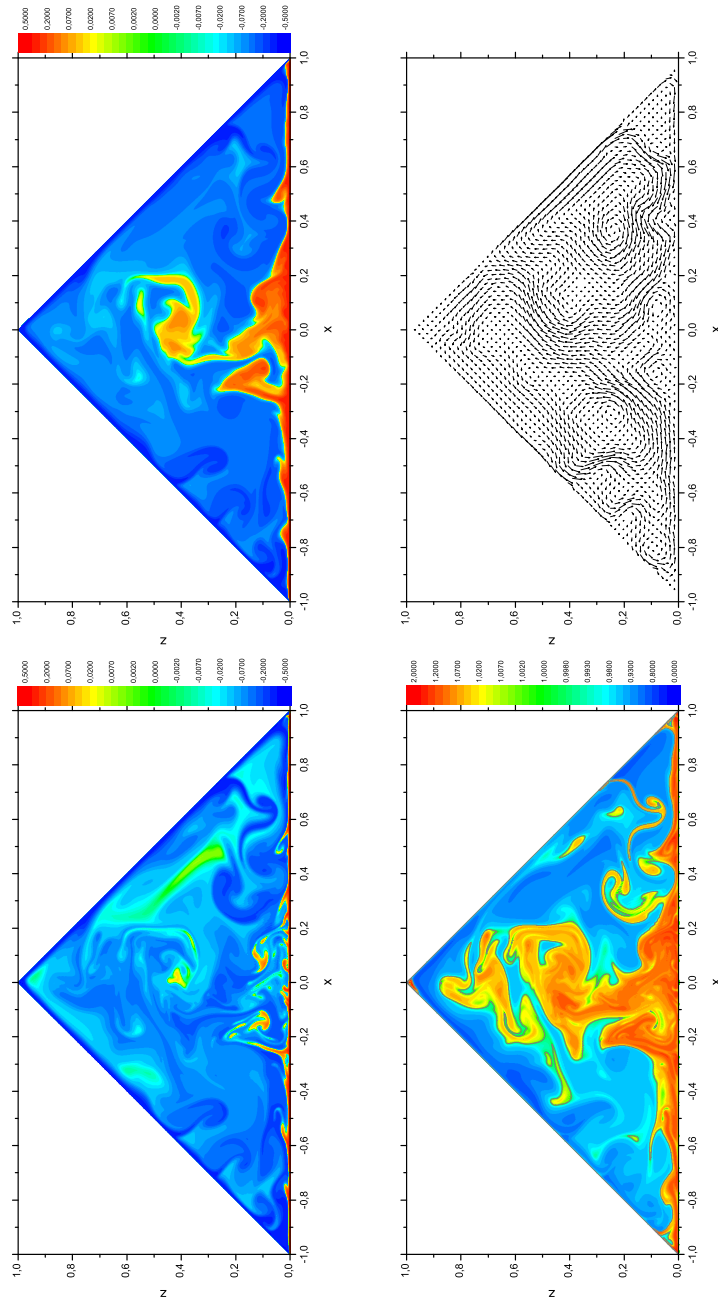


Figura 6.9: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$, $\Delta T = 9,6^\circ\text{C}$, $t = 0,01t_c$.

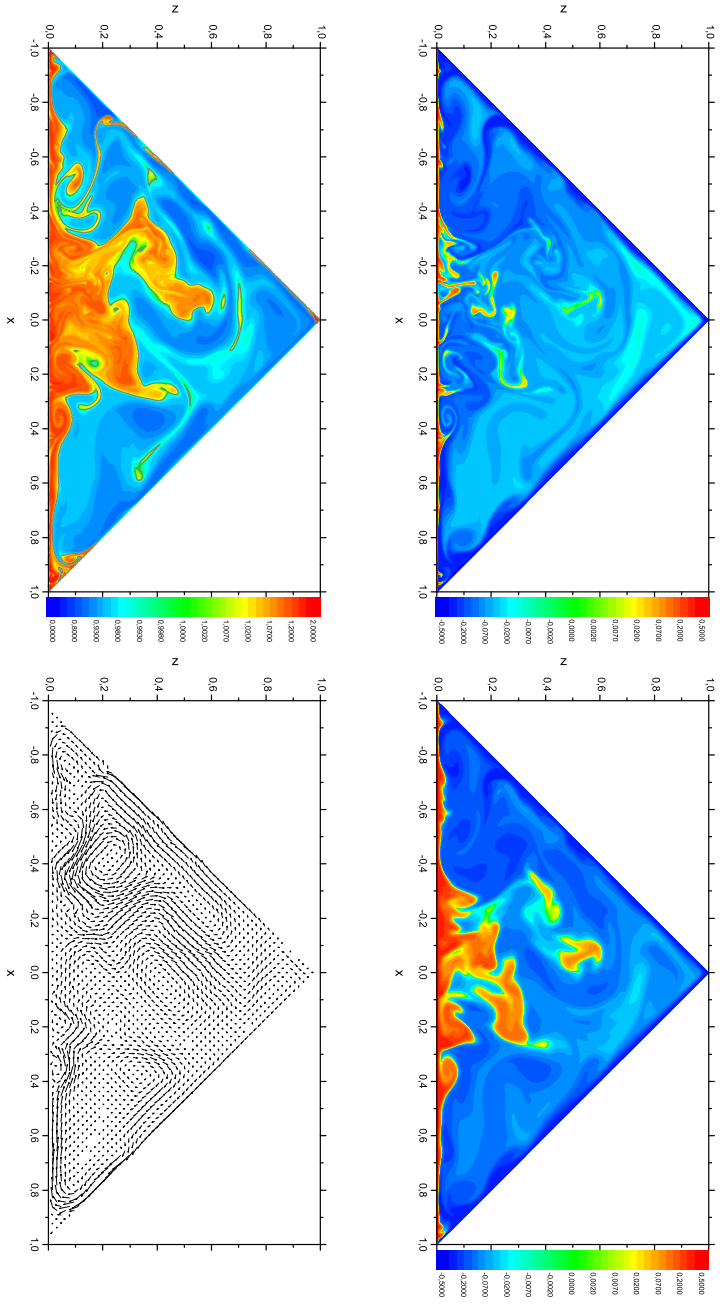


Figura 6.10: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $T = 40^\circ\text{C}$, $\Delta T = 10,0^\circ\text{C}$, $t = 0,01t_c$.

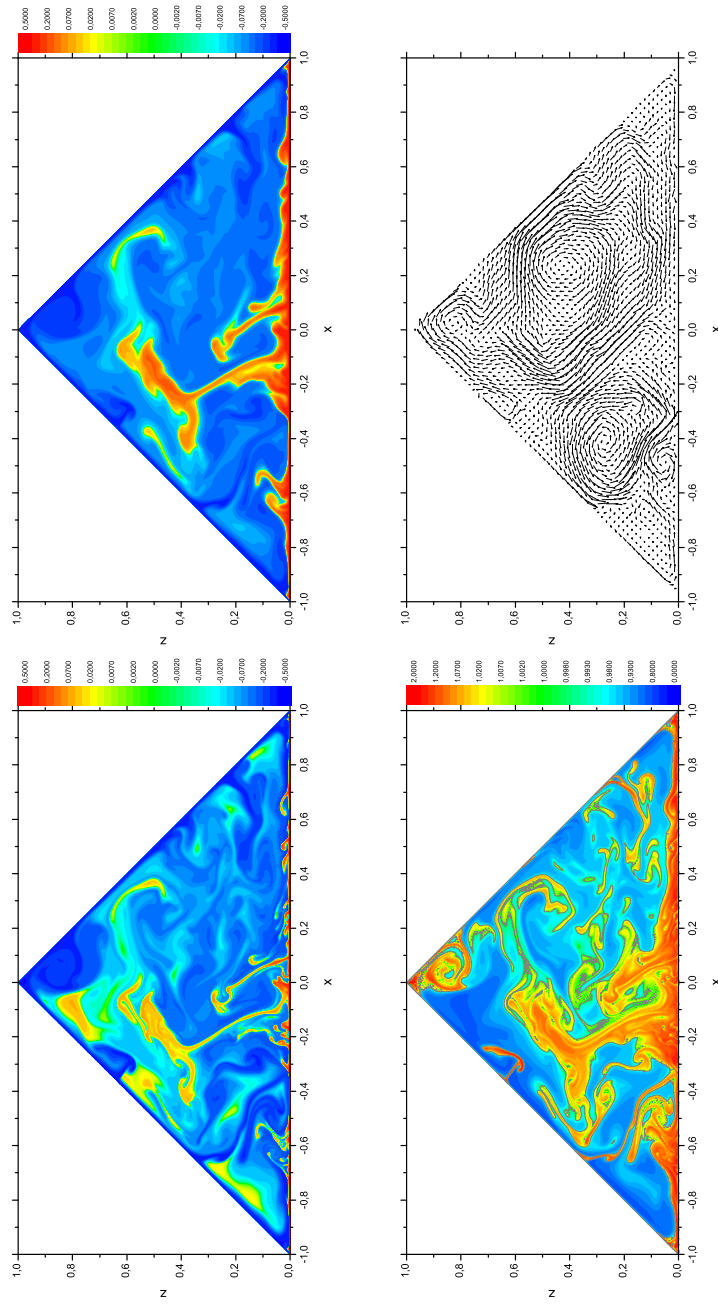


Figura 6.11: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\bar{T} = 45^\circ\text{C}$, $\Delta T = 10,5^\circ\text{C}$, $t = 0,01t_c$.

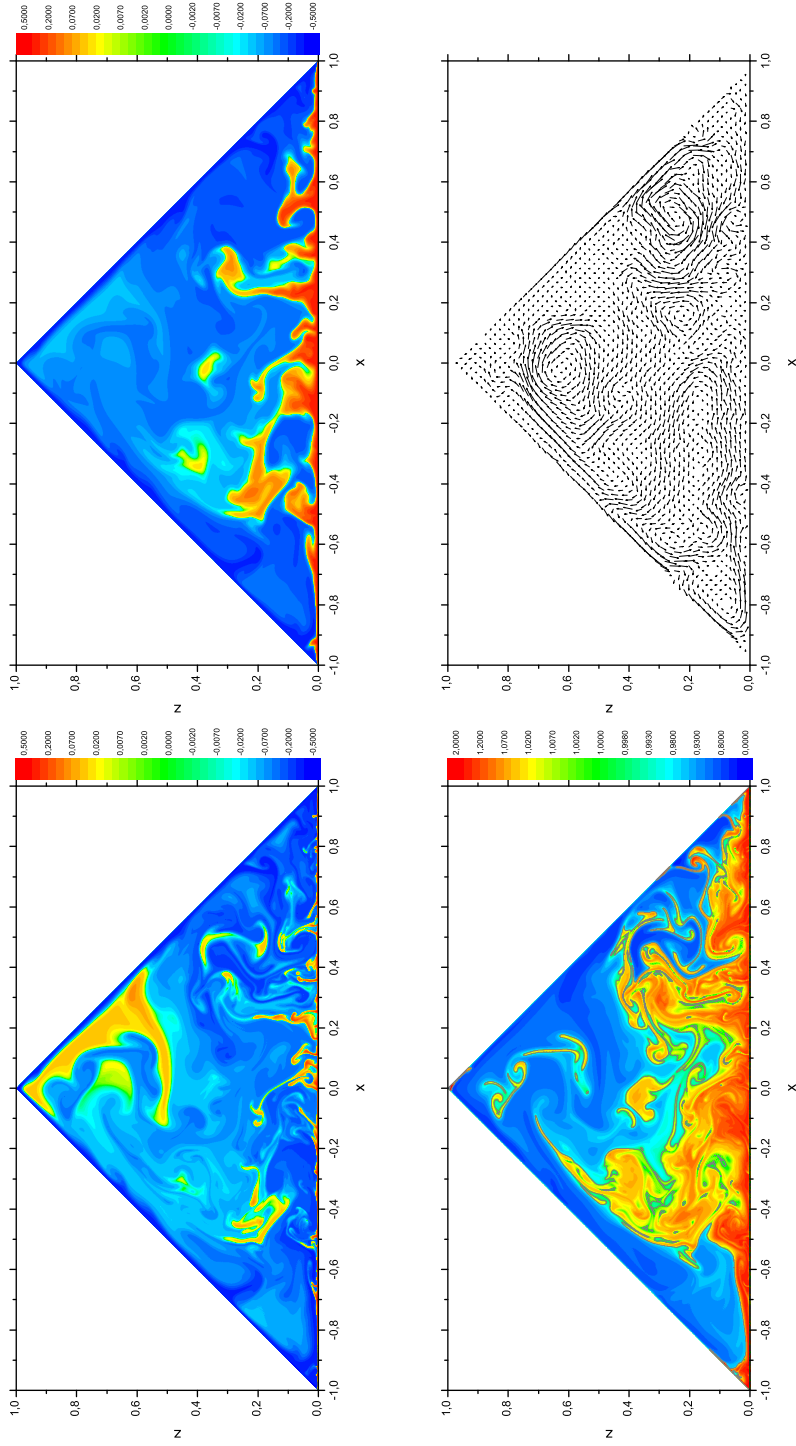


Figura 6.13: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\bar{T} = 50^\circ\text{C}$, $\Delta T = 11,6^\circ\text{C}$, $t = 0,00499tc$.

