



*Universidad de los Andes*  
*Centro de Física Fundamental*  
*Area de Caos y Sistemas Complejos*

**Simulación Mesoscópica de Fluidos Binarios  
Bajo Flujo de Corte**

Trabajo de grado presentado ante la  
**Universidad de Los Andes**  
como requisito parcial para optar al Título de:  
**Licenciado en Física**

Presentado por:  
**Br. Marco V. A. González G.**

Tutor:  
**Dr. Carlos Echeverria**

Tutor Académico:  
**Dr. Kay Tucci**

Mérida, Marzo de 2019

# Resumen

Se propone una manera de incluir un campo externo de corte al modelo de colisión multipartículas con parámetro de repulsión para fluidos binarios, donde se verifica que el campo propuesto cumpla con las propiedades hidrodinámicas correctas, con el fin de estudiar la formación y crecimiento de las fases del sistema bajo esta fuerza externa.

El modelo de colisión multipartículas, al ser un modelo mesoscópico, permite simular sistemas con gran cantidad de partículas a un bajo costo computacional y a la vez conservar la estructura completa del espacio de fases con lo cual se puede recuperar la descripción hidrodinámica del sistema dadas por la ecuaciones de Navier-Stokes.

La manera en que se propuso la aplicación del campo externo al sistema no fue directamente sobre cada uno de los elementos del sistema (partículas, moléculas, etc.), sino se aplicó el campo externo a los centros de masa de cada especie molecular.

Los resultados obtenidos revelan que al aplicar un flujo de corte al sistema hace que la formación de patrones (separación espinodal) sea más rápida para ciertos parámetros. Sin embargo, si el flujo aplicado es muy intenso el sistema no se separará debido a que la repulsión que hay entre las especies no es suficientemente fuerte como para mantener la estructura segregada del sistema, también se observó que la tasa a la que se ven deformados los patrones en el tiempo, al estar el sistema expuesto al campo de corte, sigue una ley de potencias del tipo  $t^m$  donde se obtuvo un valor para el exponente de  $m = -0.7$ , estos resultados son similares a los observados en otras investigaciones, tanto teóricas como experimentales.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>I</b>
<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Simulación de Dinámica Molecular</b>	<b>3</b>
1.1. Colisión Multipartículas . . . . .	3
1.1.1. Dinámica del Modelo Colisión Multipartículas . . . . .	4
1.1.2. Propiedades de la Dinámica del Modelo de Colisión Multipartículas . . . . .	5
1.2. Colisión Multipartículas con Parámetro de Repulsión . . . . .	6
1.2.1. Coeficiente de Difusión . . . . .	7
1.2.2. Separación Espinodal . . . . .	8
<b>2. Fluido Binario Bajo un Flujo de Corte</b>	<b>10</b>
2.1. Flujo de Corte . . . . .	10
2.2. Viscosidad de un Fluido Binario . . . . .	12
2.3. Viscosidad de un Fluido Binario Bajo Flujo de Corte . . . . .	14
<b>3. Separación Espinodal Bajo Flujo de Corte</b>	<b>17</b>
3.1. Separación Espinodal . . . . .	17
3.1.1. Crecimiento de los Dominios . . . . .	18
3.2. Deformación de Estructura . . . . .	20
3.2.1. Tamaño Promedio de los Dominios en los Ejes $x$ e $y$ . . . . .	20
3.2.2. Deformación de la Estructura de los Dominios en el Tiempo . . . . .	23
<b>Conclusiones</b>	<b>25</b>

# Introducción

Los modelos de tipo colisión multipartículas son modelos mesoscópicos que simplifican la dinámica de los sistemas a partir de no seguir en cada intervalo de tiempo a todos los componentes del sistema sino dividiendo el volumen total en celdas más pequeñas dentro de las cuales se aplica una regla que cambia las velocidades de las partículas o moléculas simulando las colisiones que hubieran tenido lugar en la celda, estos modelos son de gran ayuda en la simulación de dinámica molecular debido a que con poca capacidad de cómputo se pueden realizar simulaciones con gran cantidad de partículas. Seguidamente se hará uso del modelo colisión multipartículas con Parámetro de Repulsión propuesto por C. Echeverría et. al. en [1], el cual sirve para modelar sistemas hidrodinámicos compuestos por varias especies inmiscibles, en particular este modelo será aplicado a fluidos binarios bajo un flujo de corte.

Estos sistemas hidrodinámicos son interesantes debido a que las reglas de crecimiento de las fases, en el caso de que el sistema no esté expuesto a ningún campo externo, harán que el estado final del sistema sea estacionario [2, 3], con lo cual se pueden hacer estudios de la tasa de crecimiento de los dominios y de la forma y propiedades de sus estructuras [4–7].

El estudio de fluidos binarios bajo campos externos empezó a generar mucho interés desde el siglo pasado, debido a que aunque el fluido no alcanza un estado de equilibrio a causa de la fuerza externa que se opone a la descomposición espinodal normal, este introduce anisotropía en la formación de los patrones y nuevas características en escalas de longitud y tiempo.

Con el paso del tiempo la manera de estudiar estos sistemas ha variado de acuerdo con las propiedades que se necesite estudiar y con las herramientas que han estado disponibles en ese momento. Una de las primeras investigaciones encontradas para fundamentar este trabajo, en el cual se estudian fluidos binarios bajo flujo de corte fueron realizadas por: Eugene C. Eckstein et. al. en [8] donde se propone una manera para realizar experimentos con fluidos binarios y se determina el coeficiente de difusión del fluido, Amitabha Chakrabarti y Raúl Toral en [9] usan la ecuación de Cahn, Hilliard y Cock y encuentran que para varios intervalos de tiempo el crecimiento de las fases del sistema se puede describir en términos de escalamiento usando el radio promedio de los dominios en el tiempo, Yanan Wu et. al. en [2] resuelven numéricamente la ecuación de Langevin en dos y tres dimensiones y estudian algunas propiedades reológicas del fluido bajo flujo de corte encontrando que para un valor de estrés constante ocurre un máximo para la viscosidad independiente de la tasa de corte aplicada. Por su parte Paz Padilla y Søren Toxvaerd en [7] haciendo uso de simulación de dinámica molecular se analiza el efecto del campo

de corte en el crecimiento de los dominios y en los coeficientes de transporte donde se pudo observar que el flujo de corte puede mejorar el crecimiento de los dominios en la dirección en la que actúa el campo de corte y restringir e incluso suprimir el crecimiento de los dominios en la dirección normal a la del flujo.

En este trabajo se estudia el comportamiento del coeficiente viscosidad primero sin campo externo y sin interacción entre distintas especies, luego añadiendo repulsión entre especies y, por último, se analiza el comportamiento temporal de la viscosidad cuando actúa el campo externo en el sistema.

También se estudiará la acción del campo de corte en la formación de las fases donde se verificará que el sistema crezca siguiendo una ley de potencias del tipo  $t^\alpha$ , donde a  $\alpha$  se le conoce como exponente de crecimiento. Con esto se evaluará el valor del exponente de crecimiento en función de la intensidad del campo aplicado con lo cual se podrá ver la acción del campo aplicado en el crecimiento del sistema y el tamaño de las fases. Adicionalmente se hará un estudio de la deformación de la estructura a partir del tamaño promedio de los dominios en los ejes  $x$  (Eje de flujo) e  $y$  (Eje de corte) con lo cual se podrá observar por separado de qué manera evolucionan las fases del sistema y con esto poder estudiar la proporción que hay entre los tamaños de los dominios en  $y$  y en  $x$  para poder hacer un análisis de la deformación de la estructura de los dominios bajo flujo de corte.

Esta investigación se presenta de la siguiente manera: En el capítulo 1 se hace un resumen de lo que son los modelos de simulación de dinámica molecular del tipo colisión multipartículas, de qué manera se realizan las simulaciones, cómo se aplica la dinámica, se habla sobre el modelo de colisión multipartículas con parámetro de repulsión y se discuten las propiedades más resaltantes de este modelo.

En el capítulo 2 se propone el flujo de corte para el modelo y se hacen estudios sobre las propiedades hidrodinámicas que tiene que cumplir el fluido para seguir estando en un régimen newtoniano, además de verificar las propiedades del coeficiente de viscosidad con campo externo y sin él.

Por último en el capítulo 3 se evalúa la formación y crecimiento de las fases bajo flujo de corte haciendo uso del radio promedio de los dominios en el tiempo  $R_t$  con el cual se evalúa que el crecimiento del sistema siga una ley de potencias y se hacen estudios de la deformación de la estructura al aplicar el campo de corte al sistema.

# Capítulo 1

## Simulación de Dinámica Molecular

Existen muchas técnicas para realizar simulaciones de dinámica molecular, algunas microscópicas concentradas en seguir a cada paso de tiempo a cada una de las moléculas y su interacción con el resto de las demás moléculas que componen el fluido [10] y otras técnicas como los métodos de Lattice-Boltzmann, en los cuales para simular un fluido se resuelven las ecuaciones de conservación macroscópicas (de masa, energía y momento) numéricamente [11]. Cada una de estas técnicas tiene ventajas y desventajas notables, en el sentido de que la primera requiere bastante poder de cómputo para realizar una simulación con gran cantidad de partículas y la segunda elimina este problema al sólo resolver las ecuaciones discretas pero perdiendo gran parte de la descripción del sistema a niveles microscópicos. Sin embargo, las técnicas como la colisión multipartículas (o MPC por sus siglas en inglés) al usar escalas de tiempo y espacio mesoscópicas disminuyen notablemente el tiempo de cómputo, mientras aún se pueden observar pequeñas variaciones térmicas del fluido.

Cada modelo o técnica es usado dependiendo del sistema a simular y las propiedades o características que se necesiten estudiar. En particular, en este trabajo se usará el modelo propuesto por C. Echeverría et. al. [1] en el cual se usa un tipo de colisión multipartículas para simular fluidos binarios, y se demuestra que el modelo cumple con propiedades físicas importantes, tales como la estabilidad de interfaces, separación de fases (separación espinodal) y crecimiento de dominios en sistemas con distintas condiciones de borde obteniendo resultados bastante buenos en todos los casos.

### 1.1. Colisión Multipartículas

Los sistemas complejos pueden desencadenar fenómenos que no son fáciles de describir a nivel microscópico usando métodos de simulación dinámica molecular. Estos sistemas son extensivos debido a que algunos o todos sus constituyentes son especies moleculares tales como polímeros, biomoléculas u otros agregados moleculares de gran tamaño y muchos componentes [12].

Estos sistemas pueden exhibir formación de patrones a partir de la segregación de sus cons-

tituyentes o cambios de forma de la molécula inducidos por flujos de corte o interacciones hidrodinámicas. Los modelos de colisión multipartículas simplifican la descripción de la dinámica y reducen significativamente el tiempo de simulación mientras mantienen características esenciales de la dinámica molecular [1, 13], esto hace que sea alcanzable, en tiempos racionales y con procesadores de bajo nivel, una descripción de los fenómenos microscópicos.

Los modelos de tipo colisión multipartículas se basan principalmente en no tener que calcular la interacción de cada partícula con respecto a las demás, si no dividiendo el volumen total en celdas más pequeñas y dejando que las partículas se muevan libremente por intervalos de tiempo fijos entre los cuales se aplica una regla que simula la interacción o colisión entre las partículas de cada celda.

