



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA QUÍMICA - INGENIERÍA DE PROCESOS

INESTABILIDADES DIFUSIVAS EN FLUIDOS COMPLEJOS

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
MARCOS TURCIO CUEVAS

TUTOR:
DR. OCTAVIO MANERO BRITO, IIM-UNAM
COMITÉ TUTOR:
DR. ÁNGEL ENRIQUE CHÁVEZ CASTELLANOS, FQ-UNAM
DR. RENÉ OSVALDO VARGAS AGUILAR, ESIME AZCAPOTZALCO-IPN

Ciudad Univesitaria, CD.MX. Marzo 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

Jurado Asignado:

Presidente Dr. Antonio Capella Kort
Secretario Dr. José Esteban López Aguilar
1er. Vocal Dr. José de Jesús Álvarez Ramírez
2do. Vocal Dr. René Osvaldo Vargas Aguilar
3er. Vocal Dr. Octavio Manero Brito

Tesis desarrollada en la Facultad de Química y en el Instituto de Investigación en Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México.

TUTOR DE TESIS:

DR. OCTAVIO MANERO BRITO

Agradecimientos

Este trabajo es la conclusión de una labor ardua y continua por parte de muchas personas; de mis padres Jesús y Eloísa, quienes siempre me han apoyado; de mis abuelos Barbara y Jesús, quienes ya no están conmigo; de mis hermanos Luis y Quetzalli, quienes siempre han estado a mi lado; de mi familia Leonardo, Mónica, Felipe y Karina, quienes siempre han confiado en mi; de mis compañeros Sauron, Niña, Tasha, Nieve, Ciruela, Kuro y Almendra, quienes nunca me han abandonado; de mis amigos Luis, Kémish, Ulises, César, Julio, Triana, Jessica, Edson y David, quienes me acompañaron durante mis estudios en la universidad; de mis profesores Enrique Chávez, Octavio Manero, Carlos Lira, Ernest Zeller y Luis Ángel López-Latorre, a quienes les debo su paciencia y enseñanzas; y de quienes me han apoyado, enseñado y acompañado (disculpen que no pueda nombrarlos a todos). Al final, soy yo quien debe presentar y defender el trabajo que todos me han confiado. Espero no defraudarlos y les agradezco la oportunidad que me han dado.

Resumen

En este trabajo se presenta un mecanismo alternativo, el cual permite la formación de bandas de corte en fluidos complejos. Dicho mecanismo, conocido como patrones de Turing, propone que la inestabilidad causante de la formación de bandas de corte es resultado de la difusión, tanto del esfuerzo como de una variable estructural del fluido, a diferencia de la inestabilidad mecánica ya conocida (la meseta del esfuerzo). En este análisis se mantiene una relación monótona creciente entre el esfuerzo cortante y la rapidez de deformación. Se discute la formación de patrones de Turing tanto en fluidos engrosantes como adelgazantes con contribuciones difusivas. También se presenta la ecuación de amplitud para dicho sistema y se deducen las condiciones para el desarrollo de inestabilidades secundarias, haciendo evidente la riqueza dinámica de las inestabilidades difusivas.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. El mecanismo de Turing	7
1.2. El modelo BMP generalizado	10
1.3. Hipótesis y Objetivos	13
2. Patrones de Turing en el modelo BMP	15
2.1. Espacio de Turing para el modelo BMP	17
2.1.1. Interacción cooperativa positiva	20
2.1.2. Interacción cooperativa negativa	21
2.1.3. Valores propios del operador laplaciano	23
2.2. Discusión	24
2.2.1. Sobre la difusión del esfuerzo	24
2.2.2. Fluido engrosante	25
2.2.3. Fluido adelgazante	32
2.3. Efecto de los esfuerzos normales	39
2.4. Discusión	44

3. Ecuaciones de amplitud para el modelo BMP	48
3.1. Ecuación lineal de las amplitudes	49
3.2. Contribuciones no lineales a las amplitudes	51
3.2.1. Solución a orden ϵ	53
3.2.2. Solución a orden ϵ^2	54
3.2.3. Solución a orden ϵ^3	56
3.2.4. Ecuación de amplitudes en \mathbb{R}^2	59
3.3. Ecuaciones de fase	60
3.4. Discusión	62
3.4.1. Comparación con resultados experimentales tomados de la li- teratura	64
4. Conclusiones y trabajo futuro	70
4.1. Conclusiones	70
4.2. Trabajo futuro	72

Capítulo 1

Introducción

El comportamiento reológico de un fluido se debe las escalas espaciales y temporales que los rigen, longitud y tiempo característicos del fluido. Cuando estas escalas son muy pequeñas, comparadas con las correspondientes escalas del proceso de flujo, el fluido se comporta de manera muy simple, mostrando un campo de flujo uniforme y una relación lineal entre el esfuerzo cortante (σ_{12}) y la rapidez de deformación ($\dot{\gamma}$). Este fluido reológicamente simple se conoce como “fluido newtoniano”. Por otro lado, cuando las escalas características del fluido son de orden semejante a las escalas del proceso, la estructura del fluido interactúa con el flujo, generando campos de flujo no uniforme, así como relaciones no lineales entre σ_{12} y $\dot{\gamma}$. A este tipo de fluidos se les denomina “fluidos complejos” [1–11].

En las últimas décadas se ha generado un gran interés por el estudio de los fluidos complejos, en particular, el estudio de las inestabilidades que tales fluidos presentan [3, 9, 12–17]. Dicho interés continua creciendo debido a los avances experimentales

en visualización de flujo [5, 6, 14–16, 18, 19], las cuales, junto con la implementación de nuevas técnicas numéricas [5, 6, 14–16, 18, 19], han permitido entender, modelar e interpretar los fenómenos reológicos de una mejor manera.

Las técnicas de visualización de flujo, como velocimetría por resonancia magnética nuclear y velocimetría por dispersión de luz, han permitido observar fenómenos como la formación de bandas de corte [5, 6, 14–16, 18, 19], es decir, zonas donde el fluido presenta diferentes propiedades reológicas para un valor determinado del esfuerzo cortante [4, 5, 9, 16, 18–23, 26].

En un principio, se propusieron modelos reológicos que permiten la formación de dos bandas estables, tanto en tiempo como en espacio. En dichos modelos se considera que la formación de bandas de corte se debe a una inestabilidad mecánica, la cual es provocada por una relación no monótona entre el esfuerzo cortante y la rapidez de deformación (ver Fig. 1.1) [4, 9, 20–23].

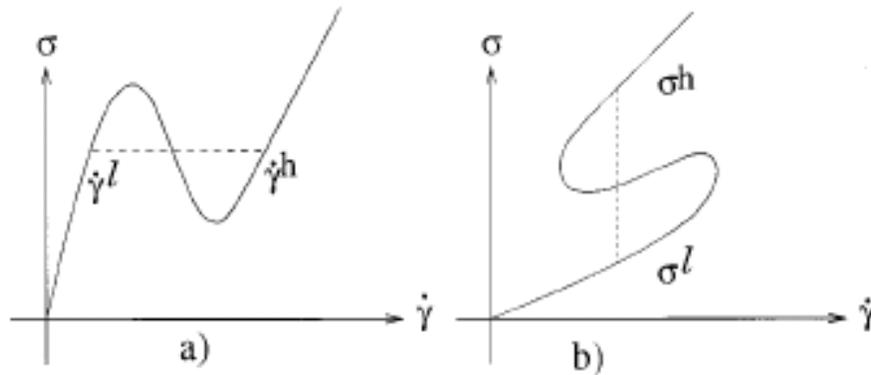


Figura 1.1: Tipos de bandas de corte: a) bandas paralelas a la vorticidad, b) bandas perpendiculares a la vorticidad. Modificada de [26].

Las ecuaciones constitutivas que describen dicha inestabilidad mecánica, como

la ecuación de Johnson-Segalman [4, 20, 21] y el modelo cúbico de Bautista-Manero-Puig [9–11], presentan una zona donde σ_{12} decrece al aumentar $\dot{\gamma}$; alrededor de esta zona se define la meseta del esfuerzo (Fig. 1.1a). Para valores de $\dot{\gamma}$ dentro de la meseta, el flujo se vuelve mecánicamente inestable y el fluido se separa en dos fases paralelas a la dirección de la velocidad. Las propiedades de las fases quedan determinadas por los valores extremos de la meseta del esfuerzo. Las mismas ecuaciones constitutivas se pueden modificar para obtener bandas paralelas a la vorticidad; en este caso se define una meseta a un valor de la rapidez de deformación (Fig. 1.1b) [9, 26].

Estos modelos describen adecuadamente la formación de bandas de corte en el equilibrio; la meseta del esfuerzo se determina minimizando el potencial de la ecuación constitutiva y, por analogía con la ecuación de Van der Waals, se utiliza la regla de la palanca para determinar la distribución de las fases [4, 11, 20, 21]. Dicho procedimiento, aunque familiar en la termodinámica clásica, presenta complicaciones en los sistemas reológicos; debido a que dichos sistemas se encuentran en flujo, no es posible definir una energía libre que permita describir transiciones entre fases, además de que dicha transición entre fases presenta una discontinuidad tanto en el esfuerzo como en la viscosidad [11, 29–33].

Las inestabilidades mecánicas tampoco pueden explicar algunos resultados experimentales, como la formación de múltiples bandas de corte y el comportamiento dinámico de éstas [3, 5, 13–15, 18, 19, 21, 24, 25]. Como ejemplo, en la Figura 1.2 se muestra el comportamiento espacio-temporal de una muestra de bromuro de cetiltrimetilamonio a diferentes rapidezces de deformación. En esta figura se puede observar que las bandas presentan diferentes comportamientos a lo largo de la meseta de es-

fuerzos. Para rapidezces de deformación cercanas al límite inferior de la meseta de esfuerzos, se observa que las bandas oscilan en la dirección vertical. Por otro lado, para rapidezces de deformación intermedias, la interfase entre las bandas es estable en tiempo y espacio. Finalmente, para rapidezces de deformación cercanas al límite superior de la meseta de esfuerzos, las bandas se comportan de manera más compleja, presentándose nucleación y colapso de las bandas en el tiempo.

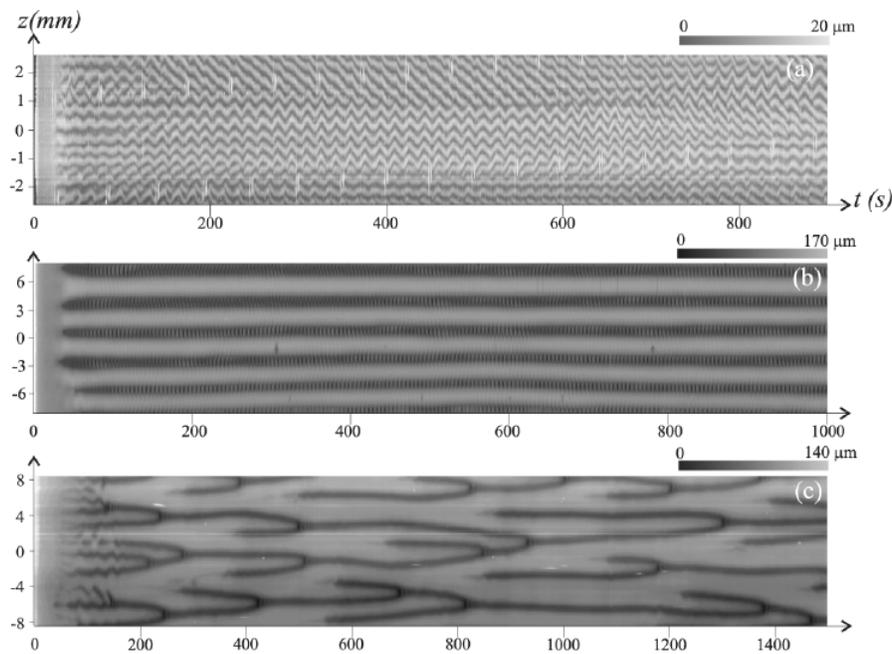


Figura 1.2: Distintos tipos de patrones para la interfase a distintas rapidezces de deformación. Modificada de [19].

En un esfuerzo por conciliar la descripción mecánica del fenómeno con los resultados experimentales, se han incluido pequeñas contribuciones difusivas en las ecuaciones constitutivas [4, 20–22]. De esta manera se obtiene modelos no locales, en los que

la difusión no afecta significativamente a la meseta del esfuerzo ni a la distribución de fases, pero permite la formación de múltiples bandas y hace que las ecuaciones constitutivas sean continuas y diferenciables en todos los puntos [4, 16, 20–22, 24–26].

Otra propuesta importante plantea describir el comportamiento reológico del fluido mediante ecuaciones cinéticas estructurales [1, 3, 8]. De esta manera, se obtienen relaciones que expresan cambios estructurales en el fluido debidos a las interacciones entre las variables de flujo y el fluido en sí. En este escenario, las bandas de corte se deben a la coexistencia de dos estructuras del fluido para un solo valor del esfuerzo cortante; la primera estructura se caracteriza por altas interacciones entre las partículas del fluido, mientras que la segunda estructura presenta pocas interacciones [1, 3, 8]. Sin embargo, debido a la complejidad de las ecuaciones cinéticas en el régimen no lineal, dichos modelos resultan inadecuados para la descripción de la dinámica de las bandas. Por esta razón, se proponen ecuaciones en las que la estructura del fluido se expresa a través de una propiedad mecánica de éste, por ejemplo, la viscosidad [7].

Por otro lado, distintos experimentos de visualización de flujo han mostrado que la formación de bandas es muy dinámica [5, 18, 19], como se muestra en la Figura 1.3. Del lado izquierdo se presentan las velocidades locales obtenidas, donde se puede apreciar un cambio marcado en la pendiente en el perfil de velocidades, en especial en los recuadros (c) y (e). Dicho cambio en la pendiente ha sido asociado con la formación de bandas de corte y la formación de una meseta del esfuerzo [4, 20, 21]. Sin embargo, en el lado derecho, donde se muestran las imágenes de velocimetría del fluido, se puede observar que el fluido no presenta dos bandas estables, como lo predicen los modelos cúbicos; en las imágenes b, d y f, se puede observar la formación de dos

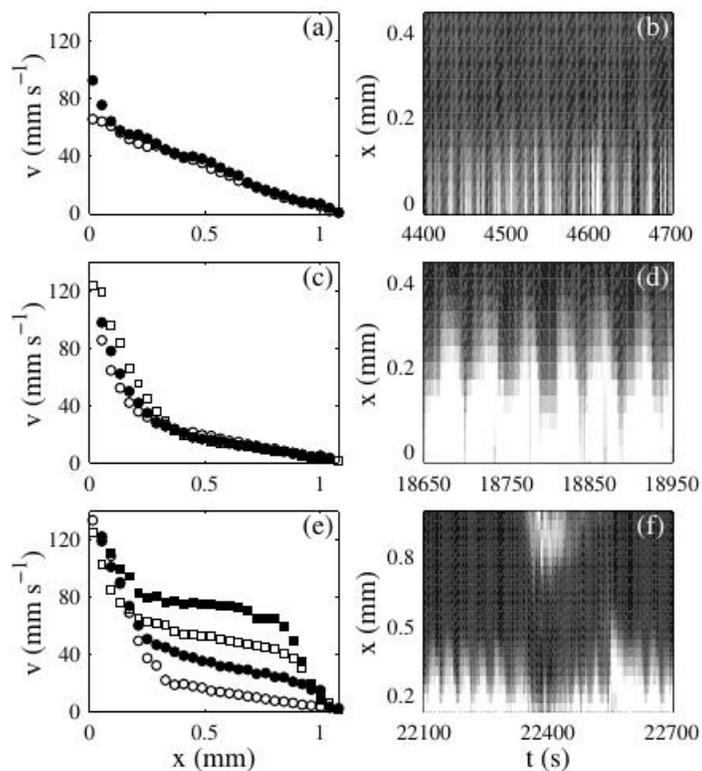


Figura 1.3: Comportamiento de una solución de *CTAB* al 20% a $\dot{\gamma} = 186\text{s}^{-1}$. Modificado de [6].

bandas con una interfase oscilatoria e irregular, mostrando que el comportamiento local del fluido es más complejo que lo predicho por la inestabilidad mecánica. Dichas inestabilidades secundarias son características de sistemas de reacción-difusión [17, 27, 28, 30, 34–36], donde reciben el nombre de patrones de Turing [27, 35, 36]; éstas se presentan cuando la difusión provoca la separación de fases en sistemas que, de otra manera, son completamente uniformes y estables. Este comportamiento también ha sido observado por otros grupos [42].

Los patrones de Turing han sido estudiados en una gran variedad de disciplinas, desde la biología [37] hasta la demografía [38]. En la química, en particular en la termodinámica, dichos patrones son conocidos como estructuras disipativas y son asociados con dinámicas complejas y caóticas fuera del equilibrio [28, 39].

1.1. El mecanismo de Turing

En 1952, Alan Turing presentó un mecanismo con el que un sistema de ecuaciones de reacción, con estados de equilibrio linealmente estables, presenta inestabilidades espaciales al incluir efectos difusivos [27, 35, 36]. De manera más clara, dado el sistema de reacción en \mathbb{R}^2 :

$$\begin{aligned}\partial_t u &= f(u, v), \\ \partial_t v &= g(u, v),\end{aligned}\tag{1.1}$$

con valores de equilibrio linealmente estables, u_E y v_E ; es decir, éstos satisfacen [35, 36]:

$$f(u_E, v_E) = 0, \quad g(u_E, v_E) = 0,\tag{1.2}$$

y los valores propios de la matriz:

$$\begin{pmatrix} \partial_u f & \partial_v f \\ \partial_u g & \partial_v g \end{pmatrix},$$

evaluados en u_E y v_E , son siempre negativos; pero el sistema de reacción–difusión:

$$\begin{aligned}\partial_t u &= f(u, v) + \partial_{xx} u, \\ \partial_t v &= g(u, v) + D\partial_{xx} v,\end{aligned}\tag{1.3}$$

tiene al menos un valor propio positivo [35, 36]. Los valores propios de los sistemas de reacción-difusión representan los tiempos característicos de la reacción cerca del punto de equilibrio [31, 35, 36]. Así, si se tiene un sistema con valores propios negativos, las perturbaciones locales desaparece con una rapidez proporcional al valor propio y la solución de equilibrio se restablece al paso del tiempo. Por otro lado, los valores propios positivos provocan que las perturbaciones crezcan, por lo que la solución de equilibrio se pierde con el tiempo [17, 27, 28, 34–36].