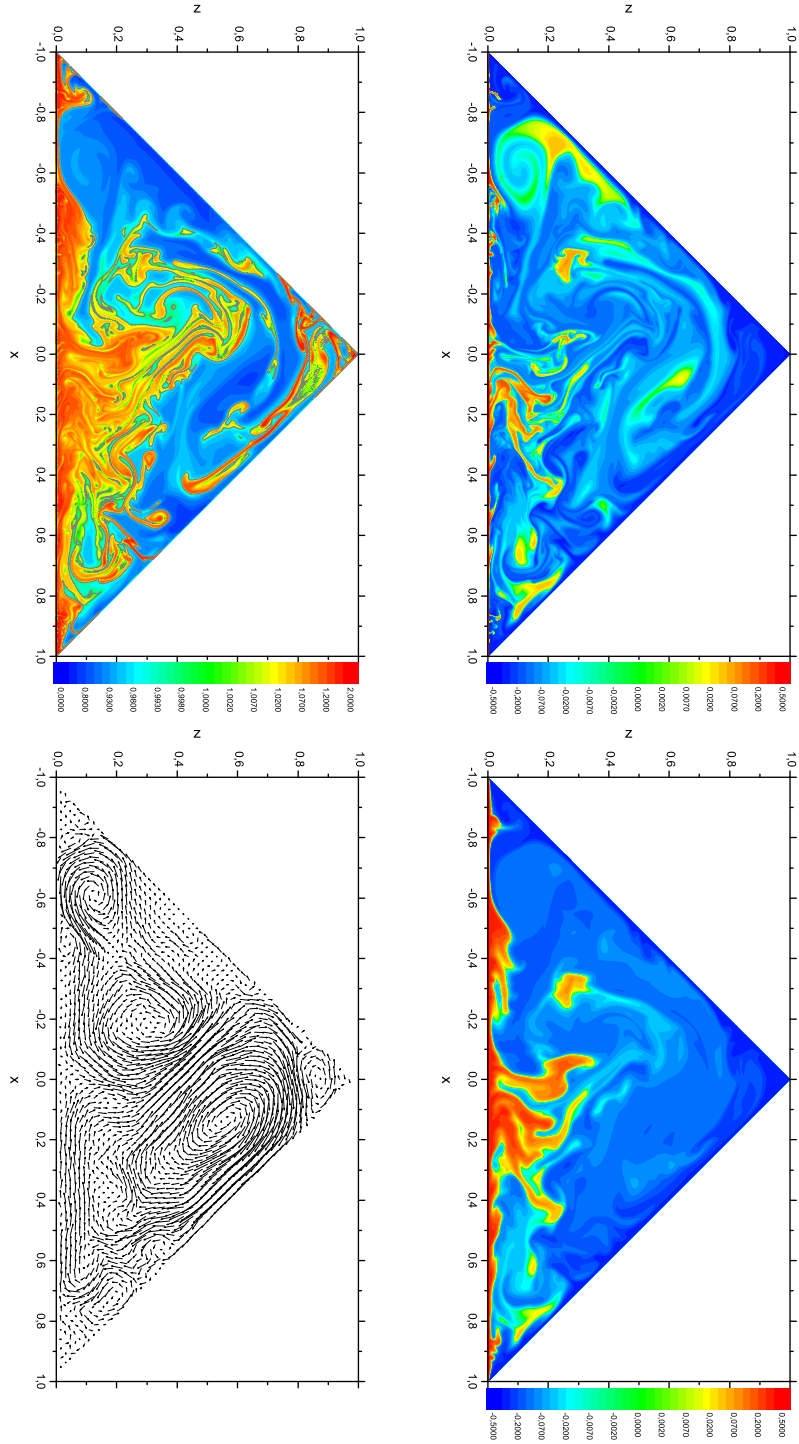


Figura 6.14: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\bar{T} = 52^\circ\text{C}$, $\Delta T = 11, 7^\circ\text{C}$, $t = 0, 009337c$.

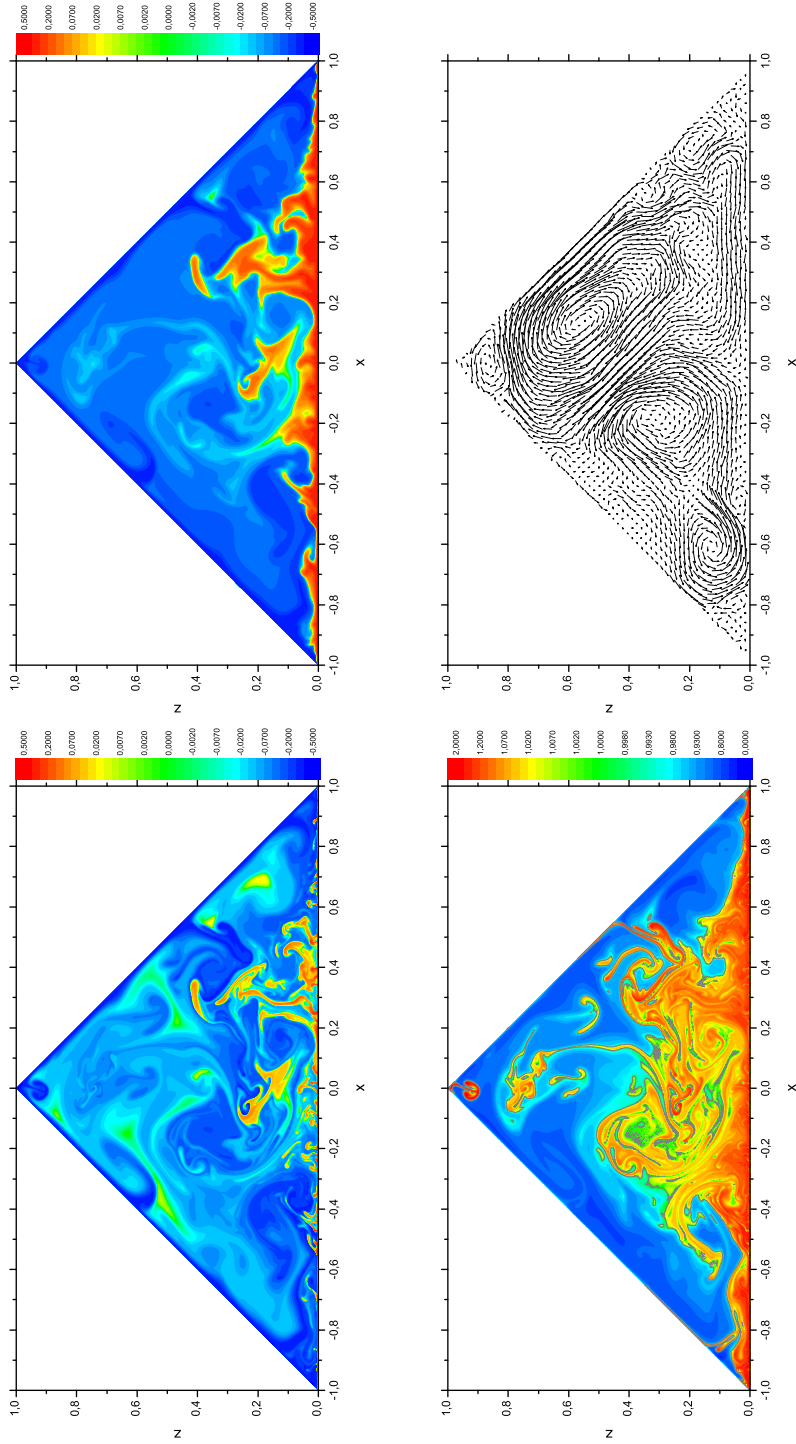


Figura 6.15: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $\bar{T} = 52,6^{\circ}\text{C}$, $\Delta T = 11,4^{\circ}\text{C}$, $t = 0,00973tc$.

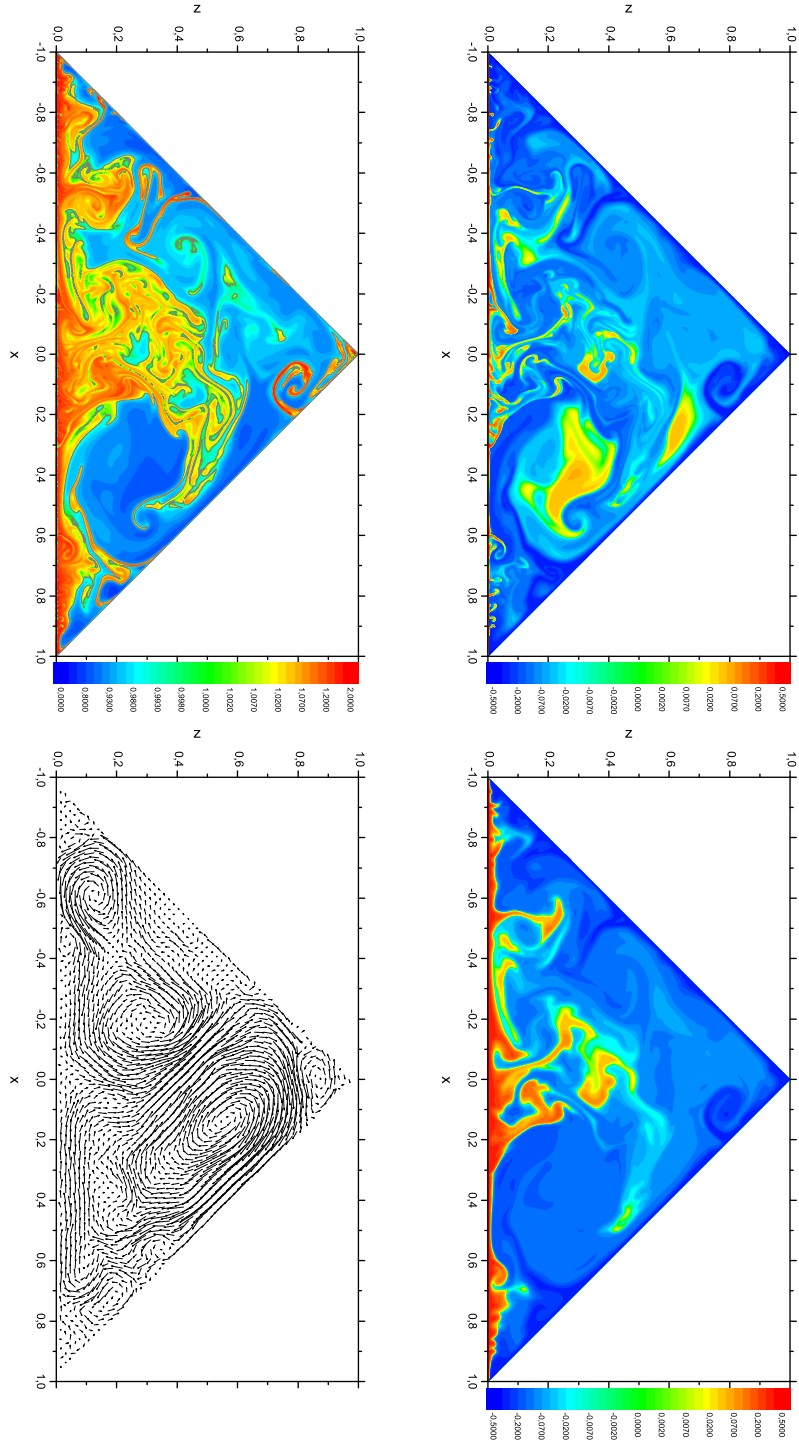


Figura 6.16: Campos de temperatura (arriba izquierda), contenido de agua (arriba derecha), humedad relativa (abajo izquierda) y velocidad (abajo derecha) para convección húmeda en la celda triangular, para $T = 53,5^{\circ}\text{C}$, $\Delta T = 11,0^{\circ}\text{C}$, $t = 0,008197c$.

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

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

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

6.2.6. Flujo térmico y de masa

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

$$\mathbf{j}_h = -K\nabla T, \quad (6.2)$$

$$\mathbf{j}_w = -D\nabla q, \quad (6.3)$$

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

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

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

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

$$J_s = \frac{Q_s}{A}. \quad (6.5)$$

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

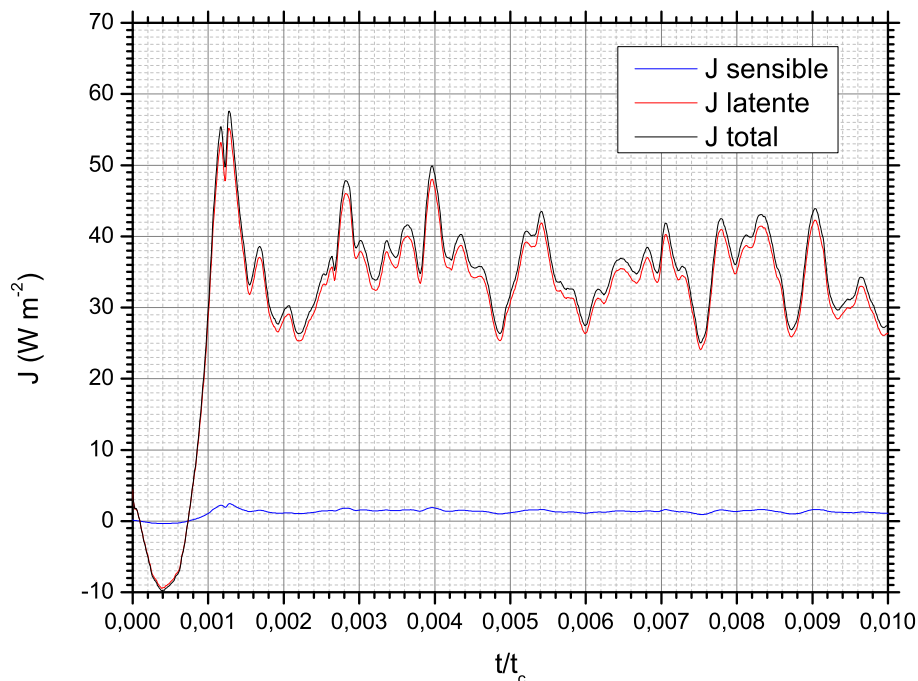


Figura 6.17: Flujo térmico J numérico por calor sensible (azul), latente (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 20^\circ\text{C}$, $\Delta T = 2,3^\circ\text{C}$, en función del tiempo.

