

## Tesis de Maestría en Física

# Simulación Numérica de la Vaporización Explosiva de Líquidos Confinados de Van der Waals

Presenta:

**Luis Ángel Pascual Hernández**

2192803073

Asesor:

Dr. Leonardo Di Girolamo Sigalotti Díaz

# AGRADECIMIENTOS

A mi asesor de tesis, Dr. Leonardo Sigalotti, por su apoyo durante toda la duración de la maestría, que a pesar de la pandemia siempre estuvo pendiente de mi y no perdimos contacto a pesar de estos años tan complicados para todos. Le agradezco mucho su excelente trato tanto en la licenciatura como en el posgrado. Mi agradecimiento sincero va dirigido también al Dr. Lamberto Díaz Damacillo por su apoyo durante las pruebas de calibración del código.

A mis amigos y compañeros del posgrado, que fueron de mucha importancia para ayudarme en situaciones como trámites, información del programa de estudios, entre otras cosas, y sobre todo por su amistad, que desafortunadamente desde el inicio de la pandemia no he vuelto a ver a la mayoría de ellos. También a mis profesores, de los cuales aprendí conocimientos muy valiosos, que me han sido muy útiles y estoy seguro me servirán para toda la vida.

A mi familia, que en estos años hemos pasado tiempo juntos a pesar de la situación global, que siempre han estado al tanto de mi. En especial a mis padres, quienes siempre han exaltado mi formación académica a lo largo de estos años.

A la Universidad Autónoma Metropolitana, por haber sido mi casa de estudios durante la licenciatura y posgrado, que siempre nos brinda el mejor trato y servicios a cada uno de los estudiantes, y en la cual siempre hemos tenido una plantilla de investigadores y profesores de muy alto nivel, tanto del punto de vista académico y científico como del punto de vista humano.

Y al Barcelona Supercomputing Center (BSC) de España por permitir el uso de sus facilidades de cómputo donde se realizaron las simulaciones presentadas en esta tesis.

# RESUMEN

En este trabajo de investigación se estudia mediante simulación numérica la evaporación ordinaria y la vaporización explosiva de gotas líquidas de van der Waals en equilibrio termo-mecánico bajo condiciones de microgravedad cuando éstas son sometidas a un calentamiento uniforme e instantáneo, usando el método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (SPH). A diferencia de modelos precedentes en la literatura, las simulaciones numéricas se realizaron con la ayuda de una versión modificada del código hidrodinámico DualSPHysics que incluye los efectos de tensión superficial, transferencia de calor, transferencia de masa a través de la interface líquido-vapor y la dinámica interfacial siguiendo como modelo termodinámico la aproximación de campo medio de van der Waals, el cual permite simular transiciones de fase de primer orden, dando lugar a un modelo de interface difusa. En comparación con otros modelos se introduce por primera vez un término no clásico en la ecuación de energía interna para la correcta descripción de la estructura de la interface líquido-vapor. Los resultados de las simulaciones para un rango amplio de temperaturas de calentamiento muestran que dependiendo de la densidad y temperatura iniciales de la gota y de la temperatura de calentamiento, las simulaciones predicen cinco regímenes distintos de evaporación: (i) evaporación de las capas superficiales de la gota por descomposición espinodal, (ii) evaporación por nucleación homogénea con la formación de una burbuja interna que se expande radialmente para luego colapsar sobre sí misma desapareciendo, (iii) fragmentación lenta por nucleación homogénea donde la burbuja se expande hasta romper la capa líquida alrededor de ella, dando lugar a un proceso de fragmentación en pequeñas gotas, las cuales permanecen en reposo o se expanden lentamente, (iv) fragmentación rápida donde los fragmentos líquidos se expanden ahora rápidamente alejándose del sitio de la fragmentación y (v) vaporización explosiva donde la burbuja formada por nucleación se expande de manera violenta. Durante este proceso la mayor parte del líquido inicial se convierte en vapor y la capa líquida alrededor de la burbuja en expansión se hace extremadamente delgada fragmentándose en gotas diminutas algunas de las cuales se evaporan durante su expansión. Para los casos donde ocurre evaporación superficial por descomposición espinodal o nucleación homogénea con la formación de una burbuja transitoria las simulaciones predicen con muy buena aproximación la ecuación de Clausius-Clapeyron para la presión de vapor como función del recíproco de la temperatura. Por otro lado, para los casos donde ocurre vaporización explosiva los modelos predicen un límite de supercalentamiento  $T_s \approx 0,9893$  (en unidades reducidas), que difiere del valor teórico para un fluido de van der Waals ( $T_s = 1$ , unidades reducidas) en alrededor del 1%. En base a estos resultados se puede concluir que las simulaciones numéricas describen correctamente la dinámica de la inestabilidad interfacial y, por consiguiente, la fragmentación y vaporización explosiva de gotas líquidas en microgravedad cuando éstas son sometidas a un calentamiento uniforme e instantáneo.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Antecedentes</b>	<b>5</b>
<b>3. Justificación</b>	<b>9</b>
<b>4. Objetivos</b>	<b>11</b>
4.1. Objetivo general . . . . .	11
4.2. Objetivos específicos . . . . .	11
<b>5. Marco teórico</b>	<b>12</b>
5.1. Modelo termodinámico de van der Waals (vdW) . . . . .	12
5.2. Ecuaciones básicas . . . . .	22
5.3. Modelo de interface difusa . . . . .	24
5.3.1. Aproximación de campo medio . . . . .	25
5.3.2. Estructura interna de la interface . . . . .	27
5.3.3. Exceso de energía en la interface . . . . .	28
5.3.4. Ecuaciones de movimiento modificadas . . . . .	29
5.3.5. Tensor de Korteweg en coordenadas rectangulares . . . . .	31
5.3.6. Tensor de esfuerzos en coordenadas rectangulares . . . . .	32
5.4. Descomposición espinodal . . . . .	33
5.5. Nucleación homogénea . . . . .	35
<b>6. Métodos numéricos</b>	<b>37</b>
6.1. El método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (SPH) . . . . .	37
6.1.1. Aproximación kernel . . . . .	38
6.1.2. Aproximación de partículas . . . . .	41
6.2. Leyes de conservación . . . . .	44
6.2.1. Conservación de la masa . . . . .	44
6.2.2. Conservación del momento lineal . . . . .	44
6.2.3. Conservación del momento angular . . . . .	45
6.2.4. Representaciones SPH alternativas del gradiente y de la divergencia	46
6.3. El código DualSPHysics . . . . .	47
6.3.1. Representación SPH de la ecuación de continuidad . . . . .	47
6.3.2. Representación SPH del tensor de esfuerzos viscosos . . . . .	48
6.3.3. Representación SPH del tensor de Korteweg . . . . .	50
6.3.4. Representación SPH de la ecuación de movimiento . . . . .	52
6.3.5. Representación SPH de la ecuación de energía interna . . . . .	53
6.3.6. Cálculo de la temperatura . . . . .	55



6.3.7.	Representación SPH de la ecuación de entropía . . . . .	56
6.3.8.	Integración temporal . . . . .	57
6.3.9.	Función kernel . . . . .	58
<b>7.</b>	<b>Modelos numéricos y resultados de las simulaciones</b>	<b>60</b>
7.1.	Parámetros iniciales . . . . .	61
7.2.	Prueba de validación . . . . .	61
7.3.	Pruebas de convergencia . . . . .	64
7.4.	Modelos iniciales . . . . .	65
7.5.	Evaporación de gotas . . . . .	71
7.5.1.	Evaporación superficial . . . . .	72
7.5.2.	Nucleación homogénea transitoria . . . . .	76
7.5.3.	Presión de vapor . . . . .	80
7.5.4.	Fragmentación lenta . . . . .	82
7.5.5.	Fragmentación rápida . . . . .	87
7.5.6.	Vaporización explosiva . . . . .	87
7.5.7.	Límite de supercalentamiento . . . . .	91
7.5.8.	Masa evaporada como función del tiempo . . . . .	93
<b>8.</b>	<b>Conclusiones y perspectivas</b>	<b>97</b>
<b>9.</b>	<b>Bibliografía</b>	<b>101</b>
	<b>Lista de Figuras</b>	<b>110</b>
	<b>Apéndices</b>	<b>115</b>
<b>A.</b>	<b>Equilibrio de una interface plana</b>	<b>115</b>
<b>B.</b>	<b>Derivación de las ecuaciones modificadas</b>	<b>117</b>
B.1.	Relaciones de clausura . . . . .	117
B.2.	Ecuaciones modificadas . . . . .	119
<b>C.</b>	<b>Equilibrio de una inclusión esférica</b>	<b>121</b>
<b>D.</b>	<b>Derivación de la aproximación kernel del gradiente de una función</b>	<b>123</b>

# Capítulo 1

## Introducción

La evaporación de un líquido es un proceso físico en el cual la fase líquida pasa lenta y gradualmente a un estado gaseoso, es decir, a una fase de vapor. El proceso puede ocurrir a cualquier temperatura siempre y cuando el líquido adquiera suficiente energía térmica para poder vencer los efectos de tensión superficial. Desde el punto de vista molecular, el proceso de evaporación ocurre cuando la energía cinética adquirida por las moléculas del líquido es mayor que el trabajo cohesivo ejercido por la tensión superficial sobre la superficie del líquido. En general, la tasa de evaporación de un líquido es mayor cuanto mayor es la temperatura a la que se somete el líquido. Sin embargo, puede también ocurrir a temperaturas mucho más moderadas en líquidos con menor tensión superficial. Es importante distinguir el proceso de evaporación del proceso de ebullición de un líquido. Por ejemplo, por encima de la superficie libre de un líquido siempre habrá una cantidad de sus moléculas en estado gaseoso. En condiciones de equilibrio, esa capa de moléculas en fase gaseosa define la presión de vapor saturante, la cual depende de la temperatura y de la naturaleza del líquido en cuestión. Cuando la cantidad de gas es inferior a la presión de saturación, entonces la evaporación ocurre al pasar las moléculas gradualmente de la fase líquida a la fase gaseosa. Solo cuando la evaporación se produce a presión atmosférica, es decir, cuando la presión de saturación es igual a la presión atmosférica, decimos que se produce la ebullición. A veces en cambio de *evaporación* suele usarse en la literatura el término *vaporización* para indicar de manera más general el cambio de estado de líquido a vapor de una sustancia. Es decir, cuando el cambio de fase involucra la totalidad de la masa de la sustancia, como ocurre, por ejemplo, cuando una cantidad de agua hierve en una olla de cocción, entonces a la vaporización del agua se le llama ebullición. En cambio, cuando el cambio de fase ocurre solamente en la superficie del líquido al proceso de vaporización se le denomina evaporación.

En términos físicos, la vaporización de una sustancia líquida implica una transición de fase. Por ejemplo, una transición de fase líquido-vapor se produce cuando una solución homogénea es llevada bruscamente a una temperatura por debajo del valor crítico, es decir, en la región inestable del diagrama de fases encerrada por la curva de *coexistencia* (o curva *binodal*). En particular, la separación de la solución en dos fases diferentes puede ocurrir por *nucleación* o bien por *descomposición espinodal*. Por ejemplo, la nucleación se refiere a la formación de una burbuja (nucleación homogénea) o más burbujas de vapor (nucleación heterogénea) en el interior de la sustancia. Generalmente esto ocurre cuando la solución líquida penetra en la región metaestable del diagrama de fases, entre la curva binodal y la curva *espinodal*. En

esa región el sistema es termodinámicamente inestable con respecto a la amplificación de fluctuaciones con amplitud finita. Por debajo de la curva espinodal, es decir, en la brecha de miscibilidad la separación de fases ocurre de manera espontánea como resultado de fluctuaciones infinitesimales. Este proceso se conoce en la literatura como descomposición espinodal [1]. Muchas de las características básicas de las transiciones de fase líquido-vapor pueden estudiarse en el marco de la teoría del campo medio de van der Waals (vdW) [2]. En general, el estudio de transiciones de fase de primer orden mediante cálculos hidrodinámicos con transferencia de calor constituye aún hoy en día un tema abierto de investigación.

El interés en el proceso de descomposición espinodal se debe mayormente a la utilidad de muchas aleaciones cuyas propiedades son una consecuencia de este proceso [3, 4]. Transiciones de fase por descomposición espinodal han sido también observadas en una variedad de materiales tales como minerales cristalinos, soluciones minerales sólidas en geología, aceros, geles, cerámicas y mezclas de polímeros y líquidos [5, 6, 7]. Cuando estos materiales pasan de un estado inicial estable a uno inestable en la brecha de miscibilidad, debido a la presencia de fluctuaciones estadísticas, se observa la formación transitoria de patrones inhomogéneos de concentración durante el camino del sistema al equilibrio. Desde que Cahn y Hilliard introdujeron el concepto de crecimiento (o amplificación) de pequeñas fluctuaciones [8, 9] ha habido un interés creciente en el estudio de la dinámica de formación de dichos patrones mediante la implementación de modelos numéricos [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18]. Mientras la mayoría de estos modelos se ha enfocado en la simulación numérica de la descomposición espinodal y formación de patrones en sistemas de dimensiones infinitas mediante el uso de condiciones de frontera periódicas, en comparación pocas simulaciones han sido reportadas en la literatura para sistemas de dimensiones finitas con superficies libres, como es el caso de la evaporación de gotas líquidas [19, 20, 21, 22, 23, 24, 25]. Un resultado común de estas últimas simulaciones es la identificación a grandes rasgos de cuatro posibles procesos de vaporización donde una gota sometida a calentamiento puede experimentar: (a) un proceso de evaporación superficial con el resultado final de una gota de menor tamaño coexistiendo en equilibrio con su atmósfera de vapor; (b) nucleación homogénea transitoria con la formación de una burbuja interior, la cual se expande por un momento antes de colapsar sobre sí misma y desaparecer por completo. Durante este proceso la gota experimenta simultáneamente evaporación superficial; (c) fragmentación de la capa líquida en pequeñas gotas debido a la expansión rápida de una burbuja interior formada por nucleación y (d) vaporización explosiva por exposición repentina de la gota a temperaturas muy altas.

En general, la evaporación rápida de una masa líquida puede resultar en una explosión violenta cuando el líquido alcanza el límite de supercalentamiento, es decir, la máxima temperatura por debajo del valor crítico que un líquido puede alcanzar bajo condiciones de presión y composición constantes inmediatamente antes de entrar en un proceso de vaporización explosiva [26, 27]. En el límite de supercalentamiento, el líquido penetra en el dominio de estados metaestables donde fluctuaciones aleatorias y de tamaño finito dan inicio a la evaporación espontánea del líquido por nucleación homogénea acompañada por aceleraciones del fluido y tasas de evaporación extremadamente altas. Este proceso de carácter violento implica desviaciones del equilibrio termodinámico que son por lo general varios órdenes de magnitud mayores que los implicados en los procesos de evaporación ordinaria. Si bien el fenómeno de vaporización explosiva se observa frecuentemente en la combustión

de combustibles, en el contacto de lava fundida con agua, en el transporte de gas natural licuado, durante la falla del sistema de enfriamiento de los reactores nucleares y en muchos otros procesos industriales, la formulación de una teoría básica que explique los detalles de la evaporación explosiva se encuentra aún a la espera de poder completarse. Sin embargo, los peligros asociados con explosiones accidentales de este tipo han motivado el interés por la investigación de estas interacciones tanto a nivel teórico como experimental. En experimentos a escalas reales otros procesos complejos ocurren en combinación con la vaporización explosiva tales como, por ejemplo, la mezcla de fluidos, la transferencia de calor y la presencia de múltiples fases, entre otros que han dificultado el uso de dichos experimentos para el desarrollo de una teoría detallada. En cambio buena parte del conocimiento sobre la vaporización explosiva proviene fundamentalmente de experimentos a pequeña escala con gotas confinadas en una columna de vapor [28, 29, 30]. En particular, esta técnica ha permitido observar la explosión de gotas líquidas por supercalentamiento aislada de otros factores y determinar el límite de supercalentamiento de sustancias puras y mezclas binarias [31, 32, 33, 34]. Por otro lado, medidas experimentales de la expansión explosiva de una burbuja formada por nucleación en el interior de una gota han sido difíciles de tomar por las pequeñas escalas involucradas y la rapidez del proceso de cambio de fase de líquido a vapor. Además, con el objeto de excluir otros factores externos como, por ejemplo, los efectos de la gravedad es deseable poder realizar experimentos bajo condiciones de microgravedad. Sin embargo, la ejecución de tales experimentos en el laboratorio presenta la limitante de duraciones muy cortas, mientras que durante las misiones espaciales la limitante mayor esta representada por los costos elevados [35, 36].

En este trabajo de tesis se proponen modelos numéricos con el uso del método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (SPH, por sus siglas en inglés) para el estudio de la evaporación de gotas líquidas de van der Waals en el vacío bajo condiciones de microgravedad con particular énfasis en el estudio de modelos de vaporización explosiva. SPH es un método Lagrangiano donde el fluido es representado por un conjunto finito de partículas (o puntos de interpolación). Debido a su carácter Lagrangiano, el fluido queda completamente descrito por el movimiento de las partículas lo que hace que el método sea particularmente conveniente para modelar grandes deformaciones en el fluido y sistemas con fronteras altamente irregulares. Además, no necesita de técnicas particulares para seguir la evolución de la interfase entre diferentes fases y, por lo tanto, el método es idóneo para la simulación de transiciones de fase. A diferencia de modelos previos en la literatura, los cálculos numéricos se llevaron a cabo con una versión modificada del código hidrodinámico DualSPHysics [37] que tiene cuenta de los efectos térmicos y capilares. Para ello se procedió a complementar las ecuaciones de continuidad y de movimiento implementadas en el código DualSPHysics con una ecuación para la energía interna. Para simular la transición de fase líquido-vapor el modelo combina las ecuaciones de estado de vdW para la presión y la energía interna con un modelo de interfase difusa [38], donde el tensor de esfuerzos de Korteweg, derivado a partir del funcional de energía libre de Helmholtz, se agrega como término fuente al tensor de esfuerzos viscoso en la ecuación de momento y de energía interna con el objeto de modelar correctamente la transición de las variables físicas a través de la interfase que separa ambas fases. Inherente a esta formulación es el modelado del espesor interfacial el cual a su vez estará determinado por la escala espacial sobre la que varía la densidad. En las etapas finales del proceso de separación de fases a temperaturas subcríticas, la interfase de separación entre el líquido y el vapor tiende

a una superficie de discontinuidad (es decir, a una superficie suficientemente delgada). En este límite, la fuerza de Korteweg se reduce esencialmente a la fuerza de Marangoni [39, 40] y el espesor de la interfase se aproxima asintóticamente a una superficie libre, la cual puede representarse por una superficie de espesor cero dotada de propiedades físicas tales como, por ejemplo, la tensión superficial [38]. A diferencia de trabajos precedentes en esta línea de investigación, además del tensor de esfuerzos de Korteweg, otro término no-clásico consistente con el modelo termodinámico en la aproximación de campo medio ha sido agregado como término fuente en la ecuación de energía interna. Dicho término representa la tasa de vaporización a través de la interfase difusa y, por lo tanto, se encuentra relacionado a la difusión del calor latente en la zona interfacial. Si bien este término ha sido obviado en todas las simulaciones precedentes, el mismo es de fundamental importancia para la correcta descripción de la estructura interna de la interfase líquido-vapor en equilibrio.

La gran mayoría de las simulaciones de evaporación de gotas líquidas reportadas en la literatura parten de una configuración fuera del equilibrio, asumiendo formas cuadradas en dos dimensiones y cúbicas en tres dimensiones. A diferencia de estos trabajos precedentes en este espacio se estudia la evaporación por calentamiento externo de gotas en equilibrio termo-mecánico, que corresponde a condiciones iniciales más reales. Dependiendo de la densidad y temperatura de equilibrio iniciales y de la temperatura de calentamiento, los resultados de las simulaciones numéricas predicen cinco regímenes distintos de evaporación: (i) evaporación de las capas superficiales de la gota por descomposición espinodal a temperaturas moderadas de calentamiento, (ii) evaporación por nucleación homogénea con la formación de una burbuja interna de vapor al aumentar la temperatura de calentamiento, la cual se expande radialmente hasta alcanzar un radio máximo antes de colapsar sobre sí misma y desaparecer por completo, (iii) fragmentación lenta por nucleación de una burbuja a mayores temperaturas de calentamiento, la cual se expande radialmente hasta romper la capa líquida que la encierra en un número de pequeñas gotas que pueden permanecer en reposo o expandirse muy lentamente, (iv) fragmentación rápida donde los fragmentos líquidos resultantes se expanden ahora rápidamente alejándose del sitio de la fragmentación, y (v) vaporización explosiva cuando la burbuja formada por nucleación se expande de manera violenta a temperaturas correspondientes al límite de supercalentamiento o por encima de éste, dando origen a un proceso de explosión. Durante la vaporización explosiva la mayor parte del líquido se convierte rápidamente en vapor y solo una pequeña parte sobrevive en forma de gotas diminutas como resultado de la fragmentación de una capa líquida delgada al final de la expansión de la burbuja. En los casos donde se produjo evaporación superficial por descomposición espinodal o por nucleación homogénea las simulaciones predicen el aumento de la presión de vapor con la temperatura y, realizando un ajuste con los datos numéricos, se logra reproducir muy bien la relación de Clausius-Clapeyron. Por otro lado, los modelos predicen un límite de supercalentamiento  $T_s \approx 0,9893$ , que difiere del valor teórico para un fluido de vdW ( $T_s = 1$ ) en alrededor del 1%. Estos resultados indican que las simulaciones numéricas describen correctamente la dinámica de la inestabilidad interfacial y, por lo tanto, la fragmentación y la vaporización explosiva de gotas líquidas en microgravedad cuando éstas son sometidas a un calentamiento uniforme e instantáneo.

# Capítulo 2

## Antecedentes

La dinámica de gotas líquidas ha sido objeto de intensa investigación teórica y experimental ya que éstas se encuentran frecuentemente en innumerables procesos naturales y de producción industrial como, por ejemplo, la formación de gotas de lluvia, la impresión por inyección de tinta y la atomización por inyección de combustible entre muchos otros. En particular, tanto la formación como la deformación de gotas líquidas son procesos que están asociados con el movimiento y el cambio de morfología de superficies libres y de interfaces. No obstante, la simulación numérica de dichos procesos ha representado a lo largo de los años grandes retos para muchos investigadores en el área de la dinámica de fluidos computacional. Otro problema que ha representado un reto aún mayor es la simulación de flujos bifásicos con transiciones de fase tanto en gotas líquidas como en sistemas de mayor tamaño. Por ejemplo, la comprensión de los mecanismos físicos que intervienen en los cambios de fase líquido-vapor son importantes en muchos procesos naturales e industriales tales como la condensación de gases y la vaporización y evaporación de líquidos. En respuesta a estos retos se han realizado numerosos estudios experimentales con el objeto de mejorar la utilización del calor. Sin embargo, una serie de fenómenos fuera del equilibrio que ocurren durante los procesos que implican transiciones de fase como, por ejemplo, la nucleación tanto homogénea como heterogénea, las interacciones entre burbujas y las inestabilidades interfaciales generalmente complican las interpretaciones de los resultados experimentales. Por esta razón fundamental las simulaciones numéricas se han convertido en un instrumento útil para la descripción detallada de los mecanismos físicos que intervienen durante las transiciones de fase.

Hasta la fecha, muchos modelos numéricos han sido desarrollados para la simulación de flujos bifásicos con cambios de fase, que incluyen diferentes métodos como, por ejemplo, el método *volume-of-fluid* (VOF) [41], el método *level-set* (LS) [42], el método de lattice-Boltzmann [43, 44, 45, 25], y el método SPH [19, 15, 18, 22, 23, 24]. El modelado numérico de la transición de fase líquido-vapor requiere un correcto tratamiento de la transferencia de masa, momento y energía a través de las interfaces. En base al tratamiento de las integrales de transferencia, las simulaciones de flujos bifásicos con cambios de fase pueden clasificarse en dos categorías diferentes. Una categoría de modelos se basa en el cálculo de las integrales de transferencia como términos fuente en las ecuaciones hidrodinámicas. Ejemplos de esta metodología han sido reportados por Son et al. [42] para el caso de la formación de una burbuja sobre una superficie horizontal con la ayuda del método LS, por Welch y Wilson [46] en la simulación de la evaporación de películas horizontales de líquido usando el método VOF

y por Tomar y Biswas [47] quienes simularon el crecimiento de una burbuja usando un método híbrido que acopla el método LS con el método VOF. Más recientemente, Safari et al. [44] estudiaron transiciones de fase líquido-vapor empleando el método de lattice Boltzmann. La gran mayoría de estos métodos se basa en la suposición que la transferencia de calor se debe a gradientes de temperatura y que la temperatura en la interface es igual a la temperatura de saturación. Sin embargo, el uso de estos métodos de transferencia se ha visto limitado debido a suposiciones por lo más empíricas que se hacen para aproximar las integrales de transferencia de masa y energía. La segunda categoría de métodos se basa en el uso de una ecuación de estado para describir cambios de fase sin necesidad de recurrir a trucos o suposiciones. Muchos de estos cálculos hacen uso de la ecuación de estado de van der Waals (vdW), de Peng-Robinson o de Carnahan-Starling [38, 48, 49], que son entre las más conocidas. Por ejemplo, Gong y Cheng [50] realizaron simulaciones con lattice Boltzmann de la nucleación y crecimiento de burbujas a partir de la ebullición de un líquido en contacto con una superficie caliente haciendo uso de la ecuación de Peng-Robinson. Empleando técnicas y métodos similares, Li et al. [51, 52] simularon transiciones de fase líquido-vapor durante la ebullición de líquidos. Por otro lado, Xu y Qian [53] investigaron el calentamiento y la ebullición de fluidos monocomponentes usando la teoría de capilaridad de vdW. Cálculos de descomposición espinodal con el uso de métodos de lattice Boltzmann han sido también reportados por Toghianiyan et al. [54] y Nemati et al. [55].

Los métodos de dinámica molecular (DM) han sido también usados con éxito para la simulación de transiciones de fase líquido-vapor. Por ejemplo, Long et al. [56] modelaron con el uso de técnicas de DM la evaporación de gotas submilimétricas en una cámara de vapor. Por otro lado, Maruyama y Kimura [57] realizaron cálculos con DM para estudiar la vaporización explosiva y la nucleación heterogénea de burbujas de argón sobre superficies sólidas. Posteriormente, Dou et al. [58] y Gu y Urbassek [59] describieron la evaporación de una película líquida debido al calentamiento por una superficie irradiada con luz láser, encontrando que el proceso de evaporación dependía del espesor de la película. Holyst y Litniewski [60] simularon la evaporación de nanogotas y demostraron que la temperatura es una función continua a través de la interface líquido-vapor cuando la razón de densidades es pequeña, mientras Zhang et al. [61] simularon la evaporación de nanogotas sobre sustratos calientes demostrando que durante el proceso de evaporación la temperatura del vapor era siempre mayor que la del líquido y que el flujo de masa evaporada aumentaba cuando se aumentaba el grado de hidrofilia del sustrato. Hens et al. [62] estudiaron la nucleación de burbujas bajo el efecto de varios grados de supercalentamiento y para diferentes superficies de contacto, encontrando que la forma de las burbujas estaba fuertemente relacionada con la mojabilidad de la superficie sólida. Simulaciones de DM más recientes han demostrado que la inclusión de pilares nanoestructurados sobre superficies planas pueden conducir a un aumento de la transferencia de energía con la consiguiente observación de vaporizaciones explosivas mucho más violentas [63, 64, 65]. Semiromi y Azimian [66, 67] con la ayuda de una función potencial de Lennard-Jones modificada realizaron cálculos de DM para estudiar los mecanismos que gobiernan las transiciones de fase líquido-vapor y simularon la ebullición de flujo anular en nanocanales.

Las aplicaciones del método SPH al estudio de flujos bifásicos con transiciones de fase han sido relativamente más recientes. En particular, el método ha sido aplicado a problemas de formación de patrones en sistemas con extensión infinita [15, 18] y a la dinámica de gotas líquidas. Modelos SPH de cambios de fase líquido-vapor en

gotas líquidas fueron inicialmente propuestos por Nugent y Posch [19] usando una ecuación de estado de vdW. En efecto, estos modelos han servido de referencia para todas las simulaciones SPH posteriores para el estudio de la evaporación, nucleación y vaporización explosiva de gotas líquidas. En particular, en el modelo de Nugent y Posch [19], la tensión superficial no es un parámetro de entrada sino que se modela de manera natural a partir de la parte cohesiva (fuerzas de atracción) implicada en la ecuación de estado de vdW. En efecto, cerca de la interface líquido-vapor, las fuerzas atractivas de largo alcance que operan entre las partículas son diferentes entre las dos fases, dando origen a una fuerza perpendicular en todo punto a la interface y que apunta hacia la fase más densa (es decir, la fase líquida). Por lo tanto, en esta aproximación no es necesario localizar explícitamente la interface mediante el uso de algoritmos para el seguimiento y el cálculo de la curvatura local de la superficie. Estos autores también demostraron que por razones de estabilidad numérica del método SPH las fuerzas cohesivas debían interpolarse separadamente redoblando el rango de interacción. Sucesivamente Tartakovsky y Meakin [68] propusieron un método alternativo para el estudio de la dinámica de gotas de vdW basado en el uso de una fuerza de interacción entre pares de partículas. Un modelo de interface difusa fue posteriormente desarrollado por Xu et al. [69] para la simulación SPH de fluidos bifásicos de vdW con transiciones de fase líquido-vapor. El modelo de interface difusa ha sido fundamental para las simulaciones de vaporización de gotas, cuyos tamaños pueden ir de las decenas de micrones a escalas milimétricas. A escala molecular, una interface puede considerarse como una zona de transición cuyo espesor típico a temperaturas subcríticas es de unas decenas de Angströms. Esto implica que el tamaño típico de una burbuja o gota es al menos  $10^6$  veces mayor que el espesor de una interface, lo que permite aproximarla por una superficie de discontinuidad. Sin embargo, el espesor de una interface aumenta cuando el sistema se aproxima al punto crítico, volviéndose de extensión infinita en dicho punto. Cerca del punto crítico el espesor de la interface puede ser tan grande o mayor que el tamaño de las fases por lo que se hace necesario describir la estructura de la misma. En particular, el modelo termodinámico implicado por el modelo de interface difusa sirve para describir correctamente la estructura de la interface en presencia de efectos de transferencia de calor cuando la temperatura del sistema es cercana al valor crítico [38].

Cálculos SPH de la descomposición espinodal y nucleación homogénea de gotas líquidas de vdW fueron posteriormente reportados por Sigalotti et al. [22]. Para ello se implementó un modelo de interface difusa donde el tensor de Korteweg para el modelado de las fuerzas capilares se incluyó como término fuente en la ecuación de momento. En aquellas gotas para las cuales no se observó evaporación, el modelo predijo valores de la tensión superficial en muy buen acuerdo con la ecuación de Young-Laplace. Para un rango de valores iniciales de densidad y temperatura, las simulaciones predijeron la formación de gotas estables y subcríticas con una atmósfera de vapor en equilibrio como resultado de un proceso de evaporación superficial. Por otro lado, los modelos SPH predijeron un aumento de la presión de vapor con la temperatura y reprodujeron con muy buen ajuste la relación de Clausius-Clapeyron. En un trabajo posterior, Sigalotti et al. [23] simularon la evaporación y vaporización explosiva de gotas en microgravedad. En este caso, la temperatura de la gota se aumentó gradualmente con el objeto de predecir el punto de separación entre la evaporación normal como resultado del calentamiento subcrítico y la vaporización explosiva en el límite de supercalentamiento. Los resultados demostraron que bajo un regimen



de calentamiento subcrítico, las gotas experimentaban evaporación espontánea hasta producir una gota de menor tamaño en equilibrio con su atmósfera de vapor. Al aumentar el grado de calentamiento, la gota podía experimentar evaporación superficial y nucleación homogénea al mismo tiempo. Sin embargo, en estos casos se observó que la presión interna de la burbuja no era suficiente para fragmentar la capa líquida, colapsando sobre sí misma y produciendo de nuevo una gota de menor tamaño en equilibrio con su atmósfera de vapor. Muy cerca o en el límite de supercalentamiento, una burbuja inestable se producía por nucleación homogénea, la cual se expandía dando lugar o bien a un proceso de fragmentación de la capa líquida arriba de la burbuja o a una explosión violenta en pequeñas gotas, dependiendo de la densidad del líquido. A supercalentamientos mayores, la gota experimentaba vaporización explosiva independientemente de la densidad del líquido. Estos cálculos predijeron el límite de supercalentamiento teórico para fluidos de van der Waals con una precisión de 4%. Mientras la gran mayoría de los modelos SPH precedentes se limitaron a dos dimensiones, cálculos más recientes por Xiong et al. [24] estudiaron la evaporación de gotas de agua en tres dimensiones sobre sustratos hidrofílicos e hidrofóbicos. Variando la magnitud del flujo de calor transmitido por la superficie a la gota, estos autores pudieron dividir el régimen de evaporación normal del de vaporización explosiva y establecer un flujo de calor crítico para el agua. Además, se observó en correspondencia con trabajos previos en la literatura que superficies hidrofílicas favorecían el proceso de vaporización explosiva, mientras que sobre superficies hidrofóbicas se observó que la gota experimentaba vaporización explosiva rebotando sobre la superficie.

# Capítulo 3

## Justificación

La evaporación de sustancias líquidas es un proceso bastante común tanto en nuestra experiencia de vida diaria como en la industria. Por ejemplo, actualmente se han puesto en práctica tecnologías basadas en el proceso de evaporación al vacío para reducir el volumen de las aguas residuales industriales, con un bajo costo energético, y al mismo tiempo recuperar el agua en aplicaciones dispares. Por otro lado, la evaporación es un proceso clave dentro del ciclo hidrológico que conduce a la formación de las nubes producto de la condensación del agua en las capas altas de la atmósfera y a las precipitaciones en forma de gotas. Por esta y por muchas otras razones es de fundamental importancia comprender los mecanismos físicos que intervienen durante los procesos de evaporación y vaporización explosiva de líquidos. En este sentido otro ejemplo práctico concierne la expansión rápida en la atmósfera de vapores no confinados, como podría ser el caso de una nube tóxica, producto del derramamiento de una sustancia líquida contaminante la cual se evapora en un tiempo determinado a consecuencia de la radiación solar. La vaporización explosiva o explosión de vapor ocurre de manera natural cuando el agua entra en contacto con la lava durante una erupción volcánica o a nivel industrial cuando se vierte agua sobre un metal incandescente o fundido para enfriarlo. Sobrecalentamiento durante el transporte de gas líquido por tuberías o fallas en el sistema de enfriamiento de un reactor nuclear, o inclusive en la interacción combustible-refrigerante, pueden ocurrir fenómenos de explosiones violentas por vaporización. Sin embargo, los fundamentos físicos de estos procesos no están aún suficientemente claros por lo que se hace necesario invertir más trabajo de investigación tanto a nivel experimental como a nivel teórico.

Dado que los procesos de transiciones de fase, como son los casos de la evaporación y la vaporización explosiva de líquidos, implican una serie de fenómenos fuera del equilibrio, los cuales incluyen la formación de burbujas mediante nucleación, interacciones líquido-vapor e inestabilidades interfaciales, el problema se hace tan complejo que es necesario recurrir a la solución numérica de las ecuaciones de la dinámica de fluidos con transferencia de calor. Si bien existe en la literatura una gran cantidad de modelos numéricos con el uso de diferentes métodos y técnicas, los cuales han ayudado a comprender algunas propiedades de las transiciones de fase tanto normales como explosivas para distintos sistemas, la gran mayoría de estos modelos se basan en cálculos con baja resolución espacial. Tal es el caso de la simulación de la evaporación de gotas líquidas donde la falta de resolución no ha solo impedido reproducir aspectos físicos observados a nivel experimental, como por ejemplo la amplificación de perturbaciones interfaciales durante el proceso de expansión

de la burbuja por nucleación previa a la vaporización explosiva [28, 70], sino también reproducir los detalles de la interfase difusa que separa el líquido del vapor cuando los efectos térmicos son importantes. Es importante mencionar que en comparación con los métodos más convencionales como, por ejemplo, los métodos de lattice Boltzmann, dinámica molecular y elementos o volúmenes finitos, se han reportado muy pocas simulaciones con el método SPH en la literatura. Si bien todas estas simulaciones se basan en un modelo de interfase difusa donde los efectos de las fuerzas capilares se modelan mediante el uso del tensor de Korteweg en las ecuaciones de balance de momento y energía, ninguna de ellas reproduce correctamente los detalles de la estructura de la interfase líquido-vapor debido a que no se toma en cuenta un término no local en la ecuación de energía interna, el cual es directamente proporcional al cambio de densidad con el tiempo y está relacionado con la tasa de evaporación en la zona interfacial. En otras palabras, durante la evaporación normal de una gota, las partículas fluidas cruzan la interfase desprendiéndose de la gota y convirtiéndose en partículas de vapor lo que implica un cambio en la densidad de esas partículas. En particular, este término es de fundamental importancia para la correcta descripción de la interfase ya que es proporcional a la difusión del calor latente en la zona interfacial debido al proceso de evaporación.

# Capítulo 4

## Objetivos

### 4.1. Objetivo general

Estudiar mediante simulaciones numéricas usando el método SPH la evaporación y vaporización explosiva de gotas líquidas de van der Waals en el marco del modelo de interface difusa.

### 4.2. Objetivos específicos

- Derivar la forma de las ecuaciones de momento y energía en la aproximación de campo medio y en el marco de trabajo del modelo termodinámico de capilaridad de van der Waals para la descripción de flujos líquido-vapor con transiciones de fase.
- Extender el código hidrodinámico DualSPHysics para la inclusión de los efectos capilares y térmicos: tensor de Korteweg y transferencia de calor.
- Calibrar el código resultante y diseñar las pruebas de validación aumentando la resolución espacial con respecto a cálculos precedentes.
- Realizar estudios de convergencia para la circularización de gotas subcríticas por efectos de tensión superficial.
- Calcular modelos de gotas circulares en equilibrio termo-mecánico con diferentes densidades y temperaturas subcríticas como condiciones iniciales para los modelos de evaporación.
- Calcular una serie de modelos de evaporación y vaporización explosiva sometiendo las gotas a calentamiento con diferentes temperaturas.
- Estudiar los diferentes regímenes de evaporación como función de la densidad y temperatura de calentamiento y clasificar los diferentes procesos en un gráfico de fracción de masa de vapor contra temperatura de calentamiento.
- Determinar el límite de supercalentamiento y compararlo con el valor teórico para un fluido de van der Waals.

# Capítulo 5

## Marco teórico

### 5.1. Modelo termodinámico de van der Waals (vdW)

El gas ideal corresponde a un modelo donde los átomos o las moléculas que lo componen se consideran partículas puntuales que interactúan con las paredes del recipiente que lo contiene y entre sí únicamente a través de colisiones perfectamente elásticas, o inclusive que no interactúan entre sí en absoluto. Es decir, si se impone un modelo de gas de partículas independientes en el marco de la Mecánica Estadística, entonces se obtiene la ecuación de estado del gas ideal como también la dependencia única de la energía interna con la temperatura absoluta, entre otros resultados compatibles con el concepto de gas ideal. En la disertación de su tesis doctoral en el año 1873, van der Waals introdujo correcciones a la ecuación de estado del gas ideal que tenían en cuenta el volumen finito de las moléculas y las fuerzas atractivas que una molécula ejercía sobre otra a distancias comparables con su tamaño, que se conocen en la literatura como fuerzas de cohesión o simplemente fuerzas de corto alcance. Estas correcciones le permitieron a van der Waals establecer una ecuación de estado capaz de reproducir cualitativamente los procesos de licuefacción (es decir, condensación) de un gas y evaporación de un líquido. En otros términos, la ecuación de estado de vdW es idónea para describir transiciones de fase líquido-vapor de primer orden. Si consideramos un mol ( $n = 1$ ) de sustancia, la ecuación de estado de vdW toma la forma

$$p = \frac{R_g T}{(v - \tilde{b})} - \frac{\tilde{a}}{v^2}, \quad (5.1)$$

donde  $R_g$  es la constante universal de los gases,  $v = V/n$  es el volumen por mol,  $\tilde{b}$  es una constante que tiene cuenta del volumen de las moléculas y la constante  $\tilde{a}$  es una medida de las fuerzas de cohesión entre las moléculas. En gases reales, la presencia de una molécula, cuyo volumen es igual a  $V_0$  impide que otras moléculas de igual volumen, penetren en su esfera de influencia. Suponiendo que  $V_0$  corresponde al volumen de una esfera rígida se tiene que  $V_0 = (4\pi/3)r_0^3$ . De esta manera, la esfera de influencia puede definirse como aquella cuya superficie puede ser alcanzada por otras moléculas que chocan, sin que los volúmenes moleculares se superpongan. El radio de esta esfera es el doble del radio de la molécula y por tanto su volumen es  $8V_0$ . La constante  $\tilde{b}$  es igual

a cuatro veces el volumen total de todas las moléculas presentes en un mol, es decir,

$$\tilde{b} = 4V_0N = \frac{16\pi}{3}r_0^3N, \quad (5.2)$$

donde  $N = nN_0$  es el número de moléculas,  $n$  es el número de moles y  $N_0$  es el número de Avogadro. Para un mol ( $n = 1$ ) se tiene  $N = N_0$ . En dos dimensiones,  $\tilde{b} = 2\pi r_0^2N$ , que corresponde a dos veces el tamaño de un disco de radio  $r_0$ . Por otro lado, la constante  $\tilde{a}$  tiene cuenta de las fuerzas cohesivas de corto alcance que actúan entre moléculas vecinas y es igual a  $N^2\tilde{\gamma}$ , donde  $\tilde{\gamma}$  representa la acción cohesiva.

Sabiendo que  $v = V/n$  y que la masa del gas es  $M = n\mu$ , donde  $\mu$  es el peso molecular, se obtiene que

$$V = \frac{M}{\rho} = \frac{n\mu}{\rho} \Rightarrow v = \frac{\mu}{\rho}.$$

Si, además, el gas está compuesto de  $N$  moléculas, entonces la masa de una molécula es  $m = M/N = \mu/N_0$ , y la ecuación (5.1) puede reescribirse como

$$p = \frac{R_g T}{\left(\frac{\mu}{\rho} - \tilde{b}\right)} - \frac{\tilde{a}}{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)^2} = \frac{\rho R_g T}{\mu \left(1 - \rho \frac{\tilde{b}}{\mu}\right)} - \frac{\tilde{a} \rho^2}{\mu^2}.$$

Haciendo uso de la relación  $R_g = N_0 k$ , donde  $k$  es la constante de Boltzmann, se obtiene la forma

$$p = \frac{\rho N_0 k T}{\mu \left(1 - \rho \frac{\tilde{b}}{\mu}\right)} - \frac{\tilde{a} \rho^2}{\mu^2}.$$

Recordando que  $\tilde{b} = 4V_0N_0$  y  $\tilde{a} = N_0^2\tilde{\gamma}$  y definiendo las relaciones  $b = 4V_0$  y  $a = \tilde{\gamma}$ , de manera que  $\tilde{b} = bN_0$  y  $\tilde{a} = aN_0^2$ , podemos reescribir la Ec. (5.1) en términos de unidades reducidas

$$p = \frac{\rho \bar{k} T}{(1 - \rho \bar{b})} - \bar{a} \rho^2, \quad (5.3)$$

donde  $\bar{k} = k/m$ ,  $\bar{b} = b/m$  y  $\bar{a} = a/m^2$ . Esta es la forma de la ecuación de estado usada por Nugent y Posch [19] y es desde entonces la forma adoptada en todas las simulaciones de transiciones de fase líquido-vapor usando el método SPH. Usando ahora la relación termodinámica para el coeficiente de expansión térmica

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p,$$

diferenciado la Ec. (5.3) y haciendo  $dp = 0$  (proceso isobárico) se llega a la expresión

$$dp = 0 = \frac{\rho \bar{k} dT}{(1 - \rho \bar{b})} + \left[ \frac{\bar{k} T}{(1 - \rho \bar{b})^2} - 2\bar{a} \rho \right] d\rho,$$

de donde se sigue finalmente que

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{\rho} \left[ \frac{\rho \bar{k} (1 - \rho \bar{b})}{\bar{k} T - 2\bar{a} \rho (1 - \rho \bar{b})^2} \right]. \quad (5.4)$$

Si  $\bar{a} = \bar{b} = 0$ , la segunda igualdad en la Ec. (5.4) se reduce a la relación  $\alpha = 1/T$ , que corresponde a la forma de la expansión térmica del gas ideal. Por otro lado, usando la relación termodinámica

$$\left( \frac{\partial u}{\partial v} \right)_T = T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v - p,$$

donde  $u$  es la energía interna, se puede demostrar que

$$\left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T = -\frac{\rho^2}{\mu} \left(\frac{\partial u}{\partial \rho}\right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho - p = \bar{a}\rho^2.$$

Igualando el segundo término con el último se tiene la relación diferencial  $du = -\bar{a}\mu d\rho$  que por integración directa conduce a la ecuación calórica

$$U = -\bar{a}\rho + \tilde{f}(T),$$

donde  $U$  es la energía interna específica  $U = u/M$  y la constante de integración es una función de  $T$ . El término  $-\bar{a}\rho$  representa la energía potencial debido a las fuerzas de cohesión entre las moléculas. A partir de la relación

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_\rho = C_v,$$

donde  $C_v$  es el calor específico a volumen constante, es evidente que  $\tilde{f}'(T) = C_v T = \bar{k}T$ . Por lo tanto, la ecuación calórica en unidades reducidas toma la forma

$$U = \bar{k}T - \rho\bar{a}. \quad (5.5)$$

Diferenciando ahora la ec. (5.3) para un proceso isocórico (es decir,  $d\rho = 0$ ), obtenemos

$$dp = \frac{\rho\bar{k}dT}{(1 - \rho\bar{b})},$$

mientras que de la diferenciación de la ec. (5.5) se deduce que

$$dU = \bar{k}dT.$$

De estas dos expresiones resulta que el coeficiente de Grüneisen,  $\Gamma$ , está dado por

$$\Gamma = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial U}\right)_\rho = \frac{1}{(1 - \rho\bar{b})}.$$

Como  $\Gamma > 0$ , debe cumplirse que  $\rho < 1/\bar{b}$ . Si se toma el producto entre el coeficiente de expansión térmica,  $\alpha$ , y el coeficiente de Grüneisen se obtiene la expresión

$$\alpha\Gamma = \frac{\bar{k}}{\bar{k}T - 2\bar{a}\rho(1 - \rho\bar{b})^2}. \quad (5.6)$$

Por otro lado, el módulo de expansión isoentrópica definido como

$$K_s = \rho \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s,$$

es también una cantidad positiva, donde  $s$  denota la entropía. Una expresión para el módulo de expansión isoentrópica puede derivarse a partir de la relación

$$dS = \frac{1}{T}dU - \frac{p}{T\rho^2}d\rho,$$

para un proceso isoentrópico ( $dS = 0$ ), donde  $S$  es la entropía por unidad de masa. Haciendo  $dS = 0$  en la relación de arriba y diferenciando las Ecs. (5.3) y (5.5) se llega a la expresión para  $K_s$

$$K_s = \rho \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = 2\rho \left[ \frac{\bar{k}T}{(1 - \rho\bar{b})^2} - \bar{a}\rho \right], \quad (5.7)$$

Por lo tanto, la condición de que  $K_s > 0$  implica que

$$\bar{k}T > \bar{a}\rho (1 - \rho\bar{b})^2. \quad (5.8)$$

Esta condición asegura que la velocidad del sonido,  $c_s$ , pertenezca al conjunto de los números reales y, por lo tanto, exista como parámetro físico, donde  $c_s^2 = K_s/\rho$  o

$$c_s = \sqrt{2 \left[ \frac{\bar{k}T}{(1 - \rho\bar{b})^2} - \bar{a}\rho \right]}. \quad (5.9)$$

Los calores específicos a volumen y presión constantes deben también ser cantidades positivas. En particular, el calor específico a volumen constante obedece la expresión

$$C_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_\rho = \bar{k}, \quad (5.10)$$

el cual es siempre positivo dado que  $\bar{k} > 0$ . El calor específico a presión constante,  $C_p$ , puede calcularse a partir de la relación

$$C_p - C_v = \left[ -\rho^2 \left( \frac{\partial U}{\partial \rho} \right)_T + p \right] \left[ \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{\rho} \right) \right]_p. \quad (5.11)$$

Luego de algunos pasos algebraicos se llega a la expresión

$$C_p = \frac{2\bar{k} [\bar{k}T - \bar{a}\rho(1 - \rho\bar{b})^2]}{\bar{k}T - 2\bar{a}\rho(1 - \rho\bar{b})^2}. \quad (5.12)$$

La condición para que la velocidad del sonido sea un número real requiere que el módulo isoentrópico  $K_s > 0$ , o equivalentemente que la condición (5.8) se cumpla. Si la condición (5.8) se cumple, entonces la positividad de  $\alpha\Gamma$  y  $C_p$  requiere además que se cumpla la condición adicional

$$\bar{k}T > 2\bar{a}\rho (1 - \rho\bar{b})^2, \quad (5.13)$$

la cual resulta ser una condición más restrictiva.