### 1.1.1. Dinámica del Modelo Colisión Multipartículas

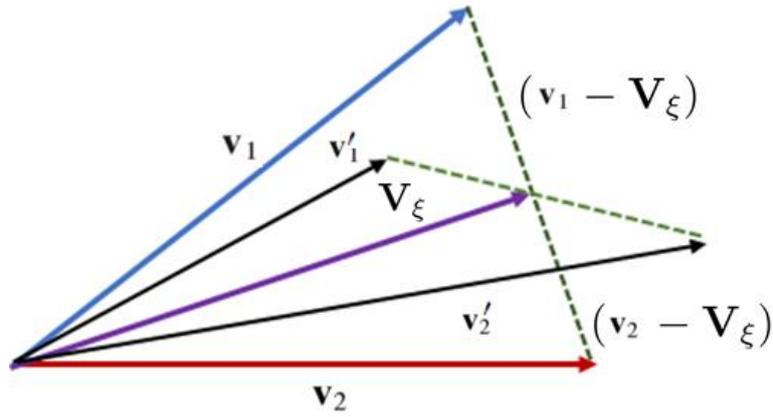
Este modelo considera un sistema constituido por  $N$  partículas con masa  $m$  en una caja de simulación de volumen  $\mathcal{V} = L_x \times L_y \times L_z$  donde  $L_x$ ,  $L_y$  y  $L_z$  representan el tamaño del sistema a simular en las coordenadas  $x$ ,  $y$  y  $z$  respectivamente. Las partículas tendrán posiciones  $\mathbf{r}_i$  y velocidades  $\mathbf{v}_i$  continuas, se asume que las partículas que componen el sistema colisionan a intervalos de tiempo discretos  $\tau$  y se mueven libremente entre estos intervalos, de lo anterior, la posición de la partícula  $i$  en el de tiempo  $t + \tau$  será:

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i + \mathbf{v}_i \tau \quad (1.1)$$

Las colisiones entre partículas que pudieran tener lugar entre estos intervalos de tiempo vendrán representadas por un operador de rotación que simulará los efectos de muchas colisiones reales, las cuales se llevarán a cabo de la siguiente manera: El volumen  $V$  se dividirá en celdas cúbicas de lado  $l$  las cuales se identificaran con el subíndice  $\xi$ , a cada celda se le asigna un operador de rotación aleatorio  $\hat{\omega}_\xi$ . La velocidad del centro de masa de las partículas en la celda  $\xi$  será  $\mathbf{V}_\xi = \frac{1}{n_\xi} \sum_{i=1}^{n_\xi} \mathbf{v}_i$  donde  $n_\xi$  representa el número de partículas en la celda. Las velocidades luego de las colisiones de las partículas en la celda vendrán dadas por:

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{V}_\xi + \hat{\omega}_\xi(\mathbf{v}_i - \mathbf{V}_\xi) \quad (1.2)$$

La regla dada en la ecuación anterior, fue propuesta por primera vez por A. Malevanets y R. Kapral [14] en el contexto de un modelo de lattice con regla de flujo estocástico. Los conjuntos de rotaciones usados en la dinámica del MPC pueden ser escogidos de varias maneras y cada uno determinará el valor y las propiedades de los coeficientes de transporte del sistema de manera similar a como el potencial intermolecular determina las propiedades de transporte en un sistema que evoluciona usando dinámica molecular con las ecuaciones de Newton [12].



**Figura 1.1:** Aplicación de la regla de colisión multipartículas para dos partículas con velocidades iniciales  $\mathbf{v}_1$  (línea azul) y  $\mathbf{v}_2$  (línea roja), velocidades luego de las colisiones  $\mathbf{v}'_1$  y  $\mathbf{v}'_2$  (líneas negras) respectivamente. Los valores de velocidad intermedios  $(\mathbf{v}_1 - \mathbf{V}_\xi)$  y  $(\mathbf{v}_2 - \mathbf{V}_\xi)$  se muestran con líneas punteadas de verde oscuro y  $\hat{\omega}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{V}_\xi)$  y  $\hat{\omega}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{V}_\xi)$  se muestran con la línea punteada de verde claro [12].

En la figura 1.1 se observa la aplicación de la regla de colisión multipartículas para dos partículas con velocidades iniciales  $\mathbf{v}_1$  (línea azul) y  $\mathbf{v}_2$  (línea roja) y velocidades luego de la aplicación de la regla dada en la ecuación (1.2)  $\mathbf{v}'_1$  y  $\mathbf{v}'_2$  (líneas negras) respectivamente. En la imagen también se puede apreciar de qué manera se rota el vector  $(\mathbf{v}_i - \mathbf{V}_\xi)$  por medio del operador  $\hat{\omega}$  para poder calcular la velocidad final de dicha partícula.

### 1.1.2. Propiedades de la Dinámica del Modelo de Colisión Multipartículas

Se puede demostrar que el modelo conserva cantidades físicas importantes como lo son la masa, la cantidad de movimiento lineal y la energía. La primera es la más sencilla: la cantidad de moléculas iniciales en el sistema será igual a la cantidad final del sistema luego de cada intervalo de tiempo, con esto se tiene la conservación de la masa en el sistema. La conservación de la cantidad de movimiento lineal vendrá dada de la siguiente manera:

$$\sum_{i=1}^{n_\xi} m \mathbf{v}'_i = \sum_{i=1}^{n_\xi} m (\mathbf{V}_\xi + \hat{\omega}_\xi [\mathbf{v}_i - \mathbf{V}_\xi]) = \sum_{i=1}^{n_\xi} m \mathbf{v}_i \quad (1.3)$$

Donde se usa el hecho de que todas las partículas de la celda tienen el mismo operador de rotación. Usando el mismo argumento la conservación de la energía vendrá dada por:

$$\sum_{i=1}^{n_\xi} \frac{m}{2} |\mathbf{v}'_i|^2 = \sum_{i=1}^{n_\xi} \frac{m}{2} |\mathbf{V}_\xi + \hat{\omega}_\xi [\mathbf{v}_i - \mathbf{V}_\xi]|^2 = \sum_{i=1}^{n_\xi} \frac{m}{2} |\mathbf{v}_i|^2 \quad (1.4)$$

Las dos últimas relaciones aseguran que la energía y la cantidad de movimiento se conserven en cada celda luego de cada intervalo de tiempo a lo largo de la simulación, con lo cual se preserva la estructura completa del espacio de fases de la dinámica molecular y esto permite que sea posible recuperar las ecuaciones de Navier-Stokes [12, 13].

## 1.2. Colisión Multipartículas con Parámetro de Repulsión

Este modelo propuesto por Echeverría et. al. en [1] toma dos de las reglas dichas anteriormente pero con la intención de estudiar fluidos binarios, es decir fluidos que están compuestos por dos especies de partículas, se añade una nueva regla la cual simulará la repulsión que pudiese haber entre las dos especies. Las partículas de distintas especies se diferenciarán con las letras  $A$  y  $B$ , la masa de las moléculas será respectivamente  $m^A$  y  $m^B$ , el número de moléculas de alguna especie en la celda  $\xi$  vendrá dado por:  $n_\xi^\gamma$ , donde  $\gamma$  representa la especie de partículas de interés. La velocidad del centro de masa antes de la colisión para las partículas de especie  $\gamma$  en la celda  $\xi$  será:

$$\mathbf{V}_\xi^\gamma = \frac{1}{n_\xi^\gamma} \sum_{i=1}^{n_\xi^\gamma} \mathbf{v}(i)_\xi^\gamma \quad (1.5)$$

Donde  $\mathbf{v}(i)_\xi^\gamma$  es la velocidad de la partícula  $i$  de especie  $\gamma$  en la celda  $\xi$  antes de la colisión. Con el fin de simular la segregación entre distintas especies se agrega un nuevo parámetro el cual simulará el efecto de repulsión entre distintas especies similar a los usados en modelos de descomposición espinodal [3], para esto, la velocidad de los centros de masa considera la repulsión entre especies de la siguiente manera:

$$\tilde{\mathbf{V}}_\xi^\gamma = \frac{\kappa \rho_\xi^{\gamma^*} m_{\gamma^*} \hat{\mathbf{r}}_{\gamma\gamma^*} + \mathbf{V}_\xi^\gamma}{|\kappa \rho_\xi^{\gamma^*} m_{\gamma^*} \hat{\mathbf{r}}_{\gamma\gamma^*} + \mathbf{V}_\xi^\gamma|} |\mathbf{V}_\xi^\gamma| \quad (1.6)$$

Donde  $\gamma^*$  representa a la especie contraria a  $\gamma$ ,  $\rho_\xi^{\gamma^*}$  es la densidad de partículas  $\gamma^*$  en la celda  $\xi$ ,  $\hat{\mathbf{r}}_{\gamma\gamma^*}$  es el vector unitario en la dirección entre los centros de masa de las partículas  $\gamma$  y  $\gamma^*$ ,  $|\dots|$  es la magnitud del vector y  $\kappa$  es el parámetro que representa la fuerza repulsiva entre distintas especies. La velocidad de la partícula  $i$  luego de las colisiones se calcula de la siguiente manera:

$$\tilde{\mathbf{v}}(i)_\xi^\gamma = \tilde{\mathbf{V}}_\xi^\gamma + (\mathbf{v}(i)_\xi^\gamma - \mathbf{V}_\xi^\gamma) \quad (1.7)$$

Luego aplicando el operador de rotación a cada una de las especies:

$$\mathbf{v}'(i)_\xi^\gamma = \sum_{\gamma} \left( \tilde{\mathbf{V}}_\xi^\gamma + \hat{\omega}_\xi^\gamma \left( \tilde{\mathbf{v}}(i)_\xi^\gamma - \tilde{\mathbf{V}}_\xi^\gamma \right) \right) \quad (1.8)$$

El modelo conserva el momento y la energía global del sistema a cada intervalo de tiempo, aunque no el momento y la energía local de cada una de las celdas, además conserva la invarianza galileana, verificado a través del coeficiente de difusión, el cual demostró ser independiente de la dirección espacial [1].

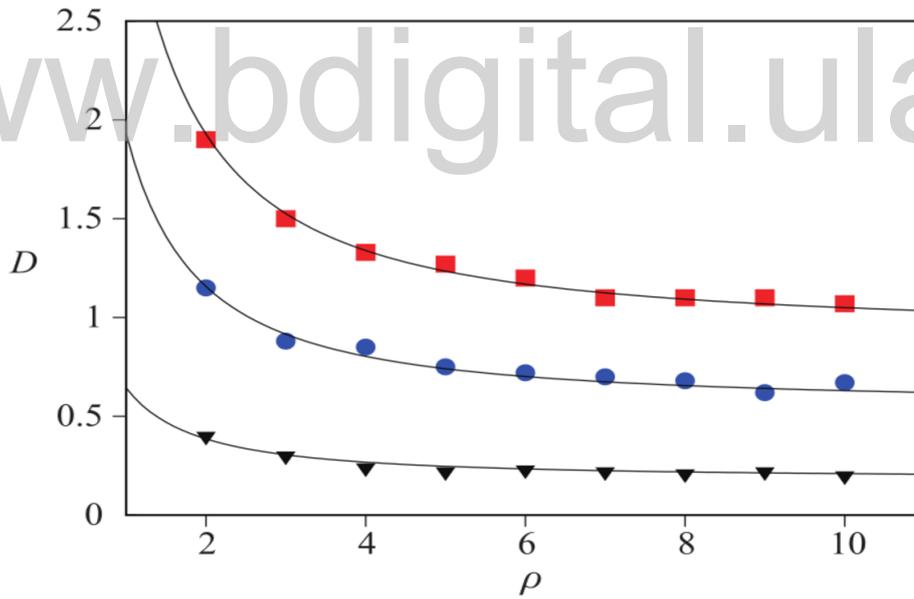
### 1.2.1. Coeficiente de Difusión

Como se vio en [15], si las colisiones no están correlacionadas, el coeficiente de difusión para una sola especie de partículas puede ser aproximado a la ecuación:

$$D = \frac{K_B T \tau}{2m} \left( \frac{3\rho}{(\rho - 1 + e^{-\rho})(1 - \cos\theta)} - 1 \right) \quad (1.9)$$

Donde  $\rho$  es la densidad numérica del fluido definida a partir de la relación  $V = N\rho$  con  $V$  el volumen y  $N$  el número de partículas,  $\tau$  es el intervalo de tiempo,  $K_B T$  es la temperatura en unidades reducidas y  $\theta$  es el ángulo de rotación del operador  $\hat{\omega}$ . Esto se usó para demostrar que el modelo funciona a bajas temperaturas, que es donde normalmente ocurren las separaciones de fases.