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

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

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

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

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

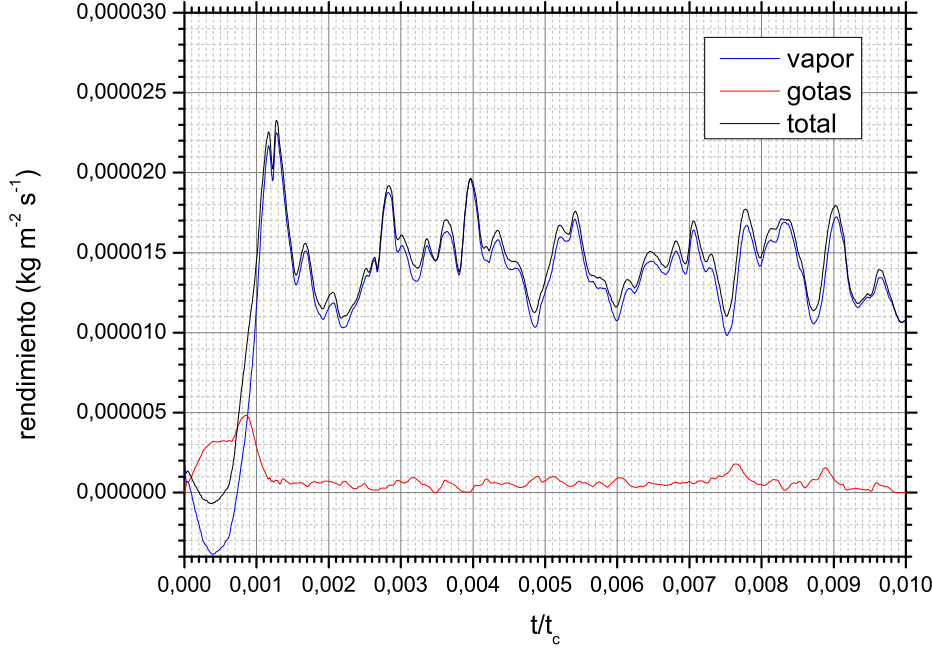


Figura 6.18: Rendimiento numérico por condensación de vapor (azul), deposición de gotas (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 20^\circ\text{C}$, $\Delta T = 2,3^\circ\text{C}$, en función del tiempo.

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

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

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

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

$$h_s = \frac{J_s}{\delta T}. \quad (6.8)$$

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

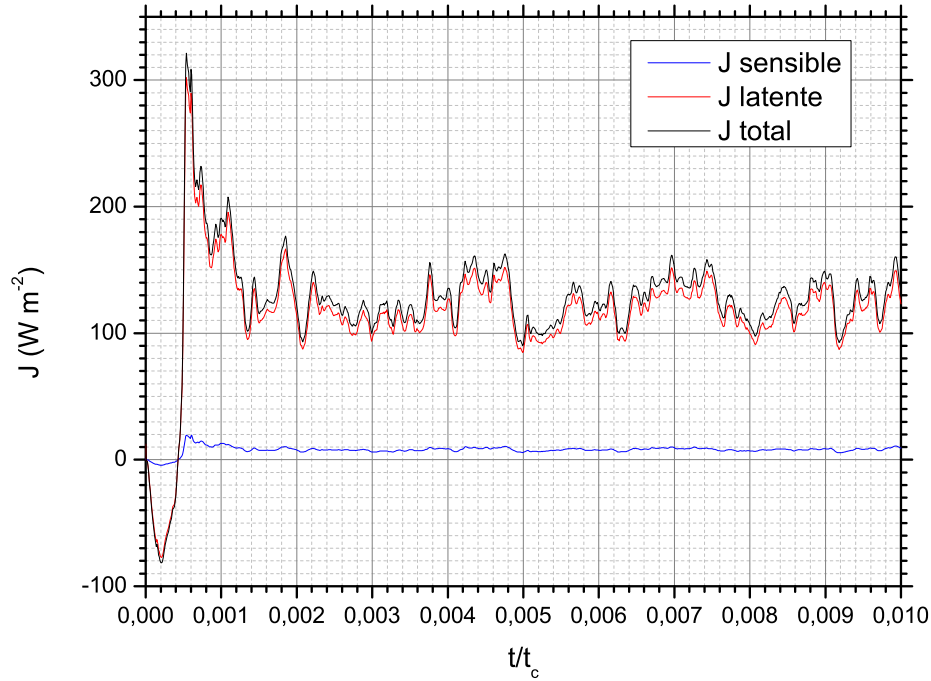


Figura 6.19: Flujo térmico J numérico por calor sensible (azul), latente (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$, $\Delta T = 9,6^\circ\text{C}$, en función del tiempo.

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

$$k_c = \frac{Q_w}{A\delta q}, \quad (6.9)$$

donde

$$Q_w = -D \int \nabla q \cdot ds \quad (6.10)$$

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

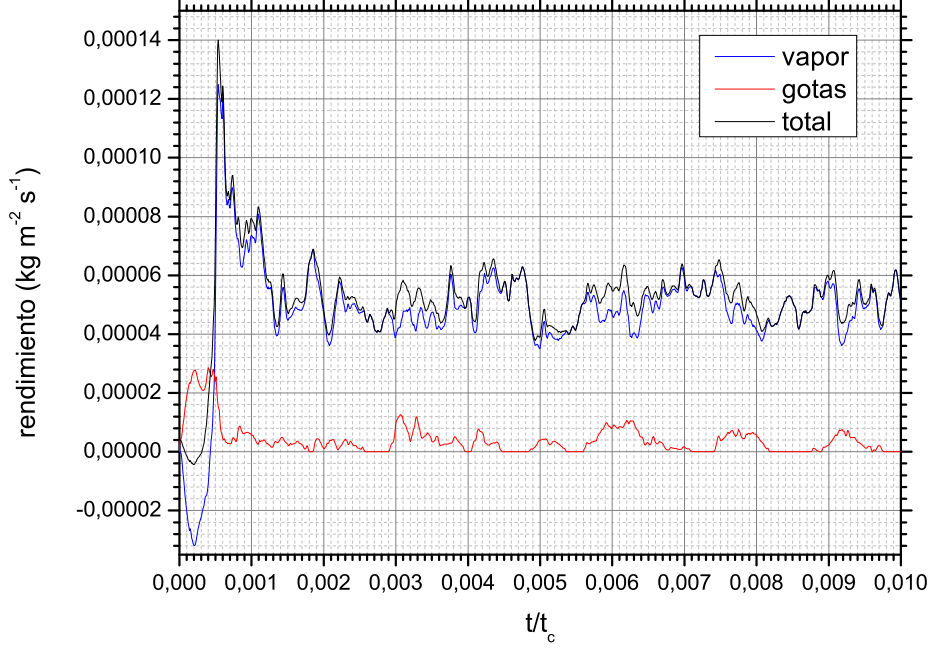


Figura 6.20: Rendimiento numérico por condensación de vapor (azul), deposición de gotas (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$, $\Delta T = 9,6^\circ\text{C}$, en función del tiempo.

líquida $k_{c,l}$ como

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

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

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

donde hemos definido el campo de concentración de vapor

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

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

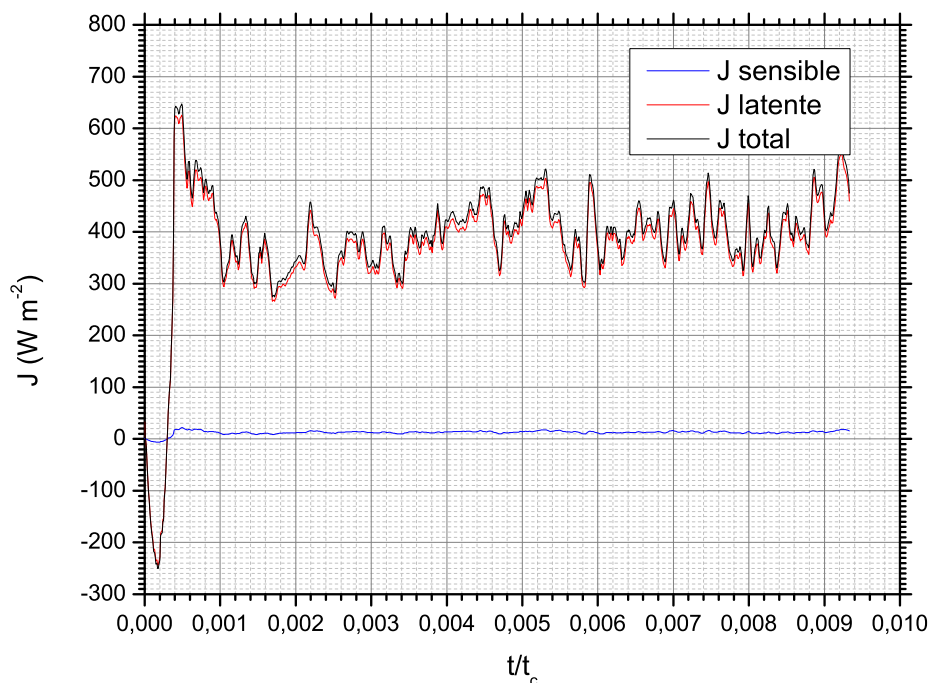


Figura 6.21: Flujo térmico J numérico por calor sensible (azul), latente (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 52^\circ\text{C}$, $\Delta T = 11,7^\circ\text{C}$, en función del tiempo.

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

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

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

$$U = W - V. \quad (6.17)$$

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

$$J_l = l_v U. \quad (6.18)$$

El flujo de calor total será entonces

$$J_t = J_s + J_l. \quad (6.19)$$

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

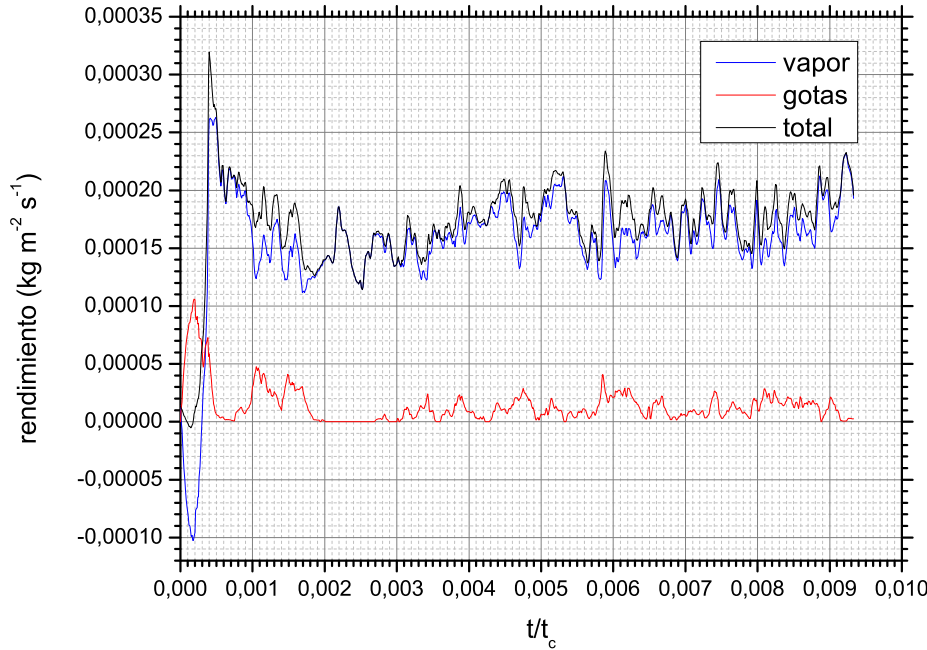


Figura 6.22: Rendimiento numérico por condensación de vapor (azul), deposición de gotas (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 52^\circ\text{C}$, $\Delta T = 11,7^\circ\text{C}$, en función del tiempo.

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

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

Por brevedad sólo presentaremos una muestra representativa de los resul-

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

Por ejemplo para $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$, $\Delta T = 9,6^\circ\text{C}$ (figura 6.19) el enfriamiento alcanza su máximo para $t \sim 0,00025t_c$, y el calentamiento para $t \sim 0,0005t_c$. Comparando con el campo de temperatura mostrado en la figura 6.4, vemos que el pico de enfriamiento corresponde a los tiempos en que la intrusión de la burbuja caliente y húmeda ascendente fuerza al fluido más frío y seco, que inicialmente se hallaba en la cúspide, a descender por el interior de la cubierta (recuérdese que el fluido es incompresible). El pico de calentamiento en cambio, corresponde al tiempo en que dicha burbuja toma contacto con la cubierta, invirtiendo la situación. Tras este transitorio el flujo térmico entra rápidamente en régimen, y ya no presenta rasgos notorios para $t > 0,002t_c$. Se encuentra disponible una animación [90] de este caso, la que muestra los campos de temperatura, concentración, humedad relativa y velocidad en la misma disposición que en la figura 6.9, para t desde cero hasta $0,01t_c$ a intervalos de 10^{-5} y a 5 cuadros por segundo, lo que corresponde aproximadamente a la evolución en tiempo real del sistema. Se recomienda su visualización, ya que resulta de gran ayuda para la comprensión de la dinámica.

