

5. LA SIMULACIÓN CINEMÁTICA

En este capítulo se describe el modelo de Simulación Cinemática (KS), que es el tema central de la tesis. La descripción del modelo se realiza de forma genérica, partiendo de su origen en el artículo de Kraichnan (1970) y pasando al modelo, mas completo, descrito por Fung et al. (1992). A continuación se presenta la simulación realizada en la parte experimental de esta tesis, y, por último, se hace una revisión de los resultados más importantes publicados hasta la actualidad sobre análisis Lagrangiano basados en este modelo.

5.1. Descripción del modelo

La KS aparece en la literatura científica en el artículo de Kraichnan (1970), donde se analiza la difusión de partículas mediante dos métodos: la KS (aunque Kraichnan aun no la denominaba así) y la aproximación de interacción directa (Kraichnan, 1966, 1975).

El campo Euleriano de velocidades se calcula en el punto \vec{x} y el instante t como

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^N \left[\vec{A}(\vec{k}_i) \cos(\vec{k}_i \cdot \vec{x} + \omega_i t) + \vec{B}(\vec{k}_i) \sin(\vec{k}_i \cdot \vec{x} + \omega_i t) \right], \quad (5.1)$$

donde

$$\vec{A}(\vec{k}_i) = \vec{\zeta}_i \times \vec{k}_i \quad (5.2a)$$

$$\vec{B}(\vec{k}_i) = \vec{\xi}_i \times \vec{k}_i, \quad (5.2b)$$

lo cual asegura que se cumpla la condición de continuidad,

$$\vec{k}_i \cdot \vec{A}(\vec{k}_i) = \vec{k}_i \cdot \vec{B}(\vec{k}_i) = 0. \quad (5.3)$$

Los vectores $\vec{\zeta}_i$ y $\vec{\xi}_i$ son obtenidos a partir de una distribución Gaussiana bi o tridimensional, dependiendo de las dimensiones de la simulación (ver apéndice C). Los vectores \vec{k}_i se obtienen a partir de una distribución isotrópica.

El módulo de $\vec{\zeta}_i$ y $\vec{\xi}_i$ se calcula a partir del espectro de energía. La frecuencia propia de cada escala, ω_i es obtenida de una distribución Gaussiana de desviación estándar ω_0

El análisis Lagrangiano se realiza integrando la ecuación de movimiento de la partícula,

$$\frac{d\vec{x}_\alpha}{dt} = \vec{u}(\vec{x}_\alpha, t). \quad (5.4)$$

Kraichnan utiliza dos espectros bidimensionales y dos tridimensionales. En cada uno de los casos, uno de los espectros es una delta de Dirac, de forma que la energía esta concentrada en una escala concreta. Del artículo de Kraichnan hay que destacar el análisis que hace de la anomalía presentada para campos Eulerianos “congelados” ($\omega_0 = 0$). En estos campos, las partículas pueden ser atrapadas en órbitas cerradas, dando lugar a observaciones anómalas en la dispersión, la correlación de velocidades Lagrangianas o en la kurtosis (“flatness”) de la distribución de posiciones. Éste fenómeno de partículas atrapadas es especialmente importante en turbulencia bidimensional.

Aún así, Kraichnan encuentra que el comportamiento asintótico de la dispersión relativa de partículas para $t \rightarrow \infty$ (ver ecuación (3.60)) se recupera para un campo generado mediante KS, incluso cuando éste es “congelado”.

Fung et al. (1992), basándose en el artículo de Kraichnan y el de Drummond et al. (1984), amplían el modelo y lo hacen algo mas complejo.

Fung et al. simulan campos 3D con un único espectro, el de von Kármán (Hinze, 1975),

$$E(k) \sim \frac{k^4}{(g + k^2)^{\frac{17}{6}}}, \quad (5.5)$$

donde g es una constante que dependerá de la normalización del espectro, que se comporta como $E(k) \sim k^4$ para grandes escalas y $E(k) \sim k^{-\frac{5}{3}}$ para el espectro a pequeña escala en el subrango inercial. Utilizan dos modelos de simulación. En el primero, el espectro de energía es dividido en dos partes, una correspondiente a las grandes escalas ($k < k_c$) y la otra asociada a las pequeñas escalas ($k > k_c$). Los remolinos simulados con la parte del espectro a gran escala se mueven por el dominio de forma aleatoria¹. La velocidad a pequeña escala se calcula teniendo en cuenta la advección producida por el movimiento a gran escala. En el segundo modelo, tan sólo el subrango inercial del espectro es simulado, y pares de partículas son abandonadas en el flujo con una determinada separación inicial.

