

**PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ**

**FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA**



**PUCP**

**GENERACIÓN DE PATRONES QUÍMICOS MEDIANTE FLUJOS  
CORTANTES**

**TRABAJO DE INVESTIGACIÓN PARA LA OBTENCIÓN DEL GRADO  
DE BACHILLER EN CIENCIAS CON MENCIÓN EN FÍSICA**

**AUTOR**

**ANGELO ISAAC LEDESMA ARAUJO**

**ASESOR:**

**DESIDERIO AUGUSTO VÁSQUEZ RODRIGUEZ**

Lima, Enero del 2020

## RESUMEN

Los sistemas de reacción-difusión permiten la formación de estructuras debido a las distintas difusividades de sustancias químicas. Uno de estos sistemas es el de activador-inhibidor presentado en el modelo del Brusselador. En el caso en que este sistema se encuentre en un fluido, requerirá de términos de advección que representan el fenómeno de transporte ocasionado por la velocidad del fluido. Cuando el flujo presenta un esfuerzo de corte, las difusividades efectivas de cada sustancia son modificadas, permitiendo invertir las condiciones de estabilidad que permiten la formación de patrones (Vásquez, 2004).

En este trabajo se analiza la formación de patrones debido a la advección de un flujo cortante. A través de un flujo de Poiseuille, donde la velocidad tiene dependencia espacial transversal (forma parabólica), se puede violar la condición de formación de patrones de Turing (Vásquez, 2004).

Para poder expandir esta investigación y analizar el efecto de un flujo generado por un vórtice, primero se analizará el movimiento caótico generado por vórtices y se caracterizarán diferentes patrones generados por distintos flujos cortantes.

## ÍNDICE

Índices de figuras .....	1
Introducción .....	2
Metodología .....	3
Ecuación de reacción-difusión-advección .....	5
Patrones sin flujo .....	6
Patrones con flujo .....	9
Análisis de otros flujos cortantes .....	11
Análisis de Vórtices .....	13
Modelo de vórtice parpadeante .....	14
Caracterización de trazas .....	15
Mezclas por advección .....	17
Exponente de Lyapunov .....	18
Conclusiones .....	19
Bibliografía .....	21
Anexos .....	22

## ÍNDICES DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1 Estructura estable en una dimensión espacial .....	7
Figura 2 Patrón sin flujo en dos dimensiones espaciales .....	8
Figura 3 Estructura estable en $[0,10] \times [0,5]$ .....	9
Figura 4 Patrón en dos dimensiones con flujo de Poiseuille .....	10
Figura 5 Patrón en dos dimensiones con flujo $\bar{V} = 500$ y $p = 0.5$ .....	12
Figura 6 Patrón en dos dimensiones con flujo $\bar{V} = 350$ y $p = 1$ .....	12
Figura 7 Trazas no caóticas con diferentes condiciones iniciales .....	16
Figura 8 Traza de una partícula en movimiento caótico .....	16
Figura 9 Sistema de partículas a $t = 0$ .....	17
Figura 10 Sistema de partículas a $t = T/2$ .....	17
Figura 11 Sistema de partículas a $t = T$ .....	17
Figura 12 Sistema de partículas a $t = 3T/2$ .....	17
Figura 13 Sistema de partículas a $t = 2T$ .....	17
Figura 14 Sistema de partículas a $t = 5T/2$ .....	17
Figura 15 Evolución de la distancia entre partículas cercanas en el régimen caótico .....	19

## INTRODUCCIÓN

El fenómeno de advección consiste en el movimiento de un sistema debido a un flujo lo que se observa en los diferentes campos de la ciencia. Podemos verlo en la interacción de torbellinos, en las corrientes atmosféricas e incluso en reacciones químicas. Este fenómeno es muy útil para la mezcla de fluidos en procesos industriales (Isaac, 2013) y en la generación de estructuras estables en las concentraciones de ciertas sustancias químicas (Vásquez, 2004). Por lo que es importante entender el efecto de la advección y analizarlo en diferentes situaciones, como es el caso de un sistema químico o en un sistema de vórtices donde el flujo es tangencial.

En este trabajo se estudiarán los efectos de advección en sistemas de reacción-difusión. Se comenzará planteando la metodología para obtener las soluciones de las ecuaciones analizadas en el presente trabajo. En primer lugar, nos enfocaremos en la generación de patrones en un sistema activador-inhibidor (sistema Brusselador) siguiendo la condición de formación de patrones de Turing, y luego violaremos esta condición al agregar el fenómeno de advección generada por un flujo cortante el cual presenta dependencia espacial transversal (flujo de Poiseuille). En segundo lugar, se verá el efecto de la advección que se genera debido a un sistema de vórtices, encontrando comportamiento caótico en el caso particular del modelo de vórtice parpadeante de Hassan Aref (1984). El flujo generado por este modelo es cortante y tiene dependencia espacial similar al caso anterior. Además, se realiza una simulación simple de una mezcla, generada por el modelo de vórtice parpadeante.

## METODOLOGÍA

En muchos casos es complicado resolver ecuaciones de forma analítica por lo cual se usa métodos computacionales como el de diferencias finitas. Para utilizar estos métodos es necesario discretizar funciones. Esto consiste en transformar o redefinir una función continua en una función discreta con un valor de distancia muy pequeña entre los puntos discretos. En este caso todas las derivadas de las expresiones se discretizarán y serán utilizadas para resolver las ecuaciones de reacción-difusión-reacción y la ecuación diferencial de movimiento de una partícula en el sistema de vórtice parpadeante. Elegimos una notación tal que nos proporcione información temporal y espacial en dos dimensiones:  $\mathbf{X} = X_{n,i,j} = X(t_n, x_i, z_j)$   $\mathbf{Y} = Y_{n,i,j} = Y(t_n, x_i, z_j)$ .

Además, para abreviar las notaciones debemos tomar en cuenta que  $n, i$  y  $j$  son enteros positivos, y  $t_n, x_i$  y  $z_j$  son valores reales y representan al tiempo, la posición espacial  $x$  y la posición espacial  $z$  respectivamente. Por esto se define:  $t_{n \pm 1} = t_n \pm \Delta t$ ,  $x_{i \pm 1} = x_i \pm \Delta x$  y  $z_{j \pm 1} = z_j \pm \Delta z$ .

Los deltas representan las distancias entre los puntos discretos.

Las derivadas parciales en una dimensión se aproximan como:

$$\frac{\partial Y_{n,i}}{\partial x} \approx \frac{Y_{n,i+1} - Y_{n,i-1}}{2\Delta x} \quad \text{y} \quad \frac{\partial X_{n,i}}{\partial x} \approx \frac{X_{n,i+1} - X_{n,i-1}}{2\Delta x}.$$

La gradiente espacial en dos dimensiones se aproxima como:

$$\vec{\nabla} Y_{n,i,j} = \left( \frac{\partial Y_{n,i,j}}{\partial x}, \frac{\partial Y_{n,i,j}}{\partial z} \right) \approx \left( \frac{Y_{n,i+1,j} - Y_{n,i-1,j}}{2\Delta x}, \frac{Y_{n,i,j+1} - Y_{n,i,j-1}}{2\Delta z} \right)$$

$$\vec{\nabla} X_{n,i,j} = \left( \frac{\partial X_{n,i,j}}{\partial x}, \frac{\partial X_{n,i,j}}{\partial z} \right) \approx \left( \frac{X_{n,i+1,j} - X_{n,i-1,j}}{2\Delta x}, \frac{X_{n,i,j+1} - X_{n,i,j-1}}{2\Delta z} \right).$$

La primera derivada temporal se aproxima como:  $\frac{\partial X_{n,i,j}}{\partial t} \approx \frac{X_{n+1,i,j} - X_{n,i,j}}{\Delta t}$

$$\frac{\partial Y_{n,i,j}}{\partial t} \approx \frac{Y_{n+1,i,j} - Y_{n,i,j}}{\Delta t} .$$

