

ADAPTACIÓN DE UN MÉTODO PSEUDO-ESPECTRAL A CONDICIONES DE CONTORNO NO-LIBRES

ADAPTING A PSEUDO-SPECTRAL METHOD TO NON-FREE BOUNDARY CONDITIONS

I.C. Ramos^a, C.B. Briozzo^b.

^a Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG) – Universidad Nacional de Córdoba – CONICET

^b Facultad de Matemática Astronomía y Física (FaMAF) – Universidad Nacional de Córdoba

Recibido: 20/11/2013; aceptado: 25/08/2014

Se presenta la adaptación a condiciones de contorno no libres de un método pseudo-espectral basado en transformada de Fourier compleja. El método se aplica a la integración numérica de las ecuaciones de Oberbeck–Boussinesq en una celda de Rayleigh–Bénard con condiciones de contorno de Dirichlet en velocidad (*no-slip*) y temperatura (contacto térmico perfecto). Se muestran los primeros resultados de una simulación numérica 2D de convección de aire seco para número de Rayleigh alto ($R \sim 10^9$). Estos resultados representan la base a partir de la cual se pretende estudiar, mediante el mismo método, convección húmeda en un destilador solar.

Palabras clave: método pseudo-espectral, condiciones de contorno no libres, convección de Rayleigh–Bénard.

We present the adaptation to non-free boundary conditions of a pseudospectral method based on the (complex) Fourier transform. The method is applied to the numerical integration of the Oberbeck–Boussinesq equations in a Rayleigh–Bénard cell with Dirichlet boundary conditions for velocity (*no-slip*) and temperature (perfect thermal contact). We show the first results of a 2D numerical simulation of dry air convection at high Rayleigh number ($R \sim 10^9$). These results are the base for the later study, by the same method, of wet convection in a solar still.

Keywords: pseudospectral method, non-free boundary conditions, Rayleigh–Bénard convection.

I. INTRODUCCIÓN

Observaciones experimentales¹ han mostrado que la aparición de un flujo convectivo turbulento puede mejorar significativamente la eficiencia de un destilador solar tipo batea, pero hasta ahora se carece de una explicación teórica. Una simulación hidrodinámica adecuada debe incorporar los efectos de humedad y condensación, lo cual sólo se ha vuelto posible recientemente^{2,3}. La simulación también debe ser capaz de resolver los detalles finos del flujo y enfrentarse con números de Rayleigh $\sim 10^9$. Los métodos pseudo-espectrales basados en la transformada de Fourier son adecuados para este tipo de tareas cuando las condiciones de contorno (CC) son libres (normalmente periódicas), son rápidos, fáciles de programar, la discretización de los operadores espaciales es muy simple y tiene una resolución espectral completa, los términos no lineales pueden ser tratados mediante convoluciones por Transformada Rápida de Fourier (FFT), y resolver la ecuación de Poisson (ver Sección II) es casi trivial. Sin embargo son difíciles de adaptar a CC no libres³, requiriendo el uso de bases alternativas (por ejemplo transformada seno o polinomios de Chebyshev) donde la discretización de incluso operadores diferenciales simples es compleja, las convoluciones son complicadas, y resolver la ecuación de Poisson es difícil.

Por otro lado, en métodos que trabajan directamente sobre la grilla de coordenadas discretizar operadores e

implementar CC no libres es fácil, pero discretizaciones de orden alto resultan computacionalmente costosas. Aun peor, sobre una grilla $N \times M$ los mejores Resolvedores Rápidos de Poisson (FPS) tienen una cuenta de operaciones $O((N \times M) \log_2(N \times M))$ al menor orden de discretización (cuadrático), y mucho peor para órdenes superiores.

En este trabajo vamos a mostrar como un método pseudo-espectral basado en Fourier puede ser adaptado a CC no libres simples sin perder sus características más atractivas. Este es un primer paso hacia la consrucción de una simulación pseudo-espectral de convección de aire húmedo dentro de un destilador solar tipo batea, y debe ser entendido solo como una demostración de principio.