¹ Alternativamente, estos remolinos a gran escala pueden ser calculados mediante LES o DNS (véase, p.e., Flohr and Vassilicos (2000)).

En esta tesis se simula únicamente la parte del espectro correspondiente al subrango inercial, ya que tan sólo nos interesa el comportamiento Lagrangiano en estas escalas. Las simulaciones realizadas son bidimensionales, y, a diferencia del modelo de Kraichnan o el de Fung, los modos de Fourier $\vec{A}(k_i) = \vec{A}_i$ y $\vec{B}(k_i) = \vec{B}_i$ no son obtenidos de una distribución Gaussiana, sino que son calculados directamente mediante

$$\|\vec{A}_i\| = \|\vec{B}_i\| = \int_{k_i - \Delta k_i}^{k_i + \Delta k_i} E(k) dk, \quad (5.6)$$

donde $E(k)$ es el espectro de energía, y

$$\Delta k_i = \frac{k_i - k_{i-1}}{2}. \quad (5.7)$$

En general, la distribución de k_i puede ser geométrica,

$$k_i = k_1 \left(\frac{k_N}{k_1} \right)^{\frac{i-1}{N-1}}, \quad (5.8)$$

algebraica,

$$k_i = k_1 i^{\log(k_N/k_1)/\log N}, \quad (5.9)$$

o lineal,

$$k_i = k_1 + \left(\frac{k_N - k_1}{N - 1} \right) (i - 1). \quad (5.10)$$

La elección de la distribución determinará la repartición de energía entre nodos. En principio, para un número N lo suficientemente grande, no hay diferencia entre el campo generado con una distribución u otra.

Flohr and Vassilicos (2000) observan, sin embargo, que en el cálculo de la correlación de velocidades Lagrangianas para diferentes valores de N , la convergencia es mayor usando la distribución geométrica. Por otra parte, no encuentran diferencias apreciables en el cálculo de la dispersión de pares de partículas.

La evolución temporal está controlada por los valores de las frecuencias de cada modo, ω_i . Utilizamos uno de los modelos propuestos por Fung et al. (1992) y Fung and Vassilicos (1998),

$$\omega_i = \lambda k_i^{\frac{3}{2}} E(k_i)^{\frac{1}{2}}, \quad (5.11)$$

donde λ es el denominado *coeficiente de estacionariedad*, y tiene un valor del orden de la unidad. Para $\lambda = 0$ obtenemos un campo turbulento “congelado”.

El cálculo del movimiento de las partículas individuales se realiza integrando (5.4) mediante un Runge-Kutta de segundo orden de paso de tiempo fijo. A diferencia de en la DNS, en la KS no es necesario realizar una extrapolación del campo de velocidades sobre la posición de la partícula; calculamos el campo en cualquier posición y en cualquier instante. De hecho, en el cálculo Lagrangiano con KS no existe ninguna malla de discretización. En nuestras simulaciones, la malla ha sido creada a efectos únicamente de cálculos Eulerianos (correlaciones, espectros, funciones de estructura, ...).

5.2. Dispersión de partículas en el marco de la KS

Una de las aplicaciones mas comunes de la KS hasta el momento ha sido el análisis Lagrangiano de dispersión de partículas en flujo turbulento. Kraichnan (1970) obtuvo el comportamiento asintótico teórico de la dispersión de partículas a tiempos grandes, aunque fueron Fung et al. (1992) quienes estudiaron en profundidad el fenómeno de dispersión para tiempos intermedios mediante KS.. En particular analizan el valor de la constante G de la ley de Richardson, (ver ecuación (3.49)),

$$D^2 = G\epsilon t^3. \quad (5.12)$$

Fung et al. realizan experimentos para diferente extensión del subrango inercial (y, por lo tanto, diferente número de Reynolds), obteniendo valores que van desde $G = 0,10$ para Reynolds grande a $G = 1,64$ para valores de Reynolds bajos. Kraichnan (1966) obtiene $G = 2,42$ usando un esquema LHDI (Langrangian History Direct Interaction)². Otros valores de G publicados son $G = 3,5$ para el modelo EDQNM (Larchevêque and Lesieur, 1981) y $G = 2,0$ con el modelo de vuelo aleatorio (“random flight model”) desarrollado por Thomson (1990).

