

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

ESTUDIO NUMÉRICO DE INESTABILIDADES PARAMÉTRICAS Y TÉRMICAS EN FLUIDOS UTILIZANDO EL MÉTODO DE CAMPO DE FASE

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: DOCTOR EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA: JONATHÁN BOANERGE PÉREZ NAVARRETE

TUTOR PRINCIPAL Dr. ANTONMARIA G. E. MINZONI ALESSIO IIMAS-UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR Dr. ARTURO OLVERA CHÁVEZ IIMAS-UNAM Dr. MARCO ANTONIO REYES HUESCA FACULTAD DE INGENIERIA-UNAM

CIUDAD DE MÉXICO, AGOSTO, 2016



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Índice

Agradecimientos - 2 -
- 2 -
- 3 -
Introducción4 -
Objetivo general
Objetivos Específicos
Capítulo 1 Antecedentes
1.1 Método de campo de fases aplicado a fluidos 8 -
1.1.1 Introducción 8 -
1.1.2 Método de campo de fase 8 -
1.2 Inestabilidades hidrodinámicas no lineales 13 -
1.2.1 Teoría lineal 14 -
1.2.2 Teoría no lineal 16 -
Capítulo 2. Ecuaciones gobernantes 17 -
2.1 Introducción 17 -
2.2 Formulación del problema 18 -
Capítulo 3. Método numérico 22 -
Capítulo 4. Experimentos numéricos y validación 25 -
4.1 Separación de fases 2D 25 -
4.1.1 Descomposición espinodal 25 -
4.1.2 2D Crecimiento de dominios 28 -
4.2 Separación de fases y evolución de dominios 3D 29 -
4.3 Inestabilidad de Rayleigh–Taylor 33 -
4.4 Evolución temporal de gotas viscosas sujetas a pulsos largos de aceleración
impulsiva y de gotas sujetas a una aceleración impulsiva modulada
4.4 Caos espacio-temporal (STC) y aparición de estructuras tipo solitón en la
inestabilidad de Faraday 40 -
4.5 Ruptura de jets (chorros) no lineales viscosos sujetos a una aceleración impulsiva
modulada 42 -
4. 6 Inestabilidad Convectiva 48 -
4.6.1 Termales
4.6.2 Plumas térmicas ascendentes (starting thermal plumes), laminares y oscilatorias
52 -
4.6.3 Influencia en el inicio y desarrollo de la inestabilidad convectiva debido a una
fuente de calor móvil puntual, a una fuente lineal con inclinación fija e inclusive para
una fuente de calor lineal rotatoria
4.6.4 Oscilaciones de Lente térmico: estados caóticos y cuasi-periódicos 60 -
4.6.5 Modificaciones al flujo debido a las contribuciones de pequeña escala en la
inestabilidad convectiva: Efecto Pistón 65 -
Capítulo 5. Conclusiones - 69 -
Agradecimientos adicionales 70 -
- 70 -
Anexo 1. Algunos comentarios sobre modelaje 75 -

Agradecimientos

Pero por encima de todas las cosas quiero agradecer a mi Dios, mi Padre, Jesús y el Espíritu Santo, quienes crearon el Cielo y la Tierra. Por haber sido oído por medio del Señor y Dios Todopoderoso Jesucristo que nuevamente oyó mi oración y me permitió terminar mis estudios de doctorado.

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a mi tutor, el Dr. Antonmaria Minzoni Alessio, por su ayuda permanente para mis estudios de posgrado. Ha sido un honor, es más un privilegio, haber realizado mis estudios de doctorado bajo su guía. A través de su dirección permanente he aprendido incontables conocimientos en físico-matemática entre los que destaco, la solución numérica de ecuaciones en derivadas parciales con innumerables aplicaciones en mecánica de fluidos, flujo de calor, transporte de masa y programación.

Estoy en deuda con el Dr. Geffroy, el Dr. Olvera y el Dr. Reyes sin cuya ayuda y sincero interés en mi proyecto de tesis ésta no hubiera sido posible.

Agradezco a mis padres, Roberto y Carmela, quienes me han ayudado siempre en las turbulentas épocas de crisis.

Agradezco a mi hermano David Boanerge de quien su coraje y valor al encarar las difíciles situaciones que Dios ha puesto en su vida han sido un ejemplo para mí.

Acknowledgements

Foremost I thank my God, my Father, Jesus and the Holy Ghost, who created the Earth and Heaven, through Jesus Christ for hearing my prayer once again and let me end up my Ph. D. study.

I would like to state my truthful gratitude to my advisor, Professor Tim Minzoni, for his continuous support of my Ph.D. study. It has been honor and privilege to have done my studies under the direction of Professor Tim Minzoni. Through his guidance, I have grown as a single student who sheared his knowledge in mathematics, fluid flow, and computer science.

I am deeply indebted to the support of Professor Enrique Geoffrey Aguilar and whom I have learned many important issues on fluids.

I would like to express thankfulness to Professor Arturo Olvera Chavez from for being on my dissertation committee.

I would like to express thankfulness to Professor Marco Antonio Reyes Huesca and whom I found always priceless instruction and computing expertise.

I would like to thank all my classmates during my years of study as a graduate student at IIM-UNAM.

The continued love, support and encouragement of my family has motivated me throughout my academic career. I would like to thank to my brother, David and my parents, Roberto and María del Carmen. My dissertation is dedicated to them.

Resumen

Estudio numérico de inestabilidades paramétricas y térmicas en fluidos utilizando el método de campo de fase

Autor: Jonathán Boanerge Pérez Navarrete Supervisor: Antonmaria Minzoni Alessio

Resumen

En esta tesis se presenta el estudio de varias inestabilidades hidrodinámicas asociadas a variaciones de gravedad y a gradientes de temperatura modulados, incluyendo la inestabilidad convectiva asociada a las oscilaciones de lente térmico, para muestras altamente absorbentes, y aún la asociada al efecto termoacústico (efecto pistón) para fluidos sujetos a bajo Número de Mach. Esto se realizó numéricamente ya que al presente la resolución analítica del modelo propuesto es imposible. Los estudios previos sobre flujos convectivos y termocapilares es en el mejor de los casos incompleto, ya que por una parte omiten la inclusión de la tensión superficial -por ser un termino singular asociado a la condición de salto en la interfaz de fluidos multifásicos- o bien porque no capturan ni las aceleraciones impulsivas ni los gradientes térmicos modulados asociados a este tipo de flujos. Para ello se empleo de manera novedosa en el término de la fuerza de flotación, de la ecuación de conservación de momento, dos contribuciones no lineales:

- 1. Un primer término que representa la variación espacial y temporal asociada a la gravedad efectiva, que puede ser de tipo impulsivo.
- 2. El segundo termino acopla las ecuaciones de conservación del momento a las variaciones térmicas de tipo impulsivo estudiadas en este trabajo.

Mientras que para esquemas numéricos convencionales el tratamiento de la interfaz con múltiples reconexiones y rompimientos es todo un reto, para el método de campo de fase seguir la evolución de morfologías arbitrarias y complejas es sencillo. Esto último se realiza siguiendo la marcha temporal del campo de fases. El campo de fases describe numéricamente que fase o fluido, de un conjunto de dos o más, se encuentran en una posición particular en el sistema en un instante dado. El campo de fases se asocia a su vez al parámetro de orden del sistema. El parámetro de orden es una medida del cambio macroscópico de las propiedades del sistema en una transición de fase, por lo que el parámetro de orden refleja los cambios de la estructura microscópica del sistema. Este parámetro de orden describe por consiguiente el curso de una transición de fase en el sistema de fluidos multifásicos estudiado. Y esto porque los cambios en la propiedad de interés del sistema, el parámetro de orden, son una manifestación del exceso de energía libre asociado a la transición de fase. Para este fin se resolvió numéricamente un conjunto de ecuaciones no lineales acopladas advectivas: la ecuación de Cahn-Hilliard, la ecuación de Navier-Stokes y la del calor. Junto a las ecuaciones de las posiciones de la fuente térmica que puede ser advectada por el mismo flujo. Para ello se utilizó una discretización semi-implícita aunado a una estrategia de paso fraccionado en el dominio del tiempo. La discretización espacial fue espectral utilizando la transformada rápida de Fourier. Este modelo permitió simulaciones exitosas incluso en modestas computadoras personales. Estos experimentos numéricos permitieron como un bono adicional clarificar los mecanismos de la inestabilidad responsable del coronamiento y el efecto Pistón.

Los códigos desarrollados en C++ permitieron fueron validados para cada ecuación independientemente. Las variadas y complejas morfologías reportadas se deben a los múltiples efectos considerados: viscosos, termocapilares, gravedad y gradientes térmicos modulados.

Introducción

El campo de estudio de las inestabilidades hidrodinámicas concierne a la determinación de las condiciones precisas bajo las cuales un flujo, inicialmente estacionario, sujeto a una perturbación, modifica sus patrón de flujo [1-29]. La inestabilidad paramétrica es un caso especial de inestabilidad. La excitación paramétrica consiste en la variación explicita dependiente del tiempo de un parámetro de un sistema dinámico [28]. Estas excitaciones paramédicas se distinguen del forzamiento en que las fluctuaciones aparecen como la modulación temporal de un parámetro, como puede ser la gravedad. Partiendo de las ecuaciones de Euler junto a la restricción de incompresibilidad y basados en el trabajo de Lamb, Benjamin y Ursell [28,29] corroboraron que estas ecuaciones se reducen a la

ecuación de Mathieu: $\frac{d^2x}{dt^2} + (\alpha + \beta \cos(t))x = 0$. Con α y β como parámetros ajustables. x

es una posición de interés y t es el tiempo. Y que es una expresión de la ecuación de Hill

[29]: $\frac{d^2x}{dt^2} + (\alpha + V(t))x = 0$, donde V(t) es cualquier función periódica con periodo 2π . La

que describe una posición de equilibrio estable si todas las soluciones permanecen acotadas cuando t $\rightarrow\infty$; mientras que esta es inestable si para estas soluciones x(t) $\rightarrow\infty$ cuando t $\rightarrow\infty$, en cuyo caso tenemos una inestabilidad paramétrica [29]. La que puede presentar una transición, es decir una bifurcación, hacia el caos con el forzamiento apropiado. Comportamiento que es característico de esta inestabilidad [27-29]. Por lo que en esta tesis estudiamos la transición al caos de la inestabilidad paramétrica, en la inestabilidad tipo Faraday. Y tanto para dar cabida a términos no lineales, difusivos y de tensión superficial así como para estudiar esta inestabilidad -y las térmicas asociadas al termino de la fuerza de flotación dependiente del campo de temperaturas- es que se resolvieron numéricamente varias ecuaciones acopladas en derivas parciales. Partiendo de las Ecuaciones de Navier-Stokes y del Calor acopladas a la de Cahn-Hilliard, esta última para definir la interfaz, estudiamos en esta tesis fluidos multifásicos newtonianos. Fluidos para los que consideramos viscosidades y movilidades constantes y semejantes. Para ello se empleó el método de campo de fase para fluidos con diferencia de densidades entre ellos guiados por: Fuerzas gravitacionales constantes, fuerzas gravitacionales variables (modulada e impulsiva) y variaciones térmicas asociadas a fuentes de tipo impulsivo moduladas.

En el capítulo 1 se señalan las ideas más importantes detrás del método de campo de fase que simplifican el tratamiento de la interfaz en fluidos multifásicos y de la tensión superficial, método que puede generalizarse con la ecuación de Navier–Stokes facilitando su aplicación al estudio de las inestabilidades hidrodinámicas. En el capítulo 2 describimos la formulación del modelo. En el capítulo 3 se dan detalles del método numérico empleado utilizando una discretización espectral en el espacio y una discretización semi-implícita con una estrategia de separación temporal para desacoplar en cada paso temporal las ecuaciones no estacionarias advectivas acopladas de Cahn–Hilliard, Navier–Stokes y energía sin disipación. En el capítulo 4 presentamos los resultados de los experimentos numéricos [30-86]. Se simuló la descomposición espinodal tanto para dominios bidimensionales como tridimensionales. La descomposición espinodal involucra el crecimiento de perfiles de concentración localizados debido a fluctuaciones aleatorias alrededor de una región de metaestabilidad. Este cambio es homogéneo en toda la mezcla que se da en el camino que lleva a incremento de zonas de enriquecidas de soluto, produciendo una estructura de dos fases modulada [50,51]. La inestabilidad de Rayleigh–

Taylor también fue estudiada, esta se presenta para cualquier perturbación a lo largo de la interfaz entre un fluido pesado sobre un fluido ligero, generando que ambos fluidos se penetren mutuamente debido a la diferencia de densidades entre ambos al estar sujetos a una aceleración gravitacional constante [42,53,54]. Como un caso especial de esta inestabilidad (la inestabilidad de Rayleigh-Taylor) se estudio también la evolución temporal de gotas viscosas sujetas a pulsos largos de aceleración impulsiva y de gotas sujetas a una aceleración impulsiva modulada [56-58]. Como un caso especial de la inestabilidad paramétrica, explicada varios párrafos arriba, estudiamos numéricamente el caos espacio-temporal (STC) y la aparición de estructuras tipo solitón en la inestabilidad de Faraday. Las ondas de Faraday (o inestabilidad de Faraday) se originan al vibrar periódicamente en dirección vertical a la superficie inicialmente en reposo un contenedor parcialmente lleno de fluido o bien lleno con dos fluidos no miscibles a la frecuencia apropiada. Los patrones de flujo y la deformación característica de la interfaz, así como su frecuencia devienen de un acoplamiento entre las fuerzas de aceleración generadas por una gravedad modulada [59-64]. Estos estudios nos llevaron naturalmente al estudio de la ruptura de jets (chorros) no lineales viscosos sujetos a una aceleración impulsiva modulada [64-66]. Siendo nuestro interés el estudio de la inestabilidad paramétrica y su caso térmico estudiamos la inestabilidad convectiva. La inestabilidad convectiva se origina por las fuerzas de flotación a las que se sujeta un fluido en reposo calentado. Cabe mencionar que para las plumas térmicas formadas en este régimen la difusividad térmica y viscosa estabilizan el fluido. En las que el cambio del patrón de flujo estacionario se caracteriza por su transición a un nuevo flujo por la razón de las fuerzas estabilizantes del flujo a las desestabilizantes. Lo que mide la importancia de los procesos convectivos respecto a la difusividad térmica y difusividad viscosa [67-70]. Varios factores deben darse para que las características propias de las inestabilidades convectivas se presenten. Una diferencia de temperatura continua, fluctuaciones de temperatura y la no separación de la base de la pluma térmica [67], y en el caso inestabilidades luz-fluido un gradiente de densidad gravitacionalmente estable, (esto es una configuración de fluido ligero sobre fluido denso) junto al efecto de Marangoni que dispara la inestabilidad originada por la tensión superficial una vez que la pluma térmica alcanza la interfaz entre los fluidos [1,67-69]. Nuestro propósito principal en la inestabilidad hidrodinámica de origen lumínico, termales y plumas térmicas es controlar estos fenómenos que inician cuando una fuente térmica eleva la temperatura -por ejemplo una fuente de luz láser- formando un punto de calor en el fluido desde el que la pluma absorbe calor y que se eleva al generarse una diferencia de temperatura con el fluido circundante hacia la superficie del fluido. La absorción continua de calor de la fuente térmica en el sistema de fluidos empleado, origina un acoplamiento entre el flujo convectivo y el termocapilar para el caso del fenómeno de lente térmico. La ascensión de termales se caracteriza como un flujo restringido por la relación de una cierta cantidad de flotación fija y una fuente de flotación separada, ya que a deferencia de las plumas térmicas una característica fundamental de los termales es su separación de la capa limite termoquímica [66]. Los termales posen una cabeza que es en forma de hongo y donde en su inicio antes de separarse de la capa de fluido y ascender en el seno del fluido frío es una consecuencia de su propia unión con la capa limite termoquímica por la propia influencia de la fuente térmica que forma una capa térmica a su alrededor y del fluido calentado que siendo menos denso asciende y se separa de ésta [66]. La diferencia entre un jet y una pluma térmica reside en el hecho de que para los primeros hay una fuente impulsiva de momento y para las segundos una fuente térmica impulsiva. Para estas plumas

ascendentes (starting thermal plumes) una capa de fluido advacente a una fuente puntual de flotación es abruptamente calentada incrementando su temperatura en las cercanías de una fuente térmica [70]. La aparición de un lente térmico inicia con el calentamiento local que se induce por un rayo láser en un líquido con elevada absorbancia. Alrededor del eje del rayo láser se genera una distribución de temperaturas radial con la consecuente modificación del índice de refracción del medio que se vuelve función del cambio de temperatura local, creándose así en el fluido un lente para el ravo láser cuvo haz es difractado, modificándose en función del campo de temperatura el índice de refracción y modificando con el lente así formado, a su vez, el patrón de flujo y la posición de la fuente térmica. Como resultado del mencionado calentamiento localizado del fluido este es menos denso en la cercanía del eje del ravo láser y debido a la absorbancia continuada del fluido los fotones absorbidos se convierten en calor y una pluma térmica se eleva hasta alcanzar la interfaz mientras simultáneamente ocurre un proceso convectivo en el fluido. Por el efecto Marangoni las fuerzas capilares debidas a la tensión superficial que impulsan el fluido caliente lejos de la zona en que se encontraba originalmente la cabeza de la pluma térmica. A la vez en la zona de calentamiento del láser el fluido frío sustituye al fluido desplazado por la pluma térmica. Este proceso repite una y otra vez debido al acoplamiento de osciladores térmicos no lineales que interaccionan débilmente [7] deformando la interfaz (o superficie libre), que oscila a merced de la retroalimentación que se da entre el calentamiento y el flujo del fluido dando lugar a la llamada oscilación de lente térmico [9,11-13]. La aparición de un lente térmico inicia con el calentamiento local que se induce por un rayo láser en un líquido con elevada absorbancia. Alrededor del eje del rayo láser se genera una distribución de temperaturas radial con la consecuente modificación del índice de refracción del medio que se vuelve función del cambio de temperatura local, creándose así en el fluido un lente para el rayo láser cuyo haz es difractado, modificándose en función del campo de temperatura el índice de refracción y modificando con el lente así formado, a su vez, el patrón de flujo y la posición de la fuente térmica. Como resultado del mencionado calentamiento localizado del fluido este es menos denso en la cercanía del eje del ravo láser y debido a la absorbancia continuada del fluido los fotones absorbidos se convierten en calor y una pluma térmica se eleva hasta alcanzar la interfaz mientras simultáneamente ocurre un proceso convectivo en el fluido. Por el efecto Marangoni las fuerzas capilares debidas a la tensión superficial que impulsan el fluido caliente lejos de la zona en que se encontraba originalmente la cabeza de la pluma térmica. A la vez en la zona de calentamiento del láser el fluido frío sustituye al fluido desplazado por la pluma térmica. Este proceso repite una y otra vez debido al acoplamiento de osciladores térmicos no lineales que interaccionan débilmente [7] deformando la interfaz (o superficie libre), que oscila a merced de la retroalimentación que se da entre el calentamiento y el flujo del fluido dando lugar a la llamada oscilación de lente térmico [9,11-13]. Para estudiar de manera más precisa la inestabilidad convectiva usamos una fuente fija lineal para la que las condiciones en la pared fueron de Neumann para crear una zona de ajuste rápido en las cercanías de la pared creando una inhomogeneidad en el flujo que sigue la evolución del campo de temperatura [73-80]. Y que para el efecto pistón o termo acústico a bajos números de Mach puede tratarse el fluido de interés como débilmente compresible, y que he resulta en la novedosa aparición de este fenómeno para fluidos incompresibles, pero cuyo origen no resulta del todo claro [79,80] y que en esta tesis logramos esclarecer como efectos de pequeña escala. Finalmente, el capítulo 5 se presentan las conclusiones.

Objetivo general

Estudiar numéricamente inestabilidades hidrodinámicas de amplitud finita (no infinitesimales y que requieren por tanto el empleo de las ecuaciones no lineales completas) para fluidos multifásicos newtonianos de viscosidad y movilidad constantes y semejantes mediante el método de campo de fase con diferencia de densidades entre ellos guiados por:

- Fuerzas gravitacionales constantes
- Fuerzas gravitacionales variables (modulada e impulsiva)
- Variaciones térmicas asociadas a fuentes de tipo impulsivo

Objetivos Específicos

- Utilización del método de campo de fase para seguir la evolución de la interfaz entre fluidos no miscibles debido a procesos de coalescencia y ruptura de la interfaz para las inestabilidades hidrodinámicas estudiadas resolviendo el sistema de ecuaciones de Cahn–Hilliard, Navier–Stokes y energía sin disipación empleando la aproximación de Boussinesq para el término de flotación en la ecuación de Navier-Stokes
- Utilizar un método numérico semi-implícito en el tiempo para desacoplar el sistema de ecuaciones Cahn–Hilliard, Navier–Stokes y energía sin disipación
- Emplear una discretización espacial espectral espacial para resolver las ecuaciones mediante la transformada rápida de Fourier
- Desarrollar códigos en C++ que permitan el uso de la librería fftw3.3.3 (software libre) para la transformada rápida de Fourier así como uso la clase *valarray* de la Plantilla de Librerías Estándar de C++ (*STL*) paralelizando el código.

Capítulo 1 Antecedentes

1.1 Método de campo de fases aplicado a fluidos

1.1.1 Introducción

La interfaz que separa dos fluidos ha recibido dos tratamientos a saber [29]:

a) Interfaz definida, que como lo indica su nombre considera que las propiedades físicas en la interfaz son discontinuas, la interfaz es de espesor cero y donde la condición de salto en las propiedades se da a través de las condiciones de frontera.

b) Interfaz difusa, es un modelo en la que la misma tiene un espesor distinto de cero donde las propiedades varían rápida pero suavemente en ella.

La idea no es nueva ya Rayleigh (1892) y van der Waals (1893) propusieron que la interfaz entre dos fluidos era difusa, pero la idea no es ciertamente nueva pues, ya en el año 50 antes de Jesús Cristo, Lucretius señaló que "ningún cuerpo está completamente lleno o vacío" [30]. A principios del siglo pasado Van der Waals modeló un sistema bifásico gas-líquido por medio de una función de densidad que variaba continuamente a lo largo de la interfaz gas-líquido demostrando que cerca del punto crítico su espesor es infinito [31]. Alrededor de 1950 retomando esta idea Cahn y Hilliard modelaron sistemas heterogéneos con interfaz difusa [32]. El siguiente avance teórico en el acercamiento a la interfaz difusa se dio en la teoría estocástica de las transiciones de fase cerca del punto crítico al emplear casi las mismas ecuaciones (Modelo H) [33]. La necesidad del modelaje de fluidos con interfaz o superficie libre ha hecho que estos métodos ganen gran aceptación ya que pueden ser aplicados a fluidos cerca del punto crítico y el movimiento de la línea de contacto entre sólido/liquido/gas. Pero su mayor posibilidad de aplicación es para el flujo de fluidos en los que se presentan cambios topológicos extremos: interfaces complejas y que se autointersectan, rupturas y reconexiones múltiples de la interfaz, procesos todos que son extremadamente difíciles de seguir e implementar numéricamente con otros métodos [29,30].