La combinación de las condiciones (5.8) y (5.13) con la positividad de los estados básicos  $\rho$ ,  $T$  y  $\Gamma$ , define completamente el dominio del espacio de fase para este modelo de van der Waals. Para la mayoría de los gases el lado derecho de la Ec. (5.4) es positivo, es decir,  $\alpha > 0$  en el rango de temperaturas ordinarias. Sin embargo, el hidrógeno  $H_2$  y los otros gases nobles son la excepción. Retornando por un momento a la Ec. (5.1), los parámetros  $\tilde{a}$  y  $\tilde{b}$  son constantes características de cada gas y se suelen obtener a partir de los valores que toman las variables termodinámicas en el punto crítico, es decir, los valores de  $v_{cr}$ ,  $p_{cr}$  y  $T_{cr}$ . El punto crítico es un punto de inflexión de la isoterma crítica,  $T_{cr}$ , en el diagrama presión-volumen y, al mismo tiempo, un punto donde la primera



derivada se anula, pese a no tratarse de un mínimo ni de un máximo local, de manera que se cumplen las relaciones

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 p}{\partial v^2}\right)_T = 0.$$

Tomado la derivada de la presión en la Ec. (5.1) una vez y dos veces con respecto al volumen específico manteniendo constante la temperatura e igualando a cero ambas expresiones, se llega a las ecuaciones algebraicas

$$\begin{aligned} R_g T - \frac{2\tilde{a}}{v^3}(v - \tilde{b})^2 &= 0, \\ R_g T - \frac{3\tilde{a}}{v^4}(v - \tilde{b})^3 &= 0, \end{aligned}$$

cuya solución define el volumen y la temperatura crítica

$$v_{\text{cr}} = 3\tilde{b}, \quad T_{\text{cr}} = \frac{8}{27} \frac{\tilde{a}}{R_g \tilde{b}}, \quad (5.14)$$

mientras la presión crítica se obtiene sustituyendo los valores de arriba en la Ec. (5.1)

$$p_{\text{cr}} = \frac{1}{27} \frac{\tilde{a}}{\tilde{b}^2}. \quad (5.15)$$

La Figura 5.1 muestra la representación de la ecuación de vdW para diferentes isothermas, es decir, para diferentes valores de la temperatura. La curva roja corresponde a la isoterma crítica donde las primeras derivadas se anulan en el punto crítico. La presión crítica y la temperatura crítica quedan definidas como la ordenada y la abscisa de ese punto, respectivamente. Repitiendo los mismos pasos para la Ec. (5.3) se puede demostrar que en términos de los parámetros reducidos el punto crítico se encuentra definido por los valores

$$\rho_{\text{cr}} = \frac{1}{3\bar{b}}, \quad p_{\text{cr}} = \frac{\bar{a}}{27\bar{b}^2}, \quad T_{\text{cr}} = \frac{8\bar{a}}{27\bar{k}\bar{b}}. \quad (5.16)$$

La condición de que la entalpía  $H = U + p/\rho$  sea constante es válida para cualquier ecuación de estado. De la relación diferencial

$$dH = TdS + \frac{1}{\rho}dp,$$

se tiene que para un proceso finito

$$\Delta H = T\Delta S + \frac{1}{\rho}\Delta p.$$

Recordando además que el cambio de entropía en términos del cambio de temperatura y presión está dado por

$$\Delta S = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p \Delta T + \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T \Delta p,$$

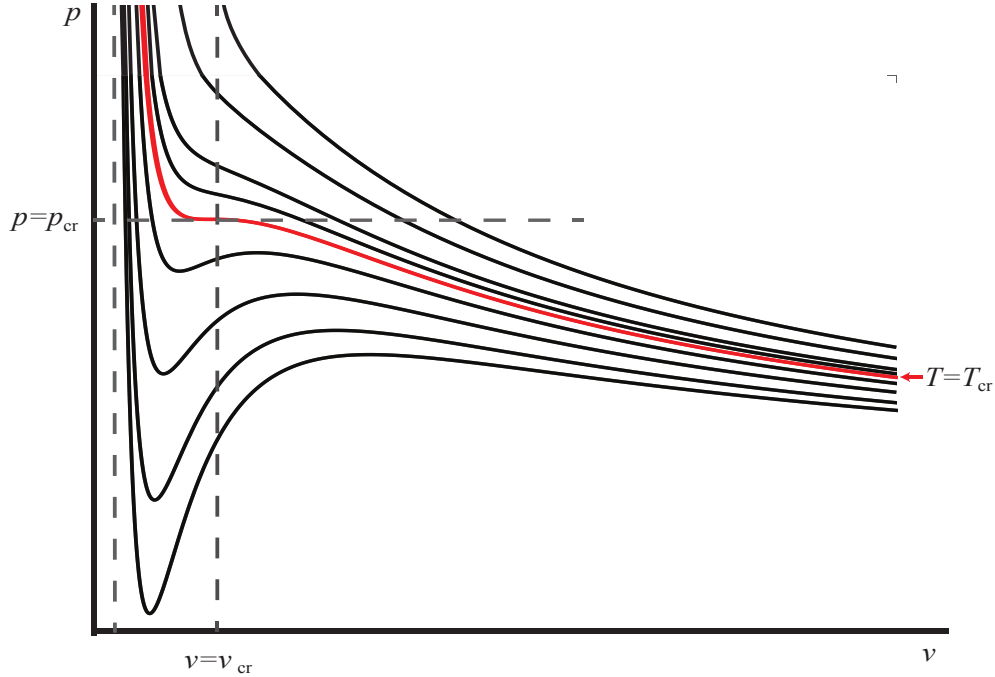


Figura 5.1: Representación de la ecuación de estado de van der Waals para diferentes valores de temperatura  $T$ . La curva roja corresponde a la temperatura crítica,  $T_{cr}$ . La presión crítica y el volumen crítico quedan definidos como la ordenada y la abscisa del punto crítico, respectivamente.

y sustituyendo en la expresión para el cambio de entalpía, se llega a

$$\Delta H = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_p \Delta T + T \left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_T \Delta p + \frac{1}{\rho} \Delta p = C_p \Delta T + \left[ T \left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_T + \frac{1}{\rho} \right] \Delta p.$$

Usando la relación termodinámica

$$\left( \frac{\partial S}{\partial p} \right)_T = \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p,$$

se tiene finalmente que el cambio de entalpía está dado por

$$\Delta H = C_p \Delta T + \Delta p \left[ \frac{1}{\rho} + \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \right] = C_p \Delta T + \frac{1}{\rho} \left[ 1 + \frac{T}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \right] \Delta p.$$

La condición de entalpía constante  $\Delta H = 0$  resulta en la expresión

$$\frac{\Delta T}{\Delta p} = -\frac{1}{C_p \rho} \left[ 1 + \frac{T}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \right],$$

que se conoce como el efecto Joule-Thomson para procesos finitos. Usando ahora la definición de  $\alpha$  en la Ec. (5.4), se puede demostrar que

$$\frac{\Delta T}{\Delta p} = \frac{T}{C_p \rho} \left( \alpha - \frac{1}{T} \right) = \frac{2\bar{a} (1 - \rho\bar{b})^2 - \bar{k}T\bar{b}}{2\bar{k} [\bar{k}T - \bar{a}\rho (1 - \rho\bar{b})^2]}, \quad (5.17)$$

donde se ha hecho también uso de la Ec. (5.12) para el calor específico a presión constante. Cuando el gas se expande  $\Delta p < 0$  y  $\Delta T < 0$  por lo que de acuerdo con la Ec. (5.17) se tiene que

$$\frac{\Delta T}{\Delta p} > 0 \Rightarrow \frac{2\bar{a}(1 - \rho\bar{b})^2 - \bar{k}T\bar{b}}{2\bar{k}[\bar{k}T - \bar{a}\rho(1 - \rho\bar{b})^2]} > 0.$$

En vista de la condición (5.8) el requerimiento anterior se reduce a exigir que se cumpla la desigualdad

$$\frac{2\bar{a}(1 - \rho\bar{b})^2}{\bar{k}T} > \bar{b}. \quad (5.18)$$

La región en el plano  $(p, T)$  en la que la expansión ( $\Delta p < 0$ ) está asociada con una disminución de la temperatura ( $\Delta T < 0$ ) corresponde a la región donde  $(\partial T/\partial p)_H > 0$ . Esta región positiva está acotada por la curva de inversión sobre la cual  $(\partial T/\partial p)_H = 0$ . De acuerdo con la Ec. (5.17) esta última se cumple cuando

$$\alpha(p, T) = \frac{1}{T}. \quad (5.19)$$

Esta ecuación define la curva de inversión que separa la región donde  $\mu = (\partial T/\partial p)_H > 0$  de la región donde  $\mu = (\partial T/\partial p)_H < 0$ . En particular, la mayoría de los gases bajo condiciones ordinarias de presión y temperatura se encuentran dentro de la curva de inversión. Si usamos la Ec. (5.4) en la Ec. (5.19), se puede demostrar que la curva de inversión para un gas de vdW está dada por

$$\frac{2\bar{a}}{\bar{k}T}(1 - \rho\bar{b})^2 = \bar{b}, \quad (5.20)$$

la cual luego de algunos pasos algebraicos simples puede reescribirse en términos de las variables reducidas  $\tilde{p} = p/p_{cr}$  and  $\tilde{T} = T/T_{cr}$  como

$$\tilde{p} = 24\sqrt{3\tilde{T}} - 12\tilde{T} - 27. \quad (5.21)$$

La Figura 5.2 muestra el gráfico de  $\tilde{p}$  en función de  $\tilde{T}$  según la Ec. (5.21) que muestra la curva de inversión para un fluido de vdW.

El rendimiento de una máquina que opera según el proceso de Joule-Thomson depende de la integral

$$T_2 - T_1 = \int_{p_1}^{p_2} \left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_H dp. \quad (5.22)$$

En aplicaciones prácticas la presión  $p_2$  después de la expansión es, en la mayoría de los casos, aproximadamente igual a la presión atmosférica, mientras que la temperatura  $T_1$  se encuentra determinada esencialmente por la elección del fluido para el pre-enfriado. Por ejemplo, para la licuefacción del aire se utiliza agua refrigerada, mientras que para la licuefacción del  $H_2$  se usa nitrógeno líquido.

En termodinámica el término “fase” se usa para denotar los diferentes estados de agregación de una sustancia única, incluyendo las diferentes formas estructurales del sólido (como, por ejemplo, las estructuras cristalinas y las estructuras amorfas). En la teoría desarrollada por van der Waals se estudia el equilibrio entre la fase gaseosa “2” y la fase líquida “1”, es decir, el equilibrio existente entre el vapor saturado de una

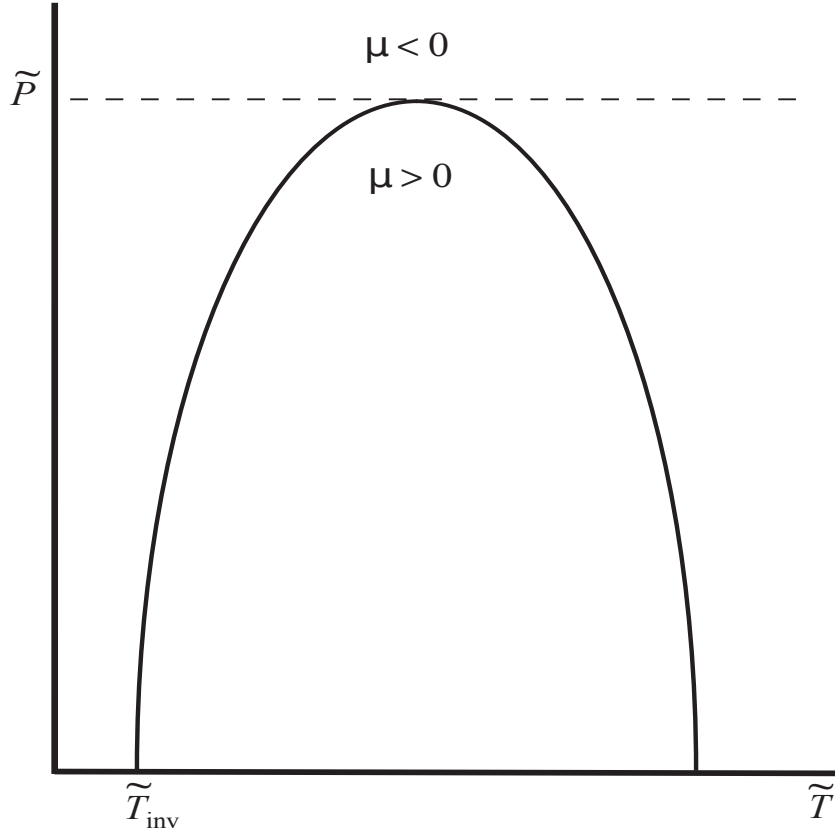


Figura 5.2: Temperatura de inversión de Joule-Thomson de acuerdo con la Ec. (5.21).

sustancia con su fase líquida. Cuando la presión entre estas dos fases es igual, decimos entonces que existe equilibrio mecánico entre ambas fases, mientras la igualdad de temperatura entre las fases define la condición de equilibrio térmico según la ley cero de la termodinámica. La entalpía libre, o energía libre de Gibbs,  $G$ , es el potencial más adecuado para usar cuando  $p$  y  $T$  permanecen constantes. En términos de la variación de la presión y temperatura, la variación de la energía libre de Gibbs está dada por la relación diferencial

$$dG = -SdT + \frac{1}{\rho}dp$$

Por lo tanto, cuando  $dT = 0$  y  $dp = 0$  (equilibrio termo-mecánico) se tiene que  $dG = 0$ , expresando la igualdad de  $G$  en ambas fases, es decir,  $G_1 = G_2$ . Si la masa de la sustancia en la fase 1 es  $m_1$  y en la fase 2 es  $m_2$ , entonces se tiene la relación de igualdad  $m_1g_1 = m_2g_2$ , donde  $g$  es la entalpía libre por unidad de masa.

Con referencia a la Figura 5.1, consideremos una isoterma para la cual  $T < T_{cr}$  e intersectémosla mediante la isóbara  $p < p_{cr}$  representada por la línea recta que une los puntos  $A$  y  $B$  en la Figura 5.3. Usando la relación

$$G = U - TS + \frac{p}{\rho},$$

la igualdad  $G_A = G_B$  conduce a la expresión

$$U_B - U_A - T(S_B - S_A) + p \left( \frac{1}{\rho_B} - \frac{1}{\rho_A} \right) = 0. \quad (5.23)$$

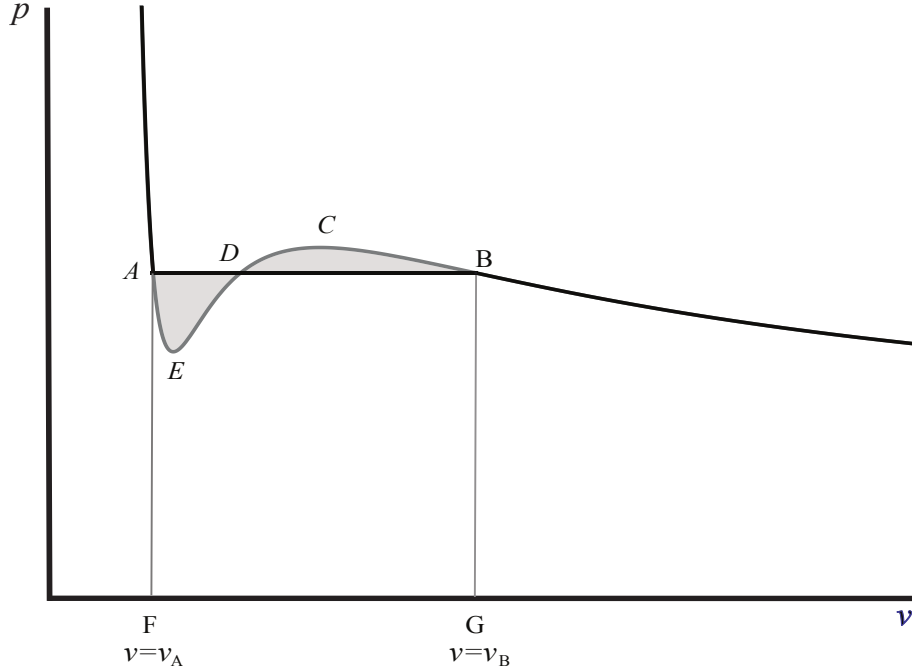


Figura 5.3: Isoterma subcrítica de van der Waals donde se muestra la construcción de Maxwell de la curva binodal.

La diferencia de entropía puede también calcularse a partir de la relación diferencial

$$dS = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial U}{\partial T} dT + \frac{\partial U}{\partial \rho} d\rho \right) - \frac{1}{T} \frac{p}{\rho^2} d\rho.$$

Usando ahora la ecuación calórica (5.5), el cambio diferencial de entropía puede finalmente escribirse en unidades reducidas como

$$dS = \bar{k} \left[ \frac{dT}{T} - \frac{1}{(1 - \rho\bar{b})} \frac{d\rho}{\rho} \right]. \quad (5.24)$$

Integrando entre  $A$  y  $B$ , se llega a la expresión para la diferencia de entropía entre los puntos  $A$  y  $B$

$$S_B - S_A = \bar{k} \ln \frac{T_B}{T_A} + \bar{k} \ln \left[ \frac{\rho_A (1 - \rho_B \bar{b})}{\rho_B (1 - \rho_A \bar{b})} \right]. \quad (5.25)$$

Tomando en cuenta la igualdad de  $T$  en ambos puntos de la intersección  $A$  y  $B$ , la Ec. (5.25) se reduce a

$$S_B - S_A = \bar{k} \ln \left[ \frac{\rho_A (1 - \rho_B \bar{b})}{\rho_B (1 - \rho_A \bar{b})} \right]. \quad (5.26)$$

A partir de la relación diferencial

$$dU = \left( \frac{\partial U}{\partial \rho} \right)_T d\rho + \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_S dT,$$

podemos ahora calcular la diferencia de energía interna a lo largo de la isóbara entre los puntos  $A$  y  $B$ . Integrando se llega directamente a la forma

$$\bar{a} (\rho_B - \rho_A) + \bar{k} T \ln \left[ \frac{\rho_A (1 - \rho_B \bar{b})}{\rho_B (1 - \rho_A \bar{b})} \right] + p \frac{(\rho_B - \rho_A)}{\rho_B \rho_A} = 0, \quad (5.27)$$

donde se ha hecho uso de las relaciones (5.5) y (5.26). Nótese que la Eq. (5.27) es equivalente a la Eq. (5.23) que se había deducido a partir de la igualdad de la energía libre de Gibbs en ambas fases. Integrando ahora la ecuación de estado de vdW (5.1) se puede demostrar que

$$\int_A^B p d\left(\frac{1}{\rho}\right) = \bar{a}(\rho_B - \rho_A) + \bar{k}T \ln \left[ \frac{\rho_A(1 - \rho_B \bar{b})}{\rho_B(1 - \rho_A \bar{b})} \right].$$

Combinando esta ecuación con la Ec. (5.27) se llega a la importante relación

$$\int_A^B \frac{p}{\rho^2} d\rho = p \frac{(\rho_B - \rho_A)}{\rho_B \rho_A},$$

la cual en términos del volumen por mol puede escribirse en la forma equivalente

$$\int_A^B p dv = p(v_B - v_A). \quad (5.28)$$

Geoméricamente el término  $p(v_B - v_A)$  representa el área del rectángulo  $ABFG$  en la Figura 5.3. De acuerdo con la Ec. (5.27), su área es igual a la comprendida entre la isoterma y el eje de las abscisas. Por lo tanto, las dos regiones sombreadas, delimitadas por las curvas  $AED$  y  $DCB$ , en la figura deben poseer áreas iguales. Esta regla proporciona un método gráfico para determinar los puntos  $A$  y  $B$  para el equilibrio de fase. La línea  $AB$  se conoce como la línea de Maxwell. Implementando la misma construcción anterior para cada isoterma que se encuentre debajo del punto crítico,  $T = T_{cr}$ , se obtiene la curva que encierra esa región en el plano  $(p, v)$  sobre la cual las dos fases, líquida y gaseosa, coexisten en equilibrio. Dicha curva recibe el nombre de curva binodal o curva de coexistencia. La Figura 5.4 muestra la forma de la curva en el diagrama  $(p, v)$ . A la derecha esta línea solo puede existir el gas o el vapor, mientras que al lado izquierdo solo puede existir la fase líquida. El vértice de la curva, donde se encuentran ambas ramas, coincide con el punto crítico  $v_{cr}, p_{cr}$ . El lugar geométrico de los puntos  $A$  define la llamada línea de agua (o líquido), mientras que el de los puntos  $B$  es la línea de vapor (o gas). Procediendo de la fase gaseosa encontramos que las primeras gotas de líquido aparecen en la línea de vapor. De manera similar, procediendo de la fase líquida las primeras burbujas de vapor aparecen al cruzar la línea líquida. Retornando a la Figura 5.3, los puntos a lo largo de la línea de Maxwell son puntos de volumen variable pero de igual presión  $p$  y temperatura  $T$ . La variación de volumen se produce por las distintas proporciones de las fases líquida y gaseosa presentes. Por ejemplo, en el punto  $B$  tenemos vapor puro saturado de volumen molar  $v_B$ , mientras que en el punto  $A$  se tiene líquido puro de volumen molar  $v_A$ . Tanto la sobresaturación como el subenfriamiento denotan estados de equilibrio inestables, es decir, no corresponden a estados de verdadero equilibrio como los correspondientes a los puntos en ambos extremos de la línea de Maxwell. En condiciones favorables es posible obtener vapor sobresaturado cuando a temperatura constante la presión asume un valor mayor que el valor en el punto  $B$  sobre la línea de vapor. De manera similar, el estado líquido se puede mantener a una temperatura  $T$ , cuyo valor puede exceder ligeramente el punto de ebullición si se calienta en un recipiente libre de vibraciones. A una temperatura igual a la del punto  $A$  la presión disminuye. Debe observarse, sin embargo, que las extensiones inestables sobre las líneas de frontera son muy pequeñas

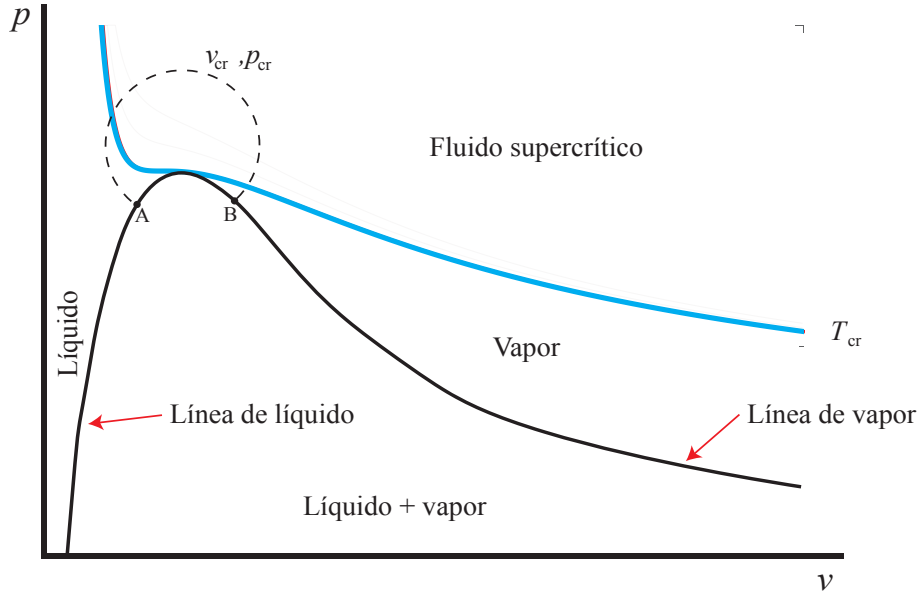


Figura 5.4: Curva binodal en el plano  $(p, v)$  (línea negra). La curva azul corresponde a la isoterma crítica.

y los estados entre los puntos  $E$  y  $C$  no pueden alcanzarse ya que corresponden a un aumento isotérmico de la presión tras la expansión.

A temperaturas por encima del valor crítico, es decir a  $T > T_{cr}$  es imposible licuar un gas. Para licuar un gas no es suficiente bajar la temperatura por debajo del valor de inversión,  $T < T_i$ . De las Ecs. (5.16) y (5.20) se puede demostrar que

$$T_i = \frac{2\bar{a}}{\bar{k}\bar{b}} (1 - \rho\bar{b})^2, \quad (5.29)$$

o

$$\frac{T_i}{T_{cr}} = \frac{27}{4} (1 - \rho\bar{b})^2. \quad (5.30)$$

Esta última relación muestra que la temperatura de inversión,  $T_i$ , es alrededor de siete veces mayor que la temperatura crítica  $T_{cr}$ . Sin embargo, es posible licuar un gas mediante una sucesión de expansiones de Joule-Thomson, alcanzando así primero el rango de licuefacción parcial y luego la licuefacción total, siempre que  $T < T_i$ . Además, es posible alcanzar la región líquida en la esquina inferior izquierda del diagrama directamente desde el estado gaseoso en la región inferior derecha sin cruzar la región sombreada de dos fases siguiendo un camino que atraviese la región por encima del punto crítico, como se muestra por la curva segmentada en la Figura 5.4. De acuerdo con la ecuación de estado de vdW los estados a lo largo de dicho camino forman un continuo de estados de equilibrio estable. No existe discontinuidad alguna ni siquiera al cruzar la isoterma crítica,  $T = T_{cr}$ , ni en su rama inferior donde  $p < p_{cr}$  ni en su rama superior para la cual  $p > p_{cr}$ . De esta manera, se puede ir del extremo,  $B$ , de la línea de Maxwell al otro extremo  $A$  a lo largo del camino segmentado.

## 5.2. Ecuaciones básicas

El modelado en mecánica de fluidos se basa en suponer que el medio es un continuo y que las variables físicas que describen el fluido son a su vez campos continuos. Por

ejemplo, para un fluido monofásico estas variables son la densidad  $\rho$ , la velocidad  $\mathbf{v}$ , la presión  $p$ , la temperatura  $T$ , la energía interna específica  $U$  y la entropía específica  $S$ . Las ecuaciones que describen localmente el movimiento del fluido en términos de esas variables se obtienen aplicando los principios de conservación de la masa, del momento, de la energía y de la entropía. En forma general estas ecuaciones se pueden escribir en coordenadas Lagrangianas como:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (5.31)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbb{T}, \quad (5.32)$$

$$\frac{dU}{dt} = \frac{1}{\rho} \mathbb{T} : \nabla \mathbf{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q}, \quad (5.33)$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{\rho} \Delta_s - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right), \quad (5.34)$$

donde  $\mathbb{T}$  es el tensor de esfuerzos definido como

$$\mathbb{T} = -p\mathbb{I} + \eta (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^t) + \left( \zeta - \frac{2}{d}\eta \right) \nabla \cdot \mathbf{v}\mathbb{I}, \quad (5.35)$$

$\eta$  es el coeficiente de viscosidad dinámica,  $\zeta$  es la segunda viscosidad,  $d$  es un factor igual a 2 en dos dimensiones e igual a 3 en tres dimensiones, el sobreíndice  $t$  indica transposición,  $\mathbb{I}$  es el tensor identidad (o unitario),  $\mathbf{q}$  es el flujo de calor dado por

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T, \quad (5.36)$$

$\kappa$  es el coeficiente de conducción térmica y  $\Delta_s$  es la generación de entropía definida como

$$\Delta_s = \frac{\kappa (\nabla T)^2}{T^2} + \frac{\eta}{T} (\nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v}). \quad (5.37)$$

Las ecuaciones (5.31)-(5.37) describen el comportamiento de un fluido Newtoniano donde la transferencia de calor se encuentra gobernada por la ley de Fourier. Es posible también formular una ecuación diferencial para la energía total

$$E = U + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \quad (5.38)$$

que en coordenadas Lagrangianas toma la forma

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \mathbb{T}) - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q}, \quad (5.39)$$

donde el primer término en el lado derecho de la ecuación puede expandirse como

$$\nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \mathbb{T}) = \mathbf{v} \cdot \nabla \cdot \mathbb{T} + \mathbb{T} : \nabla \mathbf{v} \quad (5.40)$$

donde haciendo uso de la Ecuación (5.35)

$$\mathbb{T} : \nabla \mathbf{v} = -p \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} \eta (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^t) : (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^t) + \left( \zeta - \frac{2}{d} \right) (\nabla \cdot \mathbf{v})^2. \quad (5.41)$$



Para cerrar el sistema de ecuaciones (5.31)-(5.34) es necesario especificar relaciones constitutivas para la presión y energía interna. Dichas ecuaciones constitutivas estarán dadas por la ecuación de estado (5.3) y la ecuación calórica (5.5) de van der Waals. Dado que mediante estas ecuaciones de estado el comportamiento termodinámico del fluido queda completamente descrito por la expresión  $U = U(S, \rho)$  para la energía interna y dado que la primera ley de la termodinámica en la forma

$$dU = TdS + \frac{p}{\rho^2}d\rho, \quad (5.42)$$

define la ecuación de estado  $p = p(\rho, T)$ , al quedar cerrado el sistema de ecuaciones (5.31)-(5.34), las ecuaciones (5.33) y (5.34) se convierten en equivalentes y, por lo tanto, una de ellas no será necesaria. Sin embargo, además de la ecuación de energía interna se considerará la solución de la ecuación de entropía con la finalidad de probar en qué medida las simulaciones numéricas satisfacen la segunda ley de la termodinámica. Con este fin, haciendo uso de las relaciones (5.36) y (5.37), y notando además que

$$\frac{\kappa}{T^2} (\nabla T)^2 + \nabla \cdot \left( \frac{\kappa}{T} \nabla T \right) = \frac{1}{T} \nabla \cdot (\kappa \nabla T),$$

la ecuación (5.34) puede reescribirse más convenientemente en la forma

$$\rho \frac{dS}{dt} = \frac{1}{T} \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \frac{\eta}{T} (\nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v}), \quad (5.43)$$

donde el primer término del lado derecho está asociado a la generación de entropía debido a procesos de conducción térmica, mientras el segundo término describe la generación de entropía debido a la disipación viscosa. De esta manera para el presente modelo, la tasa de cambio temporal de la entropía dependerá de estos dos procesos irreversibles.

### 5.3. Modelo de interface difusa

En los modelos clásicos de sistemas de dos fluidos la interface que divide ambos fluidos se toma como una superficie infinitamente delgada dotada de tensión superficial. Dicha superficie actúa para todos los efectos como una superficie de discontinuidad de manera tal que las ecuaciones de movimiento para los dos fluidos deben resolverse separadamente y la interface la cual debe rastrearse explícitamente se toma en cuenta aplicando condiciones de contorno apropiadas. A escalas moleculares, una interface puede definirse como una zona de transición cuyo espesor típico es de unas decenas de Angströms. Contrariamente en un modelo de interface difusa, la región interfacial estará representada por una variación continua de un parámetro de orden tal como, por ejemplo, la densidad, donde la variación del parámetro de orden se define consistentemente con las teorías microscópicas de interfaces [2]. Estas variaciones de densidad dan lugar a una interface con un espesor finito y una estructura interna, la cual conecta de manera continua los valores de densidad de ambos fluidos. Por lo tanto, a través de la interface las cantidades físicas estarán definidas en términos de las variaciones de densidad en esa región y, en contraste con una superficie de discontinuidad donde las cantidades estarían distribuidas sobre una superficie bidimensional, las cantidades físicas estarán distribuidas en el volumen de la

interface, la cual luce como una capa tridimensional. De esta manera, las ecuaciones de movimiento deberán modificarse para tener cuenta de la presencia de la interface difusa.

El modelo de interface difusa ha sido usado con éxito en el modelado de procesos de solidificación y transiciones de fase [71, 72, 73]. Si bien estos estudios se han enfocado en modelar mecanismos de difusión solamente, estudios posteriores han aplicado la teoría de interface difusas a la descripción de fenómenos hidrodinámicos más complejos. Por ejemplo, Antanovskii [74] desarrolló modelos de fluidos binarios con transferencia de calor y de especies, usando la composición como parámetro de orden. Modelos similares fueron presentados posteriormente por Gurtin et al. [75] para describir el movimiento de un fluido binario isotérmico. Por otro lado, Jasnow y Viñals [39] estudiaron procesos de migración de gotas por efectos termocapilares como también procesos de coalescencia de gotas y descomposición espinodal haciendo uso de un modelo de interface difusa. Estos autores también presentaron una derivación del modelo usando un formalismo Hamiltoniano. Simulaciones más recientes basadas en modelos de interface difusa han sido reportadas por Pütz and Nielaba [18], Sigalotti et al. [22, 23], Xiong et al. [24] y Zhang et al. [25], entre otros, para el estudio de transiciones de fase líquido-vapor, es decir, descomposición espinodal, nucleación homogénea y nucleación heterogénea tanto en dominios de extensión infinita como en sistemas confinados por superficies libres.

Una situación particular donde la teoría de interface difusa surge naturalmente es en la descripción de un fluido cerca de su punto crítico. Por ejemplo, a temperaturas por debajo del punto crítico, dos fases distintas, separadas por una interface, pueden coexistir en equilibrio. Sin embargo, a temperaturas por encima del valor crítico, solo una fase estará presente y la interface cesará de existir. Cuando se alcanza la temperatura crítica por debajo, la interface se hace infinitamente difusa y los efectos de tensión superficial desaparecen. En el contexto de fenómenos críticos existen en la literatura algunos trabajos enfocados en el estudio de la dinámica de interfaces difusas. En particular, Felderhof [76] derivó las ecuaciones que gobiernan la dinámica de interfaces difusas cerca del punto crítico para sustancias puras usando un formalismo Lagrangiano. Empleando un modelo hidrodinámico similar, Langer y Turski [77] describieron la condensación de un vapor cerca de su punto crítico usando una aproximación de grano grueso (coarse-grained). Técnicas basadas en renormalización de grupos se han implementado también en modelos de interface difusa con la finalidad de estudiar transiciones de fase en fluidos binarios como también la dinámica de sustancias puras cerca de sus puntos críticos [78, 79, 80, 81].

### 5.3.1. Aproximación de campo medio

En este apartado se describe el modelo termodinámico a usar que consiste en el modelo de capilaridad de van der Waals para flujos líquido-vapor con cambios de fase. En particular, el modelo es en efecto un modelo de interface difusa para la descripción de la interface que separa un líquido de su fase de vapor para una sustancia pura. En este modelo la interface se caracteriza principalmente por una estructura en equilibrio. Sin embargo, la estructura interna de una interface líquido-vapor en equilibrio no puede describirse en términos de la termodinámica clásica, donde por clásico se entiende que la energía de una partícula (o elemento) de fluido depende solamente de variables locales, tales como la densidad y la temperatura. Por el contrario, consistencia física en la descripción de la interface requiere el uso de términos no locales. En el caso de una

interface líquido-vapor, van der Waals introdujo la siguiente descripción termodinámica

$$F = F(\rho, T, \nabla\rho) = F^0(\rho, T) + \frac{\lambda}{2} (\nabla\rho)^2, \quad (5.44)$$

donde  $F$  es la energía libre del fluido por unidad de volumen,  $F^0$  define la parte clásica de la energía libre y  $\lambda$  es el coeficiente de capilaridad. El valor de  $\lambda$  depende solamente del potencial intermolecular y a lo largo de esta discusión, por simplicidad, se considerará como una constante.

El diferencial de  $F$  está dado por

$$dF = -\bar{S}dT + Gd\rho + \vec{\phi} \cdot d(\nabla\rho), \quad (5.45)$$

donde  $\bar{S}$  es la entropía,  $G$  es la entalpía (o energía) libre de Gibbs y  $\vec{\phi}$  es un vector a definirse más adelante. La segunda ley de la termodinámica establece que la entropía de un sistema cerrado y aislado en equilibrio se maximiza. Por lo tanto, cualquier cambio adicional de entropía será siempre igual a cero, lo cual puede expresarse matemáticamente como la variación de la integral

$$\delta \int_V [\bar{S} + \mathcal{L}_1 \bar{U}(S, \rho, \nabla\rho) + \mathcal{L}_2 \rho] dV = 0, \quad (5.46)$$

donde  $V$  es el volumen del dominio del fluido,  $\bar{U}$  es la energía interna, y  $\mathcal{L}_1$  y  $\mathcal{L}_2$  son multiplicadores de Lagrange que representan las constantes de conservación de la energía y de la masa, respectivamente. Usando la relación

$$\bar{U} = F + \bar{S}T, \quad (5.47)$$

y la expresión para la variación de  $F$ , usando el diferencial de  $F$  dado por la Ecuación (5.45),

$$\delta F = -\bar{S}\delta T + G\delta\rho + \vec{\phi} \cdot \delta(\nabla\rho),$$

en la Ecuación (5.46) se llega a la integral

$$\int_V \left[ (1 + \mathcal{L}_1 T) \delta\bar{S} + (\mathcal{L}_1 G + \mathcal{L}_2) \delta\rho + \mathcal{L}_1 \vec{\phi} \cdot \delta(\nabla\rho) \right] dV = 0. \quad (5.48)$$

Escribiendo el último término del integrando en la Ecuación (5.48) en la forma

$$\vec{\phi} \cdot \delta(\nabla\rho) = \vec{\phi} \cdot \nabla(\delta\rho) = \nabla \cdot (\vec{\phi}\delta\rho) - (\nabla \cdot \vec{\phi})\delta\rho, \quad (5.49)$$

la Ecuación (5.48) puede reescribirse como

$$\int_V \left[ (1 + \mathcal{L}_1 T) \delta\bar{S} + (\mathcal{L}_1 G - \mathcal{L}_1 \nabla \cdot \vec{\phi} + \mathcal{L}_2) \delta\rho \right] dV + \int_V \mathcal{L}_1 \nabla \cdot (\vec{\phi}\delta\rho) dV = 0. \quad (5.50)$$

Empleando el teorema de la divergencia se obtiene

$$\int_V \mathcal{L}_1 \nabla \cdot (\vec{\phi}\delta\rho) dV = \mathcal{L}_1 \oint_{\partial V} (\vec{\phi}\delta\rho) \cdot d\mathbf{S} = \mathcal{L}_1 \oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot \vec{\phi}\delta\rho dS, \quad (5.51)$$

donde  $\partial V$  es la frontera del dominio y  $\mathbf{n}$  es el vector unitario normal a la superficie  $S$  que encierra al volumen del dominio. Asumiendo que  $\mathbf{n} \cdot \vec{\phi} = 0$  sobre  $\partial V$ , se tiene que

$$\mathcal{L}_1 \oint_{\partial V} \mathbf{n} \cdot \vec{\phi}\delta\rho dS = 0, \quad (5.52)$$

y, por lo tanto, la Ecuación (5.50) se reduce a

$$\int_V \left[ (1 + \mathcal{L}_1 T) \delta \bar{S} + (\mathcal{L}_1 G - \mathcal{L}_1 \nabla \cdot \vec{\phi} + \mathcal{L}_2) \delta \rho \right] dV = 0. \quad (5.53)$$

Dado que esta integral debe satisfacerse para toda variación  $\delta \bar{S}$  y  $\delta \rho$  se encuentra que

$$1 + \mathcal{L}_1 T = 0 \quad \Rightarrow \quad T = -\frac{1}{\mathcal{L}_1},$$

y

$$\mathcal{L}_1 G - \mathcal{L}_1 \nabla \cdot \vec{\phi} + \mathcal{L}_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad G - \nabla \cdot \vec{\phi} = \text{constant}.$$

Dado que  $\mathcal{L}_1$  y  $\mathcal{L}_2$  son constantes, estas relaciones definen las condiciones de equilibrio

$$T = \text{constant}, \quad (5.54)$$

$$G - \nabla \cdot \vec{\phi} = \text{constant}. \quad (5.55)$$

La primera condición implica que la temperatura del sistema debe ser uniforme en equilibrio (condición de equilibrio térmico), mientras la segunda condición indica que la entalpía libre de Gibbs generalizada

$$\hat{G} = G - \nabla \cdot \vec{\phi} = \text{constant}, \quad (5.56)$$

debe ser también uniforme en equilibrio. Estas condiciones de equilibrio son válidas en todo el sistema bifásico, excepto en la interface donde lo son solo en promedio.

### 5.3.2. Estructura interna de la interface

Comencemos por considerar la expresión (5.44) para la energía libre del fluido. En este caso realizando la sustitución

$$\vec{\phi} \cdot d(\nabla \rho) = \nabla \cdot (\vec{\phi} d\rho) - (\nabla \cdot \vec{\phi}) d\rho,$$

en el diferencial de  $F$  dado por la Ecuación (5.45) y diferenciando el resultado con respecto a  $\rho$ , se llega a la condición de equilibrio (5.56)

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} = G - \nabla \cdot \vec{\phi} = \text{constant}. \quad (5.57)$$

Por otro lado, dado que en equilibrio  $G \rightarrow G^0$  donde

$$G^0 \equiv \frac{\partial F^0}{\partial \rho}, \quad (5.58)$$

se tiene

$$\frac{\partial F^0}{\partial \rho} - \nabla \cdot \vec{\phi} = \text{constant}. \quad (5.59)$$

Diferenciando ahora la relación (5.44) con respecto a  $\rho$  se puede demostrar que

$$\frac{\partial F^0}{\partial \rho} - \lambda \nabla^2 \rho = \text{constant}, \quad (5.60)$$

que comparando con la Ecuación (5.59) conduce a la definición del vector  $\vec{\phi}$

$$\vec{\phi} = \lambda \nabla \rho. \quad (5.61)$$

En la Ecuación (5.60)  $F^0 = F^0(\rho, T_0)$ , donde  $T_0$  es una temperatura constante que corresponde a la temperatura de equilibrio del sistema. La Ecuación (5.60) es una ecuación diferencial que el campo de densidad debe satisfacer en el equilibrio.

### 5.3.3. Exceso de energía en la interface

Como ejemplo ilustrativo del significado físico de la Ecuación (5.60), en el Apéndice A se resuelve dicha ecuación para el caso de una interface plana en equilibrio, donde se demuestra que en condiciones de equilibrio lejos de la interface se cumplen las condiciones

$$F^0(\rho_l) - G_{\text{eq}}\rho_l = F^0(\rho_v) - G_{\text{eq}}\rho_v, \quad (5.62)$$

$$p^0(\rho_l) = p^0(\rho_v), \quad (5.63)$$

donde la presión en equilibrio,  $p^0 = p^0(\rho, T_0)$  está dada por  $p^0 = \rho G^0 - F^0$ . En las ecuaciones (5.62) y (5.63) los subíndices “l” y “v” se refieren, respectivamente, a la fase líquida y a la fase de vapor, mientras que  $G_{\text{eq}}$  es el valor de la entalpía libre de Gibbs en equilibrio.

En esta sección procederemos a determinar la energía concentrada en la interface. Para ello consideremos por simplicidad la interface plana del Apéndice A, donde  $z$  es la coordenada normal a la interface. En el lado de la interface correspondiente a la fase de vapor, el exceso de energía es

$$F(\rho, \nabla\rho) - F^0(\rho_v) + G_{\text{eq}}\rho_v,$$

mientras que en el lado de la fase líquida, el exceso de energía está dado por

$$F^0(\rho_l) - G_{\text{eq}}\rho_l - F(\rho, \nabla\rho),$$

de manera que

$$\frac{d\mathcal{E}_{\text{ex}}}{dz} = F(\rho, \nabla\rho) - F^0(\rho_v) + G_{\text{eq}}\rho_v|^- + F^0(\rho_l) - G_{\text{eq}}\rho_l - F(\rho, \nabla\rho)|^+, \quad (5.64)$$

donde  $\mathcal{E}_{\text{ex}}$  es la energía concentrada en la interface. Sustrayendo  $G_{\text{eq}}\rho$  del primer término a la derecha de la Ecuación (5.64), sumándolo al segundo, e integrando se tiene

$$\mathcal{E}_{\text{ex}} = \int_{-\infty}^{z_i} [F(\rho, \nabla\rho) - F^0(\rho_v)] dz + \int_{z_i}^{+\infty} [F^0(\rho_l) - F(\rho, \nabla\rho)] dz - G_{\text{eq}}\rho^{\text{ex}}, \quad (5.65)$$

donde  $z_i$  denota una posición cualquiera y

$$\rho^{\text{ex}} = \int_{-\infty}^{z_i} (\rho - \rho_v) dz + \int_{z_i}^{+\infty} (\rho_l - \rho) dz. \quad (5.66)$$

Observando que  $\nabla\rho \rightarrow 0$  y que  $F(\rho, \nabla\rho) \rightarrow F^0(\rho)$  en las fases continuas, y usando la relación (A.4) del Apéndice A se puede demostrar que la Ecuación (5.65), con la Ecuación (5.66), toma la forma

$$\mathcal{E}_{\text{ex}} = \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\partial\rho}{\partial z} \right)^2 dz = \lambda \int_{\rho_v}^{\rho_l} \left( \frac{\partial\rho}{\partial z} \right) d\rho \rightarrow \sigma, \quad (5.67)$$

donde  $\sigma$  es la tensión superficial.

### 5.3.4. Ecuaciones de movimiento modificadas

El modelo termodinámico de vdW en donde la energía del fluido no depende solo de términos locales como la temperatura,  $T$ , y la densidad,  $\rho$ , sino también del gradiente de la densidad,  $\nabla\rho$ , permite describir la estructura interna de la interface líquido-vapor e interpretar el exceso de energía en la interface como la tensión superficial. Como resultado de esto, el comportamiento termodinámico del fluido deja de ser clásico y, como consecuencia de la dependencia de la energía con  $\nabla\rho$ , las ecuaciones clásicas de movimiento (5.31)-(5.34) deberán modificarse.