El laplaciano en una dimensión se puede representar como la segunda derivada parcial, y este se aproxima como:

$$\nabla^2 X_{n,i} = \frac{\partial^2 X_{n,i}}{\partial x^2} \approx \frac{X_{n,i+1} + X_{n,i-1} - 2X_{n,i}}{(\Delta x)^2}$$

$$\nabla^2 Y_{n,i} = \frac{\partial^2 Y_{n,i}}{\partial x^2} \approx \frac{Y_{n,i+1} + Y_{n,i-1} - 2Y_{n,i}}{(\Delta x)^2} .$$

El laplaciano para dos dimensiones espaciales se aproxima como:

$$\nabla^2 X_{n,i,j} = \frac{\partial^2 X_{n,i,j}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 X_{n,i,j}}{\partial z^2} \approx \frac{X_{n,i+1,j} + X_{n,i-1,j} - 2X_{n,i,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{X_{n,i,j+1} + X_{n,i,j-1} - 2X_{n,i,j}}{(\Delta z)^2}$$

$$\nabla^2 Y_{n,i,j} = \frac{\partial^2 Y_{n,i,j}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_{n,i,j}}{\partial z^2} \approx \frac{Y_{n,i+1,j} + Y_{n,i-1,j} - 2Y_{n,i,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{Y_{n,i,j+1} + Y_{n,i,j-1} - 2Y_{n,i,j}}{(\Delta z)^2} .$$

Después de la discretización, estas expresiones se reemplazan en sus respectivas ecuaciones y se despejan las componentes temporales que evolucionan; es decir, en el tiempo discreto  $t_{n+1}$ . Debemos tener en cuenta que para cada solución de todas las ecuaciones se necesitan condiciones iniciales, las cuales son fijas y necesarias dado que al reemplazarlas podemos hallar los valores de las variables en el tiempo  $t_{n+1}$  y estas se vuelven a utilizar para obtener los valores de las variables en el tiempo  $t_{n+2}$  y así sucesivamente. A esto se le llama un proceso de iteración. Con esto podemos obtener la solución a un tiempo definido.

En el caso de la ecuación de movimiento en el sistema de vórtice parpadeante se utilizó el método de Runge-Kutta de orden 4 (Burden, Faires 2012). Este consiste en subdividir en tres

espacios el intervalo que genera dos puntos discretos contiguos. Esto permitirá disminuir el error del método. Esto es necesario dado que encontramos movimiento caótico, y por la alta sensibilidad de este tipo de movimiento necesitamos el menor error posible.

## ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN-ADVECCIÓN

Para comenzar entendemos difusión como un fenómeno de transporte en el cual una o más especies se propagan. Esto genera un cambio en la concentración debido a una diferencia de concentraciones en el espacio y al movimiento aleatorio de las partículas individuales que conforman dicha especie o sistema. La velocidad a la cual se propagan estos sistemas o especies depende de sus coeficientes de difusión (difusividades). Otro fenómeno de transporte importante es la advección, el cual se entiende como el movimiento de un sistema debido a la existencia de velocidades.

Se estudiará el efecto combinado de advección y difusión en las ecuaciones del modelo del Bruselador (Nicolis, Prigogine, 1977). Para lo cual se incluyen los términos advectivos de transporte que dependen de la velocidad del fluido. Se utilizará las ecuaciones (1) y (2) para describir el comportamiento de este sistema.

$$\frac{\partial X}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} X = D_x \nabla^2 X + A - (B + 1)X + YX^2 \quad (1)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} Y = D_y \nabla^2 Y + BX - YX^2 \quad (2)$$

Las ecuaciones (1) y (2) representan un sistema donde hay un activador e inhibidor siendo  $X$  e  $Y$  sus concentraciones respectivamente;  $D_x$  y  $D_y$  son las difusividades de activador( $X$ ) e inhibidor( $Y$ ) respectivamente, tomando a  $\vec{V}$  como la velocidad del fluido o sistema.

Vemos en las ecuaciones (1) y (2) que hay cuatro términos importantes: uno es la evolución temporal que está representada por la derivada parcial de las concentraciones con respecto al tiempo; el segundo es el efecto de la advección el cual está representada por el producto interno del campo vectorial del flujo con la gradiente de las concentraciones; el tercero es el efecto de la difusión, representada por el producto de las difusividades con el laplaciano de cada concentración; y el cuarto componente es la interacción entre el inhibidor y el activador para cada evolución, donde A y B son constantes arbitrarias. Estos términos se reemplazan con su respectiva discretización espacial y temporal, y se resolverán con la metodología antes mencionada.

### **Patrones sin flujo**

Existe una condición necesaria para generar estos patrones o estructuras de estados estables, llamada condición de formación de patrones de Turing, la cual menciona que para  $\frac{D_y}{D_x} > Q$  el estado homogéneo pierde estabilidad, lo cual llevaría a la formación de estados estables no homogéneos (patrones) a un tiempo muy largo, donde Q es un valor crítico que depende de los valores específicos de los parámetros A y B. En el caso de que los parámetros A y B tomen el valor de  $A = B = 10$  entonces obtenemos un valor de  $Q = 1.235$ . (Vásquez, 2004)

Comenzaremos por el caso más simple, es decir, en una dimensión espacial y un campo de velocidades nulo (sin advección) y usando la metodología mencionada, con constantes  $A=10$ ,  $B=10$  (Vásquez, 2004) y con las respectivas condiciones de fronteras. Previamente a estas condiciones, se puede hallar el estado estacionario y homogéneo para los valores de A y B, el cual se obtiene cuando la concentración no evoluciona de manera temporal y no presenta

gradiente espacial, obteniéndose una concentración de  $X = 10$  para el activador y  $Y = 10$  para el inhibidor. Ahora definimos nuestro dominio espacial donde el eje Z será el espacial e irá desde cero hasta diez y los valores de concentración inicial para el sistema en todo el dominio será de  $10 \pm e$ , donde “e” es una perturbación aleatoria entre -0.05 y 0.05, en los extremos del dominio espacial las concentraciones serán constantes e igual al valor del estado estacionario hallado anteriormente. Con  $D_x = 16$  y  $D_y = 30$  obtenemos, luego de iterar a un tiempo bastante largo, los resultados correspondientes a la Figura 1.