1.1.2 Método de campo de fase

En la literatura no se da ninguna distinción entre el modelo de interfaz difusa y el de método de campo de fase. El nombre de campo de fase debe su nombre a procesos de solidificación sólido líquido en los que la fase termodinámica de interés se encuentra en cada punto del espacio [30].

Supongamos una región del espacio Ω está completamente llena por un fluido binario cuya superficie es $\partial\Omega$. Supongamos adicionalmente que al fluido le es aplicable la teoría de transiciones de fase de Landau [34]. Una hipótesis en principio muy fuerte ya que esta supone la existencia de correlaciones de largo alcance en a nivel microscópico entre las partículas del fluido y que en los estados de transición puede seguirse por medio de la correspondiente modificación de algunas las propiedades macroscópicas del fluido, como puede ser la concentración relativa de los componentes de un fluido binario. Es pues la composición local tomada como el parámetro de orden (ϕ). Por lo mismo cuando las fluctuaciones locales en las propiedades del sistema exceden esta correlación de largo alcance entre las distintas regiones en el fluido nos hallamos en el intervalo de Ginzburg, una región donde la teoría de Landau cesa de ser aplicable. Así el desarrollo local de inhomogeneidades, producto de condiciones de no-equilibrio, pueden crecer y estabilizarse de manera dominante en ciertas regiones (subdominios Ω_n , donde $\Omega_n \subset \Omega$) haciendo que el parámetro de orden ya no sea representativo del estado del sistema. Mientras esto no suceda resulta válido pensar que el parámetro de orden, ϕ , señala la concentración relativa de los componentes de un sistema de fluidos binarios aun tiempo dado, t. Este parámetro de orden toma en el bulto para cada fase -en el equilibrio- los valores de $\phi(\mathbf{\bar{x}}, t) = \phi_+$ [34].

La Ec. de Cahn-Hilliard se deriva de un balance de masa (Ec. 1):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \bullet \mathbf{h} \tag{1}$$

Donde **h** es el flujo masa relacionado al potencial químico (μ) por medio de la ecuación constitutiva (Ec. 2):

$$\mathbf{h} = -M\nabla\mu \tag{2}$$

Donde M es la movilidad de las distintas fases. El concepto de un continuo no conservativo del campo de fases para distinguir entre dos fases distintas fue introducido por Langer [35]. El campo de fases es igual a -1 en una de las fases y 1 en la otra. Para el caso de un líquidos binarios los valores asignados al campo de fases es (Ecuación 3):

$$\phi$$
=-1 en el líquido 1, más denso
 ϕ = 1 en el líquido 2, menos denso (3)

Por lo que ϕ representa la fracción presente de cada una de las fases en Ω . Donde ϕ varía continua y suavemente entre -1 y 1 en la interfaz de espesor δ , por lo que la curva de nivel $\phi=0$ define la posición de la interfaz.

La aparición de la ecuación de ecuaciones Cahn–Hilliard advectiva es una consecuencia de la ecuación de balance para el parámetro de orden (Ecuación 4) [34]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \bullet \left(\mathbf{\tilde{u}} \, \phi \right) + \nabla \bullet \mathbf{J} = 0 \tag{4}$$

Donde t es el tiempo, **u** es la velocidad local de un elemento fluido, **J** es el flujo disipativo de ϕ y $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ es la divergencia de **J**. De esta manera **J** puede definirse como (Ecuación 5):

$$\mathbf{J} = -M\nabla\mu\tag{5}$$

Donde M es la movilidad. La movilidad es llamada a veces parámetro de relajación ya que su valor determina unívocamente el relajamiento de la interfaz y M^{-1} es el tiempo de relajación. A efectos prácticos la movilidad es una constante fenomenológica de origen microscópico cuyo valor puede ser inferido de los procesos de ínter-difusión. Por otro lado μ es el potencial químico asociado al campo de fases, el cual es una medida de la capacidad de hacer trabajo del sistema por unidad de masa cuando el componente considerado se agrega al sistema, y es el equivalente de una presión química la cual puede derivarse directamente del funcional de la energía [36].

Sobre este particular la energía de un sistema no uniforme depende tanto de la composición local como la composición de sus alrededores, por lo cual el funcional de la energía (*F*) es una función de la composición local y de las derivadas de la composición local, es decir es una función del parámetro de orden y de sus derivadas $F = F(\phi, \nabla \phi, \nabla^2 \phi, ...)$, puede demostrarse sin embargo que su expresión se reduce a [29-35] (Ecuación 6) [34]:

$$F[\phi] = \int_{\Omega} \left\{ f(\phi) + \frac{1}{2} \kappa_{\phi} |\nabla \phi(\mathbf{x})|^2 \right\} d\mathbf{x}$$
(6)

El cual es de la forma de una energía libre de Ginzburg-Landau adoptando una descripción mesoscópica (de de grano grueso). Donde $f(\phi)$ es el llamado potencial de doble pozo (Figura 1 a)), κ_{ϕ} es el parámetro del gradiente de energía. El potencial de doble en el equilibrio es simétrico, ya que de otra forma una fase sería meatestable [32]. El primer término en la Ecuación 6 representa la contribución a la energía libre del material másico (en el bulto) y el segundo representa la contribución a la energía libre en exceso interfacial ligada a las variaciones del parámetro de orden.

La región espinodal está identificada en la Figura 1 b) por el intervalo (X_A^S, X_B^S) , donde $X_A^S y X_B^S$ son los llamados puntos espinodos (*spinodes*) que definen una región donde la energía libre donde del sistema es inestable a cualquier fluctuación en composición ocasionando una reducción global en la energía del sistema, la ubicación de

los puntos de inflexión en la curva de la energía libre de Gibbs (G) (Figura 1 a)), $\frac{\partial^2 G}{\partial \mathbf{Y}^2} = 0$.

Los espinodos definen la región de existencia de la curva espinodal en el diagrama de fases. Para éste caso el parámetro de orden es $X(\mathbf{x},t)$ y es la concentración de una de las especies en el punto x en el tiempo t. El intervalo (X_A, X_A^S) U (X_B^S, X_B) define el intervalo de metaestabilidad. Como se observa del diagrama de fases (Figura 1 b)), las fases estables son A y B, en la región metaestable la separación de fases procede vía nucleación y crecimiento si la perturbación finita aplicada incrementa lo suficiente la energía libre venciendo la barrera energética que impide su formación. Dentro de la región espinodal (S) a una concentración X_M^S cualquier perturbación en la concentración crece lo que puede llevar a un proceso de separación espontánea con la consecuente formación y crecimiento de regiones con distinta composición, proceso que es conocido descomposición espinodal y que da lugar a la región espinodal que resulta en la formación de dos fases que produce una microestructura muy fina de escala nanométrica formada por ondas composicionales de pequeña amplitud y de muy largo alcance espacialmente. Una particularidad de la descomposición espinodal, y que es representativa del proceso que modelaremos, es que a diferencia de los procesos convencionales de difusión en la descomposición espinodal se da la llamada difusión cuesta arriba (uphill diffusion) para la que los átomos de cada una de las fases migran de las regiones de baja concentración a las de mas alta concentración, exactamente lo contrario a la difusión convencional. En el equilibrio el potencial de doble pozo simétrico se da por la siguiente expresión que es un polinomio de Landau (Ecuación 7) [35]:

$$f(\phi) = \frac{\alpha}{4} \left(\phi - \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}\right)^2 \left(\phi + \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}\right)^2 \tag{7}$$

Donde α y β son dos constantes positivas, las cuales controlan la relación de aspecto entre las fases existentes en el sistema y la altura del doble pozo ($\beta^2/4\alpha$). Donde la altura del doble pozo define la barrera energética para la transición de fases que se asocian al parámetro de orden, ϕ . En el equilibrio el potencial químico se define como (Ecuación 8):

$$\mu = \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{x})} = f'(\phi(\mathbf{x})) - K \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) = \alpha \phi^3 - \beta \phi - \kappa_{\phi} \nabla^2 \phi.$$
(8)

Para el cual el cual el perfil en el equilibrio ($\mu=0$) define dos soluciones uniformes en el bulto $\phi_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}$ y en la interfaz una dada por $\phi_0 = \phi_+ \tanh\left(\frac{z}{\sqrt{2\xi}}\right)$ que satisface las condiciones de frontera $\phi_0(z \to \pm \infty) = \pm \phi$ (Figura 2), la cual determina el espesor de la interfaz que es proporcional a $\xi = \sqrt{\frac{\kappa_{\phi}}{\beta}}$ cuyo valor determina el espesor de la interfaz $\delta = 2\sqrt{2} \tanh^{-1}(0.9) \xi = 4.164\xi$. Por lo anterior podemos expresar para un sistema de fluidos binarios con movilidad constante sujetos a la restricción de incompresibilidad para el campo de fase (Ecs. 4, 5 y 8) obtenemos la Ecuación 9:

a)





b)

Figura 1. a) Energía libre del sistema debajo de la temperatura crítica. El intervalo $(X_A^{\ S} - X_B^{\ S})$ define el intervalo espinodal y el intervalo $(X_A^{\ S} - X_A^{\ S})$ U $(X_B^{\ S} - X_B)$ define el intervalo de metaestabilidad. b) Diagrama de fases de un sistema binario.



Figura 2. Perfil de tangente hiperbólica presente en la solución no uniforme del potencial químico al equilibrio (ϕ_0).

$$\frac{\mathbf{D}\phi}{\mathbf{D}t} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla\phi = \nabla \bullet (M\nabla\mu) = M\nabla^2\mu$$
(9)

Donde $\frac{\mathbf{D}\phi}{\mathbf{D}t}$ representa la derivada material o convectiva (también llamada substancial o de Stokes) y que semeja una ecuación de reacción-difusión [36,37]. Esta ecuación expresa simplemente que los flujos de difusión interfacial como proporcional al flujo local del gradiente de potencial químico. Esta ecuación se conoce como la ecuación advectiva de Cahn–Hilliard (Ecuación 9). Las siguientes son las condiciones de frontera en la pared para flujos confinados en alguna región del dominio con el vector **n** perpendicular a la pared (Ecuación 10):

$$\hat{\mathbf{n}} \bullet \nabla \phi = 0 \qquad \mathbf{y} \qquad \hat{\mathbf{n}} \bullet M \nabla \phi = 0 \tag{10}$$

En cuanto a las ecuaciones de flujo hidrodinámico pueden derivarse también de una descripción de escala mesoscópica o de grano grueso (*coarsedgrained*) [38]. La misma se basa en la idea de que la descomposición espinodal es una reacción de agrupamiento líquida supersaturada homogénea se separa espontáneamente en dos fases para lo cual se utiliza el tensor de esfuerzos una parte adicional llamada reactiva lo que resulta en la ecuación de Navier–Stokes *modificada* y para fluidos con viscosidad constante (Ecuación 11) [34,38]:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mu \nabla \phi$$
(11)

Donde ρ es la densidad de referencia del fluido, p es la presión, η es la viscosidad dinámica, ∇^2 es un operador elíptico, el llamado Laplaciano, y $\mu \nabla \phi$ es una fuerza superficial dependiente del campo de fase y que representa la contribución de la tensión superficial (σ) a la ecuación de conservación de momento (Ecuación 12):

$$\sigma = \kappa_{\phi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\phi_0}{dz}\right)^2 dz = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\kappa_{\phi}^{1/2} \beta^{3/2}}{\alpha}$$
(12)

1.2 Inestabilidades hidrodinámicas no lineales

El conjunto de las Ecuaciones 9 y 11 se conoce como el modelo H [13]. El modelo H se ha usado modela el flujo de fluidos para los cuales es relevante la existencia de la interfaz aplicándose exitosamente a dos inestabilidad hidrodinámicas: Kelvin–Helmholtz [39] y Rayleigh–Taylor [40-42]. De ambos casos el primero es gravitacionalmente estable y sólo para el segundo se presenta una inestabilidad derivada de una diferencia de densidades entre fluidos estratificados el cual sujeto a una campo gravitacional constante en una configuración en la que el fluido denso sobrepuesto sobre el ligero es inestable a perturbaciones de cualquier número de onda siempre que las velocidades entre los fluidos

 $(U_1 y U_2)$ sean distintas, las densidades son constantes para cada fluido y cambian en la interfaz rápidamente con un perfil similar al de la tangente hiperbólica (Figura 4).

Por lo que los tres trabajo reportados por Kim y colaboradores son los únicos aplicados al método de campo de fases con diferencia de densidades a una inestabilidad hidrodinámica, la inestabilidad de Rayleigh–Taylor, la cual derivada de una diferencia de densidades [40-42], destacan en su trabajo por ejemplo el empleo de: una densidad variable y la aproximación de Boussinesq.

Esto nos lleva a tener que revisar algunos aspectos relevantes respecto de las inestabilidades hidrodinámicas antes de proseguir con nuestro estudio.

El campo de estudio de las inestabilidades hidrodinámicas concierne a la determinación de las condiciones precisas bajo las que una familia de unos pocos parámetros de control (regularmente representado por el número de Reynolds¹, *Re* o Rayleigh², *Ra*) de una solución estacionaria de la ecuación de Navier–Stokes es estable. Para ello hay dos acercamientos:

- 1. La teoría lineal parte de una ecuación linealizada omitiendo cualquier efecto no lineal para perturbaciones infinitesimales y;
- 2. La teoría no lineal, conocido como el *método de la energía*. La teoría no lineal no busca la solución completa de las ecuaciones no lineales por la dificultad inherente a la obtención de las mismas. En su lugar resuelve un problema de valores propios asociado al operador auto-adjunto obtenido de la ecuación de la variación de la energía cinética de las perturbaciones, de allí su nombre de *método de la energía*.

1.2.1 Teoría lineal

Como mencionamos antes dos grandes acercamientos se han realizado al estudio de las inestabilidades hidrodinámicas: la teoría lineal y no lineal.

La teoría lineal considera que la perturbación al flujo es infinitesimal la cual predice un crecimiento exponencial cuando el parámetro relevante al caso tratado excede un número crítico.

Este número crítico representa la razón de los procesos desestabilizadores del flujo (las fuerzas de flotación o un gradiente de densidad gravitacionalmente adverso entre dos fluidos) a las estabilizadores (como pueden ser las fuerzas viscosas o bien la difusión térmica).

Regularmente para su análisis se parte de un *estado base* tal que el flujo sea estacionario, y aunque no se descarta la posibilidad de que el flujo sea no estacionario este tiene peculiaridades que analíticamente dificultan su tratamiento [43].

El estado de flujo que se investiga usualmente llamado de base, inicial o de fondo. Para el estado base U=U(x) y P=P(x) son soluciones de la ecuación de Navier–Stokes estacionaria en una región Ω sujeta a ciertas condiciones de frontera en $\partial \Omega$ (Ecs. 13 y 14):

$$\mathbf{U} \bullet \nabla \mathbf{U} + \frac{1}{\rho} \nabla P = \nu \Delta \mathbf{U} \tag{13}$$

$$\nabla \bullet \mathbf{U} = \mathbf{0} \tag{14}$$

¹ El cual representa la proporción que guardan las fuerzas inerciales a las fuerzas viscosas en el sistema.

² El cual representa la proporción que el tiempo convectivo respecto de los tiempos difusivos durante la flotación de una parcele de fluido que ha cambiado su densidad como resultado de un incremento de temperatura, δT , y cuya mas asciende por flotación en el sistema.

Donde v es la viscosidad cinemática. Como segundo paso se supone la existencia de soluciones arbitrarias para considerar las desviaciones del estado estacionario base de acuerdo a las Ecs. 15 y 16:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = \mathbf{U}(\mathbf{x}) + \delta \mathbf{u}(\mathbf{x},t)$$
(15)

$$p(\mathbf{x},t) = P(\mathbf{x}) + \delta p(\mathbf{x},t)$$
(16)

Como la *estabilidad lineal* de la solución estacionaria se determina por la evolución temporal de las perturbaciones infinitesimales los términos cuadráticos y no lineales se eliminan al sustituir las Ecs. 15 y 16 en la ecuación de Navier–Stokes (Ec. 11 sin el término de la fuerza superficial dependiente del campo de fase $\mu \nabla \phi$) resultando en (Ecs. 17 y 18):

$$\frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial t} + \delta \mathbf{u} \bullet \nabla \mathbf{U} + \mathbf{U} \bullet \nabla \delta \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla \delta p = \nu \Delta \delta \mathbf{u}$$
(17)

$$\nabla \bullet \, \delta \mathbf{u} = 0 \tag{18}$$

Para obtener un dependencia lineal en la solución de esta ecuación podemos suponer una dependencia temporal del tipo del tipo $e^{-\lambda t}$ en las soluciones de esta ecuación y sobreimponerla para hallar una solución de la forma $e^{-\lambda t} \delta \mathbf{u}$ lo que transforma nuestro problema en uno de valores característicos (Ecs. 19 y 20):

$$\lambda \delta \mathbf{u} = -\nu \Delta \delta \mathbf{u} + \delta \mathbf{u} \bullet \nabla \mathbf{U} + \mathbf{U} \bullet \nabla \delta \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla \delta p \tag{19}$$

$$\nabla \bullet \delta \mathbf{u} = 0 \tag{20}$$

1.2.1.1 Método de modos normales

El problema de hallar soluciones a las Ecs. 17 y 18 se simplifica a un problema de valores propios al añadir una dependencia exponencial a la solución en el tiempo, y al estado base se añaden perturbaciones de la forma (Ec. 21):

$$u(\mathbf{x},t) = \hat{\mathbf{u}}(z) \ e^{i(kx+ly)-\lambda t}$$
(21)

Donde $\hat{\mathbf{u}}$ representa una amplitud compleja de la cual se toma la parte real con la idea de simplificar el tratamiento de las ecuaciones dada la naturaleza periódica de las soluciones que se buscan. A esto se añade la simplicidad que acompaña diferenciar funciones exponenciales, toda vez que suponemos una dependencia en la dirección Z del campo de velocidades del estado base. k y l son reales, toda vez que se ha supuesto periodicidad en las direcciones X y Y, en tanto que λ se supone complejo, $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda = \lambda_r + i \lambda_i$. Donde i es la unidad imaginaria: $(-1)^{1/2} = i$. De manera que independientemente de la intrínseca dificultad de resolver la ecuación que se genere para cada caso al sustituir la Ec. 13 en la Ecuación de Navier–Stokes con las condiciones de frontera apropiadas en , el valor de $\mathbf{Re}(\lambda)$ define intrínsecamente la estabilidad de la solución al examinar los distintos modos de Fourier que la misma contiene, ya que si λ >0 la solución es estable, si λ <0 la solución es inestable y si

 λ =0 el sistema es neutralmente estable. El estado marginal se define como el flujo que existe entre el estado inestable y el estable el cual a su vez si **Im**(λ)=0 dando lugar patrón estacionario de flujo o bien si **Im**(λ)≠0 da lugar a la sobre-estabilidad consistente en patrón de flujo con amplitud creciente oscilatoria.

1.2.2 Teoría no lineal

Parte del supuesto que las perturbaciones eventualmente se desvanecerán si la variación temporal de la energía cinética de las perturbaciones disminuye (Ec. 22) [44]:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\left\|\delta\mathbf{u}\right\|_{2}^{2}\right) = -\nu\left\|\nabla\delta\mathbf{u}\right\|_{2}^{2} - \int_{\Omega}\delta\mathbf{u} \bullet (\nabla\mathbf{U}) \bullet \delta\mathbf{u} \ d^{d}x \le -c\left\|\delta\mathbf{u}\right\|_{2}^{2}$$
(22)

Donde el superíndice d se refiere a la dimensionalidad de el dominio Ω .

de las funciones cuadrado integrables en el espacio de Hilbert³ L²(Ω). Supongamos que c $\in \mathbb{R}$, c>0 y que c \exists . De la Ec. 22 se deriva que la viscosidad juega el papel de inhibir el crecimiento de las perturbaciones, es por ello que a partir del valor en que se inicia la bifurcación de la soluciones llevando a la aparición de la inestabilidad hidrodinámica se le llama viscosidad crítica, v_c [44,45].

³ Un espacio de Hilbert es un espacio vectorial real *X* que posee un producto interno, $X \ge X \to \mathbb{R}$, denotado por (\mathbf{u}, \mathbf{v}) para cualesquiera $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in X$, para el que todas las secuencias de Cauchy son convergentes y para el cual la norma se puede definir como $\|\mathbf{u}\| = (\mathbf{u}, \mathbf{u})^{1/2}$.

Capítulo 2. Ecuaciones gobernantes

2.1 Introducción

En las oscilaciones de lente térmico un fuente de luz láser genera una serie de complejos patrones espacio-temporales de la superficie del fluido calentado localmente que son periódicos, casi-periódicos y aún caóticos⁴ propios de un oscilador no lineal que cambia tanto su amplitud como su fase en el dominio del tiempo. Para el cual se da un proceso de auto-sincronización entre osciladores térmicos que interactúan débilmente y que se forman por el calentamiento y enfriamiento de distintas regiones del fluido respectivamente a través de la interacción de flujos convectivos y termocapilares. Esta inestabilidad luz-fluido a causado una intenso interés en estudios científicos recientes [1]. El mecanismo de transporte convectivo es un área de considerable interés para el cual el punto de inicio teórico es usualmente un conjunto de ecuaciones acopladas no lineales en derivadas parciales. La inestabilidad convectiva asociada a las oscilaciones de lente térmico ocurre para fluidos binarios con calentamiento láser (Fig. 1).

Generalmente la inestabilidad hidrodinámica inicia cuando la excitación se eleva sobre cierto valor de manera que prevalece sobre cualquier efecto disipativo (como pueden ser las difusividades viscosas y térmicas). El número de Rayleigh crítico dispara el inicio de la inestabilidad con una perturbación finita que produce la bifurcación de la solución hacia un atractor extraño asociado al caos determinístico manifestándose en un régimen de oscilaciones totalmente aperiódico. Este sistema dinámico disipativo es capaz de seguir una ruta hacia el caos y la turbulencia al sufrir sucesivas bifurcaciones dado que sub-volúmenes arbitrarios en el espacio fase se contraen a cero a tiempos extendidos [44].

Para sistemas hidrodinámicos el estado caótico esta asociado al incremento en el parámetro de control (usualmente el número de Reynolds o Rayleigh, toda vez que éstos representan la razón que existe entre la excitación y disipación en el sistema), produciendo un comportamiento aperiódico que se presenta durante un tiempo prolongado incluso bajo condiciones externas constantes debido a un decremento en la tasa de disipación presente.

Éste es un comportamiento largamente observado para varias inestabilidades hidrodinámicas puesto que la inestabilidad depende de la escala de separación entre la excitación y la disipación [43]. Para obtener un mayor entendimiento de las oscilaciones de lente térmico Gouesbet ha propuesto un modelo simple para estudiarlo numéricamente dentro del marco teórico de sistemas dinámicos no lineales altamente disipativos [12]. Sin embargo este modelo puede agruparse al lado del propuesto por Chikishev como un modelo fenomenológico no lineal con varios parámetros ajustables sin verdadera justificación física [16].