Los detalles de la derivación de las ecuaciones modificadas se encuentran en el Apéndice B. En términos del vector  $\vec{\phi}$ , las nuevas ecuaciones que deberán reemplazar a las ecuaciones (5.31)-(5.34) son:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho\nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (5.68)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \mathbb{T} + \nabla(\rho\nabla \cdot \vec{\phi}) - \nabla \cdot (\vec{\phi}\nabla\rho), \quad (5.69)$$

$$\rho \frac{dU}{dt} = \mathbb{T} : \nabla\mathbf{v} + (\rho\mathbf{v} \cdot \vec{\phi}\mathbb{I} - \vec{\phi}\nabla\rho) : \nabla\mathbf{v} + \nabla \cdot (\kappa\nabla T) + \nabla \cdot \left( \vec{\phi} \frac{d\rho}{dt} \right), \quad (5.70)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{dS}{dt} &= \frac{1}{T} \left[ \mathbb{T} + (p - \rho\nabla \cdot \vec{\phi})\mathbb{I} + \vec{\phi}\nabla\rho \right] : \nabla\mathbf{v} \\ &- \nabla \cdot \left[ \frac{1}{T} \left( \mathbf{q} + \vec{\phi} \frac{d\rho}{dt} \right) \right] - \frac{1}{T^2} \left( \mathbf{q} + \vec{\phi} \frac{d\rho}{dt} \right) \cdot \nabla T. \end{aligned} \quad (5.71)$$

El lado derecho de la Ecuación (5.71) es la generación de entropía. Según la segunda ley de la termodinámica este término debe ser mayor o igual a cero para todo movimiento posible. Esta condición se cumple solo y solo si las siguientes relaciones de clausura se satisfacen

$$\mathbf{q} + \vec{\phi} \frac{d\rho}{dt} = -\kappa\nabla T \quad \Rightarrow \quad \mathbf{q} = -\kappa\nabla T - \vec{\phi} \frac{d\rho}{dt}, \quad (5.72)$$

y

$$\mathbb{T} + (p - \rho\nabla \cdot \vec{\phi})\mathbb{I} + \vec{\phi}\nabla\rho = \mathbb{S} \quad \Rightarrow \quad \mathbb{T} = (-p + \rho\nabla \cdot \vec{\phi})\mathbb{I} - \vec{\phi}\nabla\rho + \mathbb{S}, \quad (5.73)$$

donde  $\mathbb{S}$  es el tensor de esfuerzos viscosos definido como

$$\mathbb{S} = \mathbb{T} + p\mathbb{I}. \quad (5.74)$$

Nótese que en las relaciones (5.72) y (5.73)  $\kappa > 0$  y  $\mathbb{S}$  debe satisfacer la condición  $\mathbb{S} : \nabla\mathbf{v} \geq 0$ , respectivamente. Haciendo uso de la definición de  $\vec{\phi}$  dada por la Ecuación (5.61) y de las relaciones (5.72)-(5.74) se puede demostrar luego de algunos pasos algebraicos que las ecuaciones diferenciales (5.68)-(5.71) toman la forma

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho\nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (5.75)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \mathbb{T} + \nabla \left( \lambda\rho\nabla^2\rho + \frac{\lambda}{2}\nabla\rho \cdot \nabla\rho \right) - \nabla \cdot (\lambda\nabla\rho\nabla\rho), \quad (5.76)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{dU}{dt} &= \mathbb{T} : \nabla\mathbf{v} + \left[ \frac{\lambda}{2} \left( \rho\nabla^2\rho + \frac{1}{2}\nabla^2\rho^2 \right) \mathbb{I} - \lambda\nabla\rho\nabla\rho \right] : \nabla\mathbf{v} \\ &+ \nabla \cdot (\kappa\nabla T) + \nabla \cdot \left( \lambda\nabla\rho \frac{d\rho}{dt} \right), \end{aligned} \quad (5.77)$$

$$\rho \frac{dS}{dt} = \frac{1}{T}\mathbb{S} : \nabla\mathbf{v} + \frac{1}{T}\nabla \cdot (\kappa\nabla T), \quad (5.78)$$

donde el tensor  $\lambda \nabla \rho \nabla \rho$  es el tensor de Korteweg que define la fuerza de tensión superficial tangencial a la interface y la presión  $p$  en la definición del tensor  $\mathbb{T}$  es la presión clásica  $p = p(\rho, T)$  definida por la ecuación de estado.

Para efectos de la discretización con el método SPH los términos no clásicos que aparecen en el lado derecho de las Ecuaciones (5.76) y (5.77) se escribirán en una forma más compacta. Nótese que el segundo y tercer término en el lado derecho de la Ecuación (5.76) pueden combinarse para producir el término

$$\nabla \cdot \left[ \lambda \left( \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \nabla \rho \cdot \nabla \rho \right) \mathbb{I} - \lambda \nabla \rho \nabla \rho \right]. \quad (5.79)$$

Usando la identidad vectorial  $\nabla \cdot (f \mathbf{A}) = \nabla f \cdot \mathbf{A} + f \nabla \cdot \mathbf{A}$  con  $f \rightarrow \rho$  y  $\mathbf{A} \rightarrow \nabla \rho$  se encuentra que

$$\nabla \cdot (\rho \nabla \rho) = \nabla \rho \cdot \nabla \rho + \rho \nabla^2 \rho = \rho \nabla^2 \rho + |\nabla \rho|^2, \quad (5.80)$$

de manera que

$$|\nabla \rho|^2 = \nabla \cdot (\rho \nabla \rho) - \rho \nabla^2 \rho. \quad (5.81)$$

Usando esta expresión es fácil demostrar que

$$\rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \nabla \rho \cdot \nabla \rho = \frac{1}{2} \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{4} \nabla^2 \rho^2. \quad (5.82)$$

Sustituyendo la relación (5.82) en (5.79) se llega a la misma expresión entre paréntesis cuadrados en el segundo término del lado derecho de la Ecuación (5.77). En lo que sigue, se define este término como un tensor de la forma

$$\mathbb{K} = \frac{\lambda}{2} \left( \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \nabla^2 \rho^2 \right) \mathbb{I} - \lambda \nabla \rho \nabla \rho. \quad (5.83)$$

Frecuentemente en la literatura se le llama al tensor  $\mathbb{K}$  tensor de Korteweg y se denota el coeficiente de capilaridad  $\lambda$  con la letra  $K$  tal que

$$\mathbb{K} = \frac{K}{2} \left( \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \nabla^2 \rho^2 \right) \mathbb{I} - K \nabla \rho \nabla \rho. \quad (5.84)$$

Usando las relaciones (5.83) o (5.84) para la definición del tensor de Korteweg, las Ecuaciones (5.75)-(5.78) se pueden finalmente escribir en forma más compacta como

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (5.85)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\mathbb{T} + \mathbb{K}), \quad (5.86)$$

$$\frac{dU}{dt} = (\mathbb{T} + \mathbb{K}) : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \nabla \cdot \left( K \nabla \rho \frac{d\rho}{dt} \right), \quad (5.87)$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{\rho T} \mathbb{S} : \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho T} \nabla \cdot (\kappa \nabla T). \quad (5.88)$$

Es importante notar que el último término en el lado derecho de la Ecuación (5.87) admite una interpretación diferente al resto de los otros términos. Generalmente en las fases líquida y gaseosa este término es aproximadamente cero ya que en la mayoría de los casos se trata de medios incompresibles donde  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  y, por lo tanto,  $d\rho/dt = 0$ .

Sin embargo, en la zona interfacial  $d\rho/dt$  representa la tasa de vaporización y, por ende,  $d\rho/dt \neq 0$ . Por ejemplo, en una interface donde ocurre evaporación una partícula líquida se convierte en vapor al cruzar la interface disminuyendo su densidad durante el tránsito por lo que  $d\rho/dt < 0$ . De esta manera, el último término en el lado derecho de la Ecuación (5.87) se encuentra relacionado con la propagación del calor latente,  $L$ , en la zona interfacial, el cual está definido por la relación

$$L = T \left[ \frac{1}{\rho_l} \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\rho_l} - \frac{1}{\rho_v} \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\rho_v} \right]. \quad (5.89)$$

La solución de las ecuaciones (5.85)-(5.88) acopladas a la ecuación de estado (5.3) y a la ecuación calórica (5.5) modificada de acuerdo con la relación

$$U = \frac{\xi}{2} \bar{k} T - \bar{a} \rho, \quad (5.90)$$

donde  $\xi = 2$  en dos dimensiones y  $\xi = 3$  en tres dimensiones, definen completamente el sistema líquido-vapor.

### 5.3.5. Tensor de Korteweg en coordenadas rectangulares

El tensor de Korteweg definido por la relación (5.84) utiliza la densidad del fluido como parámetro de orden, donde el primer término del lado derecho entre paréntesis es un escalar, mientras que el término  $\nabla\rho\nabla\rho$  es un tensor simétrico de segundo rango (diádico). Dado que en SPH la discretización de las ecuaciones se realiza en coordenadas rectangulares, es conveniente representar el tensor de Korteweg analíticamente en términos de sus componentes en esas coordenadas. Por ejemplo, el tensor  $\nabla\rho\nabla\rho$  se puede escribir explícitamente como

$$\begin{aligned} \nabla\rho\nabla\rho = & \left( \frac{\partial\rho}{\partial x} \right)^2 \mathbf{ii} + \frac{\partial\rho}{\partial x} \frac{\partial\rho}{\partial y} \mathbf{ij} + \frac{\partial\rho}{\partial x} \frac{\partial\rho}{\partial z} \mathbf{ik} + \frac{\partial\rho}{\partial x} \frac{\partial\rho}{\partial y} \mathbf{ji} + \left( \frac{\partial\rho}{\partial y} \right)^2 \mathbf{jj} \\ & + \frac{\partial\rho}{\partial y} \frac{\partial\rho}{\partial z} \mathbf{jk} + \frac{\partial\rho}{\partial z} \frac{\partial\rho}{\partial x} \mathbf{ki} + \frac{\partial\rho}{\partial z} \frac{\partial\rho}{\partial y} \mathbf{kj} + \left( \frac{\partial\rho}{\partial z} \right)^2 \mathbf{kk}, \end{aligned} \quad (5.91)$$

donde  $\mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}$  y  $\mathbf{k}$  son los vectores unitarios en la dirección de los ejes coordenados  $x$ ,  $y$  y  $z$ , y

$$\left( \frac{\partial\rho}{\partial x} \right)^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial x^2} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \quad (5.92)$$

$$\left( \frac{\partial\rho}{\partial y} \right)^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial y^2} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2}, \quad (5.93)$$

$$\left( \frac{\partial\rho}{\partial z} \right)^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial z^2} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2}, \quad (5.94)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial x} \frac{\partial\rho}{\partial y} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial x \partial y} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial y}, \quad (5.95)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial x} \frac{\partial\rho}{\partial z} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial x \partial z} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial z}, \quad (5.96)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial y} \frac{\partial\rho}{\partial z} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial y \partial z} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial y \partial z}. \quad (5.97)$$



Haciendo uso de las relaciones (5.92)-(5.97) en la Ecuación (5.91), el tensor de Korteweg (5.84) en términos de sus componentes queda expresado como

$$\mathcal{K}^{xx} = \frac{K}{2} \left( 2\rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial x^2} + \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \nabla^2 \rho^2 \right), \quad (5.98)$$

$$\mathcal{K}^{xy} = \mathcal{K}^{yx} = -K \left( \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial x \partial y} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial y} \right), \quad (5.99)$$

$$\mathcal{K}^{xz} = \mathcal{K}^{zx} = -K \left( \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial x \partial z} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial z} \right), \quad (5.100)$$

$$\mathcal{K}^{yy} = \frac{K}{2} \left( 2\rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial y^2} + \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \nabla^2 \rho^2 \right), \quad (5.101)$$

$$\mathcal{K}^{yz} = \mathcal{K}^{zy} = -K \left( \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial y \partial z} - \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial y \partial z} \right), \quad (5.102)$$

$$\mathcal{K}^{zz} = \frac{K}{2} \left( 2\rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial z^2} + \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \nabla^2 \rho^2 \right), \quad (5.103)$$

donde

$$\nabla^2 \rho = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2}, \quad (5.104)$$

$$\nabla^2 \rho^2 = \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho^2}{\partial z^2}. \quad (5.105)$$

Las expresiones de las derivadas (5.92)-(5.97) y de las componentes del tensor de Korteweg (5.98)-(5.103) escritas de esta manera dan lugar a representaciones discretas con el uso del método SPH que resultan ser numéricamente estables.

### 5.3.6. Tensor de esfuerzos en coordenadas rectangulares

Por razones de estabilidad numérica es conveniente reescribir el tensor de esfuerzos definido por la relación (5.35) en la forma

$$\mathbb{T} = -p^{\text{kin}} \mathbb{I} + \bar{a} \rho^2 \mathbb{I} + \eta (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^t) + \left( \zeta - \frac{2}{d} \eta \right) \nabla \cdot \mathbf{v} \mathbb{I}, \quad (5.106)$$

donde la presión dada por la Ecuación (5.3) se evalúa separando la parte cinética

$$p^{\text{kin}} = \frac{\rho \bar{k} T}{1 - \rho \bar{b}}, \quad (5.107)$$

de la parte cohesiva,  $-\bar{a}\rho^2$ , la cual es responsable de los efectos de tensión superficial. En coordenadas rectangulares, las componentes del tensor de esfuerzos toman la forma

$$\mathcal{T}^{xx} = -p^{\text{kin}} + \bar{a}\rho^2 + 2\eta \left( \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{1}{d} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) + \zeta \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (5.108)$$

$$\mathcal{T}^{yy} = -p^{\text{kin}} + \bar{a}\rho^2 + 2\eta \left( \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{1}{d} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) + \zeta \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (5.109)$$

$$\mathcal{T}^{zz} = -p^{\text{kin}} + \bar{a}\rho^2 + 2\eta \left( \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{1}{d} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) + \zeta \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (5.110)$$

$$\mathcal{T}^{xy} = \mathcal{T}^{yx} = \eta \left( \frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right), \quad (5.111)$$

$$\mathcal{T}^{xz} = \mathcal{T}^{zx} = \eta \left( \frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right), \quad (5.112)$$

$$\mathcal{T}^{yz} = \mathcal{T}^{zy} = \eta \left( \frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right), \quad (5.113)$$

donde el vector velocidad en términos de sus componentes está definido como

$$\mathbf{v} = v_x \mathbf{i} + v_y \mathbf{j} + v_z \mathbf{k}, \quad (5.114)$$

y los vectores  $\mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}$  y  $\mathbf{k}$  son los vectores unitarios en la dirección de los ejes coordenados  $x$ ,  $y$  y  $z$ , respectivamente. En las relaciones (5.108)-(5.110) la divergencia del campo de velocidad en coordenadas rectangulares está dada por la expresión

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}. \quad (5.115)$$

Para efectos de la discretización numérica de las ecuaciones de movimiento y de energía interna, es conveniente definir las siguientes componentes

$$\mathcal{T}^{\prime,xx} = \mathcal{T}^{xx} - \bar{a}\rho^2, \quad (5.116)$$

$$\mathcal{T}^{\prime,yy} = \mathcal{T}^{yy} - \bar{a}\rho^2, \quad (5.116)$$

$$\mathcal{T}^{\prime,zz} = \mathcal{T}^{zz} - \bar{a}\rho^2, \quad (5.117)$$

donde las componentes primadas corresponden a las componentes diagonales del tensor de esfuerzos sin la inclusión de las fuerzas cohesivas.

## 5.4. Descomposición espinodal

La descomposición espinodal es un mecanismo mediante el cual una solución de dos o más componentes puede separarse en distintas fases, las cuales pueden poseer diferente composición química y diferentes propiedades físicas. En un diagrama de fase, la descomposición espinodal es factible desde el punto de vista termodinámico en la región inestable limitada por la curva espinodal, la cual recibe el nombre de brecha de miscibilidad. Cuando un sistema cruza la curva *espinodal*<sup>1</sup> y entra en la brecha

---

<sup>1</sup>La curva espinodal es la curva que separa la región metaestable de la región estable en el diagrama de fases, donde una mezcla binaria puede coexistir como resultado de un proceso de descomposición espinodal. Debido a la presencia de pequeñas fluctuaciones esta curva no define necesariamente un límite nítido.

de miscibilidad, el sistema experimenta una separación de fase de manera espontánea sin pasar por un proceso de nucleación [1]. Es decir, la separación de fases ocurre de manera relativamente uniforme a través del material y no en partes discretas de este, como sucede en el caso de la nucleación, bien sea esta homogénea o heterogénea. La descomposición espinodal puede resultar en una separación de fase espontánea aún en presencia de fluctuaciones infinitesimalmente pequeñas en la densidad o composición, dando lugar a una alta interconectividad entre las dos fases.

La Figura 5.5 muestra como ejemplo un diagrama de fases de temperatura en función de la fracción molar de una fase,  $x_B$ . La línea curva continua define la frontera de las fases y se le conoce como curva de coexistencia o curva *binodal*<sup>2</sup>. Por encima de esta curva el sistema es estable y el fluido puede existir solo en una fase. Cuando el fluido entra en la brecha de miscibilidad por debajo de espinodal, entonces el sistema, compuesto por una sola fase, experimenta una transición a un sistema de dos fases. La transformación de fase en este caso es controlada solamente por un proceso de difusión. Gibbs [82] demostró que la condición de inestabilidad con respecto a un cambio continuo de fase es que la segunda derivada del cambio de la energía libre de la mezcla sea una cantidad negativa, es decir,  $\partial^2\Delta G/\partial x_B^2 < 0$ , que corresponde al segmento BD en la Figura 5.5. La región del diagrama de fases donde  $\partial^2\Delta G/\partial x_B^2 = 0$  define la curva espinodal. El cambio de la energía libre de Gibbs, como función de los cambios de entropía y entalpía, está dado por la relación

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S. \quad (5.118)$$

Si  $x_A$  y  $x_B$  son las fracciones molares de los componentes  $A$  y  $B$  de la mezcla ( $x_A + x_B = 1$ ), el cambio de entropía se puede escribir como

$$\Delta S = -R_g(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B), \quad (5.119)$$

mientras el cambio de entalpía es simplemente

$$\Delta H = x_A x_B \beta, \quad (5.120)$$

donde  $\beta$  es un parámetro de interacción. Sustitución de las relaciones (5.119) y (5.120) en la Ecuación (5.118) resulta en la expresión

$$\Delta G = x_A x_B \beta + R_g T (x_A \ln x_A + x_B \ln x_B). \quad (5.121)$$

La región inestable (o brecha de miscibilidad) se define diferenciando (5.119) con respecto a  $x_A$  y luego con respecto a  $x_B$  una vez e igualando ambos resultados a cero para obtener

$$\frac{T}{T_{\text{cr}}} = \frac{2(x_A - x_B)}{\ln x_A - \ln x_B}, \quad (5.122)$$

mientras igualando a cero las segundas derivadas de la energía libre de Gibbs se puede llegar a la expresión

$$\frac{T^2}{T_{\text{cr}}^2} = 4x_A x_B, \quad (5.123)$$

---

<sup>2</sup>La curva binodal es la curva a través de la cual el sistema es metaestable, es decir, es estable con respecto a pequeñas fluctuaciones e inestable con respecto a perturbaciones de tamaño finito. La región de metaestabilidad en el diagrama de fases está delimitada por debajo por la curva espinodal.

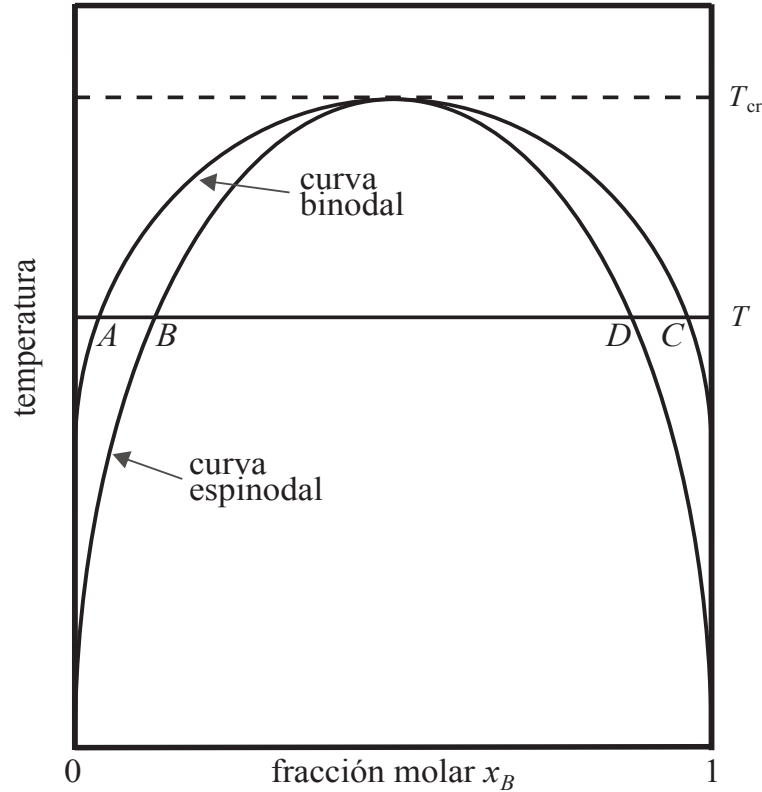


Figura 5.5: Curvas binodal y espinodal en el diagrama de fase temperatura versus fracción molar del componente  $x_B$ .

que define la curva espinodal, donde  $T_{cr} = \beta/(2R_g)$ . En la Figura 5.5 el punto donde las curvas espinodal y binodal coinciden definen la temperatura crítica  $T_{cr}$ . La recta horizontal correspondiente a una temperatura dada corta la binodal en los puntos  $A$  y  $C$  y a la espinodal en los puntos  $B$  y  $D$ . En particular, los segmentos  $AB$  y  $CD$  corresponden a valores positivos de  $\partial^2\Delta G/\partial x_B^2$ , mientras que el segmento  $BD$  corresponde a  $\partial^2\Delta G/\partial x_B^2 < 0$ .

## 5.5. Nucleación homogénea

La nucleación es una transición de fase de primer orden que ocurre como resultado de fluctuaciones de tamaño finito cuando un sistema penetra en la región metaestable delimitada por las curvas binodal y espinodal. Desde el punto de vista termodinámico constituye el punto de partida para la formación de una nueva fase. Es importante notar que en general el proceso es estocástico (aleatorio) en el sentido que aún en dos sistemas idénticos la nucleación puede ocurrir a tiempos diferentes [83, 84]. Se puede distinguir entre lo que se conoce como nucleación homogénea y nucleación heterogénea. La nucleación homogénea ocurre en la parte interior del sistema lejos de su superficie, mientras la nucleación heterogénea ocurre en varios sitios sobre la superficie del sistema [83]. Entre ambos procesos la nucleación heterogénea es mucho más común que la contraparte homogénea. Sin embargo, en gotas líquidas sometidas a calentamiento pueden formarse núcleos esféricos en el interior de las gotas, resultando en un proceso de nucleación homogénea. En el presente trabajo consideraremos el calentamiento uniforme de gotas circulares para las cuales se observa la formación de

una burbuja interior la cual, dependiendo de la densidad del líquido y de la temperatura del calentamiento, puede ser transitoria, en el sentido que se forma y luego desaparece al colapsar sobre sí misma, o expandirse radialmente hasta causar el rompimiento de la capa líquida externa.

Por otra parte, es importante recordar que la teoría clásica de la nucleación se basa en algunas suposiciones. Por ejemplo, se supone que un núcleo microscópico de radio de algunas moléculas se puede tratar como una gota o burbuja macroscópica con una superficie bien definida cuya energía libre es estimada usando propiedades de equilibrio como, por ejemplo, la tensión interfacial. Sin embargo, no es del todo claro como algo tan pequeño pueda en efecto tratarse como un volumen con una superficie bien definida. Además, la nucleación es inherentemente un proceso fuera del equilibrio termodinámico de manera que no es siempre obvio cómo pueda estimarse usando propiedades de equilibrio. La curva binodal o de coexistencia que separa la región estable de la región de metaestabilidad se puede obtener haciendo uso de la construcción de Maxwell como se describe al final de Sección 5.1.

# Capítulo 6

## Métodos numéricos

### 6.1. El método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (SPH)

El método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (en inglés: Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH) es un método alternativo a los métodos tradicionales basados en mallas para resolver las ecuaciones de la dinámica de fluidos. El método fue originalmente desarrollado de manera independiente por Lucy [85] y Gingold y Monaghan [86] para el estudio de flujos astrofísicos en tres dimensiones y con geometrías arbitrarias. Como su nombre lo indica, SPH es un método de partículas y se basa en una descripción Lagrangiana del fluido. A diferencia de los métodos tradicionales basados en mallas, en SPH el fluido está representado por un conjunto finito de puntos de observación (o partículas), lo que resulta en una herramienta de cómputo simple de implementar como de incorporar nuevos efectos físicos y tratar fronteras altamente irregulares. Debido a su simplicidad y robustez, SPH ha sido usado, desde su creación, para resolver una enorme variedad de problemas en diferentes áreas, incluyendo la mecánica de fluidos, la hidráulica, la magnetohidrodinámica, la dinámica de flujos interfaciales y de superficies libres, la dinámica de flujos multifásicos y diferentes problemas de mecánica computacional, donde ha sido empleado para estudiar la respuesta de cuerpos elásticos a deformaciones inducidas, impactos de alta velocidad, daños en la estructura de sólidos sometidos a esfuerzos y explosiones, para mencionar algunas aplicaciones. Más recientemente el método ha sido aplicado a problemas de ingeniería marítima, en ciencias de materiales, en el modelado de sistemas biológicos y en computación gráfica y visualización.

Los fundamentos matemáticos de SPH se encuentran basados en la teoría de interpolación. En este sentido las ecuaciones diferenciales que gobiernan el comportamiento de los fluidos son transformadas en ecuaciones integrales mediante el uso de una función de interpolación. De esta manera se pueden obtener soluciones numéricas sin necesidad de un mallado. Es decir, todas las funciones como sus derivadas estarán definidas por una integral de interpolación mediante el uso de una función de suavizado (o función kernel). En forma discreta, cada partícula que conforma el dominio computacional representa una parte macroscópica del fluido y tiene consigo asociada masa, momento, energía interna, temperatura, y en general cualquier otra variable o propiedad física del sistema. De esta forma el método se divide en dos partes: una parte llamada *aproximación kernel*, donde una función en un punto del dominio se

aproxima mediante una integral de interpolación, y otra parte llamada *aproximación de partículas* o simplemente aproximación SPH, donde las integrales de interpolación se aproximan mediante sumas de Riemann.

### 6.1.1. Aproximación kernel

Haciendo referencia a ideas de la teoría de distribución, la aproximación kernel de una función continua y diferenciable,  $f(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , se obtiene a partir de la propiedad

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d^n \mathbf{x}', \quad (6.1)$$

sustituyendo la distribución  $\delta$  de Dirac por una función de interpolación (o función kernel),  $W$ , tal que

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} f(\mathbf{x}') W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \quad (6.2)$$

donde  $\Omega_n \subset \mathbb{R}^n$  es el dominio espacial y  $h$  es el ancho del kernel, más comúnmente conocido como la longitud de suavizado. La notación  $\langle f(\mathbf{x}) \rangle$  se usa para denotar el estimado (o aproximación) kernel de  $f(\mathbf{x})$ . La función kernel en la relación (6.2) debe cumplir con la condición de normalización

$$M_0 = \int_{\Omega_n} W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' = 1, \quad (6.3)$$

y debe ser positiva definida, simétrica, monótonamente decreciente y tender a  $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  cuando  $h \rightarrow 0$  para que  $\langle f(\mathbf{x}) \rangle \rightarrow f(\mathbf{x})$ . En casi todas las aplicaciones modernas del método SPH se usan funciones kernel de soporte compacto, de manera que  $W = 0$  si  $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\| > kh$ , donde  $k$  es un número que especifica el soporte del kernel.

De manera similar la aproximación kernel del gradiente de la función  $f(\mathbf{x})$  se obtiene reemplazando  $f(\mathbf{x})$  en la representación (6.2) por  $\nabla f(\mathbf{x})$

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} \nabla' f(\mathbf{x}') W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \quad (6.4)$$

donde  $\nabla'$  es el operador nabla con respecto a las coordenadas primadas  $\mathbf{x}'$ . Integrando por partes se llega finalmente a la expresión para el estimado kernel del gradiente

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} f(\mathbf{x}') \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}'. \quad (6.5)$$

Una mejor representación del estimado kernel del gradiente que satisface la relación  $\nabla C = 0$ , donde  $C$  es una constante, está dada por la expresión

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} [f(\mathbf{x}') - f(\mathbf{x})] \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}'. \quad (6.6)$$

En el Apéndice D se detalla la derivación de las relaciones (6.5) y (6.6) a partir de la representación (6.4).

## Consistencia de la aproximación kernel

El concepto matemático de consistencia está relacionado con qué tan cerca las ecuaciones discretas se aproximan a las ecuaciones diferenciales exactas. En otros términos, la consistencia es una medida de los errores locales de truncamiento como resultado del proceso de discretización de las ecuaciones exactas. Como se mencionó anteriormente, en SPH el proceso de discretización requiere primero que la distribución delta de Dirac se sustituya por una función kernel. Dicho proceso implica un proceso de suavizado que introduce un error en el estimado de la función. Para cuantificar el error de la aproximación se expande la función  $f(\mathbf{x}')$  en el integrando de la relación (6.2) en series de Taylor alrededor del punto  $\mathbf{x}' = \mathbf{x}$ , de manera tal que la relación (6.2) se convierte en

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = f(\mathbf{x}) + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} \nabla^{(l)} f(\mathbf{x}) :: \cdots : \int_{\Omega_n} (\mathbf{x}' - \mathbf{x})^l W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \quad (6.7)$$

donde  $\nabla^{(l)}$  denota el producto del operador  $\nabla$   $l$  veces con respecto a las coordenadas  $\mathbf{x}$ , el símbolo “ $:: \cdots :$ ” denota el  $l$ -ésimo producto interno y  $(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^l$  es un tensor de rango  $l$ . Del desarrollo en serie (6.7) se deduce que la aproximación kernel de la función converge a la función exacta si se cumplen las siguientes relaciones de consistencia

$$\mathbf{M}_l = \int_{\Omega_n} (\mathbf{x}' - \mathbf{x})^l W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' = \mathbf{0}^{(l)}, \quad (6.8)$$

para  $l = 1, 2, \dots$ , donde  $0^{(0)} = 0$ ,  $\mathbf{0}^{(1)} = (0, 0, 0)$  es el vector nulo y  $\mathbf{0}^{(l)}$  es el tensor cero de rango  $l$ . Para  $l = 0$ , la relación (6.8) se reduce a la condición de normalización del kernel (6.3) lo que garantiza consistencia  $C^0$  para la aproximación kernel. Por otro lado, debido a la simetría del kernel la condición (6.8) se cumplirá siempre automáticamente para  $l = 1$ , garantizando así consistencia  $C^1$ . Lo mismo es cierto para todos los valores de  $l \geq 3$  impares. Solo para valores pares de  $l$  las integrales (6.8) representan fuentes finitas de error a menos que

$$W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) \rightarrow \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

El error de segundo orden en la aproximación kernel se debe al hecho que el momento del kernel para  $l = 2$ ,  $\mathbf{M}_2 \neq \mathbf{0}^{(2)}$ . Esto demuestra que la aproximación kernel para un dominio infinito alcanza a lo sumo consistencia  $C^1$  o, en otras palabras, segundo orden de precisión. Usando las Ecuaciones (6.2) y (6.3) se puede demostrar fácilmente que la integral (6.8) para  $l = 2$  se reduce a la expresión

$$\mathbf{M}_2 = \langle \mathbf{x}\mathbf{x} \rangle - \langle \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} \rangle \neq \mathbf{0}^{(2)}, \quad (6.9)$$

siempre que se alcancen consistencias  $C^0$  y  $C^1$ . Este término demuestra que la falta de consistencia  $C^2$  de la aproximación kernel se debe a una difusión intrínseca que es igual a la varianza de  $\mathbf{x}$ , es decir, de la posición de las partículas (o puntos de interpolación). En efecto, el segundo momento del kernel es una medida de la dispersión en la posición de las partículas con respecto al cuadrado del promedio de las posiciones. Por otra parte esto explica porque las formulaciones SPH basadas en segundas derivadas del kernel son sensibles al grado de desorden en la distribución de las partículas, donde la dispersión de las mismas con respecto a la media puede aumentar debido a la presencia de campos de velocidad no uniforme [87, 88].



Expandiendo ahora la función  $f(\mathbf{x}')$  en el integrando de la Ecuación (6.5) alrededor del punto  $\mathbf{x}$  se llega a la representación

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \nabla^{(l)} f(\mathbf{x}) :: \dots :: \int_{\Omega_n} (\mathbf{x}' - \mathbf{x})^l \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \quad (6.10)$$

donde los momentos del gradiente del kernel deben satisfacer las siguientes condiciones para alcanzar consistencia completa

$$\begin{aligned} \mathbf{M}'_0 &= \int_{\Omega_n} \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' = \mathbf{0}^{(1)}, \\ \mathbf{M}'_1 &= \int_{\Omega_n} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' = \mathbb{I}, \\ \mathbf{M}'_l &= \int_{\Omega_n} (\mathbf{x}' - \mathbf{x})^l \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' = \mathbf{0}^{(l+1)}, \end{aligned} \quad (6.11)$$

para  $l = 2, 3, \dots$ , donde  $\mathbb{I}$  es el tensor unitario. La condición  $\mathbf{M}'_0 = \mathbf{0}^{(1)}$ , donde  $\mathbf{0}^{(1)} = (0, 0, 0)$  es el vector nulo, es equivalente a requerir que la función kernel tome valores nulos sobre la superficie que encierra al volumen computacional. En otros términos, si  $V$  es el volumen del dominio de integración,  $\Omega_n$ , y  $S$  es la superficie continua que encierra al volumen entonces

$$\int_{\Omega_n} \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' = \int_S W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) \mathbf{n} dS' = \mathbf{0}^{(1)}, \quad (6.12)$$

donde  $\mathbf{n} dS'$  es un elemento diferencial de área y  $\mathbf{n}$  es el vector normal a ese elemento de superficie. Las Ecuaciones (6.11) son relaciones de consistencia para la aproximación kernel del gradiente.

### Divergencia de una función vectorial

Sea  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  una función vectorial cuyas componentes son funciones escalares continuas de la posición. En analogía con la derivación del estimado kernel del gradiente de una función escalar, el estimado kernel de la divergencia se puede obtener sustituyendo en la Ecuación (6.2) la función  $f(\mathbf{x})$  por  $\nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x})$  de manera que

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} \nabla' \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}') W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}'. \quad (6.13)$$

Siguiendo pasos análogos a los expuestos en el Apéndice D para la derivación de las representaciones (6.5) y (6.6), se puede demostrar que

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} \mathbf{f}(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \quad (6.14)$$

o alternativamente

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} [\mathbf{f}(\mathbf{x}') - \mathbf{f}(\mathbf{x})] \cdot \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \quad (6.15)$$

que reproduce exactamente la divergencia de una función vectorial constante.

### 6.1.2. Aproximación de partículas

La discretización SPH hace referencia a un conjunto de partículas Lagrangianas que, en general, pueden estar distribuidas de manera desordenada como consecuencia del movimiento del fluido. La región dentro de la cual el kernel toma valores diferentes de cero se denomina el soporte del kernel,  $\Omega^s$ , y corresponde a un círculo (en dos dimensiones) o a una esfera (en tres dimensiones) con centro en el punto de observación  $\mathbf{x}$ . Por lo tanto, la integración se realiza sobre la región  $\Omega = \Omega(\mathbf{x}, t)$ , que es la intersección entre  $\Omega^s$  y el dominio de cómputo  $\Omega_n$ . La discretización consiste en dividir el dominio de cómputo  $\Omega_n$  en  $N$  subdominios,  $\Omega_a$  (con  $a = 1, 2, \dots, N$ ), cada uno de ellos conteniendo una partícula en un punto  $\mathbf{x}_a \in \Omega_a$ , como se muestra en la Figura 6.1. Cada subdominio posee fronteras Lagrangianas,  $\partial\Omega_a$ , definidas de manera tal que la masa del subdominio permanece siempre constante. Con la división del dominio,  $\Omega_n$ , en  $N$  subdominios, la representación discreta de la Ecuación (6.2) puede escribirse, haciendo uso del teorema del valor medio, como

$$\begin{aligned} f_a = \langle f(\mathbf{x}_a) \rangle &\approx \sum_{b=1}^N \int_{\Omega_b} f(\mathbf{x}') W(\|\mathbf{x}_a - \mathbf{x}'\|, h) dV \\ &\approx \sum_{b=1}^N f(\mathbf{x}_b) W(\|\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b\|, h) \Delta V_b, \end{aligned} \quad (6.16)$$

donde  $\Delta V_b$  es el volumen del subdominio  $\Omega_b$  y  $\mathbf{x}_b \in \Omega_b$ . Como es de uso común en SPH, la segunda sumatoria en la Ecuación (6.16) se escribirá en forma simplificada como

$$f_a = \sum_{b=1}^N f_b W_{ab} \Delta V_b, \quad (6.17)$$

donde  $W_{ab} = W(\|\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b\|, h)$ ,  $\Delta V_b$  es el volumen del subdominio  $\Omega_b$ , y la suma escrita de ese modo se extiende sobre todas las partículas del dominio. Sin embargo, en la mayoría de las aplicaciones modernas del método SPH es común el uso de funciones kernel con soporte compacto. De esta manera, la suma en la Ecuación (6.17) se extenderá solamente sobre las  $\mathcal{N}$  partículas que se encuentran dentro del soporte esférico  $\Omega^s$  del kernel, es decir

$$f_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} f_b W_{ab} \Delta V_b, \quad (6.18)$$

donde  $\mathcal{N}$  se refiere en la literatura como el número de partículas vecinas a la partícula de observación  $a$ . En esta aproximación se introduce un error de la forma  $O(\phi, h^k)$ , donde  $k(= 2)$  es un número entero positivo que depende del orden de consistencia que se aplique y  $\phi = \phi(\mathcal{N})$  es una función del número de vecinos y depende de cómo se encuentran distribuidas las partículas dentro del soporte del kernel. Por ejemplo, si las partículas se encuentran distribuidas de manera aleatoria  $\phi(\mathcal{N}) \propto 1/\sqrt{\mathcal{N}}$  en promedio. Si, por el contrario, la distribución es regular o desordenada (pero no aleatoria) entonces  $\phi(\mathcal{N}) \propto 1/\mathcal{N}$  [88].

El volumen  $\Delta V_a$  del subdominio  $\Omega_a$  que contiene a la partícula  $a$  se puede estimar a partir de la relación

$$m_a = \int_{\Omega_a} \rho(\mathbf{x}, t) dV \approx \rho_a \Delta V_a, \quad (6.19)$$

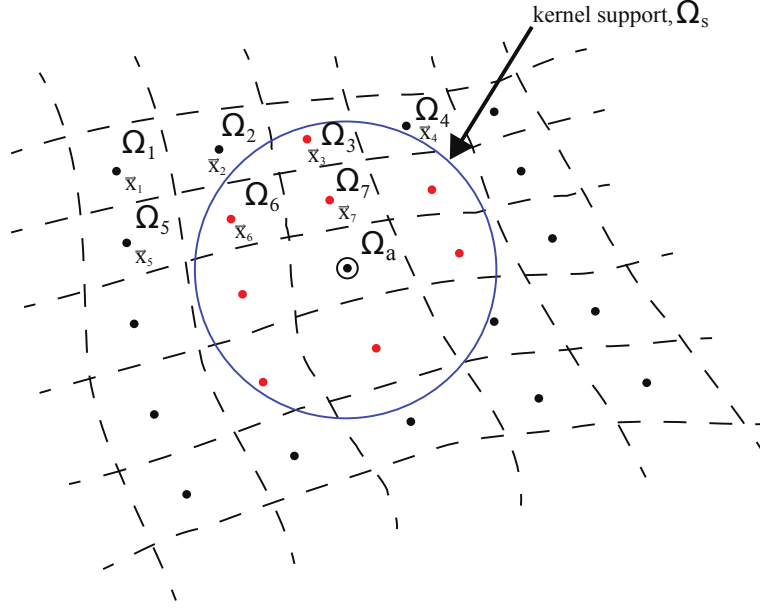


Figura 6.1: Dibujo esquemático que muestra la discretización SPH usando una función kernel con soporte compacto.

o

$$\Delta V_a = \frac{m_a}{\rho_a}, \quad (6.20)$$

donde  $m_a$  es la masa asociada a la partícula  $a$  y  $\rho_a = \rho(\mathbf{x}_a, t)$  es la densidad del fluido en la posición de la partícula  $a$ . En virtud de la relación (6.20), la Ecuación (6.18) puede escribirse finalmente como [89, 90, 91]

$$f_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} f_b W_{ab}. \quad (6.21)$$

Siguiendo pasos similares a los expuestos arriba, la aproximación de partículas de la representación kernel del gradiente dada por la Ecuación (6.5) admite la forma

$$(\nabla f)_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} f_b \nabla_a W_{ab}. \quad (6.22)$$

Sin embargo, como se verá más adelante esta expresión no es la más adecuada para aplicaciones prácticas del método ya que no cumple con el hecho que el gradiente de una función constante sea exactamente cero.

### Consistencia de la aproximación de partículas

La condición de normalización (6.3) en forma discreta

$$\sum_{b=1}^{\mathcal{N}} W_{ab} \Delta V_b = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab} = O(1), \quad (6.23)$$

no es exactamente igual a la unidad. En efecto, como se mencionó anteriormente, el error cometido por esta aproximación escala como  $\sim \mathcal{N}^{-1/2}$  si las partículas dentro

del soporte del kernel se encuentran distribuidas aleatoriamente, mientras que el error es proporcional a  $\sim \mathcal{N}^{-1}$  si en cambio la distribución es quasi-regular o no uniforme. En cualquier caso, si  $\mathcal{N}$  es suficientemente grande entonces la condición de normalización (6.23) toma valores suficientemente cercanos a la unidad, garantizando de este modo consistencia  $C^0$  para la representación (6.21). Por otro lado, es bien sabido que la función de probabilidad (6.23) pierde consistencia  $C^0$  cuando las partículas se encuentran distribuidas irregularmente, inclusive lejos de fronteras físicas del modelo, debido a errores que escalan con el número de vecinos como  $\sim \mathcal{N}^{-1} \ln \mathcal{N}$  [92]. En muchas aplicaciones del método la pérdida de consistencia surge también cuando el soporte del kernel,  $\Omega^s$  es truncado por la presencia de fronteras físicas del sistema o bien cuando se usan funciones kernel cuya longitud de suavizado,  $h$ , varía tanto espacial como temporalmente [93]. Más recientemente una nueva fuente de error relacionada con el número finito de vecinos dentro del soporte compacto del kernel fue reportada por Zhu et al. [94]. Sin embargo, el impacto de este tipo de error sobre la pérdida de consistencia es significativamente mayor en fluidos compresibles que en fluidos incompresibles, como es el caso de los fluidos simulados en este trabajo de investigación.

Una forma simple de imponer la condición

$$\sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab} = 1, \quad (6.24)$$

en presencia de una frontera del sistema es haciendo uso de la interpolación de Shepard donde se normaliza el kernel de acuerdo con la prescripción [95]

$$W_{ab} \rightarrow \frac{W_{ab}}{\sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab}}. \quad (6.25)$$

Si se aplica la representación (6.22) para evaluar el gradiente de una función  $f(\mathbf{x}, t) = C$ , donde  $C$  es una constante real, se obtiene que

$$\nabla_a C = C \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \nabla_a W_{ab} \neq 0, \quad (6.26)$$

debido a una pérdida de consistencia de la aproximación de partículas. Sin embargo, la forma discreta de la representación (6.6) [96, 97]

$$(\nabla f)_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} (f_a - f_b) \nabla_a W_{ab}, \quad (6.27)$$

asegura que  $\nabla C = 0$ . Como se verá en la sección siguiente, la pérdida de consistencia tiene consecuencias importantes en las leyes de conservación tanto del momento lineal como del momento angular en el espacio discreto.

## Divergencia de una función vectorial

De manera análoga a la aproximación de partículas del gradiente de una función escalar (6.27), la representación SPH de la Ecuación (6.15) se puede escribir en la forma [96]

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} (\mathbf{f}_b - \mathbf{f}_a) \cdot \nabla_a W_{ab}. \quad (6.28)$$

Formas alternativas a la representación (6.28) encontradas en la literatura son [98]

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_a = \frac{1}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b (\mathbf{f}_b - \mathbf{f}_a) \cdot \nabla_a W_{ab}, \quad (6.29)$$

y [19]

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\bar{\rho}_{ab}} (\mathbf{f}_b - \mathbf{f}_a) \cdot \nabla_a W_{ab}, \quad (6.30)$$

donde  $\bar{\rho}_{ab} = (\rho_a + \rho_b)/2$ . Cada una de estas expresiones produce en realidad resultados indistinguibles.

## 6.2. Leyes de conservación

### 6.2.1. Conservación de la masa

La densidad  $\rho_a$  asociada con la partícula  $a$  puede evaluarse directamente a partir de la Ecuación (6.21) sustituyendo la función  $f$  por  $\rho$  de manera tal que

$$\rho_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b W_{ab}. \quad (6.31)$$

Esta expresión conserva la masa exactamente y es una aproximación de segundo orden de la ecuación de continuidad (5.85) [89]. En efecto, la expresión (6.31) ha sido usada con frecuencia para calcular la densidad en simulaciones numéricas con el método SPH. Sin embargo, en fluidos donde la densidad varía de manera discontinua a través de una interface o frontera es preferible hacer uso de la Ecuación (5.85) cuya forma discreta se definirá más adelante.

### 6.2.2. Conservación del momento lineal

El restablecimiento de la consistencia  $C^0$  en la aproximación de partículas es equivalente a requerir que la homogeneidad del espacio no se vea afectada por el proceso de discretización espacial, que a su vez tiene como consecuencia la conservación del momento lineal [99, 88]. En otras palabras, si se alcanza consistencia  $C^0$ , la interpolación SPH asegurará invariancia con respecto a una traslación de los ejes coordenados. Para expresar esto en forma matemática considérese la representación SPH (6.21) para el vector posición  $\mathbf{x} = (x, y, z)$

$$\langle \mathbf{x} \rangle_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \mathbf{x}_b W_{ab}. \quad (6.32)$$

De acuerdo con la Ecuación (6.32), la aproximación SPH de las coordenadas transformadas  $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}$  está dada por

$$\langle \mathbf{x}' \rangle_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}'} \frac{m'_b}{\rho'_b} \mathbf{x}'_b W'_{ab}, \quad (6.33)$$

donde  $W'_{ab} = W(\|\mathbf{x}'_a - \mathbf{x}'_b\|, h')$ ,  $m'_b = \rho'_b \Delta V'_b$ ,  $\rho'_b = \rho(\mathbf{x}'_b, t)$  y  $\mathcal{N}'$  es el número de vecinos en el soporte transformado de radio  $kh'$ . La preservación de la homogeneidad del espacio bajo una traslación uniforme requiere que  $\langle \Delta \mathbf{x} \rangle = \Delta \mathbf{x}$  de modo que  $\langle \mathbf{x}' \rangle_a = \langle \mathbf{x} \rangle_a + \Delta \mathbf{x}$ . Reemplazando ahora  $\mathbf{x}'_b$  por  $\mathbf{x}_b + \Delta \mathbf{x}$  en la Ecuación (6.33) da como resultado la forma

$$\langle \mathbf{x}' \rangle_a = \langle \mathbf{x} \rangle_a + \Delta \mathbf{x} \sum_{b=1}^n \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab}, \quad (6.34)$$

donde se ha hecho  $W'_{ab} = W_{ab}$ ,  $m'_b = m_b$  y  $\mathcal{N}' = \mathcal{N}$  ya que bajo la traslación de cuerpo rígido, las coordenadas de un punto permanecen invariantes con respecto a una traslación de los ejes de coordenados. Por lo tanto, la Ecuación (6.34) evidencia que la homogeneidad del espacio discreto se satisface si y solo si la condición

$$\sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} W_{ab} = 1, \quad (6.35)$$

se satisface exactamente. Como se mencionó previamente una forma simple de garantizar el cumplimiento de esta condición es mediante la aplicación de una interpolación de Shepard (véase la Ecuación 6.25).

### 6.2.3. Conservación del momento angular

Si la relación de consistencia de la aproximación kernel (6.11) para  $l = 1$ , es decir,  $\mathbf{M}_1 = \mathbb{I}$  para  $\Omega_n = \mathbb{R}^3$ , se cumple entonces la isotropía del espacio no se verá afectada por la aproximación kernel y, como consecuencia, se conservará el momento angular [99]. En otros términos, el proceso de interpolación SPH debe ser independiente de una rotación de los ejes coordenados. Para ver esto en términos cuantitativos, consideremos por simplicidad solo pequeñas rotaciones de manera que las coordenadas cambien de acuerdo con la transformación

$$\begin{aligned} \mathbf{x}' &= \mathbf{x} - d\mathbf{w} \times \mathbf{x} \\ &= \mathbf{x} - \mathbf{x} \cdot \nabla (d\mathbf{w} \times \mathbf{x}), \end{aligned} \quad (6.36)$$

donde  $d\mathbf{w}$  es el vector de rotación diferencial. Bajo una rotación de cuerpo rígido, las coordenadas de un punto son independientes de la rotación de los ejes de coordenadas y, por lo tanto

$$\langle \nabla (d\mathbf{w} \times \mathbf{x}) \rangle_a = \nabla (d\mathbf{w} \times \mathbf{x}), \quad (6.37)$$

o alternativamente, usando la representación SPH (6.22) para el gradiente se tiene que

$$\begin{aligned} \langle \nabla (d\mathbf{w} \times \mathbf{x}) \rangle_a &= \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} (d\mathbf{w} \times \mathbf{x})_b \frac{m_b}{\rho_b} \nabla_a W_{ab} \\ &= \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} [\mathbf{x} \cdot \nabla (d\mathbf{w} \times \mathbf{x})]_b \frac{m_b}{\rho_b} \nabla_a W_{ab} \\ &= \nabla (d\mathbf{w} \times \mathbf{x}) \cdot \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \mathbf{x}_b \nabla_a W_{ab}, \end{aligned} \quad (6.38)$$

lo que implica que la condición

$$\sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \mathbf{x}_b \nabla_a W_{ab} = \mathbf{I}, \quad (6.39)$$

debe cumplirse exactamente para que se preserve la isotropía del espacio discreto y asegurar así la conservación del momento angular. Nótese que la representación (6.39) es la versión discreta de la Ecuación (6.11) para  $l = 1$ . En general, para la mayoría de las aplicaciones relacionadas con fluidos incompresibles la condición de consistencia

$$\sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) \nabla_a W_{ab} \simeq \mathbb{I}, \quad (6.40)$$

que es la forma discreta del primer momento del gradiente se cumple con una muy buena aproximación.