En cuanto a los resultados experimentales, son pocos debido a la dificultad de medición de ϵ . Tatarski (1960) midió experimentalmente el valor de $G = 0,06$, pero este resultado solo puede ser considerado como una estimación del orden de magnitud (Malik, 1991; Fung and Vassilicos, 1998). Más recientemente, un valor de $G = 0,5 \pm 0,2$ ha sido obtenido mediante turbulencia generada por rejillas en un tanque (Ott and Mann, 2000), si bien el número de Reynolds en estos experimentos es demasiado bajo como para apreciar claramente una ley de dispersión relativa del tipo de (5.12).

² Este es el valor publicado por Kraichnan, si bien recientemente Ott and Mann (2000) han corregido el cálculo efectuado por Kraichnan, obteniendo $G = 5,5$

Fung y Vassilicos (1998) utilizan la flexibilidad de la KS para simular flujos bidimensionales con diferentes espectros de energía y verificar la ley de Richardson generalizada (3.55). Efectivamente, demuestran que esta es válida siempre y cuando $n < 3$, y el parámetro de estacionariedad λ (ver (5.11)) sea del orden de 0,5, aunque no se obtiene una diferencia significativa mientras λ se mantenga en el rango $0,25 < \lambda < 0,5$. Obtienen, en cambio, desviaciones significativas de la ley (5.12) para valores de λ menores que $\sim 0,1$, en el que la ley es potencial, pero el valor de la potencia no es 3, y para $\sim 1,0$, para los que la dispersión relativa no parece seguir una ley de tipo potencial.

En relación al valor de λ , Malik y Vassilicos (1999) realizan comparaciones de dispersión relativa de partículas con las observaciones de la DNS 3D de Yeung 1994. Obtienen ahora que el análisis Lagrangiano no se ve afectado por el valor de λ siempre y cuando éste se mantenga inferior a 1. En particular, observan incluso una gran similitud entre ambos análisis Lagrangianos cuando el campo cinemático es “congelado”. Recordemos que Kraichnan hacia notar ciertas anomalías en la dispersión de partículas para campos “congelados”, aunque bien es cierto que éstas eran más importantes para el caso bidimensional. Tanto la KS de Malik y Vassilicos como la DNS de Yeung son simulaciones tridimensionales, por lo que no hay discrepancia respecto de las observaciones de Kraichnan.

5.3. Implementación del modelo

Se han considerado dos situaciones diferentes de implementación del modelo KS. En una disponemos de un espectro de energía calculado a partir de la simulación DNS con la que queremos contrastar nuestro modelo. Construimos entonces un modelo en el que se podía introducir el valor del espectro como puntos discretos (k_i, E_i) , y calculamos los módulos de los coeficientes \vec{A}_i y \vec{B}_i mediante (5.6), donde la discretización en el espacio de onda viene impuesta por los puntos discretos del espectro introducido. El número de modos y su distribución vienen dados por la forma de calcular el espectro en modelo DNS. En todos nuestros experimentos el número de puntos del espectro ha sido 100, distribuidos de forma uniforme en todo el rango de números de onda. Este espectro es el mostrado en la figura 4.1. La dirección de estos vectores viene entonces determinada (ecuación (5.3)) por la de \vec{k}_i , que es aleatoria. Esta aleatoriedad es la que garantiza la isotropía del campo generado. El número de Reynolds en estas simulaciones es, evidentemente, el mismo que para la DNS, $Re \sim (55/1)^2 \sim 3000$.

En el segundo modelo el espectro de energía es calculado a partir de unos ciertos

parámetros: la escala máxima del campo, la escala de disipación, la ley de variación potencial del espectro (es decir, el exponente n en $E(k) \sim k^{-n}$) y el valor del espectro para un determinado k . Alternativamente, se puede determinar la ley espectral con la energía total del campo en lugar de la escala externa. Todos los espectros mantienen el nivel de energía para $k = 10$ constante en $E(10) = 2,3 \cdot 10^{-2}$. La energía total de los campos es $E_T \sim 1,5$, aunque puede variar. La escala de disipación viene determinada por $\eta = 2\pi/k_\eta$, con $k_\eta = 4000$, y la externa viene dada por $k_E \sim 1,1$, variable de una simulación a otra. El número de Reynolds para estas simulaciones será entonces $Re \sim 10^7$. Los valores de k_i para el cálculo del campo Euleriano han sido distribuidos de forma lineal en todo el rango entre k_E y k_η ,

$$k_i = k_E + \frac{(k_\eta - k_E) * (i - 1)}{N - 1}$$

con $N = 150$.