Otros estudios que se enmarcan dentro de este marco teórico son meramente descriptivos dada la dificultades inherente al desarrollo del fenómeno de lente térmico en las inestabilidades luz fluido [3,9]. Como un caso de interés se encuentra el modelo propuesto por Rybak y colaboradores que fuera resulto numéricamente con una ecuación unidimensional *modificada* de la energía advectiva sin disipación pero sin una ecuación para la conservación del momento [17]. En este sentido el modelo unidimensional propuesto y resuelto numéricamente por Thorne y colaboradores acopla una ecuación de la

⁴ Y siendo este último régimen de flujo el que caracteriza las oscilaciones de lente térmico como radicalmente distintas de la inestabilidad oscilatoria asociada a los experimentos de alambre caliente (Hot Wire Experiments).

energía sin disipación a la evolución temporal del índice de refracción [18], aunque no incluye el carácter convectivo reportado como esencial en la aparición y desarrollo de las oscilaciones de lente térmico [1,3,9]. Para resolver este problema Taranenko utiliza una ecuación de conservación del momento simplificada. Pero el termino en esta ecuación unidimensional que contabiliza por los efectos de Marangoni es de hecho de la forma propia de una fuerza de flotación siendo que por lo mismo omite los efectos termocapilares y la descripción de la interfaz y el carácter singular de la tensión superficial [20]. Para el complejo sistema luz-fluido la mejor manera es resolver numéricamente el conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas en derivadas parciales toda vez que no existe un método general de solución para éstas. Para este fin el método de campo de fase nos provee de una herramienta poderosísima para simular flujos convectivos siguiendo de una manera simplificada la posición de la interfaz al fijar la posición de la interfaz por el valor de $\phi=0$, en el dominio de interés (Figura 3).



Figura 3. Geometría del canal investigado.

2.2 Formulación del problema

Las inestabilidades convectivas estudiadas tienen lugar cuando un fuente térmica ocasiona una perturbación en la interfaz fluido-fluido por una pluma térmica ascendente, los gradientes de tensión superficial en la interfaz desplazan de la zona de calentamiento el fluido calentado. Este flujo termocapilar se acopla al flujo convectivo originado por el transporte convectivo de calor alrededor del eje de la fuente térmica. A su vez ocurre una distribución de temperaturas que alcanza su máximo en el centro donde la fuente calienta el fluido y que es responsable de la elevación de una masa de fluido caliente que se conoce como pluma térmica [3,9]. La retroalimentación resultante entre estos dos flujos, uno termocapilar y el otro convectivo, crea una serie de regiones con distinta temperatura que tornan la interfaz en un oscilador no lineal que modifica tanto su fase como la amplitud de sus oscilaciones [1].

Esta compleja interacción arriba descrita ocasiona que el fluido sin calentar reemplace el fluido caliente que ha formado la pluma térmica, moviéndose el fluido frío hacia la región de calentamiento de la fuente de luz láser, con lo que el ciclo termina, pero este fluido frío se calienta nuevamente iniciando el ciclo nuevamente mediante la absorción de energía y su transformación en calor para el flujos convectivos. Y cuya repentina irrupción hacia la interfaz del fluido origina una respuesta termocapilar en la interfaz.

Para modelar la fuente térmica (Q) en la ecuación advectiva de la energía. Para las oscilaciones de lente térmico se considera que para muestra altamente absorbentes toda la energía de la fuente de luz láser se ha transformado en calor [18].

Para el modelaje hemos partido de las ecuaciones dimensionales de conservación del momento, energía térmica y continuidad para un fluido incompresible y newtoniano, para el cual la disipación viscosa se ha considerado como una contribución menor (Ecs. 23-25):

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \mathbf{u} \end{pmatrix} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{g}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \rho \end{pmatrix} + \rho \nabla \bullet \mathbf{u} = 0$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \bullet \nabla T \right) = \nabla \bullet (\kappa \nabla T) + Q$$
(25)

La aproximación de Boussinesq se utiliza para modelar pequeños cambios de densidad con la temperatura [41]. La aproximación de Boussinesq es una estimación en el mejor de los casos gruesa para la solución de las Ecs. 23-25. Sin embargo la aproximación de Boussinesq preserva el acoplamiento esencial entre los campos de velocidades y el de temperaturas, y que supone que las propiedades del fluido se evalúan a una temperatura de referencia T_0 (Ec. 26).

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \mathbf{u}\right) = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{u} + \frac{(\rho - \rho_0)}{\rho_0} \mathbf{g}$$
(26)

donde v es la viscosidad cinemática. Si la aproximación de Boussinesq se mantiene: $\rho_i = \rho_{0_i} + \rho_{0_i} \psi_i \delta T$, donde el subíndice "i" designa al fluido en consideración (i=1,2) y $\rho_0 = \frac{(\rho_{0_1} + \rho_{0_2})}{2}$. Así como δT es la diferencia de temperatura $\delta T=T-T_0$ y si ψ_i es el coeficiente de expansión térmica de cada fluido. Sustituyendo la aproximación de Boussinesq en el último término de la Ec. 26 obtenemos la Ec. 27:

$$\frac{\rho(\phi) - \rho_0}{\rho_0} = \frac{\rho_1\left(\frac{1 - \phi}{2}\right) + \rho_2\left(\frac{1 + \phi}{2}\right) - \rho_0}{\rho_0} = \frac{\phi\left(\frac{\rho_2 - \rho_1}{2}\right) + \left(\frac{\rho_2 + \rho_1}{2}\right) - \rho_0}{\rho_0} = -\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_0}\phi - (\psi_1 - \psi_2)\delta T\phi - (\psi_2 + \psi_1)\delta T$$
(27)

donde $\rho(\phi)$ es la densidad variable, $\rho(\phi) = \frac{(1+\phi)}{2}\rho_1 + \frac{(1-\phi)}{2}\rho_2$, ρ_0 es la densidad promedio $\rho_0 = \frac{(\rho_1 + \rho_2)}{2}$. Definiendo nuevos coeficientes de expansión térmica para la mezcla binaria con superilidad constante el juego completo de ecuaciones no lineales que modela las

movilidad constante el juego completo de ecuaciones no lineales que modela las oscilaciones de lente térmico es (Ecs. 28-33):

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + v\Delta \mathbf{u} + \frac{1}{\rho_0} \mu \nabla \phi - \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_0} \phi \, \mathbf{g} - \psi' \delta T \phi \, \mathbf{g} - \psi'' \delta T \, \mathbf{g} \quad (28)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (29)$$

$$\frac{DT}{Dt} = \kappa \Delta T + Q(\mathbf{x}, x_c, y_c, t) \quad (30)$$

$$\frac{D\phi}{Dt} = M \Delta \mu \quad (31)$$

$$\frac{dy_c}{dc} = b \, v(x_c, y_c, \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, x_c, y_c, T, t), T(\mathbf{x}, \mathbf{u}, x_c, y_c, \phi, t), t) \quad (32)$$

$$\frac{dx_c}{dc} = a \, u(x_c, y_c, \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, x_c, y_c, T, t), T(\mathbf{x}, \mathbf{u}, x_c, y_c, \phi, t), t) \quad (33)$$

En las ecuaciones previas el campo de temperaturas es T, p es la presión, ρ es la densidad, η es la viscosidad dinámica, t es el tiempo, **u** es el campo de velocidades, κ es la difusividad térmica, **g** es la fuerza gravitacional, $\mathbf{g}=(0,-g)$: g=10, C_p es el calor específico a presión constante, \mathbf{x}_C y y_C son las posiciones del láser horizontal y vertical respectivamente, \mathbf{k}_x y \mathbf{k}_y son valores constantes que miden la evolución la posición inicial de la fuente de luz láser $\mathbf{x}_0=(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0)$ y Q modela la fuente de luz láser.

Por otra parte, κ es la difusividad térmica, D/Dt representa la derivada material $\left(\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right), \psi' y \psi''$ expresan una combinación lineal de los coeficientes térmicos

usados antes: $\psi'=(\psi_1-\psi_2)/2$ y $\psi''=(\psi_1+\psi_2)/2$. ϕ es el parámetro de orden que contabiliza la concentración relativa de los dos componentes, M es la movilidad de las especies químicas consideradas y Q es la fuente térmica. Las componentes locales de la velocidad $\mathbf{u}=(u,v)$ de las posiciones horizontales y verticales de la fuente se calculan por medio de las Ecs. 32 y 33. Donde las constantes a y b contabilizan la proporcionalidad del desplazamiento en las posiciones X y Y de la fuente como resultado de la convección del flujo.

Las Ecuaciones 28-31 son un sistema de ecuaciones acopladas completado una vez que la forma de la fuente térmica Q es especificado, para la cual los gradientes térmicos modulados modela los procesos de absorción y conversión a energía térmica para muestras altamente absorbentes.

Para la aproximación de Boussinesq empleada antes las siguientes condiciones de frontera son utilizadas (Ec. 34):

$$T_1]_{y=h} = T_{TOP}, T_2]_{y=0} = T_{BOTTOM}$$
 (34)

Condiciones que son frecuentemente empleadas para flujos sujetos a procesos de convección natural en capas horizontales entre placas mantenidas a temperaturas constantes y que serían de uso natural para los fluidos estratificados que modelamos (Fig. 1) adicionalmente al hecho de que las mismas semejan las condiciones experimentales de las inestabilidades térmicas que deseamos estudiar [8-20,40,41,46].

La Ecuación 28, es la Ecuación de Navier–Stokes *modificada* por la inclusión de una fuerza superficial dependiente del campo de fase y las modificaciones propias del sistema binario en los dos términos correspondientes a la fuerza de flotación, uno de los cuales depende explícitamente del campo de fase [41]. La Ec. 3 es la ecuación de continuidad. La ecuación 31 es la ecuación advectiva de Cahn–Hilliard que modela la evolución temporal de una mezcla binaria de fluidos por medio del método de campo de fase.

Las Ecs. 32 y 33 contabilizan la influencia del índice de refracción ya que su cambio modifica su movimiento a merced de una campo de temperaturas dependiente del tiempo junto a las posiciones de horizontales y verticales de la fuente, al ser advectadas por el campo local de velocidades $\mathbf{u}=(u,v)$.

Para sistema luz-fluido que poseen oscilaciones térmicas por calentamiento láser [1,3, 8-20,40,41,46] empleamos las Ecs. 28-31.

A todo lo anterior sabemos el Teorema de Squire establece que para cada perturbación tridimensional existe una bidimensional más inestable [43]. Es por esta causa que estudiamos en un dominio bidimensional las inestabilidades luz-fluido.

Las condiciones de frontera para la Ec. de Cahn-Hilliard (Ec. 31) son (Ec. 35):

 $\mathbf{n} \bullet \nabla \phi = 0, \mathbf{n} \bullet M \nabla \mu \tag{35}$

donde **n** es el vector unitario normal a la frontera del dominio. Para la Ec. de Navier– Stokes *modificada* incluyendo la fuerza de flotación es necesario fijar las condiciones de de no deslizamiento en las paredes superiores e inferiores (u=0) para la geometría del canal investigado (Fig. 3).

Fijamos la condición periódica en el canal para nuestras simulaciones toda vez que es particularmente simple usar la transformada rápida de Fourier para la discretización espectral empleada. En este sentido el método de campo de fase nos permite el control de la tensión superficial por medio de los parámetros definidos por lo que la dependencia de la temperatura de esta última puede ser incluida en el modelo mediante las ecuaciones acopladas y adimensionalización apropiada [47].

Capítulo 3. Método numérico

Este capítulo como su nombre lo indica esta dedicado a la descripción del método numérico empleado. En trabajo previos se ha utilizado la simulación la solución numérica directa de las ecuaciones en diferencias finitas para resolver las Ecs. de Navier-Stokes y Cahn-Hilliard (Modelo H).

Se utiliza una discretización espectral espacial pero para la discretización temporal se empleó diferencias finitas.

En lugar de un esquema de corrección de la velocidad se seleccionó un esquema de corrección de la presión para la solución de la Ec. de Navier Stokes. Aunado a este esquema de proyección se empleo esquema de paso fraccionado en el tempo para desacoplar el calculo de la presión y el tiempo [23,24], para el que las variables del fluido se definieron en una celdilla tipo MAC (Fig. 4).



Figura 4. Celdilla tipo MAC con malla uniforme, con espaciamiento de malla h, donde se observa la locación de los distintos campos (P,u,v,ϕ,T) .

Los esquemas de corrección de la presión son algoritmos de avance en el tiempo consistente en dos pasos. la presión se emplea explícitamente en el primer paso, y es corregida en el paso subsiguiente al utilizar la condición de incompresibilidad. adicionalmente, se utilizo un esquema semi-implícito de 20 orden para resolver la Ec. de Cahn-Hilliard [48,49] (Ec. 36):

$$\frac{1.5\phi_{i,j}^{n+1} - 2\phi_{i,j}^{n} + 0.5\phi_{i,j}^{n-1}}{\Delta t} - M\left(\tau \nabla^{2}\phi_{i,j}^{n+1} + \kappa_{\phi}\nabla^{4}\phi_{i,j}^{n+1}\right) = 2\left[M\left(\nabla^{2}f'\left(\phi_{i,j}^{n}\right) - \tau \nabla^{2}\phi_{i,j}^{n}\right) - \mathbf{u}_{i,j}^{n} \bullet \nabla\phi_{i,j}^{n}\right] - \left[M\left(\nabla^{2}f'\left(\phi_{i,j}^{n-1}\right) - \tau \nabla^{2}\phi_{i,j}^{n-1}\right) - \mathbf{u}_{i,j}^{n-1} \bullet \nabla\phi_{i,j}^{n-1}\right]\right] (36)$$

Para la Ec. 36 el valor de τ se elige para cumplir la siguiente desigualdad [34]: $\tau \ge \frac{1}{2}$ máx. $f'(\phi(\mathbf{x}))$. El valor de τ se calibra para el tratamiento de ecuaciones difusivas ecuaciones con un coeficiente de difusión variable: $\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T)$, $\kappa > 0$, la última se rescribe como

 $\partial T_{\partial t} = \tau \nabla^2 T + f(T)$. esto es para el tratamiento implícito de $\tau \nabla^2 T$ y explicito de f(T).

Para la Ec. de Navier–Stokes *modificada* una discretization temporal similar como la usada para la Ec. de Cahn–Hilliard se usó junto a una malla escalonada.

En la malla la presión y el campo de fase se localizan en el centro de las cedillas . las componentes de la velocidad (u,v) se localizan en los lados de las celdillas centrados en las mismas. Mientras que la temperaturas se definen en las esquinas de las mismas (Fig. 4). Sea el paso temporal Δt y n el índice del paso en el tiempo. En el centro de todas localizada por los índices i y j para las direcciones X y Y respectivamente, para i =0, ..., Nx-1 y j =0, ..., Ny-1. Nx y Ny son los números de las celdas en las direcciones X y Y, respectivamente. De manera usual para mostrar el poder de nuestros resultados elegimos un espesor de interfaz difusa de tres puntos de malla [34]. Utilizando el valor calculado de ϕ^{n+1} calculamos las fuerzas de cuerpo y resolvemos la fuerza de cuerpo de la ecuación de Navier–Stokes *modificada* (Ec. 37):

$$\frac{1.5 \mathbf{u}^{n+1} - 2 \mathbf{u}^n + 0.5 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p^n + \nu \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} - 2\mathbf{u}^n \bullet \nabla \mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1} \bullet \nabla \mathbf{u}^{n-1} - \left(\frac{\Delta \rho^n}{\rho_0} \phi^{n+1} + \frac{\Delta \rho(T)^n}{\rho_0} \phi^{n+1} T^n + \frac{\Delta \rho(T)^n}{\rho_0} T^n\right) \mathbf{g}$$
(37)

La Ec. 37 se subdivide en dos pasos. el primer paso considera efectos viscosos y el segundo incorpora la restricción de incompresibilidad. El segundo paso suele llamarse el paso de proyección por razones que resultan obvias (Ecs. 38 y 39).

$$\frac{\operatorname{Paso 1}}{\Delta t} = \frac{1}{\rho_0} \nabla p^n + \nu \nabla^2 \mathbf{u}^* - 2\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1} \cdot \nabla \mathbf{u}^{n-1} - \left(\frac{\Delta \rho^n}{\rho_0} \phi^{n+1} + \frac{\Delta \rho(T)^n}{\rho_0} \phi^{n+1} T^n \overline{g} + \frac{\Delta \rho(T)^n}{\rho_0} T^n\right) \mathbf{g}$$

$$\frac{\operatorname{Paso 2}}{\Delta t} = \frac{1}{\rho_0} \nabla p^{n+1}$$

$$(39)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$$

Donde **u*** es la velocidad intermedia. En la Ec. 37 añadiendo un valor viejo de la presión al gradiente de presión, ∇p^n , en el primer paso y consecuentemente corrigiendo la velocidad en el segundo paso mejora la precisión del método.

Tomando la transformada de Fourier de la Ec. 31 obtenemos la Ec. 39:

$$\hat{\phi}_{i,j}^{n+1} = \frac{2 \ \hat{\phi}_{i,j}^{n} + 2 \ \hat{G}_{i,j}^{n} - \hat{G}_{i,j}^{n-1}}{(3 - 2M\Delta t \ k^{2}(\tau + \kappa_{\phi}k^{2}))}$$
(39)

donde $\hat{G}_{i,j}^m = \hat{\phi}_{i,j}^m + 2 \Delta t \left[M \left(k^2 \hat{f}'(\hat{\phi}_{i,j}^m) - \tau k^2 \hat{\phi}_{i,j}^m \right) - F \{ \overline{u}^m \bullet \nabla \phi^m \} \right]$, m=n, n-1, la transformada de Fourier se indica por ^ o F{...}. Podemos tomar la transformada de Fourier de la Ec. 38 para obtener la Ec. 40:

$$\bar{a}^{*} = \frac{\left(-\frac{2\Delta t}{\rho_{0}}\mathbf{F}\{\nabla p^{n+1}\} + 2\Delta t\mathbf{F}\{\frac{\Delta\rho^{n}}{\rho_{0}}\phi^{n+1}T^{n+1}\}\mathbf{g}2\Delta t\mathbf{F}\{\frac{\Delta\rho(T)^{n}}{\rho_{0}}\phi^{n+1}T^{n+1}\}\mathbf{g} + 2\Delta t\mathbf{F}\{\frac{\Delta\rho(T)^{n}}{\rho_{0}}T^{n+1}\}\mathbf{g} + 4\left(a^{n} - \Delta t\mathbf{F}\{\mathbf{u}^{n} \bullet \nabla \mathbf{u}^{n}\}\right) - \left(a^{n-1} - 2\Delta t\mathbf{F}\{\mathbf{u}^{n-1} \bullet \nabla \mathbf{u}^{n-1}\}\right)}{(3 - (2\eta \Delta t k^{2}/\rho_{0}))}$$
(40)

Tomando la divergencia a la primer ecuación de 39 una ecuación de Poisson se obtiene para la presión de donde obtenemos la Ec. 41:

$$\hat{P}^{n+1} = \frac{\rho_0}{\Delta t \ k^2} \mathbf{F}\{\nabla \bullet \hat{\boldsymbol{u}}^{n+1}\}$$
(41)

Que se resuelve para p^{n+1} , con condiciones periódicas en la dirección horizontal y de Neumann en las paredes, utilizamos **u*** y p^{n+1} para resolver la Ec. 39a for **u**ⁿ⁺¹. Así, usando los valores calculados de p^{n+1} , ϕ^{n+1} y **u**ⁿ⁺¹ calculamos Tⁿ⁺¹ (Ec. 42):

$$\hat{T}_{i,j}^{n+1} = \frac{\left(4\left(\hat{T}_{i,j}^{n} - \Delta t \; \mathbf{F}\{\mathbf{u}_{i,j}^{n+1} \bullet \nabla T_{i,j}^{n}\}\right) - \left(\hat{T}_{i,j}^{n-1} - 2\Delta t \; \mathbf{F}\{\mathbf{u}_{i,j}^{n} \bullet \nabla T_{i,j}^{n-1}\}\right) + 2\Delta t \; \hat{S}_{i,j}^{n}\right)}{3 - 2\kappa \; k^{2}} \tag{42}$$

En la malla escalonada el campo de temperaturas se ubica en: $\{i\pm\frac{1}{2}, j\pm\frac{1}{2}\}=(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}),$ $(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}), (i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}) y (i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}) (Fig. 4)$. La localización del campo de temperaturas se elige en los puntos de malla en su localización natural para la malla no escalonada, también llamada natural. Fijamos T_{TOP}=T₀, T_{BOTTOM}=T₁ con condiciones periódicas en la dirección horizontal.

Las Ecs. no lineales 32 y 33 que modelan la evolución temporal de las posiciones la fuente se resuelven una vez que los términos no homogéneos se han calculado, a pesar de que los mismos dependen no linealmente de $u(x_C,y_C, \phi(\mathbf{x},\mathbf{u},x_C,y_C,T,t), T(\mathbf{x},\mathbf{u},x_C,y_C,\phi,t),t)$ y $v(x_C,y_C,\phi(\mathbf{x},\mathbf{u},x_C,y_C,T,t), T(\mathbf{x},\mathbf{u},x_C,y_C,\phi,t),t)$ respectivamente. Así estas dos Ecs. 32 y 33 se resolvieron por el método trapezoidal puesto que este es también de 2° orden e involucra el menor error por truncamiento de los métodos A-estables [37].

Una vez que los campos de fase, presiones, velocidades y temperatura se calculan junto a las posiciones de la fuente $(x_c^{n+1} y y_c^{n+1})$ un nuevo ciclo comienza para n=n+1.

Capítulo 4. Experimentos numéricos y validación

El tratamiento numérico de las Ecs. 32, 33, 36-42 se programó en C++ y esto porque la paquetería para resolverlas no es un verdadero lenguaje de programación primitivo. Pues estos han sido desarrollados precisamente para esconder los detalles de programación donde las soluciones se implementan en una caja negra. Por el contrario, C++ es un lenguaje de alto nivel altamente estructurado que produce pequeños ejecutables en los que el encapsulamiento juega un rol esencial. Adicionalmente C++ está diseñado como un lenguaje de programación orientada a objetos. Es también la elección natural para el uso de las más recientes librerías FFTW (fftw3.3.3) [50]. Esta librería (fftw3.3.3) puede usarse de manera sinérgica con los contenedores de C++ (Containers), específicamente la clase valarray, una clase de plantilla que pertenece la Librería Standard de Plantillas de C++ (Standard Template Library, STL). La clase valarray esta diseñada par realizar operaciones matemáticas mediante un tratamiento binario que la hace excepcionalmente rápida con el mejor desempeño computacional posible. Por lo que este método permitió exitosamente el uso de espesores de tres puntos de malla en la interfaz. Por otra parte y adicionalmente con los tratamientos que validan nuestro trabajo en las siguientes secciones hemos de señalar que cada una de las ecuaciones que la integran este sistema de ecuaciones fue validada independientemente mediante experimentos sencillos que corroboraron mediante soluciones analíticas conocidas el desempeño de estas.