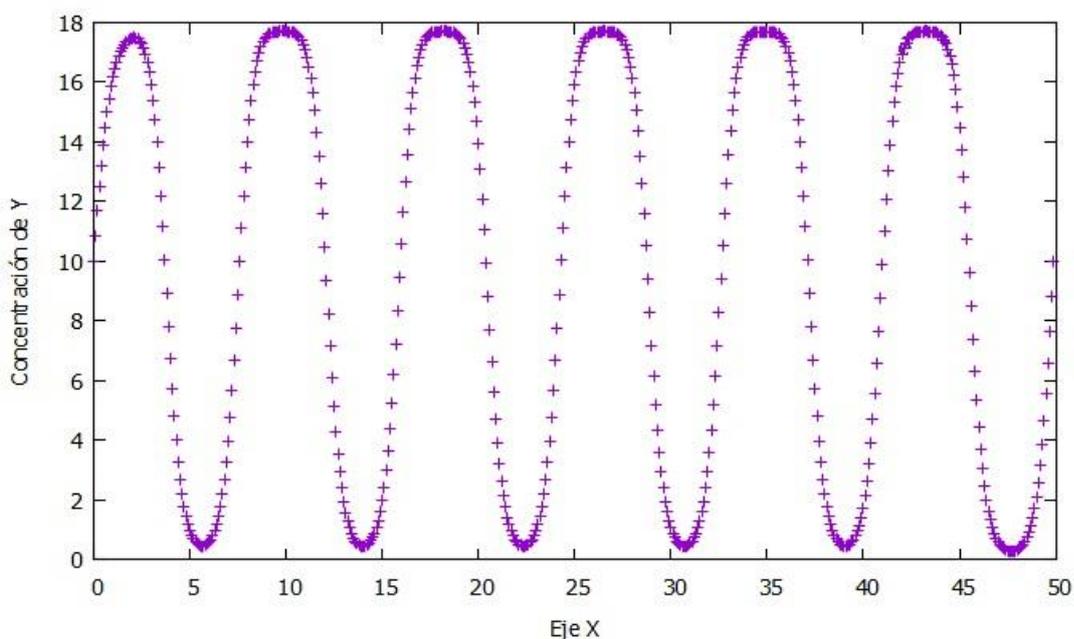
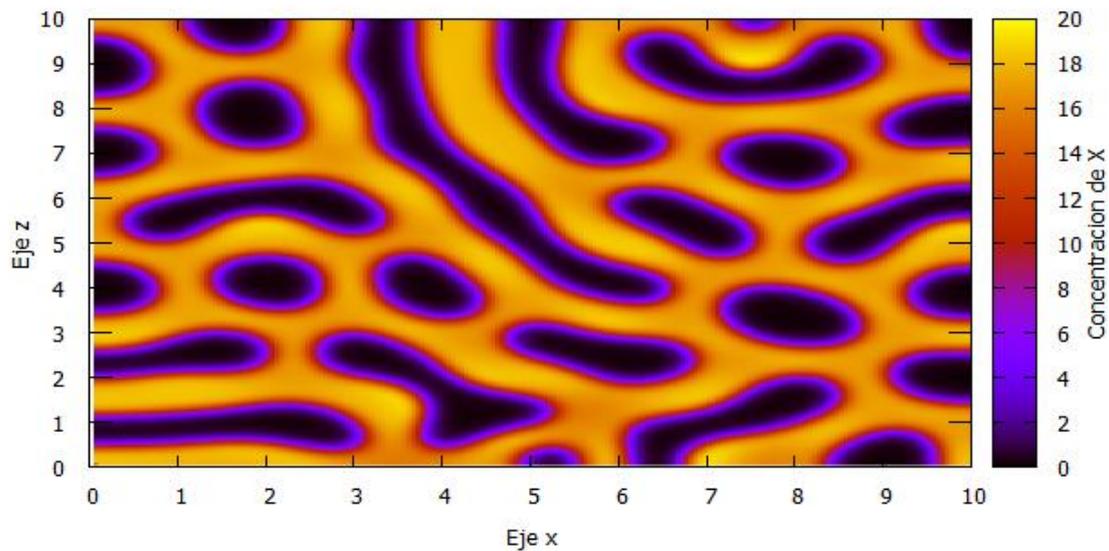


Figura 1. Estructura estable en una dimensión espacial

En la figura 1 obtenemos un estado estable periódico, lo cual nos permite concluir que a estas condiciones se genera este patrón definido. Esto ocurre en una dimensión espacial y con las difusividades cumpliendo con la condición de Turing se generan patrones.

Después de verificar las condiciones de formación de patrones, cambiaremos el dominio a uno de 2 dimensiones espaciales X-Z (rectangular). Este será representado por un cuadrado de  $[0,10] \times [0,10]$ . Tomando  $D_x = 0.5$ ,  $D_y = 1$  y las mismas condiciones



*Figura 2. Patrón sin flujo en dos dimensiones espaciales*

concentraciones iniciales con perturbación, agregamos que en los contornos la concentración se mantendrá constante e igual al estado estacionario y su derivada parcial espacial será igual a cero para cualquier tiempo de la evolución.

En la figura 2 observamos que para estas difusividades y siguiendo la condición para la formación de patrones de Turing se vuelven a generar estructuras estables, recordando que estamos considerando un flujo igual a cero.

Cambiando la ubicación del dominio espacial y siguiendo con las condiciones previas, pero cambiando las condiciones iniciales de aleatoriedad, obtenemos la figura 3.

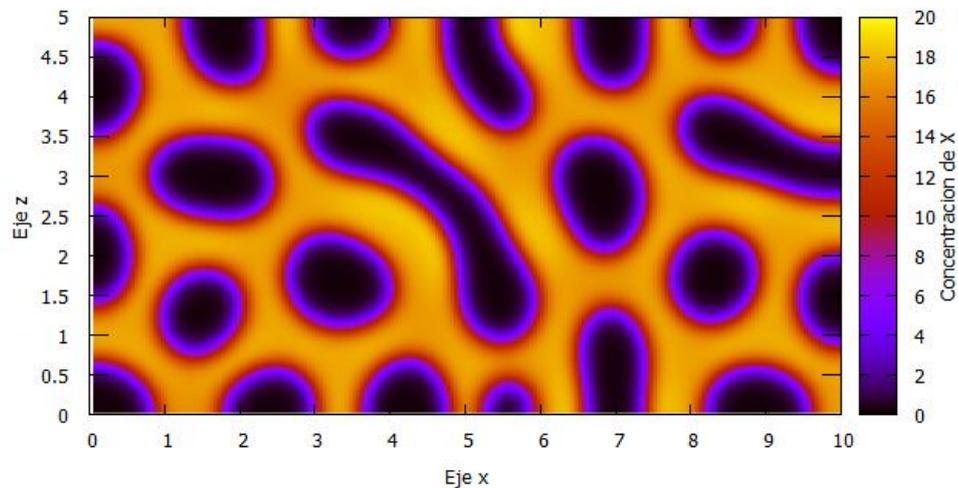


Figura 3. Estructura estable en  $[0,10] \times [0,5]$

En esta otra imagen vemos una estructura estable diferente a la anterior entonces podemos concluir que estos patrones dependen de las condiciones iniciales. Distintos dominios permitirán la formación de distintas estructuras.

### Patrones con flujo

Ahora consideramos el efecto que genera la advección. En este caso tomaremos un flujo de Poiseuille descrito por la ecuación (3).

$$\vec{V}(x, z) = V(z)\hat{x} = \frac{3}{2}\bar{V}\left(1 - 4\frac{z^2}{a^2}\right)\hat{x} . \quad (3)$$

Vemos que tiene dependencia espacial y transversal en el eje Z donde la velocidad máxima es en  $z = 0$  y el valor mínimo igual a cero en  $z = \pm a/2$  (Vásquez, 2004). El valor de  $\bar{V}$  es la velocidad promedio del fluido y es constante (Vásquez, 2004), “a” es el valor del ancho del dominio en Z.

Tomando  $\bar{V} = 200$ , los valores de  $D_x = 1$  y  $D_y = 0.5$ , es decir intercambiamos los valores de difusividades, y resolvemos las ecuaciones (1) y (2) en el dominio:  $[0;20] \times [-0.05;0.05]$ , este es similar a una película delgada con  $a = 0.1$ . Los valores de A, B y el de las concentraciones iniciales (con perturbaciones) son igual que el caso anterior. En este caso tomamos condiciones de frontera periódicas en los bordes del dominio paralelos al eje Z y después de iterar a un tiempo muy largo obtenemos la figura 4.