Se han realizado con este segundo modelo dos series de experimentos. En la primera serie se han creado campos con diferentes leyes espectrales $E(k) \sim k^{-n}$, con n variando de 1 a 5, manteniendo constante la energía total $E_T = \int_0^\infty E(k)dk \approx 1,5$. En la segunda serie se ha variado el valor de n de 0,25 a 5, manteniendo constante la escala externa k_E , y variando, por tanto, la energía total.

El variar el valor de la ley espectral n plantea un problema respecto al modelo de evolución temporal del campo, expresada en (5.11). Para $n < 3$, el valor de ω_i es creciente en i , lo cual es compatible con la física de la turbulencia. De hecho, para $n = 5/3$, obtenemos $\omega_i \sim k_i^{\frac{2}{3}}$, que da la escala de tiempo característica para la escala $l_i \sim k_i^{-1}$ según K41³. Sin embargo, para $n = 3$, la expresión (5.11) da una frecuencia característica constante, y decreciente con i cuando $n > 3$. Esto último no tiene sentido físico. Cuanto mayor es el valor de n , menor es la frecuencia asociada a las escalas pequeñas, llegando al límite de tener un campo dominado por los remolinos de gran tamaño con alta frecuencia característica, sobre un fondo de pequeños remolinos casi “congelados” (Vassilicos, comunicación personal). Veremos, sin embargo, en el siguiente capítulo que, aunque esto puede ser la causa de ciertas discrepancias en los cálculos de correlaciones temporales Eulerianas, no tiene una influencia importante sobre las Lagrangianas.

El movimiento de las partículas es calculado de la misma forma en los dos modelos. La ecuación (5.4) se integra mediante un Runge-Kutta de segundo orden con un paso de tiempo fijo $\Delta t = 10^{-4}$. Un Runge-Kutta de cuarto orden ha sido también probado, pero

³ Efectivamente, según K41, la velocidad característica de un remolino de escala l es $v \sim l^{1/3}$, y, por lo tanto, su tiempo característico de revolución será $t \sim \frac{l}{v} \sim l^{2/3}$.

el aumento de tiempo de cálculo no compensaba la casi inapreciable diferencia para este paso de tiempo.

El tiempo total de la simulación viene determinado por la disponibilidad de tiempo de cálculo y de almacenamiento. En nuestros experimentos, el número de pasos temporales era normalmente de 10000 (es decir, tiempo final 1), aunque se ha aumentado a 60000 en algunos casos especiales. Como veremos, este número de pasos temporales ha resultado ser pequeño para los campos en que $n > 3$.

El número de partículas varía entre 1000 para la primera parte (comparación con la DNS) y 12000 para la segunda.

5.4. Sumario

Los resultados publicados en base a la KS (Kraichnan, 1970; Fung et al., 1992; Fung and Vassilicos, 1998; Malik and Vassilicos, 1999) muestran que el flujo simulado no es equivalente a un flujo turbulento real debido, principalmente, a que las concentraciones de vorticidad no son las adecuadas. En KS tridimensional los hilos de vorticidad no son suficientemente elongados. En KS bidimensional, como queda patente con el trabajo presentado en esta tesis, no se detectan estructuras coherentes importantes. Esto es debido a que la simulación no representa los procesos dinámicos de la turbulencia.

Sin embargo, los buenos resultados obtenidos de los análisis Lagrangianos indican que puede ser una opción útil para modelar diferentes fenómenos asociados con la dinámica Lagrangiana: dispersión, combustión, sedimentación, etc., si bien el valor del parámetro de estacionariedad λ ha de ser escogido con cuidado, sobre todo en turbulencia bidimensional. Con un valor adecuado de este parámetro las leyes de dispersión Lagrangiana son claramente observables.

Entre las virtudes de este modelo están:

1. se pueden escoger los parámetros del espectro de energía (ley de potencia, escala integral, número de Reynolds, etc.) y, a diferencia de en los modelos estocásticos, en la KS, la escala integral de tiempo es un resultado de la simulación, no un parámetro;
2. el cálculo del campo se hace en puntos concretos del espacio. En particular, para el caso de análisis Lagrangiano, el campo se calcula únicamente sobre los puntos de la trayectoria de las partículas, evitando así la difusión numérica producida por extrapolaciones en la malla;

3. al no haber un malla de discretización, no es necesario modelar el comportamiento del flujo a pequeña escala; esto hace especialmente interesante esta técnica como modelo de submalla para otras simulaciones dinámicas (Fung et al., 1992; Flohr and Vassilicos, 2000).

Se ha terminado el capítulo detallando la implementación de los modelos de KS utilizados en esta tesis.