4.1 Separación de fases 2D

4.1.1 Descomposición espinodal

La descomposición espinodal involucra el crecimiento de perfiles de concentración localizados debido a fluctuaciones aleatorias alrededor de una región de metaestabilidad. Este cambio es homogéneo en toda la mezcla que se da en el camino que lleva a incremento de zonas de enriquecidas de soluto, produciendo una estructura de dos fases modulada. Es un reto numérico y computacional la solución de este sistema debido a las dispares escalas de tiempo involucradas así como a la rigidez inherente del modelo involucrado que simplemente no mejora al disminuir h. Aun así el corazón de nuestras simulaciones de flujos multifásicos es la separación de fase de una mezcla binaria con condiciones periódicas en la dirección de flujo y de Neumann en las paredes del canal, para la Ec. de Cahn–Hilliard se usó una condición inicial aleatoria dada por la Ec. 43:

 $\phi(\mathbf{x}, t=0) = \phi_{mean} + Cr(\mathbf{x}) \tag{43}$

C es el numero de Cahn que cuantifica la razón entre el espesor de la interfaz difusa y el tamaño del dominio, L, C= ξ/L , L. r(x) es la perturbación aleatoria, r(x) ϵ [-1,1], con media cero, $\phi_{mean} = 0$ y **u**=0 (Ec. de Cahn-Hilliard sin convección). Así adimensionalizamos las Ec. gobernante (Ec. 31) con las nuevas variables adimensionales (Ec. 44):

 $t'=t/T_c, x'=x/L_c, T_c=M_c\beta$ (44)

Usando la Ec. 44 junto a 31, obtenemos la Ec. 45:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Delta \left(f'(\phi) - C^2 \Delta \phi \right) \tag{45}$$

donde $f'(\phi) = \phi^3 - \phi$, T_c es el tiempo característico, y M_c es la movilidad característica, L_c es la longitud característica, L=1 en el cuadrado unitario.



Figura 5. Evolución de ϕ , a varios tiempos adimensionales: a) t=0.001782, Δt =4.95x10⁻⁷; b) t=0.025, c) t=0.05, d) t=0.1, e) t=0.5, f) t=3.0. Nx=Ny=128, ϕ_{mean} =0, C=4.164 x10⁻³ y Δt =1.0x10⁻⁴ para b)-f).

La Fig. 5 muestra el caso de no flujo en las paredes (*superior e inferior*) con periodicidad en la dirección horizontal (Ec. 45), mientras la Fig. 8 es para condiciones periódicas en X y Y en el dominio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ para la Ec. 45. En las Figs. 5 y 6 la fase clara corresponde a $\phi = 1$ y la oscura a $\phi = -1$.

Esta simulaciones que iniciaron con una condición inicial de composición aleatoria, ilustran la evolución temporal del proceso del crecimiento de dominio en una difusión cuesta arriba. Donde las fluctuaciones a tiempos largos se desarrollan lentamente debido a las largas distancias que han de recorrer las especies difusivas; mientras que las fluctuaciones locales son enmascaradas por la energía de la interfaz difusa que se modifica dinámicamente durante el proceso de separación de fases desarrollando una periodicidad que le es inherente (Figs. 5 y 6) [50,51].



Figura 6. Evolución de ϕ , a varios tiempos adimensionales: a) t=0.001782, Δ t=4.95x10⁻⁷; b) t=0.025, c) t=0.05, d) t=0.1, e) t=0.5, f) t=3.0. Nx=Ny=128, $\phi_{mean}=0, C=4.164 \times 10^{-3} \text{ y} \Delta$ t=1.0x10⁻⁴ para b)-f).

La descomposición espinodal describe la evolución de un estado inicial de alta energía en uno de baja energía que sigue la Ec. de Cahn-Hilliard, por lo que el funcional de la energía $F[\phi]$ debe seguir un decrecimiento monótono conservando la masa de las especies en presentes originalmente (conservación del parámetro de orden) (Fig. 7 a)).



Figura 7. Evolución temporal adimensional: a) Funcional de la energía $F[\phi]$, b) Parámetro de Orden promedio. Condición inicial aleatoria con condiciones de periodicidad horizontal y no flujo en las paredes. Correspondiente a los experimentos numéricos de decomposition espinodal de la Fig. 5.

Así, para todos los tiempos adimensionales t ≥ 0 la Ec. Cahn–Hilliard disipa energía (Fig. 7a)). Adicionalmente la media del parámetro de orden se mantiene cercana a $\phi_{mean} = 0$, y dentro de todo el intervalo temporal elegido se mantuvo dentro de 4 cifras (Fig. 7b)).

4.1.2 2D Crecimiento de dominios

Como ha sido señalado por Wodo y colaboradores [50] la morfología de fases interconectadas típicamente observada en la descomposición espinodal ($\phi_{mean}=0$) se transforma a una morfología tipo gotas cuando $\phi_{mean}\neq 0$, esta tendencia también la observamos en nuestras simulaciones al evolucionar de una fase con cierta dominancia de composición entre las especies fija ($\phi_{mean}\neq 0$, Figs. 8-10). Estos resultados provienen de la solución de la Ec. 45.



Figura 8. Evolución de ϕ , a varios tiempos adimensionales: a) t=0.0005; b) t=0.015, c) t=0.030, d) t=0.050, e) t=0.100, f) t=0.150. Nx=Ny=128, ϕ_{mean} =-0.1, C=4.164 x10⁻³ y Δ t=5x10⁻⁵ para a)-f).



Figura 9. Evolución de ϕ , a varios tiempos adimensionales: a) t=0.0005; b) t=0.015, c) t=0.030, d) t=0.050, e) t=0.100, f) t=0.150. Nx=Ny=128, ϕ_{mean} =-0.2, C=4.164 x10⁻³ y Δ t=5x10⁻⁵ para a)-f).



Figura 10. Evolución de ϕ , a varios tiempos adimensionales: a) t=0.0005; b) t=0.015, c) t=0.030, d) t=0.050, e) t=0.100, f) t=0.150. Nx=Ny=128, ϕ_{mean} =-0.4, C=4.164 x10⁻³ y Δt =5x10⁻⁵ para a)-f).

Mientras $\phi_{\text{mean}}\neq 0$ alcanza mayores valores la evolución morfológica favorece la formación de dominios tipo gota producidos de una fase padre que se separa en las dos fases siguiendo en todo caso una minimización de la energía y la conservación del campo de fase hacia un nuevo equilibrio desde su condición inicial. De manera correspondiente, mientras algunas de las gotas más pequeñas se evaporan las más pequeñas se evaporan otras alcanzan el tamaño critico rápidamente (Figs. 8-10) [50,51].

También podemos reportar que la velocidad de separación de fases es mayor que para aquellas mezclas de fases con media cero [50,51], y esto como resultado del acoplamiento del fenómeno de crecimiento-evaporación de gotas que ocurre al lado de la difusión cuesta arriba dado que para la Ec. de Cahn–Hilliard el campo de difusión relaja más rápido que la velocidad a la cual se mueve la interfaz, independientemente del hecho de que todos los procesos difusivos están en equilibrio con las interfaces.

4.2 Separación de fases y evolución de dominios 3D

Debido al método robusto que se usa para resolver numéricamente la Ec. de Cahn–Hilliard podemos manejar una interfaz pequeña (tan pequeña como tres puntos de malla) con gran resolución y que no se deteriora dinámicamente en el tiempo (Figs. 5, 6, 8-10). Sin embargo para validar el código desarrollado en la descomposición de fases en dominios 3D así como la evolución de dominios. El dominio computacional es $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$. La condición inicial está dada por la Ec. 43. En las siguientes figuras mostramos la isosuperfície de separación entre los dominios $\phi=0$ (Figs. 11-14).



Figura 11. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales: a) t=0 (condición inicial aleatoria); b) t=0.1, c) t=0.5, d) t=0.1. N³=32,768, C=4.164 x10⁻³ y Δ t=1x10⁻⁴. Condiciones periódicas en las direcciones X, Y y Z.



Figura 12. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales: a) t=0.1, b) t=0.5, c) t=0.1. N³=32,768, C=4.164 x10⁻³ y Δ t=1x10⁻⁴. Condiciones periódicas en las direcciones X y Y y de no flujo en la dirección Z.



Figura 13. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales: a) t=0.04, b) t=0.07, c) t=0.1, d) t=0.15 N³=32,768, C=4.164 x10⁻³ y $\Delta t=1x10^{-4}$. $\phi_{mean}=-0.4$. Condiciones periódicas en las direcciones X, Y y Z.





Figura 14. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales: a) t=0.04, b) t=0.07, c) t=0.1, d) t=0.15 N³=32,768, C=4.164 x10⁻³ y $\Delta t=1x10^{-4}$. $\phi_{mean}=-0.4$. Condiciones periódicas en las direcciones X y Y. Condiciones de no flujo en la dirección Z.

La evolución de separación de fases, incluyendo la evolución de dominios en forma de gotas (Figs. 11-14).

Sin embargo, como sucediera en las simulaciones 2D es fácil distinguir entre las condiciones impuestas en la pared (Figs. 11 y 12), ya que las condiciones de frontera de Neumann en la pared fuerzan al campo de fase a formar dominios que se alinean perpendicularmente a la pared (Fig. 12).

De manera análoga al caso 2D para la evolución de dominios de una fase matriz. Misma que se toma como la de mayor composición y de la que inicialmente evoluciona una fase nueva (Figs. 11-14). En la Figura 14 (ϕ_{mean} =-0.4) se acopla a la evaporación de las gotas más pequeñas y coalescencia de gotas 3D evolucionando más rápidamente que su contraparte de una mezcla homogénea de media cero (Fig. 12). Esta última tendencia refleja la naturaleza de la descomposición espinodal, esto es de la Ec. de. Cahn–Hilliard, donde el sistema es inestable a variaciones infinitesimales alrededor de una composición entre las dos fases al decrecer monótonamente. Esta separación de fases progresa por medio de la nucleación y crecimiento de gotas hasta alcanzar el equilibrio de dos fases coexistentes en diferentes regiones espaciales 3D (Figs. 13 y 14).

4.3 Inestabilidad de Rayleigh-Taylor

La inestabilidad de Rayleigh–Taylor ocurre para cualquier perturbación a lo largo de la interfaz entre un fluido pesado sobre un fluido ligero, generando que ambos fluidos se penetren mutuamente. El fenómeno se caracteriza por una razón de densidades que se representa por el número de Atwood (*At*): $_{At} = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1}$, donde ρ_2 y ρ_1 son las densidades de

los fluidos ligero y denso respectivamente. La inestabilidad de Rayleigh–Taylor muestra el desarrollo de espigas de fluido que caen junto a burbujas ascendentes de fluido ligero (Figs. 15 y 16). La fase más oscura corresponde al fluido más denso. La configuración del sistema se forma en la Fig. 3. Esta figura ilustra el arreglo de los dos fluidos incompresibles con densidad distinta, el fluido denso se coloca sobre el ligero. La inestabilidad de Rayleigh–Taylor fue estudiada por Rayleigh y más tarde relacionada a cualquier fluido acelerado por

Taylor [42]. El domino computacional elegido es $\Omega = [0, 1] \times [0, 4]$. La condición inicial está dado por la Ec. 46 :

$$\phi(x, y, t=0) = \tanh\left(\frac{y-2-0.1\cos(2\pi x)}{\sqrt{2\xi}}\right)$$
(46)

El nivel cero del perfil de la condición inicial es el de una interfaz plana a la que se ha sobre-impuesto una perturbación de número de onda, k=1, y amplitud 0.1.

Para adimesionalizar (Ec. 47):

$$\mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u}}{U_c}, t' = \frac{t}{L_c} U_c, x = \frac{x}{L_c}, p' = \frac{pL_c}{\eta_c U_c}$$
(47)

Se usó la Ec. 28 truncada a su 40 término, 29, 31 y 47 después de quitar las primas de este conjunto de ecuaciones obtenemos un modelo H adimensional *modificado* para incluir efectos de flotación para el fluido binario (Ecs. 48.1, 48.2 y 48.3), para el la diferencia de densidades queda subsumida en el número de Atwood. Para este modelo se consideran viscosidades y movilidades semejantes de los fluidos y que es una hipótesis de trajo en este y subsecuentes experimentos numéricos:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \frac{1}{Pe} \Delta \mu \qquad (48.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\text{Re}} \nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \Delta \mathbf{u} + \frac{At}{Fr^2} \phi \, \mathbf{\hat{g}} + \frac{1}{\text{Re} \cdot Ca} \mu \nabla \phi \qquad (48.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \qquad (48.3)$$

Los números adimensionales de Reynolds, Froude, Peclét y capilaridad son respectivamente: $Re = \frac{\rho_c U_c L_c}{\eta}$, $Fr = \frac{U_c}{\sqrt{g_c L_c}}$, $Pe = \frac{U_c L_c}{M_c \beta}$, $Ca = \frac{\alpha \eta_c U_c}{\beta^2 L_c} = \frac{2\eta U_c}{3\sigma}$. El primero representa

la razón de las fuerzas inerciales a viscosas, el segundo la razón de fuerzas inerciales respecto de las gravitacionales, el tercero la relación de los procesos convectivos a difusivos y el último, el numero de capilaridad, es una medida de las fuerzas viscosas a capilares en la interfaz difusa. Adicionalmente, $\mu = \phi^3 - \phi - \frac{\xi^2}{L_c^2} \Delta \phi$, $\xi = \sqrt{\frac{\kappa_{\phi}}{\alpha L_c^2}}$ y $\hat{\mathbf{g}}$ es un vector

unitario con la misma dirección de la aceleración gravitacional. L_c es el ancho del canal. La velocidad característica está dada por $U_c = (g_c L_c)^{1/2}$. Las condiciones de Neumann se usaron para las paredes del canal para la presión y periódicas en la dirección horizontal (Eqs. 48.1, 48.2 y 48.3), v=0 en las paredes. Para el campo de fase adoptamos las condiciones de no flujo en las paredes y periódica en la dirección del flujo (Figs. 15-17). se seleccionó At=0.01, por lo que el crecimiento de burbujas y espigas es simétrica [53,54]. La evolución de la inestabilidad de Rayleigh–Taylor no lineal en la que los efectos viscosos juegan un papel relevante se ha estudiado poco, con todo su estudio numérico es dado que a configuración fluido denso sobre ligero siempre es inestable para una perturbación en la interfaz de su perfil inicial de cualquier longitud de onda para fluidos confinados con periodicidad horizontal. Situación que se obtuvo por la modificación de los números de Reynolds y de capilaridad para los casos mostrados adelante (Figs. 15-17), donde g=10 y L_c=1 (Ec. 48.2).


Figura 15. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=0.6, At=0.01, Fr=1, Pe=30, Ca=15 y Δ t=3x10⁻⁵.



Figura 16. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=0.4, At=0.01, Fr=1, Pe=30, Ca=25 y $\Delta t=3x10^{-5}$.

La evolución temporal de la inestabilidad de Rayleigh–Taylor se ajusta al desarrollo de (Figs. 15 y 16) reportado previamente para burbujas y espigas [54,55a]. Sin embargo en nuestros resultados observamos que la evolución de las perturbaciones, que eran unimodales disminuyeron su velocidad de desarrollo debido a las mayores fuerzas viscosas en el numero de Reynolds y de capilaridad.

Asociado a la inestabilidad de Rayleigh–Taylor en las Figs. 15 y 16 se observa que el incremento en la en viscosidad regulariza el flujo disminuyendo la tasa de crecimiento de la inestabilidad. Así, para una cierta viscosidad esta evita el crecimiento de altos números de onda y favoreciendo el crecimiento del modo más inestable de manera selectiva al descartar el resto de ellos.

De esta manera podemos ver que la inestabilidad no lineal viscosa de Rayleigh– Taylor desarrolla un tallo y hongo más gruesos como resultado de las elevadas fuerzas viscosas, que acoplan los gradientes de presión a esta evolución [54].



Figura 17. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=0.4, At=0.01, Fr=1, Pe=30, Ca=25 y $\Delta t=3x10^{-5}$. La condición inicial para cada caso fue: a) $tanh\left(\frac{y-2-0.1\cos(4\pi x)}{\sqrt{2\varepsilon}}\right)$, b) $tanh\left(\frac{y-2-0.1\cos(8\pi x)}{\sqrt{2\varepsilon}}\right)$, $tanh\left(\frac{y-2-0.1\cos(8\pi x)}{\sqrt{2\varepsilon}}\right)$.

En el caso de una aceleración gravitacional constante empleamos los siguientes perfiles iniciales, $(\phi(x, y, t=0))$: $_{tanh\left(\frac{y-2-0.1\cos(8\pi x)}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)}$, $_{tanh\left(\frac{y-2-0.1\cos(8\pi(x-0.125))}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)}$ y $_{tanh\left(\frac{y-2-0.1\cos(4\pi x)}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)}$ (Figs. 17: a), b) y c)).

Como se ve en la Fig. 17 para los diversos casos el perfil de las burbujas se fusionaron con la dinámica que se muestra en la Fig. 17 que para esta perturbaciones unimodales ocurrió debido a la elevada viscosidad que impidió el desarrollo de números de onda elevados y el predominio del modo más inestable [24,27]. Es de notar que desde el comienzo de la simulación el número de onda más inestable crece favorablemente a costa de la fusión en el perfil de las burbujas iniciales. Así vemos que la evolución de este perfil se dio como resultado del acoplamiento del fluido drenado de las regiones de alta presión en cada burbuja, creando una región de elevada presión en la zona media del dominio (Ω), y como

una consecuencia natural de las espigas de fluido denso que descendían desde el perfil inicial seleccionado (Fig. 17 a), b) y c)).

Es por esto que la velocidad de las burbujas más grandes fue mayor durante la fusión del perfil de las burbujas iniciales y que la burbuja central se formó como resultado del flujo másico que salía de las burbujas aledañas. Esto ocasionó que as burbujas más pequeñas se redujeran en tamaño y fueran arrastradas en la dirección de las burbujas de mayor tamaño mismas que aceleraron consecuentemente en la dirección de crecimiento de la burbuja central. Este proceso se retrató en las Figs. 17 a), b) y c) que culminó en el crecimiento a velocidad constante de las burbujas más grandes y una aceleración continua del frente que evolucionó rápidamente hacia la dinámica típicamente antes vista de la inestabilidad no lineal viscosa de Rayleigh–Taylor. De estos experimentos desprendimos también la confirmación de que la tensión superficial genera una fuerza restitutiva que funciona como un mecanismo de estabilización de la interfaz (Véase la película movie1.avi en el material suplementario ya entregado y cotejado por la Coordinación del PCeIM).

Una característica de las Figuras 17 b) y 17 c) es su similitud a t=3.5, lo cual concuerda con la discusión previa de que el modo más inestable es el predominante, sin embargo esto no parece consistente con la condición de periodicidad impuesta en la dirección horizontal y que entre estas existe un simple desfase. Y sin embargo lo es, ya que la pequeña desviación en la curvatura de crestas y valles de la condición inicial representa una corrección al flujo generando un flujo secundario distinto en la dirección horizontal [24] (Figs. 17 b) y 17 c)) para cada caso. Y es precisamente como resultado de la condición inicial impuesta la trayectoria típica de un elemento fluido es una superposición del flujo secundario y el flujo primario [24] en la dirección vertical propio de la inestabilidad de Rayleigh–Taylor. Sin embargo la condición de periodicidad impuesta permite que a t=3.5 el flujo sea el mismo pues es el modo más inestable el que prevalece [27].

4.4 Evolución temporal de gotas viscosas sujetas a pulsos largos de aceleración impulsiva y de gotas sujetas a una aceleración impulsiva modulada

Es de notar que sujetar gotas a aceleraciones dependientes del tiempo, toda vez que esto puede derivar en inestabilidad de las mismas a cualquier perturbación [49]. Por lo que investigamos la evolución temporal de gotas en las que las fuerzas viscosas sean relevantes (Figs. 18-20). La evolución de la interfaz de gotas sujetas a esta fuerzas impulsivos no es conocida en principio analíticamente. Ya que esta evolución es una función compleja de las fuerzas disipativas, la excitación paramétrica o la magnitud del pulso y su duración, así como del tensor de esfuerzos en la interfaz con tensión superficial que ya de por si entraña una singularidad asociada condición de salto. Es por esto que en el área de los fenómenos no lineales su investigación en fluidos de tiende a ser muy compleja e interesante. Por otra parte, el método de campo de fase esta especialmente bien equipado para esta tarea. El tamaño de la burbuja fue especialmente elegido para evitar efectos de las paredes laterales del contenedor, dado que podría producir en la gota la forma típica de cascarón cóncavo desde abajo [56].

Se resuelve el mismo conjunto de ecuaciones de la sección previa (Sección 4.3, Ecs. 48.1-48.3) (Figs. 18-20) para los que la aceleración no uniforme, para un pulso transitorio de presión [57]. Para ello se define como $g=g(t)\hat{g}$ el primer caso definimos el pulso $g(t) = a \exp(bt)$, donde a y b son constantes a definir para la magnitud del pulso y su duración. Teniéndose así una medida de la magnitud del pulso, de la perturbación impuesta y del decaimiento de la exponencial lejos del tiempo inicial de aplicación del pulso (t=0), y esto dentro del marco de la propia solución analítica de la inestabilidad de Rayleigh Taylor (donde a=a(t), Fig. 18 y 19) [57]. Para el caso de una aceleración impulsiva modulada esta g(t) dada por la Ec. 49:

$g(t) = g_0 + a \operatorname{sen}(\omega t)$ (49)

donde ω es $2\pi k$, k es el número de onda, *a* es la amplitud de modulación y en este caso para una aceleración impulsiva $a=\delta(t)$, y la frecuencia de conducción es f= $\omega/2\pi$. Para aceleraciones no uniformes, la aceleración modulada, (a(t), Fig. 18) genera un campo de velocidades que evoluciona con una escala de tiempos característicos determinados por el forzamiento oscilatorio: ω^{-1} , acorde al hecho de que en el régimen investigado de velocidades impulsivas la escala temporal queda determinada por [58]: $T_c = L_c^2/\nu$, para este último caso sujeto a aceleraciones en un sentido u otro de la interfaz de los fluidos estaremos estudiando la inestabilidad de Richtmyer-Meshkov. Es por esto que la razón de estos dos tiempos característicos determina la rapidez relativa del transporte de momento viscoso o de la excitación paramétrica por medio del número de Strouhal: $St = L_{e}^{2}\omega/v$. Así las ecuaciones 48.1-48.3 se han modificado para tener en cuenta esta circunstancia (Fig. 20, Ecs. 49.1-49.3). Para ondas paramétricas (k=10) incluimos el número de Strouhal y fijamos condiciones de microgravedad, g₀=0. La condición inicial es una gota de fluido ligero localizada (0.5,0.5), con radio inicial r=0.125 (L_c=r). La fase más oscura corresponde al fluido más denso. El dominio elegido es $\Omega = [0, 1] \times [0, 4]$. Para la presión en la pared seccionamos condiciones de Neumann. Mientras que en la dirección horizontal se aplican condiciones periódicas y v=0 en las paredes. Para el campo de fase usamos la condición de no flujo en la pared (Ecs. 50.1-50.3).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \frac{1}{Pe} \Delta \mu \qquad (50.1)$$

$$\frac{1}{St} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\text{Re}} \nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \Delta \mathbf{u} + \left(\frac{1}{Fr_{g_0}^2} + \frac{\sin(St \ t)}{Fr_a^2}\right) At\phi \ \mathbf{g} + \frac{1}{\text{Re} \cdot Ca} \mu \nabla \phi \qquad (50.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \qquad (50.3)$$



Figure 18. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1.5, At=0.01, Fr=1, Pe=1.5, Ca=2.5, τ =14 y Δt =1x10⁴.