#### 6.2.4. Representaciones SPH alternativas del gradiente y de la divergencia

Un problema asociado con la representación (6.27) es que cuando se implementa en la discretización de las ecuaciones de movimiento para aproximar a las fuerzas de presión afecta a la conservación del momento lineal y del momento angular. Además, dificulta la construcción de una representación SPH consistente para la ecuación de energía. Por lo tanto, es práctica común emplear en cambio una representación simetrizada para evaluar el gradiente de presión, la cual puede obtenerse a partir de la identidad vectorial

$$\frac{\nabla f}{\rho} = \nabla \left( \frac{f}{\rho} \right) + \left( \frac{f}{\rho^2} \right) \nabla \rho. \quad (6.41)$$

Usando la representación clásica del gradiente (6.22) para evaluar los dos términos del lado derecho de la Ecuación (6.41) se tiene

$$\left[ \nabla \left( \frac{f}{\rho} \right) \right]_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \frac{f_b}{\rho_b^2} \nabla_a W_{ab}, \quad (6.42)$$

$$\left( \frac{f}{\rho^2} \nabla \rho \right)_a = \frac{f_a}{\rho_a^2} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \nabla_a W_{ab}. \quad (6.43)$$

Reemplazando las Ecuaciones (6.42) y (6.43) en la Ec. (6.41) y agrupando términos se obtiene la forma simetrizada

$$(\nabla f)_a = \rho_a \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left( \frac{f_a}{\rho_a^2} + \frac{f_b}{\rho_b^2} \right) \nabla_a W_{ab}. \quad (6.44)$$

Como se podrá ver más adelante esta forma es compatible con una derivación de la discretización SPH de las ecuaciones de movimiento usando los principios variacionales de la mecánica clásica [100].

De forma análoga haciendo uso de la identidad vectorial

$$\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{f} = \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{f}}{\rho} \right) + \frac{\mathbf{f}}{\rho^2} \cdot \nabla \rho, \quad (6.45)$$

usando la representación para la divergencia en la forma

$$\left[ \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{f}}{\rho} \right) \right]_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \frac{\mathbf{f}_b}{\rho_b^2} \cdot \nabla_a W_{ab}, \quad (6.46)$$

y la representación (6.22) para evaluar el gradiente de la densidad se llega a la forma simetrizada para la divergencia

$$(\nabla \cdot \mathbf{f})_a = \rho_a \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left( \frac{\mathbf{f}_a}{\rho_a^2} + \frac{\mathbf{f}_b}{\rho_b} \right) \cdot \nabla_a W_{ab}. \quad (6.47)$$

Las representaciones (6.44) y (6.47) pueden usarse directamente para evaluar el gradiente de una función vectorial,  $\nabla \mathbf{f}$ , y la divergencia de una cantidad tensorial,  $\nabla \cdot \mathbb{F}$ , respectivamente.

### 6.3. El código DualSPHysics

Las simulaciones reportadas en este trabajo se realizaron con la ayuda de una versión modificada de los últimos desarrollos implementados en el código DualSPHysics [37]. DualSPHysics, como su nombre lo indica, es un código fuente abierto basado en técnicas SPH estándar que puede ejecutarse en CPUs usando el método de memoria compartida OpenMP o en unidades de tarjetas gráficas (GPU). La razón principal de usar este software como plataforma se debe a su velocidad de cómputo mediante el uso de programación CUDA sobre tarjetas GPU Nvidia. Si bien el código ha sido originalmente desarrollado para el estudio de problemas de ingeniería costera relacionados con impactos de olas sobre estructuras, ha venido también aplicándose a otros problemas en diferentes áreas de la dinámica de fluidos computacional.

En su versión original DualSPHysics resuelve la ecuación de continuidad (5.85) acoplada con la ecuación de movimiento para un fluido compresible

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{D} + \mathbf{f}, \quad (6.48)$$

donde  $\mathbf{v}$  es el vector velocidad,  $\mathbf{D}$  representa términos disipativos y  $\mathbf{f}$  representa aceleraciones del fluido debido a fuerzas externas como, por ejemplo, la gravedad.

#### 6.3.1. Representación SPH de la ecuación de continuidad

En cambio de la sumatoria (6.31), DualSPHysics evalúa la densidad resolviendo directamente la ecuación de continuidad (5.85) en forma discreta. Para una partícula  $a$  en la posición  $\mathbf{x}_a$ , la divergencia de la velocidad se calcula usando la representación (6.28) con  $\mathbf{f} \rightarrow \mathbf{v}$  de manera que

$$(\nabla \cdot \mathbf{v})_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \mathbf{v}_{ba} \cdot \nabla_a W_{ab}, \quad (6.49)$$

donde  $\mathbf{v}_{ba} = \mathbf{v}_b - \mathbf{v}_a$ . Usando la Ecuación (6.49) la forma discreta de la ecuación de continuidad estará dada por la representación

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \rho_a \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \mathbf{v}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab} + D_a, \quad (6.50)$$



donde  $\mathbf{v}_{ab} = -\mathbf{v}_{ba}$  y  $D_a$  es un término numérico de difusión. Este término se usa en DualSPHysics como un filtro de ruido de alta frecuencia que sirve para estabilizar el esquema aplicando un suavizado adicional a la densidad y, por ende, a la presión. El término toma la forma general

$$D_a = \delta h c_a \sum_{b=1}^N \frac{m_b}{\rho_b} \vec{\Psi}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab}, \quad (6.51)$$

donde  $\delta$  controla la magnitud del término de difusión,  $c_a$  es la velocidad del sonido<sup>1</sup> y  $\vec{\Psi}_{ab}$  es un vector de disipación artificial definido como [101]

$$\vec{\Psi}_{ab} = 2(\rho_b - \rho_a) \frac{\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b}{\|\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b\|^2}. \quad (6.52)$$

En las representaciones (6.49), (6.50) y (6.51) el gradiente del kernel se evalúa usando coordenadas rectangulares, que en tres dimensiones toma la forma

$$\nabla_a W_{ab} = \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \mathbf{i} + \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \mathbf{j} + \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \mathbf{k}, \quad (6.53)$$

donde el vector posición está dado por

$$\mathbf{x}_a = x_a \mathbf{i} + y_a \mathbf{j} + z_a \mathbf{k} \quad (6.54)$$

e  $\mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}$  y  $\mathbf{k}$  son los vectores unitarios a lo largo del eje  $x$ ,  $y$  y  $z$ , respectivamente. En dos dimensiones las relaciones (6.53) y (6.54) mantienen la misma forma excepto que se omite la componente  $z$ . Dado que la función kernel es analítica, las derivadas parciales en la Ecuación (6.53) se evalúan a partir del kernel en forma analítica. Del mismo modo, en términos de sus componentes el vector velocidad asociado con la partícula  $a$  está dado por

$$\mathbf{v}_a = v_{x,a} \mathbf{i} + v_{y,a} \mathbf{j} + v_{z,a} \mathbf{k}. \quad (6.55)$$

Si bien las simulaciones presentadas en este trabajo corresponden a cálculos en dos dimensiones, es decir, en el plano  $(x, y)$ , las representaciones SPH de los varios términos y ecuaciones se escribirán tanto en el caso general de tres dimensiones como en dos dimensiones.

### 6.3.2. Representación SPH del tensor de esfuerzos viscosos

En términos de sus componentes (5.108)-(5.113) el tensor de esfuerzos viscosos admite las siguientes representaciones SPH en tres y dos dimensiones.

---

<sup>1</sup>En este modelo de vdW la velocidad del sonido se calcula usando la expresión (5.9).

### Tres dimensiones

Las componentes del tensor de esfuerzos viscosos evaluadas en la posición de la partícula  $a$  tienen la forma

$$\mathcal{T}_a^{xx} = -p_a^{\text{kin}} + \bar{a}\rho_a^2 + \frac{2\eta}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \left( \zeta - \frac{2}{3}\eta \right) (\nabla \cdot \mathbf{v})_a, \quad (6.56)$$

$$\mathcal{T}_a^{yy} = -p_a^{\text{kin}} + \bar{a}\rho_a^2 + \frac{2\eta}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \left( \zeta - \frac{2}{3}\eta \right) (\nabla \cdot \mathbf{v})_a, \quad (6.57)$$

$$\mathcal{T}_a^{zz} = -p_a^{\text{kin}} + \bar{a}\rho_a^2 + \frac{2\eta}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b v_{z,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \left( \zeta - \frac{2}{3}\eta \right) (\nabla \cdot \mathbf{v})_a, \quad (6.58)$$

$$\mathcal{T}_a^{xy} = \mathcal{T}_a^{yx} = \frac{\eta}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left( v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} + v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \right), \quad (6.59)$$

$$\mathcal{T}_a^{xz} = \mathcal{T}_a^{zx} = \frac{\eta}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left( v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} + v_{z,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \right), \quad (6.60)$$

$$\mathcal{T}_a^{yz} = \mathcal{T}_a^{zy} = \frac{\eta}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left( v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} + v_{z,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right), \quad (6.61)$$

donde

$$(\nabla \cdot \mathbf{v})_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \left( v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} + v_{z,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \right), \quad (6.62)$$

y

$$\begin{aligned} v_{x,ba} &= v_{x,b} - v_{x,a}, \\ v_{y,ba} &= v_{y,b} - v_{y,a}, \\ v_{z,ba} &= v_{z,b} - v_{z,a}. \end{aligned} \quad (6.63)$$

### Dos dimensiones

En dos dimensiones solo tres componentes serán necesarias para describir el tensor de esfuerzos viscosos:

$$\mathcal{T}_a^{xx} = -p_a^{\text{kin}} + \bar{a}\rho_a^2 + \frac{(\eta + \zeta)}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \frac{(\zeta - \eta)}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \quad (6.64)$$

$$\mathcal{T}_a^{yy} = -p_a^{\text{kin}} + \bar{a}\rho_a^2 + \frac{(\eta + \zeta)}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} + \frac{(\zeta - \eta)}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \quad (6.65)$$

$$\mathcal{T}_a^{xy} = \mathcal{T}_a^{yx} = \frac{\eta}{\rho_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left( v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} + v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \right), \quad (6.66)$$

donde

$$(\nabla \cdot \mathbf{v})_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \left( v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right). \quad (6.67)$$

En las expresiones (6.56)-(6.58), (6.64) y (6.65) el término  $p^{\text{kin}}$  se refiere a la parte cinética de la ecuación de estado (5.3), es decir

$$p_a^{\text{kin}} = \frac{\rho_a \bar{k} T_a}{(1 - \rho_a \bar{b})}. \quad (6.68)$$

### 6.3.3. Representación SPH del tensor de Korteweg

La discretización de las componentes del tensor de Korteweg en las expresiones (5.98)-(5.103) requiere que se evalúen tanto el Laplaciano como derivadas mixtas de segundo orden de la densidad. Es bien sabido que formulaciones SPH basadas en segunda derivadas del kernel son altamente sensibles al desorden en la distribución de las partículas, como en realidad ocurre en presencia de campos de velocidad no uniforme. Sin embargo, siguiendo el procedimiento desarrollado por Yildiz et al. [102] es posible derivar representaciones SPH estables para la evaluación de segundas derivadas. En particular, una expresión estable para el Laplaciano de la densidad en la posición de la partícula  $a$  está dada por

$$(\nabla^2 \rho)_a = 2 \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} (\rho_a - \rho_b) \frac{1}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab}, \quad (6.69)$$

donde  $\mathbf{x}_{ab} = \mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b$ , mientras que segundas derivadas mixtas de la densidad pueden evaluarse establemente usando la representación

$$\left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^k \partial x^l} \right)_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} (\rho_a - \rho_b) \left( \frac{5x_{ab}^k x_{ab}^l}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2} - \delta^{kl} \right) \frac{1}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab}, \quad (6.70)$$

donde  $\delta^{kl}$  es la delta de Kronecker y  $k, l = 1, 2, 3$  son índices coordenados tal que  $x^1 = x$ ,  $x^2 = y$  y  $x^3 = z$ . La representación (6.70) es válida en tres dimensiones. En el caso bidimensional siguiendo los pasos expuestos por Yildiz et al. [102] se puede demostrar que

$$\left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^k \partial x^l} \right)_a = \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} (\rho_a - \rho_b) \left( \frac{4x_{ab}^k x_{ab}^l}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2} - \delta^{kl} \right) \frac{1}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab}. \quad (6.71)$$

#### Tres dimensiones

Usando las representaciones (6.69) y (6.70) se puede demostrar luego de algunos pasos algebraicos que las aproximaciones SPH para las componentes del tensor de

Korteweg en tres dimensiones son:

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_a^{xx} &= -\frac{K}{2} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \frac{(\rho_b + 2\rho_a - 3\rho_a^2/\rho_b)}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab} \\ &+ K \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} x_{ab} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a},\end{aligned}\quad (6.72)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_a^{yy} &= -\frac{K}{2} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \frac{(\rho_b + 2\rho_a - 3\rho_a^2/\rho_b)}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab} \\ &+ K \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} y_{ab} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a},\end{aligned}\quad (6.73)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_a^{zz} &= -\frac{K}{2} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \frac{(\rho_b + 2\rho_a - 3\rho_a^2/\rho_b)}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab} \\ &+ K \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} z_{ab} \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a},\end{aligned}\quad (6.74)$$

$$\mathcal{K}_a^{xy} = \mathcal{K}_a^{yx} = \frac{5}{2} K \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \frac{x_{ab} y_{ab}}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab},\quad (6.75)$$

$$\mathcal{K}_a^{xz} = \mathcal{K}_a^{zx} = \frac{5}{2} K \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \frac{x_{ab} z_{ab}}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab},\quad (6.76)$$

$$\mathcal{K}_a^{yz} = \mathcal{K}_a^{zy} = \frac{5}{2} K \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \frac{y_{ab} z_{ab}}{\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + \epsilon h^2} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab},\quad (6.77)$$

donde el parámetro  $\epsilon = 0,01$  se añade al denominador para evitar singularidades numéricas cuando el módulo de  $\mathbf{x}_{ab}$  se hace pequeño,

$$\begin{aligned}x_{ab} &= x_a - x_b, \\ y_{ab} &= y_a - y_b, \\ z_{ab} &= z_a - z_b,\end{aligned}\quad (6.78)$$

$$\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 = x_{ab}^2 + y_{ab}^2 + z_{ab}^2,\quad (6.79)$$

y

$$\mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab} = x_{ab} \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + y_{ab} \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} + z_{ab} \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a}.\quad (6.80)$$

## Dos dimensiones

En dos dimensiones solamente las componentes  $\mathcal{K}^{xx}$ ,  $\mathcal{K}^{yy}$  y  $\mathcal{K}^{xy}$  son necesarias para describir el tensor de Korteweg. La representación SPH de las componentes  $xx$  y  $yy$  tienen la misma forma de las expresiones (6.72) y (6.73), respectivamente. En cambio la componente  $xy$  difiere de la expresión (6.75) en que el factor multiplicativo  $(5/2)K$  debe reemplazarse por  $2K$  al frente de la sumatoria.

### 6.3.4. Representación SPH de la ecuación de movimiento

Si bien las simulaciones realizadas en este trabajo se refieren a cálculos en dos dimensiones, la representación SPH de las ecuaciones modificadas se presentarán en tres dimensiones ya que la reducción a dos dimensiones es obvia.

#### Tres dimensiones

Con el objeto de preservar consistencia variacional del presente esquema la divergencia del tensor de esfuerzos y del tensor de Korteweg en la ecuación de movimiento (5.86) se evalúa usando la representación simetrizada de la divergencia dada por la Ecuación (6.47) [97]. Las tres componentes de la aceleración en forma discreta estarán, por lo tanto, dadas por las siguientes representaciones SPH:

$$\begin{aligned}
\frac{dv_{x,a}}{dt} &= \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left[ \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xx}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xx}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \right] \\
&\quad + \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left[ \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xx}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xx}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial x_a} + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xy}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial y_a} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial z_a} \right] + 2\bar{a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial x_a}, \tag{6.81}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dv_{y,a}}{dt} &= \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left[ \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{yy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{yy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{yz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \right] \\
&\quad + \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left[ \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{yy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{yy}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial y_a} + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xy}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial x_a} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{yz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial z_a} \right] + 2\bar{a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial y_a}, \tag{6.82}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dz_{,a}}{dt} &= \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left[ \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{zz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{zz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{yz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right] \\
&\quad + \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left[ \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{zz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{zz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial z_a} + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial x_a} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{yz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial y_a} \right] + 2\bar{a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial z_a}, \tag{6.83}
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_a^{\prime,xx} &= \mathcal{T}_a^{xx} - \bar{a}\rho_a^2 \\ \mathcal{T}_a^{\prime,yy} &= \mathcal{T}_a^{yy} - \bar{a}\rho_a^2 \\ \mathcal{T}_a^{\prime,zz} &= \mathcal{T}_a^{zz} - \bar{a}\rho_a^2,\end{aligned}\tag{6.84}$$

y

$$W_{ab}^H = W(\|\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b\|, H),\tag{6.85}$$

con  $H \geq 2h$ . Debido a razones de estabilidad numérica es necesario distinguir entre las componentes de corto y largo alcance en la ecuación de estado de vdW. Tal distinción permite, además, modelar correctamente los efectos de tensión superficial. Dado que el término cohesivo,  $-\bar{a}\rho^2$ , en la ecuación de estado es responsable de las fuerzas atractivas de largo alcance entre las partículas SPH, y dado que en el caso particular de una gota líquida estas fuerzas se cancelan en el interior de la misma excepto cerca de su superficie, un aumento en la estabilidad interfacial requiere que se incremente el rango de interacción de las fuerzas cohesivas a una distancia  $H$  mayor que la distancia  $h$  que se usa para evaluar el resto de las fuerzas que entran en la ecuación de movimiento. Lo mismo es cierto para el tensor de Korteweg en las Ecuaciones (6.81)-(6.83) donde el supraíndice  $H$  indica que la densidad y los gradientes en la representación SPH de  $\mathbb{K}$  deben también calcularse usando una longitud de suavizado igual a  $H$  para reproducir correctamente la coexistencia líquido-vapor y evitar la aparición de fuerzas atractivas inestables entre partículas para ciertas densidades y temperaturas [19].

## Dos dimensiones

En dos dimensiones es necesario solamente retener las componentes de la aceleración en la dirección  $x$  y  $y$ . Por lo tanto, las representaciones de las componentes  $x$  y  $y$  de las ecuaciones de movimiento pueden derivarse directamente de las Ecuaciones (6.81) y (6.82), respectivamente, haciendo simplemente que  $\partial W_{ab}/\partial z_a = 0$  en ambas ecuaciones.

### 6.3.5. Representación SPH de la ecuación de energía interna

Como se hizo en la discretización de la ecuación de movimiento para la divergencia de  $\mathbb{T} + \mathbb{K}$ , el término  $(\mathbb{T} + \mathbb{K}) : \nabla \mathbf{v}$  en la ecuación de energía interna debe evaluarse en forma simetrizada para preservar la consistencia variacional del entero esquema SPH [97]. De esta manera la representación SPH de la ecuación de energía interna (5.87)

obedece a la expresión:

$$\begin{aligned}
\frac{dU_a}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left\{ \left[ \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xx}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xx}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right. \right. \\
& + \left. \left. \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \right] v_{x,ba} \right. \\
& + \left[ \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{yy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{yy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \right. \\
& + \left. \left. \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{yz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \right] v_{y,ba} \right. \\
& + \left[ \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{zz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{zz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} + \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{xz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} \right. \\
& + \left. \left. \left( \frac{\mathcal{T}'_a{}^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{T}'_b{}^{yz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right] v_{z,ba} \right\} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left\{ \left[ \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xx}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xx}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial x_a} + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xy}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial y_a} \right. \right. \\
& + \left. \left. \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial z_a} \right] v_{x,ba} \right. \\
& + \left[ \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{yy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{yy}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial y_a} + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xy}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial x_a} \right. \\
& + \left. \left. \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{yz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial z_a} \right] v_{y,ba} \right. \\
& + \left[ \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{zz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{zz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial z_a} + \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{xz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial x_a} \right. \\
& + \left. \left. \left( \frac{\mathcal{K}_a{}^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{K}_b{}^{yz}}{\rho_b^2} \right)^H \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial y_a} \right] v_{z,ba} \right\} \\
& + \bar{a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left( v_{x,ba} \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial x_a} + v_{y,ba} \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial y_a} + v_{z,ba} \frac{\partial W_{ab}^H}{\partial z_a} \right) \\
& + \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_a \rho_b} \frac{4\kappa_a \kappa_b}{(\kappa_a + \kappa_b)} \frac{(T_a - T_b)}{(\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + 0,01h^2)} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab} \\
& + K \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_a \rho_b} \left( \frac{d\rho_a}{dt} + \frac{d\rho_b}{dt} \right) \frac{(\rho_a - \rho_b)}{(\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + 0,01h^2)} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab}, \tag{6.86}
\end{aligned}$$

donde el penúltimo término en el lado derecho de la Ecuación (6.86) es la representación SPH de la conducción térmica,  $\nabla \cdot (\kappa \nabla T)$  y la derivada temporal de la densidad en el último término se evalúa usando el lado derecho de la Ecuación (6.50). En la formulación SPH estándar es de uso común evaluar el término de difusión de calor mediante la representación simetrizada [89]

$$\frac{dU_a}{dt} = - \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left( \frac{\mathbf{q}_a}{\rho_a^2} + \frac{\mathbf{q}_b}{\rho_b^2} \right) \cdot \nabla_a W_{ab}, \tag{6.87}$$

donde

$$\mathbf{q}_a = -\kappa (\nabla T)_a = -\kappa \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_b} (T_a - T_b) \nabla_a W_{ab}, \quad (6.88)$$

haciendo uso de la representación (6.27) para el gradiente de temperatura. Sin embargo, la aproximación (6.87) presenta serios problemas ya que es extremadamente sensible a la distribución de las partículas [103]. En efecto, pruebas anteriores con este método demostraron que los errores numéricos excedían a las fuerzas de presión por un orden de magnitud con la implicación que la difusión de calor a través de superficies libres se calculaba incorrectamente [85]. La amplificación del error se debía a la doble interpolación asociada con las Ecuaciones (6.87) y (6.88) [103]. Se demostró posteriormente que la conducción térmica evaluada según la representación en el penúltimo término de la Ecuación (6.86) producía resultados más estables y robustos en simulaciones hidrodinámicas [104].

### 6.3.6. Cálculo de la temperatura

Una vez que se conoce la energía interna para todas las partículas del sistema mediante la integración de la Ecuación (6.86) se procede a actualizar la temperatura en la posición de cada partícula de acuerdo con el siguiente procedimiento iterativo:

$$T_a^{(0)} = \frac{U_a^{n+1}}{U_a^n} T_a^n, \quad (6.89)$$

donde  $U_a^{n+1}$  es la energía interna calculada al paso de tiempo  $n + 1$  y  $U_a^n$  es el valor en el paso de tiempo anterior  $n$ . El valor de  $T_a^0$  es usado para iniciar el proceso iterativo:

$$U_a^{(m-1)} = U(\rho_a^{n+1}, T_a^{(m-1)}), \quad (6.90)$$

$$T_a^{(m)} = \frac{U_a^{n+1}}{U_a^{(m-1)}} T_a^{(m-1)}, \quad (6.91)$$

para  $m = 1, 2, \dots$ . La Ecuación (6.90) implica evaluar la energía interna usando la ecuación calórica de vdW (5.90), es decir

$$U_a^{(m-1)} = \frac{\xi}{2} \bar{k} T_a^{(m-1)} - \bar{a} \rho_a^{n+1}. \quad (6.92)$$

La iteración compuesta por las Ecuaciones (6.90) y (6.91) se repite hasta alcanzar convergencia, es decir, hasta que

$$|T_a^{(m)} - T_a^{(m-1)}| < \epsilon, \quad (6.93)$$

donde  $\epsilon$  es una tolerancia que se fija a conveniencia. En las simulaciones reportadas en este trabajo se tomó  $\epsilon = 1,0 \times 10^{-15}$ , lo que requirió un número de iteraciones  $m$  entre 20 y 25. Cuando se alcanza convergencia entonces  $T_a^{n+1} = T_a^{(m)}$ . Una vez que se actualiza la temperatura se actualiza también la presión usando la ecuación de estado (5.3)

$$p_a^{n+1} = \frac{\rho_a^{n+1} \bar{k} T_a^{n+1}}{(1 - \rho_a^{n+1} \bar{b})} - \bar{a} (\rho_a^{n+1})^2. \quad (6.94)$$



### 6.3.7. Representación SPH de la ecuación de entropía

En lo que concierne a la evolución del sistema la ecuación de entropía (5.88) no es necesaria ya que es equivalente a la ecuación de energía interna. Sin embargo, se resuelve la ecuación de entropía como una medida de la capacidad del esquema numérico de satisfacer la segunda ley de la termodinámica. Para mantener consistencia variacional con la ecuación de movimiento y de energía interna el término  $\mathbb{S} : \nabla \mathbf{v}$  se evalúa usando una representación simetrizada, mientras que el término de conducción térmica se evalúa usando la misma representación estable del penúltimo término en la Ecuación (6.86). De esta manera la representación SPH de la ecuación de entropía queda como

$$\begin{aligned}
\frac{dS_a}{dt} &= \frac{1}{2T_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} m_b \left\{ \left[ \left( \frac{\mathcal{S}_a^{xx}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{xx}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \left( \frac{\mathcal{S}_a^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{xy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right. \right. \\
&+ \left. \left( \frac{\mathcal{S}_a^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{xz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \right] v_{x,ba} \\
&+ \left[ \left( \frac{\mathcal{S}_a^{xy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{xy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \left( \frac{\mathcal{S}_a^{yy}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{yy}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right. \\
&+ \left. \left( \frac{\mathcal{S}_a^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{yz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \right] v_{y,ba} \\
&+ \left[ \left( \frac{\mathcal{S}_a^{xz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{xz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial x_a} + \left( \frac{\mathcal{S}_a^{yz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{yz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial y_a} \right. \\
&+ \left. \left. \left( \frac{\mathcal{S}_a^{zz}}{\rho_a^2} + \frac{\mathcal{S}_b^{zz}}{\rho_b^2} \right) \frac{\partial W_{ab}}{\partial z_a} \right] v_{z,ba} \right\} \\
&+ \frac{1}{T_a} \sum_{b=1}^{\mathcal{N}} \frac{m_b}{\rho_a \rho_b} \frac{4\kappa_a \kappa_b}{\kappa_a + \kappa_b} \frac{(T_a - T_b)}{(\|\mathbf{x}_{ab}\|^2 + 0,01h^2)} \mathbf{x}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab}, \tag{6.95}
\end{aligned}$$

donde

$$\mathcal{S}_a^{xx} = \mathcal{T}_a^{\prime,xx} + p_a^{\text{kin}}, \tag{6.96}$$

$$\mathcal{S}_a^{yy} = \mathcal{T}_a^{\prime,yy} + p_a^{\text{kin}}, \tag{6.97}$$

$$\mathcal{S}_a^{zz} = \mathcal{T}_a^{\prime,zz} + p_a^{\text{kin}}, \tag{6.98}$$

$$\mathcal{S}_a^{xy} = \mathcal{T}_a^{xy}, \tag{6.99}$$

$$\mathcal{S}_a^{xz} = \mathcal{T}_a^{xz}, \tag{6.100}$$

$$\mathcal{S}_a^{yz} = \mathcal{T}_a^{yz}. \tag{6.101}$$

La versión bidimensional de la Ec. (6.95) se obtiene haciendo  $\partial W_{ab}/\partial z_a = 0$ . De esta manera solamente las componentes  $xx$ ,  $yy$  y  $xy$  del tensor de viscosidad sobreviven. Más que el valor de la entropía, el interés es en el cambio de entropía para cada partícula en el tiempo, es decir

$$\Delta S_a^{n \rightarrow n+1} = S_a^{n+1} - S_a^n, \tag{6.102}$$

de manera que el cambio total de entropía del sistema es la suma de los cambios para todas las partículas

$$\Delta S_T^{n \rightarrow n+1} = \sum_{a=1}^{\mathcal{N}} \Delta S_a^{n \rightarrow n+1}, \tag{6.103}$$

que debe ser siempre  $\geq 0$  de acuerdo con la segunda ley de la termodinámica. En efecto, el cambio de entropía total es monitoreado para todas las simulaciones. Si en algún caso se encuentra que  $\Delta S_T^{n \rightarrow n+1} < 0$  entonces se procede a detener el cálculo.

### 6.3.8. Integración temporal

Las Ecuaciones (6.50), (6.81)-(6.83), (6.86) y (6.95) deben integrarse simultáneamente con la ecuación

$$\frac{d\mathbf{x}_a}{dt} = \mathbf{v}_a, \quad (6.104)$$

para la posición instantánea de las partículas, donde  $\mathbf{x}_a = (x_a, y_a, z_a)$  en tres dimensiones y  $\mathbf{x}_a = (x_a, y_a)$  en dos dimensiones.

En DualSPHysics la integración temporal de las ecuaciones se implementa a través de un método explícito usando bien sea un integrador de Verlet [105] o un esquema simpléctico. En este trabajo las simulaciones se llevaron a cabo usando la opción de un integrador de Verlet. En particular, este método de integración explícita es de uso común en dinámica molecular y asegura segundo orden de precisión a un bajo costo computacional ya que no requiere usar múltiples pasos para completar un intervalo de tiempo  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ . En este esquema la integración de las variables hidrodinámicas se calcula en el orden siguiente

$$\mathbf{x}_a^{n+1} = \mathbf{x}_a^n + \Delta t \mathbf{v}_a^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left( \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} \right)^n, \quad (6.105)$$

$$\rho_a^{n+1} = \rho_a^{n-1} + 2\Delta t \left( \frac{d\rho_a}{dt} \right)^n, \quad (6.106)$$

$$\mathbf{v}_a^{n+1} = \mathbf{v}_a^{n-1} + 2\Delta t \left( \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} \right)^n, \quad (6.107)$$

$$U_a^{n+1} = U_a^{n-1} + 2\Delta t \left( \frac{dU_a}{dt} \right)^n, \quad (6.108)$$

$$S_a^{n+1} = S_a^{n-1} + 2\Delta t \left( \frac{dS_a}{dt} \right)^n. \quad (6.109)$$

Nótese que la tasa de cambio en el tiempo de las variables hidrodinámicas en las Ecuaciones (6.105)-(6.109) se evalúan directamente en un tiempo intermedio  $t^n$  y está dada por el lado derecho de las Ecuaciones (6.50), (6.81)-(6.83), (6.86) y (6.95). Dado que la integración de Verlet se realiza en intervalos de tiempo escalonados, es decir, del tiempo  $t^{n-1}$  al tiempo  $t^{n+1}$  usando términos fuente evaluados en el tiempo intermedio  $t^n$ , puede ocurrir que luego de un número de pasos de tiempo las ecuaciones para la densidad, velocidad, energía interna y entropía se desacoplen entre sí, dando lugar a resultados que divergen de la solución física. Para evitar esta fuente de error, se sugiere alrededor de cada 40 o 50 pasos de tiempo efectuar la integración temporal de acuerdo

con el siguiente esquema alternativo

$$\mathbf{x}_a^{n+1} = \mathbf{x}_a^n + \Delta t \mathbf{v}_a^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left( \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} \right)^n, \quad (6.110)$$

$$\rho_a^{n+1} = \rho_a^n + \Delta t \left( \frac{d\rho_a}{dt} \right)^n, \quad (6.111)$$

$$\mathbf{v}_a^n = \mathbf{v}_a^{n-1} + \Delta t \left( \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} \right)^n, \quad (6.112)$$

$$U_a^{n+1} = U_a^n + \Delta t \left( \frac{dU_a}{dt} \right)^n, \quad (6.113)$$

$$S_a^{n+1} = S_a^n + \Delta t \left( \frac{dS_a}{dt} \right)^n. \quad (6.114)$$

### 6.3.9. Función kernel

Es bien sabido que las simulaciones SPH pueden ser afectadas por un tipo de inestabilidad, conocida como inestabilidad tensional, que hace que las partículas se aglomeren en pares, se acumulen formando ciertos patrones artificiales o inclusive se aparten entre sí. Este tipo de inestabilidad aparece frecuentemente en simulaciones de sólidos [106, 107] y de fluidos aún cuando la presión es positiva [108]. Muchos métodos han sido sugeridos en la literatura para remover o evitar la inestabilidad tensional [108, 109, 110, 95, 111, 112, 113]. Muchos de estos intentos han sido efectivos en algunos casos. Sin embargo, en realidad ninguno de ellos es efectivo en todos los casos [107]. El problema de la inestabilidad tensional fue estudiado con detalle por Swegle et al. [106] mediante un análisis de estabilidad de von Neumann en una dimensión, logrando establecer un criterio de estabilidad en términos de los esfuerzos sobre el material y de las segundas derivadas de la función kernel. En particular, una condición suficiente para que la inestabilidad se amplifique es que  $W''\Sigma > 0$ , donde  $W''$  es la segunda derivada del kernel y  $\Sigma$  se refiere al estado de tensión.

En la mayoría de las simulaciones con el método SPH es frecuente el uso de funciones kernel cuyas segundas derivadas cambian signo de negativo a positivo haciendo que  $W''\Sigma > 0$  independientemente del hecho que la tensión sea positiva o negativa. Mientras la segunda derivada del kernel cambie de signo dentro de su soporte compacto, será imposible remover o evitar la inestabilidad tensional. Con el propósito de remover la inestabilidad tensional en presencia de una presión positiva, Yang et al. [114] introdujeron el kernel hiperbólico

$$W(q, h) = \alpha_d \begin{cases} q^3 - 6q + 6 & \text{si } 0 \leq q < 1, \\ (2 - q)^3 & \text{si } 1 \leq q < 2, \\ 0 & \text{si } 2 \leq q, \end{cases} \quad (6.115)$$

donde  $\alpha_d = 1/(7h)$ ,  $1/(3\pi h^2)$  y  $15/(62\pi h^3)$  en una, dos y tres dimensiones, respectivamente. En particular, la función de interpolación (6.115), a diferencia de otros kernels tradicionales, posee segundas derivadas positivas en todo el soporte compacto. Esta propiedad asegura que las fuerzas repulsivas entre partículas SPH no decrecen a medida que las partículas se acercan entre sí durante una compresión. Por otro lado, dado que las segundas derivadas del kernel permanecen siempre positivas, si las partículas SPH se encuentran bajo tensión negativa, entonces la simulación es

estable de acuerdo al criterio  $W''\Sigma > 0$ . A medida que la tensión se vuelve negativa (es decir, presión positiva) en la simulación de fluidos viscosos y conductivos, como es el caso del modelado de la evaporación de gotas líquidas, el uso de la función kernel (6.115) garantiza que la simulación proceda libre de inestabilidades tensionales.

# Capítulo 7

## Modelos numéricos y resultados de las simulaciones

En este capítulo se describen los resultados obtenidos a partir de las simulaciones numéricas. El enfoque hidrodinámico empleado se basa en una formulación moderna del método SPH que incorpora los efectos de conducción térmica y un modelo termodinámico basado en la aproximación de campo medio de van der Waals. Por lo tanto, el modelo numérico propuesto es idóneo para investigar la evolución dinámica y térmica de sistemas que experimentan transiciones de fase líquido-vapor como, por ejemplo, la evaporación de gotas líquidas mediante procesos de descomposición espinodal, nucleación homogénea y vaporización explosiva por supercalentamiento. Si bien la evaporación de gotas líquidas por descomposición espinodal y nucleación homogénea ha sido estudiada en precedencia con el uso del método SPH [19, 22, 23, 24, 115], es cierto que mejorar la comprensión de los mecanismos físicos que intervienen durante las transiciones de fase líquido-vapor como también la teoría básica de la vaporización explosiva requiere de mucha más investigación tanto experimental como teórica. Por otro lado, es importante mencionar que a diferencia de todas las simulaciones SPH anteriores, en la presente formulación se incluye como fuente en la ecuación de energía interna el término no clásico  $\nabla \cdot (K \nabla \rho d\rho/dt)$  que representa la tasa de vaporización en la interface líquido-vapor y está relacionado con la dispersión de la fuente de calor latente en la zona interfacial. Dicho término es esencial para la correcta descripción de la evolución térmica de la interface y, por ende, de su estructura.

La formulación SPH implementada en este trabajo permite observar la evolución térmica de cada fase de forma directa. Por lo tanto, una parte sensible de las simulaciones tiene que ver con la implementación SPH de la conducción térmica. Con el objeto de evaluar la precisión y estabilidad del método empleado se propone una prueba de validación a diferentes resoluciones espaciales para la ecuación de transferencia de calor. Por otro lado, las pruebas de convergencia se centran en simular la dinámica de una gota a temperatura subcrítica e inicialmente cuadrada para evaluar simultáneamente los efectos de tensión superficial. Para diferentes resoluciones espaciales se simula la evolución de la gota hasta que ésta alcance equilibrio térmico y mecánico. Luego de definir la resolución necesaria para asegurar convergencia se procedió a generar gotas circulares en equilibrio con diferentes densidades y temperaturas subcríticas para producir las condiciones iniciales de los modelos de evaporación de gotas. Debido al carácter exploratorio del presente estudio las simulaciones se realizaron en dos dimensiones, dejando el caso tridimensional para

estudios posteriores en esta línea de investigación.

## 7.1. Parámetros iniciales

Para todas las simulaciones, a menos que se especifique lo contrario, se usaron los siguientes parámetros en la ecuación de estado de vdW en unidades reducidas:

$$\bar{a} = 2, \quad \bar{b} = 0,5 \quad y \quad \bar{k} = 1.$$

En estas unidades el punto crítico corresponde a  $\rho_{cr} = 2/3$ ,  $p_{cr} = 8/27$  y  $T_{cr} = 32/27 \approx 1,19$ . Para este fluido de vdW la densidad inicial,  $\rho_0$ , y la temperatura inicial,  $T_0$ , deben satisfacer las condiciones

$$\rho_0 < \frac{1}{\bar{b}} \quad y \quad \bar{k}T_0 > 2\bar{a}\rho(1 - \bar{b}\rho)^2, \quad (7.1)$$

para asegurar estabilidad termodinámica y positividad de la velocidad del sonido. En unidades reducidas el coeficiente de viscosidad dinámica  $\eta = 1$ , el coeficiente de segunda viscosidad  $\zeta = 0,1$  y el coeficiente de conducción térmica  $\kappa = 5$ . Un valor de  $\kappa = 5$  garantiza que la temperatura se ajuste rápidamente y reduce las fluctuaciones de densidad en la gota. Como en la mayoría de las simulaciones precedentes el coeficiente de capilaridad se toma como  $K = 0,1$ . Sin embargo, variar el coeficiente  $K$  de 0.1 a 1 produce pequeñas diferencias en los perfiles de densidad, presión y temperatura en equilibrio. En particular, las temperaturas de equilibrio tanto en la fase líquida como en la fase de vapor aumentan de manera imperceptible cuando se pasa de  $K = 0,1$  a 1 [22].

## 7.2. Prueba de validación

Como prueba de validación del módulo térmico se evalúa la precisión y estabilidad numérica de la ecuación de conducción térmica para resoluciones de  $10^4$ ,  $5 \times 10^4$ ,  $10^5$  y  $10^6$  partículas. El modelo de prueba consiste de dos líquidos homogéneos de densidad inicial  $\rho_0 = 1,5$  separados por una interface térmica plana como se muestra esquemáticamente en la Figura 7.1. La interface térmica se encuentra ubicada en  $x_m =$

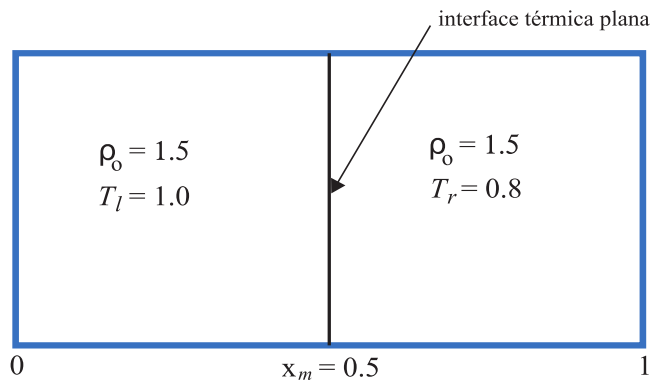


Figura 7.1: Dibujo esquemático que muestra el estado inicial del sistema para la prueba de validación de la ecuación de conducción térmica.

0,5 y separa los dos fluidos con temperaturas  $T_l = 1,0$  (compartimiento izquierdo) y  $T_r = 0,8$  (compartimiento derecho). Esta configuración inicial se escoge de manera que el sistema cae por arriba de la curva binodal. Esto implica que no ocurrirán durante la evolución efectos térmicos debido a una separación de fases. Inicialmente ambos fluidos están en reposo y en el curso de la evolución las velocidades se mantienen igual a cero.

La evolución del sistema admite una solución analítica para la temperatura en términos de la función error [104, 116]

$$T(x, t) = \bar{T} + \frac{\Delta T}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{x - x_m}{2\sqrt{\chi t}} \right), \quad (7.2)$$

donde  $\bar{T}$  es la temperatura media del sistema,  $\bar{T} = (T_l + T_r)/2$ ,  $\Delta T = |T_l - T_r|$  y  $\chi = \kappa/(\rho_0 c_p)$ , con  $\kappa = 0,01$  y  $c_p = 1$ . La energía interna está relacionada con la temperatura mediante la ecuación calórica de vdW (5.90). Por lo tanto, la solución para la energía interna estará dada también en términos de una función error que es similar a la Ecuación (7.2). Esta relación está determinada principalmente por la presión cohesiva ponderada por la densidad, que introduce ruido en la conversión de temperatura a energía interna cuando se usa una distribución de partículas regular o quasi-regular. Un aspecto importante de la conducción térmica es que disipa de manera instantánea las diferencias de temperatura debidas al ruido. Esta es la razón fundamental de por qué se prefiere inicializar la energía interna y no la temperatura. A los extremos del intervalo  $0 \leq x \leq 1$  se aplican condiciones de borde periódicas.

La Figura 7.2 muestra los perfiles numéricos de temperatura (símbolos) comparados con los perfiles analíticos dados por la Ecuación (7.2) (líneas sólidas) a cinco tiempos diferentes para el caso cuando  $N = 10^6$  partículas. Los símbolos se calculan dividiendo el dominio de cómputo (el eje  $x$ ) en un histograma de 50 barras en la dirección del eje  $x$ . De esta manera el símbolo representa un valor promedio de la temperatura entre todas las partículas que caen dentro del espesor de la barra. De acuerdo con la Figura 7.2, los perfiles numéricos reproducen bastante bien la solución analítica a todos los tiempos. El Cuadro 7.1 muestra la distancia entre ambas soluciones para los diferentes tiempos usando como métrica el error cuadrático medio

$$\operatorname{RMSE}(f) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (f_i^{\text{SPH}} - f_i^{\text{anal.}})^2}, \quad (7.3)$$

donde  $n$  se refiere al número de puntos de la solución numérica. El error cuadrático medio es equivalente a una norma  $L_2$  y provee una mejor medida del error ya que otorga más importancia a las diferencias mayores entre la solución numérica y analítica que a las diferencias menores. De este modo, el RMSE da una medida de la distancia entre el perfil numérico y el perfil analítico.

La Figura 7.3 muestra los perfiles de temperatura obtenidos con  $10^4$ ,  $2,5 \times 10^5$  y  $10^6$  partículas SPH (símbolos) comparados con la solución analítica (línea sólida) a

$t$	1	2	4	6	10
$\operatorname{RMSE}(T)$	$2,2 \times 10^{-4}$	$2,1 \times 10^{-4}$	$3,5 \times 10^{-4}$	$2,3 \times 10^{-4}$	$2,0 \times 10^{-4}$

Cuadro 7.1: Error cuadrático medio entre la solución numérica y la solución analítica referente a los perfiles de la Figura 7.2.

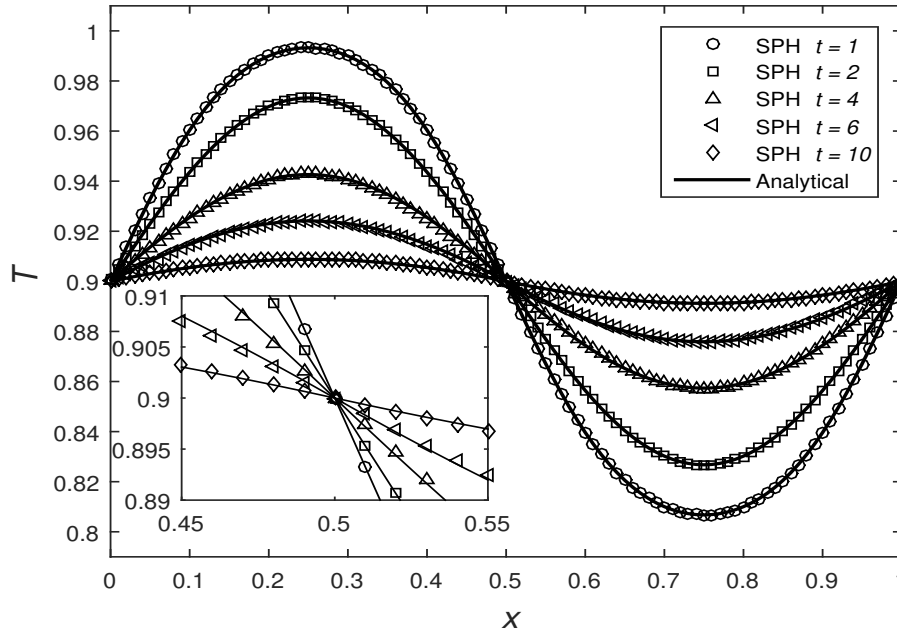


Figura 7.2: Perfiles de temperatura a diferentes tiempos para un fluido en reposo en presencia de una discontinuidad térmica en  $x_m = 0,5$  obtenidos con  $10^6$  partículas SPH usando condiciones de contorno periódicas. Los símbolos representan la solución numérica y la línea sólida es la solución analítica dada por la Ecuación (7.2). El recuadro en la parte inferior derecha muestra una ampliación de la región central de tamaño  $(x_m \pm 0,05, \bar{T} \pm 0,01)$ .