Para calcular los valores propios del sistema (1.3), se sustituyen los términos difusivos por la ecuación de valores propios del operador laplaciano ($\nabla^2 w = -\omega_s w$) [34–36], para obtener la siguiente matriz:

$$\begin{pmatrix} \partial_u f - \omega_s & \partial_v f \\ \partial_u g & \partial_v g - D\omega_s \end{pmatrix}.$$

En esta matriz se hace evidente que los valores propios del sistema (1.3) dependen de los valores propios del operador laplaciano ω_s . Como se puede observar en la definición de ω_s , éste representa la distancia característica asociada con el proceso difusivo, por lo que la difusión tiene un claro comportamiento espacial oscilatorio. El hecho de que los valores propios del sistema (1.3) dependan de ω_s , muestra que el tiempo característico de la dinámica está relacionado con las escalas espaciales

características de la difusión [34–36].

De las condiciones de estabilidad lineal se obtienen las siguientes relaciones para el sistema (1.1):

$$\partial_u f + \partial_v g < 0, \quad (1.4)$$

$$\partial_u f \partial_v g - \partial_v f \partial_u g > 0, \quad (1.5)$$

y para el sistema (1.3):

$$D\omega_s^2 - (D\partial_u f + \partial_v g)\omega_s + \partial_u f \partial_v g - \partial_v f \partial_u g < 0, \quad (1.6)$$

debido a que ω_s y D son siempre positivos y, por la desigualdad (1.5), la única manera en que se cumple la desigualdad (1.6) es [34–36]:

$$D\partial_u f + \partial_v g > 0. \quad (1.7)$$

Finalmente, se puede observar que la desigualdad (1.6) se puede representar como una parábola que depende de ω_s , es decir [36, 40]:

$$h(\omega_s) = D\omega_s^2 - (D\partial_u f + \partial_v g)\omega_s + \partial_u f \partial_v g - \partial_v f \partial_u g, \quad (1.8)$$

para que esta ecuación tenga valores negativos, el mínimo de $h(\omega_s)$ debe ser negativo, de aquí se sigue la relación:

$$(D\partial_u f - \partial_v g)^2 + 4D\partial_v f \partial_u g > 0, \quad (1.9)$$

Si la desigualdad (1.9) se cumple, entonces hay dos valores $\omega_{s\pm}$ para los cuales la función (1.8) se anula, éstos son [36, 40]:

$$\omega_{s\pm} = \frac{D\partial_u f + \partial_v g \pm \sqrt{(D\partial_u f - \partial_v g)^2 + 4D\partial_v f \partial_u g}}{2D}. \quad (1.10)$$

La condición final para que el sistema (1.3) presente patrones de Turing, es que exista un valor propio del operador laplaciano (ω_s) entre los dos valores de $\omega_{s\pm}$, es decir [36]:

$$\omega_{s-} < \omega_s < \omega_{s+}, \quad (1.11)$$

Las relaciones (1.4) a (1.11) deben ser evaluadas en u_E y v_E ; éstas representan las condiciones necesarias para la formación de patrones de Turing en un modelo en \mathbb{R}^2 ; la extensión a \mathbb{R}^n es análoga.

1.2. El modelo BMP generalizado

La versión del modelo BMP que se utiliza en este trabajo surge de la termodinámica irreversible extendida aplicada a fluidos complejos. En este marco, se considera que la fluidez (φ), la corriente difusiva (J) y el esfuerzo ($\underline{\underline{\sigma}}$) son las variables dominantes en el proceso de flujo [10, 11]. Las ecuaciones resultantes son:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{T} + k(\varphi_\infty - \varphi)\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}} + \nabla \cdot \underline{J}, \quad (1.12)$$

$$\underline{J} + \tau_1 \frac{d\underline{J}}{dt} = \underline{\underline{\beta}} \cdot (\pm \nabla \varphi + \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}), \quad (1.13)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} + \frac{1}{G\varphi} \underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \frac{2}{\varphi} \underline{\underline{D}} + (\nabla \underline{J})^S, \quad (1.14)$$

donde $(\nabla \underline{J})^S$ representa a la parte simétrica de $\nabla \underline{J}$, $\underline{\underline{\beta}}$ es una matriz de coeficientes fenomenológicos, la cual relacionan al flux másico con las variables reológicas, y la derivada convectiva contravariante del vector del tensor de esfuerzos $\underline{\underline{\sigma}}$ se definen como:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \frac{d\underline{\underline{\sigma}}}{dt} - (\underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{L}}^T). \quad (1.15)$$

En estas ecuaciones $\frac{d}{dt}$ representa la derivada material, $\underline{\underline{D}}$ es la parte simétrica del gradiente de velocidad $\underline{\underline{L}}$, φ es la fluidez (η^{-1}), φ_0 y φ_∞ representan, respectivamente, la fluidez del material a bajas y altas rapidezces de deformación, G es el módulo elástico de relajación, T se puede interpretar como un tiempo de formación estructural, mientras que k se puede entender como un parámetro cinético de destrucción estructural, τ_1 es el tiempo de relajación del flux másico, y β_0 , β'_0 , β_2 y β'_2 son parámetros fenomenológicos. En corte simple, donde x es la dirección de la velocidad, y es la dirección del gradiente de velocidades y z es la dirección de la vorticidad, y suponiendo simetría traslacional del flujo y coeficientes constantes, las ecuaciones (1.12)-(1.14) se reducen a [11]:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{T} + k(\varphi_\infty - \varphi)\sigma_{xy}\dot{\gamma} + \beta'_0 \frac{\partial J_y}{\partial y}, \quad (1.16)$$

$$J_x = \beta_2 \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y}, \quad (1.17)$$

$$J_y = \pm \beta_0 \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \beta_2 \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y}, \quad (1.18)$$

$$\sigma_{xy} + \frac{1}{G\varphi} \left(\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} - \dot{\gamma} \sigma_{yy} \right) = \frac{\dot{\gamma}}{\varphi} + \frac{\beta'_2}{2} \frac{\partial J_x}{\partial y}, \quad (1.19)$$

$$\sigma_{xx} + \frac{1}{G\varphi} \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t} - 2\dot{\gamma} \sigma_{xy} \right) = 0, \quad (1.20)$$

$$\sigma_{yy} + \frac{1}{G\varphi} \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t} = \beta'_2 \left(\frac{\partial J_y}{\partial y} \right), \quad (1.21)$$

$$\sigma_{zz} + \frac{1}{G\varphi} \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial t} = 0. \quad (1.22)$$

Al sustituir las ecuaciones (1.17) y (1.18) en las ecuaciones (1.15), (1.19) y (1.21) se obtiene:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{T} + k(\varphi_\infty - \varphi)\sigma_{xy}\dot{\gamma} + \beta'_0\beta_0 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \beta'_0\beta_2 \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial y^2}, \quad (1.23)$$

$$\sigma_{xy} + \frac{1}{G\varphi} \left(\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} - \dot{\gamma} \sigma_{yy} \right) = \frac{\dot{\gamma}}{\varphi} + \frac{\beta'_2\beta_2}{2} \frac{\partial^2 \sigma_{xy}}{\partial y^2}, \quad (1.24)$$

$$\sigma_{yy} + \frac{1}{G\varphi} \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t} = \pm \beta'_2\beta_0 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \beta'_2\beta_2 \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial y^2}. \quad (1.25)$$

Por convención reológica, resulta más conveniente usar las diferencias de esfuerzos normales [7, 9–11, 17], éstas se definen:

$$N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{yy}, \quad N_2 = \sigma_{yy} - \sigma_{zz}. \quad (1.26)$$

Así, a partir de las ecuaciones (1.20)-(1.22), se obtiene la siguiente relación para los esfuerzos normales:

$$(N_1 + N_2) + \frac{1}{G\varphi} \left(\frac{\partial(N_1 + N_2)}{\partial t} - 2\dot{\gamma} \sigma_{xy} \right) = 0. \quad (1.27)$$

De esta manera, la ecuación (1.27) se desacopla del sistema formado por las ecuaciones (1.23) y (1.24). La estabilidad de dicho sistema se puede analizar sin mayor complicación; para ello es necesario extender los conceptos presentados en la sección anterior a tres dimensiones; sin embargo, se puede reducir el sistema a dos dimensiones, si se considera estado estacionario en la ecuación (1.25) y se desprecia el efecto de la segunda derivada del esfuerzo σ_{yy} en las ecuaciones (1.23) y (1.25). Así, se obtiene:

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} = -G\varphi\sigma_{xy} + \dot{\gamma}G \pm \frac{GD_0(W)}{\varphi_\infty} \nabla^2 \varphi + D_1(W) \nabla^2 \sigma_{xy}, \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi_0 - \varphi}{T} + k(\varphi_\infty - \varphi)\sigma_{xy}\dot{\gamma} + D_0(W) \nabla^2 \varphi, \quad (1.29)$$

donde se definen el coeficiente de difusión estructural D_0 , el coeficiente de difusión del esfuerzo D_1 y el número de Weissenberg W como:

$$D_0(W) = \beta'_0\beta_0 = \dot{\gamma}\beta'_2\beta_0, \quad D_1(W) = G\varphi\frac{\beta'_2\beta_2}{2}, \quad W = \frac{\dot{\gamma}}{G\varphi_\infty}. \quad (1.30)$$

El análisis de estabilidad considera pequeñas variaciones en el número de Weissenberg crítico (W_c) para la formación de bandas, por lo que se puede considerar que los coeficientes de difusión ($D_0(W)$ y $D_1(W)$) se mantienen constantes alrededor de W_c .

1.3. Hipótesis y Objetivos

La hipótesis fundamental de este trabajo es que los términos difusivos en las ecuaciones constitutivas permiten a los fluidos presentar inestabilidades espaciales

y temporales. El mecanismo principal para tales inestabilidades es conocido como patrones de Turing, la descripción de tales patrones permitirá definir las curvas de estabilidad para el fluido en cuestión.

Siguiendo dicha hipótesis, en este trabajo se utiliza el modelo BMP difusivo para describir ciertas inestabilidades de los fluidos complejos, a saber, las bandas de corte y los comportamientos oscilatorios del esfuerzo; también se darán las condiciones bajo las cuales los fluidos presentarán dichas inestabilidades y, en ciertos casos, se comprobarán estas condiciones por medio de simulaciones numéricas.

Capítulo 2

Patrones de Turing en el modelo BMP

En este capítulo se define el espacio de Turing para el modelo BMP sin considerar esfuerzos normales. Primero se presentan las condiciones de estabilidad lineal para el modelo sin difusión, para después analizar los efectos de ésta en dos casos: El primero con difusión positiva y el segundo con difusión negativa. En la parte final de este capítulo se presentan las curvas de estabilidad y la simulaciones de los patrones obtenidos a partir del modelo BMP difusivo.

Para el tratamiento subsecuente es conveniente usar variables adimensionales, es decir:

$$t = G\varphi_\infty t_d, \tag{2.1}$$

$$\varphi = \frac{\varphi_d}{\varphi_\infty}, \tag{2.2}$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\sigma_{xyd}}{G}, \quad (2.3)$$

$$\nabla^2 = \frac{D_1}{G\varphi_\infty} \nabla_d^2. \quad (2.4)$$

Las variables con dimensiones se escriben con un subíndice d . En la ecuación (2.1), el tiempo característico se define como el inverso del tiempo viscoelástico a altas rapidezces de deformación ($G\varphi_\infty$), y se utiliza a la fluidez a altaz rapidezces de corte (φ_∞) como fluidez característica en la ecuación (2.2). Para adimensionalizar al esfuerzo cortante, en la e cuación (2.3) se utiliza al módulo elástico de relajación (G), y en la ecuación (2.4) se define la longitud característica como la longitud asociada a la difusión del esfuerzo cortante.

Con dichos escalamientos se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} = -\varphi \sigma_{xy} + W \pm D \nabla^2 \varphi + \nabla^2 \sigma_{xy}, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = T(\varphi_0 - \varphi) + K(1 - \varphi)W \sigma_{xy} + D \nabla^2 \varphi. \quad (2.6)$$

Los grupos adimensionales que surgen son: Un tiempo de formación estructural ($T = \frac{1}{G\varphi_\infty T_d}$), un esfuerzo de destrucción estructural ($K = Gk_d$), un coeficiente de difusión adimensional ($D = \frac{D_0}{D_1}$) y el número de Weissenberg ($W = \frac{\dot{\gamma}}{G\varphi_\infty}$); éste último es usado como parámetro para el sistema.

2.1. Espacio de Turing para el modelo BMP

Para seguir la idea de Turing, primero se debe notar que el lado derecho de las ecuaciones (2.5) y (2.6) se pueden separar en dos contribuciones: Una que surge de los términos de reacción, $f(\sigma, \varphi) = -\varphi\sigma + W$ y $g(\sigma, \varphi) = T(\varphi_0 - \varphi) + K(1 - \varphi)W\sigma$, respectivamente, y otra que contiene a los términos difusivos. Ahora, se definen las soluciones de equilibrio de tal manera que se anulen los términos de reacción, es decir, $f(\sigma_E, \varphi_E) = 0$ y $g(\sigma_E, \varphi_E) = 0$; de aquí se obtiene:

$$\sigma_E = \frac{W}{\varphi_E}, \quad (2.7)$$

$$\varphi_E = \frac{T\varphi_0 - KW^2}{2T} + \sqrt{\left(\frac{T\varphi_0 - KW^2}{2T}\right)^2 + \frac{KW^2}{T}}, \quad (2.8)$$

donde el subíndice E indica que se trata de valores de equilibrio. Es importante notar que estas soluciones son continuas y crecen monótonamente con W , por lo que no presentan inestabilidades mecánicas (curvas de flujo no monótonas) como en los modelos cúbicos.

La estabilidad del sistema de reacción requiere que las ecuaciones (2.5) y (2.6) sin difusión tengan valores propios negativos, esto genera las siguientes condiciones:

$$\varphi_E + T + KW\sigma_E > 0, \quad (2.9)$$

$$T\varphi_E + KW\sigma_E > 0. \quad (2.10)$$

Ambas condiciones se cumplen de manera trivial, puesto que requieren que los

tiempos característicos de construcción y destrucción estructural sean positivos. Por esta razón, el modelo BMP produce soluciones estables y un campo de flujo uniforme para todos los valores de W .

Para tomar en cuenta los efectos de la difusión en el sistema, se incluyen perturbaciones espaciales a las soluciones de equilibrio, es decir, $\sigma = \sigma_E + \hat{\sigma}$ y $\varphi = \varphi_E + \hat{\varphi}$. Al insertar estas expresiones en las ecuaciones (2.5) y (2.6), y manteniendo únicamente los términos lineales, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial \hat{\sigma}}{\partial t} = -\varphi_E \hat{\sigma} - \sigma_E \hat{\varphi} \pm D \nabla^2 \hat{\varphi} + \nabla^2 \hat{\sigma}, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial t} = -T \hat{\varphi} + KW(1 - \varphi_E) \hat{\sigma} - KW \sigma_E \hat{\varphi} + D \nabla^2 \hat{\varphi}. \quad (2.12)$$

Se debe notar que los términos de orden cero se cancelan debido a la definición de σ_E y φ_E . Estas ecuaciones representan la evolución espacial de las perturbaciones a las soluciones de equilibrio. Si las perturbaciones desaparecen, entonces se recuperan las soluciones de equilibrio y el fluido se estabiliza a un sistema uniforme con una sola fase. Por otro lado, si las perturbaciones desestabilizan la solución uniforme, el sistema pierde su simetría espacial y el fluido forma patrones espaciales estables. Los patrones formados dependen tanto de la geometría de la celda de fluido como de las condiciones de frontera del sistema. Para el tratamiento subsecuente, es conveniente expresar a las ecuaciones (2.11) and (2.12) en forma vectorial; de esta manera se

define al vector de perturbaciones \underline{u} y al operador lineal \underline{l} como:

$$\underline{u} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma} \\ \hat{\varphi} \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

$$\underline{l} = \begin{pmatrix} -\varphi_E + \nabla^2 & -\sigma_E \pm D\nabla^2 \\ KW(1 - \varphi_E) & -T - KW\sigma_E + D\nabla^2 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Por consecuencia, la ecuación para las perturbaciones es $\frac{\partial}{\partial t}\underline{u} = \underline{l} \cdot \underline{u}$. Los patrones formados pueden ser bandas de diferentes propiedades, las cuales asemejan a las bandas de corte. Estos patrones son estructuras unidimensionales con variaciones a lo largo de su dirección normal y ; por lo tanto, se pueden proponer soluciones con forma de ondas planas, es decir:

$$\underline{u} = \underline{u}_0 e^{\omega t} e^{iqy}, \quad (2.15)$$

Aquí, ω es el valor propio (la frecuencia) asociado al número de onda q y \underline{u}_0 es el vector propio. Se debe señalar que el signo de ω determina el comportamiento de las perturbaciones, por lo que hay tres situaciones posibles; si $\omega < 0$, las perturbaciones decrecen con el tiempo y desaparecen cuando $t \rightarrow \infty$, en este caso el sistema es estable. La situación contraria ocurre cuando $\omega > 0$, aquí las perturbaciones crecen con el tiempo y el sistema se vuelve inestable. Finalmente, si $\omega = 0$, las perturbaciones permanecen constantes en el tiempo, esta condición describe las curvas marginales para el sistema.

2.1.1. Interacción cooperativa positiva

Para poder describir de manera completa el espacio de Turing, es necesario definir la naturaleza de la interacción cooperativa en la ecuación (2.11). En un primer caso, se propone un proceso difusivo natural con signo positivo.

A partir del análisis de estabilidad lineal del operador (2.14) se obtiene la siguiente condición para la inestabilidad:

$$Dq^4 + (D\varphi_E + T + KW\sigma_E + DKW(1 - \varphi_E))q^2 + T\varphi_E + KW\sigma_E < 0. \quad (2.16)$$

Se puede notar que el lado izquierdo de esta desigualdad representa una parábola cóncava en q^2 , es decir $h_+(q^2)$. La condición (1.7) implica que el término $1 - \varphi_E$ debe ser negativo; debido a que la fluidez se normaliza usando la fluidez a altas rapidezces de deformación (ver la ecuación (2.2)), la desigualdad (2.16) sólo puede cumplirse para fluidos engrosantes. Además, también se necesita que la magnitud del término $DKW(1 - \varphi_E)$ sea grande; dicho término es pequeño tanto para valores bajos como para valores altos de W . Así, la inestabilidad ocurre sólo para valores intermedios de W , lo cual concuerda con la descripción experimental de las bandas de corte [4–6].