Figura 19. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=0.02, At=0.01, Fr=1, Pe=1.5, Ca=1.5, τ =14 y Δt =1x10⁴.



Figura 20. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_a=1.2, Pe=75, Ca=40, St=0.13 y $\Delta t=4x10^{-3}$.

En ausencia de flujo (t=0, **u**=0), la forma en el equilibrio de la gota es esférica porque la tensión superficial (σ) obliga a al gota a adoptar una configuración que disminuye el área superficial (t=0, Figs. 18-20), y por lo mismo la energía libre asociada.

Sin embargo como se muestra en las Figs. 19 y 20 la gota sujeta a una aceleración modulada impulsiva no rompió. Esta tendencia sin embargo es esperada ya que la viscosidad y tensión superficial son dos mecanismos de estabilización del flujo que impiden simultáneamente la ruptura de la gota, lo que se sigue de los bajos números de Reynolds y de capilaridad empleados en las simulaciones de las Figs. 19 y 20.

En la Figura 20 el alto numero de Strouhal ya presupone una escala de velocidades en la que el tiempo de asociado a los proceso de difusión viscosa del momento son mayores a aquellos impuestos por la aceleración modulada y aun cuando esta última sea impulsiva y no uniforme, así la estabilización al campo de velocidades le permite a la interfaz de la gota alcanzar el equilibro deformando dinámicamente su forma antes de que la excitación del forzamiento paramétrico pueda originar su rompimiento.

Sin embargo resulta evidente que a mayores números de Reynolds, donde las fuerzas inerciales juega un papel menor para la inestabilidad de Rayleigh Taylor con aceleración impulsiva la distribución de presión no uniforme deforma la gota promoviendo su rompimiento y la aparición de una cola en la gota prolata ascendente (Fig. 18), y esto concuerda con el hecho de que para este primer caso el número de Weber ($_{We} = \frac{\rho_c U_c^2 L_c}{\sigma}$) es

mayor que para los otros casos toda vez que de este se desprende de éste último que las fuerzas inerciales son mayores y que la tensión superficial juega un papel mucho menor. Estos resultados son la base de posteriores desarrollos que presentamos en las siguientes secciones.

4.4 Caos espacio-temporal (STC) y aparición de estructuras tipo solitón en la inestabilidad de Faraday

Al presente no hay una teoría apropiadamente desarrollada para ondas paramétricas altamente amortiguadas y menos aun no lineales sujetas a fuerzas impulsivas. Las dificultades involucran ya la compleja relación no lineal de las condiciones de frontera en la interfaz y el forzamiento paramétrico.

Mientras que el patrón oscilatorio de las inestabilidades paramétricas ha sido ampliamente estudiado tanto analítica como numéricamente en su versión linealizada, la solución numérica de las ecuaciones no lineales en derivadas parciales que modelan este problema resulta ser la única opción viable y realista para entender la evolución del caos espacio-temporal (STC) y la aparición de estructuras tipo solitón en la inestabilidad de Faraday.

Mientras las ondas de Faraday se originan al vibrar periódicamente en dirección vertical a la superficie inicialmente en reposo un contenedor parcialmente lleno de fluido o bien lleno con dos fluidos no miscibles a la frecuencia apropiada. Los patrones de flujo y la deformación característica de la interfaz, así como su frecuencia devienen de un acoplamiento entre las fuerzas de aceleración generadas por una gravedad modulada.

La inestabilidad de Faraday caótica se expresa como un movimiento no estacionario de la interfaz que por derecho propio ha sido materia de investigación en el campo de los fenómenos no lineales [59-63]. Dada la dinámica disipativa a la que constreñimos nuestras simulaciones de la inestabilidad de Faraday (*paramétrica*), la aparición de caos espacio-temporal (CET o por su acrónimo en inglés, STC) se seguía de antemano, por lo que la sensibilidad a las condiciones iniciales se da por el perfil seleccionado dado por la Ec. 46 que se modificó eventualmente por el juego del tiempo dado por la relajación viscosa y la escala temporal fijada por la gravedad modulada usada con condiciones de microgravedad.

Es así que sistemas no lineales forzados paramétricamente pueden bifurcarse de un estado inicial a un estado caracterizado por un patrón típico de flujo que se conoce como ondas de Faraday o inestabilidad de Faraday. Mientras el forzamiento paramétrico se aumenta este patrón primario puede volverse inestable y sufrir sucesivas bifurcaciones que originan una dependencia espacio temporal en la evolución de la interfaz o lo que es lo mismo caos determinístico. Se logró mediante la selección de los parámetros apropiados la aparición de estructuras tipo solitón en la inestabilidad de Faraday para fluidos binarios altamente disipativos [59].

Es por esto que estudiamos la inestabilidad de Faraday no lineal viscosa numéricamente para investigar la aparición de caos espacio-temporal (CET o por su acrónimo en inglés, STC) y la aparición de estructuras tipo solitón en la inestabilidad de Faraday al calibrar los valores apropiados de los números adimensionales de Peclét, Reynolds, Froude, Atwood y Strouhal (Eqs. 49.1, 49.2 y 49.3). Así, pudimos estudiar los efectos inerciales en el modelo H debido a una escala temporal impuesta externamente $T_c = \omega^{-1}$ en el término de la fuerza de flotación (Figs. 21-23).

Para en cualquier caso observar las dinámicas buscadas seleccionamos el régimen más no lineal donde ω es intermedio y el amortiguamiento viscoso es alto. El paso temporal se eligió de manera que la compleja evolución temporal de la interfaz se pudiera capturar apropiadamente, k=10 y L_c= λ . la fase de color más oscura en las imágenes es del fluido más denso. El dominio computacional es $\Omega = [0, 1] \times [0, 4]$. Las condiciones de Neumann se usaron para las paredes del canal para la presión y periódicas en la dirección horizontal (Eqs. 50.1, 50.2 y 50.3), v=0 en las paredes. Para el campo de fase adoptamos las condiciones de no flujo en las paredes y periódica en la dirección del flujo. Dada la aperiodicidad de la evolución d ela interfaz con los parámetros seleccionados se confirmó la existencia de caos determinístico esperado, simulaciones que se mantuvieron hasta 90 segundos de tiempo adimensional. (Véanse las películas movie2.avi, movie3.avi y movie4.avi en el material suplementario entregado y cotejado por la Coordinación del PCeIM.)



Figura 21. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_a=0.2, Pe=10, Ca=50, St=0.6 y $\Delta t=1 \times 10^{-3}$.

Estos experimentos numéricos nos permitieron estudiar ondas no lineales paramétricas en la interfaz fluido-fluido. De esta manera vemos que el sistema es excitado paramétricamente por una aceleración periódica que sin embargo evoluciona en una interfaz que se deforma aperiódicamente (CET/SCT-spatio-temporal chaos).

Esta dependencia temporal de la evolución nos ha permitido observar el mecanismo detrás del coronamiento para el que diversas instabilidades se han invocado: Rayleigh–Taylor, Rayleigh–Plateau o Richtmyer–Meshkov, o bien la acción secuencial y/o conjunta de ellas [64]. El mecanismo del coronamiento pues se halla circunscrito a la aparición de una serie de aceleraciones y desaceleraciones dependientes del tiempo que prefigura la aparición de filamentos líquidos y coronas situación que aquí se observó con la inestabilidad de Faraday.

En la inestabilidad de Faraday observamos que incrementando la magnitud del forzamiento se dio la formación espontánea de encuellamientos y la posterior eyección de gotas (Figs. 21-23).

Las simulaciones de la Fig. 21 mostraron el fenómeno de coronamiento (t>84).



Figura 22. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128,Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_a=0.1, Pe=5, Ca=25, St=1.25 y $\Delta t=5x10^{-4}$.

El comportamiento observado en las Fig. 21-23 está íntimamente ligado al número de Froude que fijó la evolución de la interfaz de coronamiento a eyección de gotas según este se incrementaba. Así la aparición de los dedos líquidos observados se origina por la instabilidad de Rayleigh–Plateau y la ruptura de éstos en gotas que mostraron una dependencia temporal en su aparición, crecimiento y desaparición, que llevó a tiempos elevados a su ruptura y a la eyección de gotas en pequeñas gotas que se difundieron siguiendo la evolución del campo de fase según la dinámica fijada por Ec. de Cahn–Hilliard para los fluidos no miscibles modelados (Véase las película movie3.avi-movie5.avi en el material suplementario entregado y cotejado por la Coordinación del PCeIM).



Figura 23. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_a=0.02, Pe=1, Ca=1, St=6.3 y $\Delta t=1 \times 10^{-4}$.

4.5 Ruptura de jets (chorros) no lineales viscosos sujetos a una aceleración impulsiva modulada

La presencia de gotas en materiales por impacto de radiación láser se observa en las superficies fundidas que se generan por la inestabilidad hidrodinámica asociada al material fundido. Esta inestabilidad hidrodinámica del material fundido es generada por el flujo de ablación que causa la eyección de gotas y la formación de ligamentos líquidos [63]. El relevante y todavía problema abierto del modelado del láser y las inestabilidad hidrodinámica asociadas está íntimamente relacionada al proceso de atomización en incontables áreas, como puede ser neblinas de fluidos, liberación selectiva de drogas, síntesis pulvimetalúrgica, etcétera. Para generar gotas más pequeñas, las inestabilidades - por ejemplo la instabilidad de Richtmyer–Meshkov - deben de estar presentes para generar la formación de gotas de manera controlada para la aplicación tecnológica de generadores

de gotas [64]. Con todo a la fecha es materia de debate la física presente en la desintegración de la masa de liquido en gotas pequeñas. Así al incrementar el forzamiento de la gravedad modulada observamos que si esta es lo suficientemente impulsiva el puente liquido se rompe en pequeñas gotas (Ecs. 50.1-50.3) (Figs. 24-28) (Véanse las películas movie5.avi a movie10.avi para la evolución del campo de fase y las películas movie11.avi a movie16.avi para el campo de aceleración no uniforme en el material suplementario entregado y cotejado por la Coordinación del PCeIM).

Así la generación de gotas por métodos piezoeléctricos, neumáticos, microfluídicamente, electrohidrodinámicamente o aerodinámicamente [65] e inclusive por impacto láser provoca una aceleración no uniforme que origina un patrón de flujo como el reportado en la Ref. 63 (Figs. 24-28). La naturaleza impulsiva de generación de gotas está bien establecida tanto experimentalmente como en simulaciones numéricas [65,66]. Para modelar la aceleración impulsiva, generada por un láser de pulsos tipo Gaussianos, una fuente (S_a) compuesta por el producto de una función dependiente del tempo, h(t), y una función delta es la que se utilizó. Para capturar la naturaleza local del impacto láser [65,66] consideramos que la gravedad modulada seguía un mecanismo difusivo lejos del eje del láser que identificamos por la posición espacial fija, x_0 . Para la función dependiente del tiempo consideramos dos casos donde las aceleraciones y desaceleraciones seguían una ley sinusoidal (f(t)=cos ωt) o sinusoidal mas una componente constante (g(t)=1+cos ωt)). El paso temporal se eligió de manera que la compleja evolución temporal de la interfaz se pudiera capturar apropiadamente, g=10, k=20 y Lc= λ (Figs. 26-30). La fase de color más oscura en las imágenes es del fluido más denso. El dominio computacional es $\Omega = [0, 1] \times$ [0, 4]. Las condiciones de Neumann se usaron para las paredes del canal para la presión y periódicas en la dirección horizontal, v=0 y a=0 en las paredes (Ecs. 52.1-52.4) usando la Ec. 51:

$$\mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u}}{U_c}, t' = \frac{t}{t_c}, x = \frac{x}{L_c}, p' = \frac{pL_c}{\rho_c U_c^2}$$
(51)

$$\frac{1}{St} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\text{Re}} \nabla p + \Delta \mathbf{u} + \frac{1}{\text{Re} \bullet Ca} \mu \nabla \phi + \frac{At}{Fr_g^2} \phi \, \mathbf{g} + \frac{At}{Fr_a^2} \phi \, \mathbf{a} \, \mathbf{g}$$
(52.1)

$$\nabla \bullet \mathbf{u} = 0$$
(52.2)

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla a = \frac{1}{\text{Pr}_a} \Delta a + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) h(t)$$
(52.3)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \phi = \frac{1}{Pe} \Delta \mu$$
(52.4)

Donde $Pr=v/\kappa$ es el número de Prandtl que representa la razón de la difusividad de momento (viscosidad cinemática) respecto de la difusividad térmica, y que para nuestro caso (Pr_a) contabiliza la naturaleza difusiva de la aceleración no uniforme empleada (Ec. 52.3) para caracterizar el impacto láser. Seleccionamos $U_c = v_c/L_c$ [58]. Y de manera semejante a las secciones previas la naturaleza oscilatoria del flujo se representa por el número de Strouhal: $St = L_c^2 \omega/v$ [24].

Para el campo de fase adoptamos las condiciones de no flujo en las paredes y periódica en la dirección del flujo.

La función delta numérica utilizada es calculada como una representación límite (Ec. 53):

$$\delta = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{(2\pi\varepsilon)} e^{\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)}{2\varepsilon}}$$
(53)

donde ε es la varianza que mide la influencia del láser en el seno de los fluidos. En las Figuras 24-27 se observa que existe una desviación de forma esférica en las gotas sujetas a una aceleración no uniforme que deben de seguir una relajación de forma a esférica [24]. Dado que la forma esférica solo es posible cuando existe la ausencia de cualquier fuerza externa ($\mathbf{g}(t)=\mathbf{0}$) [24] mientras que para estos experimentos numéricos las fuerzas capilares juegan un papel menor que las inerciales y de manera semejante las fuerzas inerciales son mayores que las capilares (Ca>>1 y We>>1).



Figura 24. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_g=14, Fr_a=0.4, Pe=5, Ca=100, St=0.6, x₀=(0.5, 1.97), Pr_a=49.5, (2 ϵ)^{1/2}=0.05, h=g(t) y Δ t=2x10⁻³.



Figura 25. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_g=14, Fr_a=0.4, Pe=5, Ca=100, St=0.6, x₀=(0.5,2.0), Pr_a=49.5, (2 ϵ)^{1/2}=0.05, h=g(t) y Δ t=2x10⁻³.



Figura 26. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_g=14, Fr_a=0.4, Pe=5, Ca=100, St=0.6, x₀=(0.5,2.05), Pr_a=49.5, (2\epsilon)^{1/2}=0.05, h=g(t) y \Delta t=2x10^{-3}.

t=0	t=3.0	t=6.0	t=9.0	t=12



Figura 27. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_g=14, Fr_a=0.4, Pe=5, Ca=100, St=0.6, x₀=(0.5, 1.75), Pr_a=49.5, (2\epsilon)^{1/2}=1.0, h=f(t) y \Delta t=2x10^{-3}.





Figura 28. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Re=1, At=0.01, Fr_g=14, Fr_a=0.3, Pe=5, Ca=100, St=0.6, x₀=(0.5,1.75), Pr_a=49.5, (2 ϵ)^{1/2}=0.5, h=f(t) y Δ t=2x10⁻³.

En las Ecs. 52.1-52.4 diversos términos contabilizan la tensión superficial, las fuerzas inerciales, las fuerzas viscosas y la fuerza de flotación que incluye la influencia de la gravedad modulada. Las magnitudes relativas de estas fuerzas se describen por medio de los números adimensionales de capilaridad, Reynolds, Froude, Atwood y Peclét.

En las Figuras 24-28 los fluidos bajo la acción de una aceleración no uniforme crean una dependencia temporal en la evolución del campo de fase de los puentes líquidos y gotas. Así la vorticidad generada por la aceleración no uniforme e impulsiva (S_a) guía la instabilidad. Donde el enrollamiento observado en la desaceleración de los fluidos y que es típica de la inestabilidad de Richtmyer–Meshkov (Figs. 24-28).

4. 6 Inestabilidad Convectiva

Varios factores deben darse para que las características propias de las inestabilidades convectivas se presenten. Una diferencia de temperatura continua, fluctuaciones de temperatura y la no separación de la base de la pluma térmica [67], y en el caso inestabilidades luz-fluido un gradiente de densidad gravitacionalmente estable, (esto es una configuración de fluido ligero sobre fluido denso) junto al efecto de Marangoni que dispara la inestabilidad originada por la tensión superficial una vez que la pluma térmica alcanza la interfaz entre los fluidos [1,67-69]. Es por esto que el sistema estudiado involucra dos fluidos con una interfaz inicialmente plana con un gradiente de densidad gravitacionalmente, para el que la densidad y la tensión superficial son funciones de la temperatura. Es probable que uno de los fenómenos mas esenciales ligado al transporte de calor convectivo es el movimiento que resulta del calor que ha absorbido el fluido liberado de una fuente impulsiva en un fluido originalmente estacionario en reposo. Nuestro propósito principal en la inestabilidad hidrodinámica de origen lumínico, termales y plumas térmicas es controlar estos fenómenos que inician cuando una fuente térmica eleva la temperatura -por ejemplo una fuente de luz láser- formando un punto de calor en el fluido desde el que la pluma absorbe calor y que se eleva al generarse una diferencia de temperatura con el fluido circundante hacia la superficie del fluido. La absorción continua de calor de la fuente térmica en el sistema de fluidos empleado, origina un acoplamiento entre el flujo convectivo y el termocapilar para el caso del fenómeno de lente térmico. Para adimensionalizar utilizamos (Ec. 54):

$$\mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u}}{U_c}, t' = \frac{t}{t_c}, \mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x}}{x_c}, p' = \frac{p}{\rho_c U_c^2}, \theta = \frac{T - T_0}{\delta T}, r = \frac{\psi'}{\psi''}, x'_c = \frac{x_c}{X_b}, y'_c = \frac{y_c}{Y_b}$$
(54)

Así adimensionalizamos las Ecs. 28-33, con la Ec. 54 para dar las Ecs. 55.1 -55.6 luego de eliminar las primas:

$$\frac{1}{St} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \Delta \mathbf{u} + \frac{At}{Fr^2} \phi \, \hat{\mathbf{g}} + r \theta \phi \, \hat{\mathbf{g}} + \theta \, \hat{\mathbf{g}} + \frac{1}{We} \mu \nabla \phi \quad (55.1)$$

$$\nabla \bullet \mathbf{u} = 0 \quad (55.2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \theta = \frac{1}{\text{Re}} \Pr \Delta \theta + Q \quad (55.3)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \phi = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \mu \quad (55.4)$$

$$\frac{\partial y_c}{\partial t} = \frac{1}{r_y} v(x_c, y_c, \phi, T, t) \quad (55.5)$$

$$\frac{\partial x_c}{\partial t} = \frac{1}{r_x} u(x_c, y_c, \phi, T, t) \quad (55.6)$$

donde $S_t = T_c \omega$, $\Pr = v/\kappa$, $We = \operatorname{Re} \cdot Ca$, $r_x = \frac{X_b}{k_x L_c}$, $Y_x = \frac{Y_b}{k_y L_c}$. El número de Weber (We)

representa la proporción que guardan las fuerzas inerciales a la tensión superficial. La velocidad característica la impone (U_c) la propia convección de los fluidos y la distancia característica del orden del ancho del canal (L_c=1). r es la razón adimensional de los respectivos coeficientes de expansión térmica de los fluidos. X_b y Y_b representan las distancias características que son convectadas las posiciones del láser en direcciones horizontal y vertical respectivamente por el flujo en una unidad de tiempo de T_c.

La fase de color más oscura en las imágenes es del fluido más denso. El dominio computacional fue $\Omega = [0, 1] \times [0, 2]$. Las condiciones de Neumann se usaron para las paredes del canal para la presión y periódicas en la dirección horizontal, v=0 en las paredes.

La inestabilidad convectiva se origina por las fuerzas de flotación a las que se sujeta un fluido en reposo calentado desde abajo. Cabe mencionar que para las plumas térmicas formadas en este régimen la difusividad térmica y viscosa estabilizan el fluido. Para representar esta razón de las fuerzas estabilizantes del flujo a las desestabilizantes discutidas antes se usa el número de Rayleigh (*Ra*) (Eq. 56) [67-70]:

$$Ra = \frac{g \psi \Delta T L_c^3}{\kappa v}$$
(56)

Así el análisis lineal de la inestabilidad convectiva se fija por la flotación de tipo térmico que mide la importancia de los procesos convectivos que definen un número de Rayleigh crítico.



Figura 29. Fuente de calor Gaussiana distribuida divariada.

4.6.1 Termales

Adicionalmente, la ascensión de termales se caracteriza como un flujo restringido por la relación de una cierta cantidad de flotación fija y una fuente de flotación separada, ya que a deferencia de las plumas térmicas una característica fundamental de los termales es su separación de la capa limite termoquímica [66]. Los termales posen una cabeza que es en forma de hongo y donde en su inicio antes de separarse de la capa de fluido y ascender en el seno del fluido frío es una consecuencia de su propia unión con la capa limite termoquímica por la propia influencia de la fuente térmica que forma una capa térmica a su alrededor y del fluido calentado que siendo menos denso asciende y se separa de ésta [66]. La fase de color más oscura en las imágenes es del fluido más denso. El dominio computacional fue $\Omega = [0, 1] \times [0, 4]$. Un gradiente de densidad gravitacionalmente estable, (esto es una configuración de fluido ligero sobre fluido denso) (Fig 3). El paso temporal se eligió de manera que la compleja evolución temporal de la interfaz pudiera capturar apropiadamente el rompimiento del tallo. Como la escala temporal relevante se fija por la convección la Ec. 55.1 debe modificarse a la Ec. 57:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{\operatorname{Re}} \Delta \mathbf{u} + \frac{At}{Fr^2} \phi \, \hat{\mathbf{g}} + r \theta \phi \, \hat{\mathbf{g}} + \theta \, \hat{\mathbf{g}} + \frac{1}{We} \mu \nabla \phi \qquad (57)$$

Estos experimentos numéricos nos permitieron estudiar la inestabilidad convectiva asociada a la liberación de termales [66] de una fuente de flotación fija espacialmente en el punto, x_0 , -Representada por Q- (Figs. 29 y 30, Ecs. 55.2-55.4, 57 y 58).