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

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

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

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

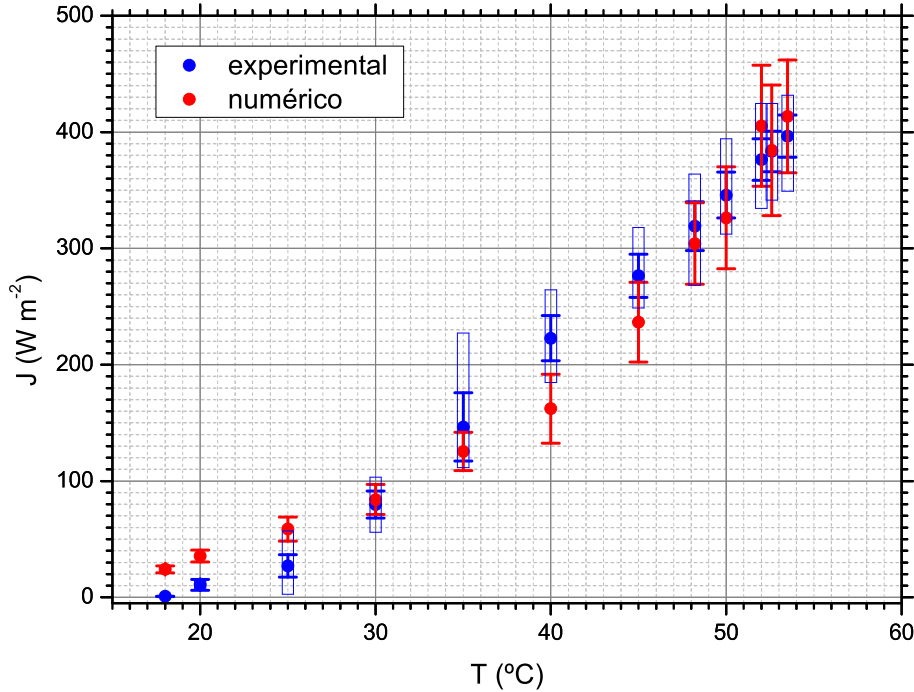


Figura 6.23: Flujo térmico total J experimental (azul) y numérico (rojo) para convección húmeda en la celda triangular, en función de la temperatura de referencia \bar{T} . Ambos valores se muestran con barras de error de una desviación standard; las cajas azules indican el rango de variación de los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

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

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

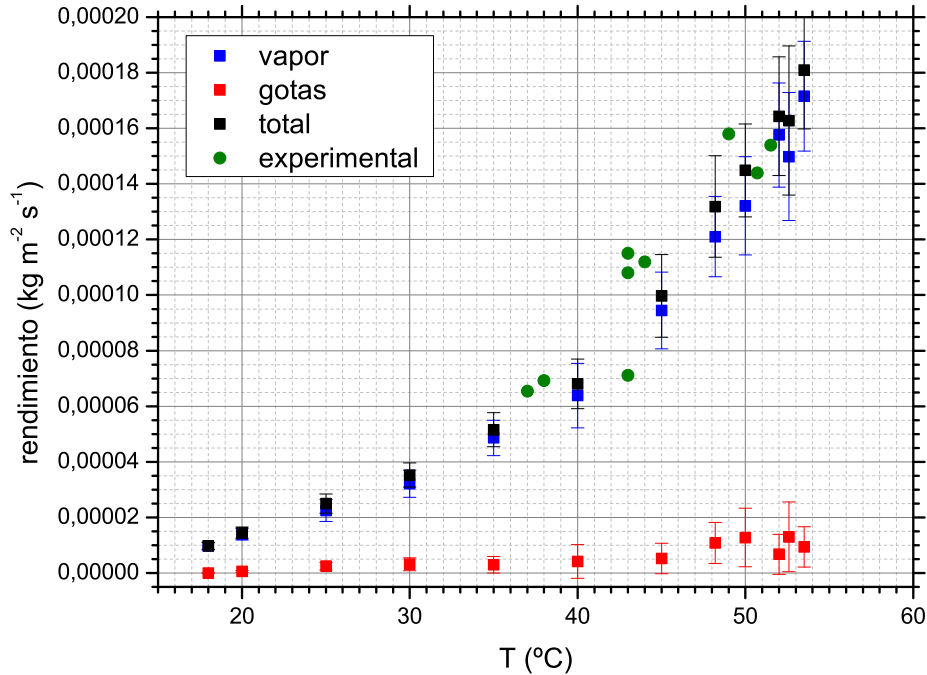


Figura 6.24: Rendimiento de agua destilada experimental (verde) y numérico (vapor en azul, gotas en rojo, total en negro) para convección húmeda en la celda triangular. Los valores numéricos se muestran con barras de error de una desviación standard.

como numéricos presentan una variabilidad relativamente grande.

6.2.7. Números de Nusselt y Sherwood

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

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

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

$$\text{Nu} = \frac{\text{Flujo térmico convectivo}}{\text{Flujo térmico conductivo}}, \quad (6.21)$$

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

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

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

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

$$Nu_s(t) = \frac{J_s(t)}{J_s(0)}, \quad Nu_l(t) = \frac{J_l(t)}{J_l(0)}, \quad Nu_t(t) = \frac{J_t(t)}{J_t(0)}, \quad (6.22)$$

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

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

$$Nu_s = \frac{\langle J_s(t) \rangle_{\text{régimen}}}{J_s(0)}, \quad Nu_l = \frac{\langle J_l(t) \rangle_{\text{régimen}}}{J_l(0)}, \quad Nu_t = \frac{\langle J_t(t) \rangle_{\text{régimen}}}{J_t(0)}, \quad (6.23)$$

donde en todos los casos hemos considerado que el estado de régimen ya se ha alcanzado a $t = 0,002t_c$. Debe notarse que $Nu_t \neq Nu_s + Nu_l$.

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

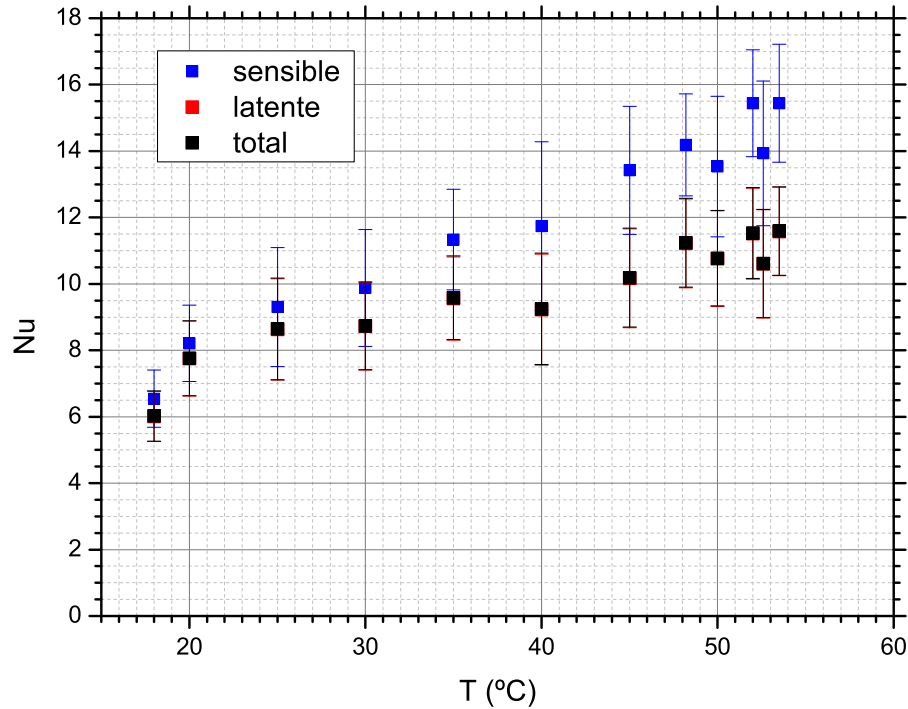


Figura 6.25: Número de Nusselt por calor sensible (azul), latente (rojo) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular.

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

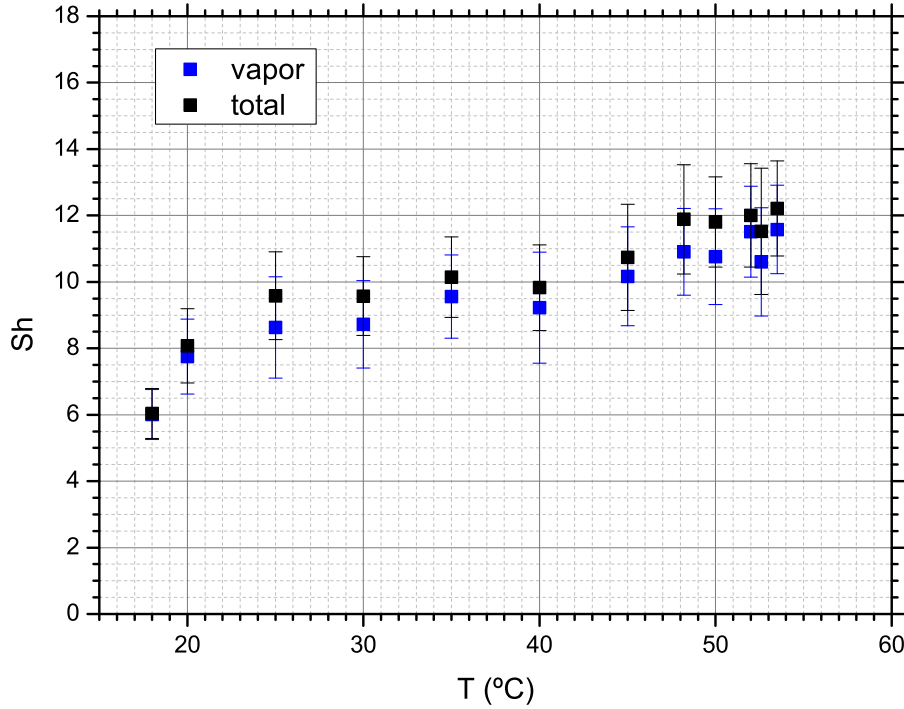


Figura 6.26: Número de Sherwood por vapor (azul) y total (negro) para convección húmeda en la celda triangular.

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

$$\text{Sh} = \frac{k_c L}{D}, \quad (6.24)$$

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

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

que tras un tratamiento completamente equivalente nos lleva a

$$\text{Sh}_v = \frac{\langle k_{c,v}(t) \rangle_{\text{régimen}}}{k_{c,v}(0)}, \quad \text{Sh}_l = \frac{\langle k_{c,l}(t) \rangle_{\text{régimen}}}{k_{c,l}(0)}, \quad \text{Sh}_t = \frac{\langle k_{c,t}(t) \rangle_{\text{régimen}}}{k_{c,t}(0)}, \quad (6.26)$$

donde los subíndices indican condensación de vapor (v), deposición de líquido (l) y total (t), y como antes consideramos que el estado de régimen ya se ha alcanzado a $t = 0,002t_c$. Debe notarse que $\text{Sh}_t \neq \text{Sh}_v + \text{Sh}_l$.

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

6.2.8. Espectros de energía cinética

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

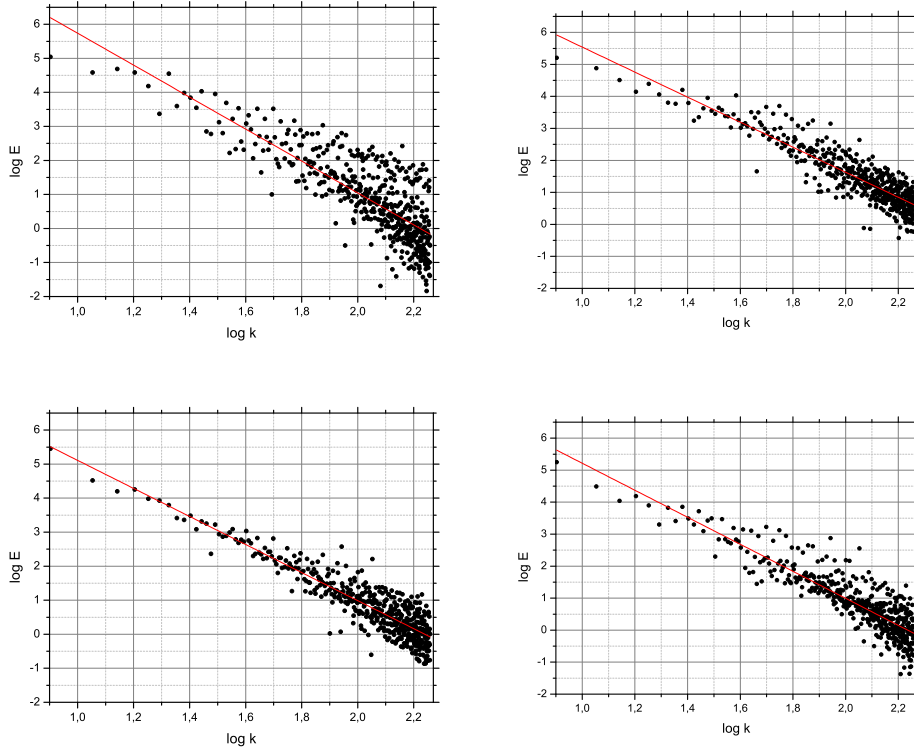


Figura 6.27: Espectros de energía para convección húmeda en la celda triangular a $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$ y $\Delta T = 9,6^\circ\text{C}$, a tiempos $t = 0,00025t_c$ (arriba izquierda), $t = 0,0005t_c$ (arriba derecha), $t = 0,001t_c$ (abajo izquierda) y $t = 0,002t_c$ (abajo derecha), sobre una grilla de 512×512 puntos. Las pendientes de las rectas de ajuste (en rojo) son $-4,69$, $-3,91$, $-4,13$ y $-4,22$, en el mismo orden.

La figura 6.27 muestra los espectros de energía cinética durante el comienzo de la convección para $\bar{T} = 35^\circ\text{C}$ y $\Delta T = 9,6^\circ\text{C}$, para los mismos tiempos mostrados en la figura 6.4. Puede verse que a $t = 0,00025t_c$ hay relativamente poca energía en los modos de número de onda grande, pero con mucha dispersión; el ascenso de la burbuja central produce aún un flujo relativamente ordenado, pero a escalas pequeñas ya comienzan a aparecer estructuras. A $t = 0,0005t_c$ la energía de las estructuras menores ha aumentado en casi dos órdenes de magnitud; este es el tiempo en que la burbuja impacta la cúspide y se dispersa. A $t = 0,001t_c$ las estructuras menores han disminuido su energía al rango que conservarán en adelante. Finalmente a $t = 0,002t_c$ el transitorio inicial ha concluido, el sistema ha entrado en régimen, y tenemos un espectro de energía que podemos considerar típico. Puede observarse la presencia de una población separada de estructuras pequeñas

con energías mayores. Fenómenos como este son transitorios y recurrentes, y corresponden a la generación de multitud de vórtices pequeños en la estela de uno mayor que asciende o desciende, o alrededor del extremo de columnas ascendentes o descendentes (*vortex shedding*).

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

Capítulo 7

Discusión y perspectivas

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

7.1. Discusión de los resultados obtenidos

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

7.1.1. Análisis de los datos experimentales

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

La EMD de las series experimentales para h y r permitió tener una visión de su evolución temporal más sencilla, y a la vez más informativa, que la proporcionada por el análisis de Fourier. En particular permitió obtener un parámetro de control r_s “limpio” de sus factores dinámicos intrínsecos e incontrolables, y permitió separar la dinámica del coeficiente de transferencia térmica h en una parte lenta h_s esclavizada a r_s , y una rápida h_f determinada principalmente por los detalles de la dinámica interna del des-

tilador. Se consiguió determinar así que el comportamiento “anómalo” de h estaba ligado a la segunda pero no a la primera, y sugiriendo que se debía a situaciones de particular desorden de las estructuras convectivas.

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

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

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

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

7.1.2. Simulación numérica del destilador

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

La fenomenología observada en las simulaciones coincide, dentro de lo que es posible apreciar visualmente, con la observada en los experimentos co-

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

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

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

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

menor, y por el hecho de que el estado de referencia para el cálculo de Nu corresponde a un sistema que transporta mucho más eficientemente el calor que su equivalente seco.