También, de acuerdo con la ecuación (2.16), existen valores de W para los cuales el mínimo de $h_+(q^2)$ es ya sea positivo, cero o negativo. El valor positivo del mínimo de $h_+(q^2)$ no forma patrones mientras que el valor negativo cumple con las condiciones para que se presente una inestabilidad espacial. El valor cero para el mínimo representa la transición entre un régimen de flujo uniforme y un sistema con bandas espaciales, esto es, el punto de bifurcación; éste define el número de Weissenberg

crítico W_c para la formación de patrones.

Finalmente, cuando se cumple con la condición (2.16), existen dos valores de q^2 para los que $h_+(q^2)$ es cero (q_-^2 y q_+^2 , respectivamente), éstos se definen como:

$$q_{\pm}^2 = -\frac{D\varphi_E + T + KW\sigma_E + DKW(1 - \varphi_E)}{2D} \pm \sqrt{\left(\frac{D\varphi_E + T + KW\sigma_E + DKW(1 - \varphi_E)}{2D}\right)^2 - \frac{T\varphi_E + KW\sigma_E}{D}}. \quad (2.17)$$

Se debe notar que q_-^2 y q_+^2 son ambos positivos. Estos valores definen las fronteras del espacio de Turing con difusión positiva. Las longitudes posibles para los patrones están acotadas por estos valores. El límite de W pequeño revela la naturaleza y el mecanismo responsable por la longitud de las bandas; estos límites son:

$$q_-^2 \approx \varphi_0, \quad q_+^2 \approx \frac{T}{D}. \quad (2.18)$$

Estas relaciones indican que la longitud característica de las bandas es menor que la longitud asociada a la estructura a bajas rapidezces de deformación, φ_0^{-1} , pero mayor a la longitud difusiva asociada al tiempo de reconstrucción estructural, T^{-1} .

2.1.2. Interacción cooperativa negativa

En esta sección se considera que la difusión de la fluidez en la ecuación (2.11) es negativa. A partir del análisis de estabilidad lineal del operador (2.14), se obtiene la

siguiente condición para la inestabilidad:

$$Dq^4 + (D\varphi_E + T + KW\sigma_E - DKW(1 - \varphi_E))q^2 + T\varphi_E + KW\sigma_E < 0. \quad (2.19)$$

Esta condición representa una parábola en q^2 , es decir, $h_-(q^2)$. Este comportamiento es cualitativamente equivalente al presentado en la sección anterior. Como se mencionó antes, las inestabilidades surgen cuando ciertas condiciones se cumplen, estas condiciones limitan al sistema; por ejemplo, en la sección anterior cuando la desigualdad (2.16) se cumplía sólo para fluidos engrosantes. Por otro lado, cuando se considera que la difusión de la fluidez es negativa, la condición (1.7) requiere que $1 - \varphi_E$ sea positivo, es decir, que el fluido sea adelgazante. De manera análoga al fluido engrosante, la condición (2.19) sólo se cumple para valores intermedios de W ; en este intervalo la función $h_-(q^2)$ tiene dos soluciones, q_+^2 y q_-^2 , éstas son:

$$q_{\pm}^2 = -\frac{D\varphi_E + T + KW\sigma_E - DKW(1 - \varphi_E)}{2D} \pm \sqrt{\left(\frac{D\varphi_E + T + KW\sigma_E - DKW(1 - \varphi_E)}{2D}\right)^2 - \frac{T\varphi_E + KW\sigma_E}{D}}. \quad (2.20)$$

El espacio de Turing está acotado por estos valores. A partir del mínimo de $h_-(q^2)$ se puede definir un Weissenberg crítico, W_c . Las relaciones (2.18), que representan a los mecanismos responsables por la longitud de las bandas, también se aplican a fluidos adelgazantes.

2.1.3. Valores propios del operador laplaciano

La existencia del espacio de Turing es una condición necesaria, pero no suficiente, para la formación de patrones de Turing. Para obtener una condición suficiente, es necesario analizar el operador de difusión. Los valores propios del operador de difusión son las soluciones a la siguiente ecuación:

$$\nabla^2 \underline{u} = -\omega \underline{u}, \quad (2.21)$$

aquí ω es el valor propio relacionado con la longitud característica del proceso de difusión. Para obtener una solución a la ecuación (2.21) que permita la formación de patrones difusivos, se requieren, en este caso, condiciones de frontera periódicas. Una manera natural de generar condiciones periódicas es considerar una celda de fluido de longitud L , en dicha celda las condiciones de frontera son:

$$\underline{u}(t, 0) = \underline{u}(t, L). \quad (2.22)$$

Es sabido que las soluciones a la ecuación (2.21) son una combinación de funciones seno y coseno, es decir, $\underline{u} = A \text{sen}(\sqrt{\omega}y) + B \text{cos}(\sqrt{\omega}y)$. Dicha solución, junto con las condiciones de frontera (2.22), genera los siguientes valores propios:

$$\omega = \left(2\pi \frac{n}{L}\right)^2, \quad (2.23)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$ representa el número de bandas presentes en una celda de longitud L . Así, la última condición para la formación de patrones de Turing es que

exista al menos un valor propio ω dentro del espacio de Turing; además, se puede probar que $\omega = q^2$. Esta relación muestra la conexión entre las condiciones de frontera, la geometría de la celda de fluido y las longitudes posibles para los patrones formados.

2.2. Discusión

En las secciones anteriores se presentaron las condiciones para la formación de patrones en el modelo BMP, en esta sección se presentan las curvas y simulaciones resultantes de tales condiciones. Los parámetros usados son representativos de sistemas micelares. El procedimiento numérico usado es un método diferencias finitas implícito, donde las condiciones iniciales corresponden a los valores de equilibrio, calculados con las ecuaciones (2.7) y (2.8), con una perturbación espacial aleatoria en la dirección del valor propio de la difusión [31, 34].

2.2.1. Sobre la difusión del esfuerzo

El signo correspondiente a la contribución de la interacción cooperativa es un punto importante en el planteamiento previo, por lo que en esta sección se discuten más a fondo sus implicaciones. En el modelo presente, la estructura del fluido se considera a través de la fluidez [7–11]. Así, una baja fluidez implica la existencia de una fase con poca movilidad, donde las estructuras presentes en el fluido interactúan fuertemente. Por otro lado, cuando las estructuras presentes en el fluido tienen pocas interacciones entre ellas, el fluido presenta una fase con alta movilidad y, por lo tanto, una alta fluidez [7, 8]. Puesto que la difusión es un proceso que depende de

la estructura del fluido (ver ecuación (1.30)) [10, 11], una estructura entrecruzada transporta esfuerzo de manera difusiva con mayor eficiencia que una estructura libre y sin interacciones.

En los fluidos engrosantes, la fluidez decrece al incrementarse el esfuerzo cortante [7], por lo que la fase con poca movilidad y una estructura entrelazada posee una alta concentración de esfuerzo (un fluido muy estructurado); éste se difunde hacia la fase con poca concentración de esfuerzo (un fluido poco estructurado). En este caso, la difusión estructural presenta una dirección natural, por lo que la contribución de la difusión del esfuerzo es positiva. Este resultado es consistente con la condición (2.16).

Por otro lado, en un fluido adelgazante, el flujo promueve la ruptura de la estructura existente a bajos esfuerzos de corte [7]. En este caso, al aumentar el esfuerzo, la fase con poca movilidad evoluciona hacia una fase con alta movilidad. Puesto que la difusión estructural ocurre de zonas con baja fluidez hacia zonas de alta fluidez, la interacción cooperativa tiene un sentido contrario al natural. Por esta razón, la contribución negativa de la difusión de la fluidez se asocia con fluidos adelgazantes. Este resultado se refleja en la ecuación (2.19).

2.2.2. Fluido engrosante

Como se discutió en la sección anterior, los patrones de Turing sólo pueden existir en fluidos engrosantes si la interacción cooperativa es positiva. Las soluciones estacionarias y uniformes, tanto para el esfuerzo cortante como para la fluidez, se presentan en las Figuras 2.1 y 2.2, respectivamente. Los parámetros usados en esta sección son:

$\varphi_0 = 100$, $K = 1$, $T = 0.2$ y $D = 2$.

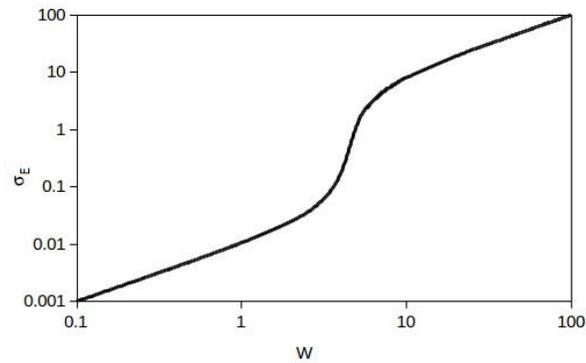


Figura 2.1: Esfuerzo adimensional en función del número de Weissenberg para un fluido engrosante.

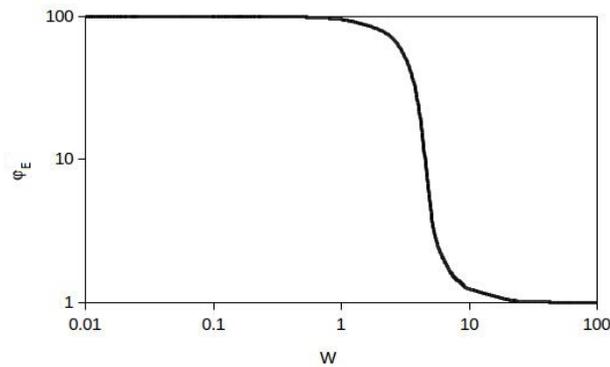


Figura 2.2: Fluidez adimensional en función del número de Weissenberg para un fluido engrosante.

En la Figura 2.1 se muestra la dependencia del valor estacionario del esfuerzo cortante, σ_E , con el número de Weissenberg, W ; en esta figura se puede observar que σ_E crece de manera monótona al aumentar W , lo cual concuerda con la ecuación (2.7). La Figura 2.2 muestra las predicciones de la ecuación (2.8) para la fluidez, φ ,

en función de W ; en este caso, se puede observar una disminución monótona de φ al aumentar W . Estas figuras son un ejemplo de un campo de flujo uniforme con una sola fase. Más aún, estas soluciones son estables ante cualquier perturbación temporal, esto debido a que las condiciones (2.9) y (2.10) se cumplen de manera trivial.

Al incorporar los efectos de la difusión, la condición para las inestabilidades se presenta en la desigualdad (2.16); en dicha condición se define la función $h_+(q^2)$ [36, 40]; en la Figura 2.3 se muestran seis curvas correspondientes a esta función para diferentes valores de W . Cuando $W = 1.07$ en a) y $W = 5.3$ en b), la función $h_+(q^2)$ es siempre positiva y, de acuerdo con la condición (2.16), el régimen de flujo uniforme es estable, incluso contra perturbaciones espaciales. Este comportamiento se puede verificar debido a que, para valores positivos de $h_+(q^2)$, ω en la solución propuesta es negativa (ver la ecuación (2.15)), de manera que el comportamiento espacial de dicha solución desaparece en el tiempo.

Las curvas correspondientes a $W_{c1} = 1.0778$ en a) y $W_{c2} = 5.2833$ en b) en la Figura 2.3 representa los puntos críticos, cuando el mínimo de la curva es cero. En este caso, la solución uniforme es estable, pero ciertas perturbaciones alrededor de W_c pueden causar flujos inestables. También hay que señalar que W_{c1} representa el inicio del espacio de Turing, mientras que W_{c2} representa el final del espacio de Turing; por lo que la formación de patrones de Turing sólo es posible para valores $W_{c1} < W < W_{c2}$, en concordancia con la discusión anterior sobre el término $DKW(1 - \varphi_E)$.

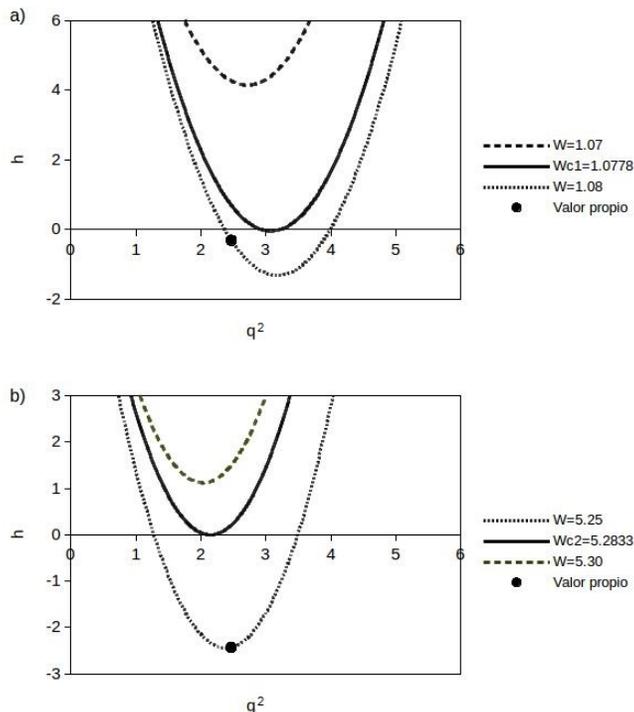


Figura 2.3: Función h_+ contra q^2 para diferentes valores de W . Las curvas superiores, correspondientes $W = 1.07$ en a) y $W = 5.3$ en b), no tiene raíces para h_+ , por lo que no existe el espacio de Turing para estos valores de W . Los mínimos de la curvas correspondientes a $W = 1.0778$ en a) y $W = 5.2833$ en b) son cero, es decir, los puntos críticos. Las curvas inferiores, correspondientes a $W = 1.08$ en a) y $W = 5.25$ en b), tienen dos raíces que determinan el espacio de Turing. El punto sólido en estas curvas representa el valor propio del operador laplaciano (ecuación (2.23)).

Las curvas correspondiente a $W = 1.08$ en a) y $W = 5.25$ en b) en la Figura 2.3, presentan dos raíces, q_-^2 y q_+^2 ; éstas determinan el intervalo donde la función $h_+(q^2)$ es negativa. En este intervalo se cumple la condición (2.16) y es conocido como espacio de Turing [35,36]. En este caso, la frecuencia de la solución es positiva, por lo que la solución uniforme es inestable y las perturbaciones espaciales crecen en

el tiempo (ver la ecuación (2.15)). Para valores de W dentro del espacio de Turing, el fluido presenta diferentes fases que forman patrones espaciales, es decir, patrones de Turing [35–37].

Finalmente, para que se puedan formar patrones espaciales, debe existir por lo menos un valor propio del operador laplaciano dentro del espacio de Turing [35, 36]. En la Figura 2.3 se muestra este valor con un punto sólido. En este caso, el cociente $\frac{n}{L}$ de la ecuación (2.23) tiene un valor de $\frac{1}{4}$, de aquí que la longitud característica de las bandas es 4 veces la longitud asociada con la difusión del esfuerzo. Por esta razón, en una celda con una extensión igual o menor a dicha longitud, el fluido no tiene espacio suficiente para formar múltiples bandas y el flujo es uniforme. Por otro lado, en celdas con una extensión de $4n$ con $n = 2, 3, 4, \dots$, el fluido tiene suficiente espacio para formar n bandas [36].

Hay que remarcar que el número de onda característico del sistema (q) está relacionado con el valor propio de la difusión (ver la ecuación (2.23)); por lo tanto, q también está relacionado con las condiciones de frontera del sistema. Por otro lado, en la ecuación (2.17) y en la Figura 2.3 se puede observar que el espacio de Turing y el número de onda crítico (q_c) están determinados por los parámetros físicos del fluido y son, como consecuencia, funciones de W .

La Figura 2.4 se muestra el número de onda crítico (línea continua) en función de W y la relación que tiene con el número de onda del sistema q , independiente de W (línea punteada constante). Aquí se puede observar que, al variar W , la relación entre q y q_c cambia, dando lugar a distintos comportamientos a lo largo del espacio de Turing (inestabilidades secundarias). En la Figura 2.4 también se muestran los

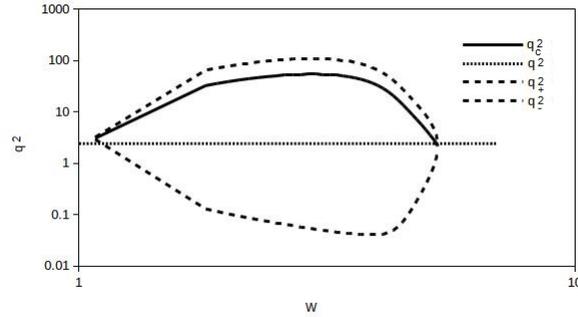


Figura 2.4: Espacio de Turing y número de onda crítico en función del número de Weissenberg. La curva continua representa a q_c^2 y las curvas discontinuas indican los valores que delimitan al espacio de Turing, q_+^2 y q_-^2 . La línea constante representa un valor de referencia para el número de onda del sistema q .

números de onda q_+^2 y q_-^2 (líneas discontinuas). Éstos representan las fronteras del espacio espacio de Turing para cada valor de W . Es necesario recordar que, aún cuando el espacio de Turing exista, el sistema no presentará bandas si el número de onda q no se encuentra entre q_+ y q_- . También, la Figura 2.4 muestra de manera explícita la relación entre la longitud del sistema de flujo, q , las longitudes características del fluido, q_+^2 y q_-^2 , y la interacción entre éstas para permitir la formación de patrones en el fluido. De esta manera, se puede interpretar a la Figura 2.4 como el equivalente a la meseta de esfuerzos de los modelos cúbicos.