Para los termales laminares mostrados en la Figura 31 fijamos una fuente de flujo calor fija en x_0 para contabilizar las fluctuaciones térmicas dado que la suposición de una temperatura constante lleva números de Rayleigh críticos que apuntan aun forzamiento térmico que no es físicamente posible (Ra>>1x10⁵), y que se halla varios órdenes de magnitud en el mejor de los casos de cualquier cálculo analítico del número de Rayleigh (*Ra=Gr•Pr*), donde *Gr* es el número de Grashof, dado que entraña una frontera puramente conductiva. Adicionalmente ignora la discontinuidad física que entraña las diferentes conductividades y difusividades térmicas de la pared y el fluido, situación que requiere un

coeficiente de transferencia de calor infinito en la pared [70], por lo que el número de Biot es también infinito Bi= ∞ , Bi=hd/ κ , donde d es el espesor de la capa de fluido, adicionalmente que se ha encontrado que estas fluctuaciones térmicas son el principal mecanismo de transporte de calor para la liberación de termales [66]. Los resultados de la Figura 29, muestran la evolución temporal típica dado que no poseen una fuente continua de flotación dada por la fuente Q en la Ec. 57 (Q=0 if $(2n+1)\pi/St$), $n \in \mathbb{N}$ (Ec. 58), que decae exponencialmente al alejarse de \mathbf{x}_0 , y cuya ubicación espacial se reporta como fija ene el espacio [66-70]. En las paredes $\partial T/\partial n=0$. Así, Q se parece a las fluctuaciones térmicas reportadas por Sparrow, Husar y Goldstein [66-70] (Fig. 30, Ec. 58):

$$Q = \frac{0.5}{\text{Re}} \left(1 + \sin(St \ t) \right) \ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (58)$$

Los resultados mostrados en la Fig. 30 concuerdan con los resultados de Shlien y Thompson [70]. La Figura 30 muestra que el termal primeramente se eleva a una distancia semejante a su diámetro a velocidad constante, para luego disminuir su velocidad a medida que crece volumétricamente al incorporar más material del fluido circundante menos denso en ascenso por las fuerzas de flotación a pesar de que los procesos de creación de los termales residen en las cercanías de la fuente térmica puntual que forma una capa limite termoquímica en las cercanías de la fuente térmica Q.



Figura 30. Desplazamiento térmico, a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=512, Pr=2.5, At=0.01, Fr=1, Pe=10, St=10, x_0=(0.5, 0.75), (2\epsilon)^{1/2}=0.5 y $\Delta t=1x10^{-5}$.

De hecho nuestros experimentos numéricos mostraron la capa de fluido calentado permanece esencialmente estática hasta que a un número de Rayleigh finito critico que según Sparrow es del orden de 1800 [69,70], que una vez alcanzando induce un repentino y natural ascensión de termales debido a los movimiento convectivos. Esto confirma que el fluido estacionario es inestable a perturbaciones de magnitud finita impuestas en el sistema de ecuaciones no lineales usado.

Los resultados de la Figura 30 ilustran que los termales ascienden a velocidad constante pero en el curso de su ascenso se da un balance ante las fuerzas viscosa y de flotación que les causa una traslación a velocidad constante U_c fijada por la influencia de la flotación en el sistema y contabilizada por el número adimensional de Rayleigh, y las escalas de temporales de difusión del momento y del calor. Así el flujo observado es una consecuencia de la selección y control de dos parámetros adimensionales *Ra* y *Pr*.

4.6.2 Plumas térmicas ascendentes (starting thermal plumes), laminares y oscilatorias

La diferencia entre un jet y una pluma térmica reside en el hecho de que para los primeros hay una fuente puntual de momento y para las segundos una fuente térmica impulsiva. La anatomía de una pluma térmica laminar se muestra en la Figura 31.



Figura 31. Anatomía de una pluma térmica laminar.

En esta el característico anillo de vorticidad se muestra en la Fig. 31, el anillo de vorticidad que se desarrolla en la cabeza mientras su base esta menos enrollada, a este a veces se le conoce como el lóbulo.

Para estas plumas ascendentes (starting thermal plumes) una capa de fluido adyacente a una fuente puntual de flotación es abruptamente calentada incrementando su temperatura en las cercanías de una fuente térmica por una cantidad δT localizada en x_0 , con las mismas ecuaciones usadas antes (Ecs. 55.2-55.4, 57 y 58). En la Fig. 32 se muestra el campo vectorial de velocidades que es una técnica muy usual para mostrar el mismo asociado a los procesos de transferencia de calor [70].



Figura 32. Campo vectorial de velocidades. Nx=128, Ny=256, Pe=10, St=10, Pr=100, At=0.01, Re=41, r=0.95, Fr=1, We=205, $x_n=(0.5, 0.97), (2\epsilon)^{1/2}=0.1, \Delta t=1x10^{-5} v t=2.35.$

Ya hemos mencionado antes que a un número de Rayleigh critico para la capa de fluido cercana a la fuente Q esta se vuelve entonces inestable y se rompe produciendo el ascenso de una pluma térmica. Para estas plumas térmicas ascendentes hallamos que las variaciones de la densidad es esencial para el desarrollo de la instabilidad convectiva. Así, las parcelas de fluido calentada menos densas ascienden por flotación mientras que las parcelas de fluido denso descienden liberando energía potencial que alimenta la inestabilidad del flujo inestable. Es de esta manera que la inestabilidad adquiere energía para el crecimiento a las perturbaciones de la energía potencial que se acumula en el sistema por la gradientes térmicos de densidad entre las superficies de iso-densidad [66-70]. Para el ascenso de plumas térmicas varios factores son importantes para fluidos viscosos incomprensible binario (Figs. 32 y 33): fuerza de flotación, torque baroclínico ($\frac{1}{\rho^2} \nabla \rho \times \nabla p$), fuerzas

gravitacionales y fuerzas viscosas cuya interacción mejora en última instancia el transporte de vorticidad y la formación del anillo de vorticidad.

El paso temporal se eligió de manera que la compleja evolución temporal de la interfaz se pudiera capturar apropiadamente, la oscilación de la pluma térmica como se observa **en la película movie17.avi en el material suplementario entregado y cotejado por la**

Coordinación del PCeIM. La fase de color más oscura en las imágenes es del fluido más denso. El dominio computacional es $\Omega = [0, 1] \times [0, 2]$. Las condiciones de Neumann se usaron para las paredes del canal para la presión y periódicas en la dirección horizontal, v=0 en las paredes. En las paredes se fijó $\theta_1 = \theta_2 = 0$ (FST) (Figs. 32 y 33). La flotación y ascenso de la pluma térmica es fácil de entender la diferencia de temperaturas que existe en el campo de flujo. En los experimentos numéricos de un fluido binario con un gradiente de densidad gravitacionalmente estable y con un calentamiento impulsivo en la zona media del canal (fuente puntual representada por una Gaussiana distribuida). Estas simulaciones se hicieron son diferentes razones de razones de coeficientes térmicos y números de Grashof para examinar el efecto de la magnitud de la flotación en la dinámica de la dinámica de las plumas térmicas. La formación del anillo de vorticidad asociado se presenta en las Figs. 33 a)-d) (Confróntese experimentos numéricos presentados con los experimentos reportados en la Ref. 67). La Fig. 32 muestra el campo vectorial asociado al flujo en celdas convectivas para los fluidos viscosos considerados. Las plumas convectivas viscosas mostradas en las Figs. 33 d)-f) para los dos fluidos muestran que la circulación interna juega un papel fundamental en el movimiento de la pluma ya que esta al realizar el transporte de material a la cabeza y de calor evitando el enfriamiento del fluido frió que le rodea. Este complejo flujo de plumas térmicas ascendentes mostró que las formas bien definidas de la cabeza y del anillo dependen del balance de fuerzas que está implícito en el número Rayleigh (Fig. 33 d)-f)).

En este caso se observó oscilaciones en el desarrollo del anillo de vorticidad que es usual en régimen de transición para plumas convectivas toda vez que el número de Rayleigh alcanzó valores cercanos a 1×10^5 . Este comportamiento oscilatorio (*puffing*) caracteriza la formación y convección de la vorticidad en las cercanías de la pluma térmica.

Así podemos ver que el torque baroclínico dominó el transporte de vorticidad en los fluidos empleados cuya diferencia de densidades ocasionó el desalineamiento entre los gradientes de densidad y presión. El *puffing* se debe al transporte de vorticidad que ocasiona el enrollamiento del lóbulo **en la película movie17.avi en el material suplementario entregado y cotejado por la Coordinación del PCeIM**, y que se originas por el desacoplamiento entre el termino de la flotación composicional asociada al número de Froude y la flotación térmica causan la oscilación de toda la pluma. Y esto porque cuando Q disminuye (Eq. 58) -debido al término sinusoidal en *Q*- el gradiente de densidad gravitacionalmente predomina sobre ésta.



Figura 33. Evolución de ϕ , a diferentes tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=256, Pe=10, St=10, Pr=100, At=0.01, Fr=1, $x_0=(0.5, 0.97)$, $(2\epsilon)^{1/2}=0.1$ y $\Delta t=1x10^{-5}$. Para a)-d) Re=41, r=0.95, We=205. a) t=0, b) t=0.5, c) t=1 y d) t=2.85. e) Re=21.0, r=0.9, We=104.7, t=3. f) Re=29.0, r=0.95, We=144, t=3 (*Confróntese experimentos numéricos presentados con los experimentos reportados en la Ref.* 67).

4.6.3 Influencia en el inicio y desarrollo de la inestabilidad convectiva debido a una fuente de calor móvil puntual, a una fuente lineal con inclinación fija e inclusive para una fuente de calor lineal rotatoria

Independientemente del hecho de que existen incontables sistemas ingenieriles para los que una fuente de calor móvil es de la mayor importancia no existe a la fecha un método numérico definitivo que pueda dar una respuesta universal a este problema. Uno de los primeros acercamientos analíticos al tema lo debemos a Rosenthal para una fuente calor puntual, lineal o in plano, las que sin embargo entrañan una singularidad local a la misma fuente de estas toda vez que son de carácter impulsivo y en su fuente o muy cercanas a estas dan valores poco realistas de la temperatura. Para resolver esta cuestión desde los estudios de Rosenthal muchos trabajo analíticos y numéricos han dado distintas soluciones. Tan recientemente como el 2013 Pham adoptó un acercamiento numérico para una fuente de calor móvil para resolver la ecuación de estado casi estacionaria de Rosenthal (que aparece en su versión adimensional en la Ec. 59) por medio de el método de Galerkin de elementos libres sin malla para curar las dificultades que se encuentran en las soluciones analíticas de Rosenthal [71].

$$-\frac{\partial\theta}{\partial x} - \Delta\theta - Q = 0 \tag{59}$$

Resulta obvio sin embargo mencionar que las soluciones halladas al resolver la Ec. 59 es valida solo en el estado cuasi-estacionario, por lo que, estas no son apropiadas de usar cualquier experimento numérico donde la formulación transitoria de la temperatura es deseable. Sin embargo una característica común de fuentes impulsivas de calor por funciones delta aproximadas dado sus resultados numéricos son mejores para casos experimentales. Por lo que el uso de fuentes puntuales se han tratado como fuentes distribuidas como Gaussianas distribuidas de manera exitosa [71,72] (Fig. 29), un acercamiento que ya hemos usado en varias secciones previas para tratar fuentes de momento impulsivas, En pared impusimos condiciones de Robin degeneradas a Neumann (En la pared $\partial \theta / \partial n=0$ y $\theta_2 = \theta_1 = 0$). Las Gaussianas distribuidas ya las hemos empleado para este fin en las secciones 4.6.1 y 4.6.2.

Para estudiar la influencia de un fuente de calor móvil en el flujo de fluido utilizamos la fuente móvil dada por la Ec. 60 en las ecuaciones Ecs. 55.1-55.4 como una primera aproximación a conjunto completo de Ecs. 55.1-55.6.

Entonces para una fuente puntual que se mueve periódicamente en la Ecs. 55.1-55.4 la Ec. 60:

$$Q = \frac{1}{\text{Re}} \left(1 + \sin(St \ t) \right) \ \delta(x - w_1 (1 + w_2 \cos(w_3 t))) \\ \delta(y - w_4 (1 + w_5 \cos(w_3 t)))$$
(60)

donde w1 y w4 son las posiciones originales de la fuente ($\mathbf{x_0}=(w_1,w_4)$), w_2 , w_5 y w_3 permiten controlar el movimiento de la fuente: amplitud de su desplazamiento (w_2,w_5) y frecuencia de movimiento (w_3), sobre la línea: $y - w_4 = \frac{w_4 w_5}{w_1 w_2} (x - w_2)$ (Fig. 34).





Figura 34. Fuente puntual de calor móvil: a) Evolución de la interfaz a varios tiempos adimensionales, b) Contornos de las líneas de isovelocidad del flujo a varios tiempos adimensionales y c) Contornos de las isotermas fluctuantes (regiones ensombrecidas) del campo de flujo a varios tiempos adimensionales. Nx=128, Ny=256, Pe=10, St=10, Pr=100, At=0.01, Re=21.0, r=0.9, Fr=1, We=104.7, $x_0=(0.5,0.97), (2\epsilon)^{1/2}=0.1, w2=0.35, w3=St, w5=0.25, \Delta t=1x10^{-5}$.

Así mismo utilizamos un número de capilaridad modificado dependiente del campo de temperaturas adimensional, Ca, para flujos termocapilares que de acuerdo a Zeytounian [29] (Fig. 36) (Eq. 61):

$$Ca' = Ca\left(1 - \frac{Ma}{We}\theta\right) \tag{61}$$

donde Ma representa en número de Marangoni (Eq. 62):

$$Ma = \frac{\Gamma \,\delta T \, L_c}{\eta \kappa} = \frac{\frac{d\sigma}{dT} \int_{T=T_0}^{\infty} \delta T \, L_c}{\eta \kappa}$$
(62)

Es así que bajo la acción de una fuente impulsiva móvil de calor la interfaz del fluido evoluciona de una manera compleja mostrando la forma característica de la interfaz ligada a las ondas térmicas que se reportan para las oscilaciones de lente térmico [1] (Fig. 35). La fuente puntual de calor en el movimiento del fluido produce en su movimiento la magnitud relativa de interacción e influencia entre las parcelas de fluido caliente y frío (Fig. 34 b) y c)).



Figure 35. Vista de la influencia de la dependencia de evolución temporal de al interfaz de la tensión superficial a t=2.5, Ma=0.9We. Correspondiente al movimiento de una fuente puntual de la Figura 36.

El uso de una fuente puntual radica en nuestro deseo de estudiar el mecanismo esencial detrás de las oscilaciones de lente térmico. Dado que el flujo de liquido inducida por la interacción con la luz se origina por la modificación del índice de refracción usando en una deflexión periódica de la trayectoria del láser, utilizamos una distribución Gaussiana con un extremo fijo (0,w1), que puede rotar con una frecuencia α y con centro sobre la línea $y - w_1 = \tan \alpha \cdot x$ cuya evolución se gobierna por la Ec.63 (Fig. 36) en las ecuaciones Ecs. 55.1-55.4.

$$Q = \frac{1}{\text{Re}}\cos(St\ t)\delta(y - w_1 - x \bullet \tan(\alpha \bullet \sin \alpha\ t))$$
(63)



Figura 36. Primera aproximación a la deflexión del la trayectoria del láser. Fuente de calor lineal y rotatoria con un extremo fijo en (0,w1), con frecuencia angular $\dot{\alpha}$ y centro sobre la línea $y - w_1 = \tan \alpha \bullet x$. a) Evolución de ϕ . Nx=128, Ny=256, Pe=10, St=60, Pr=100, At=0.01, Fr=1, Re=6.5, r=0.95, We=0.6, $\mathbf{x}_0=(0.5, 0.97)$, (2 ϵ)^{1/2}=0.05 y $\Delta t=1 \times 10^{-5}$: a1) Fuente de calor lineal con: a1) Ángulo fijo de $\alpha=10^{\circ}$, t=0; a2) Ángulo fijo de $\alpha=10^{\circ}$, t=1.32; a3) $\alpha=40^{\circ}$, $\dot{\alpha}=2.5$, t=0.105; a4) $\alpha=30^{\circ}$, $\dot{\alpha}=2.5$, t=0.105. b) Imagen de la fuente de calor lineal angulada con un extremo fijo. c) Varios ángulos iniciales (α) para la fuente de calor lineal a t=0 en el dominio [0,1]x[0,2].

Este calentamiento localizado generó gotas prolatas mostradas (Fig. 36).

4.6.4 Oscilaciones de Lente térmico: estados caóticos y cuasiperiódicos

En las secciones previas hemos observado que la inestabilidad convectiva se desarrolla cuando un forzamiento presentado por δT se eleva sobre un cierto nivel que le permite prevalecer sobre los efectos disipativos (difusividades térmicas y viscosas). El número de Rayleigh critico (Ra_{cr}) que dispara el inicio de la inestabilidad con una perturbación finita produce una bifurcación de la solución hacia un atractor extraño el ele fenómeno de oscilaciones de lentes en el régimen caótico y cuasi- periódico como resaltado de utilizar en la descripción del sistema de fluidos un sistema dinámicos altamente disipativo capaz de

una ruta hacia el caos y la turbulencia a través de varias bifurcaciones donde los volúmenes arbitrarios en el espacio fase contraen a cero a tempos largos.

Para los sistemas hidrodinámicos el estado caótico es originado por el incremento de un parámetro de control (usualmente Re o Ra, que representa la razón de la excitación a al disipación en el sistema), produciendo un comportamiento irregular que continua por periodos largos incluso para condiciones externas constantes debido al decrementos de la escala de disipación presente. Esta tendencia se ha visto para todas las inestabilidades estudiadas en las secciones previas que dependían de un parámetro de control que fijaba una escala de separación entre la excitación y la disipación [73-80].

La aparición de un lente térmico inicia con el calentamiento local que se induce por un rayo láser en un líquido con elevada absorbancia. Alrededor del eje del rayo láser se genera una distribución de temperaturas radial con la consecuente modificación del índice de refracción del medio que se vuelve función del cambio de temperatura local, creándose así en el fluido un lente para el rayo láser cuyo haz es difractado, modificándose en función del campo de temperatura el índice de refracción y modificando con el lente así formado, a su vez, el patrón de flujo y la posición de la fuente térmica. Como resultado del mencionado calentamiento localizado del fluido este es menos denso en la cercanía del eje del rayo láser y debido a la absorbancia continuada del fluido los fotones absorbidos se convierten en calor y una pluma térmica se eleva hasta alcanzar la interfaz mientras simultáneamente ocurre un proceso convectivo en el fluido. Por el efecto Marangoni las fuerzas capilares debidas a la tensión superficial que impulsan el fluido caliente lejos de la zona en que se encontraba originalmente la cabeza de la pluma térmica. A la vez en la zona de calentamiento del láser el fluido frío sustituye al fluido desplazado por la pluma térmica. Este proceso repite una y otra vez debido al acoplamiento de osciladores térmicos no lineales que interaccionan débilmente [7] deformando la interfaz (o superficie libre), que oscila a merced de la retroalimentación que se da entre el calentamiento y el flujo del fluido dando lugar a la llamada oscilación de lente térmico [9,11-13]. En el campo de los fenómenos no lineales el estudio de los sistemas luz-fluido ha dado lugar a una extensa literatura en el intento de comprender la formación, evolución y regímenes que se presentan durante el fenómeno de oscilaciones de lente de térmicos [1]. El fenómeno lente de térmicos tiene variadas aplicaciones por la aparición de fenómenos temporales no lineales: estudio de las propiedades ópticas y térmicas de nanopartículas en solución, determinación de impurezas en soluciones de materiales orgánicos, espectroscopia de soluciones micelares e inclusive el estudio de patrones espaciales complejos en fluidos [2-6].

Adicionalmente debe considerarse que para fluidos con partículas suspendidas, en los que se presenta el fenómeno de lente térmico, se da la difusión de partículas en el fluido en función de la temperatura, proceso que se conoce como efecto de Soret (o *termofóresis*) que puede ser relevante para algunos casos [5], pero que para los casos considerados aquí no lo es [81].

A todos estos procesos no lineales -incluyendo el de la termofóresis- se añaden varios más: la viscosidad del fluido es una función de la temperatura afectando así la difusión del momento; análogamente la conductividad y el calor específico del fluido afectan la difusión térmica pues son funciones de la temperatura. De todo lo anterior se desprende que para estos fluidos se dan procesos difusivos altamente no lineales (Fig. 39).



Figura 39. Diagrama esquemático del fenómeno de lente térmico.

Es así que el modelaje y el estudio numérico del proceso es a la fecha un reto ya que este solo puede ser descrito por un conjunto de ecuaciones acopladas extremadamente no lineales, por lo que distintos acercamientos se han seguido para esclarecer la influencia de los distintos procesos en la aparición y evolución del fenómeno observado, de los cuales los abajo señalados son representativos de éstos:

- 1. Brovko y colaboradores [16] resolvieron numéricamente un conjunto de ecuaciones unidimensionales no estacionarias con parámetros ajustables para resolver las oscilaciones de lente térmico, cuyos resultados dependen al menos en cierta medida de la inclusión de un término de forzamiento caótico cuyo origen no resulta del todo claro, sobre todo porque la presencia de ruido induce un efecto de enmascaramiento en la distribución de probabilidad que caracteriza la dimensionalidad del atractor. Por lo que la respuesta proviene linealmente del forzamiento. Además, el conjunto de parámetros y ecuaciones no dependen explícitamente de las propiedades físicas del fluido y que resultan fundamentales para la aparición del fenómeno [2-6]. Similarmente no hay una dependencia de las características de la fuente de luz láser, por ejemplo de la potencia toda vez que ésta ha sido reportada como esencial para producir distintos estados dinámicos observados [1,3,8-13]. En este estudio no se incluye en forma alguna la tensión superficial cuya interacción con la pluma térmica generada por el calentamiento del láser es el origen de la inestabilidad hidrodinámica observada [1,3].
- 2. Rybak y colaboradores [17] han propuesto un modelaje del fenómeno de lente térmico con la ecuación advectiva y no estacionaria de la energía sin disipación [13].

- 3. Una mejora al anterior acercamiento anterior se debe a Thorne y colaboradores quienes resolvieron numéricamente un par de ecuaciones acopladas: la ecuación de la energía no advectiva y no estacionaria sin disipación junto a la ecuación del cambio del índice de refracción en función de la temperatura. Asumiendo erróneamente que la advección en el transporte de energía no es relevante en el fenómeno de lente térmico justo cuando se ha reportado todo lo contrario [1]. Por lo mismo este modelo y simulación numérica no puede resolver apropiadamente la forma y la posición misma de la interfaz [18,19].
- 4. Taranenko resolvió numéricamente una ecuación de conservación del momento *linealizada*, acoplada a la ecuación advectiva de la energía sin disipación [20]. En este estudio no toma en cuenta efectos viscosos. Por lo anterior se ha omitido cualquier efecto no lineal, desestimando también la importancia de la convección natural así como cualquier contribución de las fuerzas capilares (tensión superficial) en la ecuación de conservación del momento.
- 5. El estudio de las oscilaciones de lente térmico es mejor descrito desde el campo de sistemas dinámicos altamente disipativos cuyo marco teórico es capaz de describir las regiones y aún las transiciones entre sus distintos estados dinámicos: periódicos, cuasi-periódicos y caóticos [9,13]. El modelo desarrollado por Gouesbet y colaboradores es espacialmente relevante pues se basa en la caracterización del fenómeno a través del establecimiento de la condición de estabilidad marginal, es decir de las transición entre el estado de flujo estable al inestable⁵.