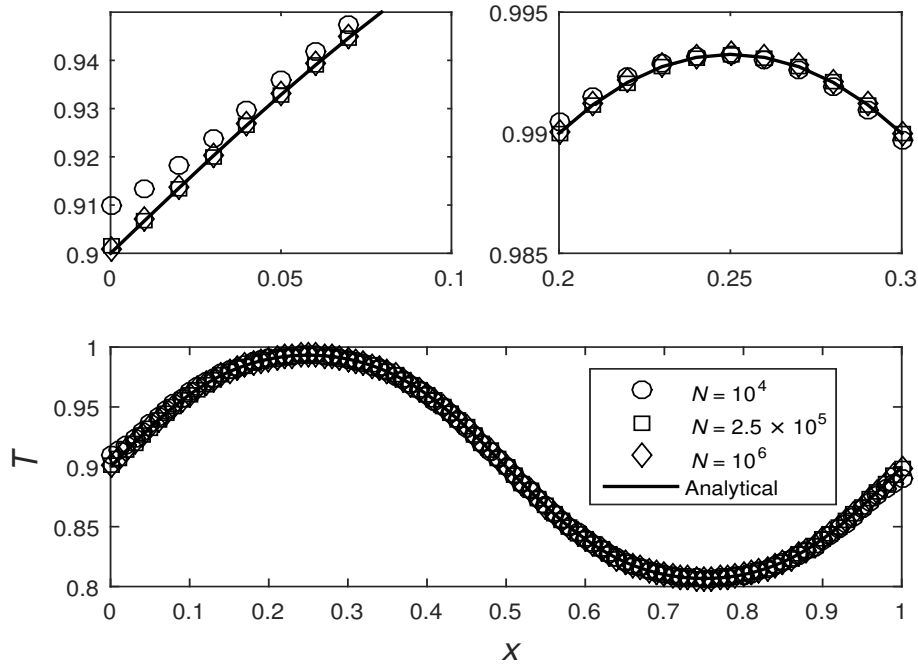


Figura 7.3: Comparación de la solución numérica (símbolos) con la solución analítica (línea sólida) a resoluciones de  $10^4$ ,  $2,5 \times 10^5$ ,  $10^6$  partículas SPH a un tiempo  $t = 1$ . Los dos recuadros superiores muestran los perfiles para  $0 \leq x \leq 0,1$  (recuadro izquierdo) y para  $0,2 \leq x \leq 0,3$  (recuadro derecho).



un tiempo  $t = 1$ . Los recuadros superiores muestran una amplificación de la solución para  $0 \leq x \leq 0,1$  (panel izquierdo) y  $0,2 \leq x \leq 0,3$  (panel derecho). Las simulaciones con  $2,5 \times 10^5$  y  $10^6$  partículas producen resultados muy similares, mientras que la simulación a menor resolución (con  $10^4$  partículas) produce un perfil que difiere de la solución analítica mayormente hacia los bordes del dominio de cómputo como se muestra claramente en el recuadro superior izquierdo de la Figura 7.3. Sin embargo, lejos de los bordes la solución con  $10^4$  partículas muestra resultados similares a los obtenidos a mayor resolución como se puede apreciar del recuadro superior de la Figura 7.3 en el intervalo  $0,2 \leq x \leq 0,3$ .

### 7.3. Pruebas de convergencia

Los modelos de convergencia consisten en calcular la evolución de gotas líquidas inicialmente fuera del equilibrio a temperaturas subcríticas y en microgravedad a diferentes resoluciones espaciales. Para modelar un estado fuera del equilibrio se define la gota inicial como un líquido cuadrado de lados  $L = 22,5$ . Esto se consigue dividiendo el área cuadrada ( $22,5 \times 22,5$ ) en pequeñas celdas cuadradas de lados  $\Delta^2 = \Delta x \times \Delta y$ , con  $\Delta x = \Delta y = \Delta s$ , y distribuyendo las partículas SPH en forma regular, es decir, colocándolas en el centro geométrico de cada celda. Al inicio las partículas se encuentran en reposo. La temperatura y densidad iniciales de la gota se determinan asignando a cada partícula una temperatura subcrítica  $T_0 = 0,2$  y una densidad  $\rho_0 = 1,777 \dots \approx 1,8$ . De esta manera se garantiza que la gota evolucione a un estado de equilibrio sin experimentar evaporación. La gota cuadrada se encuentra a su vez confinada en una caja cuadrada externa de lados  $L_{\text{ext}} = 60$ . En los bordes de la caja se aplican condiciones de frontera periódicas de manera que si una partícula del sistema sale por un lado de la caja a la misma partícula se le permite entrar por el lado opuesto de la caja externa. Este tipo de condiciones de frontera recobra importancia para el caso de una gota sujeta a procesos de evaporación donde pueden haber zonas de vapor que se desprenden de la gota expandiéndose radialmente. Sin embargo, en estas pruebas de validación la aplicación de condiciones de frontera periódicas es solo cosmética en cuanto los modelos evolucionan sin evaporar, debido a que las temperaturas permanecen suficientemente subcríticas durante la evolución.

La convergencia se mide comparando los perfiles de densidad, presión y temperatura como también las trayectorias de aproximación a la curva binodal en el plano  $T$  vs  $\rho$  a medida que se aumenta el número de partículas  $N$ . En el Cuadro 7.2 se listan los parámetros para cada modelo, es decir, el número total de partículas  $N$ , la distancia inicial entre partículas  $\Delta s$  y la masa de las partículas. Nótese que a medida que se aumenta  $N$  tanto  $\Delta s$  como  $m$  varían de manera tal que  $L$  y  $\rho_0$  permanecen invariantes,

$N$	$\Delta s$	$m$
$30 \times 30 = 900$	0.75	1.0
$60 \times 60 = 3600$	0.375	0.25
$80 \times 80 = 6400$	0.28125	0.140625
$90 \times 90 = 8100$	0.25	0.1111...
$100 \times 100 = 10000$	0.225	0.09

Cuadro 7.2: Parámetros usados en los cálculos de convergencia.

es decir, tanto el tamaño de la gota inicial como su densidad permanecen iguales para todos los casos. Esto garantiza que todos los modelos sean idénticos independientemente de la resolución inicial.

Se observa que las gotas experimentan una dinámica similar independientemente del número de partículas. Durante las primeras fases de la evolución las gotas inicialmente cuadradas se deforman hasta asumir una forma completamente circular debido a las fuerzas de tensión superficial. Durante este proceso tanto la energía cinética como el valor absoluto de la energía interna disminuyen progresivamente debido a la disipación viscosa y a la conducción térmica. Luego que las gotas se han circularizado, los procesos de disipación de la energía cinética e interna continúan lentamente hasta llegar a un estado de equilibrio termo-mecánico, donde la energía cinética tiende a cero y la energía interna tiende a un valor finito negativo. Esta parte ocupa la mayor parte de la evolución. En la Figura 7.4 se muestran los perfiles de densidad (recuadro superior izquierdo), de temperatura (recuadro superior derecho) y de presión (recuadro inferior izquierdo) de la gota en equilibrio para  $N = 900, 3600, 6400, 8100$  y  $10000$  partículas. Se puede apreciar que los perfiles de densidad, temperatura y presión se solapan con muy buena aproximación cuando  $N = 8100$  y  $10000$  partículas, indicando que ya para  $10000$  partículas se alcanza convergencia de los resultados. En el interior de la gota tanto la densidad como la temperatura son uniformes. El recuadro inferior derecho en la Figura 7.4 muestra las trayectorias seguidas por los modelos en el diagrama temperatura vs densidad. Todos los modelos evolucionan hacia un punto de equilibrio sobre la curva binodal a medida que se disipa la energía cinética independientemente de la resolución empleada. De nuevo se puede apreciar como las trayectorias para  $N = 8100$  y  $10000$  partículas son casi idénticas, implicando que efectivamente los modelos alcanzan convergencia para  $N \geq 8100$ . En base a estos resultados se usará una resolución espacial correspondiente a  $10000$  partículas para el resto de las simulaciones numéricas.

## 7.4. Modelos iniciales

Las condiciones iniciales para los modelos de evaporación corresponden a gotas circulares de radio  $R_d$  con temperaturas subcríticas y en equilibrio termo-mecánico. Luego de alcanzar equilibrio sobre la binodal, las gotas estarán caracterizadas por una densidad media  $\rho$ , temperatura media  $T$  y una superficie límite que separa al líquido del vacío. En este caso es de interés construir gotas circulares en equilibrio y en completa ausencia de procesos evaporativos.

Como en los modelos de validación, las gotas circulares se construyen partiendo de una configuración cuadrada compuesta de  $100 \times 100 = 10000$  partículas distribuidas uniformemente, cada una con una temperatura  $T_0 = 0,2$  y densidad inicial en el rango  $1,2 \leq \rho_0 \lesssim 1,8$ . Se consideran tres modelos de base con parámetros iniciales como se

Modelo	$\rho_0$	$\Delta s$	$\rho$	$T$	$R_d$
Modelo 1	1,777...	0.225	1.833	0.2967	12.73
Modelo 2	1,5	0.245	1.6805	0.5248	13.35
Modelo 3	1,2	0.274	1.4977	0.7324	14.33

Cuadro 7.3: Parámetros y modelos iniciales.

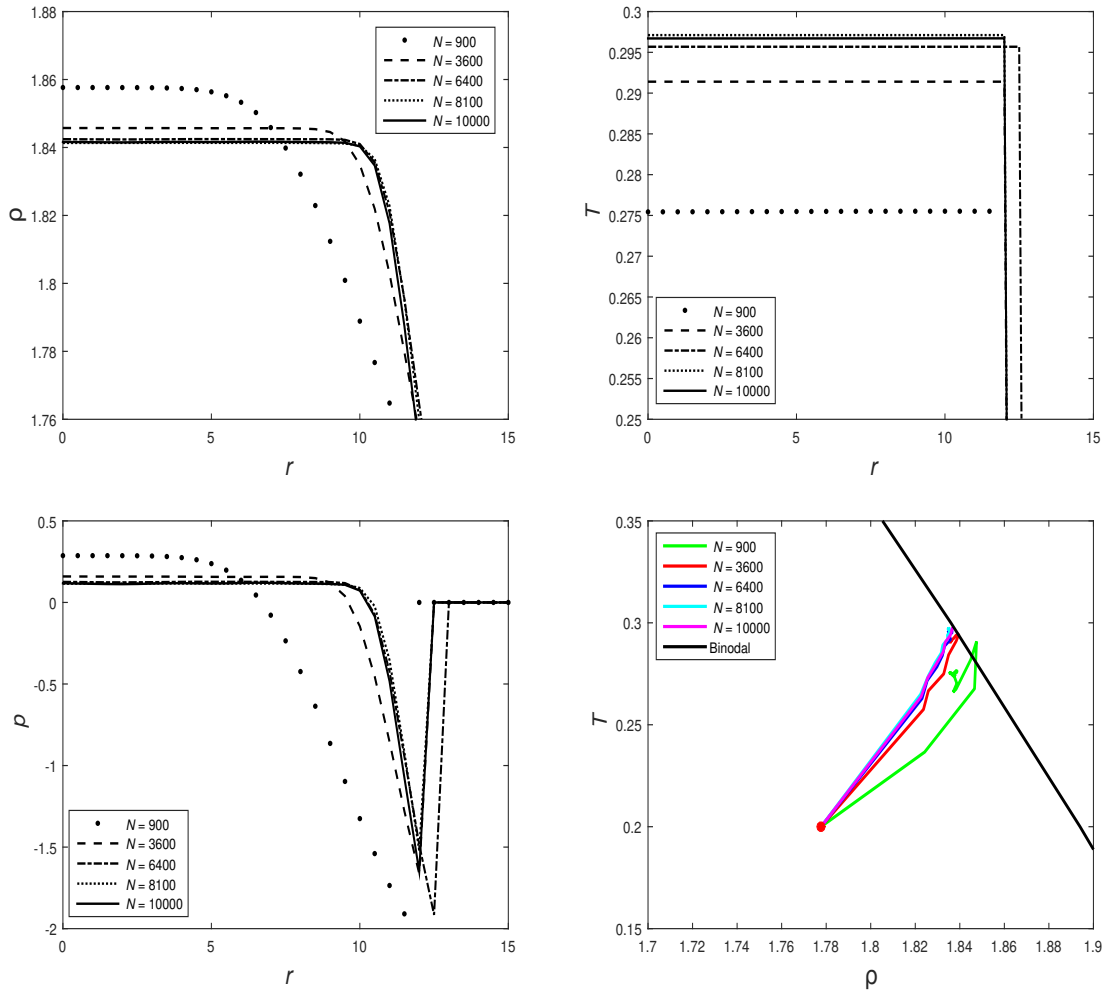


Figura 7.4: Perfiles de densidad (recuadro superior izquierdo), de temperatura (recuadro superior derecho) y de presión (recuadro inferior izquierdo) de la gota en equilibrio para  $N = 900, 3600, 6400, 8100$  y  $10000$  partículas SPH. El recuadro inferior derecho muestra una ampliación de las trayectorias seguidas por los modelos en el plano  $T$  vs  $\rho$ . La línea recta en negro corresponde a un segmento de la curva binodal. Todos los modelos evolucionan hasta alcanzar equilibrio termo-mecánico en un punto sobre la curva binodal. La gota con resolución de 900 partículas (trayectoria verde) alcanza la binodal con una temperatura menor que para los otros casos y comienza a oscilar de manera errática alrededor del equilibrio sin alcanzarlo exactamente. Para el mismo tiempo de evolución las gotas con  $N \geq 3600$  partículas alcanzan la binodal siguiendo trayectorias muy similares. Convergencia en las trayectorias se alcanza con  $N \geq 8100$  partículas, donde se observa claramente superposición de las trayectorias con el modelo de  $N = 10000$  partículas.

muestra en el Cuadro 7.3. Las separaciones  $\Delta s$  corresponden a valores tales que para los tres modelos las partículas poseen una masa  $m = 0,09$  en unidades reducidas. Las tres últimas columnas del Cuadro 7.3 muestran la densidad media,  $\rho$ , la temperatura media,  $T$ , y el radio de equilibrio de las gotas circulares resultantes.

La Figuras 7.5 y 7.6 muestran la evolución temporal de la energía cinética y de la energía interna, respectivamente. Durante el proceso de circularización por los efectos de tensión superficial las gotas experimentan un aumento de energía cinética con picos que corresponden al momento en que las gotas han adquirido una forma completamente circular. Luego la energía cinética decae rápidamente debido a la disipación viscosa hasta alcanzar asintóticamente el límite  $E_K \rightarrow 0$ . Cuando la energía cinética se hace despreciable y la energía interna alcanza un valor constante los valores de densidad y temperatura promedio oscilan alrededor de la curva binodal hasta posicionarse sobre ella como se puede observar en el recuadro inferior de la Figura 7.7 donde se muestra la trayectoria seguida por cada modelo en el diagrama de fase. La Figura 7.8 muestra el cambio de entropía,  $\Delta S$ , en el tiempo para los tres modelos del Cuadro 7.3. Durante el proceso de circularización por los efectos de tensión superficial el cambio de entropía aumenta hasta alcanzar un máximo. Como se puede observar del gráfico, el movimiento que lleva a la circularización de la gota es menos caótico en gotas de mayor densidad, lo que implica picos menores en el valor de  $\Delta S$ . Luego de la circularización, el cambio de entropía decrece progresivamente debido a los efectos de disipación tendiendo asintóticamente a cero hasta el punto de equilibrio. Esto demuestra que en ningún momento se viola la segunda ley de la termodinámica.

Las gotas cuadradas que comenzaron con una densidad inicial  $\rho_0 = 1,777\dots$  se convirtieron en gotas circulares en equilibrio con una temperatura media de  $\approx 1,5T_0$ , mientras las gotas que comenzaron con una menor densidad, es decir,  $\rho_0 = 1,5$  y  $1,2$ , resultaron en gotas más calientes con temperaturas subcríticas de  $\approx 2,5T_0$  y  $\approx 3,6T_0$ , respectivamente. En el recuadro superior de la Figura 7.7 se muestra la evolución temporal de la temperatura media hasta el punto de equilibrio sobre la curva binodal. El aumento inicial de la temperatura se encuentra asociado con un incremento en la energía interna a medida que la energía cinética se disipa, convirtiéndose en calor. Las imágenes en la Figura 7.9 muestran las gotas circulares en equilibrio para los tres modelos. Las imágenes corresponden a la densidad renderizada usando la herramienta de visualización ParaView Render Demo de DualSPHysics. Como era de esperarse las gotas inicialmente menos densas resultaron con radios mayores (véase el Cuadro 7.3).

Las condiciones iniciales para las simulaciones de evaporación de gotas se construyen exponiendo cada uno de los modelos de equilibrio del Cuadro 7.3 a un calentamiento uniforme donde la temperatura de las partículas se incrementa de manera instantánea. Esto es equivalente a colocar la gota en un baño térmico. Al calentarse repentinamente el sistema experimenta una transición instantánea a un estado fuera del equilibrio. Dado que al momento del calentamiento no todas las partículas que conforman la gota se encuentran exactamente a la misma temperatura, es necesario que al aplicar el calentamiento se calcule el incremento de temperatura para cada partícula,  $\Delta T_a = T_0 - T_a$ , donde  $T_a$  es la temperatura inicial en equilibrio asociada con la partícula  $a$  y  $T_0$  se refiere ahora a la temperatura uniforme de calentamiento. De esta manera después del calentamiento todas las partículas tendrán la misma temperatura

$$T_a \rightarrow T_a + \Delta T_a. \quad (7.4)$$

La Figura 7.10 muestra el estado inicial de los modelos en el diagrama de fase  $T$ - $\rho$  para

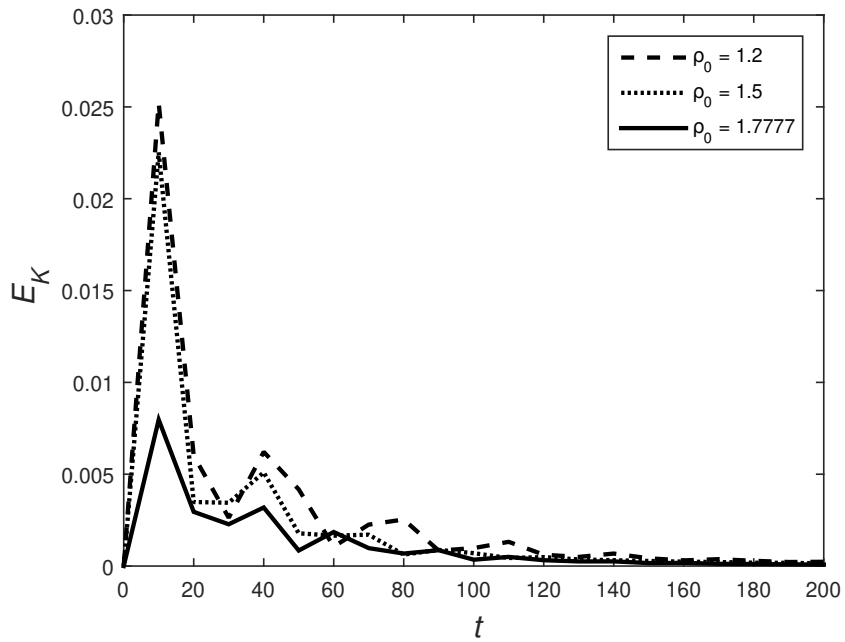


Figura 7.5: Evolución temporal de la energía cinética para los tres modelos del Cuadro 7.3. En los tres casos la energía cinética disminuye a medida que se disipa tendiendo a cero cuando la gota alcanza su estado de equilibrio.

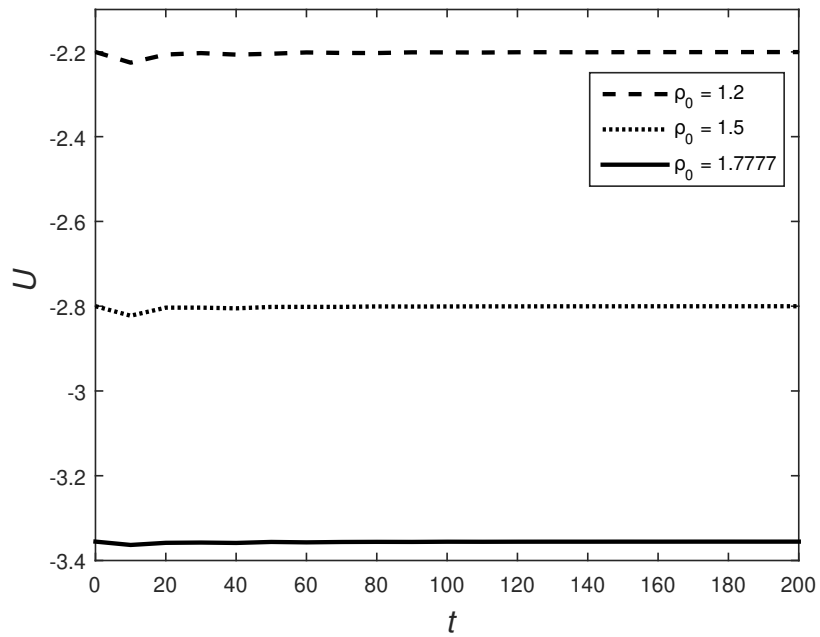


Figura 7.6: Evolución temporal de la energía interna para los tres modelos del Cuadro 7.3. En los tres casos la energía interna tiende asintóticamente a un valor negativo cuando la gota circular alcanza su estado de equilibrio.

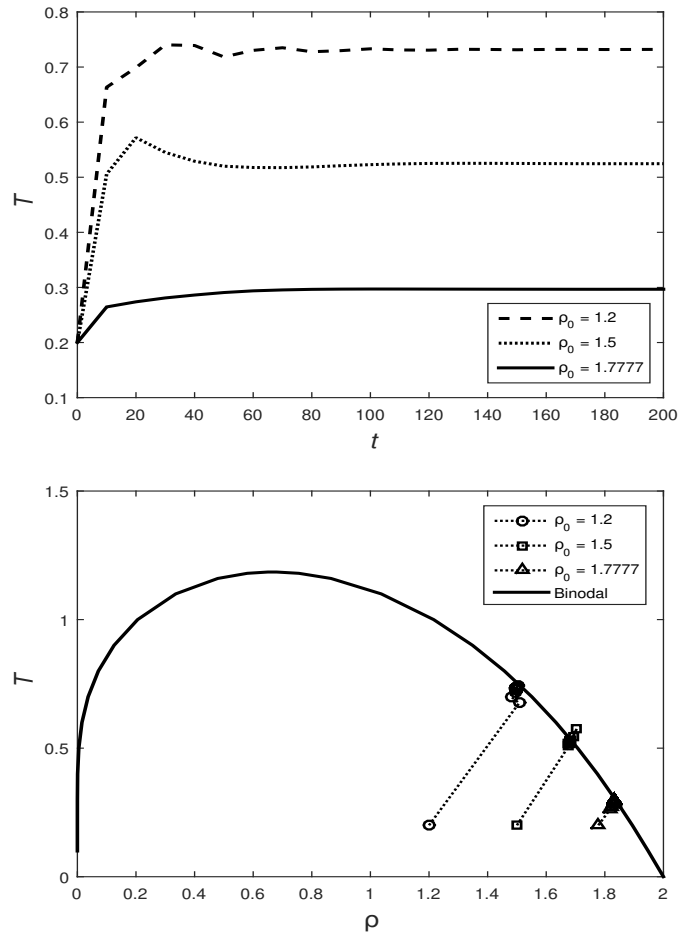


Figura 7.7: Evolución de la temperatura (recuadro superior) y trayectorias en el diagrama temperatura-densidad para los tres modelos de gotas del Cuadro 7.3 (recuadro inferior).

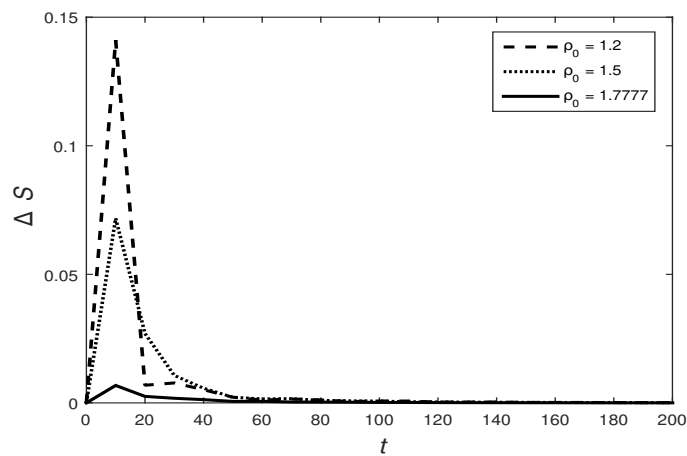


Figura 7.8: Cambio de entropía como función del tiempo para los tres modelos del Cuadro 7.3.

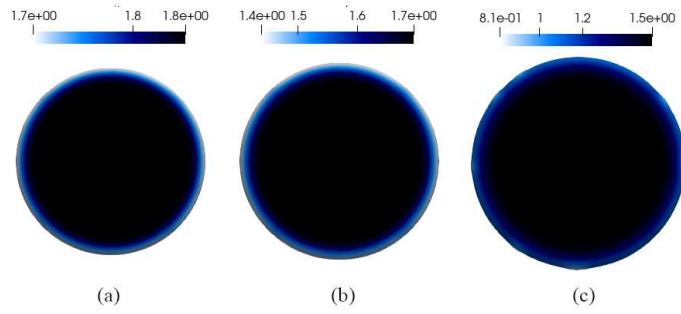


Figura 7.9: Imagen renderizada de las tres gotas en equilibrio termo-mecánico que se usarán como condiciones iniciales para las simulaciones de la evaporación de gotas por calentamiento. (a) Gota correspondiente al Modelo 1, (b) al Modelo 2 y (c) al Modelo 3 del Cuadro 7.3.

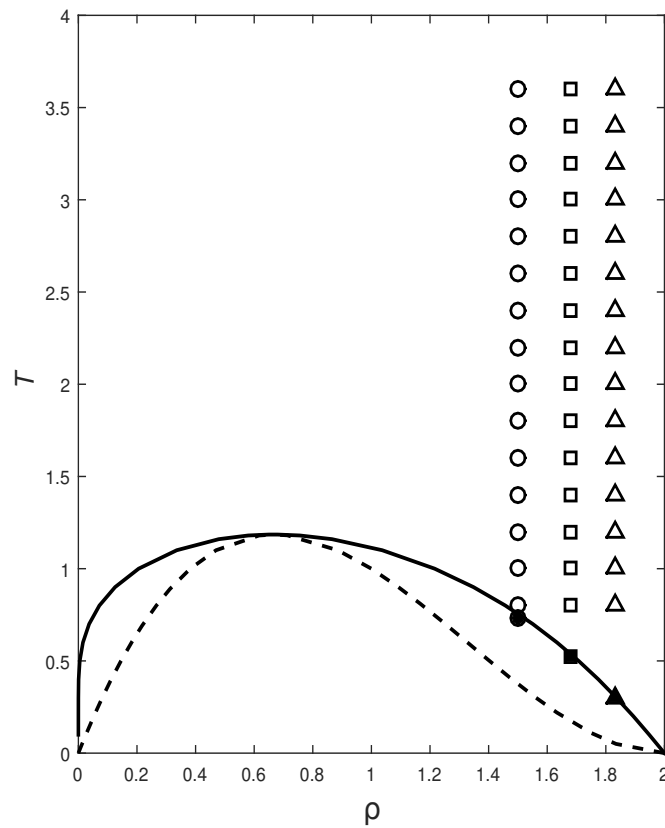


Figura 7.10: Diagrama de fase que muestra la curva binodal (línea sólida) y la curva espinodal (línea segmentada) para este fluido de van der Waals. Los símbolos negros denotan las posiciones de equilibrio sobre la binodal de las gotas que se muestran en la Figura 7.7. Los símbolos a la derecha sobre la binodal representan las condiciones iniciales de las gotas al momento del calentamiento. Los triángulos blancos corresponden al Modelo 1, los cuadrados blancos al Modelo 2 y los círculos blancos al Modelo 3 para diferentes temperaturas de calentamiento en el intervalo  $0,8 \leq T_0 \leq 3,6$ .

un fluido de van der Waals. Los símbolos muestran las temperaturas de calentamiento,  $T_0$ , y las densidades iniciales,  $\rho_0$ , en el diagrama de fase. Los tres modelos del Cuadro 7.3 definen tres secuencias de modelos para temperaturas de calentamiento en el intervalo  $0,8 \leq T_0 \leq 3,6$ . Como se puede apreciar del Cuadro 7.3, la densidad inicial para cada una de estas secuencias se obtuvo manteniendo la masa de las partículas igual a  $m = 0,09$  y variando la distancia inicial entre partículas. El área en la Figura 7.10 por debajo de la curva espinodal (línea segmentada) corresponde a una región mecánicamente inestable, donde  $(\partial p / \partial \rho)_T < 0$  y el fluido se separa espontáneamente en dos fases debido a la descomposición espinodal. La región entre las curvas espinodal y binodal (línea sólida) corresponde a una región metaestable, es decir, mecánicamente estable pero termodinámicamente inestable. Como se describió en el Capítulo 5, la curva binodal se encuentra determinada por la condición de que la energía libre de Gibbs es la misma para ambas fases. Por debajo de esta línea  $T < T_{cr}$  y las isothermas de la ecuación de vdW se deforman con la presión, alcanzando un mínimo y luego un máximo (bucle de vdW) al aumentar el volumen específico. Estos dos extremos caen sobre la curva espinodal y la intersección de una de estas isothermas con la curva binodal a través del bucle define una línea horizontal tal que las áreas encerradas por esta línea y las presiones espinodales son exactamente iguales (construcción de Maxwell, véase la Figura 5.3). La línea horizontal fija la presión de coexistencia y sus intersecciones con la curva binodal corresponden a estados de mínima energía libre y definen así los volúmenes de equilibrio para la coexistencia líquido-vapor a diferentes temperaturas.

## 7.5. Evaporación de gotas

Las tres gotas en equilibrio termo-mecánico que se muestran en la Figura 7.9 fueron usadas en este trabajo como condiciones iniciales para estudiar los detalles de la separación de fases cuando las gotas son sometidas a un calentamiento uniforme para valores de temperatura en el intervalo  $0,8 \leq T_0 \leq 3,6$ , como se puede apreciar de la Figura 7.10. Se estudia la dependencia de los resultados con la densidad del líquido al aumentar progresivamente la temperatura de calentamiento. En general, al incrementar la temperatura de calentamiento la energía térmica de la gota aumenta de manera progresiva y la separación de fase líquido-vapor se vuelve siempre más intensa, encontrándose cinco modos de vaporización de acuerdo a la morfología observada durante la evolución de los modelos.

Dependiendo de la cantidad de calor aplicado, las gotas pueden experimentar: (1) evaporación superficial, en cuyo caso la configuración final, cuando ambas fases alcanzan el punto de equilibrio sobre la binodal, consiste de una gota de menor tamaño circundada por una atmósfera de vapor; (2) nucleación transitoria, cuando la gota desarrolla en su interior una burbuja de vapor la cual se expande momentáneamente y luego colapsa sobre sí misma hasta desaparecer. En este caso la evolución puede o no estar acompañada por evaporación superficial; (3) fragmentación lenta de la gota que ocurre cuando ésta nuclea de nuevo una burbuja de vapor, la cual se expande hasta romper la capa superficial de líquido propiciando la fragmentación de ésta en un pequeño número de gotas de menor tamaño. En este caso, los fragmentos permanecen prácticamente en reposo o se expanden lentamente de manera radial, de allí el nombre de fragmentación lenta; (4) fragmentación violenta o rápida, cuando por un proceso de nucleación similar al descrito en el punto (3), la expansión de la burbuja ocurre mucho



más rápidamente, transmitiendo parte de su energía cinética disponible a los fragmentos líquidos, los cuales se dispersan radialmente hacia afuera muy rápidamente; y (5) vaporización explosiva, cuando la gota alcanza o excede el límite de supercalentamiento. En este caso la burbuja interna crece violentamente conduciendo a una explosión de la gota y a la expulsión rápida hacia afuera de un gran número de gotas diminutas acompañadas a su alrededor por pequeñas nubes o parches de vapor.

### 7.5.1. Evaporación superficial

La evaporación de las capas superficiales de una gota representa posiblemente el proceso de descomposición espinodal más simple, en el cual las moléculas líquidas en la superficie de la gota se desprenden de esta convirtiéndose en partículas de vapor. Como se mencionó anteriormente, que la evaporación de la gota ocurra o no, no depende solo de la temperatura, sino también de la densidad del líquido. Es importante subrayar aquí que, en todos los trabajos precedentes [24, 115], las simulaciones partían de una configuración de gota cuadrada. En esos casos la configuración inicial se encontraba ya en un estado fuera del equilibrio. Por el contrario, en el presente trabajo las condiciones iniciales corresponden a gotas en equilibrio que dejan de estarlo al aplicársele un calentamiento, lo que conlleva no solo a una situación más real, sino que también permite cuantificar mejor los efectos del calentamiento mismo sobre configuraciones inicialmente en equilibrio. Por otro lado, como se observa en la Figura 7.10, en este trabajo consideraremos solo calentamientos con temperaturas superiores a  $T_0 = 0,8$ , cuyos valores se posicionan hacia la región líquida y por encima de la curva binodal. Es importante mencionar que durante el proceso de evaporación superficial una parte del vapor se separa de la gota y se aleja radialmente de ésta, mientras otra parte permanece alrededor de la gota conectada mediante una interface difusa.

Evidentemente la respuesta de una gota líquida al calentamiento instantáneo y uniforme depende de la densidad del líquido que compone la gota, de su temperatura media y de la temperatura de calentamiento a la cual es sometida. Por ejemplo, la gota líquida con densidad  $\rho \approx 1,4977$  y temperatura  $T \approx 0,7324$ , correspondiente al Modelo 3 del Cuadro 7.3, evolucionó calentándose sin experimentar evaporación superficial cuando se le sometió a temperaturas de calentamiento entre  $T_0 = 0,8$  y  $0,9$ . Lo mismo ocurrió para calentamientos en el rango de temperaturas  $0,8 \leq T_0 \lesssim 1,2$  cuando  $\rho \approx 1,6805$  y  $T \approx 0,5248$  (Modelo 2) y  $0,8 \leq T_0 \lesssim 1,4$  cuando  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  (Modelo 1). Estos modelos evolucionaron hasta alcanzar un punto de equilibrio en la binodal sin producir vapor. Los resultados indican que mayor es la densidad de la gota, más alta será la temperatura de calentamiento necesaria para iniciar la evaporación de las capas superficiales de la misma. Esto es cierto aún cuando a mayor densidad las gotas en equilibrio se forman con temperaturas subcríticas menores (veáse el Cuadro 7.3). En efecto, se observó evaporación superficial en gotas con  $\rho \approx 1,4977$  en el rango de temperaturas  $1,0 \lesssim T_0 \lesssim 1,4$ , mientras que al aumentar la densidad a  $\rho \approx 1,6805$  y  $\approx 1,833$  se observó evaporación superficial para temperaturas en los intervalos  $1,3 \lesssim T_0 \lesssim 1,5$  y  $1,5 \lesssim T_0 \lesssim 1,8$ , respectivamente. En todos los casos las gotas alcanzaron equilibrio termo-mecánico con una atmósfera de vapor a su alrededor que permaneció conectada con la fase líquida mediante una interface difusa. En ningún caso se observaron parches de vapor despegándose de la superficie de la gota y expandiéndose radialmente hacia afuera.

La Figura 7.11 muestra las configuraciones finales de gotas en equilibrio con su

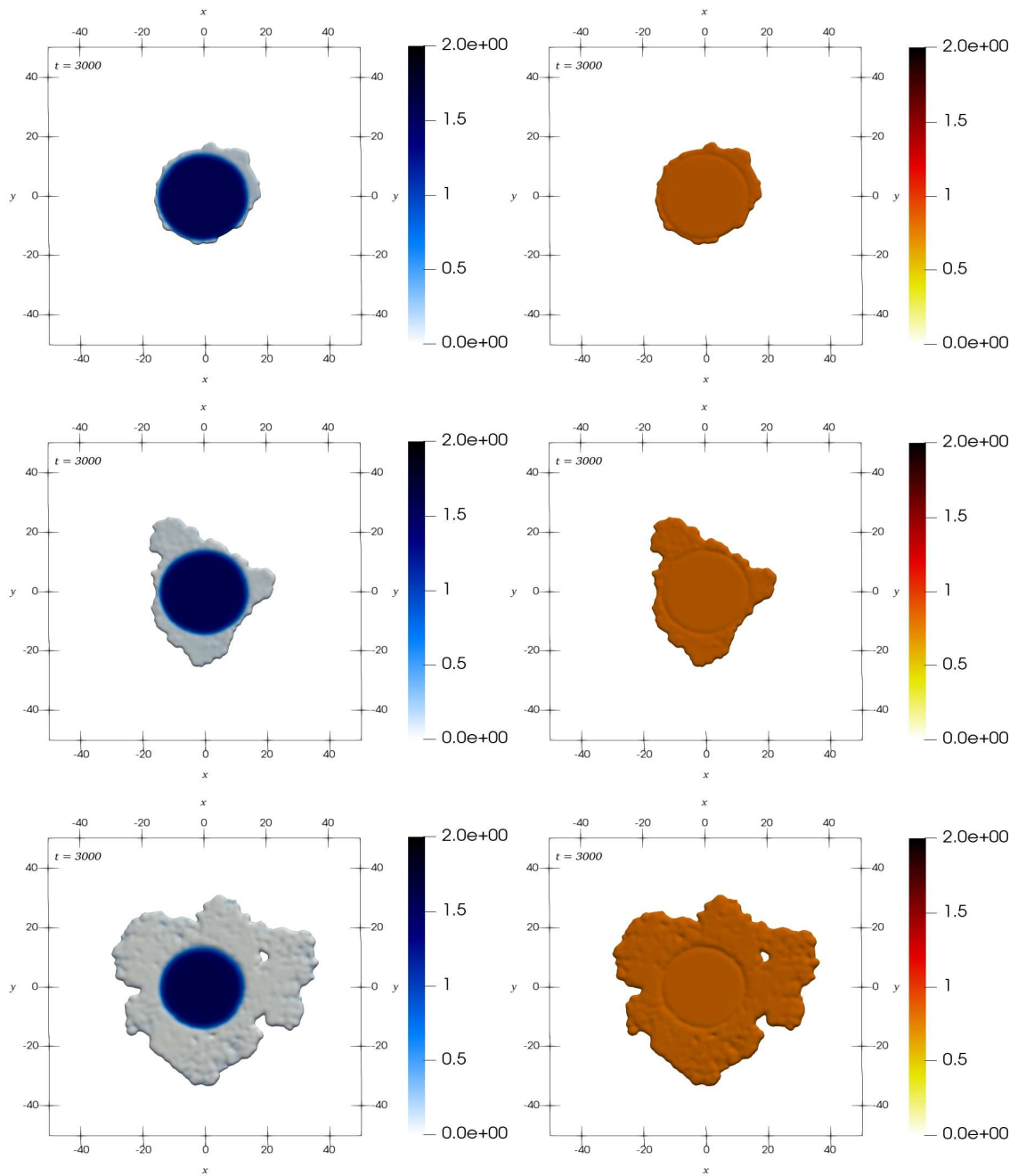


Figura 7.11: Gotas en equilibrio con su atmósfera de vapor a un tiempo  $t = 3000$  en unidades reducidas durante la evolución del modelo 1 ( $\rho \approx 1,833$ ,  $T \approx 0,2967$ ; paneles superiores), del modelo 2 ( $\rho \approx 1,6805$ ,  $T \approx 0,5248$ ; paneles intermedios) y del modelo 3 ( $\rho \approx 1,4977$ ,  $T \approx 0,7324$ ; paneles inferiores) para calentamientos con temperaturas  $T_0 = 1,8$ ,  $1,4$  y  $1,2$ , respectivamente. Los paneles a la izquierda corresponden a la densidad renderizada, mientras los paneles a la derecha muestran la distribución de temperatura. Las barras de colores a la izquierda de cada recuadro indican los contrastes de densidad y temperatura. Todos los números están en unidades reducidas.

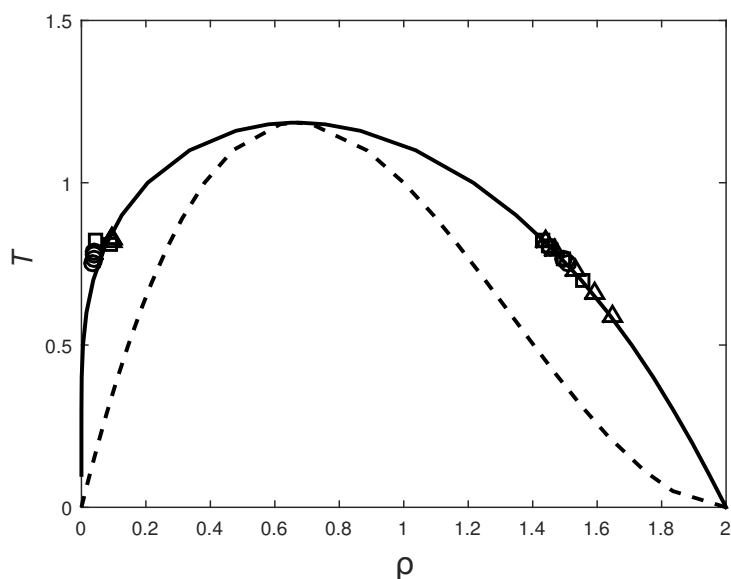


Figura 7.12: Diagrama de fase que muestra las densidades y temperaturas en equilibrio para todos los modelos que experimentaron evaporación superficial y nucleación homogénea transitoria sin fragmentar. Los símbolos sobre la curva binodal son los mismos usados en la Figura 7.10 para indicar las condiciones iniciales de calentamiento. La línea sólida corresponde a la curva binodal, mientras la línea segmentada dibuja la curva espinodal para este fluido de vdW.

atmósfera de vapor para los modelos 1 ( $\rho \approx 1,833$ ,  $T \approx 0,2967$ ), 2 ( $\rho \approx 1,6805$ ,  $T \approx 0,5248$ ) y 3 ( $\rho \approx 1,4977$ ,  $T \approx 0,7324$ ) correspondientes a temperaturas de calentamiento  $T_0 = 1,8$ ,  $1,4$  y  $1,2$ , respectivamente. La columna de la izquierda corresponde a la densidad renderizada y la columna de la derecha corresponde a la temperatura renderizada. Las barras de colores a la derecha de cada gráfico indica los contrastes de densidad y temperatura para cada modelo. Las simulaciones se siguieron hasta un punto en el cual tanto la fase líquida como la fase de vapor se encuentran coexistiendo en equilibrio, es decir, hasta cuando los valores de densidad y temperatura del líquido y del vapor se posicionan sobre la binodal como se muestra en la Figura 7.12. Es preciso mencionar en este espacio que cuando la gota correspondiente al Modelo 3 es sometida a temperaturas de calentamiento en el intervalo  $1,5 \lesssim T_0 \lesssim 1,8$ , ésta evoluciona a un estado de equilibrio evaporando el líquido en su capas más externas luego de haber experimentado inicialmente la formación de una burbuja transitoria en su interior. Sin embargo, dado que la burbuja crece y se contrae sobre sí misma muy rápidamente, es decir, en una escala de tiempo despreciable con respecto al tiempo necesario para llegar al equilibrio, se prefirió en estos casos ignorar el proceso de nucleación y clasificar estos modelos como si hubiesen experimentado solo evaporación superficial.

Los perfiles radiales de densidad, presión y temperatura para las configuraciones en equilibrio de la Figura 7.11 se muestran en la Figura 7.13. Los perfiles representan variaciones promedio de dichas cantidades a través del sistema líquido-vapor. Por ejemplo, en cada uno de estos casos los perfiles radiales se obtuvieron dividiendo al sistema en cascarones concéntricos delgados alrededor de su centro de masa. De esta manera el valor de densidad, presión y temperatura a una distancia  $r$  del centro de masa

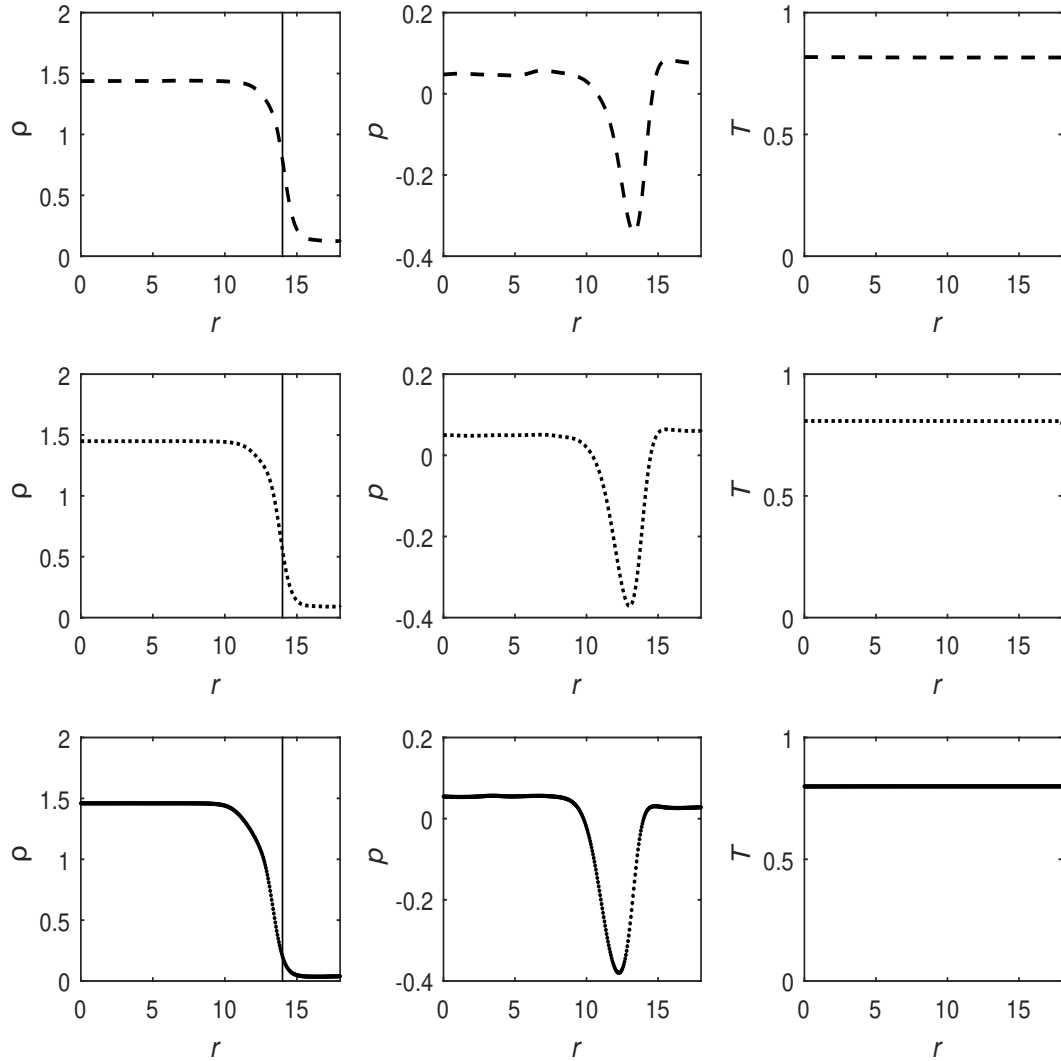


Figura 7.13: Perfiles radiales de densidad, presión y temperatura para los modelos de equilibrio de la Figura 7.11. Los recuadros superiores corresponden al modelo 1, los intermedios al modelo 2 y los inferiores al modelo 3. La línea vertical en los gráficos de densidad marcan la posición del radio equimolar de acuerdo con la expresión (7.5). Todos los números están en unidades reducidas.

se obtiene promediando dichos valores sobre todas las partículas que caen dentro del cascarón centrado en el radio  $r$ . La línea vertical en los gráficos de densidad muestran la posición del radio de la superficie equimolar,  $R$ , que separa el líquido del vapor, el cual en dos dimensiones está definido por la relación

$$R^2 = -\frac{1}{\rho_l - \rho_v} \int_0^\infty r^2 \frac{d\rho}{dr} dr, \quad (7.5)$$

donde  $d\rho/dr$  es la variación radial de la densidad a través de la interface, es decir, a lo largo de la zona de transición líquido-vapor.

Viniendo de la fase líquida, el líquido se sobrecalienta a través de la interface y la presión toma valores negativos con respecto a la presión de coexistencia (que yendo de una fase a la otra define la línea de unión de Maxwell). El sobrecalentamiento es seguido por una región de subenfriamiento antes de penetrar en la fase gaseosa. Esto define dos extremos, donde el primer extremo viniendo de la fase líquida corresponde a un límite de estabilidad para el estado líquido, donde el líquido se calienta sin evaporarse, mientras que el otro extremo corresponde a un límite de estabilidad para el vapor, donde el vapor se enfría sin condensarse. A cada lado de la interface, la temperatura de la gota líquida es aproximadamente igual a la temperatura de la atmósfera de vapor, indicando que tanto la gota como la atmósfera de vapor se encuentran en equilibrio térmico. En los gráficos de temperatura de la Figura 7.13 se muestra que tanto el líquido como el vapor se encuentran en equilibrio térmico, mientras que la temperatura promedio a través del volumen de la interface también corresponde a la temperatura de equilibrio. La forma de la variación de la presión a través de la interface líquido-vapor es típica de lo que se conoce como bucle o ciclo de vdW.