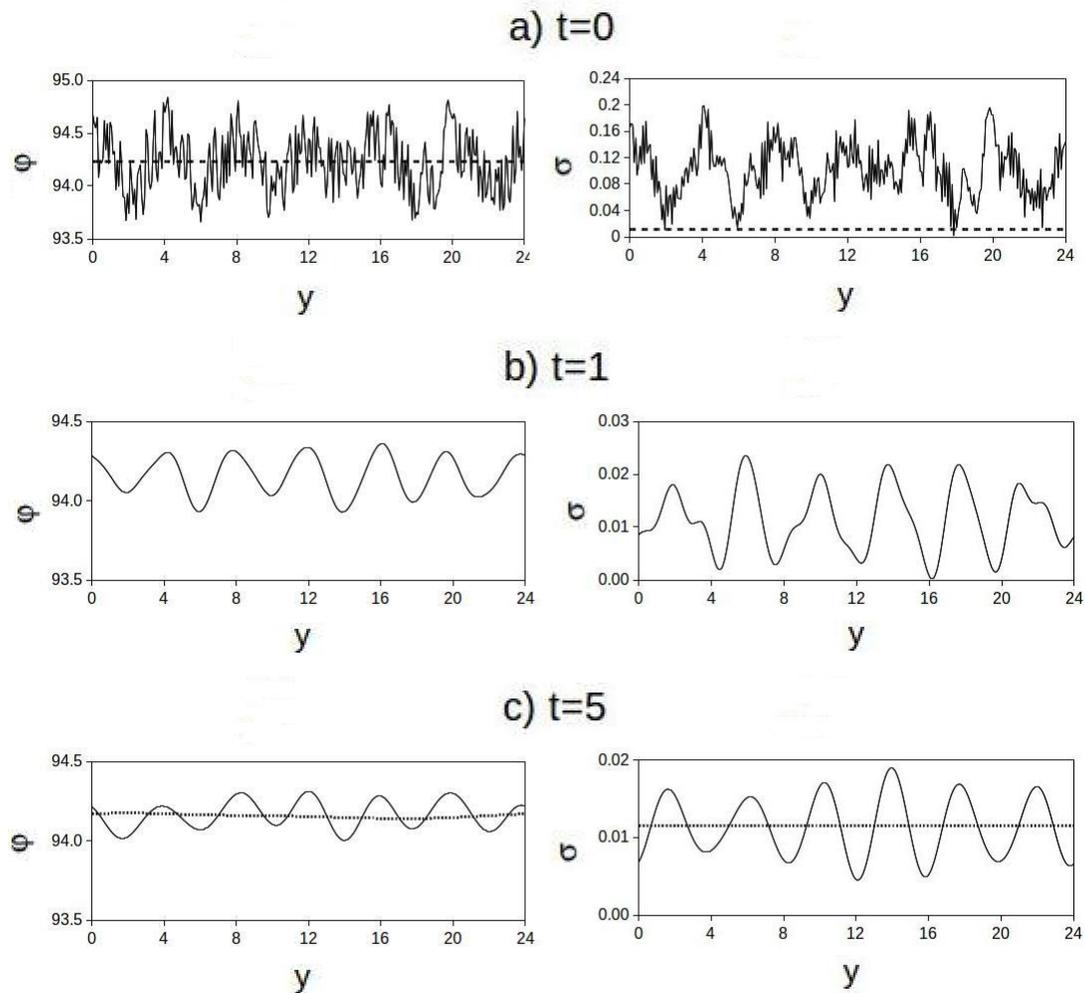


Figura 2.5: Patrones formados en el modelo BMP difusivo para fluidos engrosantes en la fluidez (izquierda) y en el esfuerzo (derecha). (a)- Las condiciones iniciales se obtienen con los correspondientes valores al equilibrio (línea punteada) más una perturbación aleatoria. (b)- La evolución del sistema a patrones después de un tiempo viscoelástico ($t = 1$). (c)- Patrones espaciales resultantes después de cinco tiempos viscoelásticos ($t = 5$). La línea punteada indica los correspondientes estados de equilibrio.

La Figura 2.5 muestra los resultados de las simulaciones numéricas del modelo

BMP difusivo. Las condiciones iniciales se presentan en la Figura 2.5a; éstas se obtiene sumando las soluciones al equilibrio calculadas con las ecuaciones (2.7) y (2.8) (línea punteada) con una perturbación espacial aleatoria en la dirección del valor propio del operador laplaciano (línea continua). Las evolución de los patrones se presenta en las Figuras 2.5b y 2.5c después de uno y cinco tiempos viscoleásticos, respectivamente, donde se muestra que los patrones resultantes están formados por un conjunto de bandas de diferentes propiedades mecánicas; estas bandas se asemejan a las bandas de corte.

En fluidos engrosantes, la posición de los máximos y mínimos en la Figura 2.5c muestra que la fase con mayor concentración de esfuerzo tiene baja fluidez, lo que concuerda con la discusión previa sobre la interacción cooperativa.

Se debe señalar que, en los patrones finales, la amplitud de las variaciones es menor que la amplitud de las perturbaciones originales. Aún así, el fluido conserva los patrones espaciales con la amplitud mostrada en la Figura 2.5c para tiempos de simulación de $t = 50$ (este resultado no se muestra aquí), lo que indica que el régimen de flujo bandeado es estable.

2.2.3. Fluido adelgazante

En la sección anterior se muestra que los patrones de Turing pueden existir en fluidos engrosantes, las condiciones para la formación de los patrones requieren una contribución positiva para la interacción cooperativa. En esta sección se presentan los resultados para fluidos adelgazantes; los parámetros usados son $\varphi_0 = 0.01$, $K = 15$, $T = 1.8$ y $D = 100$.

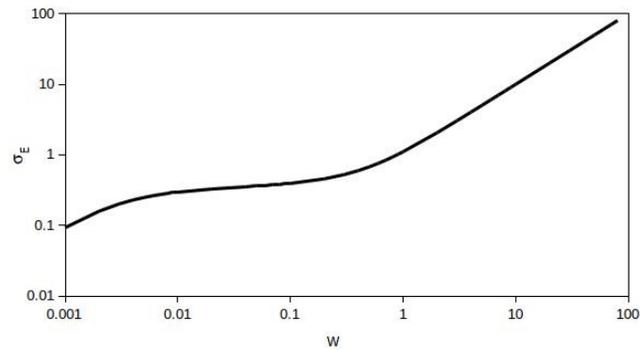


Figura 2.6: Esfuerzo cortante adimensional en función del número de Weissenberg para un fluido adelgazante.

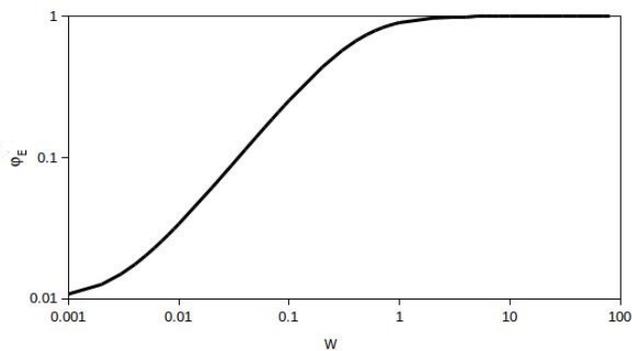


Figura 2.7: Fluidez adimensional en función del número de Weissenberg para un fluido adelgazante.

Las soluciones de equilibrio para el esfuerzo y la fluidez se presentan en las Figuras 2.6 y 2.7, respectivamente. En la Figura 2.6 se muestra que el esfuerzo cortante estacionario, obtenido con la ecuación (2.7), crece de manera monótona con W . El valor de equilibrio para la fluidez se obtiene con la ecuación (2.8), y se muestra en la Figura 2.7. Se puede observar que la fluidez también crece de manera monótona con

W . En este caso no es posible la formación de bandas de corte por inestabilidades mecánicas o descomposición espinodal; además, las soluciones de equilibrio son estables contra cualquier perturbación temporal, de acuerdo con las condiciones (2.9) y (2.10).

Para que existan patrones de Turing en fluidos adelgazantes, es necesario que la interacción cooperativa sea negativa, lo que genera la condición (2.19) y se define a la función h_- . En la Figura 2.8 se muestran seis curvas correspondientes a h_- para diferentes valores de W . Se puede observar que h_- es siempre positiva para $W = 0.006$ en a) y $W = 0.79$ en b), por lo que no se cumple la condición (2.19) y el sistema no forma patrones; en este caso, de acuerdo con (2.15), la frecuencia de la solución es negativa y las perturbaciones desaparecen en el tiempo.

Los puntos críticos están definidos en la Figura 2.8 por las curvas correspondientes a $W_{c1} = 0.0065$ en a) y $W_{c2} = 0.7777$ en b); el mínimo de estas curvas es cero, esto indica que la solución uniforme es estable, pero puede ser desestabilizada por ciertas perturbaciones en W . También, los valores W_{c1} y W_{c2} marcan el inicio y el final del espacio de Turing, respectivamente; por esta razón, sólo es posible formar patrones para valores $W_{c1} < W < W_{c2}$, lo que concuerda con el análisis del término $DKW(1 - \varphi_E)$.

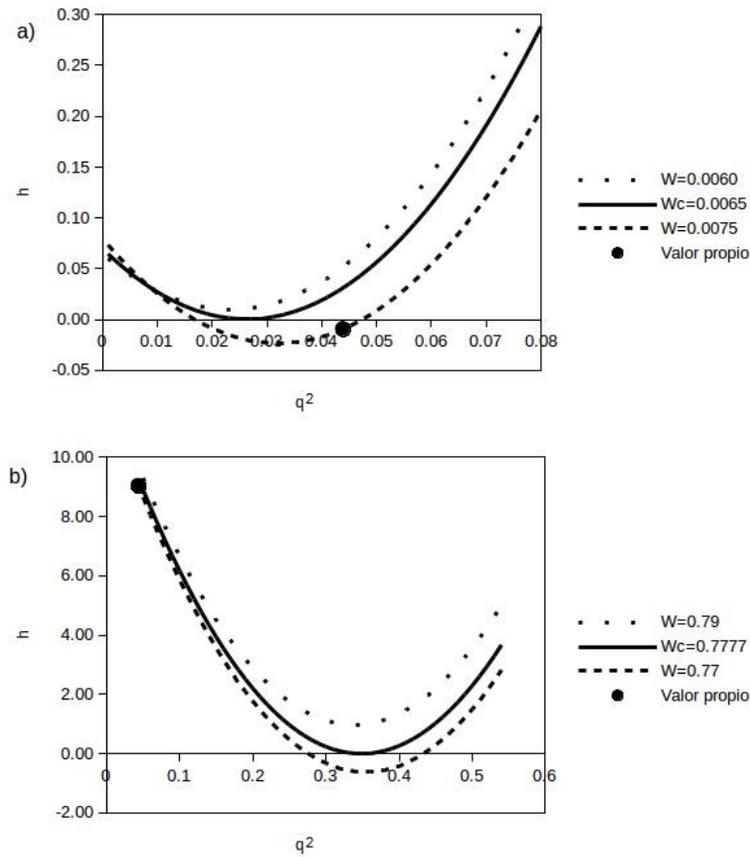


Figura 2.8: Función h_- contra q^2 para diferentes valores de W . Las curvas superiores, correspondientes $W = 0.006$ en a) y $W = 0.79$ en b), no tiene raíces para h_- , por lo que no existe el espacio de Turing para estos valores de W . Los mínimos de la curvas correspondientes a $W = 0.0065$ en a) y $W = 0.7777$ en b) son cero, es decir, los puntos críticos. Las curvas inferiores, correspondientes a $W = 0.075$ en a) y $W = 0.77$ en b), tienen dos raíces que determinan el espacio de Turing. El punto sólido en estas curvas representa el valor propio del operador laplaciano.

Por otro lado, en la Figura 2.8, las curvas correspondientes a $W = 0.075$ en a) y $W = 0.77$ en b) presentan dos raíces, q_-^2 y q_+^2 ; éstas determinan el intervalo donde la función $h_-(q^2)$ es negativa y se cumple la condición (2.16); es decir, existe el espacio

de Turing [35, 36]. Para valores de W dentro del espacio de Turing, el fluido puede formar patrones espaciales [35–37].

La formación de patrones de Turing requiere que exista al menos un valor propio del operador laplaciano dentro del espacio de Turing; dicho valor se presenta con un punto sólido en la Figura 2.8. En este caso, el cociente $\frac{n}{L}$ en la ecuación (2.23) tiene un valor de $\frac{1}{30}$, por lo que la longitud característica de las bandas es 30 veces la longitud de difusión del esfuerzo. La celda de fluido considerada debe tener una extensión de al menos 60 veces la longitud de difusión del esfuerzo para que se presenten bandas en el fluido.

Es importante señalar que, en la Figura 2.8a), el valor propio del operador laplaciano se encuentra dentro del espacio de Turing, por lo que el sistema puede formar patrones con la longitud determinada por q ; pero en la Figura 2.8b), el espacio de Turing ha variado drásticamente, y el valor propio del operador laplaciano ya no se encuentra dentro de éste; en este caso, aunque exista el espacio de Turing, la longitud de los patrones, determinada por q , no se encuentra dentro de las longitudes permitidas por el fluido, por lo que no se formarán patrones de Turing.

De manera análoga a lo ocurrido con el fluido engrosante, el número de onda característico del sistema (q) está relacionado con las condiciones de frontera del sistema; mientras que el espacio de Turing y el número de onda crítico (q_c) están determinados por los parámetros físicos del fluido, por lo que son funciones de W . La Figura 2.9 se muestra dicha dependencia del número de onda crítico (línea continua) con W y la relación que éste tiene con el número de onda del sistema q , el cual es independiente de W (línea punteada constante). Cuando se varía W , la relación entre

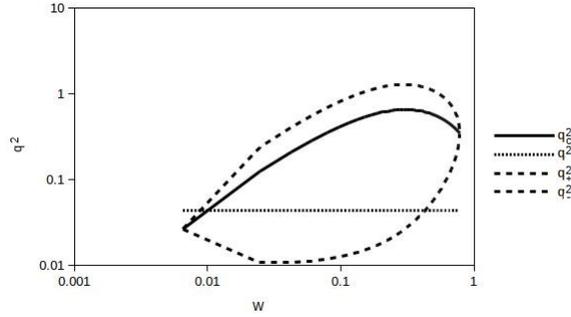


Figura 2.9: Espacio de Turing y número de onda crítico en función del número de Weissenberg. La curva continua representa a q_c^2 y las curvas discontinuas indican los valores que delimitan al espacio de Turing, q_+^2 y q_-^2 . La línea constante representa un valor de referencia para el número de onda del sistema q .

q y q_c cambia, lo que puede generar distintos comportamientos a lo largo del espacio de Turing (inestabilidades secundarias). En la Figura 2.9 también se muestran los números de onda q_+^2 y q_-^2 (líneas discontinuas). Éstos representan las fronteras del espacio espacio de Turing para cada valor de W . Es necesario recordar que el sistema no presentará bandas si el número de onda q no se encuentra entre q_+ y q_- .

De nuevo, la Figura 2.9 muestra de manera explícita la relación entre la longitud del sistema de flujo, q , y las longitudes características del fluido, q_+^2 y q_-^2 ; por lo que se puede interpretar a la Figura 2.9 como el equivalente a la meseta de esfuerzos de los modelos cúbicos.

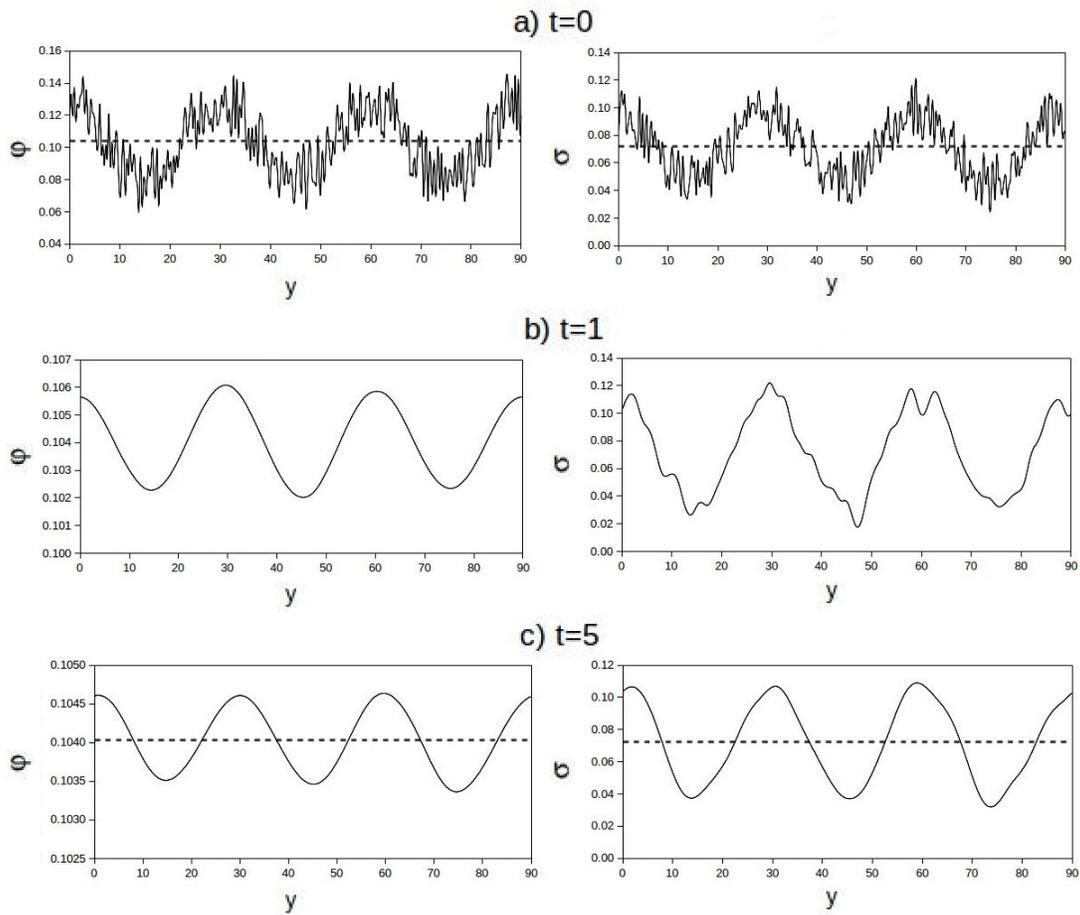


Figura 2.10: Patrones formados en el modelo BMP difusivo para fluidos adelgazantes en la fluidez (izquierda) y en el esfuerzo (derecha). (a) Las condiciones iniciales se obtienen con los correspondientes valores al equilibrio (línea punteada) más una perturbación aleatoria. (b) La evolución del sistema a patrones después de un tiempo viscoelástico ($t = 1$). (c) Patrones espaciales resultantes después de cinco tiempos viscoelásticos ($t = 5$). Se debe notar la disminución en la amplitud de las bandas.