II. SISTEMA

Consideraremos la convección de aire seco en 2D en una celda de Rayleigh–Bénard de 1m de ancho y 0.5m de alto, aproximadamente a temperatura ambiente y con diferencias de temperatura $\sim 65^\circ\text{C}$ (similar a los valores de un destilador solar real¹). La dinámica está dada por las ecuaciones de Oberbeck–Boussinesq, que en variables adimensionales relativas al perfil conductivo estático se escriben⁴

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

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

$$\nabla^2 \mathbf{u} = 0, \quad (3)$$

donde R es el número de Rayleigh y σ es el número de Prandtl (~ 0.7 para aire seco). Adoptaremos CC periódicas en la dirección horizontal, y homogéneas de Dirichlet para velocidad \mathbf{u} (*no-slip*) y temperatura θ (contacto térmico perfecto) sobre las placas superior e inferior.

Nótese que la ec. 3 no es una ecuación diferencial sino una relación constitutiva, que expresa la incompresibilidad del flujo. De hecho el término de presión en la ec. 1 es calculado mediante la aplicación de la ec. 3, lo que da

$$\nabla^2 P = -\sigma^{-1} \sum_{i,j} \partial_i \partial_j (u_i u_j) + \partial_z \theta, \quad (4)$$

donde $i, j = x, z$. En cualquier esquema de integración "clásico" esta ecuación de Poisson debe ser resuelta con CC adecuadas en cada paso temporal, para asegurar $\nabla \cdot (\partial_t \mathbf{u}) = 0$.

III. DESCOMPOSICIÓN DE HELMHOLTZ

En un esquema pseudo-espectral de CC libres la ec. 4 se resuelve trivialmente en la representación de número de onda (Fourier), pero esta solución en general no satisface CC no libres. Puede mostrarse que resolver la ec. 4 para P y sustituir en la ec. 1 es completamente equivalente a calcular

$$\partial_t \mathbf{u} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \sigma(\theta \hat{\mathbf{e}}_z + \nabla^2 \mathbf{u}) \quad (5)$$

sin campo de presión, y luego tomar la parte transversal de $\nabla \cdot \mathbf{u}$ en una descomposición de Helmholtz,

$$\text{Trans}(\bar{\mathbf{u}}) = (-k_z, k_x) (-k_z \bar{u}_x + k_x \bar{u}_z) / (k_x^2 + k_z^2), \quad (6)$$

donde la barra denota transformada de Fourier. Notando que $\text{Trans}(\bar{\mathbf{u}})$ es solución de la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \bar{\mathbf{u}} = F^{-1} \{ (-k_z, k_x) (-k_z \bar{u}_x + k_x \bar{u}_z) \} \quad (7)$$

(donde F^{-1} indica la transformada inversa de Fourier), vemos que tampoco satisface, en general, CC no libres. Sin embargo podemos agregar a la solución de la ecuación inhomogénea (7) una solución de la correspondiente ecuación homogénea

$$\nabla^2 \bar{\mathbf{u}} = 0, \quad (8)$$

que es la ecuación de Laplace, y usarla para satisfacer las CC.

IV. RESOLVEDOR DE LAPLACE

Resolver la ec. 8 sobre un dominio rectangular es un problema básico del análisis armónico, y las soluciones analíticas correspondientes a CC periódicas en la dirección horizontal son bien conocidas y pueden ser fácilmente expresadas como series de Fourier en x . La dependencia con z puede ser expresada en términos de funciones hiperbólicas, las que sobre un dominio finito en z pueden también ser desarrolladas en serie de Fourier. El truncamiento de estas series a la frecuencia de Nyquist arroja expresiones analíticas para la solución general de la ec. 8, discretizada sobre la grilla de número de onda correspondiente a la grilla de coordenadas computacional. La solución general puede ser puesta en la forma

$$\bar{u}_{pq} = a_p c_{pq} + b_p s_{pq}, \quad (9)$$

donde los índices p y q corren en dirección vertical y horizontal, respectivamente, sobre los nodos de la grilla