En la figura (1.2) se muestra el coeficiente de difusión para una sola especie de moléculas (esto es  $\tilde{\mathbf{V}}_\xi^\gamma = \mathbf{V}_\xi^\gamma$ ) en función de la densidad del fluido, para tres distintas temperaturas en un volumen  $\mathcal{V} = L_x \times L_y \times L_z = 50^3$  con condiciones de borde periódicas. El paso de simulación se tomó como  $\tau = 1$ , el operador de rotación  $\hat{\omega}_\xi$  fue tomado para describir ángulos de rotación sobre  $\theta = \pm\pi/2$  sobre ejes escogidos al azar. El número total de partículas del sistema es:  $N = \mathcal{V}\rho$ , donde  $\rho$  es la densidad media de partículas del sistema.



**Figura 1.2:** Coeficiente de difusión  $D$  en función de la densidad  $\rho$  para una sola especie de partículas, calculado usando el modelo para tres temperaturas:  $T = 0.3$  (cuadros),  $T = 0.18$  (círculos) y  $T = 0.06$  (triángulos), las líneas continuas corresponden a la ecuación (1.9) [1].

Nótese que a bajas temperaturas, el coeficiente de difusión calculado de la simulación se aproxima bastante bien al coeficiente de difusión dado por la ecuación (1.9), con esto se observa que el modelo puede ser usado para simular sistemas con temperaturas relativamente bajas ( $T \approx 0.06$ ) mientras mantienen buen comportamiento difusivo.

### 1.2.2. Separación Espinodal

Uno de los fenómenos más interesantes de estudiar de un fluido binario es la formación de patrones entre las distintas especies que componen el fluido, en la figura 1.3 se observa la evolución de un sistema con los siguientes parámetros:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ , densidad  $\rho^\gamma = 5$ , temperatura  $K_B T = 0.09$  y parámetro de repulsión  $\kappa = 5$ . El color verde indica la presencia de partículas de distintas especies en una misma celda, el color azul representa a las partículas de especie  $A$  y el color amarillo representa a las partículas de especie  $B$ . En (a)  $t = 0$  las partículas están distribuidas uniformemente en todo el volumen  $\mathcal{V}$ , en (b)  $t = 10^2$  se puede observar que ya se empiezan a formar pequeños cumulos de partículas de igual especie en algunas zonas del volumen, en (c)  $t = 10^3$  ya se observan dominios de partículas de la misma especie y en (d)  $t = 10^4$  se puede observar que ya no quedan zonas donde coexistan dos especies de partículas excepto en las interfaces.

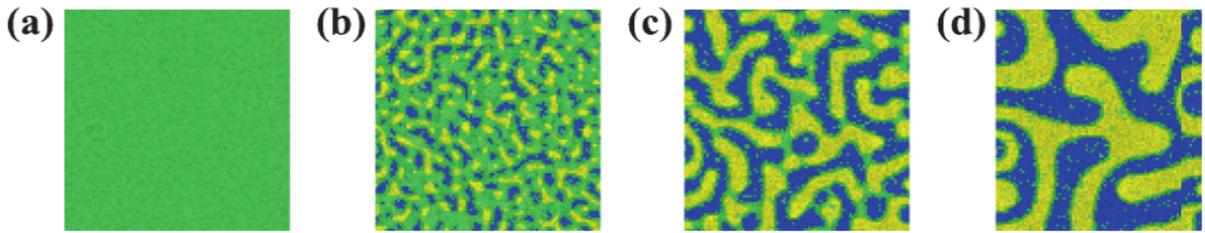
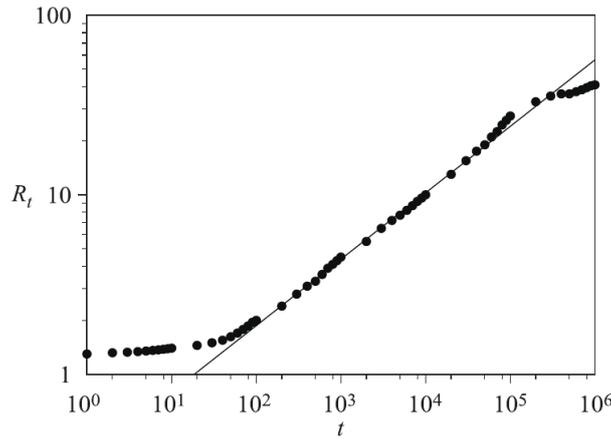


Figura 1.3: Imágenes de la evolución del sistema con los parámetros fijos:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^\gamma = 5$ ,  $K_B T = 0.09$  y  $\kappa = 5$ . El color azul y amarillo representan las especies de moléculas  $A$  y  $B$  respectivamente y el color verde indica la presencia de partículas de ambas especies. (a) Condición inicial, (b)  $t = 10^2$ , (c)  $t = 10^3$  y (d)  $t = 10^4$  [1].

Una manera de caracterizar la evolución temporal del tamaño de las fases es mediante el radio promedio de los dominios, los cuales pueden ser aproximados a una ley de potencias del tipo:

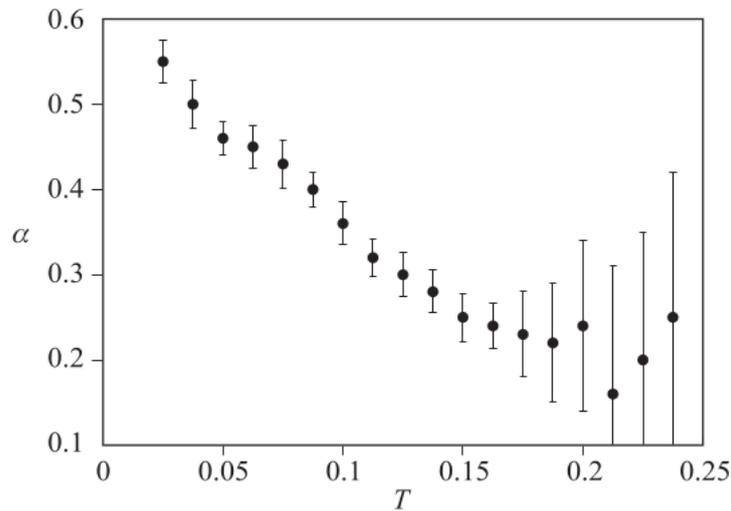
$$R_t \sim t^\alpha \quad (1.10)$$

Donde  $R_t$  es el radio promedio de las fases y  $t$  el tiempo de simulación. En la figura 1.4 se muestra el crecimiento de  $R_t$  en función del tiempo  $t$  con los parámetros:  $L_x = L_y = 200$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^\gamma = 5$ ,  $T = 0.09$  y  $\kappa = 5.0$ . Como se puede observar el logaritmo de  $R_t$  crece linealmente con el logaritmo de  $t$  en el intervalo:  $t \in [10^2, 10^5]$ , dando un valor para el exponente  $\alpha \approx 0.37$  el cual está cerca del valor teórico  $1/3$  para el crecimiento de fases en fluidos binarios en régimen difusivo [4]. Para tiempos mayores a  $t = 10^5$  el tamaño de los dominios alcanza la mitad del tamaño de la caja de simulación y el crecimiento de los dominios se hace más lento hasta que para tiempos muy grandes el sistema llega a un estado de equilibrio en el cual los dominios no cambian su tamaño [2].



**Figura 1.4:** Promedio radial de los dominios de las fases  $R_t$  (puntos negros) en función del tiempo  $t$  en escala Log-Log, con parámetros fijos:  $L_x = L_y = 200$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^\gamma = 5$ ,  $T = 0.09$  y  $\kappa = 5.0$ . La línea continua representa la mejor aproximación a la ecuación 1.10 para el intervalo de tiempo  $t \in [10^2, 10^5]$ .

La Figura (1.5) muestra el exponente de crecimiento  $\alpha$  en función de la temperatura  $T$  calculado numéricamente en el intervalo de tiempo donde la regla dada por la ecuación (1.10) permanece válida, usando los mismos parámetros de la figura anterior pero variando  $K_B T$ . Como se puede observar, el exponente decae linealmente al aumentar la temperatura hasta el valor de  $T \approx 0.2$ , sobre esta temperatura crítica las barras de error de  $\alpha$  son muy grandes y las interfaces se vuelven inestables debido a que el mezclado térmico detiene el proceso de separación de fases.



**Figura 1.5:** Exponente de crecimiento  $\alpha$  en función de la temperatura  $T$ . Con parámetros fijos:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho = 5$  y  $\kappa = 5.0$ . Las barras de error representan el error estándar de la aproximación a la ecuación (1.10) [1].

En este trabajo se analizan algunas de estas propiedades de los fluidos binarios pero considerando un campo externo de corte actuando sobre el sistema, además se analizará la acción del campo en el coeficiente de viscosidad del fluido y en la forma de las fases del fluido.

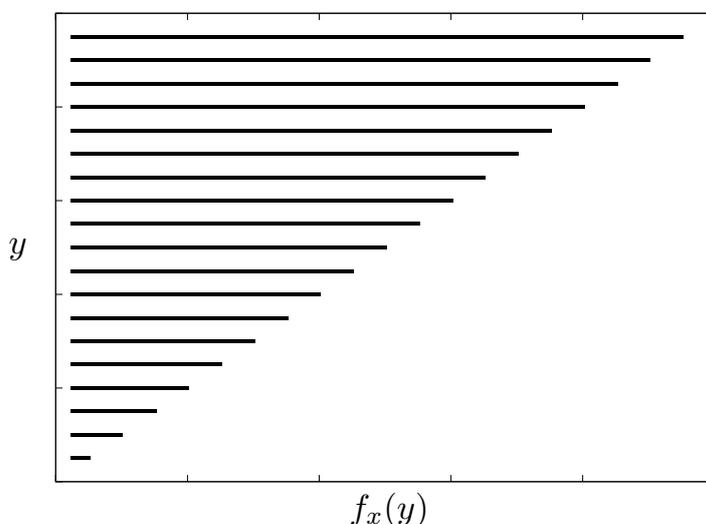
## Capítulo 2

# Fluido Binario Bajo un Flujo de Corte

La simulación de dinámica molecular bajo la acción de campos externos han generado mucho interés desde hace varias décadas, desde el punto de vista experimental y teórico [2, 7] . Los campos externos pueden ser no disipativos como lo es el campo eléctrico o disipativos como lo son los casos de un gradiente de temperatura o de velocidad (flujo de corte). Estos problemas son interesantes debido a que el fluido luego de grandes intervalos de tiempo no llega a estar en equilibrio por consecuencia de los campos externos y aún así se siguen observando fenómenos como la estabilidad de interfaces, la separación de fases y crecimiento de dominios en el fluido [2].

### 2.1. Flujo de Corte

El método que se usará para agregar la acción de un campo de corte al modelo de colisión multipartículas con parámetro de repulsión se hará de manera parecida a otras investigaciones [7], esto es agregando un campo que actúe en la componente  $x$  de la velocidad de las partículas y su magnitud sea proporcional a su posición en  $y$  como se observa en la figura 2.1.