Los resultados de las simulaciones numéricas de muestran en la Figura 2.10; la fluidez a la izquierda y el esfuerzo a la derecha. De manera análoga al fluido engrosante, las condiciones iniciales se presentan en la Figura 2.10a, las soluciones de

equilibrio se calcularon con las ecuaciones (2.7) y (2.8) para $W = 0.0075$ (línea punteada), más una perturbación aleatoria en la dirección del valor propio del operador laplaciano (línea continua). En la Figura 2.10b se presenta la evolución de los patrones después de un tiempo viscoelástico ($t = 1$); la fluidez (izquierda) muestra el patrón esperado, presentando una banda cada 30 unidades de longitud, pero el esfuerzo muestra una situación más dinámica donde las bandas no están bien definidas. Finalmente, después de cinco tiempos viscoelásticos ($t = 5$), las bandas se han definido; éstas representan múltiples fases con propiedades mecánicas diferentes.

Para fluidos adelgazantes, la posición de los máximos y mínimos en la Figura 2.5c muestra que la fase con mayor concentración de esfuerzo tiene alta fluidez, lo que corrobora la discusión previa sobre la interacción cooperativa.

2.3. Efecto de los esfuerzos normales

En las secciones anteriores la contribución de los esfuerzos normales, en particular, la segunda diferencia de esfuerzos normales, no fue tomada en cuenta a favor de lograr un tratamiento analítico más completo. Como consecuencia, el fluido presenta un comportamiento viscoelástico muy débil. Aquí se trata al fluido engrosante de la sección anterior y se incluye la contribución de la segunda diferencia de esfuerzos normales; la primera diferencia de esfuerzos normales no es incluida debido a que la ecuación para ésta no está acoplada con el resto de la dinámica.

La versión del modelo BMP que incluye esfuerzos normales es:

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = -\varphi N_2 + W^2 \psi_2 + \nabla^2 N_2 + D \nabla^2 \varphi, \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = -\varphi \sigma + W + \nabla^2 \sigma + D \nabla^2 \varphi, \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = T(\varphi_0 - \varphi) + K(1 - \varphi)W\sigma + D \nabla^2 \varphi. \quad (2.26)$$

Estas ecuaciones se presentan de manera adimensional. Las soluciones de equilibrio del modelo BMP son:

$$N_{2E} = \frac{W^2 \psi_2}{\varphi_E}, \quad (2.27)$$

$$\sigma_E = \frac{(1 + N_2)W}{\varphi_E}, \quad (2.28)$$

$$\varphi_E^3 + \left(\frac{KW}{T} - \varphi_0 \right) \varphi_E^2 + \frac{KW^2}{T} (W^2 \psi_2 - 1) \varphi_E - \frac{KW^4 \psi_2}{T} = 0, \quad (2.29)$$

el subíndice E significa que son valores al equilibrio; éstos son, en general, función de W . Es importante mencionar que la ecuación (2.29) puede presentar una o tres soluciones reales, de las cuales sólo una tiene sentido físico y es estable. Debido a la complejidad de la ecuación (2.29), no es posible determinar *a priori* el sentido físico de cada solución mas que en casos límite. Cuando $W \rightarrow 0$, existe sólo una solución a la ecuación (2.29) dada por $\varphi_E = \varphi_0$; de igual manera, cuando $W \rightarrow \infty$, la única solución a la ecuación (2.29) está dada por $\varphi_E = 1$.

La estabilidad de las soluciones se determina evaluando los valores propios del sistema linealizando alrededor de las soluciones de equilibrio; los valores propios son las soluciones de la ecuación:

$$\lambda^3 + I\lambda^2 + II\lambda + III = 0, \quad (2.30)$$

con:

$$I = 2\varphi_E + T + KW\sigma_E, \quad (2.31)$$

$$II = \varphi_E^2 + 2T\varphi_E + KW(1 + \varphi_E)\sigma_E, \quad (2.32)$$

$$III = T\varphi_E^2 + KW\varphi_E\sigma_E + KW^2(1 - \varphi_E)N_{2E}. \quad (2.33)$$

De nuevo, sólo es posible determinar *a priori* los valores propios en casos límite. Cuando $W \rightarrow 0$, los valores propios son $\lambda_1 = -T$ y $\lambda_{2,3} = -\varphi_0$; así, la solución de equilibrio dada por $\varphi_E = \varphi_0$ es estable. De manera análoga, cuando $W \rightarrow \infty$, los valores propios son $\lambda_1 = -T - KW\sigma_E$ y $\lambda_{2,3} = -1$; nuevamente, la solución de equilibrio $\varphi_E = 1$ es estable. Es conveniente recordar que los valores propios están asociados con los tiempos de la dinámica; así, cuando $W \rightarrow 0$, el tiempo característico de construcción estructural T domina la dinámica, mientras que el tiempo característico asociado a la disipación $KW\sigma_E$ es dominante cuando $W \rightarrow \infty$.

El sistema (2.24) a (2.26) puede presentar bifurcaciones estacionarias, cambio en la estabilidad o cambio en el número de soluciones de equilibrio, cuando $\lambda_i = 0$, esta condición requiere que $III = 0$ [31, 36]. En el caso de fluidos adelgazantes ($\varphi_E < 1$), la condición de bifurcación se cumple cuando $N_{2E} < 0$. Por otro lado, los fluidos engrosantes ($\varphi_E > 1$) requieren que $N_{2E} > 0$ para presentar bifurcaciones estacionarias. Es importante mencionar que el término correspondiente a N_{2E} en la ecuación (2.33) es siempre pequeño, comparado con el término que contiene a σ_E , por lo que la existencia de bifurcaciones estacionarias es muy poco probable.

Para obtener el efecto de la difusión, se plantean perturbaciones a las soluciones

de equilibrio:

$$N_2 = N_{2E} + \hat{N}_2, \quad (2.34)$$

$$\sigma = \sigma_E + \hat{\sigma}, \quad (2.35)$$

$$\varphi = \varphi_E + \hat{\varphi}. \quad (2.36)$$

Se definen el vector de perturbaciones y el operador lineal de la siguiente manera:

$$\underline{u} = \begin{pmatrix} \hat{N}_2 \\ \hat{\sigma} \\ \hat{\varphi} \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

$$\underline{l} = \begin{pmatrix} -\varphi_E + \nabla^2 & 0 & -N_{2E} + D\nabla^2 \\ W & -\varphi_E + \nabla^2 & -\sigma_E + D\nabla^2 \\ 0 & KW(1 - \varphi_E) & -T - KW\sigma_E + D\nabla^2 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Con estas relaciones, el sistema perturbado se puede escribir como $\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} = \underline{l} \cdot \underline{u}$. Se propone que esta ecuación lineal tiene solución en forma de ondas planas:

$$\underline{u} = \underline{u}_0 e^{\omega t} e^{iqy}. \quad (2.39)$$

Aquí, ω es el valor propio (la frecuencia) correspondiente al número de onda q ; en esta parte se ha supuesto que las bandas son estructuras prácticamente unidimensionales; por esta razón $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial y^2}$. Los valores propios del sistema son las raíces del siguiente

polinomio:

$$\omega^3 + I_D\omega^2 + II_D\omega + III_D = 0, \quad (2.40)$$

con:

$$I_D = I + (D + 2)q^2, \quad (2.41)$$

$$II_D = II + [2I + 2(D - 1)\varphi_E + DKW(1 - \varphi_E)]q^2 + (2D + 1)q^4, \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} III_D = III + [II + (D - 1)\varphi_E^2 + DKW(1 - \varphi_E)(W + \varphi_E)]q^2 + \\ + [I + 2(D - 1)\varphi_E + DKW(1 - \varphi_E)]q^4 + Dq^6. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Resulta evidente que, cuando $q^2 \rightarrow 0$, se recuperan las ecuaciones (2.30)-(2.33).

Para que existan patrones de Turing, es necesario que los valores propios λ_i sean negativos, mientras que al menos un valor propio con difusión ω_i sea positivo; esto ocurre en un intervalo de q^2 el cual se conoce como espacio de Turing [35, 36]. El punto crítico de la inestabilidad está dado por q_c^2 y W_c , que cumplen con $\omega = 0$, es decir, $III_D = 0$ [36].

Las condiciones suficientes para la formación de patrones de Turing son las mismas que en el caso sin esfuerzos normales. En este caso, el sistema debe tener condiciones de frontera periódicas y debe existir un valor propio del operador laplaciano dentro del espacio de Turing [36].

2.4. Discusión

En la sección anterior se considera un fluido engrosante con segunda diferencia de esfuerzos normales. Con esta elección se pretende mostrar los distintos comportamientos que puede presentar el modelo BMP al incluir esfuerzos normales. Los parámetros usados son $\varphi_0 = 100$, $T = 0.2$, $K = 1$, $\psi_2 = 0.01$ y $D = 2$.

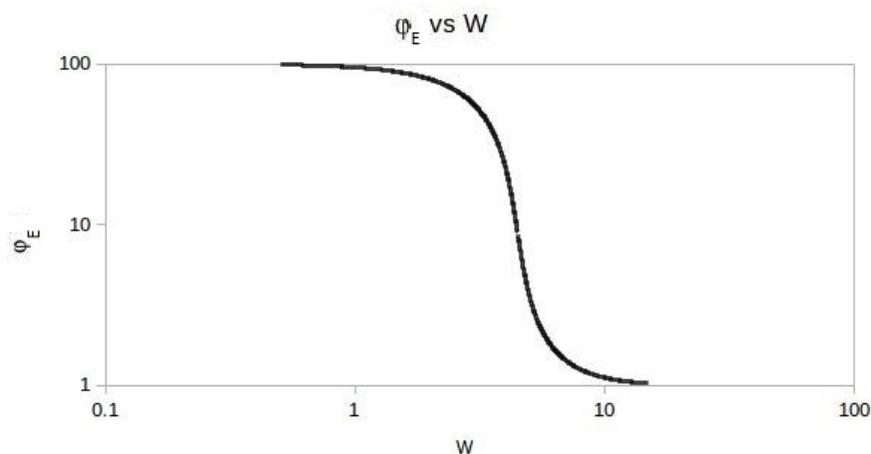


Figura 2.11: Fluidez adimensional en función del número de Weissenberg para un fluido engrosante.

En la Figura 2.11 se presenta la curva para φ_E a distintos valores de W , obtenida a partir de la ecuación (2.29). En ésta se pueden comprobar los comportamientos límite presentados. Cuando $W \rightarrow 0$, la fluidez tiende a φ_0 , y cuando $W \rightarrow \infty$, la fluidez tiende a 1. La ecuación (2.29) puede presentar múltiples raíces reales, de las cuales se espera que sólo una tenga sentido físico, es decir, que sea positiva; más aún, para que cambie la estabilidad de las soluciones, es necesario que $III = 0$ en la ecuación (2.33). Tal situación no ocurre para la combinación de parámetros usada.

La curva correspondiente a N_{2E} se presenta en la Figura 2.12. Se puede observar que la curva crece de manera monótona con W . De manera análoga, la Figura 2.13 muestra que σ_E tiene un comportamiento semejante al de N_{2E} , presentando un crecimiento monótono con W . En este caso no se presentan bandas por inestabilidades mecánicas o descomposición espinodal.

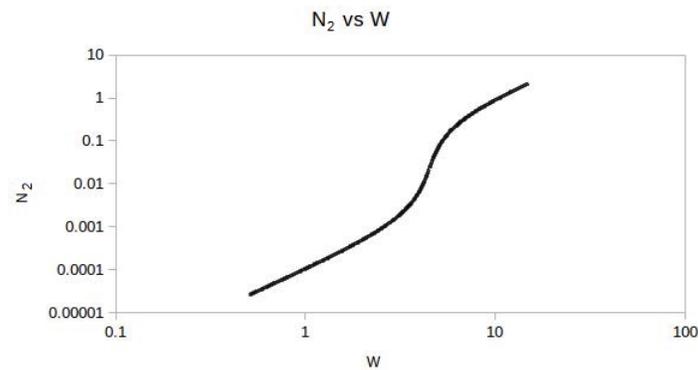


Figura 2.12: Segunda diferencia de esfuerzos normales adimensional en función del número de Weissenberg para un fluido engrosante.

Las soluciones de equilibrio, presentadas en las Figuras 2.11 a 2.13, deben ser linealmente estables, es decir, deben tener valores propios negativos. Este comportamiento se puede comprobar fácilmente debido a que los valores propios dependen de manera continua de W , el hecho de que todos los valores propios son negativos en los casos límite presentados y que no se cumplen las condiciones para que algún valor propio sea cero.

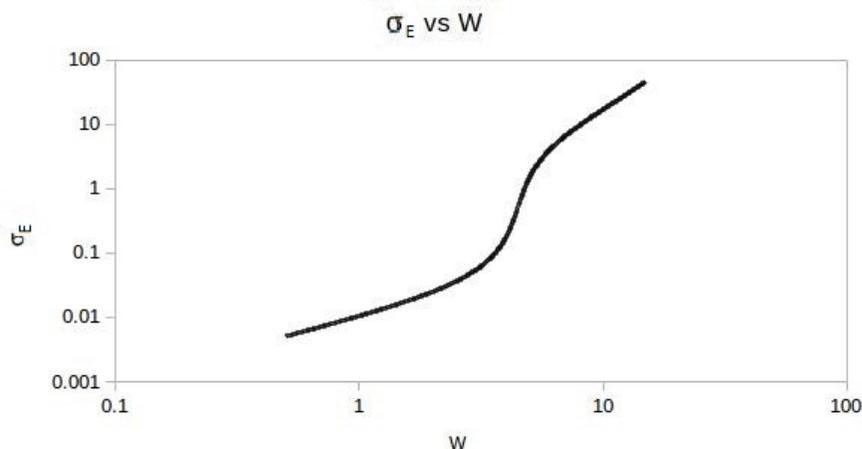


Figura 2.13: Esfuerzo cortante adimensional en función del número de Weissenberg para un fluido engrosante.

Para que el sistema presente patrones de Turing, es necesario que por lo menos un valor propio difusivo ω_i se encuentre dentro del espacio de Turing para algún número de onda q . La Figura 2.14 muestra los valores propios difusivos, calculados con la ecuación (2.40), para distintos valores de W . En la curva correspondiente a $W = 1.06$ se puede observar que el valor propio es siempre negativo, en este caso el sistema es estable ante cualquier perturbación temporal, de acuerdo con la ecuación (2.39). Por otro lado, el máximo de la curva correspondiente a $W_c = 1.066$ es cero; esta condición define el punto crítico del sistema. En este punto el sistema es estable, pero puede presentar inestabilidades ante perturbaciones específicas. La curva correspondiente a $W = 1.07$ presenta un intervalo donde ω es positiva, dicho intervalo define el espacio de Turing para el modelo BMP. En éste, el sistema es inestable ante cualquier perturbación espacial y evoluciona para formar patrones de

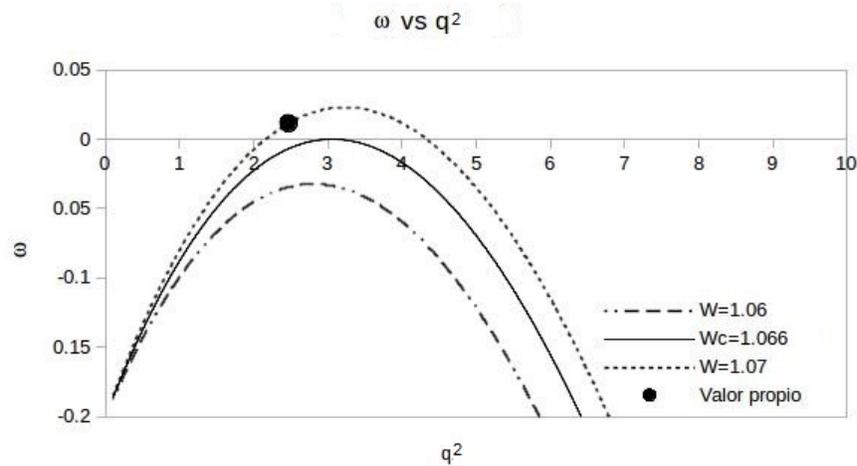


Figura 2.14: Valor propio ω contra q^2 para diferentes valores de W . La curva inferior ($W = 1.06$) siempre es negativa, por lo que el sistema es estable. El máximo de la curva correspondiente a $W = 1.066$ es cero, esto es, el punto crítico para la inestabilidad. La curva superior ($W = 1.07$) presenta un intervalo donde $\omega > 0$, en este intervalo el sistema es inestable; el punto sólido en esta curva representa al valor propio del operador laplaciano.

Turing. Finalmente, el punto sólido representa el valor propio del operador laplaciano para un valor de $\frac{n}{L} = \frac{1}{4}$; así, el sistema requiere una extensión mínima de 8 veces la longitud difusiva del esfuerzo para presentar múltiples bandas.

Con estos resultados se hace evidente que N_2 no tiene mucha influencia en el comportamiento de los patrones de Turing, la variación en el punto crítico es mínima (aproximadamente del 1%) y el valor propio del operador laplaciano no presenta variación. Este hecho es congruente con la literatura, por lo que se puede ignorar el efecto de las diferencias de esfuerzos normales en la descripción de las bandas de corte [2, 4, 9, 13, 16, 20].

Capítulo 3

Ecuaciones de amplitud para el modelo BMP

En el capítulo anterior se plantearon las condiciones de estabilidad lineal para la formación de patrones de Turing. Como resultado de tales condiciones, se definió un punto crítico, el cual marca el inicio de las inestabilidades y del régimen de flujo con bandas de corte. Las soluciones propuestas para los sistemas lineales presentados se pueden considerar exactas cuando el número de Weissenberg es cercano al valor crítico [29–33].

Puesto que, por sobre el punto crítico, existe un intervalo que cumple con las condiciones (2.16) y (2.19), el valor propio del operador lapaciano q puede tomar valores que difieren del crítico. De acuerdo con la ecuación (2.15) y las Figuras 2.3 y 2.8, el valor crítico q_c produce el valor máximo para ω , es decir, q_c provoca que las perturbaciones espaciales crezcan más rápido que cualquier otro valor de

q que cumpla con las condiciones (2.16) y (2.19). Así, el valor propio del operador laplaciano describe la formación de patrones con una longitud que difiere de la crítica $(\frac{1}{q_c})$, y con una rapidez menor a la óptima $(\frac{1}{\omega_c})$. Estas diferencias pueden provocar modulaciones en la fase y en la amplitud de los patrones originales, así como dar lugar a inestabilidades secundarias, por lo que no se pueden describir con sólo el operador lineal \underline{L} .