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

7.2. Crítica del modelo termohidrodinámico y el método pseudoespectral

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

7.2.1. Crítica del modelo termodinámico

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

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

Uno de los puntos más cuestionables, donde a nuestro entender el lector debe ejercer una saludable dosis de escepticismo, es el tratamiento del aerosol de gotas de agua en la deducción de los coeficientes de viscosidad

dinámica (Apéndice A.10) y de conducción térmica (Apéndice A.11). Si bien ninguno de los argumentos allí expuestos es patentemente falso, incluyen una cantidad de hipótesis *ad hoc* que pueden no ser válidas en contextos aún ligeramente diferentes del presente.

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

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

7.2.2. Crítica del modelo hidrodinámico

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

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

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

7.2.3. Crítica del método pseudoespectral

El método pseudoespectral seleccionado en esta Tesis, basado en la transformada discreta de Fourier compleja, posee un conjunto particular de ventajas y desventajas cuando se lo compara con otras alternativas.

Entre las desventajas cabe mencionar la dificultad de aplicarlo a un problema con condiciones de contorno que, a diferencia de lo habitual, no son libres. Ello nos obligó a desarrollar una cantidad de modificaciones *ad hoc* que resultan hasta cierto punto engorrosas. Además, el método (por definición) sólo es aplicable a geometrías en principio rectangulares, con condiciones de contorno periódicas.

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

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

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

7.3. Perspectivas de desarrollos futuros

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

En primer lugar deseamos resaltar que los buenos resultados del modelo numérico, en cuanto a reproducir los resultados experimentales para el flujo térmico y, sobre todo, para el rendimiento de agua destilada, indican que el modelo tiene poder predictivo. Podremos entonces aplicarlo para prever el resultado de diversas modificaciones del diseño del destilador. El que las simulaciones se hayan realizado en esta etapa inicial para condiciones de

funcionamiento estacionario es un defecto subsanable fácilmente: sabiendo ahora que aún para condiciones iniciales extremadamente lejos del equilibrio como las utilizadas en la Sección 6.2 el sistema entra en régimen a lo sumo a $t = 0,002t_c$ (entre treinta y cuarenta segundos de tiempo de evolución simulado), podemos diseñar un ciclo diario “comprimido” de calentamiento y enfriamiento de pocas decenas de minutos en lugar de 24 horas, lo que permitiría simularlo en un tiempo razonable. Las modificaciones necesarias en los códigos ya desarrollados son menores y sencillas de implementar, y esta será una de las primeras tareas a realizar tras la finalización de esta Tesis.

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

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

Apéndice A

Modelo termodinámico

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

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

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

A.1. Presión de saturación

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

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

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

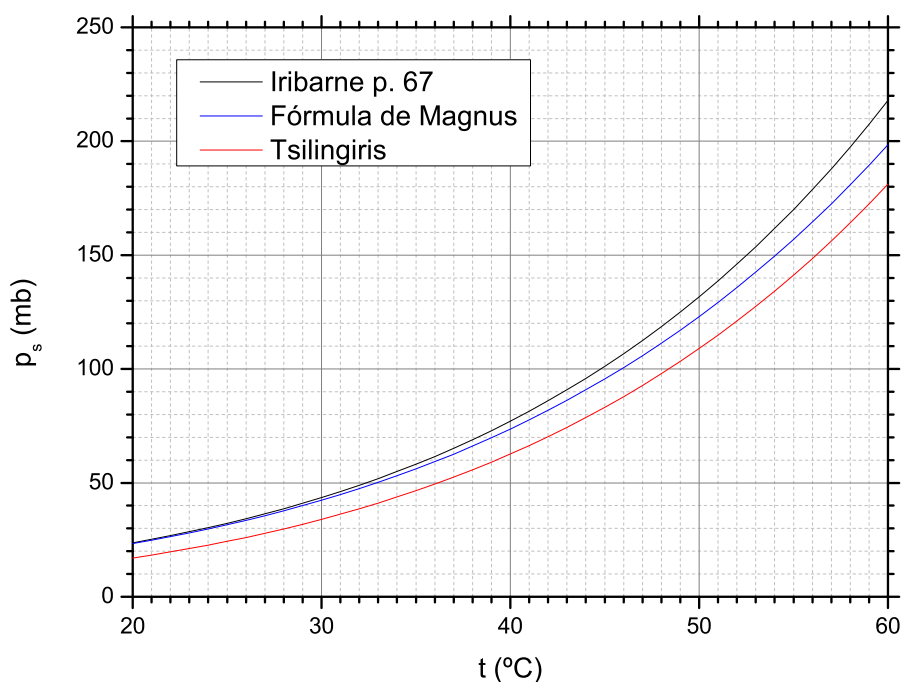


Figura A.1: Comparación de los modelos para la presión de saturación p_s .

atmosféricas usuales es

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

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

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

En ambas expresiones T está en K.

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

mial

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

donde

$$t = T + 273,15 \quad (\text{A.4})$$

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

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

A.2. Fracción molar y factor de aumento

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

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

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

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

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

$$\ln f(T, p) = (A_0 + A_1t + A_2t^2 + A_3t^3 - \exp(B_0 + B_1t + B_2t^2 + B_3t^3)) \times \left(1 - \frac{p_s(T)}{p}\right). \quad (\text{A.7})$$

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

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

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

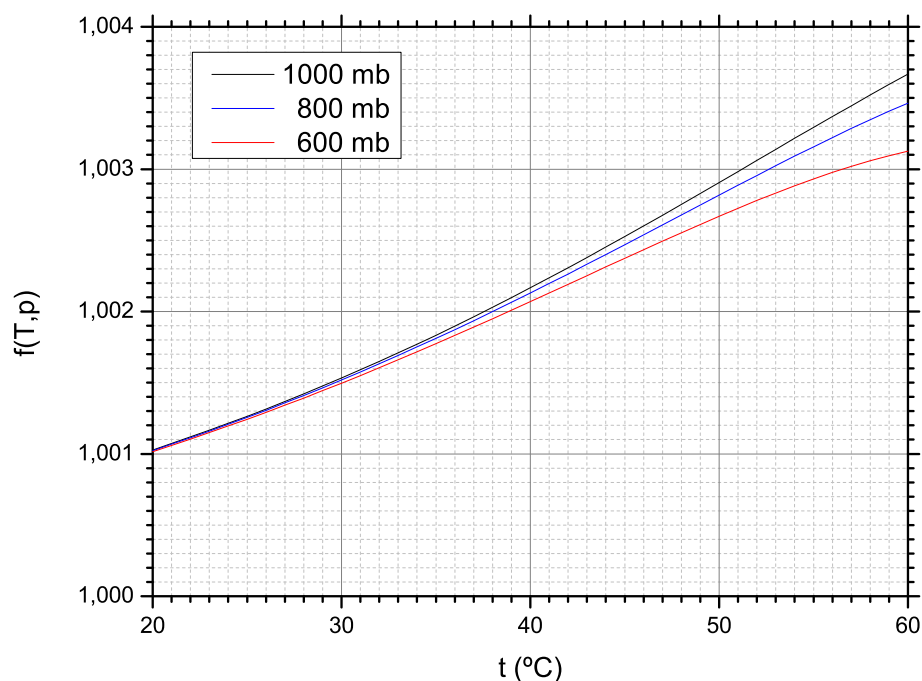


Figura A.2: Factor de aumento $f(T, p)$ dado por (A.7).

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

$$f(T, p) = 1 \quad (\text{A.8})$$

con un error menor que 0,4 %.

A.3. Mezclas y factor de compresibilidad

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

$$\rho = \frac{M_d p_d + M_v p_v}{RT}, \quad (\text{A.9})$$

A.3. MEZCLAS Y FACTOR DE COMPRESIBILIDAD

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

C_1	$0,7 \times 10^{-8} \text{ Pa}^{-1}$	K_1	$0,104 \times 10^{-14} \text{ Pa}^{-2}$
C_2	$-0,147184 \times 10^{-8} \text{ Pa}^{-1}$	K_2	$-0,335297 \times 10^{-17} \text{ Pa}^{-2}$
C_3	$1734,29 \text{ K}^{-1}$	K_3	$3645,09 \text{ K}^{-1}$

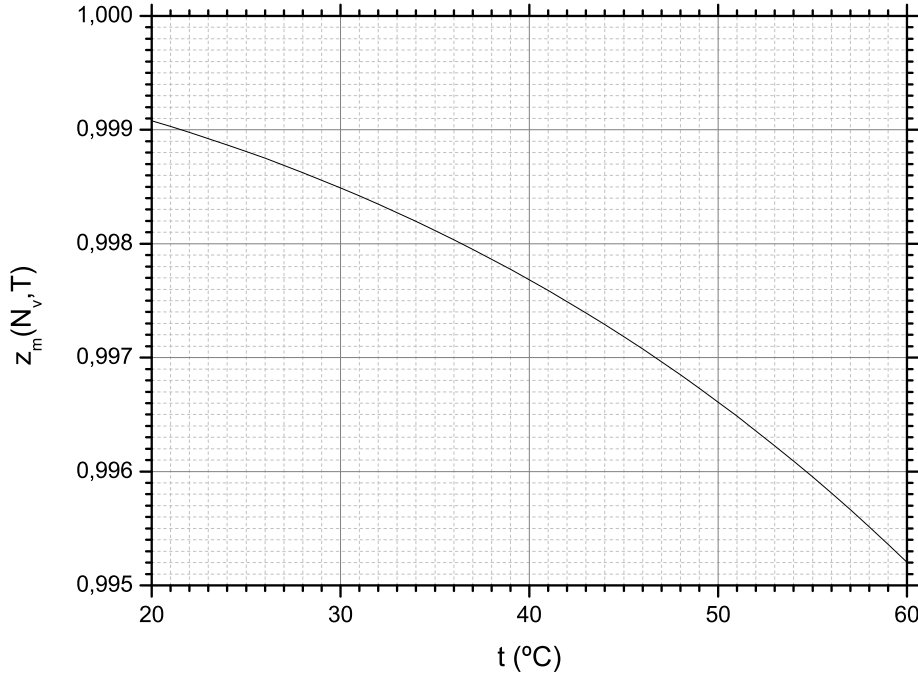


Figura A.3: Factor de compresibilidad $z_m(N_v, T)$ dado por (A.11).

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

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

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

$$z_m(N_v, T) = 1 + A p_s(T) + B p_s^2(T), \quad (\text{A.11})$$

donde

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

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

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

$$z_m(N_v, T) = 1, \quad (\text{A.13})$$

con un error menor que 0,5 %.

A.4. Mixing ratio

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

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

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

$$\varepsilon = \frac{R_d}{R_v} = 0,62199 \quad (\text{A.15})$$

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

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

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

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

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

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

A.5. Humedad específica

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

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

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

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

A la saturación tenemos la humedad específica de saturación

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

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

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

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

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

A.6. Densidad

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

A.6.1. Aire seco y vapor de agua

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

$$pV = mRT \quad (\text{A.21})$$

y poniendo

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

A.6.2. Aire húmedo

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

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

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

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

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

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

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

$$pV = (m_d R_d + m_v R_v) T, \quad (\text{A.26})$$

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

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

de modo de obtener

$$pV = mRT. \quad (\text{A.28})$$

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

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

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

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

A.6.3. Aire mojado

Para aire mojado, tenemos aire húmedo saturado más una masa m_ℓ de gotas de agua líquida. El mixing ratio es ahora

$$r = r_s + \frac{m_\ell}{m_d} \quad (\text{A.31})$$

y la masa total es

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

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

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

pero ahora la densidad debe calcularse como

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

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

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

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

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

A.6.5. Densidad en función de la concentración

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

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

y por encima

$$\rho = \frac{1 - q_s}{1 - q} \frac{1}{(1 - q_s) R_d + q_s R_v} \frac{p}{T}. \quad (\text{A.37})$$

A.7. Coeficiente de expansión térmica

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

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

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

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

A.7.1. Aire seco

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

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

$$pV = m_d R_d T, \quad (\text{A.39})$$

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

$$p\delta V = m_d R_d \delta T, \quad (\text{A.40})$$

es decir

$$\delta V = \frac{m_d R_d}{p} \delta T. \quad (\text{A.41})$$

El nuevo volumen es

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

o, usando la ley de los gases perfectos,

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

Si escribimos el nuevo volumen como

$$V + \delta V = V (1 + \alpha_d \delta T) \quad (\text{A.44})$$

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

$$\alpha_d = \frac{1}{T}, \quad (\text{A.45})$$

que es un resultado bien conocido.

A.7.2. Aire húmedo

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

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

$$pV = mRT, \quad (\text{A.46})$$

con

$$m = m_d + m_v \quad (\text{A.47})$$

la masa total y

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

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

$$\alpha_m = \frac{1}{T}, \quad (\text{A.49})$$

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

A.7.3. Aire mojado

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

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

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

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

Los estados de equilibrio termodinámico inicial y final son:

Estado inicial: Una masa m_d de aire seco que ocupa un volumen V a la presión parcial p_d y temperatura T ; una masa m_v de vapor de agua que ocupa el mismo volumen V a la presión parcial p_v y temperatura T ; y una masa m_ℓ de agua líquida que ocupa un volumen despreciable a temperatura T .