**Figura 2.1:** Magnitud de la fuerza  $f_x$  de corte sentida por una partícula en función de la coordenada  $y$ .

Aprovechando la aproximación mesoscópica del modelo el campo no actuará directamente sobre cada una de las moléculas que componen el fluido sino sobre los centros de masa de las partículas en cada una de las celdas, para esto se definirá la posición del centro de masa del tipo de partículas  $\gamma$  en la celda  $\xi$  como:

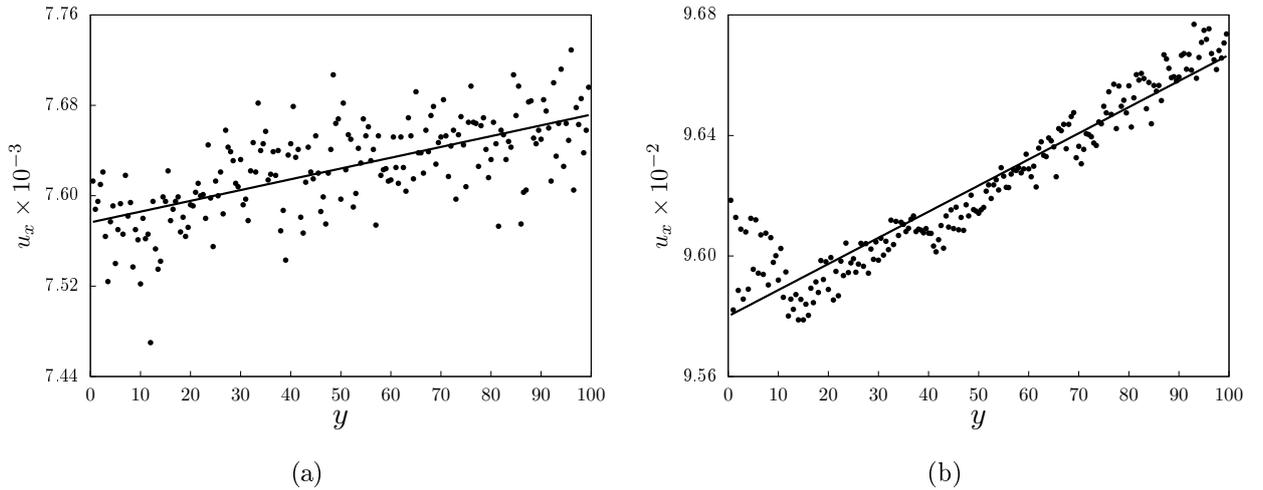
$$\mathbf{R}_\xi^\gamma = \frac{1}{n_\xi^\gamma} \sum_{i=1}^{n_\xi^\gamma} \mathbf{r}^{(i)\gamma}_\xi \quad (2.1)$$

Cuyas componentes son:  $\mathbf{R}_\xi^\gamma = X_\xi^\gamma \hat{\mathbf{x}} + Y_\xi^\gamma \hat{\mathbf{y}} + Z_\xi^\gamma \hat{\mathbf{z}}$ . Teniendo estas relaciones, se puede definir ahora que la velocidad del centro de masa de las partículas de especie  $\gamma$  en la celda  $\xi$  después de las colisiones:

$$\tilde{\mathbf{V}}_\xi^\gamma = \frac{\kappa \rho_\xi^{\gamma*} m_{\gamma*} \hat{\mathbf{r}}_{\gamma\gamma*} + s^\gamma Y_\xi^\gamma \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{V}_\xi^\gamma}{|\kappa \rho_\xi^{\gamma*} m_{\gamma*} \hat{\mathbf{r}}_{\gamma\gamma*} + s^\gamma Y_\xi^\gamma \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{V}_\xi^\gamma|} |\mathbf{V}_\xi^\gamma| \quad (2.2)$$

Donde el parámetro  $s^\gamma$  tiene la función de tasa de corte y representa la intensidad del campo de corte aplicado a las partículas de especie  $\gamma$ , para facilitar los cálculos siguientes y para poder comparar a otras investigaciones se supondrá que  $s^A = s^B = s$  y  $\rho^A + \rho^B = \rho$ .

La figura 2.2 muestra el promedio de la velocidad de las partículas en la componente  $x$  denotada como  $u_x$  en función de su posición en la componente  $y$  para dos tasas de corte:  $s = 0.05$  y  $s = 0.5$  con los siguientes parámetros:  $t = 10^4$ ,  $K_B T = 0.02$ ,  $\kappa = 5.0$ ,  $L_x = L_y = 100$  y  $L_z = 2$ . Donde se puede observar que al actuar el campo externo en el sistema, este sigue estando en un régimen newtoniano [16], esto es, que la componente en  $x$  de la velocidad del flujo sea proporcional a la componente  $y$  de la posición.



**Figura 2.2:** Velocidad promedio de las partículas en la componente  $x$   $u_x$  en función de la coordenada  $y$  para dos tasas de corte: (a)  $s = 0.05$  y (b)  $s = 0.5$ . La línea continua representa la aproximación de los datos a la ecuación de la recta ( $y = mx + b$ ).

## 2.2. Viscosidad de un Fluido Binario

El coeficiente de viscosidad de un fluido que no está sujeto a un flujo de corte, se define a través de las relaciones de Green-Kubo, basadas en la función de autocorrelación de presiones integrada [10, 12] .

$$\eta = \frac{V}{3K_B T} \int_0^{\infty} \langle P_{xy}(t) P_{xy}(0) \rangle dt \quad (2.3)$$

Donde  $P_{xy}(t)$  es el tensor de presión del fluido que es igual al negativo del tensor de estrés  $\sigma_{xy}(t)$  y se definen de la siguiente manera:

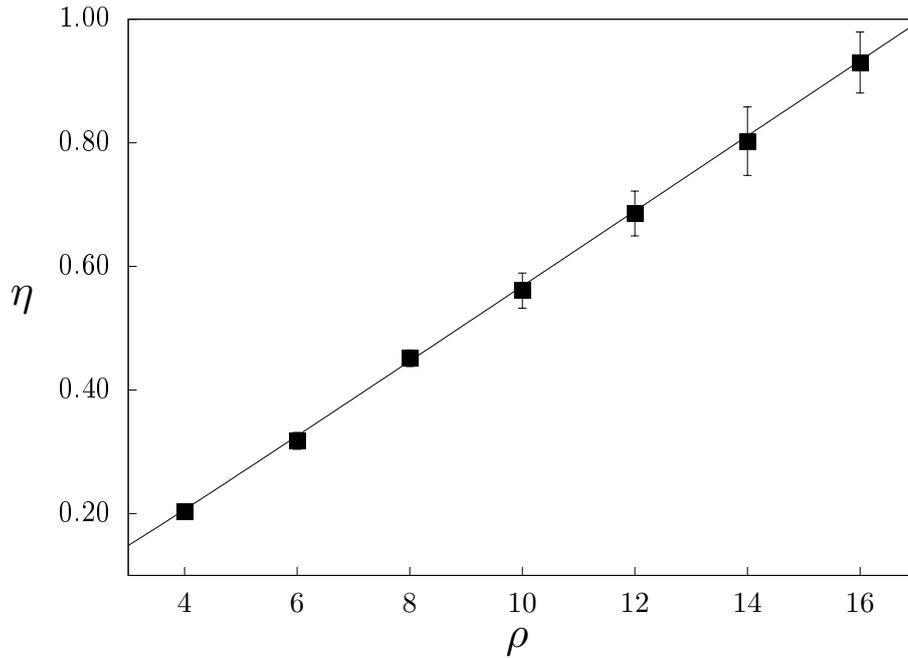
$$P_{xy}(t) = -\sigma_{xy}(t) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_i^N v_{xi} v_{yi} \quad (2.4)$$

Para los modelos de colisión multipartículas la viscosidad del fluido se puede aproximar a una ecuación que relaciona la viscosidad con la densidad del fluido y su temperatura [12], similar a lo visto en la ecuación (1.9) con la difusión.

$$\eta = \frac{k_B T \tau \rho}{2m} \left( \frac{5\rho - (\rho - 1 + e^{-\rho}) (2 - \cos \theta - \cos 2\theta)}{(\rho - 1 + e^{-\rho}) (2 - \cos \theta - \cos 2\theta)} \right) + \frac{m}{18\tau} (\rho - 1 + e^{-\rho}) (1 - \cos \theta) \quad (2.5)$$

Para verificar que el modelo de colisión multipartículas con parámetro de repulsión estuviese de acuerdo con lo visto anteriormente, se realizó una serie de simulaciones en las cuales se usaron condiciones de borde periódicas en todas las fronteras, para calcular el valor la viscosidad en función primero de la densidad y luego del parámetro de repulsión.

La figura 2.3 muestra el valor promedio de la viscosidad en función de la densidad para una sola especie de partículas, esto es  $\kappa = 0$ , usando los parámetros:  $\mathcal{V} = 30^3$ ,  $\rho = 8$ ,  $K_B T = 0.016$  y condiciones de borde periódicas en todas sus fronteras. La línea continua es la gráfica de la ecuación (2.5) y los cuadros representan los resultados de las simulaciones, para este caso se realizaron tres sets de cinco simulaciones los cuales fueron promediados y las barras de error son el promedio de las tres desviaciones estándar.

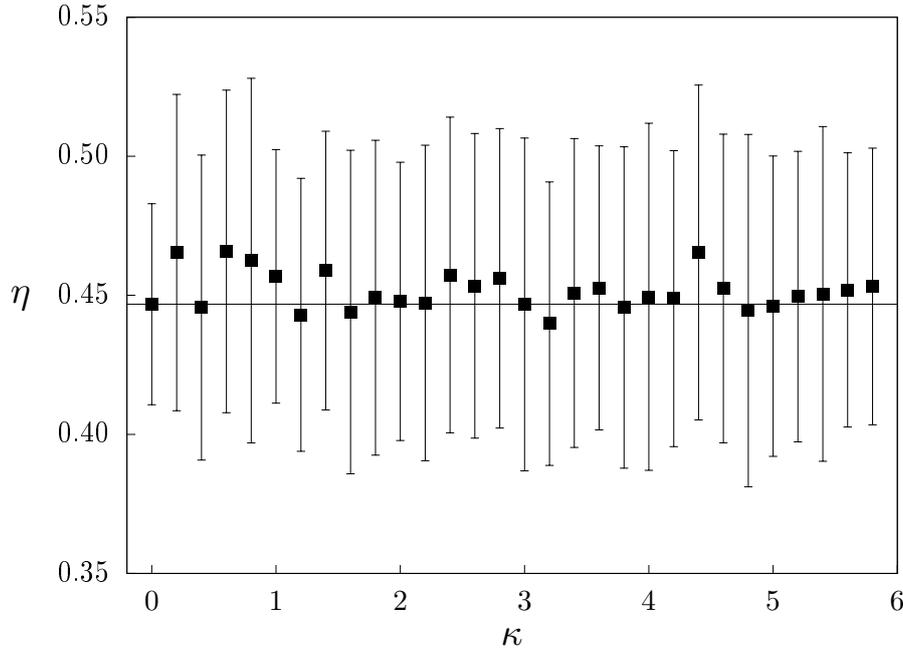


**Figura 2.3:** Viscosidad  $\eta$  en función de la densidad numérica  $\rho$  para una sola especie de partículas ( $\kappa = 0$ ) con parámetros fijos:  $\mathcal{V} = 30^3$ ,  $\rho = 8$  y  $K_B T = 0.016$ . La línea continua se realizó a partir la ecuación (2.5) usando los mismos parámetros de la simulación.

Como se puede observar en la figura 2.3, los resultados de las simulaciones se aproximan bastante bien a la ecuación (2.5) para la temperatura  $K_B T = 0.016$  con los parámetros fijos dichos anteriormente, con esto se demuestra que el modelo cumple con las propiedades de este coeficiente de transporte.

Sabiendo que el modelo simula bien el coeficiente de viscosidad a la temperatura  $K_B T = 0.016$ , se probó luego la acción del parámetro de repulsión en la viscosidad, para esto se dejó la densidad constante y se varió el valor del parámetro de repulsión  $\kappa$ , la viscosidad se calculó entre  $t = 10^5$  y  $t = 10^6$ , porque de esta forma se evitará cualquier fluctuación de energía que pueda haber localmente en las interfaces de las fases que pueda ocasionar algún cambio en el coeficiente de viscosidad no sea tomada en cuenta.