En este capítulo se consideran los términos no lineales del sistema. Esto se lleva a cabo perturbando la solución lineal obtenida con el mecanismo de Turing. Cerca del punto crítico, la perturbación de los patrones obtenidos en el análisis lineal está gobernada por ecuaciones de amplitud. Dichas ecuaciones describen las modulaciones en espacio y tiempo de los patrones iniciales [29–33].

La forma de la ecuación de amplitud depende de la naturaleza de la inestabilidad lineal y la información física del sistema particular queda contenida en los coeficientes de la ecuación. Finalmente, la ecuación de amplitud es utilizada para determinar inestabilidades secundarias cerca del punto crítico [30, 31, 34, 35].

3.1. Ecuación lineal de las amplitudes

Por sobre el valor crítico q_c , definido en el análisis lineal, existe un conjunto de ondas inestables dado por [30, 31, 34, 35]:

$$\underline{u} = \int_{q \in \Delta q} \underline{u}(q) e^{iqy} dq = \int_{q \in \Delta q} \underline{u}_0 e^{\omega t} e^{i(q-q_c)y} e^{iq_c y} dq, \quad (3.1)$$

donde \underline{u}_0 corresponde al vector propio del punto crítico y Δq son todos los valores de q con $\omega > 0$.

Para el desarrollo subsecuente es útil recordar que $\omega = \omega(W, q)$, por lo que éste se puede aproximar alrededor del punto crítico de la siguiente manera [31, 34, 35]:

$$\omega(W, q) \approx \omega_0[\mu - \xi_0^2(q - q_c)^2], \quad (3.2)$$

donde:

$$\omega_0 = W_c \frac{\partial \omega}{\partial W}, \quad (3.3)$$

$$\mu = \frac{W - W_c}{W_c}, \quad (3.4)$$

$$-\xi_0^2 = \frac{1}{2W_c} \frac{1}{\partial \omega / \partial W} \frac{\partial^2 \omega}{\partial q^2}. \quad (3.5)$$

Para obtener estas expresiones, es necesario sustituir en la expansión de ω el hecho de que en el punto crítico ocurre una bifurcación y también que se trata de un mínimo en función de W .

Para encontrar la relación entre las escalas temporales y espaciales de la dinámica se define la envolvente de amplitudes A , su evolución en el tiempo y en el espacio de la siguiente manera:

$$A(t, y) = \int_{q \in \Delta q} e^{\omega t} e^{i(q - q_c)y} dq, \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial A(t, y)}{\partial t} = \int_{q \in \Delta q} \omega e^{\omega t} e^{i(q - q_c)y} dq, \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial^2 A(t, y)}{\partial y^2} = - \int_{q \in \Delta q} e^{\omega t} (q - q_c)^2 e^{i(q - q_c)y} dq. \quad (3.8)$$

Al sustituir las ecuaciones (3.2) y (3.8) en la ecuación (3.7) se obtiene la siguiente expresión para la envolvente de amplitudes [31, 34, 35]:

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{\partial A(t, y)}{\partial t} = \mu A + \xi_0^2 \frac{\partial^2 A(t, y)}{\partial y^2}, \quad (3.9)$$

esta ecuación contiene la longitud característica de las inestabilidades, ξ_0 , y el tiempo característico de las mismas, $\frac{1}{\omega_0}$. También, a partir de la forma de la ecuación de amplitudes, se puede deducir la relación entre las escalas espacial y temporal de la dinámica, $\frac{\partial A(t, y)}{\partial t} \approx \frac{\partial^2 A(t, y)}{\partial y^2}$; dicha relación resulta de gran importancia en el desarrollo subsecuente.

3.2. Contribuciones no lineales a las amplitudes

La solución alrededor del punto crítico se puede aproximar en función de un parámetro pequeño relacionado con la distancia al valor crítico, $\epsilon = W - W_c$, de manera que, al ser separada en ordenes de ϵ , la ecuación no lineal se convierte en un sistema de ecuaciones lineales [31, 34, 35]. Para obtener a dicho sistema, es necesario expandir los operadores que aparecen en la ecuación para las perturbaciones con términos no lineales y el número de Weissenberg, obteniendo las siguientes aproximaciones:

$$\underline{u} \approx \epsilon \underline{u}_1 + \epsilon^2 \underline{u}_2 + \epsilon^3 \underline{u}_3 + \dots, \quad (3.10)$$

$$\underline{l} \approx \underline{l}_0 + \epsilon \underline{l}_1 + \epsilon^2 \underline{l}_2 + \dots, \quad (3.11)$$

$$\underline{N} \approx \epsilon^2 \underline{N}_2 + \epsilon^3 \underline{N}_3 + \dots, \quad (3.12)$$

$$W \approx W_c + \epsilon W_1 + \epsilon^2 W_2 + \dots \quad (3.13)$$

La expansión de W provoca que los valores de equilibrio σ_E y φ_E también varíen con ϵ , por lo que pueden aproximarse por las siguientes expresiones:

$$\sigma_E \approx \sigma_E(W_c) + \epsilon \sigma_E(W_1) + \epsilon^2 \sigma_E(W_2) + \dots = \sigma_{E0} + \epsilon \sigma_{E1} + \epsilon^2 \sigma_{E2} + \dots, \quad (3.14)$$

$$\varphi_E \approx \varphi_E(W_c) + \epsilon \varphi_E(W_1) + \epsilon^2 \varphi_E(W_2) + \dots = \varphi_{E0} + \epsilon \varphi_{E1} + \epsilon^2 \varphi_{E2} + \dots \quad (3.15)$$

En estas expresiones debe entenderse que los términos σ_{Ej} y φ_{Ej} representan las contribuciones a σ_E y φ_E debido a W_j .

Para la expansión de los operadores; $\frac{\partial}{\partial t}$ y $\frac{\partial}{\partial y}$ se utiliza el resultado de la ecuación lineal de amplitudes. Ésta muestra que las variaciones temporales son de orden superior a las variaciones espaciales [31, 34, 35], lo que propone las siguientes expansiones:

$$\frac{\partial}{\partial t} \approx \frac{\partial}{\partial t_0} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_1}, \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \approx \frac{\partial}{\partial y_0} + \epsilon \frac{\partial}{\partial y_1}. \quad (3.17)$$

Al sustituir las expresiones (3.10) a (3.17) en la ecuación para las perturbaciones y separar el resultado por ordenes de ϵ , se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial \underline{u}_1}{\partial t_0} = \underline{l}_{\underline{0}} \cdot \underline{u}_1, \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial \underline{u}_2}{\partial t_0} = \underline{l}_{\underline{0}} \cdot \underline{u}_2 + \underline{l}_{\underline{1}} \cdot \underline{u}_1 + \underline{N}_2, \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial \underline{u}_3}{\partial t_0} + \frac{\partial \underline{u}_1}{\partial t_1} = \underline{l}_0 \cdot \underline{u}_3 + \underline{l}_1 \cdot \underline{u}_2 + \underline{l}_2 \cdot \underline{u}_1 + \underline{N}_3, \quad (3.20)$$

donde:

$$\underline{l}_0 = \begin{pmatrix} -\varphi_{E0} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} & -\sigma_{E0} + D \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \\ KW_c(1 - \varphi_{E0}) & -T - KW_c\sigma_{E0} + D \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

$$\underline{l}_1 = \begin{pmatrix} -\varphi_{E1} + 2 \frac{\partial^2}{\partial y_0 \partial y_1} & -\sigma_{E1} + 2D \frac{\partial^2}{\partial y_0 \partial y_1} \\ K(W_1 - W_c\varphi_{E1} - W_1\varphi_{E0}) & -K(W_c\sigma_{E1} + W_1\sigma_{E0}) + 2D \frac{\partial^2}{\partial y_0 \partial y_1} \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

$$\underline{l}_2 = \begin{pmatrix} -\varphi_{E2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} & -\sigma_{E2} + D \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \\ K(W_2 - W_c\varphi_{E2} - W_1\varphi_{E1} - W_2\varphi_{E0}) & -K(W_c\sigma_{E2} + W_1\sigma_{E1} + W_2\sigma_{E0}) + D \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

$$\underline{N}_2 = - \begin{pmatrix} 1 \\ KW_c \end{pmatrix} \hat{\sigma}_1 \hat{\varphi}_1, \quad (3.24)$$

$$\underline{N}_3 = - \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_1 \hat{\varphi}_2 + \hat{\sigma}_2 \hat{\varphi}_1 \\ KW_c(\hat{\sigma}_1 \hat{\varphi}_2 + \hat{\sigma}_2 \hat{\varphi}_1) + KW_1 \hat{\sigma}_1 \hat{\varphi}_1 \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

3.2.1. Solución a orden ϵ

Como se puede observar en la ecuación (3.18), a orden ϵ se recupera el problema lineal. La solución a éste está dada por:

$$\underline{u}_1 = \underline{u}_0 e^{iqcy}, \quad (3.26)$$

donde \underline{u}_0 es el vector propio de \underline{l}_0 , es decir:

$$\underline{u}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{KW_c(1-\varphi_{E0})}{T+KW_c\sigma_{E0}+Dq_c^2} \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

A órdenes superiores, las ecuaciones tienen la forma $\left(\frac{\partial}{\partial t_0} - \underline{l}_0\right) \cdot \underline{u}_j = \underline{I}_j$. El operador del lado izquierdo es singular, debido a que el valor propio correspondiente a W_c es cero, como lo muestra la ecuación (3.18). Para resolver las ecuaciones a órdenes superiores es necesario restringir la solución a un subespacio donde el operador sea invertible, dicho subespacio está dado por la condición de Fredholm [31, 34, 35], es decir:

$$\underline{v}_0 \cdot \underline{I}_j = 0, \quad (3.28)$$

donde \underline{v}_0 es el vector propio izquierdo de \underline{l}_0 , esto es:

$$\underline{v}_0^T = \begin{pmatrix} 1 \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\varphi_{E0}+q_c^2}{KW_c(1-\varphi_{E0})} \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

3.2.2. Solución a orden ϵ^2

Al aplicar la condición de Fredholm a la ecuación (3.19) se obtiene $\underline{v}_0 \cdot \underline{l}_1 \cdot \underline{u}_1 = 0$. Separando las partes real e imaginaria, e igualándolas a cero, se obtiene el siguiente sistema:

$$[\beta K(1 - \varphi_{E0} - \alpha\sigma_{E0})W_1 - (\varphi_{E1} + \alpha\sigma_{E1})(1 + \beta KW_c)]W_1 = 0, \quad (3.30)$$

$$2q_c(1 + \alpha D + \alpha\beta D)\frac{\partial W_1}{\partial y_1} = 0. \quad (3.31)$$

La ecuación (3.31) se cumple trivialmente debido a que $1 + \alpha D + \alpha\beta D = 0$; por otra parte, la ecuación (3.30) se cumple cuando $W_1 = 0$. Estos resultados indican que la forma normal de la bifurcación es $\frac{\partial A}{\partial t} = \mu A - gA^3$. También, el hecho que $W_1 = 0$ cancela las contribuciones de éste en las expresiones (3.13) a (3.15), y simplifica los operadores (3.22), (3.23) y (3.25) para obtener:

$$\underline{l}_1 = \begin{pmatrix} 2\frac{\partial^2}{\partial y_0 \partial y_1} & +2D\frac{\partial^2}{\partial y_0 \partial y_1} \\ 0 & 2D\frac{\partial^2}{\partial y_0 \partial y_1} \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

$$\underline{l}_2 = \begin{pmatrix} -\varphi_{E2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} & -\sigma_{E2} + D\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \\ K(W_2 - W_c\varphi_{E2} - W_2\varphi_{E0}) & -K(W_c\sigma_{E2} + W_2\sigma_{E0}) + D\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

$$\underline{N}_3 = - \begin{pmatrix} 1 \\ KW_c \end{pmatrix} (\hat{\sigma}_1 \hat{\varphi}_2 + \hat{\sigma}_2 \hat{\varphi}_1). \quad (3.34)$$

Finalmente, la solución \underline{u}_2 es la suma de la solución al problema lineal más una solución particular con términos resonantes [31, 34, 35]:

$$\underline{u}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \end{pmatrix} C_2 e^{iq_c y} + \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} e^{iq_c y} + \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} e^{2iq_c y}. \quad (3.35)$$

Los coeficientes a_j y b_j se encuentran al sustituir la solución (3.35) en la ecuación

(3.19) [35], dando como resultado:

$$a_1 - \frac{1}{\alpha}b_1 = 2iq_c \left(\frac{1 + \alpha D}{\varphi_{E0} + q_c^2} \right) \frac{\partial C_1}{\partial y_1}, \quad (3.36)$$

$$a_2 = - \left(\frac{4Dq_c^2(1 - KW_c) + T}{8Dq_c^4 + T\varphi_{E0} + KW_c\sigma_{E0}} \right) \alpha C_1^2, \quad (3.37)$$

$$b_2 = - \left(\frac{KW_c(4q_c^2 + 1)}{8Dq_c^4 + T\varphi_{E0} + KW_c\sigma_{E0}} \right) \alpha C_1^2. \quad (3.38)$$

3.2.3. Solución a orden ϵ^3

Al aplicar la condición (3.28) a la ecuación (3.20) se obtiene:

$$\underline{v}_0 \cdot \frac{\partial \underline{u}_1}{\partial t_1} = \underline{v}_0 \cdot \underline{l}_{\underline{1}} \cdot \underline{u}_2 + \underline{v}_0 \cdot \underline{l}_{\underline{2}} \cdot \underline{u}_1 + \underline{v}_0 \cdot \underline{N}_3. \quad (3.39)$$

Esta expresión será analizada por términos. Primero, del término del lado izquierdo se obtiene:

$$\underline{v}_0 \cdot \frac{\partial \underline{u}_1}{\partial t_1} = (1 + \alpha\beta) \frac{\partial C_1}{\partial t_1}; \quad (3.40)$$

el primer término del lado derecho es:

$$\underline{v}_0 \cdot \underline{l}_{\underline{1}} \cdot \underline{u}_2 = -4q_c^2 \left(\frac{1 + \alpha D}{\varphi_{E0} + q_c^2} \right) \frac{\partial^2 C_1}{\partial y_1^2}; \quad (3.41)$$

a partir del segundo término del lado derecho se obtiene:

$$\underline{v}_0 \cdot \underline{l}_{\underline{2}} \cdot \underline{u}_1 = [\varphi_{E2} - \alpha\sigma_{E2} + K(W_2 - W_c\varphi_{E2} - W_2\varphi_{E0})\beta - K(W_c\sigma_{E2} + W_2\sigma_{E0})\alpha\beta]C_1. \quad (3.42)$$

Del tercer término del lado derecho se obtiene:

$$\underline{v}_0 \cdot \underline{N}_3 = \left(\frac{4q_c^2 [KW_c(1 - \alpha D) + \alpha D] + KW_c + \alpha T}{8Dq_c^4 + T\varphi_{E0} + KW_c\sigma_{E0}} \right) \alpha |C_1|^2 C_1. \quad (3.43)$$

Al sustituir los términos (3.40) a (3.43) en la expresión (3.39) y acomodar los coeficientes se obtiene:

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{\partial C_1}{\partial t_1} = \xi_0^2 \frac{\partial^2 C_1}{\partial y_1^2} + \frac{W_2}{W_c} C_1 - g |C_1|^2 C_1. \quad (3.44)$$

Finalmente, esta expresión se multiplica por ϵ^3 para recuperar los operadores originales y obtener la ecuación no lineal de las amplitudes [31, 34, 35]:

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{\partial A}{\partial t} = \xi_0^2 \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \mu A - g |A|^2 A, \quad (3.45)$$

donde los coeficientes ω_0 , ξ_0 y μ concuerdan con los valores del análisis lineal, mientras que g representa la rapidez no lineal de las amplitudes; usando estos parámetros para escalar la ecuación (3.45) se obtiene la siguiente ecuación [31]:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \mu A - |A|^2 A. \quad (3.46)$$

Aquí se mantiene explícita a μ , puesto que representa la distancia al punto crítico y puede ser usada como parámetro para describir inestabilidades secundarias. Un escalamiento adicional puede eliminar a μ de la ecuación. En dicho escalamiento se hace evidente que los patrones espaciales evolucionan en escalas temporales de orden μ^{-1} , mientras que las escalas espaciales son de orden $\mu^{-\frac{1}{2}}$ y el crecimiento de la amplitud de los patrones es de orden $\mu^{\frac{1}{2}}$ [31].

La ecuación (3.46) tiene la forma de la ecuación real de Ginzburg-Landau. Ésta surge de manera natural cerca de bifurcaciones supercríticas si el sistema es invariante a traslaciones y simétrico ($y \rightarrow -y$) [31]. La simetría indica que el término espacial de menor orden es $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ mientras que la forma cúbica es necesaria para que la ecuación sea invariante al multiplicar A por una función de fase $e^{i\phi}$. Esto corresponde a trasladar el patrón una distancia $\frac{\phi}{q_c}$. Dicha invarianza resulta útil más adelante para escribir la ecuación de fase correspondiente.

Se puede ver que si $\mu < 0$, la única solución a la ecuación (3.46) es $A = 0$. Esta solución representa un sistema uniforme y estable a perturbaciones espaciales. Por otro lado, si $\mu > 0$, la ecuación (3.46) tiene soluciones estacionarias de la forma $A_0 = a_0 e^{iqx}$ con $a_0^2 = \mu - q^2$. Éstas describen patrones periódicos y estacionarios con números de onda ligeramente diferentes del crítico.

Para tratar la estabilidad de las soluciones, la ecuación (3.46) se escribe de forma potencial [31, 34], es decir:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta A}, \quad (3.47)$$

con:

$$F = \int \left(\left| \frac{\partial A}{\partial y} \right|^2 - \mu |A|^2 + \frac{1}{2} |A|^4 \right) dy, \quad (3.48)$$

de aquí que $\frac{dF}{dt} = -2 \int \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)^2 dy < 0$, lo que implica que las soluciones a la ecuación (3.46) son estables. Por otra parte, el potencial F presenta dos mínimos, por lo que la separación de los patrones se puede tratar por descomposición espinodal [11, 31, 34].