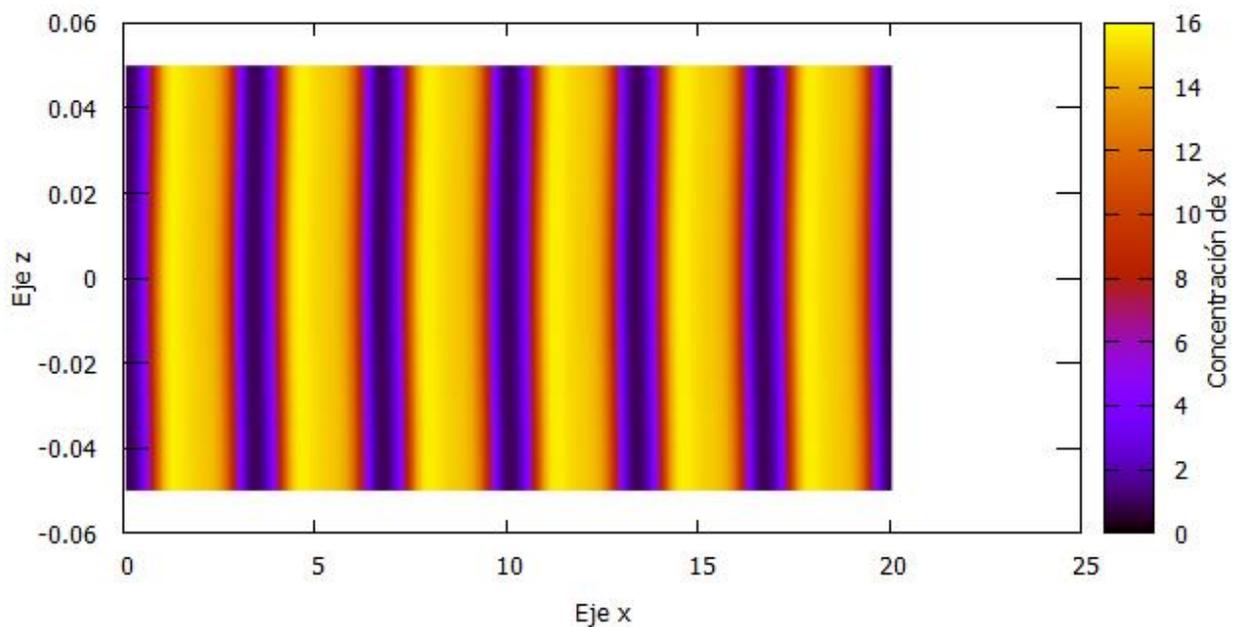


Figura 4. Patrón en dos dimensiones con flujo de Poiseuille

En la figura 4 encontramos estructuras estables incluso con el valor de Q igual a 0.5, violando así las condiciones de formación de patrones de Turing. Esta estructura, a diferencia de las anteriores halladas, está en movimiento. Esto se debe al efecto de la advección y su dirección es paralela a la velocidad del fluido (paralela al eje x).

### Análisis de otros flujos cortantes

Obtendremos patrones con un flujo similar al dado anteriormente. Este nuevo flujo es representado por la ecuación (5).

$$\vec{G}(z) = \frac{3}{2} \left( \bar{V} - \frac{2}{a} \bar{V} |z| \right) \hat{x} \quad (4)$$

$$\vec{F}(z) = \vec{V}(x, z)(1 - p) + \vec{G}(z)p \quad (5)$$

Donde el valor de “ $p$ ” va de cero a uno. El flujo  $\vec{G}$  será representada en la ecuación (4), también  $\vec{G}$  es llamado flujo cortante por tener dependencia espacial transversal y su gradiente espacial no nula. El flujo descrito por  $\vec{G}$  corresponde a un perfil lineal, desde el centro ( $z = 0$ ) hasta los extremos  $z = \pm a/2$ , donde la velocidad se hace cero.

Al tomar el mismo valor para A, B, las difusividades y tanto las condiciones iniciales como las de frontera iguales que el anterior caso, para “ $p$ ” = 1 y 0.5 obtenemos las figuras 5 y 6 respectivamente.

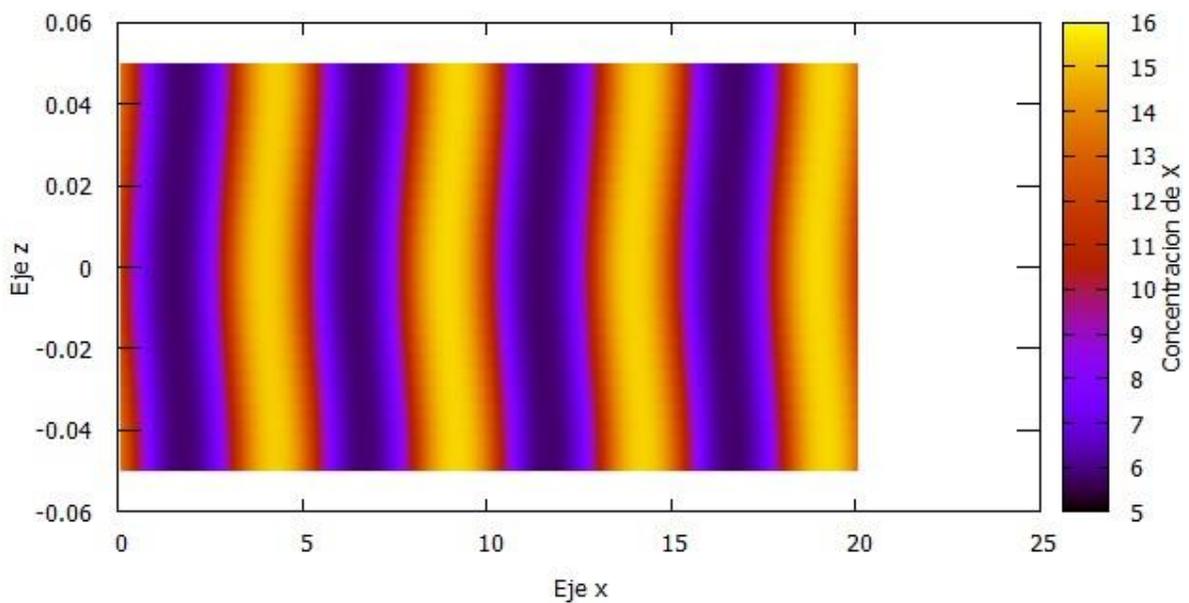


Figura 5. Patrón en dos dimensiones con flujo  $\bar{V} = 500$  y  $p = 0.5$

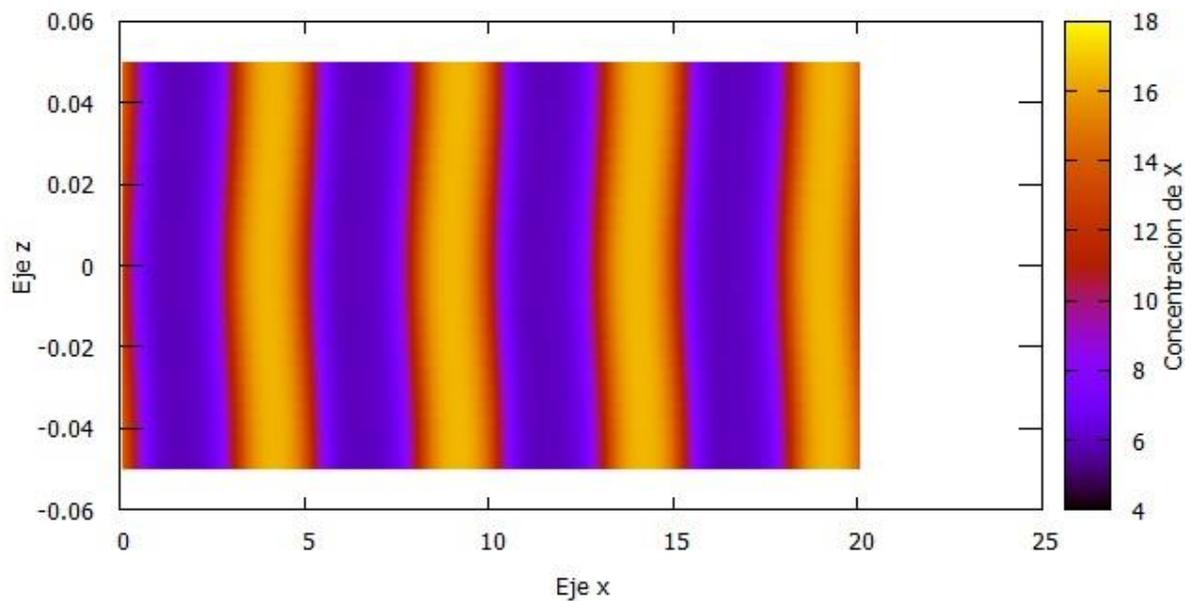


Figura 6. Patrón en dos dimensiones con flujo  $\bar{V} = 350$  y  $p = 1$

Vemos que independiente al valor de “ $p$ ” se generan patrones similares, lo cual nos ayuda a generalizar esta violación de patrones de Turing no solo al modelo de advección dado inicialmente sino para el nuevo flujo planteado en la ecuación (5).

Además, al fijar un  $p = 0.5$  obtenemos este rango de velocidades  $\bar{V}$  desde 165 hasta 1170 donde se generan patrones y para  $p = 1$  este rango va desde 153 hasta 1120 donde también se generan patrones. Por todo esto podemos inferir que para diferentes flujos el rango de valores de esa constante o valor del promedio del flujo  $\bar{V}$  cambiará.