La figura 2.4 muestra el valor del coeficiente de viscosidad en función del parámetro de repulsión  $\kappa$  usando los parámetros:  $\mathcal{V} = 30^3$ ,  $\rho = 8$  y  $K_B T = 0.016$ . Los cuadros representan los resultados de la simulación y las barras el error de los resultados calculados de la misma manera que los de la gráfica 2.3, mientras que la línea continua representa el valor de la viscosidad dado por la ecuación (2.5).



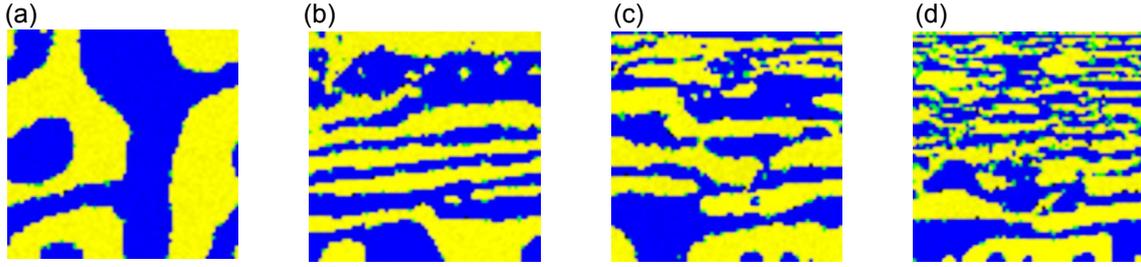
**Figura 2.4:** Viscosidad  $\eta$  en función del parámetro de repulsión  $\kappa$ , con parámetros fijos:  $\mathcal{V} = 30^3$ ,  $\rho = \rho^A + \rho^B = 8$  y  $K_B T = 0.016$ . La línea continua corresponde a la ecuación 2.3.

Como se considera que las dos especies de partículas tienen la misma masa y el mismo número de partículas, la densidad total del fluido será la suma de las densidades de cada especie,  $\rho = \rho^A + \rho^B$  y con esto se puede aproximar el valor de la viscosidad, para el caso en que  $\kappa \neq 0$ , por medio de la ecuación (2.3) a la ecuación (2.5).

### 2.3. Viscosidad de un Fluido Binario Bajo Flujo de Corte

Como se muestra en [7, 16] en el proceso de crecimiento de los patrones ocurren pequeñas fluctuaciones de energía en las interfaces, las cuales se ven reflejadas en la viscosidad. Esto ocurre de manera más notable cuando el sistema es sometido a un flujo de corte, debido a que los dominios se ven deformados en la dirección en que se aplica el campo de corte, lo que ocasiona que al llegar a un tamaño crítico, algunos de los dominios no puedan mantenerse unidos a la fase a la que pertenecen y se empiezan a romperse lo que hace que ocurra una fluctuación de energía en la región donde esto ocurre.

En la figura 2.5 se muestra el estado de cuatro sistemas: **(a)**  $s = 0.010$ , **(b)**  $s = 0.025$ , **(c)**  $s = 0.050$  y **(d)**  $s = 0.100$ , en  $t = 5 \times 10^5$ , simulados usando los siguientes parámetros:  $\rho = 10$ ,  $K_B T = 0.09$ ,  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$  y  $\kappa = 5$ , con condiciones de borde periódicas en las fronteras de los ejes  $x$  y  $z$  y de reflexión en las fronteras del eje  $y$ . Como se observa en las imágenes cuando la tasa de corte es baja ( $s = 0.01$ ) el campo apenas perturba la evolución normal del sistema binario, vista en la figura 1.3, para los casos de las tasas de corte entre  $s = 0.025$  y  $s = 0.100$  se observó que el sistema se sigue separando en fases pero estas son alargadas en la dirección del campo.



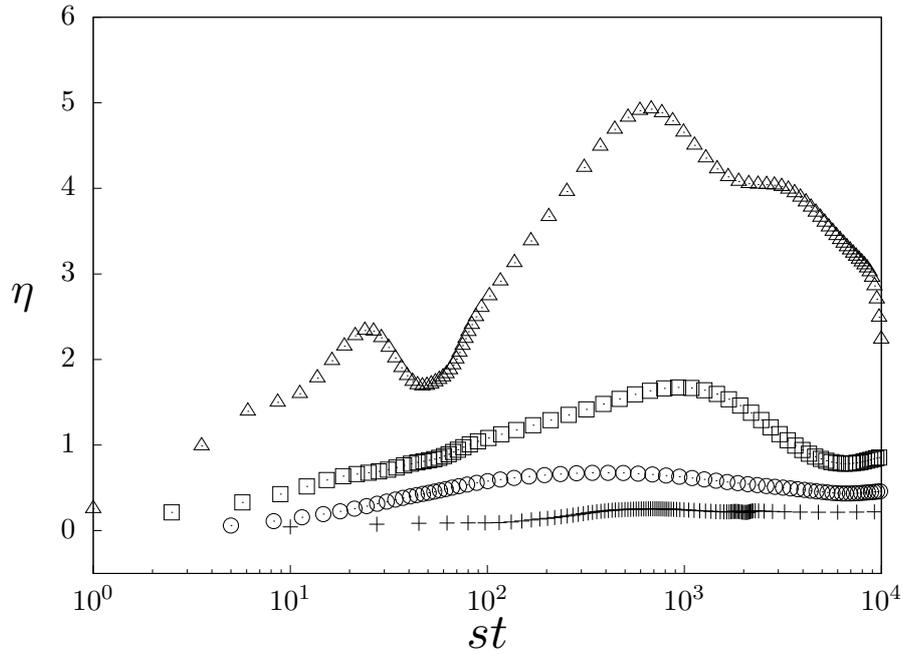
**Figura 2.5:** Imágenes del estado de varios sistemas luego de  $t = 5 \times 10^5$  con distintos flujos de corte: (a)  $s = 0.010$ , (b)  $s = 0.025$ , (c)  $s = 0.050$  y (d)  $s = 0.100$ . Con condiciones de borde periódicas en los ejes  $x$  y  $z$  y de reflexión en el eje  $y$ . Usando los parámetros fijos:  $\rho^A = \rho^B = 5$ ,  $KbT = 0.09$ ,  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$  y  $\kappa = 5$ .

Para poder observar estas fluctuaciones en la viscosidad es necesario medir la viscosidad del fluido de manera instantánea en cada intervalo de tiempo, debido a esto la ecuación (2.5) no es de utilidad, sin embargo si el flujo de corte  $s > 0$  y el fluido está en un régimen newtoniano [7], la viscosidad del fluido puede ser aproximada a:

$$\eta(t) = -\frac{\langle P_{xy}(t) \rangle}{s} \quad (2.6)$$

Donde  $P_{xy}(t)$  es la componente  $xy$  del tensor de presión dado en (2.4), en el límite cuando  $s \rightarrow 0$  y  $t \rightarrow \infty$  la ecuación anterior tiende al mismo valor numérico dado por la ecuación (2.3).

La figura 2.6 muestra una gráfica de  $\eta(t)$  en función de la tensión  $st$  definida como el producto de tasa la corte y el tiempo usando los parámetros:  $\rho = \rho^A + \rho^B = 10$ ,  $KbT = 0.02$ ,  $\kappa = 5$  y  $\mathcal{V} = 25^3$  para cuatro tasas de corte: triángulos  $s = 0.01$ , cuadros  $s = 0.025$ , círculos  $s = 0.05$  y cruces  $s = 0.1$ .



**Figura 2.6:** Viscosidad  $\eta$  en función de la tensión  $st$  medida a partir de la ecuación (2.6) para cuatro tasas de corte:  $s = 0.01$  (triángulos),  $s = 0.025$  (cuadros),  $s = 0.05$  (círculos),  $s = 0.1$  (cruces). Usando los parámetros fijos:  $\rho^A = \rho^B = 5$ ,  $KbT = 0.02$ ,  $\kappa = 5$  y  $\mathcal{V} = 25^3$ .

Como se puede observar, el valor de  $\eta$  alcanza un valor máximo para un rango de valores entre  $st \in [10^2, 10^3]$ . Para valores de  $s > 0.05$  se observó que luego de alcanzar dicho máximo tiende a un valor constante, esta característica fue observada usando distintas técnicas de simulación en [2, 7, 16, 17] y experimentalmente en [18]. Este comportamiento se debe a que cuando se los dominios empiezan a formarse y crecer, el flujo de corte hace que haya tensión extra en las interfaces que se ven deformadas, ocasionando que la viscosidad aumente hasta un valor máximo, llegado a este punto, la viscosidad cae a un valor donde se mantiene constante. En la teoría [10], para todos los flujos de corte aplicados a sistemas binarios la viscosidad para tiempos muy grandes debería tender a un valor constante sin importar el valor de de la tasa de corte  $s$ , sin embargo y similar a lo visto en [7, 17] se observa que el valor al que tiende la viscosidad para tiempos grandes es menor mientras más grande sea el flujo aplicado.

# Capítulo 3

## Separación Espinodal Bajo Flujo de Corte

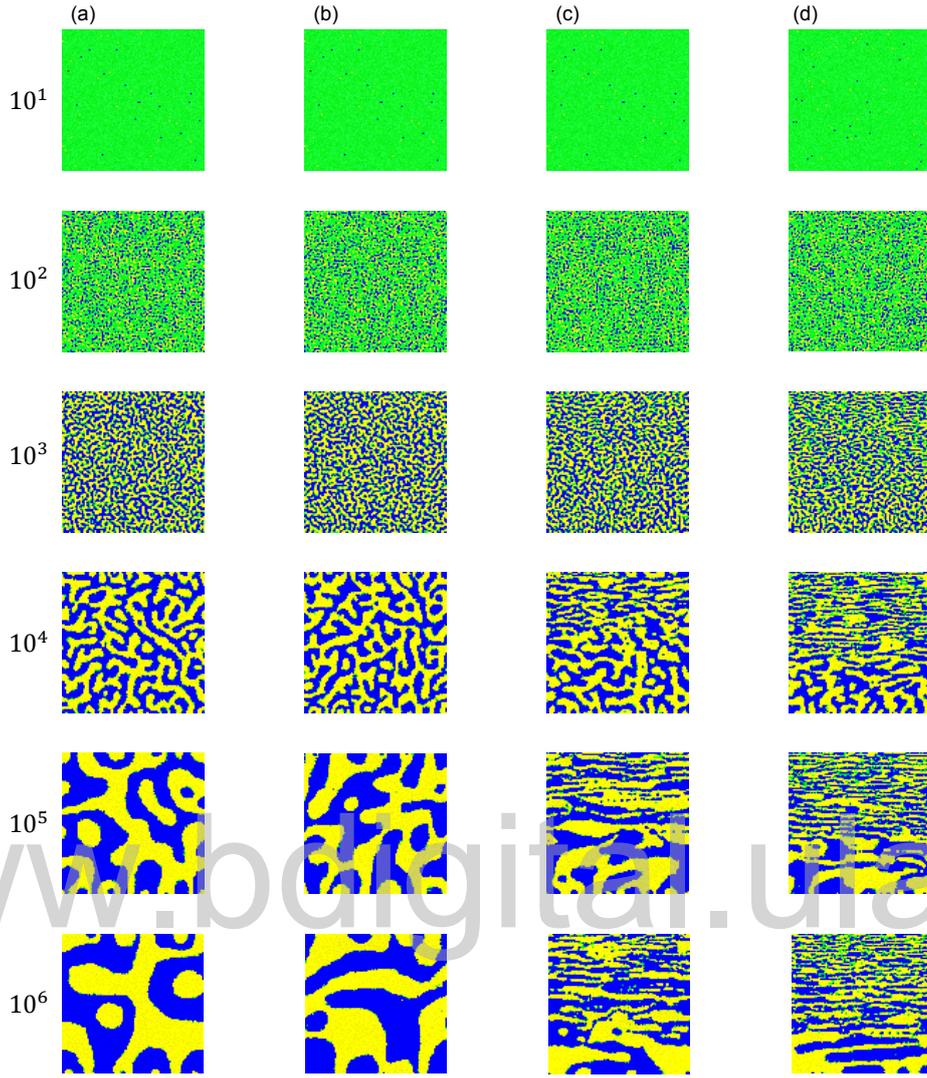
La acción de el flujo de corte en la separación de fases en fluidos binarios a sido ampliamente estudiada a lo largo de los años [2, 7, 16, 17, 19, 20], y como se vio en la figura (2.5) los patrones se ven deformados en dirección a la que se aplica el flujo de corte, su deformación viene dada por la intensidad de la tasa de corte que se aplique al sistema.