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

Las restricciones sobre este proceso son:

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

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

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

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

de modo que

$$\begin{aligned}
 \delta m_v &= \varepsilon \left(\frac{\delta p_v}{p_d} - \frac{p_v \delta p_d}{p_d^2} \right) m_d = \varepsilon \left(1 + \frac{p_v}{p_d} \right) \frac{\delta p_v}{p_d} m_d \\
 &= \varepsilon \left(1 + \frac{p_s(T)}{p - p_s(T)} \right) \frac{p_s(T)}{p - p_s(T)} \frac{m_d l_v}{R_d T^2} \delta T \\
 &= (\varepsilon + r_s(T)) r_s(T) \frac{m_d l_v}{R_d T^2} \delta T.
 \end{aligned} \tag{A.52}$$

Tratando el aire húmedo como un gas perfecto tenemos

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
 p \delta V &= \delta m_v R_v T + (m_d R_d + m_v R_v) \delta T \\
 &= (\varepsilon + r_s) r_s \frac{m_d l_v}{R_d T^2} \delta T R_v T + (m_d R_d + m_v R_v) \delta T \\
 &= \left[(\varepsilon + r_s) r_s \frac{m_d l_v}{p V \varepsilon} + 1 \right] \frac{p V}{T} \delta T.
 \end{aligned} \tag{A.56}$$

Entonces

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

Pero

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

de modo que

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

Luego

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

y usando

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

finalmente obtenemos

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

Ahora podemos calcular el nuevo volumen, que resulta

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

Si lo escribimos como

$$V + \delta V = V (1 + \alpha_w \delta T) \quad (\text{A.64})$$

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

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

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

Agrupando las expresiones precedentes, podemos unificarlas como

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

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

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

En términos de q en lugar de r , tenemos

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

A.8. Coeficiente de expansión másico

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

A.8.1. Aire húmedo

Para aire húmedo tenemos

$$\rho = \frac{1+r}{R_d + rR_v} \frac{p}{T}, \quad (\text{A.68})$$

de modo que manteniendo constantes p y T

$$\begin{aligned} \delta\rho &= \left(\frac{1}{R_d + rR_v} - \frac{(1+r)R_v}{(R_d + rR_v)^2} \right) \frac{p}{T} \delta r \\ &= \rho \left(\frac{1}{1+r} - \frac{R_v}{R_d + rR_v} \right) \delta r. \end{aligned} \quad (\text{A.69})$$

Escribiendo la nueva densidad en la forma

$$\rho + \delta\rho = \rho(1 - \beta\delta r), \quad (\text{A.70})$$

o

$$\delta\rho = -\beta\rho\delta r, \quad (\text{A.71})$$

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

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

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

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

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

luego

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

y

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

A.8.2. Aire mojado

Por encima de la saturación tenemos

$$\rho = \frac{1+r}{R_d + r_s R_v} \frac{p}{T}, \quad (\text{A.76})$$

así que ahora, manteniendo constantes p y T , obtenemos

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

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

$$\beta_w = -\frac{1}{1+r} < 0. \quad (\text{A.78})$$

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

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

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

de modo que

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

y

$$\beta_w = -\frac{1}{1 - q} < 0. \quad (\text{A.81})$$

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

Las expresiones anteriores pueden ser unificadas en la forma

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{1}{1+r} \left(\Theta (r_s - r) \frac{1+r}{\varepsilon + r} - 1 \right) \\ &= \frac{1}{1-q} \left(\Theta (q_s - q) \frac{1}{\varepsilon + (1-\varepsilon)q} - 1 \right). \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

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

A.9. CAPACIDAD CALÓRICA ESPECÍFICA

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

c_{d0}	1,03409	c_{d3}	$-0,4970786 \times 10^{-9}$
c_{d1}	$-0,284887 \times 10^{-3}$	c_{d4}	$0,1077024 \times 10^{-12}$
c_{d2}	$0,7816818 \times 10^{-6}$		

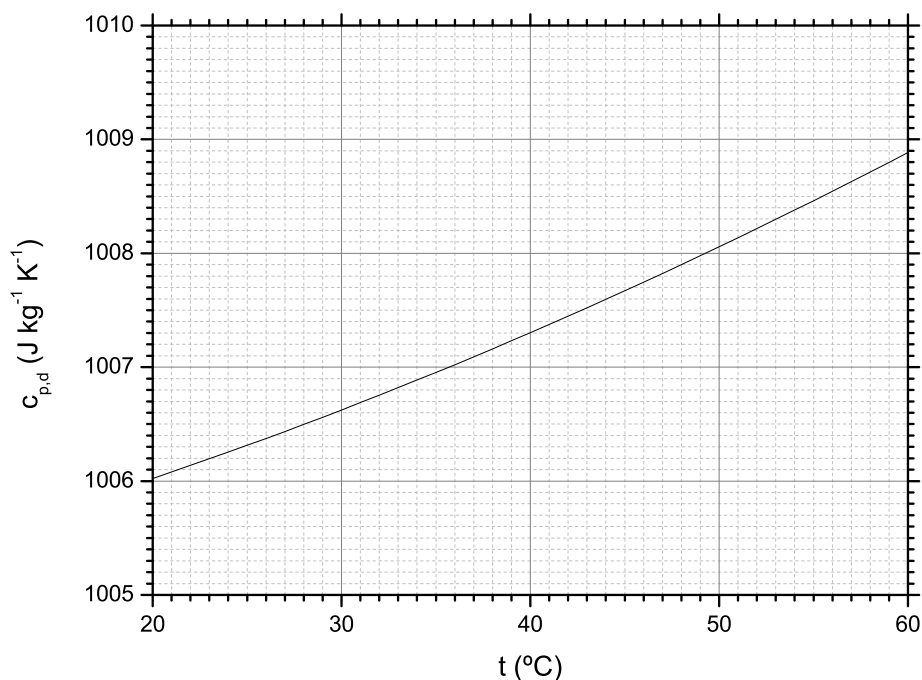


Figura A.4: Capacidad calorífica específica a presión constante para aire seco $c_{p,d}$ dada por (A.85).

A.9. Capacidad calorífica específica a presión constante

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

A.9.1. Aire seco

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

escrito como

$$\delta Q_d = c_{p,d} m_d \delta T. \quad (\text{A.83})$$

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

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

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

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

cuyos coeficientes se muestran en la Tabla A.5.

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

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

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

A.9.2. Vapor de agua

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

$$\delta Q_v = c_{p,v} m_v \delta T. \quad (\text{A.87})$$

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

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

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

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

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

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

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

A.9. CAPACIDAD CALÓRICA ESPECÍFICA

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

c_{v0}	1,86910989	c_{v2}	$1,941058941 \times 10^{-5}$
c_{v1}	$-2,578421578 \times 10^{-4}$		

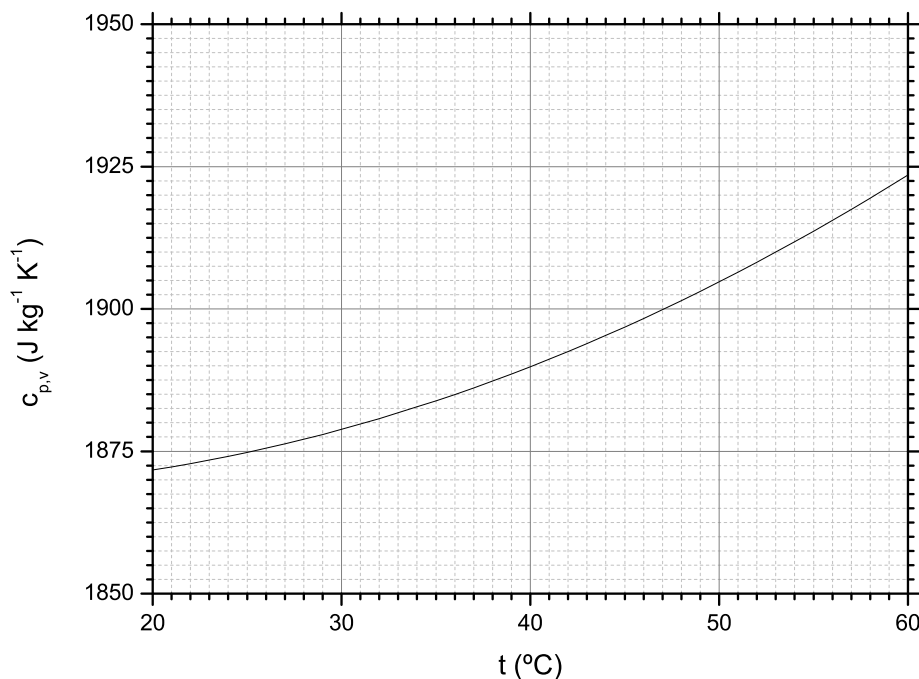


Figura A.5: Capacidad calorífica específica a presión constante para vapor de agua $c_{p,v}$ dada por (A.89).

A.9.3. Aire húmedo

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

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

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

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

pero esta expresión resulta innecesariamente complicada si usamos los modelos de Tsilingiris para $c_{p,d}$ y $c_{p,v}$.

Podemos en cambio poner el calor total absorbido como

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

donde

$$m_m = m_d + m_v = (1 + r) m_d \quad (\text{A.94})$$

es la masa total de aire húmedo. Entonces tendremos

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

y a la saturación simplemente resultará

$$c_{p,s} = \frac{c_{p,d} + r_s c_{p,v}}{1 + r_s}. \quad (\text{A.96})$$

A.9.4. Agua líquida

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

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

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

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

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

A.9.5. Aire mojado

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

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

A.9. CAPACIDAD CALÓRICA ESPECÍFICA

y el calor absorbido por este proceso de evaporación será

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

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

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

y una contribución del calentamiento del agua líquida

$$\delta Q_\ell = c_{p,\ell} m_\ell \delta T. \quad (\text{A.102})$$

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

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

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

$$r = r_s + \frac{m_\ell}{m_d}, \quad (\text{A.104})$$

de donde

$$\frac{m_\ell}{m_d} = r - r_s \quad (\text{A.105})$$

y consecuentemente

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

Por otro lado, la masa total del sistema es

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

de donde

$$m_d = \frac{m_w}{1 + r} \quad (\text{A.108})$$

y

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

que puede ser reescrita como

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

mientras que justo por encima tenemos

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

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

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

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

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

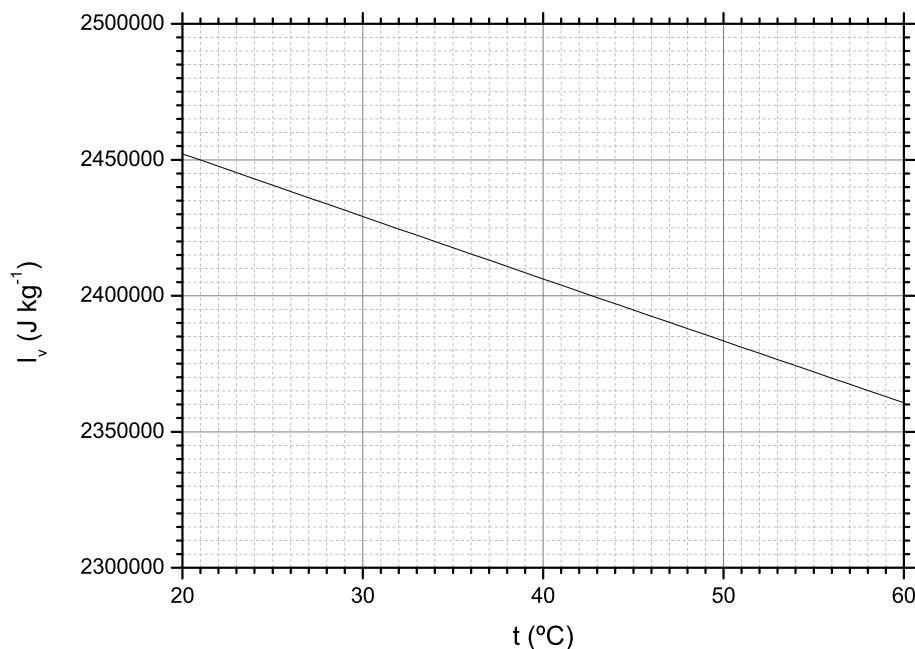


Figura A.6: Calor latente específico de vaporización del agua l_v dado por (A.123).

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

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

$$c_p^- = (1 - q_s) c_{p,d} + q_s c_{p,v}, \quad (\text{A.117})$$

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

A.9.8. Calor latente específico del agua

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

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

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

$$\frac{dl_v}{dt} = c_{p,v} - c_{p,\ell}. \quad (\text{A.120})$$

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

$$c_{p,v} = 1869,10989 - 0,2578421578t + 0,01941058941t^2 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad (\text{A.121})$$

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

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

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

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

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

A.10. Viscosidad cinemática

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

A.10.1. Generalidades

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

$$\nu = \frac{1}{2} \bar{u} \lambda \quad (\text{A.124})$$

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

$$\eta = \rho \nu \quad (\text{A.125})$$

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

A.10. VISCOSIDAD CINEMÁTICA

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

η_{d0}	$-9,8601 \times 10^{-1}$	η_{d3}	$1,2349703 \times 10^{-7}$
η_{d1}	$9,080125 \times 10^{-2}$	η_{d4}	$-5,7971299 \times 10^{-11}$
η_{d2}	$-1,17635575 \times 10^{-4}$		

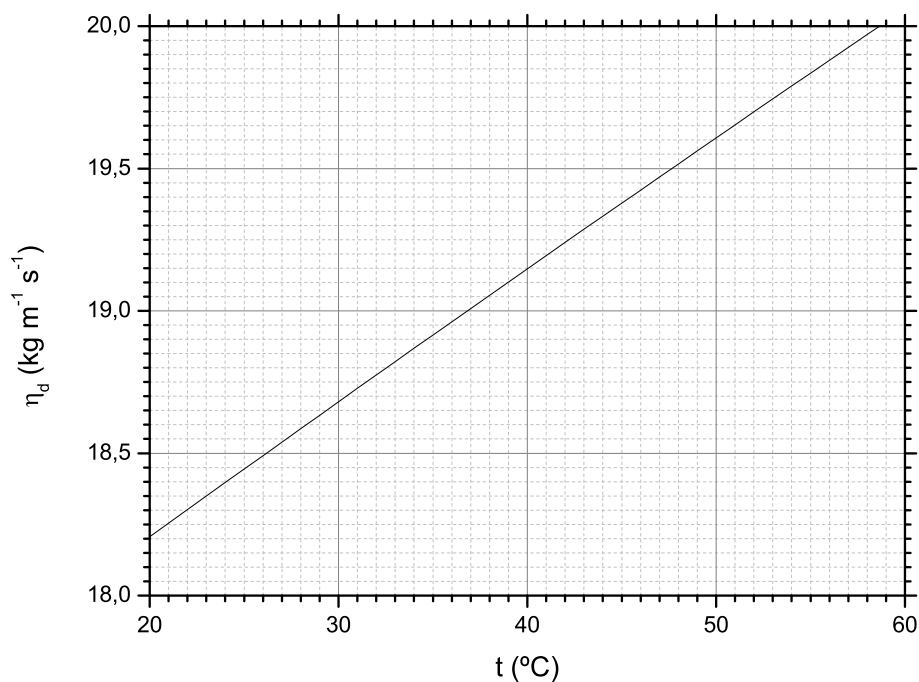


Figura A.7: Viscosidad dinámica del aire seco η_d dada por (A.128).