## ANÁLISIS DE VÓRTICES

Después de analizar el efecto de advección para flujos estacionarios en sistemas químicos, ahora veremos flujos de naturaleza caótica, con flujos cortantes generados por vórtices y por lo tanto un flujo radial.

Es común plantear la advección mediante vórtices, cuyas posiciones pueden depender del tiempo, tomando una partícula con masa despreciable y exponiéndola dentro del fluido (donde hay advección). Ahora estudiaremos un campo de velocidades que generan los vórtices, el cual es descrito en el plano complejo por la siguiente ecuación:

$$(\dot{\gamma}) = \frac{\varphi}{2\pi i} \left\{ (\gamma - z)^{-1} - \left( \gamma - \frac{c^2}{\bar{z}} \right)^{-1} \right\} . \quad (6)$$

Luego, tenemos la ecuación (6), que es general y esta expresada en imaginarios donde la barra implica conjugación (Aref, 1984). La posición en el plano complejo es gamma ( $\gamma$ ), “c” es el radio del dominio, debido a que la partícula esta confinada en un fluido de área circular,  $\varphi$  es el valor de la fuerza ejercida por el vórtice, las derivadas  $\dot{\gamma}$  nos dan la velocidad de una partícula en dicha posición y  $z = z(t)$  es la posición del vórtice.

### Modelo de vórtice parpadeante

Ahora tomaremos el caso del modelo de vórtice parpadeante de Hassan Aref (1984). Es decir, definimos una posición constante del vórtice, en el plano X-Y, durante un tiempo T/2 y luego de ese tiempo cambiamos la posición del vórtice a un punto simétrico con respecto al eje Y durante T/2 y así sucesivamente (Isaac, 2013). Además, consideramos T como el periodo en el movimiento. Entonces podemos expresar la posición del vórtice mediante la siguiente ecuación.

$$z(t) = \begin{cases} (+b, 0), & 0 < t < T/2 \\ (-b, 0), & T/2 < t < T \end{cases} . \quad (7)$$

Al reemplazar la ecuación (7) en la ecuación (6) y al tomar en consideración que las posiciones de las partículas están en dos dimensiones espaciales obtenemos dos ecuaciones diferenciales

que describen el movimiento de una partícula con masa despreciable en el espacio donde se encuentra el sistema de vórtice parpadeante, una para X y otra para Y:

$$\dot{X}(t) = \frac{-AY}{S^2+Y^2} \quad (8)$$

$$\dot{Y}(t) = \frac{AS}{S^2+Y^2} \quad (9)$$

$$S = \begin{cases} X + b, & 0 < t < T/2 \\ X - b, & T/2 < t < T \end{cases} \quad (10)$$

Donde  $A$  es constante, y  $S$  depende de la posición del vórtice. De las ecuaciones (8),(9) y (10) podemos analizar el caso donde  $b$  es muy pequeño comparado con la posición  $X$  de la partícula,  $b/X \rightarrow 0$  entonces  $S \rightarrow X$  (Isaac, 2013) y para este caso tendríamos dos situaciones físicas: una en la que la posición inicial de movimiento de la partícula está muy alejada de los vórtices, y otra situación en la que los vértices son muy cercanos entre ellos. Al considerar cualquiera de estos dos casos, y elevando al cuadrado las componentes de las velocidades, es decir las ecuaciones (8) y (9), y sumándolas tendríamos la ecuación (11) en donde “ $v$ ” es el módulo de la velocidad y “ $r$ ” es el módulo de la posición de la partícula (Isaac, 2013).

$$\dot{X}(t)^2 + \dot{Y}(t)^2 = v^2 = \frac{A^2}{X^2+Y^2} \quad (11)$$

$$v = \frac{A}{r} \quad (12)$$

Esto se reduce a un movimiento circular en el cual si la partícula se aleja de los vórtices entonces su velocidad será menor. Por el contrario, si se encuentra más cerca su velocidad será mayor, lo que corresponde a la ecuación (12).

### Caracterización de las trazas

Llamaremos trazas a las trayectorias de partículas en este sistema. En la figura 7 se muestran trazas no caóticas para partículas alejadas de los vórtices, con parámetros  $T = 0.05$ ,  $b = 0.5$  y  $A = 1$ , con la posición inicial en las abscisas igual 0.2 y con 5 posiciones igualmente espaciadas en el eje Y. Los vórtices se encuentran en posiciones simétricas lo que evidencia la simetría y la naturaleza envolvente de estas trazas, también es evidente ver que mientras las partículas se alejan de los vórtices estas trazas empiezan a definirse más y asemejándose a un movimiento circular, lo que ya se ha visto previamente con la aproximación de  $b \ll x$ . Las posiciones iniciales son cercanas a los vórtices, por lo que se espera encontrar trayectorias caóticas. Pero el periodo de los vórtices es muy corto para que las partículas sientan el efecto de este sistema de vórtice parpadeante, por eso se generan trayectorias no caóticas.

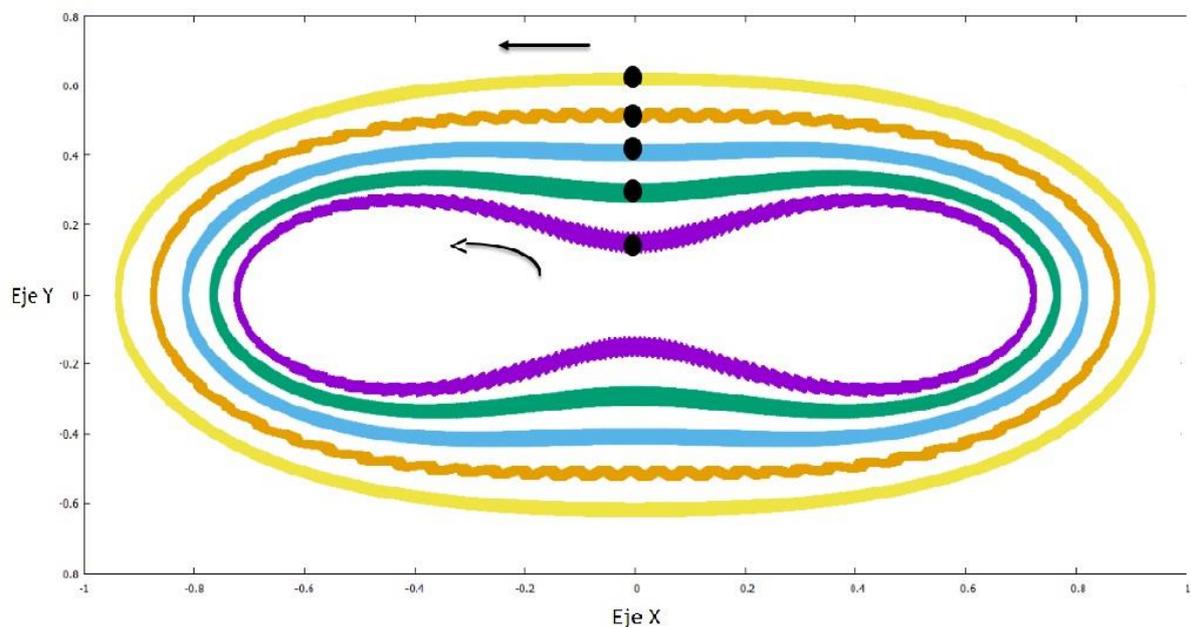


Figura 7. Trazas no caóticas con diferentes condiciones iniciales.

Ahora escogeremos una posición inicial igual a la posición inicial de la traza morada, pero cambiaremos el periodo a  $T = 1.5$  con condición inicial igual a 0.1 en la ordenada y 0 en la abscisa (Aref, 1984). En la figura 6 se muestra una trayectoria caótica por esto podemos decir que a mayores periodos y a partículas cercanas a sistema de vórtice parpadeante se generaran trazas caóticas.