3.2.4. Ecuación de amplitudes en \mathbb{R}^2

Para tratar el comportamiento de las bandas en dos dimensiones, la ecuación (3.46) debe ser modificada para incluir una segunda dimensión; con este fin, el número de onda crítico es perturbado de la siguiente manera:

$$\underline{q} = \begin{pmatrix} \varepsilon^{(1/2)} q_x \\ q_c + \varepsilon q_y \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

Así, las perturbaciones a orden lineal son:

$$|\underline{q}|^2 - q_c^2 = (2q_c q_y + q_x^2) \varepsilon. \quad (3.50)$$

En esta ecuación se presenta la relación entre de los números de onda en las diferentes direcciones, $q_y \approx q_x^2$. Con esta contribución, la ecuación (3.46) se transforma en:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{i}{2q_c} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)^2 A + \mu A - |A|^2 A. \quad (3.51)$$

El potencial correspondiente a la ecuación (3.51) es equivalente al potencial de la ecuación (3.46) con la inclusión del término correspondiente a la dirección x ; por esta razón, el análisis de estabilidad del sistema es una extensión inmediata del caso en una dimensión [31, 34].

3.3. Ecuaciones de fase

Las soluciones no lineales a la ecuación (3.51) pueden tener dos tipos de variaciones, de magnitud y de fase [31, 34]. Para separar ambas contribuciones, se sustituye $A = |A|e^{i\phi}$ en la ecuación (3.51). Por simplicidad, se considera sólo la dependencia en la dirección y y se separan las partes real e imaginaria para obtener:

$$\frac{\partial |A|}{\partial t} = \frac{\partial^2 |A|}{\partial y^2} + \left[\mu - \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \right] |A| - |A|^3, \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{2}{|A|} \frac{\partial |A|}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial y}. \quad (3.53)$$

De aquí, que la evolución de las fases sea principalmente difusiva, como se aprecia en la ecuación (3.53). Por otro lado, la ecuación (3.52) muestra que la magnitud de las amplitudes es controlada por dos contribuciones, aún en ausencia de variaciones espaciales, una de ellas está relacionada con la distancia al punto crítico (μ), mientras que la otra surge del término no lineal.

Para obtener la ecuación de fase lineal correspondiente a la ecuación (3.51), se considera una pequeña perturbación a la amplitud, a_0 , que describe la solución periódica en una dimensión con un número de onda $\delta q = q - q_c$, esto es:

$$A(y) = (a_0 + a)e^{i(qy + \phi)}, \quad (3.54)$$

donde $a_0^2 = \mu - \delta q^2$. Sustituyendo la expresión (3.54) en la ecuación (3.51), y separando las partes real e imaginaria, se obtienen las siguientes ecuaciones lineales para

la magnitud y la fase, respectivamente:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -2a_0 \left(a_0 a + \delta q \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} + \frac{\delta q}{q_c} \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{a_0}{q_c} \frac{\partial^3 \phi}{\partial y \partial x^2} - \frac{1}{4q_c^2} \frac{\partial^4 a}{\partial x^4}, \quad (3.55)$$

$$a_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} = 2\delta q \frac{\partial a}{\partial y} + a_0 \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - \frac{1}{q_c} \frac{\partial^3 a}{\partial y \partial x^2} + a_0 \frac{\delta q}{q_c} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{a_0}{4q_c^2} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}. \quad (3.56)$$

De la ecuación (3.55), se puede observar que a relaja lentamente cerca del punto crítico, mientras que ϕ nunca relaja, debido a que representa un desplazamiento entre las fases. Por esta razón, se usa el estado estacionario de la ecuación (3.55), además se cancelan las derivadas de orden mayor para obtener:

$$0 = a_0 a + \delta q \frac{\partial \phi}{\partial y}. \quad (3.57)$$

Por otro lado, de la ecuación (3.53) se sabe que la evolución de las fases es principalmente difusiva, por esta razón se eliminan las derivadas de orden superior para obtener:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{2\delta q}{a_0} \frac{\partial a}{\partial y} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\delta q}{q_c} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}. \quad (3.58)$$

Sustituyendo la ecuación (3.57) y la expresión para a_0 se obtiene la ecuación de difusión para las fases:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{\mu - 3\delta q^2}{\mu - \delta q^2} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\delta q}{q_c} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}. \quad (3.59)$$

A partir de esta ecuación se pueden describir la curva de estabilidad marginal y las curvas de inestabilidades secundarias [31, 34].

La ecuación (3.59) describe, de manera precisa, las distintas curvas de estabilidad para números de onda cercanos al crítico; aún así, esta ecuación no es adecuada para describir el comportamiento dinámico de las fases lejos del punto crítico, por lo que es necesario considerar términos de orden superior.

3.4. Discusión

Para describir de manera más natural las inestabilidades de las fases formadas por el mecanismo de Turing, en las secciones anteriores se plantearon las ecuaciones de amplitud en una y dos dimensiones. En esta sección se analizan las inestabilidades secundarias obtenidas y se compara de manera cualitativa dicha descripción con resultados tomados de la literatura. Las curvas de estabilidad correspondientes se presentan de manera cualitativa en la Figura 3.1.

A partir de la ecuación (3.59) se puede definir la curva de estabilidad marginal ($\mu = \delta q^2$). Ésta representa el punto donde se pierde la solución uniforme $A = 0$ e inician las contribuciones no lineales. Es necesario recordar que $\mu = \frac{W - W_c}{W_c}$, es decir, la distancia normalizada entre el valor del Weisenberg aplicado y el Weissenberg crítico; este parámetro debe ser positivo para que exista el espacio de Turing. Por otro lado, δq representa cuan alejado está el número de onda q , definido a partir del valor propio de la difusión (ecuación (2.23)), del valor crítico q_c , definido por W_c (el mínimo de la curva $h(q^2)$). La curva de estabilidad marginal muestra la relación que existe entre la geometría celda de flujo (q), el proceso de difusión (q_c) y los tiempos característicos del fluido y el proceso (W); este resultado muestra que la interacción

entre el fluido y el proceso de flujo no es sólo temporal, como se pretende en los modelos cúbicos [5, 9, 20, 21, 23], sino espacio-temporal.

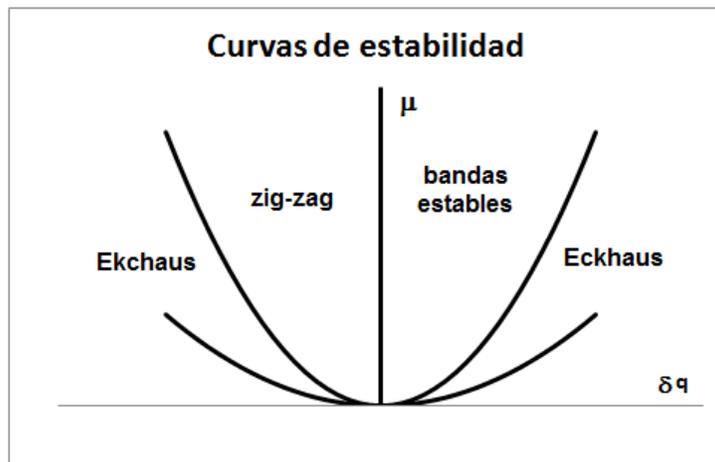


Figura 3.1: Representación cualitativa de las curvas de estabilidad obtenidas de la ecuación (3.59). La inestabilidad de Eckhaus ocurre cuando $\delta q^2 < \mu < 3\delta q^2$. La inestabilidad zig-zag ocurre cuando $\delta q < 0$. Las bandas estables se obtienen para números de onda tales que $\delta q > 0$ y $\mu > 3\delta q^2$.

El sistema puede presentar inestabilidades longitudinales cuando el coeficiente de difusión de las fases en dirección y se vuelve negativo; a partir de la ecuación (3.59), se puede observar que dicha condición se cumple cuando $\mu < 3\delta q^2$. Esta condición implica que el número de onda del sistema es mucho mayor al crítico y muy cercano al valor q_+ del espacio de Turing, donde la amplitud es pequeña. En este caso aparecen o desaparecen bandas para que el número de onda efectivo más estable; este comportamiento se conoce como inestabilidad de Eckhaus, [31, 34, 41].

De manera semejante, el sistema puede presentar inestabilidades transversales cuando el coeficiente de difusión de las fases en dirección x se vuelve negativo. Esta condición se cumple si $\delta q < 0$, es decir, el número de onda es menor al crítico, por

lo que la modulación de los patrones en la dirección x es mayor a la longitud crítica. Cuando esto ocurre, se produce una torsión de las bandas que aumenta el número de onda efectivo; esta inestabilidad es conocida como zig-zag [34].

3.4.1. Comparación con resultados experimentales tomados de la literatura

En esta sección se comparan los resultados obtenidos en las secciones anteriores con resultados presentados en distintas publicaciones.

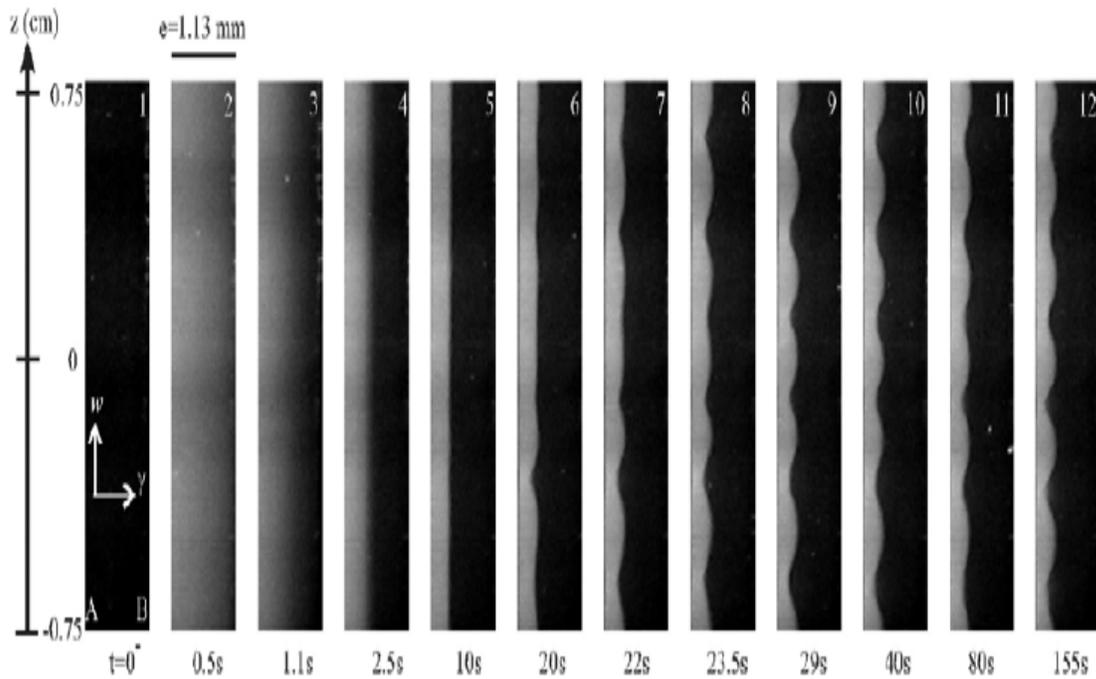


Figura 3.2: Imagen por dispersión de luz de una muestra micelar sometida a un $\dot{\gamma} = 30s^{-1}$. Modificada de [19].

La ecuación (3.53) muestra que el mecanismo principal para la evolución de las fases es la difusión. Este comportamiento se puede observar en la Figura 3.2 [19]. Esta imagen, obtenida por dispersión de luz, muestra los resultados que el grupo de M.A. Fardin obtuvo para una muestra de *CTAB* y *NaNO₃* sometida a un $\dot{\gamma} = 30s^{-1}$. En la imagen se puede observar que, a $0.5s$, el fluido presenta pequeñas variaciones locales en su estructura (turbidez de la muestra). Estas variaciones evolucionan de manera difusiva entre $1.1s$ y $2.5s$, hasta la formación de una interfase bien definida a $10s$. A partir de los $20s$, se puede observar que la interfase presenta una inestabilidad zigzag, ondulaciones espaciales a un número de onda determinado. De este comportamiento se puede inferir que, acorde con la ecuación (3.59), el número de onda del sistema es menor al número de onda crítico del fluido y perpendicular a la dirección de las bandas. Cabe mencionar que este fluido tiene un marcado comportamiento engrosante [19].

En la Figura (3.3) se muestran los resultados obtenidos por el mismo grupo para una solución de *CTAB* y *NaNO₃* [18]. En la imagen principal se muestra el esfuerzo normalizado de equilibrio ($\frac{\sigma}{G_0}$) contra el Weissenberg (aquí Wi). Se puede observar que existe una relación monótona entre éstos, en concordancia con las ecuaciones 2.7 y 2.8 y con la Figura 2.1. Aún así, se define una meseta del esfuerzo contenida entre Wi_l y Wi_h . En el recuadro se pueden ver las imágenes obtenidas por dispersión de luz del fluido para distintos valores de Wi . Cuando $Wi < Wi_l$ se puede observar que el fluido presenta una sola fase, pero cuando el valor de $Wi = Wi_h$ el fluido se separa en dos fases con una interfase que muestra oscilaciones espaciales (inestabilidad zigzag); este comportamiento es análogo al mostrado en la Figura 3.2. Finalmente, para

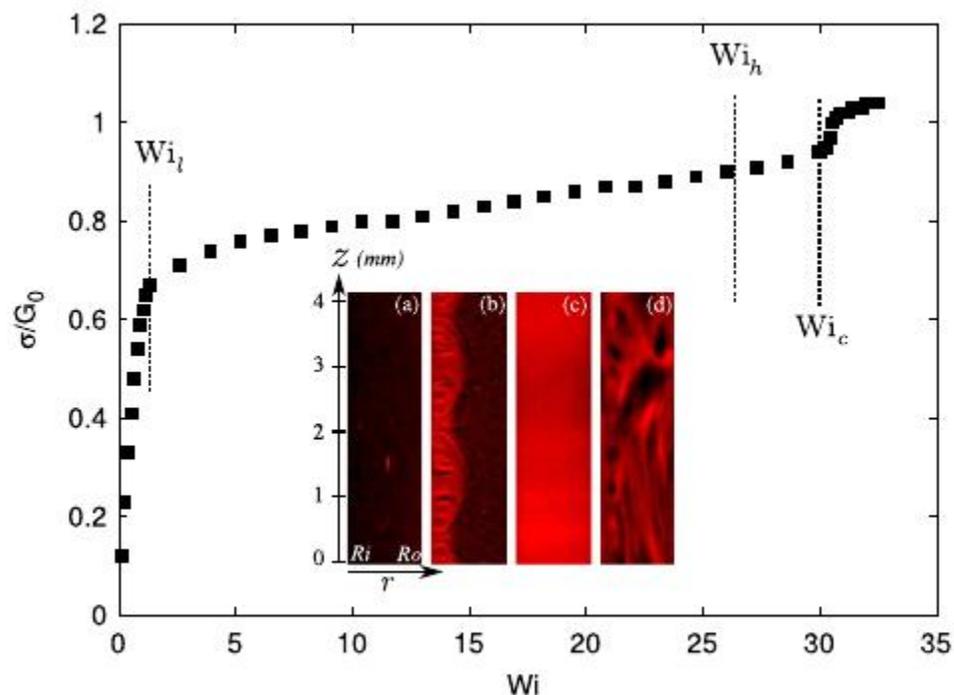


Figura 3.3: Esfuerzo normalizado en función del Weissenberg. En el recuadro se muestran imágenes en el plano z - r para distintos valores de Wi . Modificado de [18].

valores de $Wi_h < Wi < Wi_c$, el fluido regresa a formar una sola fase. Al comparar este comportamiento con la ecuación (3.59), podemos inferir que los valores Wi_l y Wi_h representan las fronteras del espacio de Turing para dicho sistema y que el número de onda crítico en Wi_h es mayor que el número de onda del sistema.

También del equipo de M.A. Fardin, las Figuras 3.4 y 3.5 muestran los datos de reometría y las imágenes de birefringencia, respectivamente, correspondientes a una solución de *CTAB* y *NaNO₃* en función de $\dot{\gamma}$ [5]. La Figura 3.4 muestra una relación monótona entre el esfuerzo cortante y la rapidez de deformación, consistente

con las ecuaciones 2.7 y 2.8 y con la Figura 2.1. En esta imagen se define la meseta de

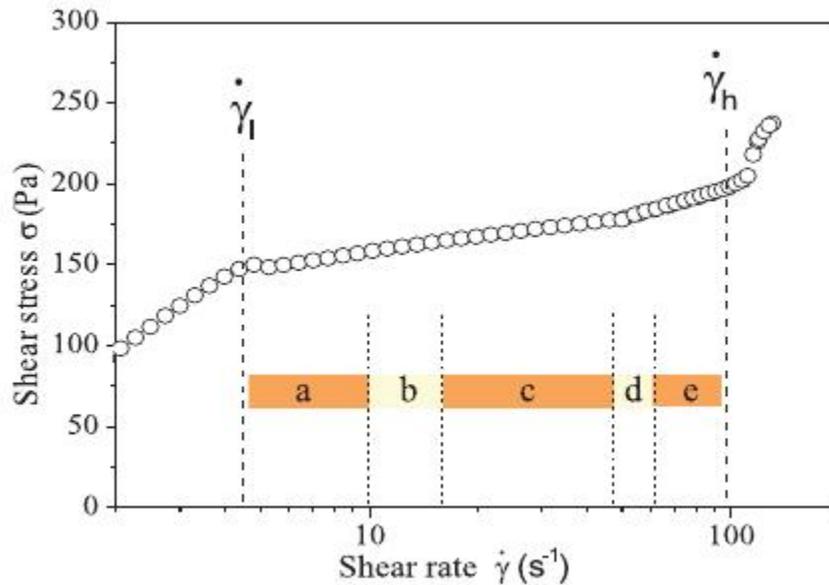


Figura 3.4: Curva de esfuerzo cortante contra rapidez de deformación correspondiente a la Figura 3.5(a)-(e). Modificado de [5].

esfuerzos entre los valores $\dot{\gamma}_l$ y $\dot{\gamma}_h$; dentro de ésta se definen cinco zonas etiquetadas de la *a* a la *e*. Hay que notar que la meseta de esfuerzos no es constante, como se define en los modelos cúbicos [4, 20, 21], sino que ésta crece de manera monótona en concordancia con la Figura 2.1.

La Figura 3.5 muestra los patrones presentes en las diferentes zonas marcadas en la Figura 3.4. En la Figura 3.5a se puede observar que se presentan múltiples bandas que oscilan a un número de onda determinado (inestabilidad zigzag). Este comportamiento se presenta en la zona *a* de la Figura 3.4, para valores de $\dot{\gamma}$ cercanos a $\dot{\gamma}_l$, donde podemos inferir que el número de onda crítico es mayor que el número de onda del sistema (ver Figura 3.1).