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

$$\eta = \frac{1}{\frac{\chi_a}{\eta_a} + \frac{\chi_b}{\eta_b}}, \quad (\text{A.126})$$

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

$$\frac{1}{\eta} = \frac{\chi_a}{\eta_a} + \frac{\chi_b}{\eta_b} \quad (\text{A.127})$$

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

A.10.2. Aire seco

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

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

cuyos coeficientes se listan en la Tabla A.7.

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

A.10.3. Vapor de agua

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

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

donde

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

Substituyendo las constantes y convirtiendo a unidades MKS tenemos

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

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

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

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

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

A.10.4. Aire húmedo

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

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

η_{v0}	8,058131868	η_{v1}	$4,000549451 \times 10^{-2}$
-------------	-------------	-------------	------------------------------

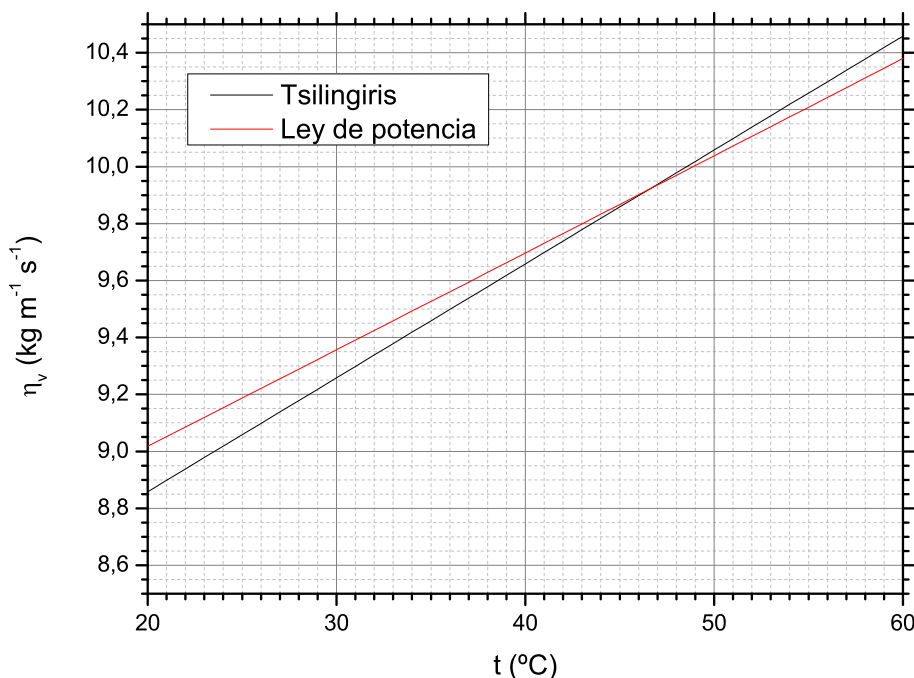


Figura A.8: Viscosidad dinámica del vapor de agua η_v dada por (A.131) y (A.132).

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

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

donde

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

son las llamadas “fracciones de momentum” para aire seco y vapor, respectivamente. Aquí N_i son las fracciones molares y M_i los pesos moleculares del aire seco y del vapor de agua. Notemos que todos los términos que incluyen pesos moleculares no cambian si éstos se reemplazan por las masas μ_i de las moléculas correspondientes. Notemos también que las fracciones de momento y_i son adimensionales.

APÉNDICE A. MODELO TERMODINÁMICO

Los pesos moleculares para aire seco y vapor de agua son ([39] Ap. I, p. 245, [40])

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

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

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

y resultan

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

También, usando $M_v = \varepsilon M_d$ resulta

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

y

$$\left(\frac{2\sqrt{M_d M_v}}{M_d + M_v} \right)^{0,375} = \left(\frac{2\sqrt{\varepsilon}}{1 + \varepsilon} \right)^{0,375} = 0,98958. \quad (\text{A.139})$$

Substituyendo estas expresiones tenemos

$$\frac{1}{\eta} = \frac{\varepsilon}{\eta_d} + \frac{r^2}{\eta_v} + 1,9792 \frac{\sqrt{\varepsilon} r}{\sqrt{\eta_d \eta_v}}. \quad (\text{A.140})$$

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

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

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

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

En nuestro caso particular tendremos entonces

$$\Phi_{dd} = \Phi_{vv} = 1 \quad (\text{A.143})$$

y

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

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

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

con

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

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

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

A.10.5. Aire mojado

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

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

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

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

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

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

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

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

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

APÉNDICE A. MODELO TERMODINÁMICO

Usando que y_ℓ escala como $1/\sqrt{M_\ell}$ para un dado valor de m_ℓ , estos términos escalan como

$$\begin{aligned} \frac{y_\ell^2}{\eta_\ell} &\propto \frac{1}{M_\ell \eta_\ell}, \\ 2 \frac{y_d y_\ell}{\sqrt{\eta_d \eta_\ell}} \left(\frac{2\sqrt{M_d M_\ell}}{M_d + M_\ell} \right)^{0,375} &\propto \frac{1}{M_\ell^{0,1875} \sqrt{M_\ell \eta_\ell}}, \\ 2 \frac{y_\ell y_v}{\sqrt{\eta_\ell \eta_v}} \left(\frac{2\sqrt{M_\ell M_v}}{M_\ell + M_v} \right)^{0,375} &\propto \frac{1}{M_\ell^{0,1875} \sqrt{M_\ell \eta_\ell}}. \end{aligned} \quad (\text{A.152})$$

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

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

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

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

de modo que

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \frac{y_\ell^2}{\eta_\ell} &\propto \frac{1}{M_\ell M_\ell^{-\frac{1}{6}}} = M_\ell^{-\frac{5}{6}}, \\ 2 \frac{y_d y_\ell}{\sqrt{\eta_d \eta_\ell}} \left(\frac{2\sqrt{M_d M_\ell}}{M_d + M_\ell} \right)^{0,375} &\propto \frac{1}{M_\ell^{0,1875} \sqrt{M_\ell M_\ell^{-\frac{1}{6}}}} = M_\ell^{-0,60417}, \\ 2 \frac{y_\ell y_v}{\sqrt{\eta_\ell \eta_v}} \left(\frac{2\sqrt{M_\ell M_v}}{M_\ell + M_v} \right)^{0,375} &\propto \frac{1}{M_\ell^{0,1875} \sqrt{M_\ell M_\ell^{-\frac{1}{6}}}} = M_\ell^{-0,60417}. \end{aligned} \quad (\text{A.157})$$

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

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

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

En el modelo de Tsilingiris tendríamos

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

con

$$\Phi_{\ell\ell} = 1 \quad (\text{A.160})$$

y

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

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

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

y las contribuciones a la viscosidad dinámica de la mezcla como

$$\begin{aligned} \frac{N_\ell \eta_\ell}{N_d \Phi_{\ell d} + N_v \Phi_{\ell v} + N_\ell \Phi_{\ell\ell}} &\propto M_\ell^{-2/3}, \\ \frac{N_v \eta_v}{N_d \Phi_{vd} + N_v \Phi_{vv} + N_\ell \Phi_{v\ell}} &\simeq \frac{N_v \eta_v}{N_d \Phi_{vd} + N_v \Phi_{vv}}, \\ \frac{N_d \eta_d}{N_d \Phi_{dd} + N_v \Phi_{dv} + N_\ell \Phi_{d\ell}} &\simeq \frac{N_d \eta_d}{N_d \Phi_{dd} + N_v \Phi_{dv}}. \end{aligned} \quad (\text{A.163})$$

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

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

De la relación

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} \quad (\text{A.164})$$

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

$$\nu = \frac{R_d + \min(r, r_s) R_v T}{1 + r} \frac{1}{p \left[\frac{\varepsilon}{\eta_d} + \frac{\min^2(r, r_s)}{\eta_v} + 2 \left(\frac{2\sqrt{\varepsilon}}{1 + \varepsilon} \right)^{0,375} \frac{\sqrt{\varepsilon} \min(r, r_s)}{\sqrt{\eta_d \eta_v}} \right]} \quad (\text{A.165})$$

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

En el modelo de Tsilingiris tendremos

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

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

A.10.7. Viscosidad cinemática en función de la concentración

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

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

A.10.8. Una aproximación relevante

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

Colisión aire-gota: Recordemos que venimos despreciando la solubilidad del aire en agua. Esto significa que las moléculas de aire que chocan con gotas de agua, o bien rebotan inmediatamente o bien son transitoriamente adsorbidas en la superficie y después liberadas. En ambos casos las moléculas de aire salientes son “emitidas” estadísticamente en condiciones de equilibrio termodinámico, en el sentido de tener una distribución de velocidad de Maxwell–Boltzman a la temperatura de equilibrio. De modo que en este caso la hipótesis está bien justificada en el sentido de la transferencia de momento efectiva.

Colisión vapor-gota: En este caso las moléculas de agua que chocan pueden integrarse a la gota por condensación, pero bajo la hipótesis de que tenemos aire húmedo saturado se debe liberar una cantidad igual de moléculas a la fase gas, otra vez en condiciones de equilibrio termodinámico. Para aire húmedo no saturado, en cambio, ambos procesos no se balancean, pero debemos tener presente que en nuestro modelo termodinámico sólo consideramos la presencia de gotas si estamos por encima de la saturación. En cuanto al crecimiento de gotas por condensación, este proceso está dominado por efectos de tensión superficial, que en general estamos despreciando. De modo que la hipótesis vuelve a estar bien justificada en este caso, o al menos es consistente con las limitaciones de nuestro modelo.

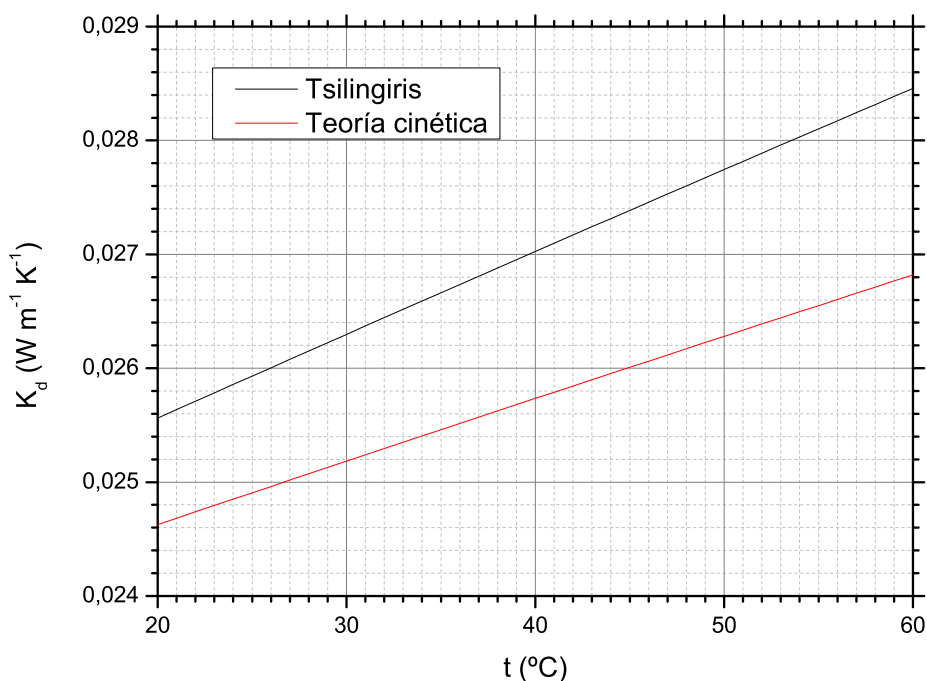
Colisión gota-gota: Excepto por coalescencia de gotas, también en este caso la colisión entre gotitas puede ser inelástica, pero en promedio esto no debería alterar su distribución de velocidades de Maxwell–Boltzman, sino por otra razón que su equilibrio termodinámico con las otras componentes (vapor y aire). La prevalencia de la coalescencia en colisiones entre gotitas puede descartarse sobre la base de la estabilidad relativa de nieblas y nubes que estamos asumiendo implícitamente: si la coalescencia fuera un proceso dominante, o al menos importante, llegaríamos rápidamente a condiciones de precipitación, que están mucho más allá del alcance pretendido por nuestro modelo.

A.10.9. Selección del modelo

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

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

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


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

A.11. Conductividad térmica

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

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

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

A.11.1. Aire seco

En este caso tenemos

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

que insertado en la expresión general de teoría cinética da

$$K_d = \frac{19}{4} \eta_d R_d. \quad (\text{A.170})$$

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

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

cuyos coeficientes se listan en la Tabla A.9.

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

$$K_d = \frac{19}{4} \eta_d R_d = 5.580\,754\,338 \times 10^{-4} T^{\frac{2}{3}} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}. \quad (\text{A.172})$$

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

A.11.2. Vapor de agua

En este caso

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

y la expresión general de la teoría cinética da

$$K_v = \frac{21}{4} \eta_v R_v. \quad (\text{A.174})$$

Otra vez Tsilingiris provee un modelo más preciso,

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

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

$$K_v = \frac{21}{4} \eta_v R_v = 5.464\,760\,847 \times 10^{-5} T^{1.1} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (\text{A.176})$$

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

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

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

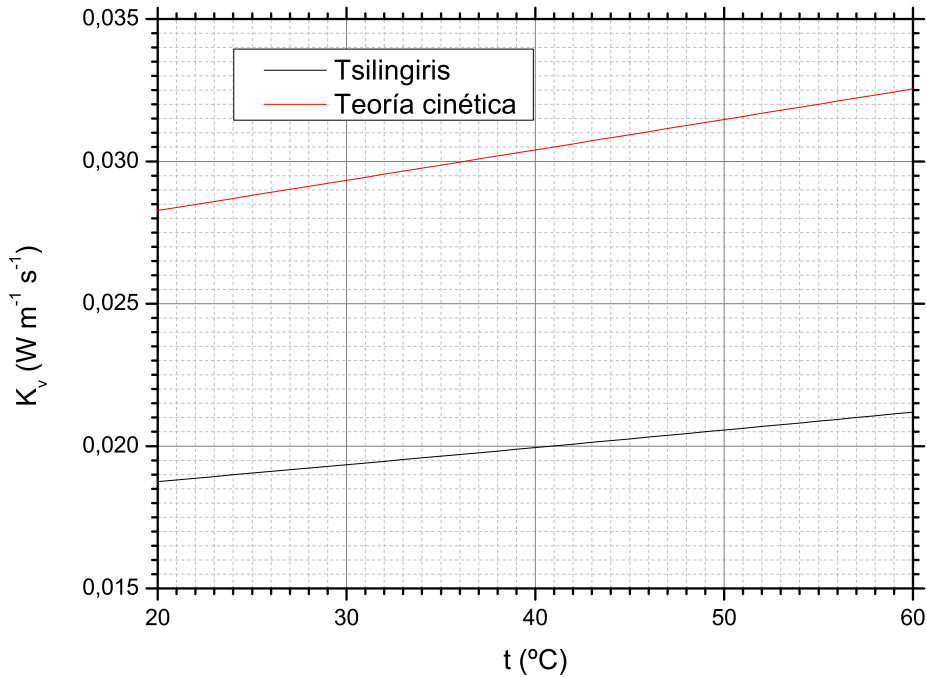


Figura A.10: Conductividad térmica del vapor de agua K_v dada por (A.176) y (A.175).