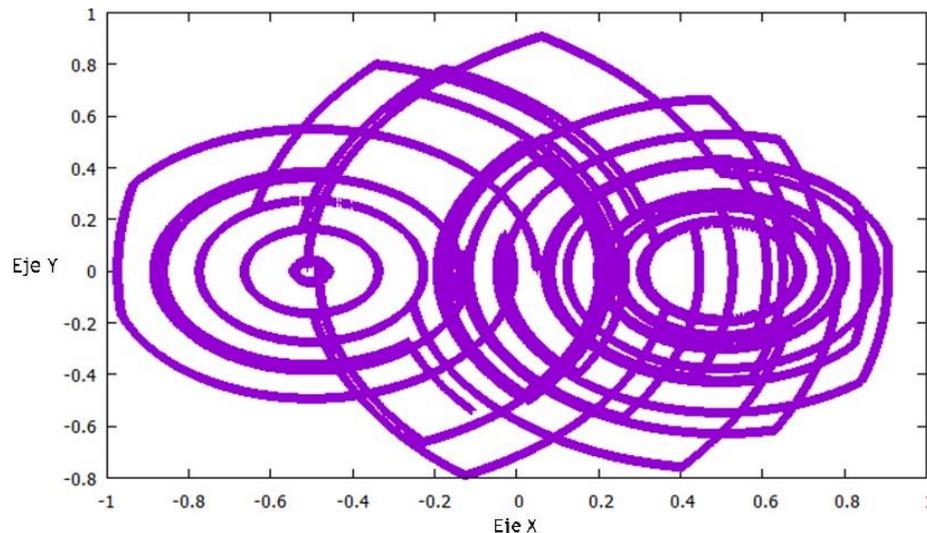


Figura 8. Traza de una partícula en movimiento caótico

### Mezclas por advección

Luego de definir cualitativamente los parámetros para encontrar sistemas caóticos o espacios de inestabilidad, ahora veremos el efecto de la advección, analizando un caso simple de la mezcla que se genera por el efecto de vórtice parpadeante. Para esto simularemos las posiciones de 2000 partículas alineadas en el eje Y (Isaac, 2013), desde  $y = -2.5$  hasta  $y = 2.5$ , con  $x = 0$ . Se tomarán los valores del periodo,  $b$  y  $A$  igual que en el caso anterior donde se encontró movimiento caótico.

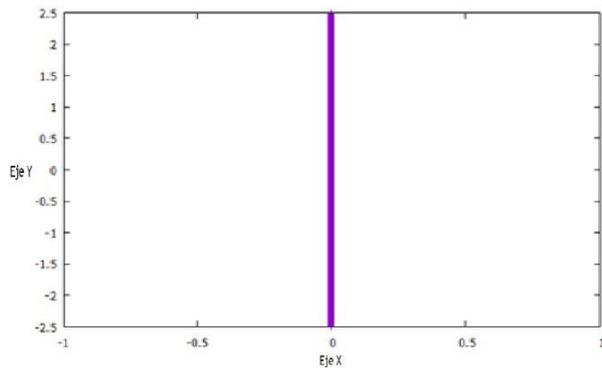


Figura 9. Sistema de partículas a  $t = 0$

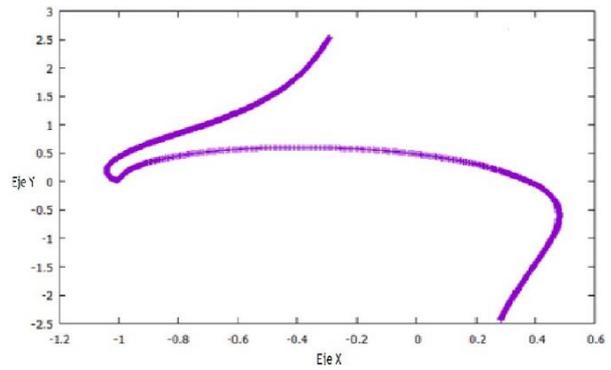


Figura 10. Sistema de partículas a  $t = T/2$

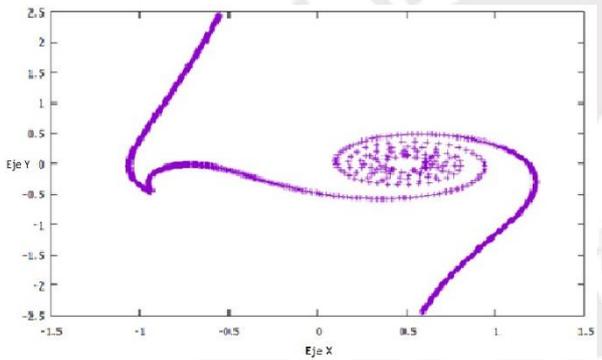


Figura 11. Sistema de partículas a  $t = T$

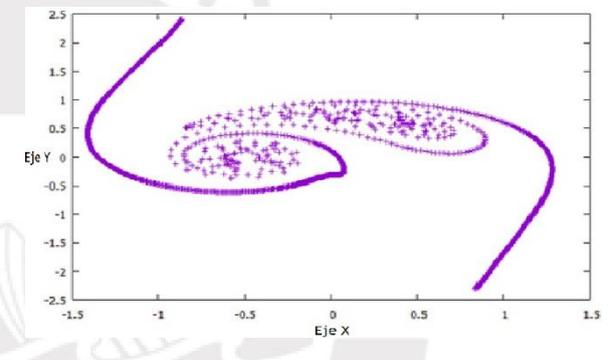


Figura 12. Sistema de partículas a  $t = 3T/2$

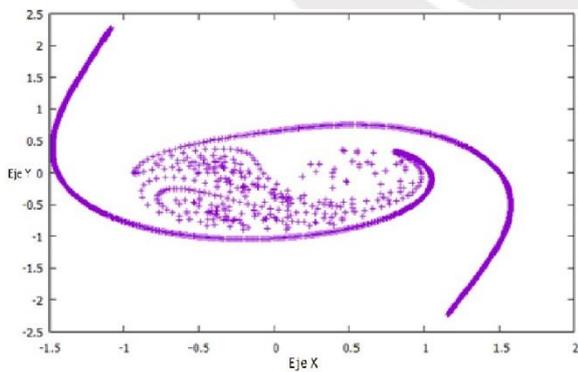


Figura 13. Sistema de partículas a  $t = 2T$

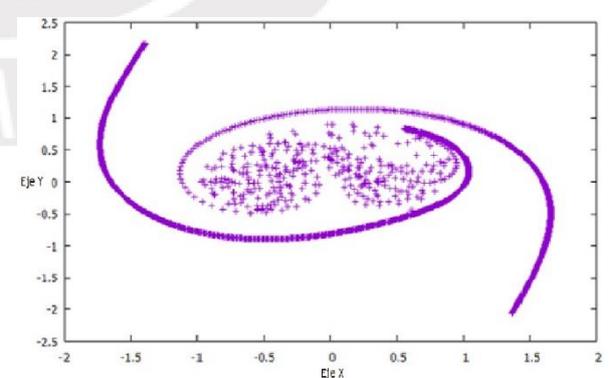


Figura 14. Sistema de partículas a  $t = 5T/2$

En las figuras 9 hasta la 14 se muestran posiciones de las partículas en diferentes tiempos. Es evidente que en un tiempo  $t = T$  se pierde totalmente algún patrón definido por lo que ahora se puede considerar al sistema una mezcla. El estudio de la advección en relación a mezclas nos permite analizar mecanismos para optimizar o controlarlas.

### Exponente de Lyapunov

El exponente de Lyapunov ( $\lambda$ ) caracteriza la diferencia de caminos o trayectorias entre dos partículas a lo largo del tiempo (Isaac, 2014). Si estas trayectorias encontradas corresponden a un movimiento caótico, la sensibilidad a las condiciones iniciales implica una mayor divergencia entre ambas a medida que evolucionan en el tiempo. Un exponente de Lyapunov positivo implica que ambas trayectorias se alejan entre ellas, por lo que implica un movimiento caótico (Wolf, Swift, Swinney, Vastano, 1985).