## 7.5.2. Nucleación homogénea transitoria

Cuando las gotas en equilibrio se someten a temperaturas en los intervalos  $1,7 \lesssim T_0 \lesssim 2,0$  ( $\rho_0 \approx 1,833$ , triángulos en la Figura 7.10),  $1,5 \lesssim T_0 \lesssim 1,8$  ( $\rho_0 \approx 1,6805$ , cuadrados en la Figura 7.10) y  $1,5 \lesssim T_0 \lesssim 1,9$  ( $\rho_0 \approx 1,4977$ , círculos en la Figura 7.10), las gotas experimentan evaporación espontánea por nucleación homogénea mediante la formación de una burbuja de vapor en su interior. Debido a que el calentamiento externo se aplica de manera uniforme, en todos los casos la burbuja es circular y se forma alrededor del centro geométrico de la gota. En experimentos de gotas inmersas en una columna de líquido caliente e inmiscible con un gradiente de temperatura en la dirección de ascenso de la gota se observó que las gotas nucleaban en los bordes y no de manera simétrica debido a que en este caso el calentamiento ocurría de manera no uniforme [28, 30]. Sin embargo, en condiciones de microgravedad y bajo los efectos de un calentamiento uniforme, se espera que la gota experimente la formación de una burbuja en su interior y no cerca de su superficie como ocurre cuando el calentamiento es aplicado no uniformemente. Esto se ha podido confirmar parcialmente por experimentos más recientes donde se observó que una solución electrolítica calentada por efecto Joule en un nanoporo de estado sólido, alcanzaba temperaturas suficientemente altas para producir la formación de una burbuja en el centro del poro [117]. El proceso de nucleación ocurre cuando la gota es llevada fuera del equilibrio en la región metaestable del diagrama de fases entre la curva binodal y la curva espinodal, como se muestra en la Figura 7.10. En esa región el sistema es inestable desde el punto de vista termodinámico con respecto a fluctuaciones de amplitud finita. En el caso de los modelos en la Figura

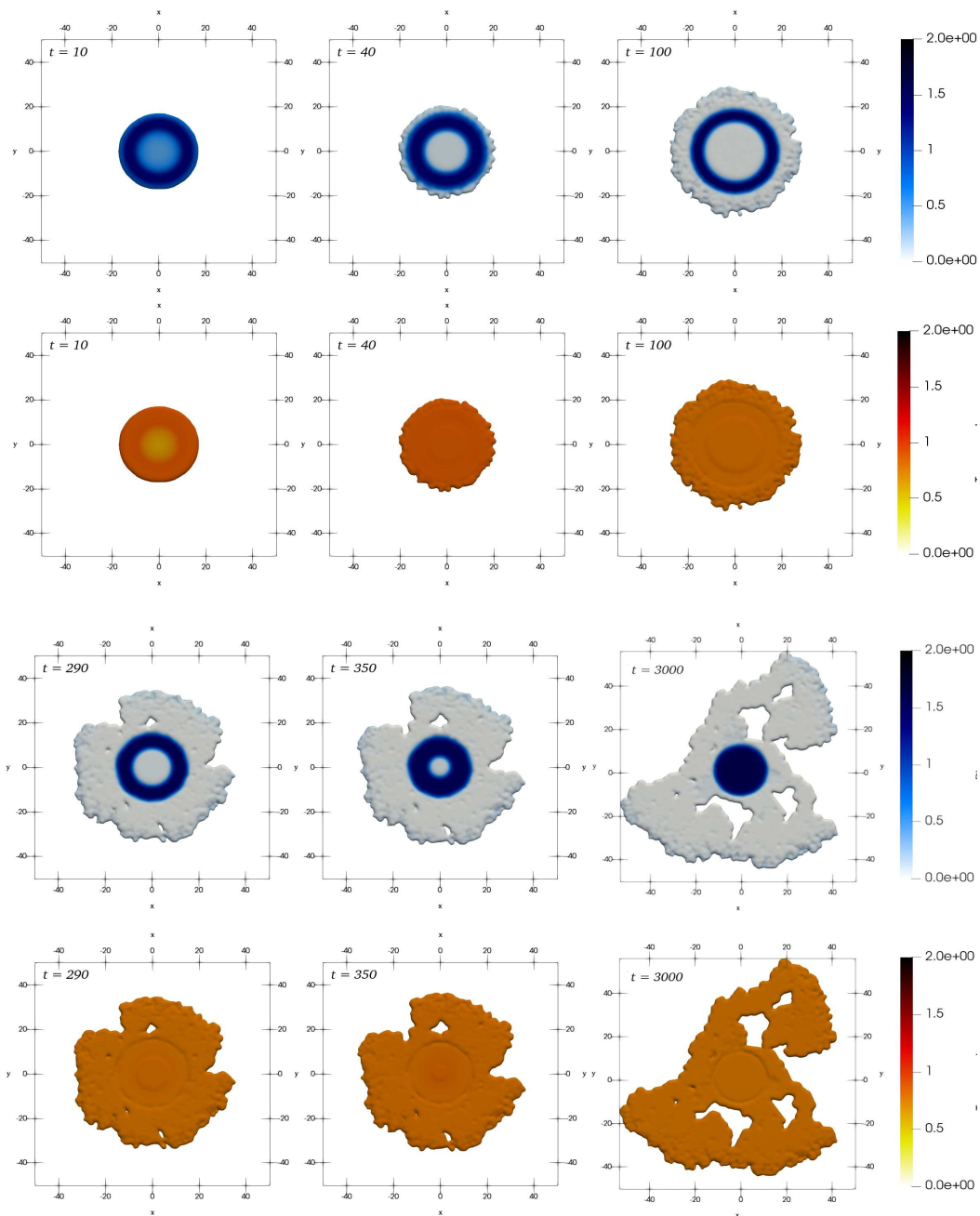


Figura 7.14: Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$  (Modelo 3) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 1,6$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. El tiempo  $t = 3000$  corresponde a un tiempo suficientemente largo para cuando la gota ha ya alcanzado equilibrio termo-mecánico con su atmósfera de vapor.

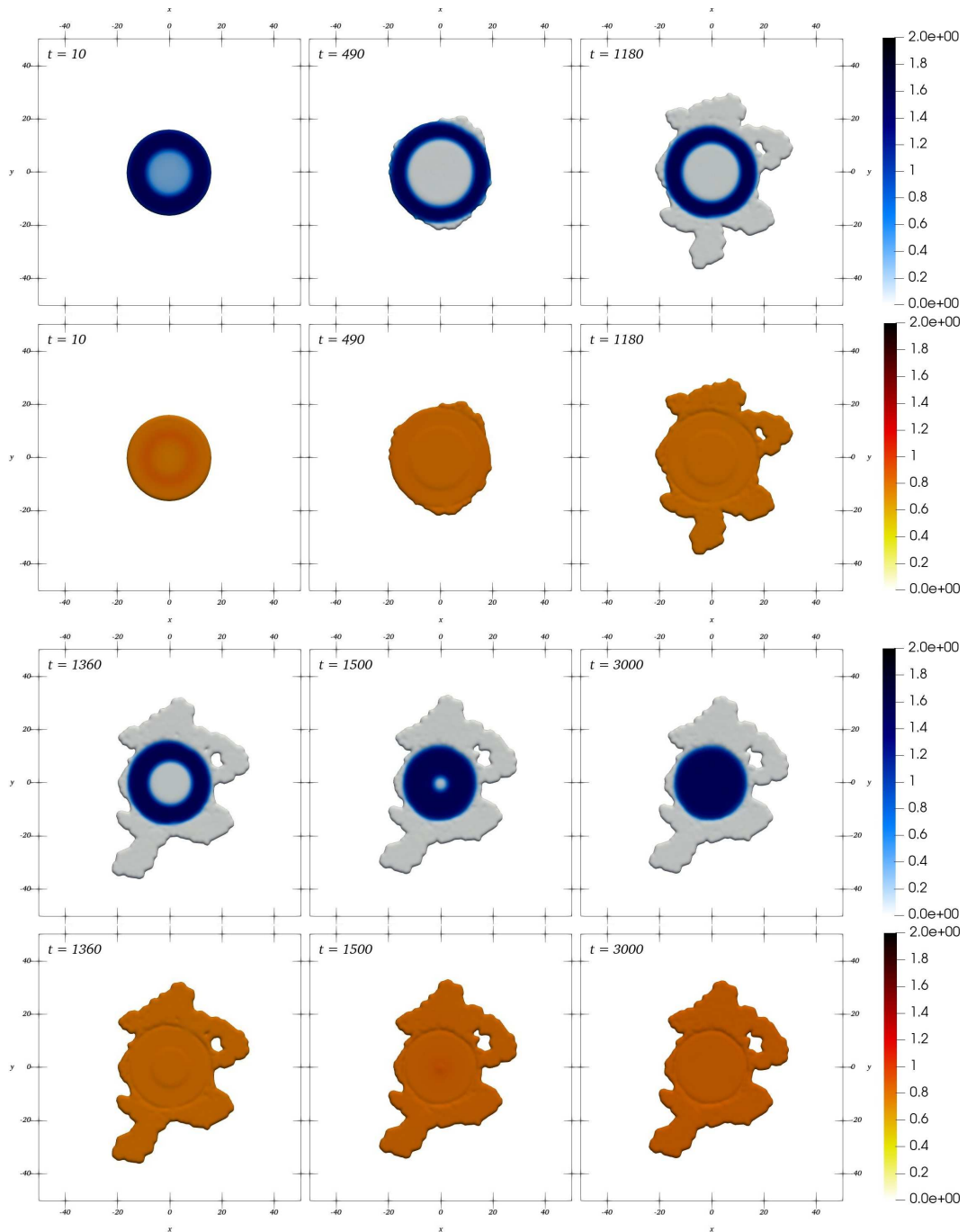


Figura 7.15: Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,6805$  y  $T \approx 0,5248$  (Modelo 2) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 1,6$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. El tiempo  $t = 3000$  corresponde a un tiempo suficientemente largo para cuando la gota ha ya alcanzado equilibrio termo-mecánico con su atmósfera de vapor.

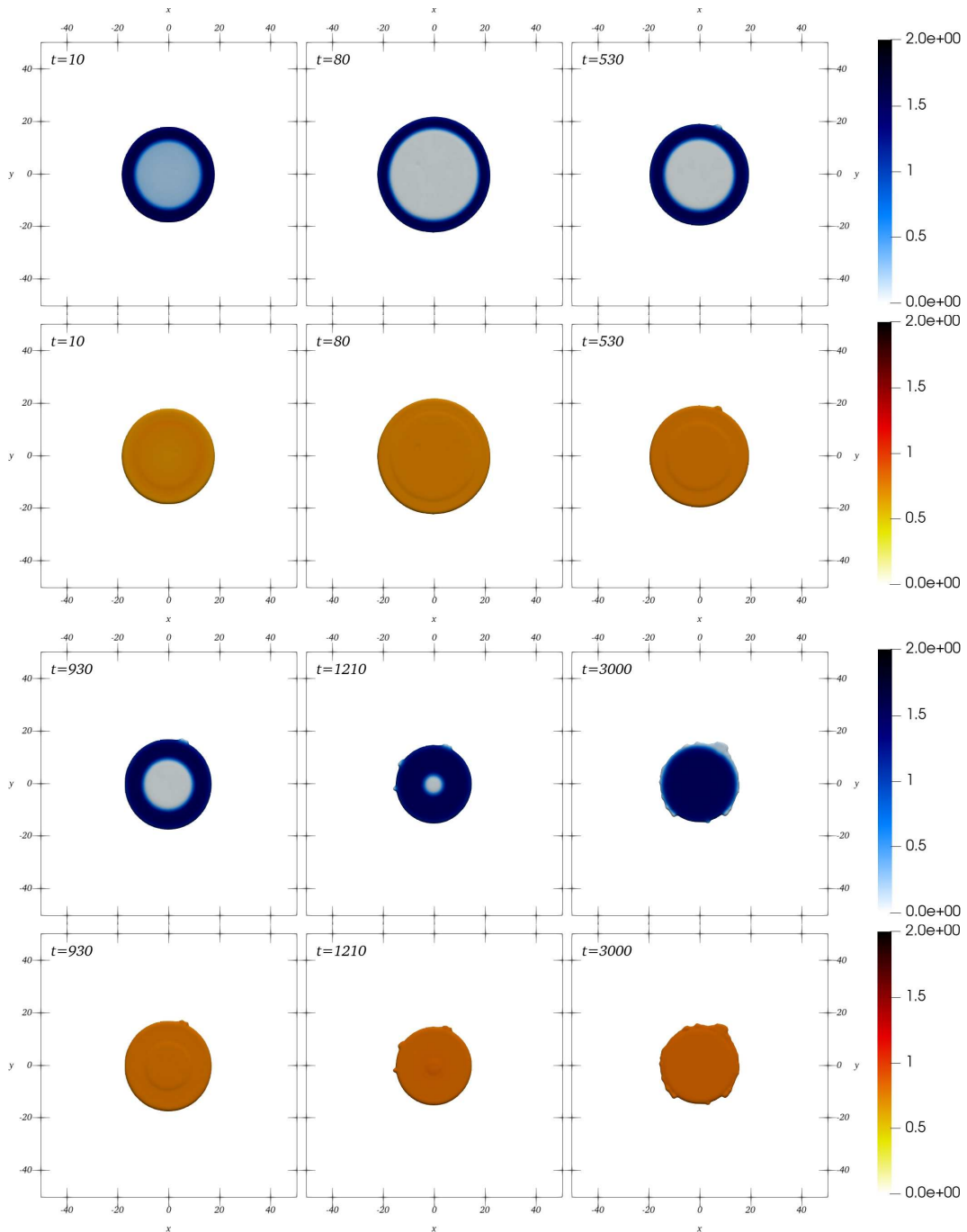


Figura 7.16: Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  (Modelo 1) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,0$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. El tiempo  $t = 3000$  corresponde a un tiempo suficientemente largo para cuando la gota ha ya alcanzado equilibrio termo-mecánico con su atmósfera de vapor.



7.10, el calentamiento aplicado en los rangos de temperatura mencionados arriba provee al sistema de suficiente energía térmica para promover colisiones entre las moléculas líquidas y formar eventualmente un pequeño espacio de vapor en el centro de la gota. Este pequeño espacio de vapor crece tomando la forma de una burbuja, la cual se expande radialmente por un tiempo corto hasta alcanzar un radio máximo, después del cual la burbuja colapsa sobre sí misma hasta desaparecer por completo. Durante el proceso de crecimiento de la burbuja interna la gota experimenta simultáneamente evaporación superficial.

La Figura 7.14 muestra la densidad y temperatura a diferentes tiempos durante la evolución de una gota en equilibrio con densidad  $\rho \approx 1,4977$  (Modelo 3), la cual es sometida a un calentamiento repentino con temperatura  $T_0 = 1,6$ . Los recuadros en la primera y tercera fila muestran la densidad, mientras los recuadros en la segunda y cuarta fila muestran la temperatura. Es evidente de los gráficos que muestran la distribución de temperatura que para tiempos  $t \geq 100$  tanto el líquido como el vapor se encuentran ya en equilibrio térmico. Cuando se le aplica el calentamiento con temperatura  $T_0 = 1,6$ , la gota es llevada a la región metaestable del diagrama de fase, experimentando la formación de una burbuja de vapor en su interior, la cual se expande rápidamente hasta alcanzar un radio máximo en  $t = 100$  para luego colapsar sobre sí misma y desaparecer por completo. Al mismo tiempo la gota experimenta evaporación de sus capas superficiales hasta alcanzar un estado de equilibrio con su atmósfera de vapor sobre la curva binodal.

Las Figuras 7.15 y 7.16 muestran una evolución similar a la de la Figura 7.14 para los casos de una gota con valores iniciales de densidad  $\rho \approx 1,6805$  (Modelo 2) y  $\rho \approx 1,833$  (Modelo 1) luego de ser calentadas uniformemente con temperaturas  $T_0 = 1,6$  y  $2,0$ , respectivamente. En el caso de la Figura 7.15 la expansión y contracción de la burbuja es algo más lenta que en el caso anterior y la evaporación superficial es menos prominente. Al aumentar la densidad de la gota inicialmente en equilibrio, el proceso de expansión y contracción de la burbuja ocurre aún más lentamente. Solo cuando la burbuja ha colapsado completamente sobre sí misma se puede observar que la gota comienza a experimentar evaporación en su superficie, si bien a una tasa muy inferior a los dos casos precedentes como se puede observar de la Figura 7.16. En particular, la evaporación superficial de la gota en la Figura 7.16 es muy escasa debido a su mayor densidad aún cuando fue sometida a un calentamiento con una temperatura más alta. De esta manera a igualdad de temperaturas de calentamiento, las gotas más densas experimentan nucleación homogénea con la burbuja interna expandiéndose y colapsando sobre sí misma en una escala de tiempo mayor y evaporación superficial a una tasa menor. Todos los modelos de gotas que experimentaron un proceso de nucleación transitoria evolucionaron hacia un estado de equilibrio termo-mecánico, como se muestra en la Figura 7.12.

### 7.5.3. Presión de vapor

A medida que la temperatura aumenta, habrá siempre un mayor número de moléculas que adquieren suficiente energía para vencer las fuerzas de atracción molecular en el líquido y migrar a la fase de vapor, contribuyendo así al aumento de la presión de vapor. El calor latente (o entalpía) de vaporización,  $\Delta H_{\text{vap}}$ , provee una medida de la intensidad de las fuerzas intermoleculares en el líquido ya que representa la energía necesaria para transformar una cierta cantidad de líquido en vapor sin que

haya un cambio de temperatura. De esta manera, valores grandes de  $\Delta H_{\text{vap}}$  indican fuerzas atractivas grandes entre las moléculas del líquido. La relación matemática entre la presión de vapor y la temperatura está dada por la ecuación de Clausius-Clapeyron

$$p_v = A \exp\left(-\frac{\Delta H_{\text{vap}}}{\bar{k}T}\right), \quad (7.6)$$

donde  $A$  es una constante experimental relacionada con el punto de ebullición normal. Tomando el logaritmo natural en ambos miembros de la Ec. (7.7) se obtiene la expresión

$$\ln p_v = -\frac{\Delta H_{\text{vap}}}{\bar{k}T} + C, \quad (7.7)$$

que representa la ecuación de una recta con pendiente igual a  $-\Delta H_{\text{vap}}/\bar{k}$ . La pendiente de esta recta está determinada por la razón entre el calor latente liberado en la transición de fase líquido-vapor y la discontinuidad entre los volúmenes ocupados por ambas fases. Por otro lado, dado que la entropía, expresada como la primera derivada del potencial de Helmholtz con respecto a la temperatura, y el volumen, expresado como la primera derivada de la energía libre de Gibbs con respecto a la presión, son ambos discontinuos a través de la recta, la ecuación de Clausius-Clapeyron se aplica solo a transiciones de fase de primer orden.

La Figura 7.17 muestra la dependencia del logaritmo natural de la presión,  $\ln p_v$ , con el inverso de la temperatura,  $1/T$ , para todos los modelos que experimentaron evaporación superficial y nucleación homogénea en mayor o menor medida. La línea sólida en la gráfica representa el mejor ajuste de la Ec. (7.7) con los datos representados. Esta recta posee una pendiente  $\Delta H_{\text{vap}}/\bar{k} \approx 3,14$ . En este caso para representar la pendiente se han omitido los datos correspondientes a los modelos que evolucionaron a partir de condiciones iniciales cercanas a la zona líquida del diagrama de fases, formando así gotas estables sin evaporar. Estos datos divergen de la recta en la figura y presentan, además, cierta dispersión. La línea recta en la Figura (7.17) obedece a la relación

$$p_v \propto \exp\left(\frac{-3,14}{T}\right), \quad (7.8)$$

y reproduce con muy buena aproximación la Ec. (7.7) para estos valores moderados de la presión de vapor.

A medida que  $T/T_{\text{cr}} \rightarrow 1$ , la discontinuidad de las primeras derivadas del potencial de Helmholtz con respecto a la temperatura y de la energía libre de Gibbs con respecto a la presión disminuye y de esta manera la entropía del líquido tiende a igualar la entropía del vapor. En otras palabras, cuando  $T/T_{\text{cr}} = 1$  la fase líquida no puede distinguirse de la fase gaseosa y tanto el volumen molar como las capacidades caloríficas a volumen constante toman el mismo valor para ambas fases. De este modo en el punto crítico tendremos transiciones de fase de segundo orden y cuando  $T/T_{\text{cr}} \rightarrow 1$  se cumple que [118]

$$\frac{\Delta H_{\text{vap}}}{T} \propto \left(1 - \frac{T}{T_{\text{cr}}}\right)^{1/2}, \quad (7.9)$$

es decir, la entalpía de vaporización es directamente proporcional a la temperatura. De esta relación es evidente que cuando  $T/T_{\text{cr}} \rightarrow 1$  la entalpía de vaporización tiende a cero, mientras que cuando  $T/T_{\text{cr}} \rightarrow 0$ , esta se vuelve independiente de la temperatura y tiende al valor límite  $\Delta H_{\text{vap}} = \bar{a}/\bar{b}$  [118], donde  $\bar{a}$  y  $\bar{b}$  son los parámetros de vdW en

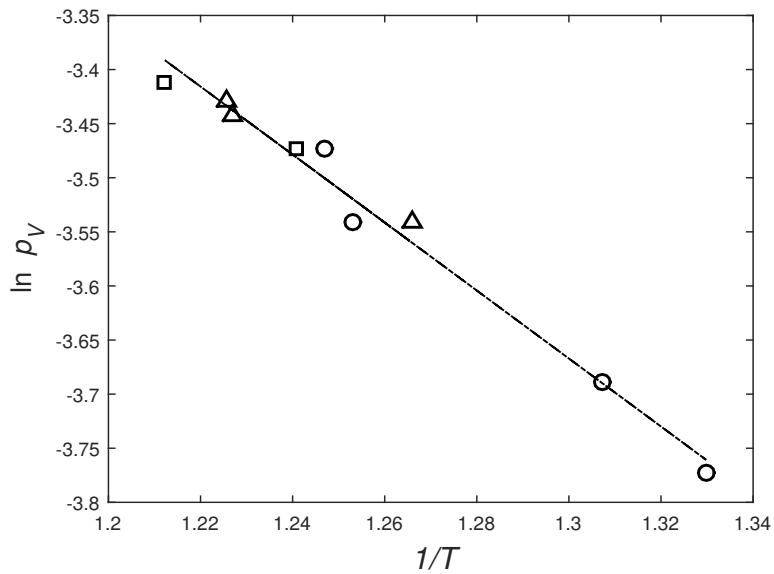


Figura 7.17: Logaritmo natural de la presión de vapor como función del inverso de la temperatura para los modelos que experimentaron evaporación superficial y nucleación homogénea en mayor o menor medida. La línea sólida ajusta los datos numéricos (símbolos) a la ecuación de Clausius-Clapeyron (7.7). La pendiente de la recta  $-\Delta H_{\text{vap}}/\bar{k} \approx -3,14$  define la entalpía de vaporización en unidades reducidas para este fluido de vdW.

la Ec. (5.3). Dado que para los modelos en este trabajo  $\bar{a} = 2$  y  $\bar{b} = 0,5$ , se tiene que este límite corresponde a  $\Delta H_{\text{vap}} = 4$ . Este límite difiere del valor de la pendiente de la línea recta en la Figura 7.17 en  $\approx 11\%$ . Sin embargo, el límite cuando  $T/T_{\text{cr}} \rightarrow 0$  es de interés solo desde el punto de vista teórico ya que ninguna sustancia real experimenta transiciones de fase líquido-vapor a temperaturas  $T \rightarrow 0$  y el límite  $T \rightarrow 0$  para una sustancia real debería en principio solo aplicarse en el intervalo de temperaturas  $T_{\text{tp}} < T \ll T_{\text{cr}}$ , donde  $T_{\text{tp}}$  es la temperatura del punto triple de la sustancia.

#### 7.5.4. Fragmentación lenta

Cuando una gota se somete a una temperatura suficiente para alcanzar el límite de supercalentamiento, las fuerzas de presión interna de la burbuja exceden la presión externa ejercida por la capa líquida que encierra a la burbuja. En estos casos, al formarse la burbuja interna, su rápida expansión es gobernada por los efectos inerciales producidos por la alta presión de vapor. En general, a temperaturas de supercalentamiento la tensión superficial disminuye al punto que no es más efectiva para detener el crecimiento de la burbuja. A medida que la burbuja se expande, la evaporación procede rápidamente dando lugar a una inestabilidad dinámica que estimula el crecimiento de una perturbación superficial en la forma de una inestabilidad de Rayleigh-Taylor [119]. En esta fase avanzada de la evolución la transferencia de calor desde la capa líquida externa, que se encuentra más caliente, al vapor en expansión, que a su vez se encuentra menos caliente, puede también contribuir a la inestabilidad de Rayleigh-Taylor. De esta manera la evolución hidrodinámica de la nucleación está completamente determinada por la expansión rápida de la burbuja interna y por la

inestabilidad interfacial, dando origen a una reducción progresiva de la capa líquida externa hasta producir la fragmentación de ésta.

Es bien sabido que la energía liberada cuando un líquido supercalentado se evapora puede dar origen a una vaporización explosiva si una fracción importante de esta energía aparece en forma de una onda de detonación térmica, o si, por el contrario, la burbuja se expande tan rápidamente que el líquido alrededor no tiene tiempo de responder acústicamente [120]. Sin embargo, para gotas suficientemente densas, como es el caso de los modelos con  $\rho_0 \approx 1,833$  y valores de  $T_0$  en el rango entre 2.2 y 3.0, la energía térmica liberada no es suficiente para crear un frente detonante y la expansión de la burbuja no es tan rápida pero suficiente para fragmentar la capa líquida alrededor de la burbuja. En este caso, la gota se fragmenta en dos, o más gotas secundarias las cuales o bien permanecen estáticas en el sitio en las que se produjeron, o se expanden muy lentamente. De aquí que nos refiramos a este tipo de fragmentación como *fragmentación lenta*. La fragmentación lenta se distingue de la *fragmentación rápida* en cuanto la mayor parte de la energía disponible se invierte en la ruptura de la capa líquida y solo una pequeña parte en energía cinética de movimiento de las gotas secundarias.

Cuando las gotas en equilibrio con densidad  $\rho \approx 1,4977$  y temperatura  $T \approx 0,7324$  son sometidas a calentamiento uniforme con temperaturas en el intervalo  $2,0 \lesssim T_0 \lesssim 2,5$ , estas experimentan al inicio un proceso de nucleación homogénea con desprendimiento de su superficie de pequeños parches de vapor, los cuales se expanden rápidamente de manera radial hacia afuera. A medida que la presión interna excede a la presión externa ejercida por el líquido la burbuja continúa expandiéndose, mientras que la evaporación en la interface líquido-vapor procede rápidamente dando origen a una inestabilidad dinámica que tiende a distorsionarla, estimulando así la amplificación de una perturbación interfacial en la forma de una inestabilidad de Rayleigh-Taylor [119], como se puede apreciar de la Figura 7.18 para el caso de la evolución de una de estas gotas sometida a un calentamiento con  $T_0 = 2,4$ . En estas etapas finales de la expansión de la burbuja la transferencia de calor entre el cascarón líquido más caliente y el vapor en expansión más frío contribuyen a la amplificación de la inestabilidad. Como consecuencia de esto, el cascarón líquido se vuelve siempre más delgado de manera no uniforme hasta que se fragmenta en un número de pequeñas gotas. En este caso particular se puede observar la fragmentación de la capa líquida en 11 fragmentos, los cuales se expanden lentamente de manera radial.

A medida que la densidad de la gota inicial aumenta más energía térmica será necesaria para fragmentarla. Sin embargo, como se muestra en el Cuadro 7.3 mayor es la densidad de la gota en equilibrio menor es su temperatura por lo que no será posible establecer un criterio uniforme que nos diga cuánto más calentamiento será necesario para fragmentar gotas más densas pero con igual temperatura de equilibrio. Sin embargo, para gotas con  $\rho \approx 1,6805$  y  $T \approx 0,5248$  se obtiene fragmentación lenta para calentamientos con temperaturas en el intervalo  $2,0 \lesssim T_0 \lesssim 2,6$ , mientras que para gotas aún más densas con valores de equilibrio  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  se observó fragmentación lenta para temperaturas de calentamiento en el intervalo  $2,2 \lesssim T_0 \lesssim 3,0$ . En estos casos la evolución dinámica de las gotas procedió de manera muy similar al ilustrado en la Figura 7.18. Sin embargo, a diferencia del caso anterior, la Figura 7.19 muestra que para una temperatura de calentamiento  $T_0 = 2,2$  la gota con  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  se fragmenta en dos gotas, las cuales instantes después coalescen para formar una sola gota, mientras que al someterla a calentamiento con una temperatura  $T_0 = 2,4$  de manera similar la gota se fragmenta de nuevo en dos gotas las cuales

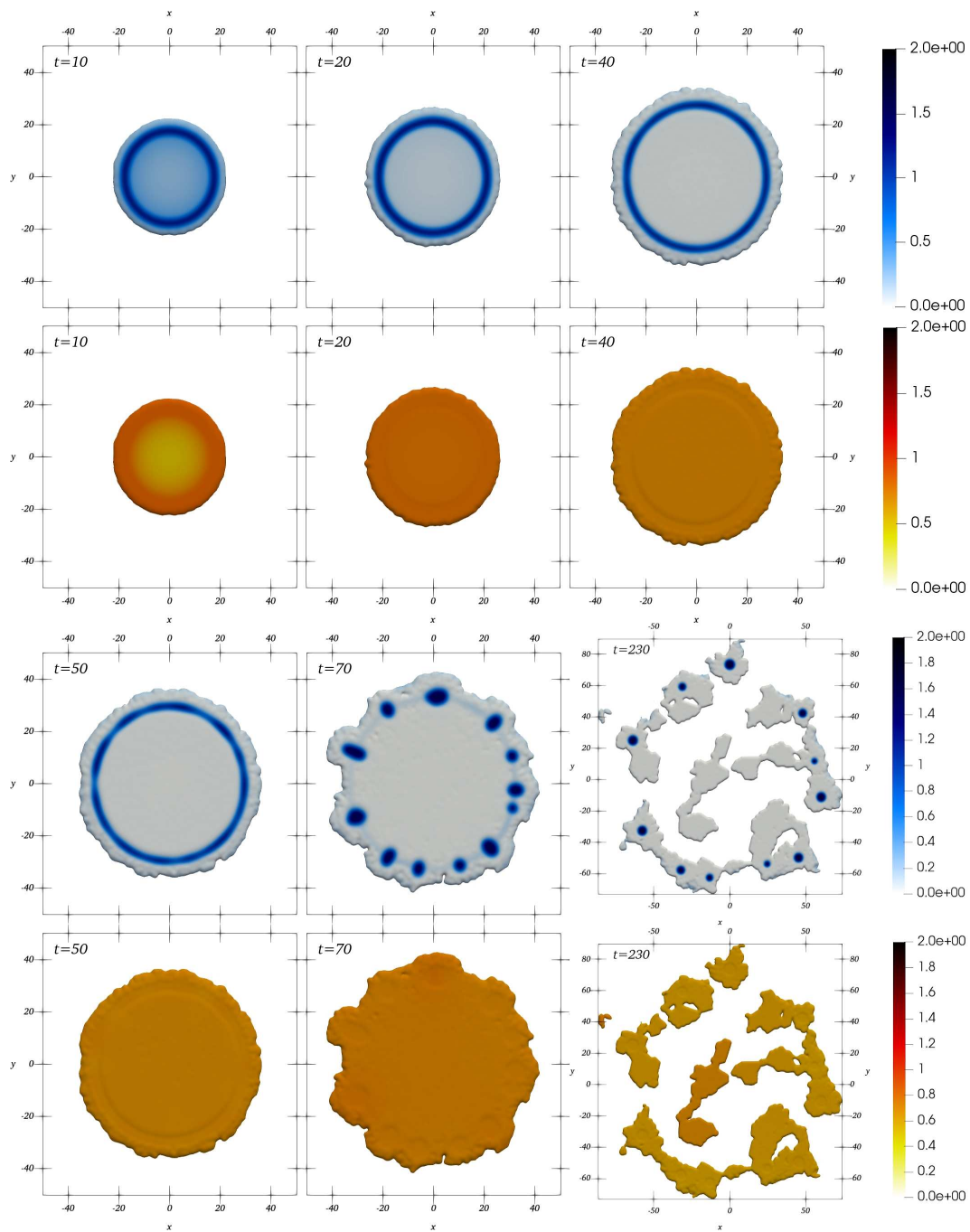


Figura 7.18: Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$  (Modelo 3) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,4$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. Al tiempo  $t = 230$  las pequeñas gotas se expanden lentamente en equilibrio termo-mecánico con sus atmósferas de vapor. La escala espacial de los últimos dos recuadros para  $t = 230$  se ha cambiado para apreciar mejor los fragmentos líquidos en expansión.

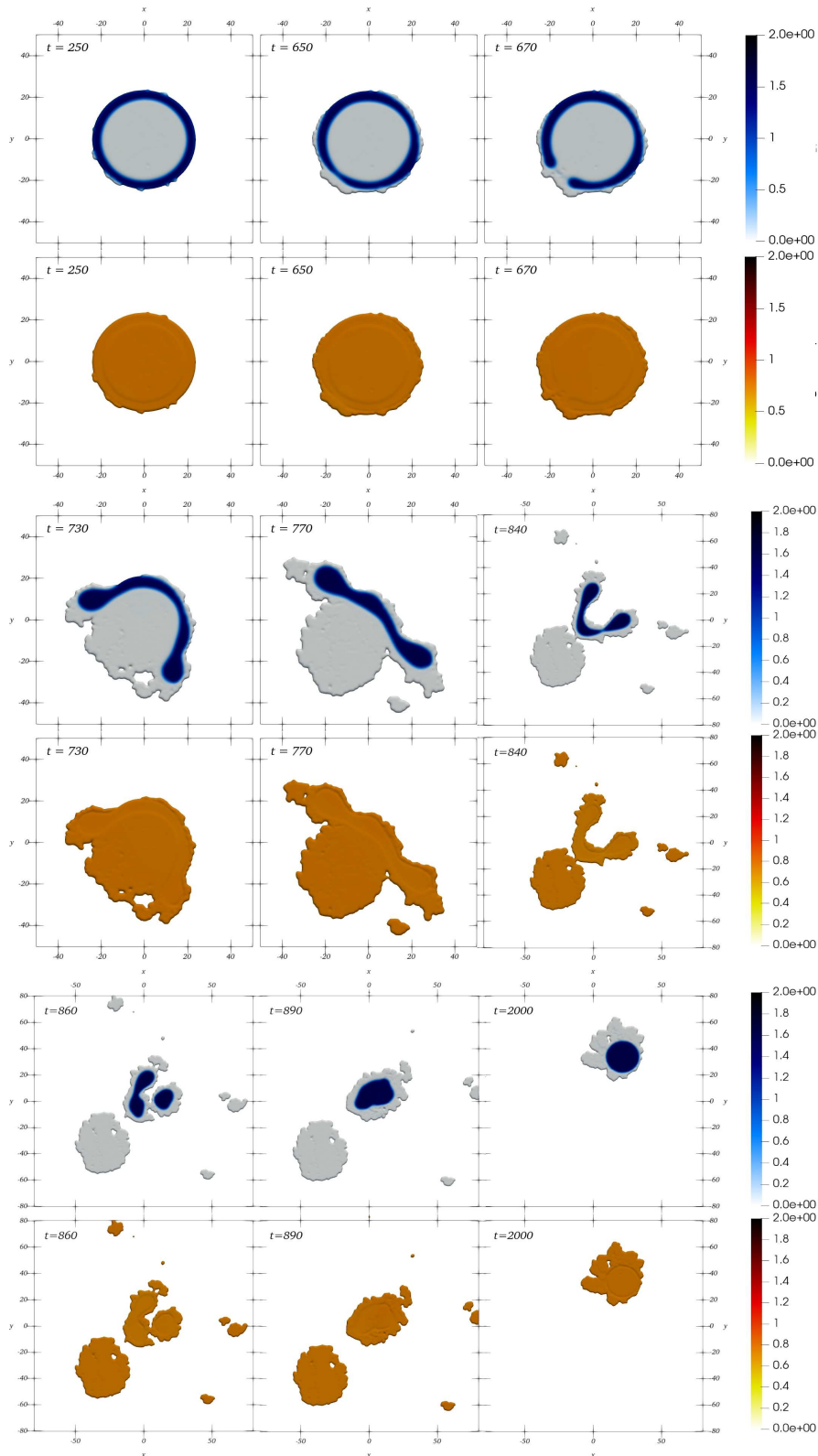


Figura 7.19: Densidad (primera, tercera y quinta fila de recuadros) y temperatura (segunda, cuarta y sexta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  (Modelo 1) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,2$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. Al tiempo  $t = 840$  lo que queda de la capa líquida se divide en dos fragmentos, los cuales coalescen para formar una gota de menor tamaño que la inicial antes del calentamiento en equilibrio con su atmósfera de vapor.

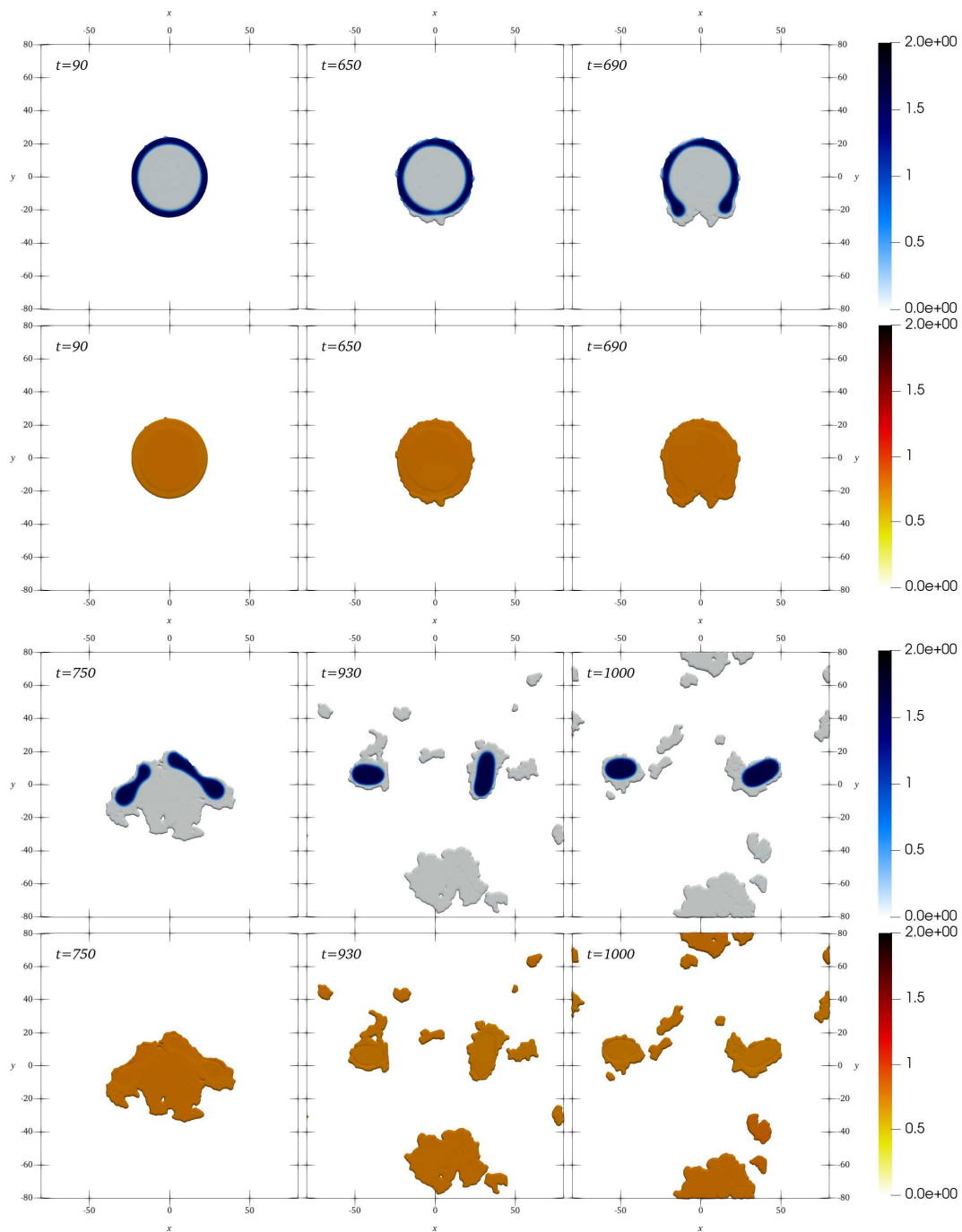


Figura 7.20: Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  (Modelo 1) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,4$ . Las barras de colores en el lado derecho  $t$  indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. Al tiempo  $t = 750$  lo que queda de la capa líquida se ha dividido en dos fragmentos, los cuales sobreviven alejándose lentamente en equilibrio con sus respectivas atmósferas de vapor.

sobreviven en equilibrio, como se muestra en la Figura 7.20. Es importante mencionar que en estos dos casos la expansión de la burbuja interna procede mucho más lentamente que para el caso de la gota a menor densidad de la Figura 7.18, esto sin importar el valor inicial de la temperatura de la gota.

### 7.5.5. Fragmentación rápida

En este caso la evolución procede de manera muy similar a como se describió en la sección anterior para el caso de fragmentación lenta. Sin embargo, a diferencia del caso anterior la burbuja experimenta una expansión mucho más rápida lo que hace que solo una fracción de la energía térmica liberada sea empleada en fragmentar la capa líquida alrededor y una fracción importante se convierta en energía cinética de movimiento de los fragmentos líquidos. Si la expansión de los fragmentos ocurre en el vacío bajo condiciones de microgravedad, estos seguirán dispersándose de manera continua e indefinida. Sin embargo, si la fragmentación ocurre en otro líquido inmiscible entonces las fuerzas de arrastre y fricción deberían disipar la energía cinética y detener el movimiento de los fragmentos.

Gotas en equilibrio con densidad  $\rho \approx 1,4977$  y temperatura  $T \approx 0,7324$  sometidas a calentamiento con temperaturas en el intervalo  $2,6 \lesssim T_0 \lesssim 3,1$  experimentan un proceso de nucleación homogénea y expansión rápida de la burbuja. En estos casos, como también en los casos de fragmentación lenta, la expansión de la burbuja excede la capacidad que tiene la capa líquida que la encierra para responder acústicamente [120]. Un caso típico de fragmentación rápida se ilustra en la Figura 7.21 donde se muestra como ejemplo la respuesta al calentamiento súbito con  $T_0 = 2,8$  de una gota con densidad  $\rho \approx 1,4977$  y temperatura inicial  $T \approx 0,7324$ . En este caso, la gota nuclea una burbuja interna, la cual se expande rápidamente, y simultáneamente experimenta evaporación superficial, lanzando pequeños parches de vapor radialmente hacia afuera. Debido a la expansión rápida de la burbuja, cuya presión excede por mucho el peso del cascarón líquido, hace que éste se vuelva extremadamente delgado y se fragmente en 13 gotas muy pequeñas las cuales acompañadas de su atmósfera de vapor se expanden alejándose rápidamente del sitio del rompimiento del líquido. Al aumentar la temperatura de calentamiento se producen gotas tan pequeñas que durante el proceso de expansión algunas de ellas se evaporan desapareciendo por completo.

Fragmentación rápida se observó también en gotas con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,6805$  y  $T \approx 0,5248$  para calentamientos en el intervalo de temperaturas  $2,7 \lesssim T_0 \lesssim 3,2$ , mientras que para gotas con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  se observó fragmentación rápida solo para un rango estrecho de temperaturas de calentamiento entre  $\approx 3,1$  y  $\approx 3,3$ .

### 7.5.6. Vaporización explosiva

En el límite de supercalentamiento la burbuja se expande de manera violenta, es decir, a una tasa mucho mayor que la velocidad de respuesta del líquido a su alrededor, dando así origen a una ruptura explosiva de la gota. A diferencia de la fragmentación lenta y rápida, la vaporización explosiva del líquido implica aceleraciones del fluido y desviaciones del equilibrio termodinámico que son varios órdenes de magnitud mayores que los implicados en la ebullición y evaporación ordinarias. En general, la vaporización explosiva difiere de la fragmentación rápida en la magnitud del campo de presión interna



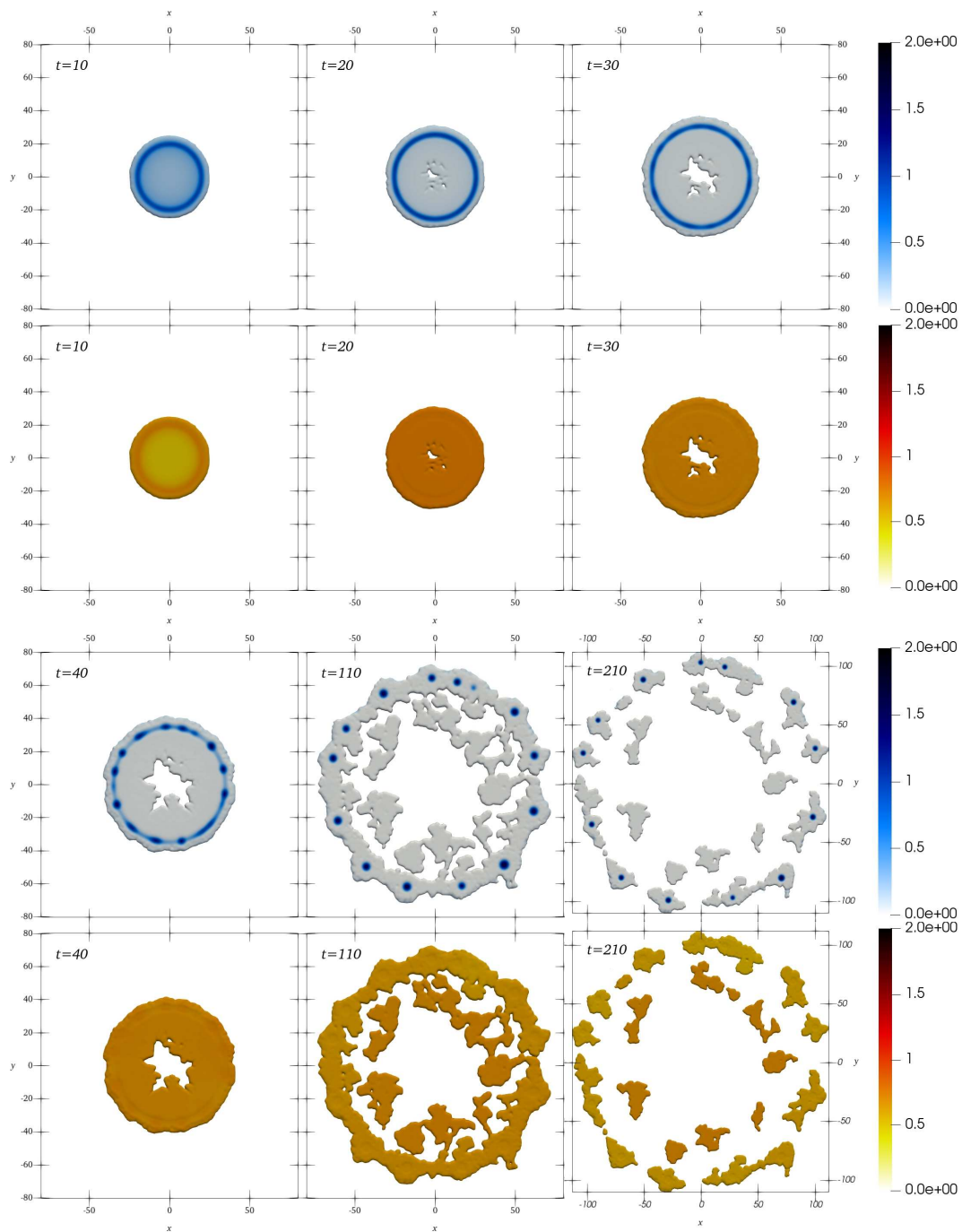


Figura 7.21: Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$  (Modelo 3) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,8$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. Al tiempo  $t = 110$  lo que queda de la capa líquida se ha dividido en 15 fragmentos, de los cuales solo 13 sobreviven al tiempo  $t = 210$  alejándose rápidamente en equilibrio con sus respectivas atmósferas de vapor.