A.11.3. Aire húmedo

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

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

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

donde, usando su ec.(2)

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

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

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

con

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

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

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

con

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

Se obtiene entonces

$$\Theta_{dd} = \Theta_{vv} = 1 \quad (\text{A.183})$$

y

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

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

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

y

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

A la saturación simplemente tendremos

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

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

A.11.4. Aire mojado

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

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

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

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

siendo así continua con derivada discontinua.

A.11.6. Conductividad térmica en función de la concentración

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

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

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

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

A.11.7. Difusividad térmica

La difusividad térmica está definida como [40]

$$\kappa = \frac{K}{\rho c_p}. \quad (\text{A.190})$$

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

A.12. Difusividad de masa

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

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

donde T está en K.

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

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

con p en Pa. Absorbiendo el factor de conversión en los coeficientes, el modelo queda

$$D = (D_0 + D_1T + D_2T^2) p^{-1} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \quad (\text{A.193})$$

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

A.13. Coeficientes en el estado de referencia

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

$$r_s = \frac{q_s}{1 - q_s}. \quad (\text{A.194})$$

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

Expansión térmica:

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

Expansión másica:

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

Calor específico:

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

Densidad:

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

Viscosidad cinemática:

$$\nu = \frac{\eta}{\rho}. \quad (\text{A.199})$$

Viscosidad dinámica:

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

Conductividad térmica:

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

Coefficientes de mezcla:

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

Difusividad térmica:

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

Difusividad de masa:

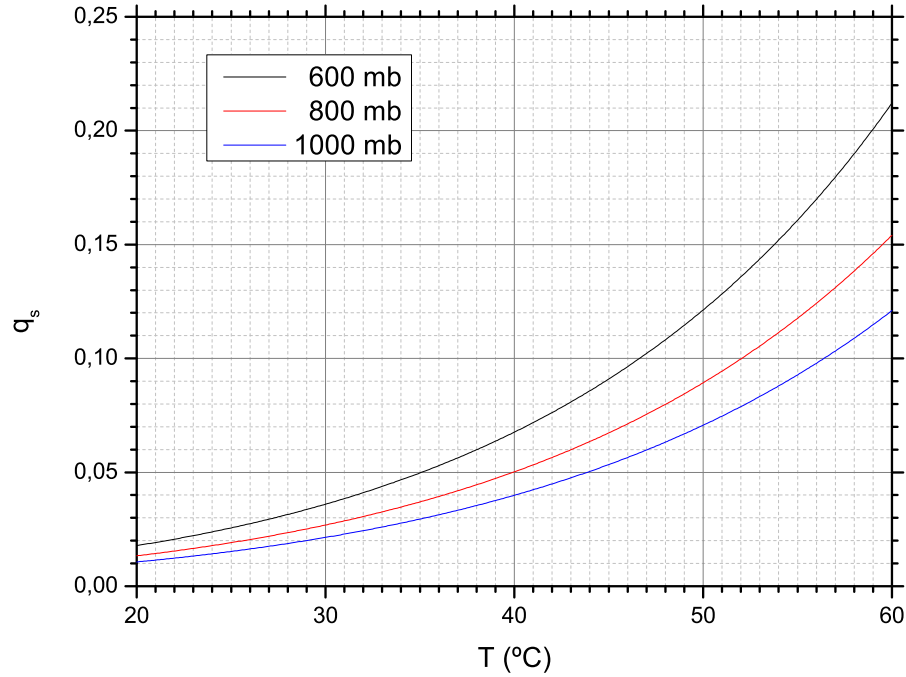
$$D = (D_0 + D_1 T + D_2 T^2) p^{-1}. \quad (\text{A.204})$$

$$D_0 = -2,8118 \times 10^{-1}, \quad D_1 = 4.5383 \times 10^{-3}, \quad D_2 = 1.6779 \times 10^{-5}.$$

A.14. Linealización de la humedad específica de saturación

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

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


 Figura A.11: Humedad específica de saturación q_s .

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

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

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

$$f(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 + \dots \quad (\text{A.205})$$

donde

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

Supongamos que queremos aproximarla por una linealización

$$f_{\text{lin}}(x) = A_{\text{lin}} + B_{\text{lin}}x \quad (\text{A.207})$$

A.14. LINEALIZACIÓN DE LA HUMEDAD ESPECIFICA

sobre el intervalo simétrico

$$-\delta \leq x \leq \delta, \quad (\text{A.208})$$

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

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

Entonces debemos tener

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

y

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

de donde es inmediato que

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

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

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

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

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

y definiendo

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

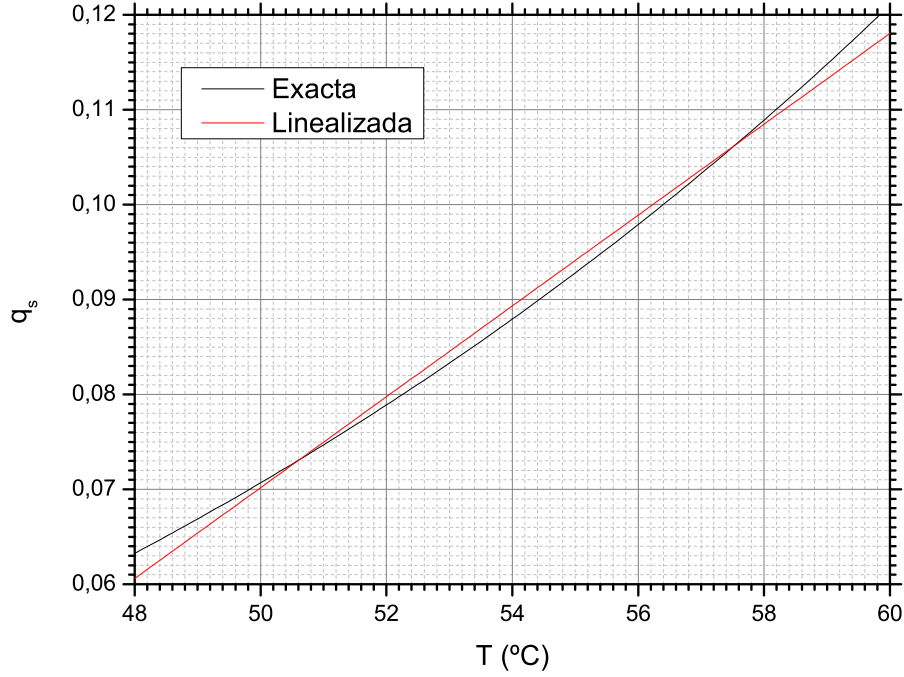


Figura A.12: Humedad específica de saturación y linealización óptima para $\bar{T} = 54^\circ\text{C}$, $\Delta T = 12^\circ\text{C}$, $p = 1000$ mb.

es sencillo obtener la recursión

$$\begin{aligned}
 m'_s &= \frac{n'_s (1 + m_s)}{p - n_s}, \\
 m''_s &= \frac{n''_s (1 + m_s) + 2n'_s m'_s}{p - n_s}, \\
 m'''_s &= \frac{n'''_s (1 + m_s) + 3n''_s m'_s + 3n'_s m''_s}{p - n_s},
 \end{aligned} \tag{A.216}$$

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

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

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

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

A.14. LINEALIZACIÓN DE LA HUMEDAD ESPECIFICA

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

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

Apéndice B

Ecuación de Laplace

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

B.1. Celda rectangular

Comenzamos buscando una solución general analítica del problema

$$\nabla^2 u = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq z \leq H. \quad (\text{B.1})$$

Notemos primero que el problema

$$\nabla^2 u = 0 \quad (\text{B.2})$$

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

$$u(x, z) = X(x)Z(z) \quad (\text{B.3})$$

sustituyendo, y dividiendo por XZ , obtenemos

$$\frac{X''}{X} = -\frac{Z''}{Z} = -\lambda^2, \quad (\text{B.4})$$

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

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

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

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

La solución general tendrá entonces la forma

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

para lo cual necesitaremos calcular las DFTs

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} M\tilde{S}_{pq} &= \sum_{m=1}^{M-1} e^{ik_{z,q}z_m} \sinh\left(k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)\right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{M-1} e^{ik_{z,q}z_m} \left(e^{k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)} - e^{-k_{x,p}\left(z_m - \frac{H}{2}\right)} \right) + \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2} e^{-k_{x,p}\frac{H}{2}} \sum_{m=0}^{M-1} \left(e^{(ik_{z,q}+k_{x,p})\frac{H}{M}} \right)^m - \frac{1}{2} e^{k_{x,p}\frac{H}{2}} \sum_{m=0}^{M-1} \left(e^{(ik_{z,q}-k_{x,p})\frac{H}{M}} \right)^m \\ &\quad + \sinh\left(k_{x,p}\frac{H}{2}\right). \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Procediendo como en el caso anterior,

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

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

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

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

$$M\tilde{S}_{0q} = 0 \quad (\text{B.25})$$

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

$$\begin{aligned}
 M\tilde{L}_{pq} &= \sum_{m=0}^{M-1} e^{ik_{z,q}z_m} \left(z_m - \frac{H}{2} \right) - \left(-\frac{H}{2} \right) \\
 &= \frac{H}{M} \sum_{m=0}^{M-1} m \left(e^{ik_{z,q} \frac{H}{M}} \right)^m - \frac{H}{2} \sum_{m=0}^{M-1} \left(e^{ik_{z,q} \frac{H}{M}} \right)^m + \frac{H}{2} \\
 &= \frac{H}{e^{ik_{z,q} \frac{H}{M}} - 1} + \frac{H}{2} \\
 &= -i \frac{H}{2} \frac{\sin \left(k_{z,q} \frac{H}{M} \right)}{1 - \cos \left(k_{z,q} \frac{H}{M} \right)}. \tag{B.26}
 \end{aligned}$$

donde hemos usado que

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

y que

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

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

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

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

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

con

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

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

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

APÉNDICE B. ECUACIÓN DE LAPLACE

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

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

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

$$\tilde{u}_{pq} = a_p \tilde{C}_{pq} + b_p \tilde{S}_{pq}, \quad (\text{B.35})$$

con

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

y usando la unicidad de la DFT obtenemos

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

que puede invertirse inmediatamente para obtener

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

y usando la unicidad de la DFT obtenemos

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

que puede invertirse inmediatamente para obtener

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

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

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

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

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

la correspondiente solución en la grilla número de onda se escribirá

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

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

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

y reescribir la solución como

$$\tilde{u}_{pq} = \tilde{A}_p \tilde{c}_{pq} + i\tilde{B}_p \tilde{s}_{pq}. \quad (\text{B.55})$$

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

B.2. Celda cuadrada

La solución general analítica del problema

$$\nabla^2 u = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq z \leq L \quad (\text{B.56})$$

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

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

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

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

con r y s enteros, y escribiremos

$$u(x, z) = \sum_r c_r e^{-i2\pi r x/L} e^{-2\pi r z/L} + \sum_s d_s e^{-2\pi s x/L} e^{-i2\pi s z/L} + a_{00} + a_{10}x + a_{01}z + a_{11}xz. \quad (\text{B.59})$$

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

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

donde por brevedad hemos definido

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

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

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

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

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

$$u_{nm} = u(x_n, z_m) \quad (\text{B.63})$$

y restringiéndolos consistentemente al escribir

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

donde hemos definido

$$x'_n = x_n - \frac{L}{2}, \quad z'_m = z_m - \frac{L}{2}. \tag{B.65}$$

La reescritura de este campo discretizado en la forma

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

requiere el cálculo de las DFTs

$$\cosh(k_p z'_m) = \sum_{q=-N/2}^{N/2} C_{pq} e^{-ik_q z_m}, \quad \sinh(k_p z'_m) = \sum_{q=-N/2}^{N/2} S_{pq} e^{-ik_q z_m} \tag{B.67}$$

para $p \neq 0$,

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

para $q \neq 0$, y

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

$$x'_n z'_m = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} Q_{pq} e^{-ik_p x_n} e^{-ik_q z_m}, \tag{B.70}$$

$$x'_n = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} X_{pq} e^{-ik_p x_n} e^{-ik_q z_m}, \tag{B.71}$$

$$z'_m = \sum_{p=-N/2}^{N/2} \sum_{q=-N/2}^{N/2} Z_{pq} e^{-ik_p x_n} e^{-ik_q z_m}. \tag{B.72}$$

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

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

con

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

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

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

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

y

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

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

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

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

Es importante recordar que siempre, en estas expresiones,

$$a_0 = \bar{a}_0 = b_0 = \bar{b}_0 = 0. \quad (\text{B.82})$$

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

APÉNDICE B. ECUACIÓN DE LAPLACE

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

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

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

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

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

Introduciendo las DFT unidimensionales de estas CC

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

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

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

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

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

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

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

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

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

y hemos definido

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Bibliografía

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

BIBLIOGRAFÍA

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

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

BIBLIOGRAFÍA

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

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

BIBLIOGRAFÍA

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

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

BIBLIOGRAFÍA

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

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