Esto nos da la rigurosidad matemática necesaria para llamar movimiento caótico a las trazas de las partículas encontradas [figura 9]. Este exponente es una medida de la naturaleza caótica del movimiento de las partículas en una región del espacio definido. Este se halla tomando  $\Delta r_0$  como la diferencia inicial de las posiciones de dos partículas y  $\Delta r(t)$  como su separación en el tiempo.

$$\Delta r(t) = \Delta r_0 e^{\lambda t} \tag{13}$$

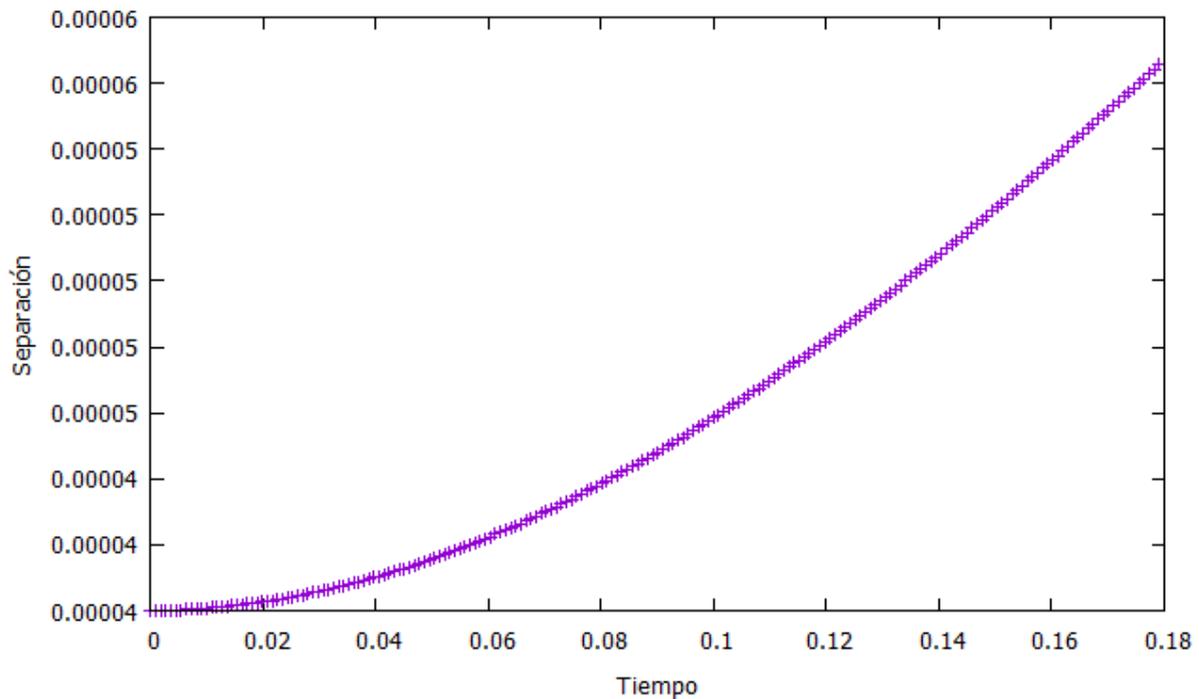


Figura 15. Evolución de la distancia entre partículas cercanas en el régimen caótico

Al realizar un ajuste lineal de la forma representada en la ecuación (13) y con la separación inicial igual a 0.00004 y con los datos obtenidos en la figura 15 se obtiene un exponente de Lyapunov positivo e igual a 1,65. Lo que indica el carácter caótico de las partículas.

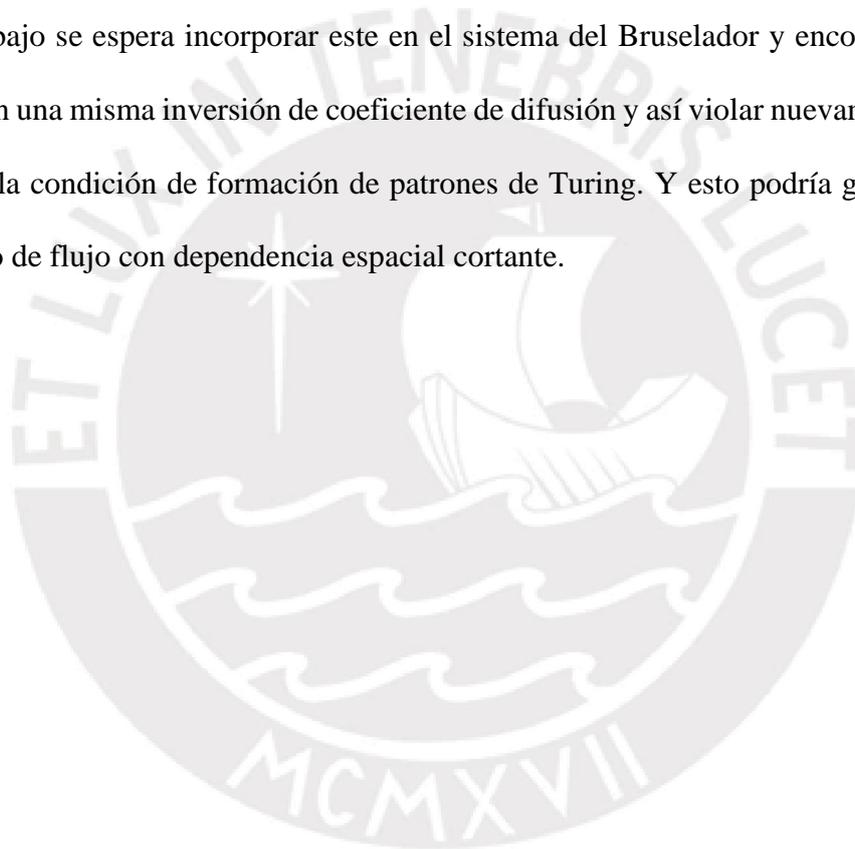
## CONCLUSIONES

Se pudo verificar la condición de formación de patrones de Turing. Además, que al considerar el efecto de la advección se pudo violar esta condición. No solo reproducimos los resultados obtenidos en el flujo de Poiseuille, sino también al adicionar un flujo descrito por la ecuación (5). Además, si el sistema evoluciona sin advección y no cumpliendo la condición de formación de patrones de Turing entonces el sistema colapsa a su estado homogéneo (sin patrones) correspondiente al estado estable, el cual reversionen las perturbaciones en largo plazo. Otro punto a resaltar es la dependencia de los patrones obtenidos al dominio donde se resuelven las ecuaciones (1) y (2).

También pudimos observar que se puede utilizar el sistema de vórtice parpadeante como un modelo matemático en la mezcla de fluidos, debido a que las partículas se distribuyen en una determinada área de manera efectiva en un corto tiempo.

Podemos concluir que el valor positivo del exponente de Lyapunov se debe a la naturaleza caótica del movimiento en el sistema de vórtice parpadeante.

Después de encontrar advección de naturaleza caótica en el sistema de vórtice parpadeante, en un futuro trabajo se espera incorporar este en el sistema del Bruselador y encontrar patrones que impliquen una misma inversión de coeficiente de difusión y así violar nuevamente con este tipo de flujo la condición de formación de patrones de Turing. Y esto podría generalizarse a cualquier tipo de flujo con dependencia espacial cortante.



## BIBLIOGRAFÍA

Burden Richard L., Faires J. Douglas, (2012) Runge-Kutta Methods. *Numerical Methods*. Brooks/Cole (pp 225 - 230)

*Centre pour la Communication Scientifique Directe*. Disponible 15 de octubre de 2019, de <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01654059>

H. Aref. (1984). Stirring by chaotic advection. *Journal of fluid Mechanics*, 143:1–12.

H. Aref. (1990). Chaotic advection of fluid particles, *Philosophical Transactions of the Royale Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 333.1631 .273-88

Isaac Rohan (2013). Chaotic Advection in a Blinking Vortex Flow. *Final Report*.1-10

Nicolis G. and Prigogine I. (1977). Self-Organization in Non-equilibrium Chemical System. Wiley, New York

Solomon Tom (2014). Chaos and chaotic fluid mixing. *Snapshots of modern mathematics from Oberwolfach*. (4) 1-4.

Vasquez R. Desiderio (2004). Chemical Instability Induced by a Shear Flow. *Physical Review Letters*, 3 de Setiembre, Vol 93(10), 1–3.

Wolf Alan, Swift Jack, Swinney Harry L., Vastano John (1985). Determining Lyapunov exponents from a time series. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Elsevier, 16 (3), pp.285 - 317.