Para modelar y entender como se presenta el fenómeno de oscilaciones de lente térmico Gouesbet [12] propuso un modelo simple dentro del marco de sistemas no lineales altamente disipativos. Pero en el fondo este modelo es tan fenomenológico como el de Chikishev [12], **al punto que Gouesbet y colaboradores reconocen ser muy arbitrario y sin fundamento físico** [12]. Otros trabajos son de carácter cualitativo mas bien que analíticos o numérico [9]. Rybak se basa solo en una ecuación de conservación del momento unidimensional [17]. Mientras que Thorne acopla ecuaciones unidimensionales del calor y de la evolución temporal del índice de refracción [18]. Pero el modelo de Thorne elimina los efectos convectivos y advectivos que son fundamentales en el desarrollo de la evolución la inestabilidad convectiva asociada al fenómeno de oscilaciones de lente térmico [1].

⁵ Cabe destacar que la inestabilidad se origina por medio de una perturbación infinitesimal -inestabilidad lineal- o finita -inestabilidad no lineal al estado base del flujo. Al darse la inestabilidad la perturbación que modifica el flujo ésta se incrementa exponencialmente en amplitud en el dominio del tiempo.



Figura 40. Oscilaciones de lente térmico. A) Oscilaciones verticales de la posición de la fuente. Nx=128, Ny=256, Pe=10, St=10, Pr=100, At=0.01, Fr=1, $\mathbf{x_0}$ =(0.5,0.97), [0,1]x[0,2], (2 ϵ)^{1/2}=0.1 r_x=r_y=1 y Δ t=1x10⁻⁵: a) Re=41, r=0.95, We=205; b) Re=20.5, r=0.95, We=102; c) Re=20.5, r=0.95, We=0.205. Mapas del espacio fase (b) y c)) mostrando las posiciones horizontal y vertical de la fuente en el intervalo de tiempos adimensionales, t \in [0,4.5]. Nx=128, Ny=256, Pe=10, St=10, Pr=100, At=0.01, Fr=1, $\mathbf{x_0}$ =(0.5,0.97), [0,1]x[0,2], (2 ϵ)^{1/2}=0.1, r_x=1, We=0.003, Ma=0.9We y Δ t=1x10⁻⁵:B) Comportamiento periódico, Re=0.324, r=0.95, r_y=6.706 y C) Comportamiento Caótico, Re=0.324, r=0.95, r_y=6.0.

En tanto Taranenko [20] utiliza inapropiadamente un termino de flotación por el de las fuerzas de Marangoni en su ecuación de conservación del momento al lado de la ecuación de la energía unidimensionales. Para el que empleamos las Ecs. 55.1-55.6 y la Ec. 58, pero esta última escalada por 0.05/Re en vez de 0.5/Re, para modelar las oscilaciones de lente térmico considerando que para fuentes altamente absorbentes toda la energía absorbida por la muestra se transforma en calor (Fig. 40).

Los resultados mostrados en la Fig. 40 A) muestra las oscilaciones verticales de la fuente en Y cuando la convección supera cualquier influencia de la tensión superficial (Véase la película movie19.avi, movie20.avi y movie21.avi en el material

suplementario ya entregado y cotejado por la Coordinación del PCeIM), para los que los parámetros de control determinaron que x_c fuese 0.5 a lo largo de las simulaciones.

En las paredes se fijó $\theta_1=\theta_2=0$ (FST) en la Fig. 40 A) $\theta_{TOP}=\theta_{BOTTOM}=0$ y para la Figs. 40 B) y C) $\theta_{TOP}=0$ y $\theta_{BOTTOM}=0.9$.

Notablemente los resultados en las Figs. 40 B) y C) retratan el estado instantáneo del sistema para valores fijos de los parámetros de control (los números adimensionales: *St, Re, At, Fr, We, r, Pr, Pe, r_y* y r_x) que representan un punto el espacio fase n-dimensional (n=6) con coordenadas: $u, v, \theta, \phi, y_c y x_c$, dado que esta irregularidad en el patrón de flujo es la manifestación de una instabilidad hidrodinámica en un sistema determinístico dado por las Ecs. 55.1-55.6 (*caos determinístico*). La evolución del sistema luz-fluido es ejemplificado por los retratos fase de las trayectorias de la posición del centro de la fuente (Figs. 40 B) y C)).

El sistema de fluidos binarios con interfaz estudiado aquí utilizando el método de campo de fase evolucionó en los estados periódicos y caóticos (Figs. 40 B) y C)) [1]. Adicionalmente, estos resultados muestran la retroalimentación que fija en los sistemas luzfluido la aparición de oscilaciones de lente térmico en un oscilador no lineal que se ajusta inmediatamente al patrón de flujo dirigiendo el movimiento del centro de la fuente térmica para el que el parámetro de control r_y juega un papel crítico. De hecho la única diferencia entre los estados caóticos y cuasi-periódicos reportados reside en el valor dado a r_v . Esto no significa que r_x juega un papel fundamental en la evolución temporal de la oscilación de lente térmico. Lo que significa es que el parámetro de control r_y fija la escala de longitud asociada a la medida en que los efectos termocapilares influencian el cambio de posición de la fuente, así r_v define por si mismo una escala dinámica para la retroalimentación entre el flujo convectivo y el flujo ocasionado por efectos termocapilares en la inestabilidad convectiva asociada a las oscilaciones de lente térmico. Además, al fijar las condiciones iniciales de las coordinadas u, v, θ , ϕ , y_c y x_c , en t=0 es evidente que un sistema luz-fluido es un sistema en la que la solución es extremadamente sensible a las condiciones iniciales (Fig. 40).

Así, la Fig. 40 B) retrata un cuasi-periódico mientras la Fig. 40 C) muestra un atractor extraño. En las Figuras 41 B)-C) observamos dos estados distintos de organización entre los osciladores formados por las parcelas de fluido frío y caliente demostrando los estados cuasi-periódico y caótico se gobierna por las posiciones de la fuente (x_c, y_c) [1].

4.6.5 Modificaciones al flujo debido a las contribuciones de pequeña escala en la inestabilidad convectiva: Efecto Pistón

Para estudiar de manera más precisa la inestabilidad convectiva usamos una fuente fija lineal parara la que las condiciones en la pared fueron $\partial T/\partial n=0$ y T₂=T₁=T₀) para crear una zona de ajuste rápido en las cercanías de la pared creando una inhomogeneidad en el flujo que sigue la evolución del campo de temperatura [73-80]. Y que para el efecto pistón o termo acústico a bajos números de Mach puede tratarse el fluido de interés como débilmente compresible, y que he resulta en la novedosa aparición de este fenómeno para fluidos incompresibles, pero cuyo origen no resulta del todo claro [79,80]. Así las fluctuaciones en la vorticidad y de la fuerza de flotación debido a gradientes térmicos modulados en la capa limite cercana a la pared mostraron ser grandemente afectadas por las contribuciones de pequeña escala Eq. 64:

 $Q = \cos(\omega t) \,\delta(y - wl) \tag{64}$

usada para describir los procesos de calentamiento y enfriamiento asociados al acoplamiento entre las parcelas de fluido frías y calientes. El centro de la distribución Gaussiana para la función delta está en la línea y=w1.

4.6.5.1 Locación espacialmente fija de una fuente de calor lineal

Cuando la advección de la posición vertical del láser no se toma en cuenta (Ecs. 55.1-55.4) podemos estudiar perturbaciones bidimensionales periódicas en el tiempo y en el tiempo (Ec. 64) con amplitud normales (Fig. 37). *Q* mueve la interfaz fluido-fluido una distancia finita (Véase la película movie18.avi en el material suplementario ya entregado y cotejado por la Coordinación del PCeIM). Así, la perturbación es originalmente oscilatoria originando el desplazamiento vertical del fluido hasta que esta inicia un crecimiento exponencial de la perturbación (Fig. 37 b)).



Figura 37. Inestabilidad baroclínica afectada por las contribuciones de pequeña escala. a) Evolución de ϕ . Nx=128, Ny=256, ρ_0 =1000 kgm⁻³, $(\rho - \rho_0)/\rho_0 = 0.01$, g=10 ms⁻², $\alpha = \beta = 100$, M=0.001 mol m²J⁻¹s⁻¹, $\kappa = 0.01$ m²s⁻¹, $\nu = 0.01$ m²s⁻¹, r=0.95, $\omega = 60$ s⁻¹, Feunete de calor lineal fija horizontalmente a w₁=0.097 m, (2 ϵ)^{1/2}=0.005 m y $\Delta t = 1$ x10⁻⁵ s, [0,0.1]x[0,0.2] m². b) Torque baroclinico normalizado por su valor máximo.

El acoplamiento entre las diferentes escalas de tiempo en el problema causa un retraso entre el gradiente de densidad y el gradiente de presión en la interfaz debido al forzamiento y la inercia de los fluidos que se mueven en direcciones opuestas como resultado de la interacción entre la flotación térmica y composicional. Esto origina una producción de vorticidad, esto es una fuente de vorticidad, conocida como producción baroclínica de vorticidad. La baroclinicidad del fluido se mide por el torque baroclínico $\frac{1}{\sigma^2} \nabla \rho \times \nabla p$ (Fig. 37

b)) el cual fija la condición critica para las perturbaciones impuestas lejos de la pared en la corriente libre para la receptividad de la capa límite [73-80].

Así, la baroclinicidad del flujo toma un papel central en la producción de vorticidad dado que las perturbaciones impuestas en la corriente libre tienen que transferir energía para el movimiento no estacionario de la corriente libre. Las perturbaciones impuestas en la corriente libre originan ondas oscilatorias no se propagan del todo corriente abajo en el inicio del flujo debido al amortiguamiento de las fuerzas difusivas pero una vez que se ha dado una suficiente propagación de las mismas en el flujo aparecen en la dirección vertical una inestabilidad conectiva que crece exponencialmente (Fig. 37 b)) debido la interacción de éstas y la capa límite por el fenómeno de receptividad como resultado de una combinación apropiada de frecuencia y longitud de onda, así como de la posición de la interfaz y de la fuente (Figs. 37 a) y b)).

El rápido crecimiento de la perturbación alcanza su máximo en el tiempo t=0.33 s con una velocidad de 6.4 m/s (Fig. 37 b) y *Detalle*).

Sin embargo como el flujo en la dirección vertical está limitada por las paredes las que causan una reducción una vez que la pluma se acerca a la pared (t>0.33 s). Esto permite que aparezcan perturbaciones al flujo en la dirección horizontal que modifican la retroalimentación entre las ondas cerca de la pared y las ondas que viajan en el flujo como resultado de la fuente lineal de calor. Estas ondas en la dirección horizontal se superponen a las ondas que alimentan la inestabilidad convectiva en la dirección vertical. Adicionalmente este rápido crecimiento de las perturbaciones ocasiona que el calor de la fuente sea arrastrado por el fluido circundante muy a la manera de los termales (*Ver* Sección 4.6.1) donde la ruptura del tallo o cola impide que la fuente de flotación siga alimentando de calor y material caliente al termal, pero a diferencia de estos últimos la velocidad no se estabiliza si no que crece exponencialmente hasta que la pluma térmica formada golpea súbitamente la pared. Por lo que estas perturbaciones en sentido horizontal modifican el desarrollo de la inestabilidad y así el conjunto de los mecanismos difusivos en el fluido, representados por los varios términos difusivos en las ecuaciones no lineales empleadas decae correspondientemente rápido siguiendo la ruta de flujo estable supercrítica (t>0.33 s).

4.6.5.2 Modificación a los efectos de pequeña escala en la inestabilidad convectiva asociada a la transferencia de calor termoacústica por convección vertical ascendente y descendente de fluido

Para verificar la compleja interacción encontrada ya que por el propio desplazamiento en sentido vertical ascendente y descendente de la interfaz y de las perturbaciones impuestas

por la fuente térmica en el flujo y considerando que por hallarse las mismas en cualquier lado de región fuente de las perturbaciones (Q) analizamos la posibilidad de que en caso de que estas inestabilidades viajaran en ambos sentidos la respuesta vertical ascendente pudo ser descendente y decidir si la solución está compuesta por una combinación de ambas permitimos que la fuente fuera convectada por el flujo, dado que al ser modificada en su posición vertical w1 las interacciones de la receptividad en la pared y las perturbaciones en la corriente libre alterarían sus influencias relativas [78].

Por lo que para estos experimentos numéricos utilizamos las Ecs. 55.1-55.5 de donde concluimos que la solución a la manera de las ondas de Tollmien–Schlichting se forma por ondas que viajan en ambos sentidos y la dirección de desarrollo de la inestabilidad es una función compleja del reajuste en al pared, la receptividad de la capa límite, la amplitud, frecuencia, la posición de la fuente de la perturbación y de la dirección de la perturbación que pueden actuar con los ajustes hallados cooperativamente por efectos de pequeña escala [78] (Fig. 38).



Figura 38. Influencia del movimiento de la fuente en la dirección de desarrollo de la inestabilidad, K=ky (Ec. 55.5). Correspondiente a una fuente de calor lineal impulsiva con los parámetros del experimento de la Fig. 39, t=0.345 s a amenos que se especifique otra cosa.

Capítulo 5. Conclusiones

En este trabajo pudimos estudiar numéricamente inestabilidades hidrodinámicas de amplitud finita (no infinitesimales y que requieren por tanto el empleo de las ecuaciones no lineales completas) para fluidos multifásicos newtonianos de viscosidad y movilidad constantes mediante el método de campo de fases en flujos con diferencia de densidades entre ellos guiados por:

- Fuerzas gravitacionales constantes
- Fuerzas gravitacionales variables (modulada e impulsiva)
- Variaciones térmicas

El sistema de ecuaciones no lineales acopladas resultante se resolvió utilizando la transformada rápida de Fourier (*FFT*) mediante la librería de uso libre fftw3.3.3 al ligarla a un programa escrito en C++ para lo cual se usaron varios compiladores: *gcc* y *g*++ (versión 4.7.1 y que son de uso libre), Borland C++ 5.5 Free Command-line Tools (también de uso libre), Dev C++ versión 4.9.9.2, C++Builder 2009 (*RAD Studio 2009*) y Visual C++ (*Visual Studio*) 2005, 2008 y 2010 (*grashofbispimazSkaled.cpp*). Incluyendo programación en paralelo a través del estándar que representan OMP y PPL para éste último.

Complementariamente este desarrollo nos permitió el estudio de los procesos de descomposición espinodal y la evolución de dominios con condiciones periódicas y de Dirichlet homogéneas cuyo tratamiento es especialmente apropiado para la transformada discreta de Fourier (*DFT*) por su naturaleza periódica tanto 2D como 3D, a diferencia de las inestabilidades hidrodinámicas las que se estudiaron bidimensionalmente toda vez que acorde al teorema de Squire, *para cualquier perturbación tridimensional inestable le corresponde una bidimensional más inestable.*

Para la inestabilidad convectiva asociada a las oscilaciones de lente térmico confirmamos la existencia no sólo de regimenes cuasi-periódicos y caóticos al realizar el seguimiento del eje de la fuente láser previamente.

Para ésta última observamos la aparición de crecimientos exponenciales, evolución de flujos estables supercríticos (*secondary flow*).

Por otra parte, la transformada discreta de Fourier (*DFT*) permitió un procesamiento simple de los términos difusivos en el dominio de la frecuencia en las ecuaciones no estacionarias advectivas acopladas de Cahn–Hilliard, Navier–Stokes y energía sin disipación. Que junto a la restricción de incompresibilidad y las posiciones de la fuente horizontal y vertical nos permitió el modelaje exitoso de la inestabilidad convectiva asociada a las oscilaciones de lente térmico.

Estos resultados numéricos para la inestabilidad convectiva asociada a las oscilaciones de lente térmico son importantes dado que es imposible de lograr analíticamente, acuerda cercanamente a los resultados experimentales, el modelo se derivo de primeros principios y con base física, el modelo de ninguna forma utiliza un acercamiento fenomenológico, el modelo no posee ninguna función o parámetro ajustable sin justificación física "*ad hoc*", el modelo predice y controla la presencia patrones de flujo cuasi-periódicos y caóticos para inestabilidades inducidas por la interacción luz-fluido mediante el ajuste de los números adimensionales relevantes que fijan la evolución temporal de la inestabilidad convectiva asociada al fenómeno de lente térmico.

Agradecimientos adicionales

Agradezco a M. Frigo y S.G. Johnson por el proveer las últimas librerías de FFTW [50]. Agradezco al CONACYT por la beca para la obtención al grado de Doctor. Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM, IG100714 RG100714: La dinámica de objetos embebidos en un líquido cuando están sujetos a perturbaciones de flujos fuertes u ondas acústicas. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.

Referencias

- 1. E. Greenfield, C. Rotschild, A. Szameit, J. Nemirovsky, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, M. Saraf, E. Lifshitz, M. Segev. Light-induced self-synchronizing flow patterns. New J. Phys. 13 (2011) 053021, 1–12
- 2. M. Mashayekh, D. Dorranian. Size-dependent nonlinear optical properties and thermal lens in silver nanoparticles. *Optik* 125 (2014) 5612–5617
- Y. Enokida, T. Kakudo, A. Suzuki. Application of Laser-Induced Thermal Lens Oscillation to Concentration Measurement in Organic Solutions, J. Nuclear Sci. Tech. 29 (3) (1992) 255-262
- 4. L. Rodriguez, R. Escalona. Fourier transforms method for measuring thermal lens induced in diluted liquid samples. *Optics Comms.* 277 (**2007**) 57–62
- J. Georges, T. Paris. Influence of the Soret effect on the analytical signal in cw-laser thermal lens spectrometry of micellar solutions. *Anal. Chim. Acta* 386 (1999) 287– 296
- 6. E. Braun, L. P. Fauche, X. A. Libchabe, D. W. McLaughli, D. J. Muram, M. J. Shelley. Filamentation and Undulation of Self-Focused Laser Beams in Liquid Crystals. *Europhys. Lett.* 23 (4) (1993) 239–244
- 7. A. Pikovsky, M. Rosenblum, J. Kurths. Synchronization: A Universal Conceptin Nonlinear Sciences. Cambridge University Press, New York, **2001**
- V. Y. Bazhenov, M. V. Vasnetsov, M. S. Soskin, V. B. Taranenko. Dynamics of Laser-Induced Bubble and Free-Surface Oscillations in an Absorbing Liquid. *Appl. Phys. B* 49 (1989) 485–489
- Y. Martín-Biosca, G. Ramis-Ramos, C. Rozé, L. Le Sceller. Analytical Study of the Thermal Induced Oscillations Known as Heartbeats. *Microchemical J.* 58 (1998) 80–89
- C. Roze, G. Gouesbet, R. Darrigo. Oscillatory instabilities produced by heat from a temperature-controlled hot wire below an interface. J. Fluid Mech. 250 (1993) 253– 216
- 11. G. Gouesbet, C. Rozé, S. Meunier-Guttin-Cluzel. Instabilities By Local Heating Below an Interface. J. Non-Equilib. Thermodyn. 25 (2000) 337-379
- 12. G. Gouesbet. Simple model for bifurcations ranging up to chaos in thermal lens oscillations and associated phenomena. *Phys. Rev. A* 42 (10) (**1990**) 5928–5945
- 13. G. Gouesbet, E. Lefort. Dynamical states and bifurcations of a thermal lens using spectral analysis. *Phys. Rev. A* 37 (12) (**1988**) 4903–4915
- 14. V. Trisaksri, S. Wongwises. Critical review of heat transfer characteristics of nanofluids. *Renewable Sust. Energy Revs.* 11 (2007) 512–523
- 15. X.-Q. Wang, A. S. Mujumdar. Heat transfer characteristics of nanofluids: a review. *Int. J. Thermal Sci.* 46 (2007) 1–19
- 16. O. O. Brovko, D. Valenti, S. I. Lebedenko, B. Spagnolo, A. Yu. Chikishev. Numerical Investigation of Optical Heartbeats with External Driving Forces. *Moscow Univ.Phys. Bull.* 65 (3) (2010) 180–183.
- 17. V. N. Alekseev, K. A. Naugol'nykh, S. A. Rybak. Instability of a liquid surface with laser heating. *Zhurnal Prikladnoi Mekhaniki i Tekhnicheskoi Fiziki*, 3 (**1991**) 28–34
- 18. S. J. Sheldon, L. V. Knight, J. M. Thorne. Laser-induced thermal lens effect: a new theoretical model. *Appl. Opt.* 21 (9) (**1982**) 1663–1669
- P. Kumar, A. Khan, D. Goswami. Importance of molecular heat convection in time resolved thermal lens study of highly absorbing samples. *Chem. Phys.* 441 (2014) 5–10
- V. Y. Bazhenov, M. V. Vasnetsov, M. S. Soskin, V. B. Taranenko. Self-oscillations of a liquid near a free surface during continuous local heating. *JETP Lett.* 49 (6) (1989) 376–379
- H. D. Ceniceros Angulo. Convergence of a Reformulated Boundary Integral Method for Two Fluid Interfaces with Surface Tension. Ph. D. Thesis, New York University, 1995
- 22. D. Jacqmin. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface. J. Fluid Mech. 402 (2000) 57–88
- 23. S. O. Unverdi, G. Tryggvason. A Front-Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-fluid Flows. J. Comp. Phys. 100 (1992)25-37
- 24. L. G. Leal. Advanced Transport Phenomena: Fluid Mechanics and Convective Transport. Cambridge University Press, New York, 2007
- 25. M. Frigo, S. G. Johnson. FFTW: an adaptive software architecture for the fft. *ICASSP Conf. Proc.* 3 (1998) 1381–1384.
- Walter S. Brainerd. Guide to Fortran 2003 Programming. Springer-Verlag, London, 2009
- 27. Prandtl's Essentials of Fluid Mechanics. H. Oertel (Ed.). Springer-Verlag, New York, 2004
- 28. P. G. Drazin. *Introduction to Hydrodynamic Stability*. Cambridge University Press, United Kingdom, Cambridge **2002**
- Mathematics of Complexity and Dynamical Systems. Robert A. Meyers (Ed.). Springer-Verlag, New York, 2009. D. M. Anderson, G. B. McFadden, A. A. Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. Annu. Rev. Fluid Mech. 30 (1998) 139–65
- 30. *Multiphase microfluidics: the diffuse interface model.* R. Mauri (Ed.). CISM, Udine, Italy, **2012**
- 31. J. D. Van Der Waals (1893): The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous density variation. Transl. J. S. Rowlinson, in J. Stat. Phys. 20 (1979) 197–244
- J. W. Cahn, J. E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system I. J. Chem. Phys. 28 (1958) 258–267
- 33. P. C. Hohenberg, B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.* 49 (3) (1977) 435–479
- 34. V. E. Badalassi, H. D. Ceniceros, S. Banerjee. Computation of multiphase systems with phase field models. *J. Comput. Phys.* 190 (2003) 371–397