de número de onda. Aquí c_{pq} y s_{pq} son matrices $N \times M$ para las cuales tenemos expresiones analíticas, y pueden ser calculados sólo una vez al comienzo de la simulación. La única tarea a realizar en cada paso de la integración temporal es ajustar los $2N$ coeficientes libres a_p y b_p para satisfacer las CC en las fronteras superior e inferior. Como se verá en la siguiente Sección, esto es una tarea $O(N \times M)$, superando así la velocidad del mejor FPS por un factor significativo para grillas grandes.

V. ESQUEMA DEL ALGORITMO

Inicialización:

- Se toma velocidad cero y ruido blanco Gaussiano para la temperatura (amplitud \sim ruido térmico) discretizados sobre la grilla coordenada, y se toma FFT para obtener $\bar{u}_{x,pq}$, $\bar{u}_{z,pq}$ y θ_{pq} en la grilla número de onda.
- Se calcula (solo una vez) las matrices c_{pq} y s_{pq} .

Integración temporal:

- Se calculan las convoluciones de $\bar{u}_{x,pq}$, $\bar{u}_{z,pq}$ y θ_{pq} vía FFT con la regla 2/3.
- Se calculan los lados derechos de las ecuaciones de evolución como

$$(\partial_t \bar{u}_x)_{pq} \leftarrow ik_{x,p} (\bar{u}_x * \bar{u}_x)_{pq} + ik_{z,q} (\bar{u}_z * \bar{u}_x)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \bar{u}_{x,pq}$$

$$(\partial_t \bar{u}_z)_{pq} \leftarrow ik_{x,p} (\bar{u}_x * \bar{u}_z)_{pq} + ik_{z,q} (\bar{u}_z * \bar{u}_z)_{pq} - \sigma k_{pq}^2 \bar{u}_{z,pq} + \sigma \theta_{pq}$$

$$(\partial_t \theta)_{pq} \leftarrow ik_{x,p} (\bar{u}_x * \theta)_{pq} + ik_{z,q} (\bar{u}_z * \theta)_{pq} - k_{pq}^2 \theta_{pq} + R \bar{u}_{z,pq}$$

- Se calcula $\text{Trans}(\partial_t \bar{\mathbf{u}})$ como

$$(\partial_t \bar{u})_{pq} \leftarrow [-k_{z,q} (\partial_t \bar{u}_x)_{pq} + k_{x,p} (\partial_t \bar{u}_z)_{pq}] / k_{pq}^2$$

$$(\partial_t \bar{\mathbf{u}})_{pq} \leftarrow (-k_{z,q}, k_{x,p})$$

$$\times [(\partial_t \bar{u})_{pq} - c_{pq} \sum_r (\partial_t \bar{u})_{pr} - s_{pq} \sum_r k_{z,r} (\partial_t \bar{u})_{pr}]$$

La integración temporal se realiza mediante un algoritmo de Runge-Kutta-Cash-Karp de quinto orden con paso adaptativo⁵.

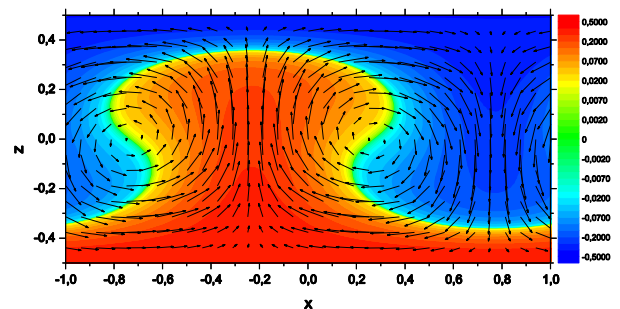


Figura 1. Campos de temperatura velocidad para $R=5R_c$ a $t=2t_c$ en una grilla de 32×16 .