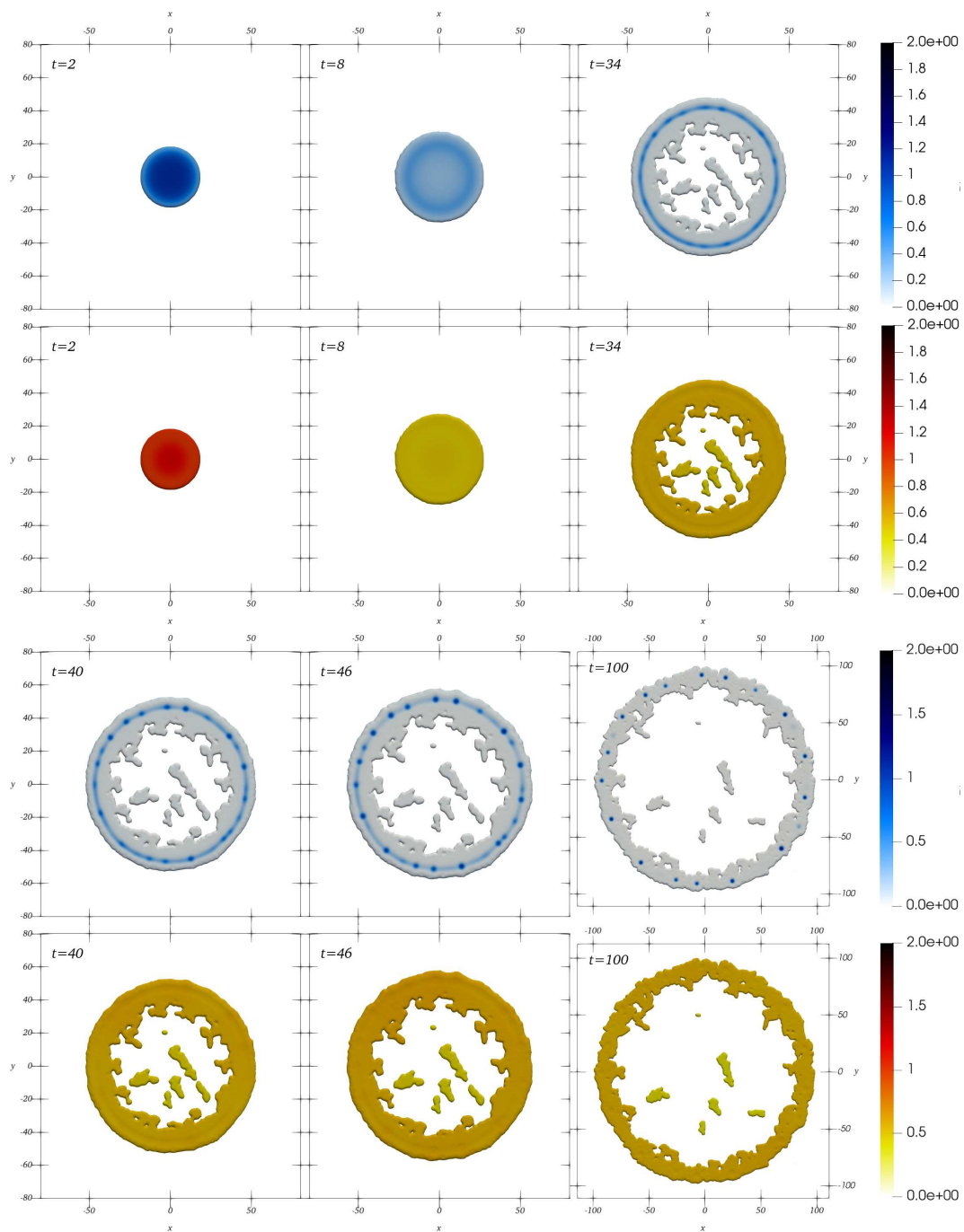


Figura 7.22: Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$  (Modelo 3) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 3,4$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas.

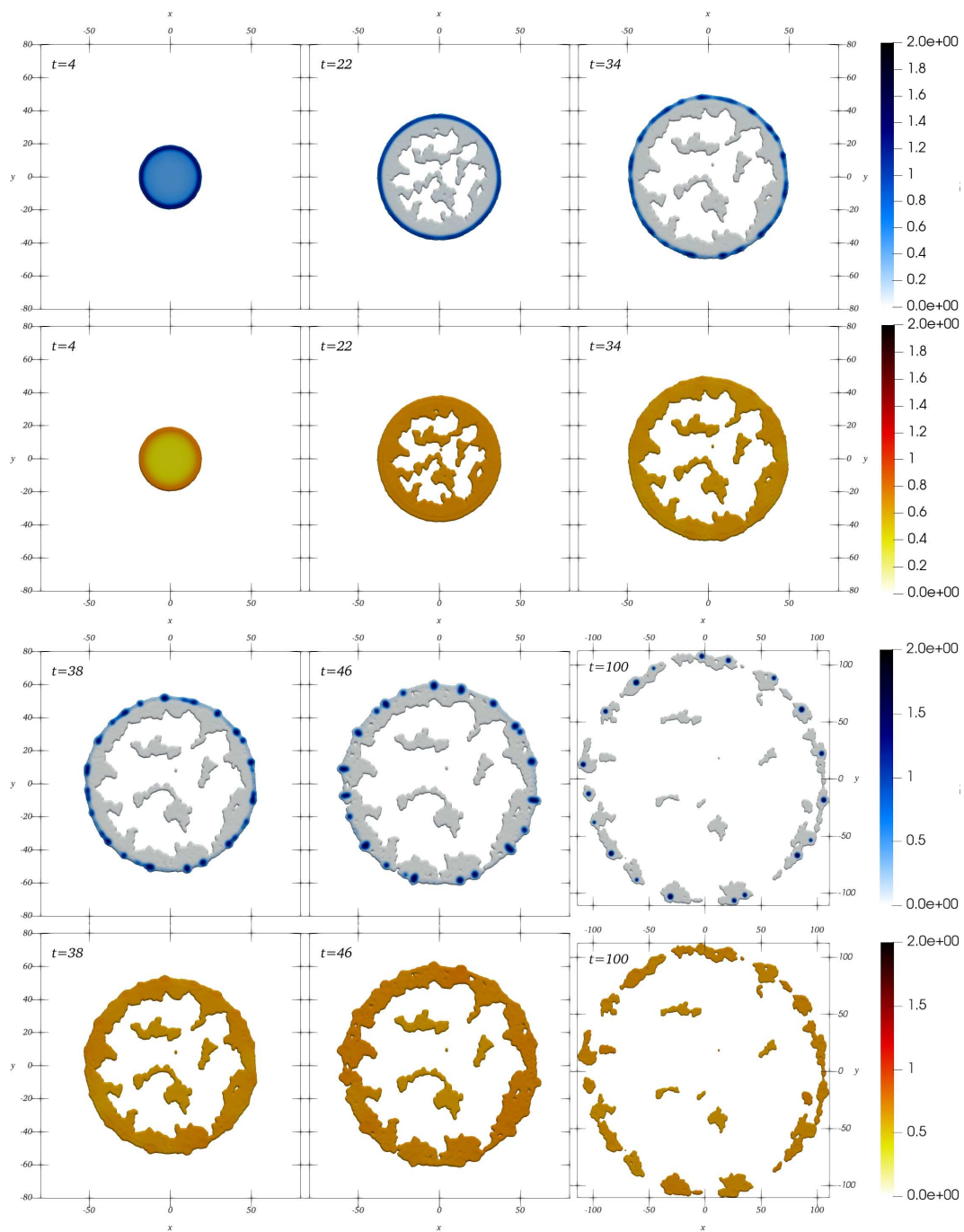


Figura 7.23: Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  (Modelo 1) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 3,6$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas.

que actúa como un frente de deflagración que hace que el cascarón líquido alrededor se vuelva muy delgado antes de fragmentarse en un gran número de pequeñas gotas. En este caso, como en el caso de la fragmentación, la dinámica del rompimiento del líquido es gobernada por la inestabilidad de Rayleigh-Taylor. Al momento de la explosión el material de la gota, mayormente en forma de vapor, se expande rápidamente alejándose del sitio de la explosión. Durante este proceso solo una pequeña fracción del material de la gota se encuentra aún en fase líquida conformada por gotas tan pequeñas que muchas de ellas terminan evaporándose durante la expansión.

Gotas en equilibrio con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$  experimentaron vaporización explosiva para temperaturas de calentamiento  $T_0 > 3,1$ . En particular, la Figura 7.22 muestra la vaporización explosiva de una de estas gotas cuando es expuesta a un calentamiento uniforme con  $T_0 = 3,4$ . Durante las primeras etapas de la evolución la gota nuclea una burbuja interna que crece rápidamente y simultáneamente a esto ocurre un proceso de evaporación superficial donde una infinidad de pequeños parches de vapor se desprenden radialmente alejándose de la gota a gran velocidad. La deflagración de la capa interna de líquido procede tan rápidamente que el líquido alrededor toma la forma de un cascarón muy delgado, el cual se fragmenta en 23 pequeñas gotas, algunas de las cuales se evaporan desapareciendo por completo. La vaporización explosiva también se observó en gotas inicialmente con densidad  $\rho \approx 1,6805$  y temperatura  $T \approx 0,5248$  cuando fueron sometidas a calentamientos con temperaturas  $T_0 > 3,2$ , mientras que gotas inicialmente con  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  experimentaron vaporización explosiva para calentamientos con  $T_0 > 3,3$ . A temperaturas de supercalentamiento todas las gotas indiferentemente de la densidad y temperatura iniciales experimentaron una evolución similar a la mostrada en la Figura 7.22. Por ejemplo, la Figura 7.23 muestra la evolución de una gota con densidad  $\approx 1,833$  y temperatura  $\approx 0,2967$  cuando es sometida a una temperatura de calentamiento  $T_0 = 3,6$ . En este caso, el cascarón líquido se fragmenta en al menos 22 pequeñas gotas visibles y una infinidad de gotas diminutas las cuales se evaporan durante la expansión radial. Algunas de las gotas más grandes coalescen y otras experimentan evaporación superficial mientras se alejan radialmente del sitio de la explosión.

### 7.5.7. Límite de supercalentamiento

El límite de supercalentamiento de un líquido es la máxima temperatura a partir de la cual el líquido evapora rápidamente. Se dice en general que un líquido está supercalentado si existe a una temperatura mayor que su temperatura de saturación o, equivalentemente, si existe a una presión por debajo de su presión de saturación local [121]. En particular, un líquido supercalentado se encuentra en un estado metaestable el cual bajo el efecto de ciertas perturbaciones posee el potencial de causar explosiones termohidráulicas severas [28, 121]. Si bien el fenómeno asociado con el supercalentamiento de líquidos ha impulsado el desarrollo de varias tecnologías útiles y podría representar un punto de fuerza en el perfeccionamiento del diseño y aplicación de las micro-máquinas térmicas, por otro lado, ha sido la causa más común de accidentes destructivos en muchos procesos industriales [122].

El límite teórico de supercalentamiento para un fluido de vdW a presión  $p = 0$  está dado por [123]

$$T_s = \frac{27}{32}T_{cr}. \quad (7.10)$$

Dado que  $T_{cr} = 32/27$ , la relación (7.10) implica que el límite de supercalentamiento para un fluido de vdW con los parámetros especificados en la Sección 7.1 está dado por  $T_s = 1$ . Esta temperatura es  $\approx 0,84T_{cr}$ . Se ha encontrado que este valor se encuentra razonablemente en acuerdo con medidas experimentales de gotas de agua bajo tensión hidrostática que dan un valor de  $T_s = \sqrt{27/32}T_{cr} \approx 0,92T_{cr}$ , que es alrededor del 9% mayor que el valor teórico [124]. Una posible explicación de la discrepancia es que el estado termodinámico del agua difiere de una ecuación de estado de vdW. Sin embargo, un buen número de líquidos tiene límites de supercalentamiento cercanos a  $27T_{cr}/32$  [124]. Por otro lado, para la mayoría de los líquidos orgánicos el límite termodinámico de calentamiento obedece a la relación empírica [125]

$$T_s = \left[ 0,11 \left( \frac{p}{p_{cr}} \right) + 0,89 \right] T_{cr}, \quad (7.11)$$

donde  $p_{cr}$  es la presión crítica. Para una presión ambiente nula, es decir,  $p = 0$ , la relación (7.11) se reduce a  $T_s = 0,89T_{cr}$ , que difiere del valor teórico en  $\approx 5\%$ . Otra relación empírica que se ha propuesto para determinar el límite de supercalentamiento está dada por [126]

$$T_s = T_{sat} + 0,82206T_{cr} - 0,89485T_{sat}, \quad (7.12)$$

donde  $T_{sat}$  es la temperatura de saturación del líquido correspondiente a presión atmosférica. Sin embargo, al igual que las relaciones (7.10) y (7.11), esta última relación da solo un estimado del límite de supercalentamiento. Más recientemente, un ajuste cuadrático del límite de supercalentamiento a presión atmosférica para varias sustancias químicas de interés industrial, usando la ecuación de estado de vdW, está dado por la expresión polinomial [121]

$$T_s = 0,8449 + 0,11344\tilde{p} + 0,039695\tilde{p}^2, \quad (7.13)$$

donde  $\tilde{p}$  es la presión reducida dada por la Ecuación (5.21).

Para determinar el límite de supercalentamiento a partir de los modelos numéricos se calcula el valor de  $T_0$  para el cual se observa vaporización explosiva por primera vez. Por ejemplo, para gotas con valores iniciales de densidad  $\approx 1,4977$  y temperatura  $\approx 0,7324$  se observó vaporización explosiva a una temperatura de calentamiento igual a 3.12, lo que requirió aumentar la temperatura de calentamiento en pequeños intervalos  $\Delta T_0 = 0,01$  para esta secuencia de modelos. De manera similar gotas con  $\rho \approx 1,6805$  y  $T \approx 0,5248$  evaporaron de manera explosiva por primera vez cuando  $T_0 = 3,24$ , mientras que gotas con  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  comenzaron a explotar cuando  $T_0 = 3,306$ . Para estas gotas se requirió ejecutar los modelos para incrementos de la temperatura de calentamiento  $\Delta T_0 = 0,001$ . Sin embargo, estos intervalos son tan pequeños que los modelos no se muestran explícitamente en la Figura 7.10. Para los modelos que experimentaron a una determinada temperatura de calentamiento vaporización explosiva se determinó el límite de supercalentamiento promediando la temperatura asociada con todas las partículas SPH en la capa líquida instantes antes del rompimiento del líquido. Este procedimiento produjo límites de supercalentamiento  $T_s = 0,988$  en gotas inicialmente con  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$ ,  $T_s = 0,989$  en gotas inicialmente con  $\rho \approx 1,6805$  y  $T \approx 0,5248$  y  $T_s = 0,991$  en gotas inicialmente con  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$ . Promediando estos valores se encuentra que el límite medio de supercalentamiento corresponde a una temperatura de  $T_s \approx 0,9893$  o en términos de la temperatura crítica para este fluido de vdW ( $T_{cr} = 32/27$ )  $T_s \approx 0,835T_{cr}$ . El límite

de supercalentamiento de  $\approx 0,9893$  predicho de esta manera es alrededor del 1% por debajo del valor teórico  $T_s = 1$  para la ecuación de estado de vdW y cerca del 6.2% menor que el valor sugerido por la relación empírica (7.11) a presión nula.

### 7.5.8. Masa evaporada como función del tiempo

Para cada uno de los regímenes de evaporación descritos en las secciones anteriores es de interés cuantificar la cantidad de masa líquida que se pierde en forma de calor y determinar así la funcionalidad de la masa de vapor con el calentamiento aplicado. Es útil recordar en este espacio que una diferencia con cálculos precedentes de este tipo es que aquí partimos de condiciones iniciales que corresponden a una gota en equilibrio termo-mecánico y que la gota es llevada fuera del equilibrio al aplicársele un calentamiento uniforme.

Durante procesos de descomposición espinodal y nucleación homogénea la tasa de evaporación, es decir, la velocidad con la que el líquido se convierte en vapor, aumenta rápidamente al inicio para luego decaer cuando el sistema alcanza un estado de equilibrio. A partir de ese momento la tasa de evaporación tiende a cero y la masa de vapor permanece constante en el tiempo. La Figura 7.24 muestra la variación en el tiempo de la masa total de vapor,  $M_v$ , para el caso de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$ , respectivamente, cuando la gota es sometida a calentamiento con distintas temperaturas,  $T_0$ . La masa de vapor producida es proporcional a la temperatura de calentamiento. Las curvas punteada ( $T_0 = 1,0$ ) y segmentada ( $T_0 = 1,2$ ) de color negro corresponden a los casos donde la gota experimentó solo evaporación superficial por descomposición espinodal, mientras las curvas de color azul correspondientes a temperatura de calentamiento entre  $T_0 = 1,4$  y  $1,8$  corresponden a los casos donde la gota experimentó nucleación homogénea acompañada de evaporación superficial sin fragmentarse. A medida que se sigue aumentando la temperatura de calentamiento en el intervalo  $2,0 \leq T_0 \leq 2,4$  (curvas de color rojo) la gota experimentó fragmentación lenta, mientras que a temperaturas entre  $T_0 = 2,6$  y  $3,0$  (curvas de color magenta) la gota evaporó experimentando fragmentación rápida. Solo para temperaturas  $T_0 \geq 3,2$  se observa vaporización explosiva (curvas de color verde).

La Figura 7.25 muestra la evolución de la masa de vapor a diferentes temperaturas de calentamiento para el caso de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,6805$  y  $T \approx 0,5248$ , respectivamente. Al aumentar la densidad de la gota se observa evaporación a mayores temperaturas de calentamiento comparado con los modelos de la Figura 7.24. Esto ocurre casi independientemente del valor de la temperatura inicial. En particular, se observa evaporación superficial solo a partir de  $T_0 = 1,4$  (curva punteada de color azul). Sin embargo, en este caso la gota experimenta evaporación superficial solo después de  $t = 1500$ . Cuando la temperatura de calentamiento se aumenta a  $T_0 = 1,6$  la gota nuclea rápidamente una burbuja transitoria seguido de evaporación superficial a una tasa relativamente lenta. Un comportamiento similar ocurre a  $T_0 = 1,8$ , excepto que en este caso la gota termina dividiéndose en dos fragmentos hacia el final de la evolución cuando  $t \approx 1400$ . Durante este proceso la tasa de evaporación aumenta más rápidamente a partir de  $t = 1100$ . Un comportamiento similar se observa también para  $T_0 = 2,6$  (curva punteada de color rojo). En este caso la gota experimenta fragmentación lenta en 3 gotas de menor tamaño. Solo para temperaturas  $T_0 \geq 2,2$  la masa de vapor evoluciona siguiendo un comportamiento

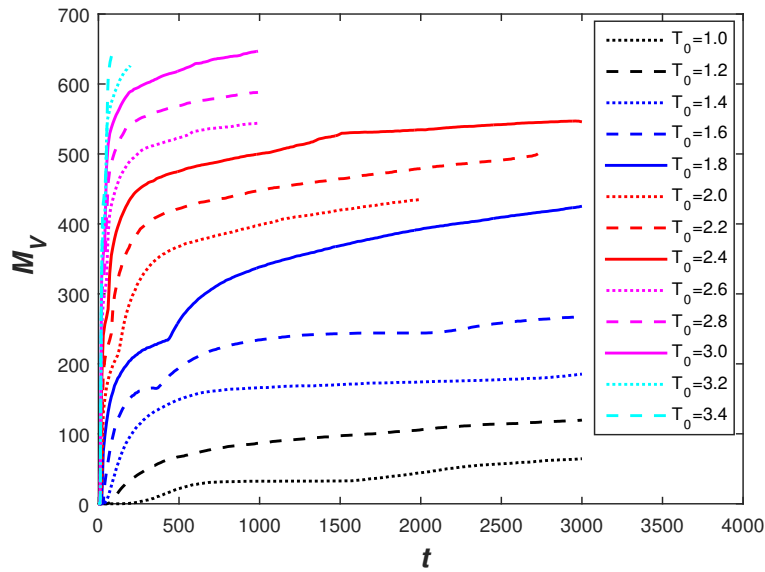


Figura 7.24: Masa total de vapor,  $M_v$ , como función del tiempo en unidades reducidas para una gota inicialmente en equilibrio termo-mecánico con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$  cuando es sometida a calentamiento uniforme con temperaturas en el intervalo  $1,0 \leq T_0 \leq 3,4$ .

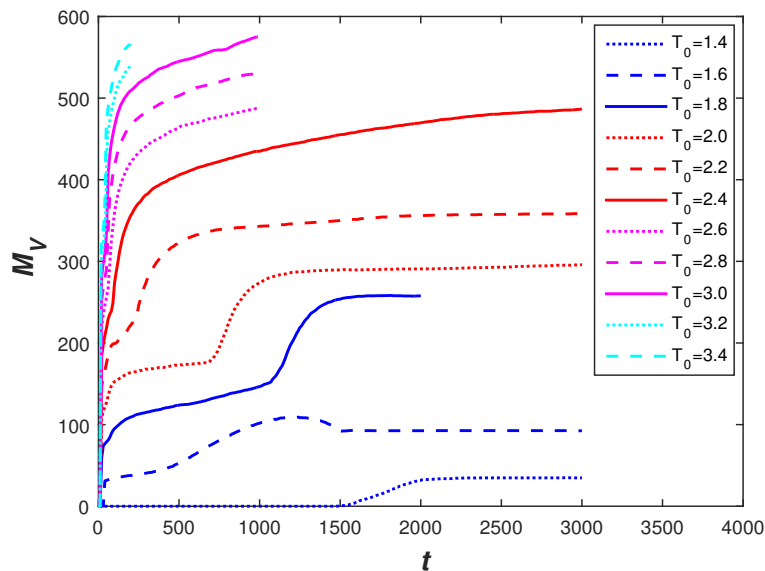


Figura 7.25: Masa total de vapor,  $M_v$ , como función del tiempo en unidades reducidas para una gota inicialmente en equilibrio termo-mecánico con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,6805$  y  $T \approx 0,5248$  cuando es sometida a calentamiento uniforme con temperaturas en el intervalo  $1,4 \leq T_0 \leq 3,4$ .

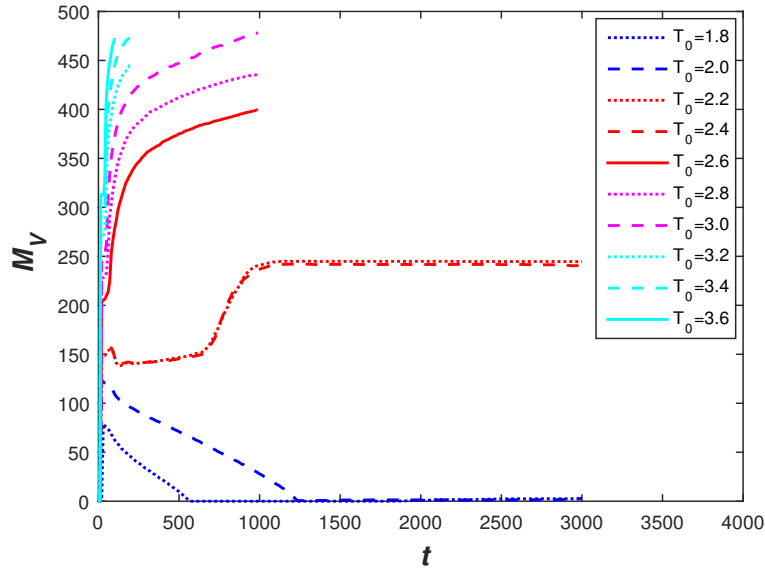


Figura 7.26: Masa total de vapor,  $M_v$ , como función del tiempo en unidades reducidas para una gota inicialmente en equilibrio termo-mecánico con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  cuando es sometida a calentamiento uniforme con temperaturas en el intervalo  $1,8 \leq T_0 \leq 3,4$ .

parecido al observado para los modelos de la Figura 7.24. Las curvas de color rojo para temperaturas entre  $T_0 = 2,0$  y  $2,4$  corresponden a la producción de vapor para gotas que experimentaron fragmentación lenta, mientras las curvas de color magenta para temperaturas de calentamiento entre  $T_0 = 2,6$  y  $3,0$  corresponden a casos donde la fragmentación ocurrió de manera rápida. Solo para temperaturas  $T_0 \geq 3,2$  (curvas de color verde) se observa vaporización explosiva. En estos casos la masa de vapor aumenta muy rápidamente durante los primeros instantes de la evolución, es decir, durante tiempos  $t \lesssim 250$ .

Cuando se aumenta aún más la densidad inicial de la gota, la evaporación ocurre a temperaturas de calentamiento mayores como se observa de la Figura 7.26 para el caso de una gota inicialmente con  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$ . Para  $T_0 = 1,8$  y  $2,0$  (curvas punteada y segmentada de color azul, respectivamente) la gota experimenta nucleación homogénea al mero inicio. En ambos casos la burbuja interna aumenta de tamaño durante los primeros instantes ( $t \approx 10$ ), alcanzando la masa de vapor un máximo para luego decaer a una tasa más lenta. En el primer caso la burbuja desaparece por completo después de  $t = 500$ , mientras que en el segundo caso lo mismo ocurre solo después de  $t \approx 1300$ . Luego que la burbuja desaparece, la gota en ambos casos evoluciona hacia el equilibrio termo-mecánico casi sin evaporar. Los modelos con  $T_0 = 2,2$  y  $2,4$  (curvas punteada y segmentada de color rojo) experimentan una evolución similar en cuanto ambos experimentan la formación de una burbuja interna la cual persiste por largo tiempo antes de fragmentarse en dos gotas líquidas de menor tamaño cuando  $t \approx 740$ . Solo para valores de la temperatura entre  $2,6$  (curva sólida de color rojo) y  $3,0$  (curvas de color magenta) la gota experimenta nucleación de una burbuja de manera rápida fragmentándose rápidamente en numerosas gotas diminutas, siguiendo un proceso de fragmentación rápida. Como en los casos anteriores para gotas de menor densidad inicial, se observa vaporización explosiva con un aumento violento de la masa de vapor



para temperaturas de calentamiento  $T_0 \geq 3,2$ .

# Capítulo 8

## Conclusiones y perspectivas

En este trabajo se ha estudiado mediante simulaciones numéricas el problema de la evaporación y vaporización explosiva de gotas de van der Waals (vdW) en dos dimensiones bajo condiciones de microgravedad y suponiendo que el medio externo a la gota es vacío, usando el método de Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (SPH, por sus siglas en inglés). En particular, se modela el comportamiento de gotas líquidas cuando éstas son sometidas a calentamiento externo uniforme. Para efectuar las simulaciones se usó como plataforma el código numérico DualSPHysics, el cual ha sido modificado en su última versión para incorporar efectos térmicos como, por ejemplo, conducción térmica y conversión de energía cinética en calor. Originalmente el código DualSPHysics fue desarrollado para estudiar flujos con superficies libres, incluyendo interacciones con componentes sólidos, para aplicaciones de impactos de olas marinas con estructuras costa afuera. En particular, DualSPHysics es un software que combina códigos en C++, CUDA y Java para el estudio de sistemas complejos con aplicaciones en ciencia e ingeniería [37]. Los modelos de evaporación de gotas implementados para este estudio incluyen los efectos de tensión superficial, transferencia de calor, transferencia de masa a través de la interface líquido-vapor y la dinámica interfacial siguiendo el modelo termodinámico, conocido como aproximación de campo medio de van der Waals que permite simular transiciones de fase líquido-vapor de primer orden, dando lugar a un modelo de interface difusa. De esta manera se pueden modelar las fuerzas termocapilares acoplando las ecuaciones de la hidrodinámica con una descripción difusa de la interface líquido-vapor, donde la parte reversible del tensor de esfuerzos está expresada en términos del tensor de Korteweg [38].

A diferencia de la gran mayoría de estudios precedentes en esta línea de investigación, en este trabajo se parte de condiciones iniciales que consisten de gotas perfectamente circulares en equilibrio termo-mecánico, las cuales son llevadas fuera del equilibrio al aplicárseles de manera repentina un calentamiento externo. Además, en la derivación de la ecuación de energía interna, en correspondencia con la primera ley de la termodinámica, se considera por primera vez en este tipo de modelado un término no clásico que tiene cuenta de la tasa de vaporización en la interface líquido-vapor, donde una partícula líquida se convierte en vapor al cruzar la zona interfacial disminuyendo su densidad durante el tránsito. La incorporación de este término en la ecuación de energía interna es de fundamental importancia para la correcta descripción de la propagación del calor latente en la interface y, por lo tanto, para una mejor descripción de la estructura de la interface. Para gotas en equilibrio con una densidad y temperatura fijas, se procedió a estudiar la respuesta

del líquido aumentando gradualmente el calentamiento instantáneo. Con este objetivo se consideraron tres modelos básicos de gotas que diferían en densidad, temperatura y tamaño. En términos de unidades reducidas se consideraron tres secuencias de modelos con temperaturas de calentamiento en el intervalo  $0,8 \leq T_0 \leq 3,6$  para gotas en equilibrio con densidades ( $\rho$ ) y temperaturas ( $T$ ) iniciales dadas por ( $\rho \approx 1,4977$ ,  $T \approx 0,7324$ ), ( $\rho \approx 1,6805$ ,  $T \approx 1,5248$ ) y ( $\rho \approx 1,833$ ,  $T \approx 0,2967$ ). A medida que se aumenta la temperatura de calentamiento, las simulaciones predicen cinco regímenes distintos de evaporación:

- Evaporación superficial en la cual se produce evaporación espontánea en las capas superficiales de la gota por descomposición espinodal, el proceso terminando en la formación de una gota líquida de menor tamaño en equilibrio termo-mecánico con su atmósfera de vapor.
- Evaporación por nucleación homogénea con la formación de una burbuja interna, la cual se expande por un corto tiempo antes de colapsar sobre sí misma y desaparecer por completo. En la mayoría de los casos el proceso de nucleación homogénea está también acompañado de evaporación superficial.
- Fragmentación lenta de la gota donde una burbuja inestable creada por nucleación homogénea crece induciendo la fragmentación de la capa líquida a su alrededor en gotas secundarias, las cuales permanecen sin moverse de manera apreciable o, por el contrario, se expanden radialmente alejándose del sitio de la fragmentación lentamente.
- Fragmentación rápida en la cual solo parte de la energía de expansión de la burbuja se invierte en la fragmentación de la capa líquida a su alrededor y parte es usada como energía cinética de movimiento de los fragmentos líquidos, los cuales se expanden radialmente hacia afuera alejándose rápidamente del sitio de la fragmentación.
- Vaporización explosiva donde la burbuja creada por nucleación se expande de manera violenta. En este caso la capa líquida alrededor de la burbuja adquiere un espesor despreciable antes de fragmentarse en muchas gotas pequeñas las cuales se expanden de manera explosiva hacia afuera. Al mero inicio, durante el proceso de nucleación, las capas externas de la gota experimentan un proceso de evaporación superficial donde una infinidad de parches de vapor se alejan radialmente de la gota a altas velocidades. A temperaturas por encima del límite de supercalentamiento algunas de estas pequeñas gotas se evaporan durante su expansión.

En los procesos de evaporación superficial y nucleación homogénea, incluyendo los casos donde se produce fragmentación, los resultados numéricos muestran que las densidades y las temperaturas finales de coexistencia líquido-vapor en equilibrio caen con muy buena aproximación sobre la curva binodal. Lo mismo se observa para las gotas que resultan de la fragmentación, las cuales aún expandiéndose se encuentran coexistiendo con su atmósfera de vapor en equilibrio termo-mecánico con valores de la densidad y la temperatura que convergen sobre la curva binodal. A medida que se aumenta la temperatura de calentamiento por encima del límite de supercalentamiento, la expansión de la burbuja interna ocurre más rápidamente y

la capa líquida a su alrededor se vuelve siempre más delgada instantes antes del rompimiento en un enjambre de pequeñas gotas. La corrugación de la superficie de la burbuja debido a la vaporización rápida como se observa en las simulaciones está en muy buen acuerdo con las medidas experimentales de Shepard y Sturtevant [28] y los experimentos en microgravedad reportados por Ervin y colaboradores [70]. Es importante enfatizar que estos resultados sirven de apoyo a la idea aceptada por la comunidad científica de que las corrugaciones a pequeñas escalas de la superficie de la burbuja en expansión instantes antes de la fragmentación son el producto de la intensificación de la tasa de transferencia de calor y de evaporación a través de la interface vapor-líquido, provocando la amplificación de perturbaciones en la forma de una inestabilidad de Rayleigh-Taylor [119]. Esto demuestra que la transferencia de calor juega un papel muy importante en activar el mecanismo de inestabilidad que conduce a la vaporización explosiva. Por otro lado, las simulaciones numéricas predicen un límite de supercalentamiento  $T_s \approx 0,9893$ , que difiere del valor teórico para un fluido de vdW ( $T_s = 1$ ) en alrededor del 1%. Si bien los modelos presentados en este trabajo difieren de la evaporación y vaporización explosiva de gotas en medios líquidos, los resultados de las simulaciones describen correctamente la dinámica de la inestabilidad interfacial y la evaporación explosiva de gotas líquidas en microgravedad.

El problema de la fragmentación y vaporización explosiva de gotas líquidas involucra razones de densidad entre el líquido y el vapor que pueden ser tan altas como un factor de  $\sim 40$ -50. Bajo estas condiciones métodos tradicionales como, por ejemplo, los métodos de diferencias finitas y de volúmenes finitos pueden presentar serios inconvenientes debido a inestabilidades numéricas aún cuando trabajen con técnicas sofisticadas de seguimiento y reconstrucción de la interface, mientras el método SPH es suficientemente robusto para tratar el problema de manera estable y seguir con buena precisión el movimiento y deformación de la interface. En efecto, simulaciones precedentes con el uso de técnicas en diferencias finitas se han limitado solamente al estudio del desarrollo de las inestabilidades interfaciales antes de la fragmentación [127, 36]. Sin embargo, una limitación de los presentes modelos yace en la suposición que los coeficientes de transporte (los coeficientes de viscosidad y conducción térmica) son constantes, es decir, independientes de la densidad y temperatura. En general, es bien sabido que para los líquidos tanto los coeficientes de viscosidad dinámica como de segunda viscosidad disminuyen al aumentar la temperatura. Sin embargo, para algunos líquidos como, por ejemplo, para el agua pura el coeficiente de segunda viscosidad depende más fuertemente de la temperatura que el coeficiente de viscosidad dinámica [128]. Por ejemplo, para modelar la dependencia de la viscosidad dinámica con la temperatura es de uso común la expresión empírica

$$\eta = A \exp(-BT), \quad (8.1)$$

donde  $A$  y  $B$  son coeficientes a determinar de manera empírica para la mayoría de los casos [128]. Por otro lado, es también notorio que el coeficiente de conducción térmica disminuye con la temperatura para la mayoría de los líquidos [129]. En particular, la conductividad del vapor tiene un efecto importante en los procesos de intercambio de calor entre la burbuja en expansión y la capa líquida a su alrededor, lo que puede afectar la intensidad de la explosión o bien determinar la implosión de la burbuja [130]. Por ejemplo, si el líquido en cuestión no es buen conductor del calor entonces la tasa de transferencia de calor del líquido al vapor decrece y, por lo tanto, el crecimiento y la expansión de la burbuja también decrecerán. De esta manera para poder realizar

comparaciones cuantitativas con resultados experimentales de la evaporación ordinaria y explosiva de gotas será de fundamental importancia incluir las dependencias de los coeficientes de transporte con la temperatura en las ecuaciones de la hidrodinámica. Por lo tanto, estudios futuros en esta línea de investigación considerarán la posibilidad de caracterizar el tipo de líquido usando ecuaciones de estado diferentes a la ecuación de vdW junto con coeficientes de transporte dependientes de la temperatura.

La resolución empleada en las presentes simulaciones, correspondiente a  $N = 10000$  partículas, se basa en cálculos de convergencia para modelos de gotas en evaporación bien sea por descomposición espinodal o por nucleación homogénea. En estos cálculos separados se encontró que las temperaturas y densidades de las configuraciones finales coincidían en menos del 2% con los valores de equilibrio sobre la curva binodal. Sin embargo, el número de partículas empleado es un factor importante sobre todo en lo que concierne el estudio de la fragmentación y vaporización explosiva de gotas. Si bien para resoluciones de 10000 partículas los modelos pueden dar resultados aceptables desde el punto de vista cualitativo, inclusive comparados con resoluciones espaciales aún mayores, pueden haber diferencias cuantitativas, por ejemplo, en el número de fragmentos producidos sobre todo en los casos de supercalentamiento acompañado de fragmentación rápida o explosiva. Además, la resolución puede también influir en los tiempos de rompimiento de las capas líquidas alrededor de burbujas en expansión, en los valores predichos del límite de supercalentamiento, en los efectos de tensión superficial y la estructura y espesor de la interface difusa que separa el líquido de su atmósfera de vapor. En investigaciones futuras se planea hacer uso de un mayor número de partículas para examinar la capacidad del método para reproducir detalles de la estructura de la interface difusa y efectuar comparaciones con datos experimentales en la literatura tanto para gotas en microgravedad como para gotas inmersas en medios líquidos bajo la acción de la gravedad.

# Capítulo 9

## Bibliografía

- [1] E. P. Favvas and A. Ch. Mitropoulos. What is spinodal decomposition? *Journal of Engineering Science and Technology Review*, 1:25–27, 2008.
- [2] J. S. Rowlinson and B. Widom. *Molecular Theory of Capillarity*. Dover, New York, 2002.
- [3] B. Ditchek and L. H. Schwartz. Applications of spinodal alloys. *Annual Review of Materials Science*, 9:219–253, 1979.
- [4] W. R. Cribb and J. O. Ratka. Copper spinodal alloys. *Advanced Materials and Processes*, 160(11):27–30, 2002.
- [5] A. Putnis. *Introduction to Mineral Sciences*. Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [6] P. Papon, L. Leblond, and P. H. E. Meijer. *The Physics of Phase Transitions: Concepts and Applications*. Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [7] M. U. Kim, J. P. Ahn, H. K. Seok, E. Fleury, H. J. Chang, D. H. Kim, P. R. Cha, and Y. C. Kim. Application of spinodal decomposition to produce metallic glass matrix composite with simultaneous improvement of strength and plasticity. *Metals and Materials International*, 15:193–196, 2009.
- [8] J. W. Cahn and J. E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. iii. nucleation in a two-component incompressible fluid. *Journal of Chemical Physics*, 31(3):688–699, 1959.
- [9] J. W. Cahn. On spinodal decomposition. *Acta Metallica*, 9:795–801, 1961.
- [10] Y. Guissani and B. Guillot. A computer simulation study of the liquid-vapor coexistence curve of water. *Journal of Chemical Physics*, 98(10):8221–8235, 1993.
- [11] W. R. Osborn, E. Orlandini, M. R. Swift, J. M. Yeomans, and J. R. Banavar. Lattice boltzmann study of hydrodynamic spinodal decomposition. *Physical Review Letters*, 75(22):4031–4034, 1995.
- [12] B. T. Nadiga and S. Zaleski. Investigations of a two-phase fluid model. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 15:885–896, 1996.

- [13] V. Sofonea, A. Lamura, G. Gonnella, and A. Cristea. Finite-difference lattice boltzmann model with flux limiters for liquid-vapor systems. *Physical Review E*, 70:046702, 2004.
- [14] R. Borcia and M. Bestehorn. Phase-field simulations for drops and bubbles. *Physical Review E*, 75:056309, 2007.
- [15] A. Charles and P. Daivis. Smooth particle methods for vapour liquid coexistence. In F. Chan, D. Marinova, and R. S. Anderssen, editors, *Proceedings of the 19th World IMACS Congress and MODSIM11 International Congress of Modelling and Simulation*, pages 516–522. The Modelling and Simulation Society of Australia and New Zealand, Canberra, Australia, 2011.
- [16] A. G. Lamorgese and R. Mauri. Diffuse-interface modelling of liquid-vapor phase separation in a van der waals fluid. *Physics of Fluids*, 21(4):044107, 2009.
- [17] D. Reith, K. Bucior, L. Yelash, P. Virnau, and K. Binder. Spinodal decomposition of polymer solutions: molecular dynamics simulations of the two-dimensional case. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24:115102, 2012.
- [18] M. Pütz and P. Nielaba. Effects of temperature on spinodal decomposition and domain growth of liquid-vapor systems with smoothed particle hydrodynamics. *Physical Review E*, 91:032303, 2015.
- [19] S. Nugent and H. A. Posch. Liquid drops and surface tension with smoothed particle applied mechanics. *Physical Review E*, 62(4):4968–4975, 2000.
- [20] N. G. Hadjiconstantinou, A. L. Garcia, and B. J. Alder. Surface properties of a van der waals fluid. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 281(1-4):337–347, 2000.
- [21] P. B. Warren. Vapor-liquid coexistence in many-body dissipative particle dynamics. *Physical Review E*, 68:066702, 2003.
- [22] L. Di G. Sigalotti, J. Troconis, E. Sira, and F. Peña-Polo. Diffuse-interface modeling of liquid-vapor coexistence in equilibrium drops using smoothed particle hydrodynamics. *Physical Review E*, 90:013021, 2014.
- [23] L. Di G. Sigalotti, J. Troconis, E. Sira, F. Peña-Polo, and J. Klapp. Smoothed particle hydrodynamics simulations of evaporation and explosive boiling of liquid drops in microgravity. *Physical Review E*, 92:013021, 2015.
- [24] H.-B. Xiong, C.-Y. Zhang, and Z.-S. Yu. Multiphase sph modeling of water boiling on hydrophilic and hydrophobic surfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 130:680–692, 2019.
- [25] C. Zhang, H. Liang, X. Yuan, G. Liu, Z. Guo, and L. Wang. Lattice-boltzmann model for van der waals fluids with liquid-vapor phase transition. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 179:121741, 2021.
- [26] H. Wakeshima and K. Takada. On the limit of superheat. *Journal of the Physical Society of Japan*, 13(11):1398–1403, 1958.

- [27] G. R. Moore. Vaporization of superheated drops in liquids. *AIChE Journal*, 5(4):458–466, 1959.
- [28] J. E. Shepherd and B. Sturtevant. Rapid evaporation at the superheat limit. *Journal of Fluid Mechanics*, 121:379–402, 1982.
- [29] D. L. Frost and B. Sturtevant. Explosive boiling of a droplet at the superheat limit. *Physics of Fluids*, 29(9):2777–2777, 1986.
- [30] D. L. Frost. Dynamics of explosive boiling of a droplet. *Physics of Fluids*, 31(9):2554–2561, 1988.
- [31] M. Blander, D. Hengstenberg, and J. L. Katz. Bubble nucleation in n-pentane, n-hexane and n-pentane + hexadecane mixtures and water. *Journal of Physical Chemistry*, 75(23):3613–3619, 1971.
- [32] W. Porteous and M. Blander. Limits of superheat and explosive boiling of light hydrocarbons, halocarbons, and hydrocarbon mixtures. *AIChE Journal*, 21(3):560–566, 1975.
- [33] C. T. Avedisian and I. Glassman. High pressure homogeneous nucleation of bubbles within superheated binary liquid mixtures. *Journal of Heat Transfer*, 103(2):272–280, 1981.
- [34] H.-C. Park, K.-T. Byun, and H.-Y. Kwak. Explosive boiling of liquid droplets at their superheat limits. *Chemical Engineering Science*, 60(7):1809–1821, 2005.
- [35] H. S. Lee and H. Merte. The origin of the dynamic growth of vapor bubbles related to vapor explosions. *Journal of Heat Transfer*, 120(1):174–182, 1998.
- [36] A. Esmaeeli and G. Tryggvason. Computations of explosive boiling in microgravity. *Journal of Scientific Computing*, 19:163–182, 2003.
- [37] J. M. Domínguez, G. Fourtakas, C. Altomare, R. B. Canelas, A. Tafuni, O. García-Feal, I. Martínez-Estévez, A. Mokos, R. Vacondio, A. J. C. Crespo, B. D. Rogers, P. K. Stansby, and M. Gómez-Gesteira. Dualsphysics: from fluid dynamics to multiphysics problems. *Computational Particle Mechanics*, pages 1–29, 2021.
- [38] D. M. Anderson, G. B. McFadden, and A. A. Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30:139–165, 1998.
- [39] D. Jasnow and J. Viñals. Coarse-grained description of thermo-capillary flow. *Physics of Fluids*, 8(3):660–669, 1996.
- [40] D. Jacqmin. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 402:57–88, 2000.
- [41] C. Kunkelmann and P. Stephan. Cfd simulation of boiling flows using the volume-of-fluid method within openfoam. *Numerical Heat Transfer. Part A: Applications*, 56(8):631–646, 2009.



- [42] G. Son, V. K. Dhir, and N. Ramanujapu. Dynamics of heat transfer associated with a single bubble during nucleate boiling on a horizontal surface. *Journal of Heat Transfer*, 121(3):623–631, 1999.
- [43] Z. Dong, W. Li, and Y. Song. A numerical investigation of bubble growth on and departure from a superheated wall by lattice-boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(21-22):4908–4916, 2010.
- [44] H. Safari, M. H. Rahimian, and M. Krafczyk. Extended lattice boltzmann method for numerical simulation of thermal phase change in two-phase fluid flow. *Physical Review E*, 88(1):013304, 2013.
- [45] Q. Li, K. H. Luo, Q. J. Kang, Y. L. He, Q. Chen, and Q. Liu. Lattice boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. *Progress in Energy and Combustion Science*, 52:62–105, 2016.
- [46] S. W. J. Welch and J. Wilson. A volume of fluid based method for fluid flows with phase change. *Journal of Computational Physics*, 160(2):662–682, 2000.
- [47] G. Tomar, G. Biswas, A. Sharma, and A. Agarwal. Numerical simulation of bubble growth in film boiling using a coupled level-set and volume-of-fluid method. *Physics of Fluids*, 17(11):112103, 2005.
- [48] A. Onuki. Dynamic van der waals theory of two-phase fluids in heat flow. *Physical Review Letters*, 94(5):054501, 2005.
- [49] J. Liu, C. M. Landis, H. Gomez, and T. J. R. Hughes. Liquid-vapor phase transition: thermomechanical theory, entropy stable numerical formulation, and boiling simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 297:476–553, 2015.
- [50] S. Gong and P. Cheng. Lattice boltzmann simulation of periodic bubble nucleation, growth and departure from a heated surface in pool boiling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 64:122–132, 2013.
- [51] Q. Li, Q. J. Kang, M. M. Francois, Y. L. He, and K. H. Luo. Lattice boltzmann modeling of boiling heat transfer: The boiling curve and the effects of wettability. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 85:787–796, 2015.
- [52] Q. Li, Y. Yu, and Z. X. Wen. How does boiling occur in lattice boltzmann simulations? *Physics of Fluids*, 32(9):093306, 2020.
- [53] X. Xu and T. Qian. Single-bubble dynamics in pool boiling of one-component fluids. *Physical Review E*, 89(6):063002, 2014.
- [54] A. Toghianiyan, M. Zarringhalam, O. A. Akbari, G. A. S. Shabani, and D. Toghraie. Application of lattice boltzmann method and spinodal decomposition phenomenon for simulating two-phase thermal flows. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 509:673–689, 2018.
- [55] M. Nemati, A. Abady, D. Toghraie, and A. Karimipour. Numerical investigation of the pseudo potential lattice boltzmann modeling of liquid-vapor for multiphase flows. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 489:65–77, 2018.