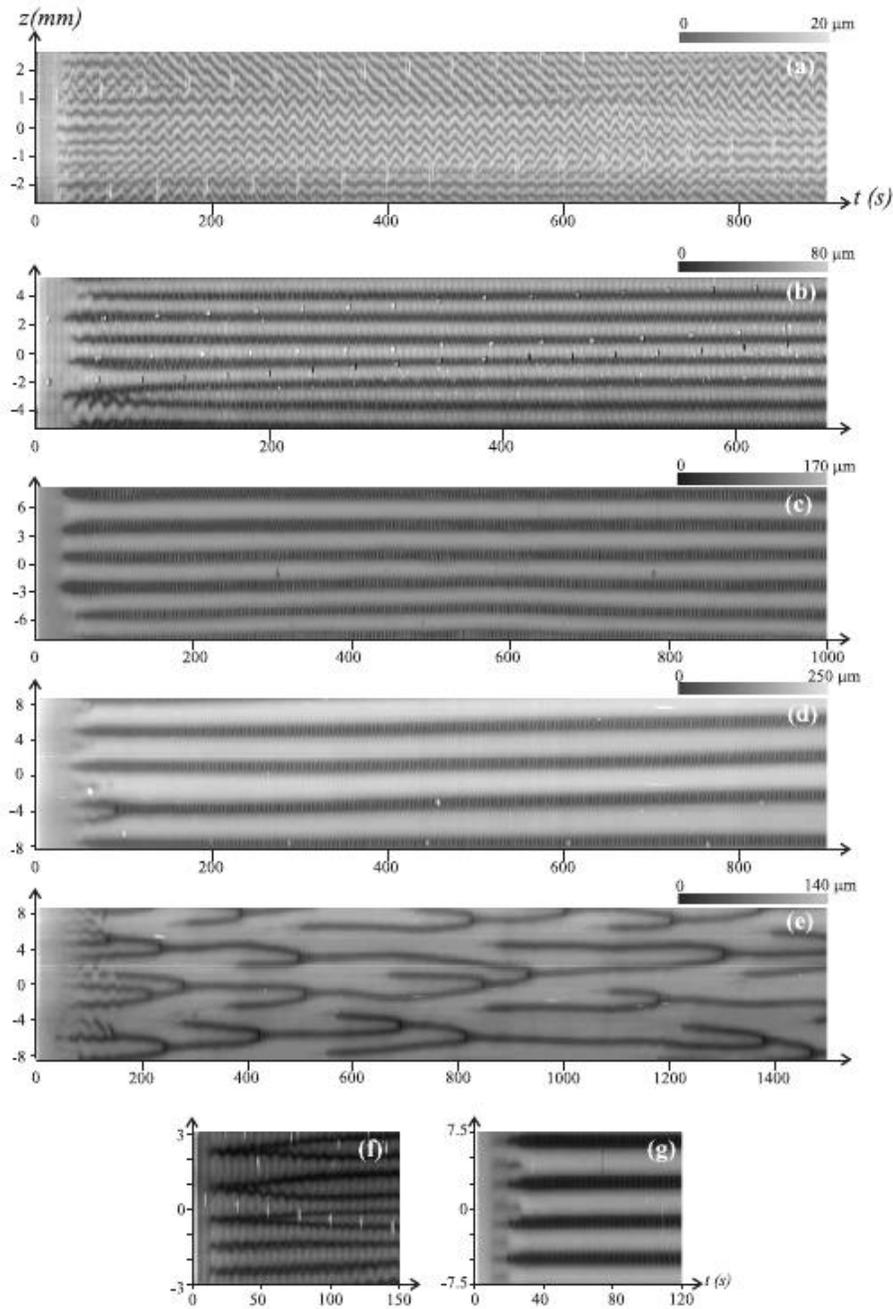


Figura 3.5: Evolución de la posición de la interfase para una solución de *CTAB* con *NaNO₃*. (a) $\dot{\gamma} = 6.5s^{-1}$, (b) $\dot{\gamma} = 13s^{-1}$, (c) $\dot{\gamma} = 30s^{-1}$, (d) $\dot{\gamma} = 50s^{-1}$, (e) $\dot{\gamma} = 70s^{-1}$. Las figuras (f) y (g) corresponden a un $\dot{\gamma}$ de $13s^{-1}$ y $50s^{-1}$ variando la temperatura. Modificado de [5].

En las Figuras 3.5*b* y 3.5*c* se muestran múltiples bandas estables; según la Figura 3.1; este comportamiento ocurre cuando el número de onda crítico es ligeramente menor que el número de onda del sistema, es decir, la inestabilidad primaria (bandas de Turing) predomina; en la Figura 3.4 se puede observar que ésto ocurre a valores de $\dot{\gamma}$ intermedios (zonas *b* y *c*).

En la Figura 3.5*d* se puede observar que las bandas correspondientes a la fase clara son más gruesas que las bandas de la fase oscura. Este comportamiento es consistente con la inestabilidad de Eckhaus descrita en por la ecuación (3.59), donde el número de onda crítico es suficientemente mayor al número de onda del sistema (ver Figura 3.1). Estos comportamientos concuerdan con la descripción cualitativa presentada en la Figura 2.4, donde el número de onda crítico y el espacio de Turing dependen de W , por lo que, al aumentar $\dot{\gamma}$, se varía la inestabilidad que el sistema presenta.

Finalmente, la Figura 3.5*e* muestra un comportamiento espacio-temporal de las bandas (inestabilidad de Benjamin–Feir), el cual no se ha descrito en este trabajo. También, las Figuras 3.5*e* se muestra la dependencia con la temperatura que tienen las propiedades mecánicas del fluido y, por lo tanto, el espacio de Turing y las curvas de estabilidad marginal.

Capítulo 4

Conclusiones y trabajo futuro

4.1. Conclusiones

En este trabajo se estudió el efecto que tienen la difusión del esfuerzo cortante y de una variable estructural en el modelo BMP. Se mostró que el mecanismo de Turing puede inducir la formación de patrones espaciales (bandas de Turing), aun cuando se mantenga una relación monótona entre el esfuerzo cortante y la rapidez de deformación.

Se determinó que la existencia y la extensión del espacio de Turing está determinada por la ecuación constitutiva (ver ecuaciones (2.17) y (2.20)). Dicho espacio acota las longitudes que las bandas pueden mostrar, pero no define la longitud real de éstas. La longitud de las bandas está relacionada con las condiciones de frontera y la extensión de la celda de flujo a través del operador de difusión (ecuación (2.23)).

Se encontró que, en fluidos engrosantes, la fase con una alta concentración de

esfuerzo presenta una estructura con altas interacciones, por lo que requiere mayor esfuerzo para fluir; este comportamiento provoca que la interacción cooperativa sea positiva (de zonas de alta a zonas de baja concentración de esfuerzo), y también permite definir un punto crítico para la formación de bandas. En este caso, el espacio de Turing está bien definido y sólo requiere que $D \neq 1$. Por otro lado, en fluidos adelgazantes, la difusión del esfuerzo actúa en dirección contraria a la difusión de la estructura. Esto provoca que la interacción cooperativa tenga signo negativo, lo que a su vez provoca que D tenga valores altos (movilidades muy diferentes) para poder definir el punto crítico y el espacio de Turing.

En las Figuras 2.4 y 2.9 se muestra que el análisis de estabilidad para el mecanismo de Turing es equivalente a otros análisis de estabilidad presentados en la literatura [21]. En dicho trabajo, el análisis de estabilidad parte de un desarrollo espinodal, definiendo una meseta del esfuerzo relacionada con la formación de dos bandas de corte estacionarias. Sin embargo, el mecanismo de Turing propuesto en este trabajo, permite la formación de bandas múltiples sin la definición de una meseta del esfuerzo, de tal manera que sistemas con curvas de flujo monótonas pueden evolucionar hacia estados con bandas. Una conclusión importante es que la difusión de la variable estructural es necesaria en la ecuación del esfuerzo para que existan los patrones de Turing.

Adicionalmente, las bandas de Turing pueden ser más dinámicas que las bandas de corte clásicas; este hecho se vuelve evidente al analizar las ecuaciones de amplitud obtenidas. Las ecuaciones de amplitud describen modulaciones lentas en espacio y tiempo de las bandas de Turing, y se mostró que dichas modulaciones son de distinto

orden (ecuación (3.9)). Los detalles del modelo reológico en cuestión no afectan la forma de la ecuación de amplitud, y sólo se presentan a través de los coeficientes de las amplitudes (ver ecuaciones (3.41)-(3.43)). Por esta razón, las ecuaciones de amplitud se pueden usar para entender cuestiones universales sobre la formación de bandas en sistemas reológicos. Aún así, las ecuaciones de amplitud son válidas sólo para condiciones débilmente no lineales (cerca de punto crítico). En regímenes altamente no lineales, dichas ecuaciones sólo dan información cualitativa del comportamiento de las bandas.

La ecuación de amplitud en una dimensión espacial se extendió al plano incluyendo un vector de onda diferente al crítico. Esto mostró que las amplitudes presentan anisotropía direccional (ecuación (3.51)). A partir de la ecuación de amplitudes en dos dimensiones, se derivó la ecuación de difusión de fases en dos dimensiones (ecuación (3.59)); dicha ecuación permitió definir las curvas críticas para las inestabilidades de Eckhaus y zigzag, como se muestran en la Figura 3.1. Las inestabilidades secundarias descritas en este trabajo se han observado en distintos sistemas reológicos.

4.2. Trabajo futuro

En este trabajo se consideró que los coeficientes de difusión, tanto del esfuerzo cortante como de la variable estructural, son independientes de la rapidez de deformación; por otro lado, la deducción del modelo difusivo mostró que dichos coeficientes dependen de la rapidez de deformación a través de la fluidez. Dicha dependencia junto con las implicaciones que ésta tiene sobre el espacio de Turing y los valores

propios de la difusión se estudiarán en un trabajo posterior.

La segunda suposición importante de este trabajo fue que la rapidez de deformación aplicada es constante. En trabajos futuros se planea estudiar el efecto de rapidezces de deformación oscilatorias de pequeña amplitud, esto con el fin de considerar flujos reométricos. También se planea estudiar el efecto de distintas geometrías reométricas.

Bibliografía

- [1] A.D. El-Kareh, L.G. Leal, “*Existence of solutions for all Deborah numbers for a non-Newtonian model modified to include diffusion*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 33, pp. 257 – 287 (1989).
- [2] M. Cromer, M.C. Villet, G.H. Frederickson, L.G. Leal, “*Shear banding in polymer solutions*”, Physics of Fluids, 25, 051703 (2013).
- [3] M.E. Cates, D.A. Head, A. Ajdari, “*Rheological chaos in a scalar shear-thickening model*”, Physical Review E, 66, 025202 (2002).
- [4] P.D. Olmsted, “*Perspectives on shear banding in complex fluids*”, Rheol. Acta, 47, pp. 283 – 300 (2008).
- [5] S. Lerouge, M.A. Fardin, M. Argentina, G. Grégoire, O. Cardoso, “*Interface dynamics in shear-banding flow of giant micelles*”, Soft Matter, 9, (2008).
- [6] S. Manneville, “*Recent experimental probes of shear banding*”, Rheol. Acta, 47, pp. 301 – 318 (2008).

- [7] F. Bautista, J.F.A. Soltero, E.R. Macías, J.E. Puig, O. Manero, “*Irreversible thermodynamics approach and modeling of shear-banding flow of wormlike micelles*”, J. Phys. Chem. B., 106, pp. 13018 – 13026 (2002).
- [8] E. Rincón, A.E. Chávez, R. Herrera, O. Manero, “*Rheological modelling of complex fluids: a transient network model with microstates*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 131, pp. 64 – 77 (2005).
- [9] F. Bautista, J.H. Pérez-López, J.P. García, J.E. Puig, O. Manero, “*Stability analysis of shear banding flow with the BMP model*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 144, pp. 160 – 169 (2007).
- [10] O. Manero, J.H. Pérez-López, J.I. Escalante, J.E. Puig, F. Bautista, “*A thermodynamic approach to rheology of complex fluids: the generalized BMP model*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 146, pp. 22 – 29 (2007).
- [11] J.P. García-Sandoval, O. Manero, F. Bautista, J.E. Puig, “*Inhomogeneous flows and shear banding formation in micellar solutions: Predictions of the BMP model*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 179 – 180, pp. 43 – 54 (2012).
- [12] C. Grand, J. Arrault, M.E. Cates, “*Slow transients and metastability in wormlike micelle rheology*”, J. Phys. II, 7, pp. 1071 – 1086 (1997).
- [13] A. Aradian, M.E. Cates, “*Instability and spatiotemporal rheochaos in a shear-thickening fluid model*”, Europhys. Lett., 70, pp. 397 – 403 (2005).

- [14] R. Bandyopadhyay, G. Basappa, A.K. Sood, “*Observation of chaotic dynamics in dilute sheared aqueous solutions of CTAT*”, Physical Review Letters, 84, pp. 2022 – 2025 (2000).
- [15] R. Ganapathy, A.K. Sood, “*Nonlinear flow of wormlike micellar gels: Regular and chaotic time-dependence of stress, normal force and nematic ordering*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 149, pp. 78 – 86 (2008).
- [16] M.A. Fardin, T.J. Ober, C. Gay, G. Grégoire, G.H. McKinley, S. Lerouge, “*Potential “ways of thinking” about the shear-banding phenomenon*”, arXiv:1107.1247 (2011).
- [17] R.G. Larson, “*Instabilities in viscoelastic flows*”, Rheol. Acta, 31, pp. 213 – 263 (1992).
- [18] M.A. Fardin, D. Lopez, J. Croso, G. Grégoire, O. Cardoso, G. H. McKinley, S. Lerouge, “*Elastic turbulence in shear banding wormlike micelles*”, Physical Review Letters, 104, 178303 (2010).
- [19] M.A. Fardin, S. Lerouge, “*Instabilities in wormlike micelle systems*”, Eur. Phys. J. E, 35 : 91 (2012).
- [20] H.J. Wilson, S.M. Fielding, “*Linear instability of planar shear banded flow of both diffusive and non-diffusive Johnson–Segalman fluids*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 138, pp. 181 – 196 (2006).
- [21] S.M. Fielding, H.J. Wilson, “*Shear banding and interfacial instability in planar Poiseuille flow*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 165, pp. 196 – 202 (2010).

- [22] M. Renardy, “*Korteweg stresses and admissibility criteria for shear banded flows*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 213, pp. 68 – 72 (2014).
- [23] Y. Renardy, M. Renardy, “*Stability of shear banded flow for a viscoelastic constitutive model with thixotropic yield stress behavior*”, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 244, pp. 57 – 74 (2017).
- [24] L. Zhou, L.P. Cook, G.H. McKinley, “*Multiple shear-banding transitions for a model of wormlike micellar solutions*”, SIAM J. APPL. MATH., 72 – 4, pp. 1192 – 1212 (2012).
- [25] S. Bertil, G. Boffetta, “*Elastic waves and transition to elastic turbulence in a two-dimensional viscoelastic Kolmogorov flow*”, Physical Review E, 82, 036314 (2010).
- [26] O. Radulescu, P.D. Olmsted, C.-Y. David Lu, “*Shear banding in reaction-diffusion models*”, Rheol. Acta, 38, pp. 606 – 613 (1999).
- [27] A.M. Turing, “*The chemical basis of morphogenesis*”, Philos. Trans. R. Soc., B 237, pp. 37 – 72 (1952).
- [28] G. Nicolis, I. Prigogine, “*Self-Organization in Nonequilibrium Systems*”, Wiley-Interscience, USA (1977).
- [29] P.C. Hohenberg, B.I. Halperin, “*Theory of dynamic critical phenomena*”, Reviews of Modern Physics, 49 – 3, pp. 435 – 479 (1977).
- [30] M.C. Cross, P.C. Hohenberg, “*Pattern formation outside of equilibrium*”, Rev. Mod. Phys. 65, 851 (1993).

- [31] H. van Beijeren, M.H. Ernst, “*Fundamental Problems in Statistical Mechanics VIII*”, North-Holland, Amsterdam (1994).
- [32] M.C. Cross, H. Greenside, “*Pattern Formation and Dynamics in Nonequilibrium Systems*”, Cambridge University Press, USA (2009).
- [33] J.E. Wesfreid, H.R. Brand, P. Manneville, G. Albinet, N. Boccara, “*Propagation in Systems far from Equilibrium*”, Springer-Verlag (1987).
- [34] P. Manneville, “*Dissipative Structures and Weak Turbulence*”, Academic Press, United Kingdom (1990).
- [35] B. Peña Penciller, “*Inestabilidades de Turing en Sistemas de Reacción–Difusión*”, Tesis Doctoral, Universidad de Navarra, España, (2012).
- [36] A.V. Ponce, “*Formación de patrones por el mecanismo de Turing en sistemas de reacción–difusión*”, Tesis, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico, (2013).
- [37] M. Baurmann, T. Gross, U. Feudel, “*Instabilities in spatially extended predator–prey systems: Spatio-temporal patterns in the neighborhood of Turing–Hopf bifurcations*”, Journal of Theoretical Biology, 245, pp. 220 – 229 (2007).
- [38] S.–K. Lai, H. Hanc, P.–C. Kod, “*Are cities dissipative structures?*”, International Journal of Urban Sciences, (2013).
- [39] S.H. Kim, H.–S. Park, “*Dissipative structures of autocatalytic reactions in tubular flow reactors*”, Korean J. of Chem. Eng., 10, pp. 226 – 234 (1993).

- [40] G. Gambino, M.C. Lombardo, M. Sammartino, “*Turing instability and traveling fronts for a nonlinear reaction–diffusion system with cross-diffusion*”, *Mathematics and Computers in Simulations*, 82, pp. 1112 – 1132 (2012).
- [41] L.S. Tuckerman, D. Barkley, “*Bifurcation analysis of the Eckhaus instability*”, *Physica D*, 46, 57 – 86 (1990).
- [42] L. Casanellas, C.J. Dimitriou, T.J. Ober, G.H. McKinley, “*Spatiotemporal dynamics of multiple shear-banding events for viscoelastic micellar fluids in cone-plate shearing flows*”, *J. Non–Newtonian Fluid Mech.*, 222, pp. 234 – 247 (2015).