Un problema al estudiar el crecimiento de los dominios bajo distintos tipos flujos de corte es que los regímenes temporales son distintos [4, 7, 21], sin embargo como se vio en [7] para tiempos donde los dominios se empiezan a formar, la regla de la ecuación (1.10) sigue siendo válida.

### 3.1. Separación Espinodal

Debido a que el flujo de corte no es constante en el eje  $y$ , la deformación de las fases del fluido serán distintas entre este eje y los demás, las fases que se forman en la frontera más cercana a  $y = 0$  son un poco más grandes que las que se forman cerca de  $y = L_y$ , de nuevo se usarán condiciones de borde periódicas en los ejes  $x, z$  y reflexión en el eje  $y$  para el resto de las simulaciones, esto para evitar que la transición que hay entre  $y = 0$  e  $y = L_y$  interfiera con el tamaño de las fases del fluido.

En la figura 3.1 se puede observar la evolución temporal de cuatro sistemas con tasas de corte: (a)  $s = 0.005$ , (b)  $s = 0.01$ , (c)  $s = 0.05$ , y (d)  $s = 0.1$ , en cada caso se le aplicó la misma tasa de corte a las dos especies de partículas, es decir,  $s^A = s^B = s$  usando los parámetros:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 5$ ,  $\kappa = 6$  y  $K_B T = 0.09$ . cada columna representa un sistema con una tasa de corte distinta esto es: **(a)**  $s = 0.005$ , **(b)**  $s = 0.01$ , **(c)**  $s = 0.05$  y **(d)**  $s = 0.1$ . Como se puede observar en las imágenes para tiempos menores a  $t = 10^3$  todos los sistemas crecen de manera parecida, sin embargo, ya en  $t = 10^4$  cada sistema se empieza a diferenciar de los otros sobretodo en la frontera superior de  $y$  donde los sistemas están sometidos a una mayor fuerza. También se observa en la imagen **(d)** para el tiempo  $t = 10^6$  que el sistema no puede mantener su configuración espinodal y se observa que hay varias zonas donde aún coexisten las dos especies de partículas (color verde).

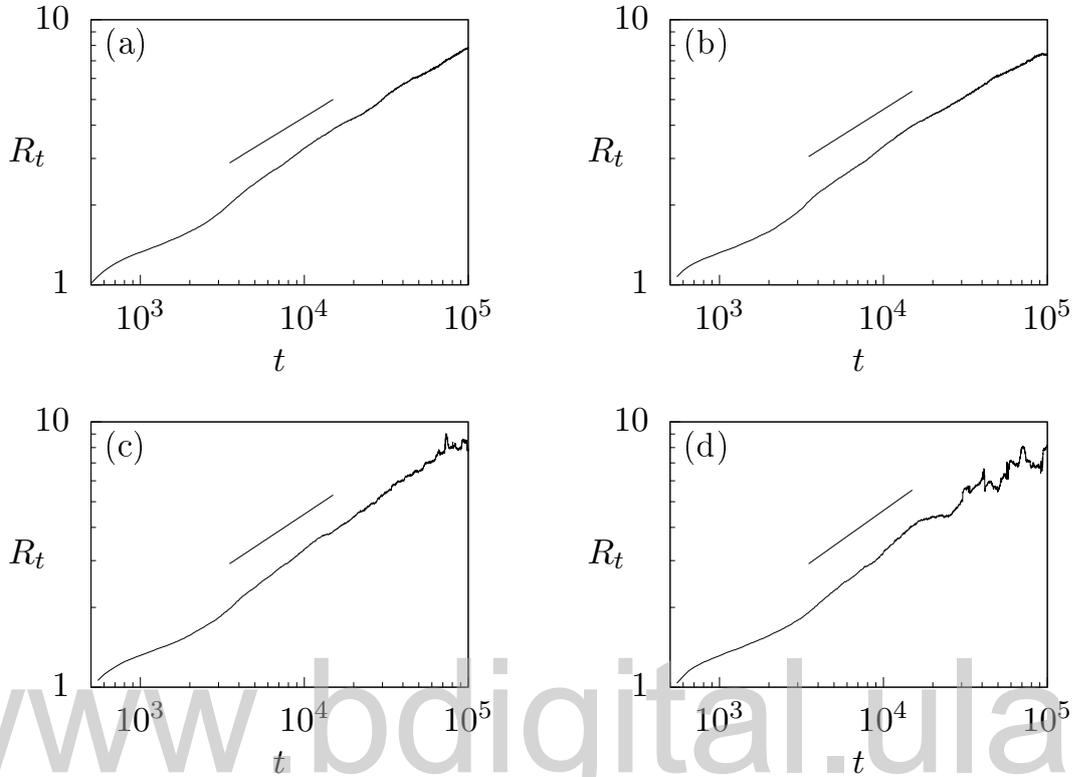


**Figura 3.1:** Imágenes de la evolución temporal de cuatro sistemas bajo la acción de una tasa de corte aplicada de izquierda a derecha. Con parámetros fijos:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 5$ ,  $\kappa = 6$  y  $K_B T = 0.09$ . Para tasas de corte: (a)  $s = 0.005$ , (b)  $s = 0.01$ , (c)  $s = 0.05$ , y (d)  $s = 0.1$ . En los tiempos: primera fila: Condición inicial, segunda fila  $t = 10^2$ , tercera fila  $t = 10^3$ , cuarta fila  $t = 10^4$ , quinta fila  $t = 10^5$  y sexta fila  $t = 10^6$ .

### 3.1.1. Crecimiento de los Dominios

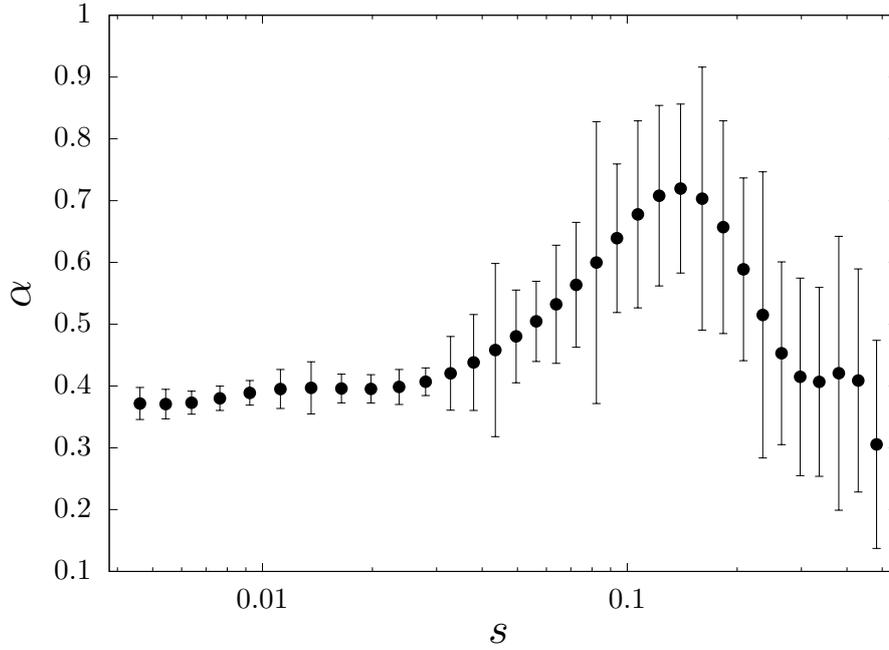
Usando la misma aproximación hecha por Echeverría et. al. [1] para medir el tamaño promedio de los dominios que se forman usando el modelo de colisión multipartículas con parámetro de repulsión, se tomó el promedio de los radios de los dominios en el tiempo de varias simulaciones realizadas con el modelo, la figura 3.2 muestra la evolución de  $R_t$  en función del tiempo  $t$  en escala logarítmica usando los siguientes parámetros:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ , densidad  $\rho^A = \rho^B = 6$ , temperatura  $K_B T = 0.09$  y parámetro de repulsión  $k = 6$  para cuatro tasas de corte: (a)  $s = 0.0075$ , (b)  $s = 0.01$ , (c)  $s = 0.05$  y (d)  $s = 0.075$ . Como se observa en el intervalo de tiempo  $t \in [1 \times 10^3, 2 \times 10^5]$  todos los sistemas siguen la regla de crecimiento dada por

la ecuación 1.10 dando un valor para el exponente de crecimiento en cada caso de  $\alpha = 0.37$ ,  $\alpha = 0.39$ ,  $\alpha = 0.41$  y  $\alpha = 0.44$ . Como se puede ver aunque el tamaño máximo que alcanzan las fases de los sistemas en el tiempo son menores mientras más se aumenta el valor de  $s$ , los sistemas tienden a crecer más rápido aprovechando la inercia dada por el campo externo.



**Figura 3.2:** Evolución temporal del promedio de los radios de las fases formadas para varios flujos de corte y su exponente de crecimiento: (a)  $s = 0.0075$ ,  $\alpha = 0.37$ . (b)  $s = 0.01$ ,  $\alpha = 0.39$ . (c)  $s = 0.05$ ,  $\alpha = 0.41$ . (d)  $s = 0.075$ ,  $\alpha = 0.44$ . Con parámetros fijos:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 6$  y  $K_B T = 0.09$ .

Sabiendo esto, se realizaron una serie de simulaciones con el fin de estudiar la evolución del exponente de crecimiento  $\alpha$  en función de la tasa de corte aplicada al sistema. La figura 3.3 muestra los resultados obtenidos de las simulaciones usando los parámetros fijos:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ , densidad  $\rho^A = \rho^B = 6$ , temperatura  $K_B T = 0.09$  y parámetro de repulsión  $\kappa = 6$ , para tasas de corte en el intervalo  $s \in [0.1 : 0.2]$ . Como se puede apreciar, para valores de  $s < 0.03$  el exponente  $\alpha$  se mantiene en un valor constante aproximado de  $\alpha \approx 0.37$ , después de esto, el exponente de crecimiento aumenta hasta un valor máximo que se encuentra en el intervalo de  $s \in [0.1 : 0.2]$  y luego empieza a decaer hasta  $s = 0.5$ , pasado este valor el radio promedio de las fases no crece de manera lineal en el tiempo con lo cual no se puede aproximar a la ecuación (1.10).



**Figura 3.3:** Evolución temporal del exponente de crecimiento  $\alpha$  en función del flujo aplicado  $s$  en el intervalo de  $s \in [0.04 : 0.5]$ , con parámetros fijos  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 6$ ,  $\kappa = 6$  y  $K_B T = 0.09$ .

Este resultado es interesante, debido a que aunque el tamaño máximo que pueden alcanzar los dominios en el sistema cuando se le aplica el flujo de corte es menor mientras aumenta  $s$ , la velocidad a la que crecen los dominios aumenta.