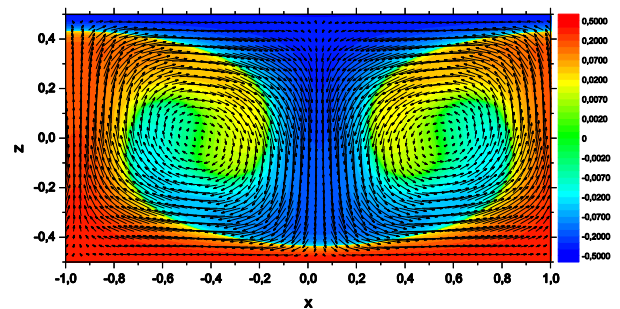


Figura 2. Campos de temperatura velocidad para $R=50R_c$ a $t=t_c$ en una grilla de 64×32 .

VI. CORRIDAS DE PRUEBA

Incluso para un sistema simple como el estudiado aquí, la fenomenología que se encuentra es rica; presentaremos sólo una breve descripción. Todos los resultados están dados en términos del número de Rayleigh crítico para la celda lateralmente infinita $R_c \sim 1701$, y del tiempo característico que para nuestra celda y medio es $t_c \sim 11797s$.

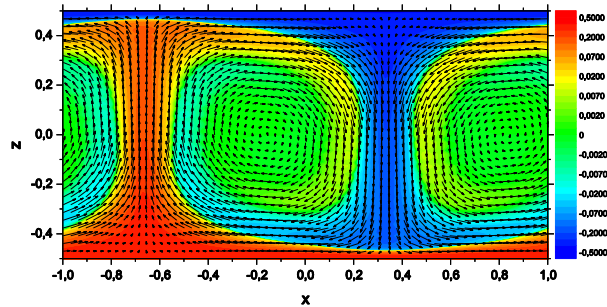


Figura 3. Campos de temperatura velocidad para $R=500R_c$ a $t=0.25t_c$ en una grilla de 128×64 (velocidad decimada a una grilla de 64×32).

A bajo R un estado de régimen estacionario, que consiste en dos rolos contrarrotantes, es alcanzado en tiempos del orden de t_c o menores. Este tiempo cae rápidamente cuando R crece, hasta $\sim 0.1t_c$ para $R \sim 1000R_c$ (ver fig. 1, 2 y 3).

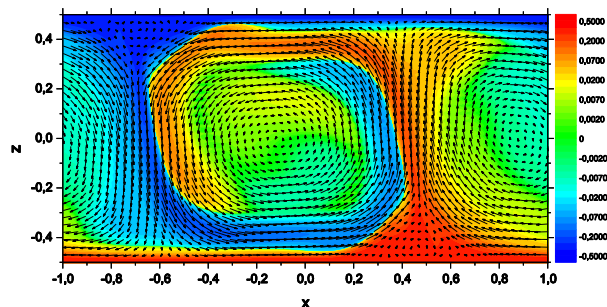


Figura 4. Campos de temperatura velocidad para $R=5000R_c$ a $t=0.05t_c$ en una grilla de 192×96 (velocidad decimada a una grilla de 64×32).

Alrededor de $R \sim 5000R_c$ estos rolos desarrollan oscilaciones laterales y aparecen las primeras "estructuras secundarias" (pequeños remolinos) cerca de la base de las plumas ascendentes y descendentes (ver fig. 4).

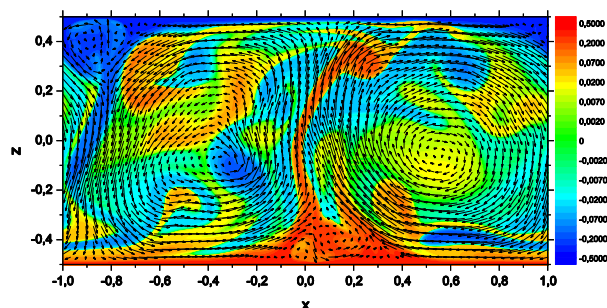


Figura 5. Campos de temperatura velocidad para $R=5 \times 10^4 R_c$

a $t=0.01t_c$ en una grilla de 384×192 (velocidad decimada a una grilla de 64×32).