## ANEXOS

**Programa para generar el sistema de vórtice parpadeante**

```

implicit real *8 (A-H,O-z)
REAL *8 k1(2), k2(2), k3(2), y(2), yn(2), k4(2)
read (*,*) A,xo,yo
y(1)=yo
y(2)=xo
dt=0.01
t=0
yn=0
xs=0
b=0.5
periodo=1.5
DO I=1,20000

xs=fun(t,y(2),b)

!write(*,*) i,xs
k1(1)=dt*A*(y(2)/(xs**2+y(1)**2))
k1(2)=dt*A*(-y(1)/(xs**2+y(1)**2))

xs=fun(t,y(2),b)
y=y+k1*(0.5)

k2(1)=dt*A*(y(2)/(xs**2+y(1)**2))
k2(2)=dt*A*(-y(1)/(xs**2+y(1)**2))

xs=fun(t,y(2),b)
y=y-k1*(0.5)+0.5*k2

```

```

k3(1)=dt*A*(y(2)/(xs**2+y(1)**2))
k3(2)=dt*A*(-y(1)/(xs**2+y(1)**2))

```

```

xs=fun(t,y(2),b)
y=y+k3-0.5*k2

```

```

k4(1)=dt*A*(y(2)/(xs**2+y(1)**2))
k4(2)=dt*A*(-y(1)/(xs**2+y(1)**2))

```

```

yn=y+(1/6.)*(k1+2*k2+2*k3+k4)

```

```

print*, y(2),y(1)

```

```

y=yn

```

```

t=t+dt

```

```

if (t.gt.1.5) then

```

```

t=0

```

```

end if

```

```

END DO

```

```

END

```

```

real *8 function fun(t,a,b)

```

```

implicit real *8 (A-Y)

```

```

xs=0

```

```

if (t.lt.0.75) then

```

```

xs=a+b

```

```

end if

```

```

if (t.gt.0.75) then

```

```

    if (t.lt.1.5) then

```

```

        xs = a+b

```

```

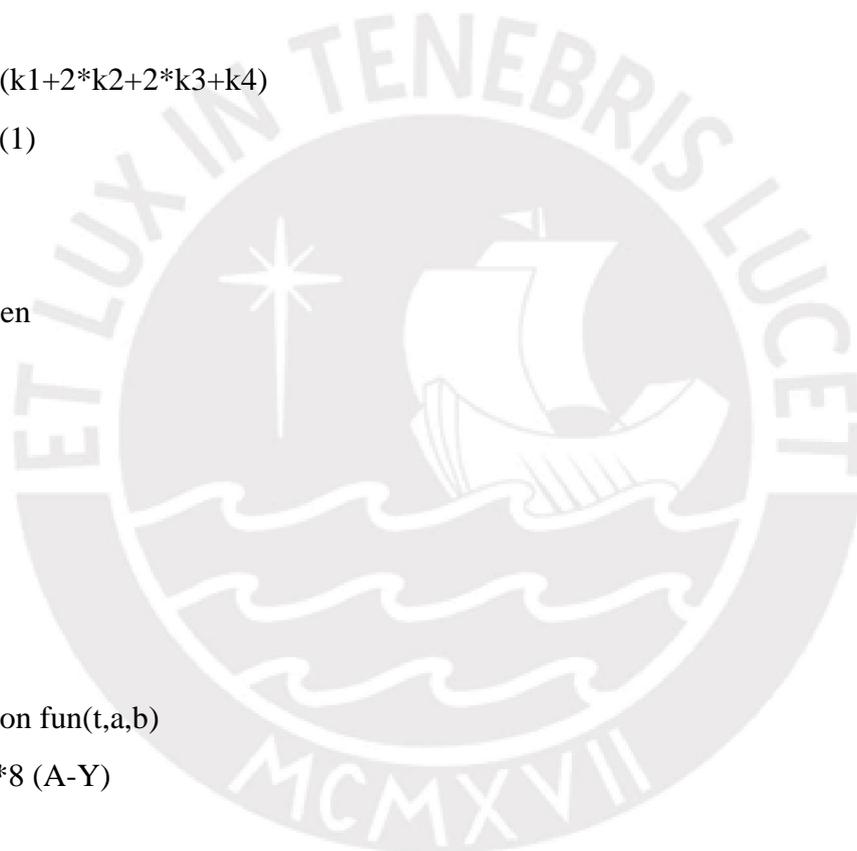
    end if

```

```

    if (t.gt.1.5) then

```



```

        t=0
        xs = a-b
    end if
end if
fun=xs
end

```

### Sistema del Brusaletor con advección

```

implicit real*8(A-h,o-z)
real*8 x(300,25), y(300,25) , xn(300,25) , yn(300,25)
read(*,*) time,velocidadmedia,Difx,Dify

desx=20.
desy=0.1
A=10.
B=100.
xo=A
yo=B/A
!Difx=1.
!Dify=2.
dx=desx/299.
dy=desy/24.
dt=0.000002
xn=0.
yn=0.
n=time-1
prix=0.
priy=0.
vel=velocidadmedia
width=dy*24

```

```
max=0.
```

```
y=y0
```

```
x=x0
```

```
do j=2,24
```

```
    do i=2,299
```

```
        y(i,j)=y(i,j)+(0.5-rand())*0.5
```

```
        x(i,j)=x(i,j)+(0.5-rand())*0.5
```

```
    end do
```

```
end do
```

```
do l=1,n
```

```
    do i=2,299
```

```
        do j=2,24
```

```
            z=-0.05416666+j*dy
```

```
            velx=1.5*vel*(1./(2*dx))*(1-4*(z/width)**2 )
```

```
            vely=1.5*vel*(1./(2*dx))*(1-4*(z/width)**2 )
```

```
            zorro=(x(i+1,j)-x(i-1,j))*velx
```

```
            zorra=(y(i+1,j)-y(i-1,j))*vely
```

```
            f=fun(A,B,x(i,j),y(i,j))
```

```
            g=gun(A,B,x(i,j),y(i,j))
```

```
            xn(i,j)=dt*( Difx*(x(i+1,j)+x(i-1,j)-2*x(i,j))*(1./dx**2) + f +
Difx*(x(i,j+1)+x(i,j-1)-2*x(i,j))*(1./dy**2) + zorro ) + x(i,j)
```

```
            yn(i,j)=dt*( Dify*(y(i+1,j)+y(i-1,j)-2*y(i,j))*(1./dx**2) + g +
Dify*(y(i,j+1)+y(i,j-1)-2*y(i,j))*(1./dy**2) + zorra ) + y(i,j)
```

```
        end do
```

```
    end do
```

```
bo=(xn(100,10)-x(100,10))/dt
```

```
ao=(x(101,10)-x(99,10))/(2*dx)
```

```

do=(xn(101,10)-xn(99,10))/(2*dx)
co=-bo/ao
eo=-bo/do
!write(*,*) co,eo,max
    x=xn
    y=yn
    do k=1,300
        x(k,25)=x(k,24)
        y(k,25)=y(k,24)
        x(k,1)=x(k,2)
        y(k,1)=y(k,2)
    end do
    do k=1,25
        x(300,k)=x(2,k)
        y(300,k)=y(2,k)
        x(1,k)=x(299,k)
        y(1,k)=y(299,k)
    end do

itst=Mod(l,1000)

if (itst.eq.0) write(*,*) x(150,15),y(1,10),x(2,10)
end do

do i=1,300
write(25,*) "
write(24,*) "
    do j=1,25
        xi=i*dx
        yj=-0.05416666+j*dy
        write(25,*) xi,yj , y(i,j)

```

```
        write(24,*) xi,yj , x(i,j)
    end do
end do
```

```
!no repetir las i en los do
end
```

```
real *8 function fun(a,b,m,n)
implicit real *8 (A-Y)
real*8 m,n
```

```
xs=A-(B+1)*m + n*m**2
```

```
fun=xs
end
```

```
real *8 function gun(a,b,m,n)
implicit real *8 (A-Y)
real*8 m,n
```

```
xs=b*m - n*m**2
```

```
gun=xs
end
```