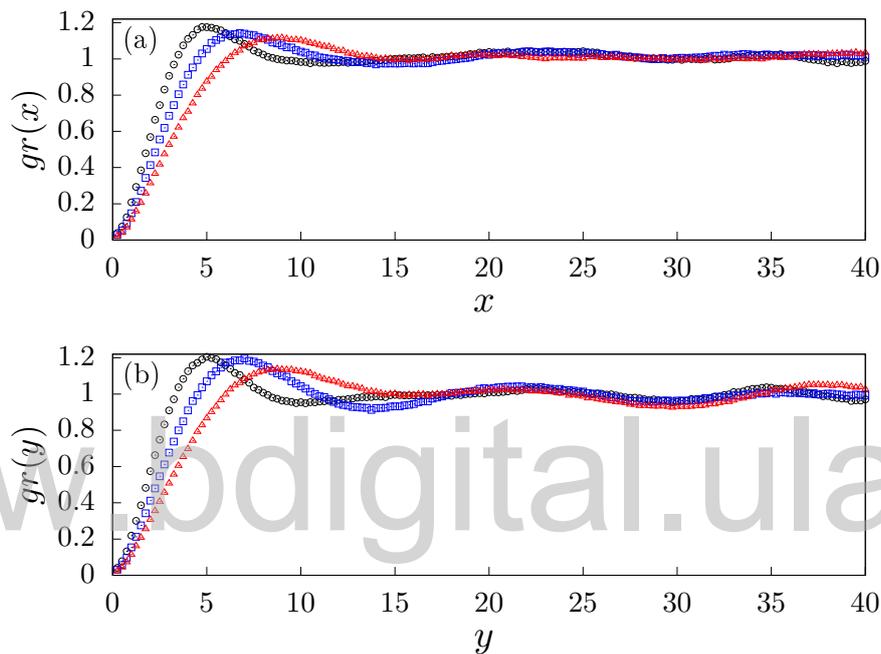
## 3.2. Deformación de Estructura

El estudio de la deformación de estructura en las fases que se forman en el proceso de la separación espinodal es importante debido a que es una de las maneras en la que se pueden contrastar los resultados numéricos obtenidos mediante la simulación de dinámica molecular con los experimentos realizados en laboratorios [18]. Estas comparaciones se hacen a partir de el estudio del tamaño promedio de las fases en los ejes  $x$  e  $y$ , de manera en que se puede ver la evolución por separado de los dominios en cada eje.

### 3.2.1. Tamaño Promedio de los Dominios en los Ejes $x$ e $y$

Anteriormente se estudió el crecimiento de los patrones del fluido binario al momento de estar expuesto a un campo externo haciendo uso del radio promedio de los dominios en el tiempo, sin embargo esta medida no toma en cuenta toda la información. El sistema al estar expuesto a un campo de corte por grandes intervalos de tiempo los dominios tienden a alinearse con la dirección de flujo (eje  $x$ ), mientras que llegan a un ancho máximo en la dirección de corte (eje  $y$ ), este ancho máximo que pueden mantener los dominios está relacionado con el parámetro de repulsión y con el tamaño del sistema.

La manera en que se realizaron medidas del tamaño promedio de los dominios en cada eje fue la siguiente: se calculó la función de distribución lineal de cada una de las partículas de especie  $\gamma$  respecto a las partículas de especie contraria, de esta forma se tiene una función de distribución lineal promedio para todas las partículas de especie  $A$  y  $B$  para los ejes  $x$  e  $y$ . Teniendo estas funciones de distribución lineal de cada especie de partículas en función de la especie contraria para cada eje se busca el máximo de la función y la distancia a la que esté el máximo del origen será el tamaño promedio de los dominios del sistema en ese tiempo, se llamará:  $R_x(t)$  al tamaño promedio de los dominios en el eje  $x$  y  $R_y(t)$  el tamaño promedio de los dominios en el eje  $y$ .

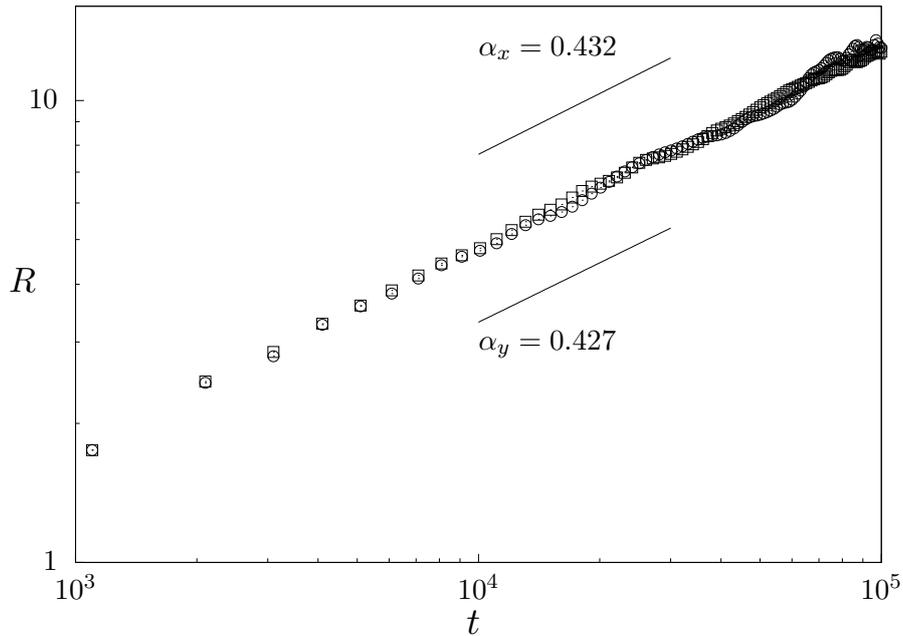


**Figura 3.4:** Función de distribución lineal en ausencia de flujo de corte en los ejes: (a) eje  $x$  y (b) eje  $y$ . Para varios tiempos: círculos negros  $t_1 = 1 \times 10^4$ , cuadros azules  $t_2 = 2 \times 10^4$  y triángulos rojos  $t_3 = 5 \times 10^4$  usando los parámetros:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 6$   $\kappa = 6$  y  $K_B T = 0.09$ .

La figura 3.4 muestra el comportamiento de la función de distribución lineal en cada eje: (a) eje  $x$  y (b) eje  $y$  para tres tiempos distintos: círculos negros  $t_1 = 1 \times 10^4$ , cuadros azules  $t_2 = 2 \times 10^4$  y triángulos rojos  $t_3 = 5 \times 10^4$ , con los siguientes parámetros fijos:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 1$ ,  $\kappa = 5$ ,  $K_B T = 0.09$ ,  $\rho^A = \rho^B = 6$ . Las funciones de distribución lineal alcanzan un valor máximo el cual varía en el tiempo, este máximo nos indica el tamaño promedio que tienen los dominios en cada intervalo de tiempo que se mida, el tamaño de los dominios en la figura 3.4 son:  $R_x(t_1) = R_y(t_1) = 5.00$ ,  $R_x(t_2) = R_y(t_2) = 6.75$  y  $R_x(t_3) = R_y(t_3) = 8.75$ .

La razón por la cual las funciones de autocorrelación en los ejes  $x$  e  $y$  son ligeramente distintas en un tiempo fijo es debido a las condiciones de borde que se le imponen al sistema, estas son periódicas en  $x$  y de reflexión en  $y$ , de esta forma la función de distribución lineal en el eje  $x$  está en el intervalo de  $x \in [0, 50]$  y en el eje  $y$  en el intervalo  $y \in [0, 100]$ .

Para verificar que el crecimiento de los dominios siguen la regla de crecimiento vista ante-

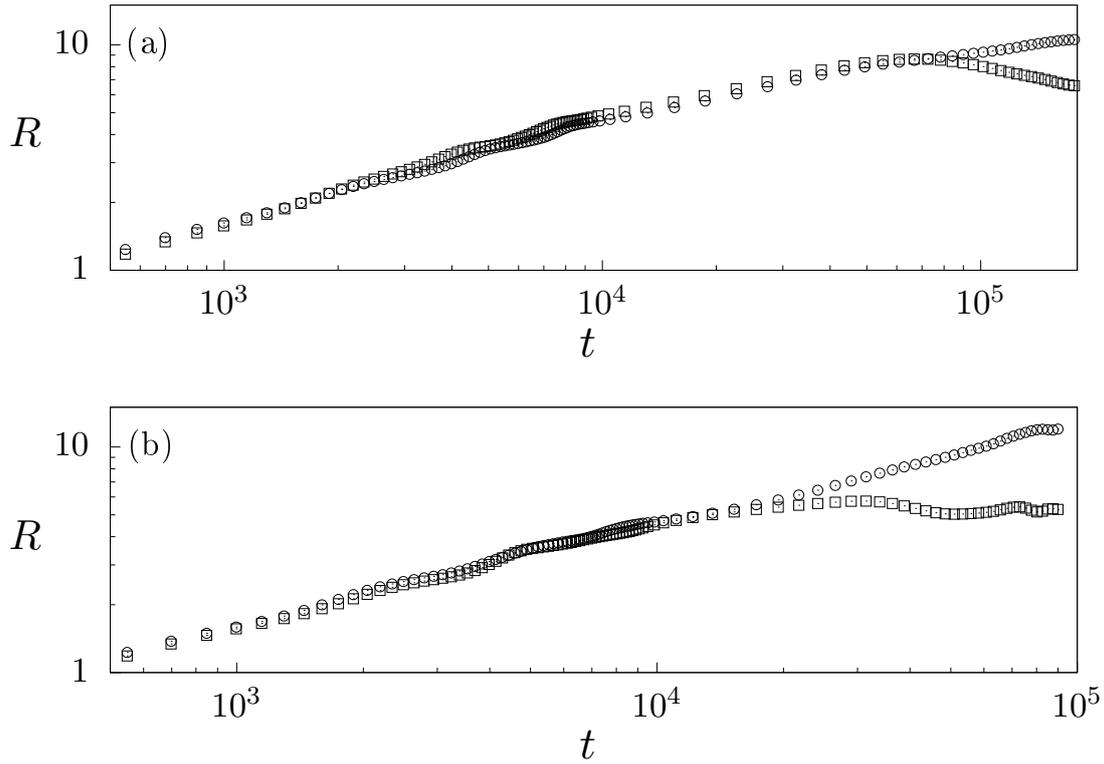


**Figura 3.5:** Tamaño promedio de los dominios del sistema en los ejes  $x$  e  $y$  en ausencia de campo externo en función del tiempo. Usando los parámetros:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 6$ ,  $\kappa = 6$  y  $K_B T = 0.09$ . Los círculos representan el tamaño promedio de los dominios en el eje  $x$  ( $R_x$ ) y los cuadros el tamaño promedio de los dominios en el eje  $y$  ( $R_y$ ). El valor del exponente de crecimiento en los dos ejes fue de  $\alpha \approx 0.43$ .

riormente en la ecuación (1.10) se realizaron una serie de medidas en ausencia de flujo de corte. En la figura 3.5 se puede observar el comportamiento del tamaño promedio de las fases en cada uno de los ejes en el tiempo usando los mismos parámetros fijos de la figura 3.4.  $R_x(t)$  está representado con puntos circulares y  $R_y(t)$  está representado con puntos cuadrados. Como se aprecia en la figura, el tamaño de los dominios en cada eje son iguales debido a que no existen fuerzas externas. De esta forma se observa que los crecimientos de los dominios en cada eje siguen la ley de potencias con un valor para el exponente de crecimiento en los dos ejes de  $\alpha \approx 0.43$ .

Sabiendo que esta manera de medir el tamaño medio de las fases del fluido funciona con el modelo de colisión multipartículas con parámetro repulsión, se estudió la manera en que se comporta el tamaño promedio de los dominios del sistema en el tiempo al estar sometido a un flujo de corte.