Por encima de $R \sim 5000R_c$ el estado de régimen se vuelve desordenado y aperiódico, consistiendo en plumas y remolinos intermitentes con un amplio rango de tamaños (ver fig. 5).

A $R \sim 5 \times 10^5 R_c$ la diferencia de temperatura es $\sim 65^\circ C$; los remolinos mas pequeños tienen $\sim 1cm$ de ancho, y las velocidades típicas son $\sim 1m/s$, en concordancia con las observaciones experimentales¹ (ver fig. 6). El tiempo para alcanzar este estado de régimen es bastante corto, $\sim 0.001 t_c$.

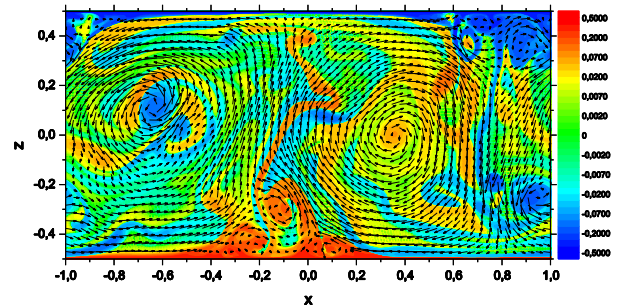


Figura 6. Campos de temperatura velocidad para $R=5 \times 10^5 R_c$ a $t=0.002t_c$ en una grilla de 512×256 (velocidad decimada a una grilla de 64×32).

Nótese que en todas las figuras excepto las fig. 1 y 2 la grilla de velocidades ha sido decimada para mejorar la claridad.

VII. DESEMPEÑO DEL CÓDIGO

Sobre todo el rango de R barrido aquí (mas de cinco órdenes de magnitud), el código mantiene la divergencia del campo de velocidad y los valores de campo en la base y en la tapa prácticamente en cero a precisión de máquina, mostrando que el método implementado es correcto en este aspecto.

También sobre este rango de R el espaciamiento de grilla necesario para obtener campos "suaves" (es decir, para capturar todos los detalles físicos hasta las menores escalas presentes) es consistente con el grosor de la capa límite. Sin embargo, para grillas no lo suficientemente finas el código brinda todavía resultados cualitativamente razonables; típicamente aparece una inestabilidad tipo *checkerboard*, pero el algoritmo le impide crecer, mostrando muy buena estabilidad incluso en presencia de una severa pérdida de precisión.

El algoritmo también es rápido: la simulación para $R \sim 10^9 R_c$ (ver fig. 6), en una grilla de 512×256 , toma aproximadamente un día por minuto simulado en un solo núcleo de la CPU PentiumD en la cual se corrieron las simulaciones.

VIII. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Hemos mostrado cómo un método pseudo-espectral basado en transformada de Fourier puede ser adaptado a condiciones de contorno no libres en un caso simple, al costo de un modesto trabajo analítico sobre las soluciones de las ecuaciones de Poisson y Laplace. El código resultante es rápido y estable, e implementa las

CC y la condición de incompresibilidad esencialmente a precisión de máquina.

La extensión de este esquema a una celda de Rayleigh-Bénard cerrada (es decir, con CC no libres también sobre las paredes laterales) se halla actualmente en curso.

IX. REFERENCIAS

1 - I. De Paul. Solar Energy Engineering **124**, 311-314 (2002).

2 - O. Pauluis and J. Schumacher. Commun. Math. Sci. **8**, 295-319 (2010).

3 - T. Weidauer and J. Schumacher. Phys. Fluids **24**, 076604 (2012).

4 - M.C. Cross and P.C. Hohenberg. Rev. Mod. Phys. **65**, 851-1112 (1993).

5 - W.H. Press, S.A. Teukolsky, T.T. Vetterling, and B.P. Flannery. Numerical Recipes. Cambridge University Press (1996).