- [56] L. N. Long, M. M. Micci, and B. C. Wong. Molecular dynamics simulations of droplet evaporation. *Computer Physics Communications*, 96(2-3):167–172, 1996.
- [57] S. Maruyama and T. Kimura. A molecular dynamics simulation of a bubble nucleation on solid surface. *International Journal of Heat and Technology*, 18:69–74, 2000.
- [58] Y. S. Dou, L. V. Zhigilei, N. Winograd, and B. J. Garrison. Explosive boiling of water films adjacent to heated surfaces: A macroscopic description. *The Journal of Physical Chemistry A*, 105:2748–2755, 2001.
- [59] X. Gu and H. M. Urbassek. Atomic dynamics of explosive boiling of liquid-argon films. *Applied Physics B*, 81:675–679, 2005.
- [60] R. Holyst and M. Litniewski. Heat transfer at the nanoscale: Evaporation of nanodroplets. *Physical Review Letters*, 100:055701, 2008.
- [61] J. Zhang, F. Leroy, and F. Müller-Plathe. Evaporation of nanodroplets on heated substrates: A molecular dynamics simulation study. *Langmuir*, 29(31):9770–9782, 2013.
- [62] A. Hens, R. Agarwal, and G. Biswas. Nanoscale study of boiling and evaporation in a liquid argon film on a platinum heater using molecular dynamics simulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 71:303–312, 2014.
- [63] S. M. Shavik, M. N. Hasan, and A. K. M. M. Morshed. Molecular dynamics study on explosive boiling of thin liquid argon film on nanostructured surface under different wetting conditions. *The Journal of Electronic Packaging*, 138(1), 2016.
- [64] S. Zhang, F. Hao, H. Chen, W. Yuan, Y. Tang, and X. Chen. Molecular dynamics simulation on explosive boiling of liquid argon film on copper nanochannels. *Applied Thermal Engineering*, 113:208–214, 2017.
- [65] R. Diaz and Z. Guo. A molecular dynamics study of phobic/philic nano-patterning on pool boiling heat transfer. *Heat and Mass Transfer*, 53:1061–1071, 2017.
- [66] D. T. Semiromi and A. R. Azimian. Molecular dynamics simulation of liquid-vapor equilibrium by using the modified Lennard-Jones potential function. *Heat and Mass Transfer*, 46(3):287–294, 2010.
- [67] D. T. Semiromi and A. R. Azimian. Molecular dynamics simulation of annular flow boiling with the modified Lennard-Jones potential function. *Heat and Mass Transfer*, 48(1):141–152, 2012.
- [68] A. Tartakovsky and P. Meakin. Modeling of surface tension and contact angles with smoothed particle hydrodynamics. *Physical Review E*, 72:026301, 2005.
- [69] Z. Xu, P. Meakin, and A. M. Tartakovsky. Diffuse-interface model for smoothed particle hydrodynamics. *Physical Review E*, 79:036702, 2009.

- [70] J. S. Ervin, H. Merte, R. B. Keller, and K. Kirk. Transient pool boiling in microgravity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(3):659–674, 1992.
- [71] R. Kobayashi. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth. *Physica D*, 63:410–423, 1993.
- [72] A. A. Wheeler, B. T. Murray, and R. J. Schaefer. Computation of dendrites using a phase-field model. *Physica D*, 66:243–262, 1993.
- [73] J. A. Warren and W. J. Boettinger. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43(2):689–703, 1995.
- [74] L. K. Antanovskii. A phase-field model of capillarity. *Physics of Fluids*, 7:747–753, 1995.
- [75] M. E. Gurtin, D. Polignone, and J. Viñals. Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 6(6):815–831, 1996.
- [76] B. U. Felderhof. Dynamics of the diffuse gas-liquid interface near the critical point. *Physica*, 48(4):541–560, 1970.
- [77] J. S. Langer and L. A. Turski. Hydrodynamic model of the condensation of a vapor near its critical point. *Physical Review A*, 8:3230–3243, 1973.
- [78] B. I. Halperin, P. C. Hohenberg, and E. D. Siggia. Renormalization-group calculations of divergent transport coefficients at critical points. *Physical Review Letters*, 32:1289–1292, 1974.
- [79] E. D. Siggia, B. I. Halperin, and P. C. Hohenberg. Renormalization-group treatment of the critical dynamics of the binary-fluid and gas-liquid transitions. *Physical Review B*, 13:2110–2123, 1976.
- [80] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, 49(3):435–479, 1977.
- [81] A. Onuki and K. Kawasaki. Nonequilibrium steady state of critical fluids under shear flow: a renormalization group approach. *Annals of Physics*, 121(1-2):456–528, 1979.
- [82] J. W. Gibbs. *Collected Works*. Yale University Press, New Haven, 1948.
- [83] H. R. Pruppacher and J. D. Klett. *Microphysics of Clouds and Precipitation*. Kluwer Academic Publishers, The Netherland, 1997.
- [84] R. P. Sear. Quantitative studies of crystal nucleation at constant supersaturation: Experimental data and models. *CrystEngComm*, 16(29):6506–6522, 2014.
- [85] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 82:1013–1024, 1977.

- [86] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics – theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 181:375–389, 1997.
- [87] P. Herrera, M. Massabo, and R. Beckie. A meshless method to simulateolute transport in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, 32:413–429, 2009.
- [88] L. Di G. Sigalotti, J. Klapp, O. Rendón, C. A. Vargas, and F. Peña-Polo. On the kernel and particle consistency in smoothed particle hydrodynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 108:242–255, 2016.
- [89] J.J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 30:543–574, 1992.
- [90] J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on Progress in Physics*, 68(8):1703–1759, 2005.
- [91] M. B. Liu and G. R. Liu. Smoothed particle hydrodynamics (sph): An overview and recent developments. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17:25–76, 2010.
- [92] L. Di G. Sigalotti, O. Rendón, J. Klapp, C. A. Vargas, and F. Cruz. A new insight into the consistency of the sph interpolation formula. *Applied Mathematics and Computation*, 356:50–73, 2019.
- [93] M. B. Liu and G. R. Liu. Restoring particle consistency in smoothed particle hydrodynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 56:19–36, 2006.
- [94] Q. Zhu, L. Hernquist, and Y. Li. Numerical convergence in smoothed particle hydrodynamics. *The Astrophysical Journal*, 800(1)(1):6, 2015.
- [95] J. K. Chen, J. E. Beraun, and C. J. Jih. An improvement for tensile in smoothed particle hydrodynamics. *Computational Mechanics*, 23:279–287, 1999.
- [96] P. W. Randles and L. D. Libersky. Smooth particle hydrodynamics: some recent improvements and applications. *Computer Methods in Applied Mechanical Engineering*, 139:375–408, 1996.
- [97] J. Bonet and T.-S. L. Lok. Variational and momentum preservation aspects of smooth particle hydrodynamic formulations. *Computer Methods in Applied Mechanical Engineering*, 180:97–115, 1999.
- [98] L. Hernquist and N. Katz. Treesph-a unification of sph with the hierarchical tree method. *The Astrophysical Journal and Supplement Series*, 70:419–446, 1989.
- [99] R. Vignjevic and J. Campbell. *Review of Development of the Smooth Particle Hydrodynamics (SPH) Method*, pages 367–396. Springer, Dordrecht, Netherland, 2009.
- [100] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 46:429–453, 1982.

- [101] D. Molteni and A. Colagrossi. A simple procedure to improve the pressure evaluation in hydrodynamic context using the sph. *Computer Physics Communications*, 180:861–872, 2009.
- [102] M. Yildiz, R. A. Rook, and A. Suleman. Sph with the multiple boundary tangent method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 77(10):1416–1438, 2009.
- [103] L. Brookshaw. Solving the heat diffusion equation. *Memorie della Società Astronomica Italiana*, 65(4):1033–1042, 1994.
- [104] M. Jubelgas, V. Springel, and K. Dolag. Thermal conduction in cosmological sph simulations. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 351:423–435, 2004.
- [105] L. Verlet. Computer ‘experiments’ on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Physical Review*, 159:98–103, 1967.
- [106] J. W. Swegle, D. L. Hicks, and S. W. Attaway. Smoothed particle hydrodynamics stability analysis. *Journal of Computational Physics*, 116:123–134, 1995.
- [107] J. P. Gray, J. J. Monaghan, and R. P. Swift. Sph elastic dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190:6641–6662, 2001.
- [108] M. Schüssler and D. Schmitt. Comments on smoothed particle hydrodynamics. *Astronomy and Astrophysics*, 97:373–379, 1981.
- [109] C. T. Dyka and R. P. Ingel. An approach for tension instability in smoothed particle hydrodynamics (sph). *Computers & Structures*, 57:573–580, 1995.
- [110] C. T. Dyka, P. W. Randles, and R. P. Ingel. Stress points for tension instability in sph. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40:2325–2341, 1997.
- [111] J. J. Monaghan. Sph without tensile instability. *Journal of Computational Physics*, 159:290–311, 2000.
- [112] Y. Meleán, L. Di G. Sigalotti, and A. Hasmy. On the sph tensile instability in forming viscous liquid drops. *Computer Physics Communications*, 157:191–200, 2004.
- [113] W. G. Hoover, C. G. Hoover, and E. C. Merritt. Smooth-particle applied mechanics: Conservation of angular momentum with tensile stability and velocity averaging. *Physical Review E*, 69:016702–1–10, 2004.
- [114] X. Yang, M. Liu, and S. Peng. Smoothed particle hydrodynamics modeling of viscous liquid drop without tensile instability. *Computers & Fluids*, 92:199–208, 2014.
- [115] H. Xiong, Q. Wang, C. Zhang, H. Wang, and J. Lin. Droplet evaporation to boiling in van der waals fluid. *Journal of Thermal Science*, 31:790–801, 2022.

- [116] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*, volume 6. Elsevier, Amsterdam, 2013.
- [117] G. Nagashima, E. V. Levine, D. P. Hoogerheide, M. M. Burns, and J. A. Golovchenko. Superheating and homogeneous single bubble nucleation in a solid-state nanopore. *Physical Review Letters*, 113:024506, 2014.
- [118] M. N. Berberan-Santos, E. N. Bodunov, and L. Pogliani. The van der waals equation: Analytical and approximate solutions. *Journal of Mathematical Chemistry*, 43(4):1437–1457, 2008.
- [119] A. Elgowainy and A. Ashgriz. Microexplosion of emulsified fuel drops. In P. Catania, B. Golchert, and C. Q. Zhou, editors, *Energy 2000: The Beginning of a New Millennium*, pages 32–37. Technomic, Lancaster, PA, 2000.
- [120] C. T. Avedisian. The homogeneous nucleation limits of liquids. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 14(3):695–729, 1985.
- [121] T. Abbasi and S. A. Abbasi. Accidental risk of superheated liquids and a framework for predicting the superheat limit. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 20:165–181, 2007.
- [122] F. I. Khan and S. A. Abbasi. An assessment of the likelihood of occurrence, and the damage potential of domino effect (chain of accidents) in a typical cluster of industries. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 14:283–306, 2001.
- [123] H. N. V. Temperley. The behaviour of water under hydrostatic tension: Iii. *Proceedings of the Physical Society*, 59(2):199–208, 1947.
- [124] H. N. V. Temperley and D. H. Trevena. Metastability of the liquid-vapor transition and related effects. *Journal of Statistical Physics*, 77(1/2):501–508, 1994.
- [125] R. C. Reid. Rapid phase transitions from liquid to vapor. *Advances in Chemical Engineering*, 12:105–208, 1983.
- [126] B. Sigales Pueyo and A. Trujillo Ventura. Modelado de estallidos de recipientes. *Ingeniería Química*, 259:465–473, 1990.
- [127] A. Elgowainy and N. Ashgriz. The rayleigh-taylor instability of viscous fluid. *Physics of Fluids*, 9(6):1635–1649, 1997.
- [128] M. J. Holmes, N. G. Parker, and M. J. W. Povey. Temperature dependence of bulk viscosity in water using acoustic spectroscopy. *Journal of Physics: Conference Series*, 269:012011, 2011.
- [129] R. C. Reid, J. M. Prausnitz, and T. K. Sherwood. *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill, New York, 1983.
- [130] N. Makouie and A. A. Taheri. Numerical evaluation of microbubble behavior: Effect of magnetic field and bubble shell viscosity. *Indian Journal of Scientific Research*, 1(2):268–274, 2014.

# Lista de Figuras

5.1.	Representación de la ecuación de estado de van der Waals para diferentes valores de temperatura $T$ . La curva roja corresponde a la temperatura crítica, $T_{cr}$ . La presión crítica y el volumen crítico quedan definidos como la ordenada y la abscisa del punto crítico, respectivamente. . . . .	17
5.2.	Temperatura de inversión de Joule-Thomson de acuerdo con la Ec. (5.21). . . . .	19
5.3.	Isoterma subcrítica de van der Waals donde se muestra la construcción de Maxwell de la curva binodal. . . . .	20
5.4.	Curva binodal en el plano $(p, v)$ (línea negra). La curva azul corresponde a la isoterma crítica. . . . .	22
5.5.	Curvas binodal y espinodal en el diagrama de fase temperatura versus fracción molar del componente $x_B$ . . . . .	35
6.1.	Dibujo esquemático que muestra la discretización SPH usando una función kernel con soporte compacto. . . . .	42
7.1.	Dibujo esquemático que muestra el estado inicial del sistema para la prueba de validación de la ecuación de conducción térmica. . . . .	61
7.2.	Perfiles de temperatura a diferentes tiempos para un fluido en reposo en presencia de una discontinuidad térmica en $x_m = 0,5$ obtenidos con $10^6$ partículas SPH usando condiciones de contorno periódicas. Los símbolos representan la solución numérica y la línea sólida es la solución analítica dada por la Ecuación (7.2). El recuadro en la parte inferior derecha muestra una ampliación de la región central de tamaño $(x_m \pm 0,05, \bar{T} \pm 0,01)$ . . . . .	63
7.3.	Comparación de la solución numérica (símbolos) con la solución analítica (línea sólida) a resoluciones de $10^4$ , $2,5 \times 10^5$ , $10^6$ partículas SPH a un tiempo $t = 1$ . Los dos recuadros superiores muestran los perfiles para $0 \leq x \leq 0,1$ (recuadro izquierdo) y para $0,2 \leq x \leq 0,3$ (recuadro derecho). . . . .	63

7.4.	Perfiles de densidad (recuadro superior izquierdo), de temperatura (recuadro superior derecho) y de presión (recuadro inferior izquierdo) de la gota en equilibrio para $N = 900, 3600, 6400, 8100$ y $10000$ partículas SPH. El recuadro inferior derecho muestra una amplificación de las trayectorias seguidas por los modelos en el plano $T$ vs $\rho$ . La línea recta en negro corresponde a un segmento de la curva binodal. Todos los modelos evolucionan hasta alcanzar equilibrio termo-mecánico en un punto sobre la curva binodal. La gota con resolución de $900$ partículas (trayectoria verde) alcanza la binodal con una temperatura menor que para los otros casos y comienza a oscilar de manera errática alrededor del equilibrio sin alcanzarlo exactamente. Para el mismo tiempo de evolución las gotas con $N \geq 3600$ partículas alcanzan la binodal siguiendo trayectorias muy similares. Convergencia en las trayectorias se alcanza con $N \geq 8100$ partículas, donde se observa claramente superposición de las trayectorias con el modelo de $N = 10000$ partículas. . . . .	66
7.5.	Evolución temporal de la energía cinética para los tres modelos del Cuadro 7.3. En los tres casos la energía cinética disminuye a medida que se disipa tendiendo a cero cuando la gota alcanza su estado de equilibrio.	68
7.6.	Evolución temporal de la energía interna para los tres modelos del Cuadro 7.3. En los tres casos la energía interna tiende asintóticamente a un valor negativo cuando la gota circular alcanza su estado de equilibrio.	68
7.7.	Evolución de la temperatura (recuadro superior) y trayectorias en el diagrama temperatura-densidad para los tres modelos de gotas del Cuadro 7.3 (recuadro inferior). . . . .	69
7.8.	Cambio de entropía como función del tiempo para los tres modelos del Cuadro 7.3. . . . .	69
7.9.	Imagen renderizada de las tres gotas en equilibrio termo-mecánico que se usarán como condiciones iniciales para las simulaciones de la evaporación de gotas por calentamiento. (a) Gota correspondiente al Modelo 1, (b) al Modelo 2 y (c) al Modelo 3 del Cuadro 7.3. . . . .	70
7.10.	Diagrama de fase que muestra la curva binodal (línea sólida) y la curva espinodal (línea segmentada) para este fluido de van der Waals. Los símbolos negros denotan las posiciones de equilibrio sobre la binodal de las gotas que se muestran en la Figura 7.7. Los símbolos a la derecha sobre la binodal representan las condiciones iniciales de las gotas al momento del calentamiento. Los triángulos blancos corresponden al Modelo 1, los cuadrados blancos al Modelo 2 y los círculos blancos al Modelo 3 para diferentes temperaturas de calentamiento en el intervalo $0,8 \leq T_0 \leq 3,6$ . . . . .	70



7.11.	Gotas en equilibrio con su atmósfera de vapor a un tiempo $t = 3000$ en unidades reducidas durante la evolución del modelo 1 ( $\rho \approx 1,833$ , $T \approx 0,2967$ ; paneles superiores), del modelo 2 ( $\rho \approx 1,6805$ , $T \approx 0,5248$ ; paneles intermedios y del modelo 3 ( $\rho \approx 1,4977$ , $T \approx 0,7324$ ; paneles inferiores) para calentamientos con temperaturas $T_0 = 1,8$ , $1,4$ y $1,2$ , respectivamente. Los paneles a la izquierda corresponden a la densidad renderizada, mientras los paneles a la derecha muestran la distribución de temperatura. Las barras de colores a la izquierda de cada recuadro indican los contrastes de densidad y temperatura. Todos los números están en unidades reducidas. . . . .	73
7.12.	Diagrama de fase que muestra las densidades y temperaturas en equilibrio para todos los modelos que experimentaron evaporación superficial y nucleación homogénea transitoria sin fragmentar. Los símbolos sobre la curva binodal son los mismos usados en la Figura 7.10 para indicar las condiciones iniciales de calentamiento. La línea sólida corresponde a la curva binodal, mientras la línea segmentada dibuja la curva espinodal para este fluido de vdW. . . . .	74
7.13.	Perfiles radiales de densidad, presión y temperatura para los modelos de equilibrio de la Figura 7.11. Los recuadros superiores corresponden al modelo 1, los intermedios al modelo 2 y los inferiores al modelo 3. La línea vertical en los gráficos de densidad marcan la posición del radio equimolar de acuerdo con la expresión (7.5). Todos los números están en unidades reducidas. . . . .	75
7.14.	Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales $\rho \approx 1,4977$ y $T \approx 0,7324$ (Modelo 3) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura $T_0 = 1,6$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. El tiempo $t = 3000$ corresponde a un tiempo suficientemente largo para cuando la gota ha ya alcanzado equilibrio termo-mecánico con su atmósfera de vapor. . . . .	77
7.15.	Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales $\rho \approx 1,6805$ y $T \approx 0,5248$ (Modelo 2) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura $T_0 = 1,6$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. El tiempo $t = 3000$ corresponde a un tiempo suficientemente largo para cuando la gota ha ya alcanzado equilibrio termo-mecánico con su atmósfera de vapor. . . . .	78

- 7.16. Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  (Modelo 1) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,0$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. El tiempo  $t = 3000$  corresponde a un tiempo suficientemente largo para cuando la gota ha ya alcanzado equilibrio termo-mecánico con su atmósfera de vapor. . . . . 79
- 7.17. Logaritmo natural de la presión de vapor como función del inverso de la temperatura para los modelos que experimentaron evaporación superficial y nucleación homogénea en mayor o menor medida. La línea sólida ajusta los datos numéricos (símbolos) a la ecuación de Clausius-Clapeyron (7.7). La pendiente de la recta  $-\Delta H_{\text{vap}}/\bar{k} \approx -3,14$  define la entalpía de vaporización en unidades reducidas para este fluido de vdW. . . . . 82
- 7.18. Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,4977$  y  $T \approx 0,7324$  (Modelo 3) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,4$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. Al tiempo  $t = 230$  las pequeñas gotas se expanden lentamente en equilibrio termo-mecánico con sus atmósferas de vapor. La escala espacial de los últimos dos recuadros para  $t = 230$  se ha cambiado para apreciar mejor los fragmentos líquidos en expansión. . . . . 84
- 7.19. Densidad (primera, tercera y quinta fila de recuadros) y temperatura (segunda, cuarta y sexta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  (Modelo 1) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,2$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. Al tiempo  $t = 840$  lo que queda de la capa líquida se divide en dos fragmentos, los cuales coalescen para formar una gota de menor tamaño que la inicial antes del calentamiento en equilibrio con su atmósfera de vapor. . . . . 85
- 7.20. Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales  $\rho \approx 1,833$  y  $T \approx 0,2967$  (Modelo 1) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura  $T_0 = 2,4$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. Al tiempo  $t = 750$  lo que queda de la capa líquida se ha dividido en dos fragmentos, los cuales sobreviven alejándose lentamente en equilibrio con sus respectivas atmósferas de vapor. . . . . 86

7.21. Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales $\rho \approx 1,4977$ y $T \approx 0,7324$ (Modelo 3) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura $T_0 = 2,8$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas. Al tiempo $t = 110$ lo que queda de la capa líquida se ha dividido en 15 fragmentos, de los cuales solo 13 sobreviven al tiempo $t = 210$ alejándose rápidamente en equilibrio con sus respectivas atmósferas de vapor. . . .	88
7.22. Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales $\rho \approx 1,4977$ y $T \approx 0,7324$ (Modelo 3) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura $T_0 = 3,4$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas.	89
7.23. Densidad (primera y tercera fila de recuadros) y temperatura (segunda y cuarta fila de recuadros) a tiempos discretos durante la evaporación de una gota con densidad y temperatura iniciales $\rho \approx 1,833$ y $T \approx 0,2967$ (Modelo 1) cuando es sometida a calentamiento uniforme con una temperatura $T_0 = 3,6$ . Las barras de colores en el lado derecho indican los contrastes de densidad y temperatura en unidades reducidas.	90
7.24. Masa total de vapor, $M_v$ , como función del tiempo en unidades reducidas para una gota inicialmente en equilibrio termo-mecánico con densidad y temperatura iniciales $\rho \approx 1,4977$ y $T \approx 0,7324$ cuando es sometida a calentamiento uniforme con temperaturas en el intervalo $1,0 \leq T_0 \leq 3,4$ .	94
7.25. Masa total de vapor, $M_v$ , como función del tiempo en unidades reducidas para una gota inicialmente en equilibrio termo-mecánico con densidad y temperatura iniciales $\rho \approx 1,6805$ y $T \approx 0,5248$ cuando es sometida a calentamiento uniforme con temperaturas en el intervalo $1,4 \leq T_0 \leq 3,4$ .	94
7.26. Masa total de vapor, $M_v$ , como función del tiempo en unidades reducidas para una gota inicialmente en equilibrio termo-mecánico con densidad y temperatura iniciales $\rho \approx 1,833$ y $T \approx 0,2967$ cuando es sometida a calentamiento uniforme con temperaturas en el intervalo $1,8 \leq T_0 \leq 3,4$ .	95
A.1. Geometría usada para describir la interface plana. . . . .	116

# Apéndice A

## Equilibrio de una interface plana

En este Apéndice consideraremos el ejemplo simple de una interface plana en equilibrio con el objeto de ilustrar el significado físico de la Ecuación (5.60). Para ello se hará uso de coordenadas Cartesianas, denotando por  $z$  la coordenada normal a la superficie plana, como se muestra esquemáticamente en la Figura A.1, y luego se buscará una solución de la Ecuación (5.60) de la forma  $\rho = \rho(z)$ , que define el perfil de densidad de la zona interfacial. Considerando solo variaciones en la estructura de la interface a lo largo de la dirección  $z$ , la Ecuación (5.60) se reduce a

$$\frac{\partial F^0}{d\rho} - \lambda \frac{d^2 \rho}{dz^2} = \text{constant}, \quad (\text{A.1})$$

la cual está sujeta a las condiciones de frontera

$$\frac{d\rho}{dz} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{d^2 \rho}{dz^2} = 0, \quad (\text{A.2})$$

por ambos lados de la interface tanto en la fase líquida como en la de vapor. Por lo tanto lejos de la interface se cumple la Ecuación (5.58)

$$\frac{\partial F^0}{d\rho} = G^0(\rho) = \text{constant}, \quad (\text{A.3})$$

de manera que

$$G^0(\rho_v) = G^0(\rho_l) = G_{\text{eq}} = \text{constant}, \quad (\text{A.4})$$

donde  $\rho_v$  y  $\rho_l$  son, respectivamente, las densidades de la fase gaseosa y líquida lejos de la interface. La relación (A.3) indica que la energía libre de Gibbs es igual en ambos lados de la interface y corresponde a la condición de equilibrio dada por la Ecuación (5.56). Combinando las Ecuaciones (A.1) y (A.3) se llega a la ecuación

$$G^0(\rho) - \lambda \frac{d^2 \rho}{dz^2} = C, \quad (\text{A.5})$$

donde  $C$  es una constante. Después de algunos pasos algebraicos, la Ecuación (A.5) se puede escribir en la forma

$$G^0(\rho)d\rho = \frac{\lambda}{2} d \left[ \left( \frac{d\rho}{dz} \right)^2 \right] + C d\rho. \quad (\text{A.6})$$

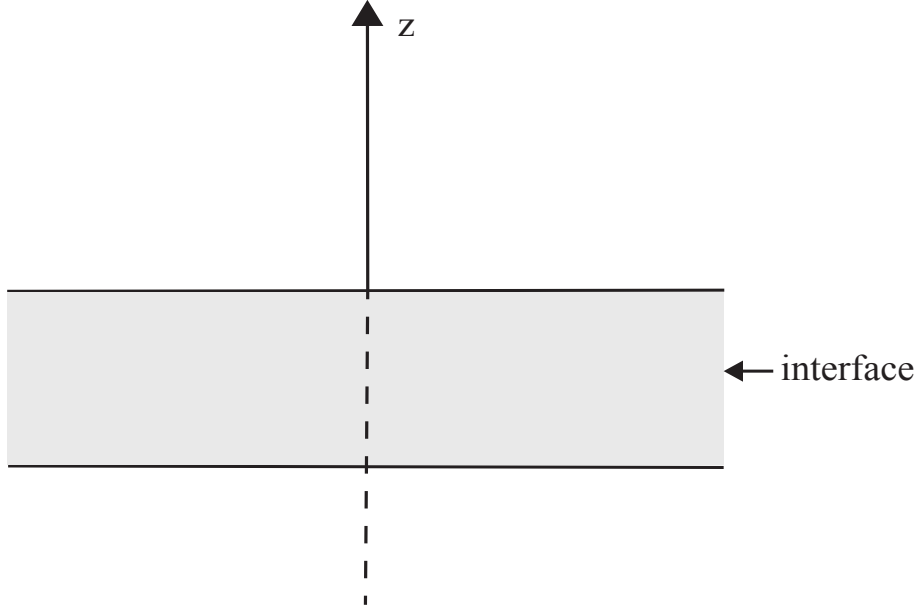


Figura A.1: Geometría usada para describir la interface plana.

Integrando entre  $\rho_v$  y  $\rho$  se obtiene

$$\int_{\rho_v}^{\rho} G^0(\rho) d\rho = \frac{\lambda}{2} \left( \frac{d\rho}{dz} \right)^2 + G(\rho - \rho_v). \quad (\text{A.7})$$

Recordando la Ecuación (A.3), la Ecuación (A.7) se reduce a la expresión

$$\int_{\rho_v}^{\rho} G^0(\rho) d\rho = \int_{\rho_v}^{\rho} \frac{dF^0}{d\rho} d\rho = F^0(\rho) - F^0(\rho_v) = \frac{\lambda}{2} \left( \frac{d\rho}{dz} \right)^2 + G(\rho - \rho_v). \quad (\text{A.8})$$

Notando que  $G_{\text{eq}} = G$  en la expresión anterior y reordenando términos se tiene finalmente la relación

$$F^0(\rho) - F^0(\rho_v) - G_{\text{eq}}(\rho - \rho_v) = \left( \frac{d\rho}{dz} \right)^2. \quad (\text{A.9})$$

Dado que en equilibrio y lejos de la interface  $d\rho/dz = 0$ , la Ecuación (A.9) define las condiciones de equilibrio

$$F^0(\rho_l) - G_{\text{eq}}\rho_l = F^0(\rho_v) - G_{\text{eq}}\rho_v, \quad (\text{A.10})$$

junto con el hecho que recurriendo a la termodinámica clásica, la presión  $p^0 = p^0(\rho, T_0)$ , estará dada por

$$p^0 = \rho G^0 - F^0, \quad (\text{A.11})$$

de donde se sigue que

$$p^0(\rho_l) = p^0(\rho_v). \quad (\text{A.12})$$

Las relaciones (A.10) y (A.12) son suficientes para definir las condiciones de equilibrio a ambos lados de la interface plana, mientras que la relación (A.9) proporciona información acerca de su estructura interna.

# Apéndice B

## Derivación de las ecuaciones modificadas

El comportamiento termodinámico de un fluido puede especificarse clásicamente mediante la expresión  $U = U(S, \rho)$ , cuyo diferencial está definido por la primera ley de la termodinámica para sistemas clásicos

$$dU = TdS + \frac{p}{\rho^2}d\rho, \quad (\text{B.1})$$

donde  $T$  es la temperatura y  $p$  es la presión, que a su vez está dada por la ecuación de estado mediante la relación  $p = p(\rho, T)$ . Sin embargo, como se ha expresado en la Sección 5.3.1, la correcta descripción de la interface en sistemas donde pueden ocurrir transiciones de fase líquido-vapor requiere la inclusión de términos no locales (o no clásicos) en la descripción termodinámica del sistema. En este Apéndice derivaremos las modificaciones a las ecuaciones clásicas de la hidrodinámica (5.31)-(5.34) siguiendo el modelo termodinámico descrito por la aproximación de campo medio de van der Waals, donde el término no local está dado por el parámetro de orden  $\nabla\rho$ . Como es natural para todo sistema termodinámico comenzaremos por considerar la ecuación para la energía interna.

### B.1. Relaciones de clausura

La forma modificada de la ecuación de energía interna dada por la Ecuación (5.70) se puede derivar a partir de las relaciones

$$U = \frac{1}{\rho}F + TS, \quad (\text{B.2})$$

para la energía interna y

$$p = \rho \left( \frac{\partial F}{\partial \rho} \right) - F, \quad (\text{B.3})$$

para la presión. De acuerdo con la relación (B.2), el diferencial de  $U$  es

$$dU = \frac{1}{\rho}dF - \frac{1}{\rho^2}Fd\rho + SdT + TdS. \quad (\text{B.4})$$

De la relación (B.3) se tiene además que

$$-\frac{F}{\rho} = \frac{p}{\rho} - \frac{\partial F}{\partial \rho}. \quad (\text{B.5})$$

Sustituyendo esta forma en la relación (B.4) se llega a la expresión

$$\rho dU = dF + \frac{p}{\rho} d\rho - \frac{\partial F}{\partial \rho} d\rho + \rho S dT + \rho T dS. \quad (\text{B.6})$$

Haciendo ahora uso de la relación (5.45)

$$dF = -\rho S dT + G\rho + \vec{\phi} \cdot d(\nabla\rho),$$

en la expresión (B.6), se llega después de algunos pasos algebraicos a la forma modificada de la primera ley de la termodinámica

$$\rho dU = \rho T dS + \frac{p}{\rho} d\rho + \vec{\phi} \cdot d(\nabla\rho). \quad (\text{B.7})$$

Diferenciando la Ecuación (B.7) con respecto al tiempo se tiene

$$\rho \frac{dU}{dt} = \rho T \frac{dS}{dt} + \frac{p}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \vec{\phi} \cdot \frac{d(\nabla\rho)}{dt}, \quad (\text{B.8})$$

que representa el punto de partida para la derivación de la Ecuación (5.70).

Usando las Ecuaciones (5.31)-(5.34), la Ecuación (B.8) se convierte en

$$\mathbb{T} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} = T \left[ \Delta_s - \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) \right] - p \nabla \cdot \mathbf{v} + \vec{\phi} \cdot \frac{d(\nabla\rho)}{dt}, \quad (\text{B.9})$$

donde el último término del lado derecho puede reescribirse como

$$\vec{\phi} \cdot \frac{d(\nabla\rho)}{dt} = \vec{\phi} \cdot \left[ \frac{\partial(\nabla\rho)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \nabla \rho \right] = \vec{\phi} \cdot \nabla \left( \frac{\partial\rho}{\partial t} \right) + \phi_i v_j \rho_{,ij}, \quad (\text{B.10})$$

donde en notación de índices

$$\vec{\phi} \cdot \mathbf{v} \cdot \nabla \nabla \rho = \phi_i v_j \rho_{,ij}, \quad (\text{B.11})$$

con  $i, j = 1, 2, 3$ . Expandiendo el último término a la derecha de la Ecuación (B.10) se tiene

$$\begin{aligned} \vec{\phi} \cdot \frac{d(\nabla\rho)}{dt} &= \nabla \cdot \left( \vec{\phi} \frac{\partial\rho}{\partial t} \right) - \frac{\partial\rho}{\partial t} \nabla \cdot \vec{\phi} + (\phi_i v_j \rho_{,j})_{,i} - (\phi_i v_j)_{,i} \rho_{,j} \\ &= \nabla \cdot \left( \vec{\phi} \frac{\partial\rho}{\partial t} \right) - \frac{\partial\rho}{\partial t} \nabla \cdot \vec{\phi} + \nabla \cdot \left( \vec{\phi} \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \right) - (\mathbf{v} \cdot \nabla \rho) \nabla \cdot \vec{\phi} - \vec{\phi} \nabla \rho : \nabla \mathbf{v} \\ &= \nabla \cdot \left( \vec{\phi} \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\phi} \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \right) - \left( \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \right) \nabla \cdot \vec{\phi} - \vec{\phi} \nabla \rho : \nabla \mathbf{v} \\ &= \nabla \cdot \left( \vec{\phi} \frac{\partial\rho}{\partial t} \right) - \frac{d\rho}{dt} \nabla \cdot \vec{\phi} - \vec{\phi} \nabla \rho : \nabla \mathbf{v}. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Sustituyendo el último término en el lado derecho de la Ecuación (B.9) por su forma expandida (B.12) y resolviendo para  $\Delta_s$  se puede demostrar que

$$\begin{aligned}\Delta_s &= \frac{1}{T} \left( \mathbb{T} + p\mathbb{I} + \vec{\phi}\nabla\rho \right) : \nabla\mathbf{v} + \nabla \cdot \left[ \frac{\mathbf{q}}{T} - \frac{1}{T} \left( \mathbf{q} + \vec{\phi}\frac{d\rho}{dt} \right) \right] \\ &\quad - \frac{1}{T^2} \left( \mathbf{q} + \vec{\phi}\frac{d\rho}{dt} \right) \cdot \nabla T + \frac{1}{T} \frac{d\rho}{dt} \nabla \cdot \vec{\phi}.\end{aligned}\quad (\text{B.13})$$

Usando la ecuación de continuidad (5.31) es fácil observar que

$$\frac{1}{T} \frac{d\rho}{dt} \nabla \cdot \vec{\phi} = -\frac{1}{T} \rho \nabla \cdot \mathbf{v} \nabla \cdot \vec{\phi} = -\frac{1}{T} \rho (\nabla \cdot \vec{\phi}) (\mathbb{I} : \nabla \mathbf{v}), \quad (\text{B.14})$$

por lo que la generación de entropía toma la forma

$$\begin{aligned}\Delta_s &= \nabla \cdot \left[ \frac{\mathbf{q}}{T} - \frac{1}{T} \left( \mathbf{q} + \vec{\phi}\frac{d\rho}{dt} \right) \right] - \frac{1}{T^2} \left( \mathbf{q} + \vec{\phi}\frac{d\rho}{dt} \right) \cdot \nabla T \\ &\quad + \frac{1}{T} \left[ \mathbb{T} + \left( p - \rho \nabla \cdot \vec{\phi} \right) \mathbb{I} + \vec{\phi}\nabla\rho \right] : \nabla \mathbf{v}.\end{aligned}\quad (\text{B.15})$$

Para todo movimiento físicamente admisible, la segunda ley de la termodinámica requiere que se cumpla la condición  $\Delta_s \geq 0$ . Introduciendo la forma de  $\Delta_s$  dada por la relación (B.15) en la Ecuación (5.34) para el cambio de entropía se tiene finalmente que

$$\begin{aligned}\hat{\Delta}_s = \Delta_s - \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) &= \frac{1}{T} \left[ \mathbb{T} + \left( p - \rho \nabla \cdot \vec{\phi} \right) \mathbb{I} + \vec{\phi}\nabla\rho \right] : \nabla \mathbf{v} \\ &\quad - \nabla \cdot \left[ \frac{1}{T} \left( \mathbf{q} + \vec{\phi}\frac{d\rho}{dt} \right) \right] - \frac{1}{T^2} \left( \mathbf{q} + \vec{\phi}\frac{d\rho}{dt} \right) \cdot \nabla T,\end{aligned}\quad (\text{B.16})$$

donde la condición  $\hat{\Delta}_s \geq 0$  se satisface siempre y cuando se satisfagan también las condiciones de clausura (5.72) y (5.73), es decir, si y solo si se cumple que

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T - \vec{\phi}\frac{d\rho}{dt}, \quad (\text{B.17})$$

y

$$\mathbb{T} = (-p + \rho \nabla \cdot \vec{\phi}) \mathbb{I} - \vec{\phi}\nabla\rho + \mathbb{S}, \quad (\text{B.18})$$

donde  $\mathbb{S} = \mathbb{T} + p\mathbb{I}$  es el tensor de esfuerzos viscosos,  $\kappa > 0$  y  $\mathbb{S} : \nabla \mathbf{v} \geq 0$ .

## B.2. Ecuaciones modificadas

La ecuación de continuidad preserva exactamente su forma en el modelo de interface difusa (véase la Ecuación 5.68). Haciendo ahora uso de la relación de clausura (B.18) en el lado derecho de la ecuación de momento (5.32) se obtiene

$$\begin{aligned}\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= -\nabla \cdot p\mathbb{I} + \nabla \cdot \mathbb{S} + \nabla \cdot (\rho \nabla \cdot \vec{\phi} \mathbb{I}) - \nabla \cdot (\vec{\phi}\nabla\rho) \\ &= \nabla \cdot \mathbb{T} + \nabla \cdot (\rho \nabla \cdot \vec{\phi}) - \nabla \cdot (\vec{\phi}\nabla\rho),\end{aligned}\quad (\text{B.19})$$

que es precisamente la Ecuación (5.69).



De manera similar usando las relaciones de clausura (B.17) y (B.18) en el lado derecho de la ecuación de energía interna (5.33) se obtiene por otro lado que

$$\begin{aligned}\rho \frac{dU}{dt} &= (-p\mathbb{I} + \mathbb{S}) : \nabla \mathbf{v} + (\rho \nabla \cdot \vec{\phi}\mathbb{I} - \vec{\phi} \nabla \rho) : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \left( \kappa \nabla T + \vec{\phi} \frac{d\rho}{dt} \right) \\ &= \mathbb{T} : \nabla \mathbf{v} + (\rho \nabla \cdot \vec{\phi}\mathbb{I} - \vec{\phi} \nabla \rho) : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \nabla \cdot \left( \vec{\phi} \frac{d\rho}{dt} \right),\end{aligned}\quad (\text{B.20})$$

que es la ecuación de energía interna modificada.

Para completar el sistema de ecuaciones, la ecuación de entropía (5.34) se puede escribir en forma compacta haciendo uso de las relaciones de clausura (B.17) y (B.18) en la expresión para  $\hat{\Delta}_s$  dada por la Ecuación (B.16). De esta manera se tiene

$$\begin{aligned}\rho \frac{dS}{dt} &= \hat{\Delta}_s \\ &= \frac{1}{T} \mathbb{S} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \left( \frac{\kappa}{T} \nabla T \right) + \frac{\kappa}{T^2} \nabla T \cdot \nabla T \\ &= \frac{1}{T} \mathbb{S} : \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{T} \nabla \cdot (\kappa \nabla T),\end{aligned}\quad (\text{B.21})$$

que demuestra la forma de la Ecuación (5.78). Nótese que la Ecuación (5.71) es equivalente en forma a la primera igualdad de la Ecuación (B.21).

# Apéndice C

## Equilibrio de una inclusión esférica

La condición de equilibrio (5.60) es válida siempre y lo es de manera particular para el caso de una inclusión esférica en equilibrio, corresponda esta a una burbuja inmersa en un líquido o, bien, a una gota líquida en su atmósfera de vapor. Por ejemplo, consideremos un sistema de coordenadas esféricas cuyo origen coincide con el centro geométrico de la inclusión. Si, además, se supone simetría esférica por simplicidad, entonces las variaciones serán únicamente en la dirección radial. Recordando que  $\partial F^0/\partial\rho = G^0$  en equilibrio, la condición (5.60) se reduce a la ecuación

$$G^0(\rho) - \lambda \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \rho) = C, \quad (\text{C.1})$$

donde  $C$  es una constante. Expandiendo el término diferencial, la Ecuación (C.1) se convierte en

$$G^0(\rho) - \lambda \frac{d^2\rho}{dr^2} - \lambda \frac{2}{r} \frac{d\rho}{dr} = C. \quad (\text{C.2})$$

Esta ecuación implica que lejos de la interface

$$G^0(\rho_v) = G^0(\rho_l) \equiv G_{\text{eq}}, \quad (\text{C.3})$$

es decir, la energía libre de Gibbs en la fase líquida es igual a la de la fase gaseosa en equilibrio. Multiplicando ambos miembros de la Ecuación (C.2) por  $d\rho/dr$  se llega luego de algunos pocos pasos algebraicos a la expresión

$$G^0(\rho)d\rho - \frac{\lambda}{2} d \left[ \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 \right] - \lambda \frac{2}{r} \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr = C d\rho. \quad (\text{C.4})$$

Integrando esta ecuación entre  $\rho_i(r=0)$  y  $\rho(r)$ , donde el subíndice  $i$  denota la fase interior (fase gaseosa si se trata de una burbuja o fase líquida si se trata de una gota), se tiene

$$\int_{\rho_i}^{\rho} \frac{\partial F^0}{\partial\rho} d\rho - \frac{\lambda}{2} \left[ \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 - \left( \frac{d\rho}{dr} \right)_i^2 \right] - 2\lambda \int_0^r \frac{1}{r} \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr = C (\rho - \rho_i), \quad (\text{C.5})$$

donde se ha hecho uso de la relación  $\partial F^0/\partial\rho = G^0$ . Dado que  $(d\rho/dr)_i^2 = 0$  y haciendo  $C = G_{\text{eq}}$ , la Ecuación (C.5) adquiere la forma

$$F^0(\rho) - F^0(\rho_i) - G_{\text{eq}} (\rho - \rho_i) = \frac{\lambda}{2} \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 + 2\lambda \int_0^r \frac{1}{r} \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr. \quad (\text{C.6})$$

Evaluemos ahora la ecuación integro-diferencial (C.6) en la fase exterior, es decir, donde  $\rho = \rho_e$ . En el caso de una burbuja el subíndice  $e$  aplica a la fase líquida, mientras que en el caso de una gota se referirá a la fase gaseosa. De esta manera el primer término en el lado derecho de la Ecuación (C.6) se anula, y la ecuación toma la forma

$$F^0(\rho_e) - F^0(\rho_i) - G_{\text{eq}}(\rho_e - \rho_i) = 2\lambda \int_0^r \frac{1}{r} \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr. \quad (\text{C.7})$$

Recordando la expresión  $p^0 = \rho G^0 - F^0$  para la presión de equilibrio, la Ecuación (C.7) puede reescribirse como

$$[\rho_i G_{\text{eq}} - F^0(\rho_i)] - [\rho_e G_{\text{eq}} - F^0(\rho_e)] = p_i^0 - p_e^0 = 2\lambda \int_0^r \frac{1}{r} \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr. \quad (\text{C.8})$$

Es importante observar que la densidad varía significativamente solo en la vecindad del radio  $R$  de la inclusión. Por lo tanto,

$$2\lambda \int_0^r \frac{1}{r} \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr \rightarrow 2\lambda \int_0^\infty \frac{1}{r} \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr \approx \frac{2\lambda}{R} \int_0^\infty \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr. \quad (\text{C.9})$$

Por otro lado, si el perfil de densidad, determinado por la solución de la Ecuación (C.6), no es del todo afectado por los efectos de curvatura, la última integral en la relación (C.9) puede aproximarse tomando el perfil de densidad correspondiente a una interface plana, en cuyo caso

$$\lambda \int_0^\infty \left( \frac{d\rho}{dr} \right)^2 dr \approx \sigma, \quad (\text{C.10})$$

o simplemente

$$p_i^0 - p_e^0 \approx \frac{2\sigma}{R}, \quad (\text{C.11})$$

que es la bien conocida relación de Laplace y  $\sigma$  es la tensión superficial (o tensión interfacial).

## Apéndice D

# Derivación de la aproximación kernel del gradiente de una función

En este apéndice se muestran los detalles de la derivación de la representación (6.5) para la aproximación kernel del gradiente de una función a partir de la representación (6.4):

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} \nabla' f(\mathbf{x}') W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \quad (\text{D.1})$$

donde  $\nabla'$  es el operador nabla con respecto a las coordenadas primadas,  $\mathbf{x}'$ . Integrando por partes se obtiene

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_n} \nabla' f(\mathbf{x}') W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' &= \int_S f(\mathbf{x}') W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) dS' \\ &- \int_{\Omega_n} f(\mathbf{x}') \nabla' W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

where  $dS' = \mathbf{n} dS'$  es un elemento de la superficie que recubre al volumen ocupado por el dominio de cómputo  $\Omega_n$  y  $\mathbf{n}$  es el vector unitario normal a ese elemento de superficie. Si, además, se supone que el volumen corresponde a una esfera hipotética de radio suficientemente grande y se usa el hecho que la función kernel es monotónicamente decreciente y se hace cero sobre la superficie de la esfera (es decir,  $W \rightarrow 0$  en el infinito), la integral de superficie en el lado derecho de la Ecuación (D.2) se anula y, por lo tanto

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = - \int_{\Omega_n} f(\mathbf{x}') \nabla' W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}'. \quad (\text{D.3})$$

Usando la identidad

$$\nabla' W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) = -\nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h), \quad (\text{D.4})$$

se llega a la expresión clásica del estimado kernel del gradiente

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} f(\mathbf{x}') \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}'. \quad (\text{D.5})$$

Nótese que es posible derivar esta forma por diferenciación directa de la Ecuación (6.2), lo que demuestra la igualdad

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \nabla \langle f(\mathbf{x}) \rangle, \quad (\text{D.6})$$

es decir, el estimado kernel del gradiente es exactamente igual al gradiente del estimado de la función.

Se puede derivar la representación (6.6) a partir de la expansión en serie de la función  $f(\mathbf{x}')$  alrededor de  $\mathbf{x}$

$$f(\mathbf{x}') = f(\mathbf{x}) + (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \cdot \nabla f(\mathbf{x}) + \dots, \quad (\text{D.7})$$

donde se han retenido solamente los dos primeros términos de la serie. Multiplicando cada término de la serie por el gradiente del kernel e integrando sobre el dominio de cómputo se tiene que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_n} f(\mathbf{x}') \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' &= (\mathbf{x}) \int_{\Omega_n} \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' \\ &+ \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \int_{\Omega_n} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' \\ &= f(\mathbf{x}) \int_{\Omega_n} \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}' \\ &+ \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbb{I}, \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

donde se ha hecho uso de la relaciones de consistencia (6.11) para el primer momento del gradiente del kernel. Usando la identidad  $\nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbb{I} = \nabla f(\mathbf{x})$  y resolviendo para el gradiente en la Ecuación (D.8) se llega a la expresión

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_n} [f(\mathbf{x}') - f(\mathbf{x})] \nabla W(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|, h) d^n \mathbf{x}', \quad (\text{D.9})$$

que es superior a la representación (D.5) en cuanto reproduce exactamente la relación  $\nabla f = 0$  para una función constante.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

### ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00127

Matrícula: 2192803073

Simulación Numérica de la Vaporización Explosiva de Líquidos Confinados de Van der Waals.

En la Ciudad de México, se presentaron a las 13:00 horas del día 3 del mes de mayo del año 2023 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

- DR. LEONARDO DI GIROLAMO SIGALOTTI DIAZ
- DR. JESUS ENRIQUE DIAZ HERRERA
- DR. IGNACIO CARVAJAL MARISCAL



LUIS ANGEL PASCUAL HERNANDEZ  
ALUMNO

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)

DE: LUIS ANGEL PASCUAL HERNANDEZ

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

### APROBAR

REVISO  
MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

DIRECTOR DE LA DIVISION DE CBI

DR. ROMAN LINARES ROMERO

PRESIDENTE

DR. LEONARDO DI GIROLAMO SIGALOTTI DIAZ

VOCAL

DR. JESUS ENRIQUE DIAZ HERRERA

SECRETARIO

DR. IGNACIO CARVAJAL MARISCAL