- N. Moelans, B. Blanpain, P. Wollants. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution. *Comp. Coup. Phase Diags. Thermochem.* 32 (2008) 268– 294
- 36. D. E. Winterbone. *Advanced Thermodynamics for Engineers*. Arnold, Great Britain, **1997**
- 37. R. J. LeVeque. Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations. SIAM, Philadelphia, 2007
- 38. D. Jasnow, J. Viñals. Coarsegrained description of thermocapillary flow. *Phys. Fluids* 8 (3) (1996) 660–669
- 39. H. D. Ceniceros, R. L. Nós, A. M. Roma. Three-dimensional, fully adaptive simulations of phase-field fluid models. J. Comp. Phys. 229 (2010) 6135–6155
- 40. H. G. Lee, K. Kim, J. Kim. On the long time simulation of the Rayleigh–Taylor instability. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 85 (2011) 1633–1647
- 41. H. G. Lee, J. Kim. A comparison study of the Boussinesq and the variable density models on buoyancy-driven flows. *J. Eng. Math.* 75 (**2012**) 15–27
- 42. H. G. Lee, J. Kim. Numerical simulation of the three-dimensional Rayleigh–Taylor instability. *Comp. Math. Appl.* 66 (2013) 1466–1474
- 43. S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Clarendon Press, Oxford, **1961**
- 44. D. D. Joseph. Stability of fluid motions. Springer-Verlag, Germany, 1976
- 45. C. Canuto, A. Quarteroni, M. Y. Hussaini, T. A. Zang. Spectral Methods, Fundamentals in Single Domains. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany 2006
- 46. Sun, P., Liu, C., Xu, J.:Phase-field model of thermo-induced Marangoni effects in the mixtures and its numerical simulations with mixed finite element method. *Commun. Comput. Phys.* 6 (5) (2009) 1095–1117
- 47. Zeytounian, R.Kh., Convection in Fluids, Springer-Verlag, Dordrecht, 2009
- 48. Chert, L.Q., Shen, J.:Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations. Comp. Phys. Comms. 108 (**1998**) 147–158
- Ascher, U.M., Ruuth, S.J., Wetton B.T.R.:Implicit-explicit methods for timedependent partial differential equations. SIAM J. Numer. Anal. 32 (3) (1995) 797– 823
- 50. M. Frigo, S.G. Johnson. FFTW: an adaptive software architecture for the fft, *ICASSP Conf. Proc.* 3 (1998) 1381–1384
- 51. O. Wodo, B. Ganapathysubramanian. Computationally efficient solution to the Cahn–Hilliard equation: Adaptive implicit time schemes, mesh sensitivity analysis and the 3D isoperimetric problem. *J. Comput. Phys.* 230 (2011) 6037–6060
- 52. A.J. Bray. Theory of phase-ordering kinetics. Adv. Phys. 43 (3) (1994) 357-459
- 53. N.J. Zabusky. Vortex paradigm for accelerated inhomogeneous flows: Visiometrics for the Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov Environments. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 31 (1999) 495–536
- 54. A. Elgowainy and N. Ashgriz. The Rayleigh–Taylor instability of viscous fluid layers. *Phys. Fluids* 9 (1997) 1635–1649
- 55. A. Sedaghat, S. Mokhtarian. Numerical Simulation of Rayleigh-Taylor Instability. *Int J. Adv. Design Manuf. Tech.* 6 (1) (**2013**) 33–40

- 56. S.V. Garimella, J.E. Simpson. Numerical treatment of moving interfaces in phase change process. In: *Fluid dynamics at interfaces*, Eds. W. Shy and R. Narayanan, Cambridge University Press, Cambridge, **1999**
- 57. H.J. Kull. Theory of the Rayleigh-Taylor instability. *Phys. Rev. Lett.* 206 (5) (**1991**) 197–325
- 58. C. Pozrikidis. *Introduction to theoretical and computational fluid dynamics*. New York, Oxford University Press, **1997**
- 59. O. Lioubashevski, H. Arbell, and J. Fineberg. Dissipative Solitary States in Driven Surface Waves. *Phys. Rev. Lett.* 76 (21) (**1996**) 3959–3962
- 60. C. L. Goodridge, W. Tao Shi, H. G. E. Hentschel, D. P. Lathrop. Viscous effects in droplet-ejecting capillary waves. *Phys. Rev. E* 56 (1) (1997) 472–475
- 61. M. Perlin, W. W. Schultz. Capillary effects on surface waves. Annu. Rev. Fluid Mech. 32 (2000) 241–274
- 62. C. L. Goodridge, H. G. E. Hentschel, D. P. Lathrop. Breaking Faraday Waves: Critical Slowing of Droplet Ejection Rates. *Phys. Rev. Lett.* 82 (15) (1999) 3062– 3065
- 63. J. B. Pérez-Navarrete. Phase Field Type Computation on Thermals Dynamics. Int. J. Dynamics Fluids. 12 (1) (2016) 1–5
- 64. R. Krechetnikov. A linear stability theory on time-invariant and time-dependent spatial domains with symmetry: the drop splash problem. *Dynamics PDE* 8 (1) (2011) 47–67
- 65. A.B. Brailovsky, S.V. Gaponov, V.I. Luchin. Mechanisms of melt droplets and solid-particle ejection from a target surface by pulsed laser action. *Appl. Phys.* A 61 (1995) 81–86
- 66. N. Ashgriz (Ed.) *Handbook of Atomization and Sprays*. New York, Springer Science+Business Media, LLC, **2011**
- 67. N. Ribe, A. Davaille, U. Christensen, In: Mantle Plumes, Edited by J.R.R. Ritter and U.R. Christensen, Springer-Verlag, Berlin, **2007**
- 68. K.K. Tan, R.B. Thorpe. The onset of convection driven by buoyancy effects caused by various modes of transient heat conduction: Part I. Transient Rayleigh numbers. *Chem. Eng. Sci.* 54 (1999) 225–238
- 69. E.N. Sparrow, R.B. Husar, R.J. Goldstein. observations and other characteristics of thermals. J. Fluid Mech. 41 (1970) 793–800
- 70. D. J. Shlien, D. W. Thompson. Some experiments on the motion of an isolated laminar thermal. J. Fluid Mech. 72 (1) (1975) 35–47. M. Mitsuya, H. Hanai, S. Sakurai, Y. Ogami, H. Kobayashi. Droplet combustion experiments in varying forced convection using microgravity environment. Int. J. Heat Fluid Flow 26 (2005) 914–921. J. J. Hegseth. N. Rashidnia, A. Chai. Natural convection in droplet evaporation. Phys. Re. E 54 (2) (1996) 1640–1644. A. Onuki. Bubble and droplet motion in binary mixtures: Evaporation-condensation mechanism and Marangoni effect. Phys. Rev. E 79 (2009) 046311-1–046311-11
- 71. X.-T. Pham. Two-Dimensional Rosenthal Moving Heat Source Analysis Using the Meshless Element Free Galerkin Method. *Numer. Heat Transfer A* 63 (11) (2013) 807–823
- 72. R. N. S. Fassani O. V. Trevisan Analytical Modeling of Multipass Welding Process with Distributed Heat Source J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng. XXV (3) (2003) 302–305

- 73. M. E. Goldsetin, L. S. Hultgren. Boundary layer receptivity to long-wave freestream disturbances. Ann. Rev. Fluid Mech. 21 (1989) 137–166
- 74. P. G. Baines, S. J. Majumdar, H. Mitsudera. The mechanics of the Tollmien-Schlichting wave. J. Fluid Mech. 312 (1996) 107–124
- 75. A. H. Nayfeh and O. N. Ashour. Acoustic receptivity of a boundary layer to Tollmien-Schlichting waves resulting from a finite-height hump at finite Reynolds numbers. *Phys. Fluids* 6 (11) (**1994**) 3705–3716
- 76. N. Itoh. The origin and subsequent development in space of Tollmien-Schlichting waves in a boundary layer. *Fluid Dynamics Res.* 1 (1986) 119-130
- 77. P. Ricco, D.-L. Tran, G. Ye. Wall heat transfer effects on Klebanoff modes and Tollmien–Schlichting waves in a compressible boundary layer. *Phys. Fluids* 21 (2009) 024106-1–024106-18
- 78. M. E. Goldsetin, L. S. Hultgren. Boundary layer receptivity to long-wave freestream disturbances. Ann. Rev. Fluid Mech. 21 (1989) 137-166
- 79. A. V. Zyuzgin, A. I. Ivanov, V. I. Polezhaev, G. F. Putin, and E. B. Soboleva. Convective Motions in Near-Critical Fluids under Real Zero-Gravity Conditions. *Cosmic Res.* 39 (2) (2001) 175–186
- B. Zappoli, A. Jounet, S. Amiroudine, A. Mojtabi. Thermoacoustic heating and cooling in near-critical fluids in the presence of a thermal plume. *J. Fluid Mech.* 388 (1999) 389–409
- Y. Lamhot, A. Barak, C. Rotschild, M. Segev, M. Saraf, E. Lifshitz, A. Marmur, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides. Optical Control of Thermocapillary Effects in Complex Nanofluids. *PRL* 103, (2009) 264503-1–264503-4
- 82. C. Canuto, A. Quarteroni, M. Y. Hussaini, T. A. Zang. Spectral Methods-Fundamentals in Single Domains, Springer-Verlag, Germany, 2006
- Bavid Jacqmin, Calculation of Two-Phase Navier–Stokes Flows Using Phase-Field Modeling, J. Comp. Phys. 155 (1999) 96–127
- 84. J. U. Brackbill, D. B. Kothe, C. Zemach. A Continuum Method for Modeling Surface Tension. J. Comp. Phys. 100 (1992) 335–354
- 85. S. Osher, R. P. Fedkiwy. Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results. J. Comp. Phys. 169 (2001) 463–502
- 86. R. Scardovelli, S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 31 (1999) 567–603

Anexo 1. Algunos comentarios sobre modelaje



Figura A1. Interfaz definida e interfaz difusa.

Es durante el proceso de modelaje que debe realizarse la selección de las fuerzas y efectos relevantes (tipo de fluido; viscosidad constante o variable, tensión superficial constante o variable v/o dependiente del campo de temperaturas, etcétera). Así en la oscilación de lente térmico resulta esencial poder determinar 1) la posición de la interfaz, así como, 2) la contribución de la tensión superficial al fenómeno. Por ello la simulación numérica de flujos con interfaz o superficie libre está ligada a la. solución de ambos problemas (Fig. A1).

La existencia de una interfaz o superficie libre involucra por una parte capturar la física relevante en el modelo propuesto asociado a la selección y desarrollo de los métodos numéricos.

Dado que la interfaz representa una discontinuidad

en la presión y en la densidad entre las distintas fases presentes, ésta puede modelarse como: una región del espacio de distinto espesor (gruesa o delgada) o bien como una discontinuidad representada por una función impulsiva⁶ en la interfaz (o superficie libre). Para esto son aplicables a este caso todos los métodos aplicables a flujos de fluidos sin interfaz (o superficie libre) tales como diferencias finitas⁷, volumen finito⁸ y elemento

⁶ Que se suele representar analíticamente por una función impulso unitario: $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, donde \mathbf{x}_0 señala la posición de la interfaz (o superficie libre).

⁷ Consiste en la construcción de una malla discreta en el dominio de interés, el reemplazo de las derivadas continuas de las ecuaciones diferenciales gobernantes con expresiones equivalentes en diferencias finitas y el consiguiente arreglo del sistema algebraico resultante en un algoritmo computacional [82-86].

⁸ Consiste en la discretización de una forma débil de la ecuaciones gobernantes al integrarlas lo que permite la existencia de soluciones discontinuas. Es un método de residuos pesados consistente en la separación del dominio empleando funciones definidas sólo dentro de cada dominio y cuyo valor es cero fuera de ese dominio. Se controla el ajuste de la solución propuesta por medio de una ecuación residual [82-86].

finito⁹ entre muchos otros, así como la utilización de métodos de malla fija¹⁰ y malla móvil¹¹ para seguir el movimiento de la interfaz o superfície libre.

Ligado a la existencia de una interfaz¹² está la contribución al flujo causada por la tensión superficial, la cual como lo señala Ceniceros es una forma especial de energía proporcional al área de la superficie [21] y por lo mismo connatural a la existencia de una interfaz. A pesar de ello implementar la tensión superficial en un algoritmo numérico entraña serias dificultades pues la misma se representa por medio de un término de carácter singular (Ecuación 1) en la ecuación de conservación del momento:

$$\sigma \,\delta_{S}(\nabla \bullet \vec{n}) \,\vec{n} \tag{A1}$$

Donde σ es la tensión superficial, δ_S es la función momento asociada a la superficie S (ver nota 7), $\nabla \bullet \vec{n}$ es proporcional a la curvatura local y \vec{n} es un vector normal a la interfaz.

Para resolver esta complicada situación la técnica de volumen de fluido (*VOF*) utiliza una malla fija que involucran tanto la reconstrucción como la propagación de la superficie libre mediante el uso la ecuación de advección unidimensional de una función escalar conocido como función de color (C) (Ecuación 2):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \bullet \nabla C = 0 \tag{A2}$$

Donde t es el tiempo, **u** es el campo de velocidades y ∇C es el gradiente de C. La función de color representa la fracción de la celda llena con la especie de interés. Sin embargo hay que notar que la función de color carece de todo fundamento físico si bien permite complejos cambios topológicos, procesos tanto de reconexión como de ruptura de la interfaz y complicadas formas de la superficie libre sólo limitada por el número de puntos en la malla. Y aunque añade algún esfuerzo computacional al requerir la aplicación de las condiciones de frontera en la superficie libre iteración tras iteración suele ser un método popular para el tratamiento tanto de la interfaz como de la tensión superficial.

⁹ Este método parte de la existencia de una solución discreta a la ecuación diferencial gobernante. Dicha solución se forma con la combinación lineal del producto de los valores nodales discretizados por las llamadas funciones de interpolación que se eligen de polinomios de orden bajo. Las funciones de interpolación son continuas por partes y definidas solo entre elementos contiguos. Adicionalmente, los elementos deben ser modificados para incluir el cálculo de la ubicación de la interfaz y su singularidad asociada así como el cálculo de los esfuerzos superficiales en la interfaz [82-86].

¹⁰ Hay una malla predefinida en el bulto del fluido que no sigue el movimiento de la interfaz, a la cual la interfaz corta entre los elementos de la malla fija que puede estructurada o no estructurada. Estos métodos son de fácil descripción y programación [82-86].

¹¹ La interfaz es la frontera entre dos subdominios de la malla, donde la interfaz se identifica con elementos de la frontera hasta cierto orden de aproximación que puede ser a su vez estructurada o no estructurada, sin embargo cuando la interfaz ha sufrido grandes deformaciones se requiere un remallado o bien implementar una malla adaptativa [82-86].

¹² En el tratamiento de las condiciones de frontera de la interfaz a veces se simplifica al tomarla como una *superficie libre* sujeta a dos suposiciones que modifican el tratamiento de las condiciones de frontera para una de las fases en la interfaz y que en el caso de la interfaz aire-líquido puede ser el aire, éstas son: a) La presión del aire depende sólo del tiempo y no de la posición y b) Los esfuerzos viscosos en el aire son despreciables [24].

Otra forma de atacar este problema es el método de tensión superficial continua (*CSF*), el cual involucra una fuerza volumétrica asociada a una función de color que se propaga en una región volumétrica muy pequeña pero definida [21].

Con un acercamiento algo distinto los métodos de seguimiento entre los incluyen seguimiento del volumen¹³ y el seguimiento del frente (*front-tracking method*)¹⁴ al lado de los métodos de curvas de nivel (*level-set method*)¹⁵ intentan dar solución al binomio interfaz-tensión superficial con relativo éxito [21].

Sin embargo para resolver esta problemática existe un método más robusto que cualquiera de los anteriores para la propagación de la interfaz [63], el método de campo de fase (*phase field method*) el cual se ha aplicado exitosamente a la simulación de fluidos multifásicos con drásticos y repentinos cambios de topología (ruptura y reconexiones múltiples) en todo el dominio de interés al modelar la creación, evolución y disolución de especies difusivas y que uso de un término singular para la tensión superficial de una manera natural, logrando que se distribuya de manera suave en un cierto número de puntos de malla para tratar la discontinuidad que implican las fuerzas capilares en la interfaz, lo que resulta en una ecuación de Navier-Stokes *modificada* [41].

Es por lo anterior que se justifica ampliamente que desde primeros principios se derive un modelo que nos permita ganar comprensión de los procesos que se dan en la inestabilidad hidrodinámica asociada al lente térmico, para lo cual en este trabajo se ha propuesto la resolución numérica por medio de la transformada rápida de Fourier. Se resuelve de manera semi-implícita tres ecuaciones extremadamente no lineales, advectivas y no estacionarias acopladas: la ecuación de Cahn–Hilliard (campo de fase), la ecuación de Navier-Stokes *modificada* (para la que adicionalmente se ha seguido un método de paso fraccionado para hallar el campo de velocidades) y la ecuación de la energía sin disipación (campo de temperaturas). Junto a dos ecuaciones diferenciales para localizar el eje de la fuente láser.

El sistema de ecuaciones no lineales acopladas resultante se resolvió utilizando la transformada rápida de Fourier (*FFT*) mediante la librería de uso libre fftw3.3.3 al ligarla a un programa escrito en C++ para lo cual se usaron varios compiladores: *gcc* y *g*++ (versiones 4.7.1 y que son de uso libre), Borland C++ 5.5 Free Command-line Tools (también de uso libre), Dev C++ versión 4.9.9.2, C++Builder 2009 (*RAD Studio 2009*) y Visual C++ (*Visual Studio*) 2005, 2008 y 2010 en todas estas versiones, ya que por cuestiones históricas se uso únicamente una computadora propia por más de un año con memoria RAM de 256 MB con SO de 128 MB, y hasta que se pudo adquirir una mejor, así como el software correspondiente arriba apuntado mejorándolo paulatinamente para un mejor desempeño.

Cabe destacar que el uso de C++ se debió a varias consideraciones:

1. Portabilidad, pues *grashofbispimazSkaled.cpp* es un programa totalmente portable. El código escrito en C++ es 100% portable ya que no depende de ni de la máquina

¹³ Para el que se usa un conjunto de marcadores de los cuales el método *MAC* -*Marker And Cell*- es un método ampliamente conocido [82-86].

¹⁴ En el cual se usan elementos computacionales para describir la interfaz, para el que el frente móvil se representa por un conjunto de puntos interconectados que representan una frontera interna móvil a cuyo alrededor se construye una malla irregular [82-86].

¹⁵ La interfaz se representa como una curva de nivel de una función auxiliar suave, advectada por el flujo [22-24].

ni del compilador. Adicionalmente C++ está disponible en todas las plataformas computacionales existentes como Windows, UNIX, Macintosh y de manera general para cualquier otra clase de ordenador y plataforma (32-64 bits).

- 2. C++ es un lenguaje algorítmico (*procedural*) de alto nivel, que combina tanto la programación estructurada de los lenguaje de alto nivel como todas la ventajas inherentes a la programación por medio del lenguaje ensamblador;
- 3. C++ es un lenguaje orientado a objetos que soporta punteros/apuntadores, clases, herencia, encapsulamiento, homonimia/sobrecarga de funciones (*overload*), funciones virtuales, polimorfismo y aún el uso de plantillas (*templates*);
- 4. C++ permite emplear la clase *valarray*, definida en el archivo de cabecera (*<valarray>*) perteneciente a la *Librería Estandarizada de Plantillas (STL)* de C++. Un arreglo *valarray* es un tipo especial de contenedor (*Container*), para colecciones de números, el cual ha sido mejorado para realizar operaciones matemáticas en sus elementos a la más elevada velocidad accediendo a los datos de manera no lineal potenciando así la ya de por si poderosa librería de la transformada discreta de Fourier (fftw3.3.3) [25].
- 5. C++ es un programa que soporta programación en paralelo (Sea OMP o PPL).

Este desarrollo nos permitió el estudio no sólo de la inestabilidad convectiva asociada al lente térmico, si no también aquellas inestabilidades hidrodinámicas no lineales, producidas por una perturbación finita al estado base de flujo, para flujos guiados por fuerzas de flotación (*buoyancy driven flows*)¹⁶ y flujos termocapilares¹⁷ (*surface-tension driven flows*), sujetos a fuerzas gravitacionales constantes, fuerzas gravitacionales variables (modulada e impulsiva):

- La inestabilidad de Rayleigh–Taylor estudiando para ésta la influencia de los efectos viscosos;
- Las inestabilidades de Faraday y de Richtmyer–Meshkov, donde se pudo estudiar los fenómenos no lineales de eyección de gota y coronamiento.

Y casos donde la convección natural y la tensión superficial juegan un papel importante típicamente de los cuales se estudiaron toda una variedad de casos:

- El ascenso de plumas térmicas y termales (*thermals*);
- la inestabilidad convectiva;
- las oscilaciones asociadas al lente térmico;
- y el efecto pistón (transferencia de calor termoacústica).

Para esta última confirmamos la existencia no sólo de regimenes cuasi-periódicos y caóticos al realizar el seguimiento del eje de la fuente láser previamente reportados por Segev y colaboradores [1], si no la posible evolución la inestabilidad convectiva relacionada con el efecto pistón [79,80]. Sin embargo como la velocidad fuera impuesta por el calentamiento de la fuente térmica esta inestabilidad hidrodinámica asociada al efecto pistón alcanzó rápidamente la desviación de su estado ideal, debido a la drástica modificación que representó la formación de una gota, la que a merced de la razón

¹⁶ Que se derivan de la diferencias de densidades entre los fluidos en el sistema [24].

¹⁷ Es decir, flujos guiados por la tensión superficial y que son ocasionados por gradientes de temperatura [24].

impuesta entre el tiempos advectivo y el tiempo difusivo térmico en el número de Rayleigh se elevara llevándose consigo todo el calor de la fuente horizontal [12]. A esta desviación del estado ideal se añadieron los efectos no lineales presentes en la formulación seleccionada [27,28]. Por otra parte la modificación del campo de velocidades impuestos por la perturbación en la pared introducida para observar la inestabilidad convectiva, siguió la ruta de una inestabilidad supercrítica adquiriendo un nuevo estado de flujo estable, flujo secundario (secondary flow). Este proceso siguió una dinámica representativa de los procesos de generación de gotas guardando ciertas similitudes con todos ellos: piezoeléctrico, neumático, acústico y con los canales micro-fluídicos. Este último resultado apunta a la importante posibilidad de controlar la generación de gotas por láser (laser *droplet generation*). Este control daría lugar a enormes aplicaciones en el área de materiales y específicamente en el área de fluidos con la reversión de la descomposición espinodal selectiva al poder modificar localmente la microestructura de los fluidos. Y esta modificación a su vez es el resultado de la ocurrencia simultánea de dos inestabilidades hidrodinámicas, las ondas de la inestabilidad convectiva -por la transferencia termoacústica de calor- y la inestabilidad de Plateau-Rayleigh que ocasionan respectivamente y en orden sucesivo: la formación y posterior la ruptura del tallo de la pluma térmica generada.



Figura A2. Geometría del canal investigado.

Complementariamente este desarrollo nos permitió el estudio de los procesos de descomposición espinodal y la evolución de dominios con condiciones periódicas y de

Dirichlet homogéneas cuyo tratamiento es especialmente apropiado para la transformada discreta de Fourier (*DFT*) por su naturaleza periódica tanto 2D como 3D, a diferencia de las inestabilidades hidrodinámicas las que se estudiaron bidimensionalmente toda vez que acorde al teorema de Squire, *para cualquier perturbación tridimensional inestable le corresponde una bidimensional más inestable* [63]. Por otra parte, la transformada discreta de Fourier (*DFT*) permite un procesamiento simple de los términos difusivos en el dominio de la frecuencia en las ecuaciones no estacionarias advectivas acopladas de Cahn–Hilliard, Navier–Stokes y energía sin disipación (Fig. A2).