La figura 3.6 muestra la evolución del tamaño de los dominios  $R_x(t)$  y  $R_y(t)$  para dos sistemas sometidos a flujos de corte distintos: (a)  $s = 0.05$  y (b)  $s = 0.1$ , usando los siguientes parámetros:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 6$ ,  $\kappa = 6$  y  $K_B T = 0.09$ . Donde se puede observar que los dominios crecen de manera similar hasta un tiempo crítico  $t_{c1} = 7 \times 10^4$  para (a) y  $t_{c2} = 1 \times 10^4$  para (b) en el cual los dominios en el eje  $x$  siguen creciendo mientras que los dominios en el eje  $y$  empiezan a disminuir su tamaño debido a la fuerza externa a la que se somete el sistema, el  $t_c$  al que sucede este fenómeno varía con el tamaño del sistema, cantidad de moléculas y flujo aplicado. Este fenómeno es observado en usando otros métodos de simulación,



**Figura 3.6:** Evolución del tamaño de los dominios en el tiempo para dos sistemas sometidos a tasas de corte: (a)  $s = 0.05$  y (b)  $s = 0.10$ . En ambas figuras los círculos representan el tamaño promedio de los dominios en el eje  $x$  ( $R_x(t)$ ) y los cuadros el tamaño promedio de los dominios en el eje  $y$  ( $R_y(t)$ ). Usando los parámetros:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 6$ ,  $\kappa = 6$  y  $K_B T = 0.09$ .

y se explica a través de la cantidad total de estrés ( $st$ ) a la que un fluido binario puede ser sometido antes de que sus patrones empiecen a ser deformados.

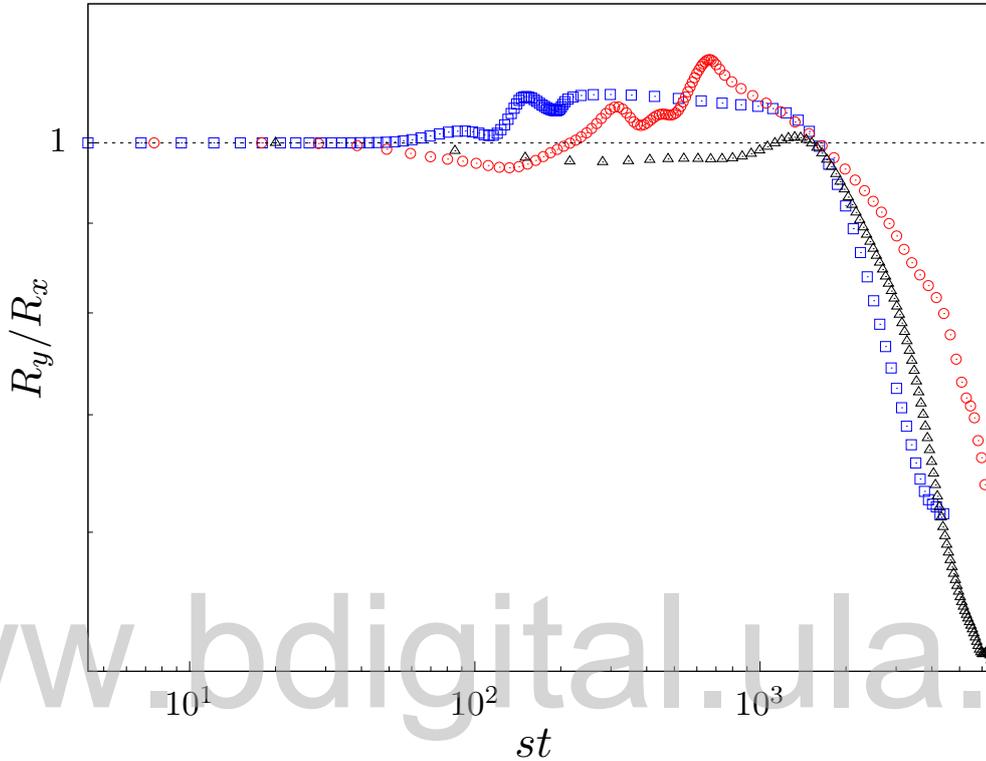
### 3.2.2. Deformación de la Estructura de los Dominios en el Tiempo

La deformación de las fases en un fluido binario que está expuesto a un flujo de corte se caracteriza por hacer que los dominios sean deformados en la dirección en la que el flujo se aplica y la velocidad a la que estos dominios se deforman depende de la tasa de corte aplicada  $s$ , una manera de caracterizar esta deformación dada por  $s$  es a partir de la razón entre  $R_y(t)$  y  $R_x(t)$ , con lo cual se puede observar en cada intervalo de tiempo, la relación que hay entre las dos y poder observar la evolución de los dominios en los dos ejes para cada flujo de corte.

Como fue visto en otras investigaciones usando distintos métodos de simulación [7] [19], el tamaño medio de los dominios en tiempos pequeños es el mismo en las dos direcciones estudiadas: eje de corte ( $y$ ) y eje de flujo ( $x$ ), sin embargo luego de un  $t_c$  los dominios en el eje de corte empiezan a disminuir su tamaño mientras que los dominios en el eje de flujo siguen creciendo.

Lo interesante de este  $t_c$ , en el cual los dominios ya no siguen una regla de crecimiento de potencias, es que sucede alrededor de un valor constante de estrés  $st_c$ , es decir aunque el

campo externo introduzca una nueva escala de tiempo, la tasa de corte hace que se puedan relacionar sistemas con distintos regímenes de crecimiento. Este fenómeno fue observado en otras investigaciones [7] [8] [20] y se debe a que al momento en que las interfaces de los fluidos se alinean con el campo de corte, el fluido tendrá una viscosidad más baja que su viscosidad volumétrica [22].



**Figura 3.7:**  $R_y/R_x$  en función del estrés  $st$  para tres flujos de corte distintos: cuadrados azules  $s = 0.05$ , círculos rojos  $s = 0.075$  y triángulos negros  $s = 0.1$ . Usando los parámetros:  $L_x = L_y = 100$ ,  $L_z = 2$ ,  $\rho^A = \rho^B = 6$ ,  $\kappa = 6$  y  $K_B T = 0.09$ .

En la figura 3.7 se puede observar el comportamiento de la razón  $R_y/R_x$  en función del estrés  $st$  al que es sometido el sistema, usando los mismos parámetros fijos de la figura 3.6 para tres tasas de corte distintas  $s_1 = 0.05, s_2 = 0.075$  y  $s_3 = 0.1$ , para valores de  $st < 100$  se puede observar que los dominios crecen a la misma tasa esto es  $R_y/R_x \approx 1.0$ , el valor de  $R_y/R_x$  esta al rededor de 1 hasta el valor de  $st \approx 1600$ , a partir del cual los dominios en el eje  $x$  siguen creciendo mientras que los dominios en el eje  $y$  se vuelven más pequeños, con lo cual el valor de  $R_y/R_x$  empieza a ser menor que 1 el resto de la simulación.

Esta tasa a la que decrece  $R_y/R_x$  a probado seguir también una ley de potencias  $R_y/R_x \sim t^m$ , el valor del exponente usando los datos de la gráfica 3.7 es  $m \simeq -0.7$ , el cual está bastante cercano a los resultados vistos en otras investigaciones: experimentalmente en [18] se tuvo que el valor del exponente era de  $m = -0.8 \pm 0.1$  y haciendo simulación de dinámica molecular [7] el exponente tenía un valor de  $m \simeq -0.7$ .

# Conclusiones

Se propuso una forma de añadir un campo externo de corte al modelo de colisión multipartículas con parámetro de repulsión y se estudió la formación y crecimiento de dominios así como la acción del campo en el coeficiente de viscosidad del fluido binario.

En la primera parte del trabajo (Capítulo 1) se analizaron los modelos del tipo colisión multipartículas y se mostró de qué manera funciona el modelo de interés además de mostrar algunas propiedades resaltantes.

En la sección de resultados (Capítulos 2 y 3) se propuso como sería la acción del campo de corte sobre los componentes del sistema y se revisó que este no cambiara el régimen newtoniano del fluido, esto es, que la relación que existe entre la componente  $x$  de la velocidad del flujo denotada como  $u_x$  tenga una relación lineal a su posición en  $y$  ( $u_x(y) \propto y$ ) y se estudia las propiedades del crecimiento espinodal bajo el flujo de corte haciendo uso del radio promedio de los dominios ( $R_t$ ) y la deformación de la estructura de las fases ( $R_y/R_x$ ).

Específicamente en el Capítulo 2 se estudiaron las propiedades del coeficiente de viscosidad  $\eta$  para el caso en que el sistema no esté expuesto a fuerzas externas, primero sin repulsión entre especies variando la densidad de las partículas que constituyen el fluido y después dejando fija la densidad y aumentando la repulsión entre especies verificando que la viscosidad del fluido se mantuviese constante. Todo esto para hacer un estudio de la viscosidad  $\eta$  en función del tiempo  $t$  para distintas tasas de corte  $s$ , donde se encontró que entre los valores de estrés total  $st \in [10^2, 10^3]$  la viscosidad alcanza un valor máximo para los parámetros estudiados en cada flujo de corte, esto debido a los pequeños picos energía que es liberada cada vez que un dominio se separa debido al campo de corte.

Por último, en el Capítulo 3 se estudió la formación de los dominios a partir del exponente de crecimiento  $\alpha$  en función de la tasa de corte  $s$ , observándose que para tasas de corte en el intervalo  $s \in [0.1 : 0.2]$  ocurre un máximo para el exponente de crecimiento para los parámetros estudiados, lo cual indica que el crecimiento de los dominios se acelera levemente con la acción del campo externo, sin embargo, por arriba de este intervalo el crecimiento de los dominios es ralentizado hasta que la acción del campo externo evita que se los formen dominios. También se evaluó la deformación de la estructura de los patrones del sistema al imponer el campo de corte a partir del tamaño promedio de los dominios en los ejes  $x$  e  $y$ , donde se observó que dependiendo de la tasa de corte aplicada al sistema hay un tiempo crítico  $t_c$  en el cual los dominios en el eje  $y$  (dirección del corte) dejan de crecer mientras que los dominios en el eje  $x$

(dirección del flujo) siguen aumentando, este fenómeno que es independiente de la tasa de corte y del tiempo demostró suceder a un valor de estrés total  $st_c$  relativamente constante. Con lo cual al evaluar la razón  $R_y/R_x$  luego del tiempo crítico para varios flujos de corte se observa que siguen una ley de potencias del tipo  $t^m$  con un valor para el exponente de  $m \simeq -0.7$  similar a lo observado en distintas investigaciones [7, 18].

[www.bdigital.ula.ve](http://www.bdigital.ula.ve)

# Bibliografía

- [1] C Echeverria, K Tucci, O Alvarez-Llamoza, EE Orozco-Guillén, M Morales, and MG Cosenza. Mesoscopic model for binary fluids. *Frontiers of Physics*, 12(5):128703, 2017.
- [2] Yanan Wu, Hana Skrdla, Turab Lookman, and Shiyi Chen. Spinodal decomposition in binary fluids under shear flow. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 239(1-3):428–436, 1997.
- [3] Mohamed Laradji, Søren Toxvaerd, and Ole G Mouritsen. Molecular dynamics simulation of spinodal decomposition in three-dimensional binary fluids. *Physical review letters*, 77(11):2253, 1996.
- [4] Alan J Bray. Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, 51(2):481–587, 2002.
- [5] Kurt Binder and D Stauffer. Theory for the slowing down of the relaxation and spinodal decomposition of binary mixtures. *Physical Review Letters*, 33(17):1006, 1974.
- [6] Zhenli Zhang, Hongdong Zhang, and Yuliang Yang. The rheology and morphology of phase-separating fluids with viscosity contrast. *The Journal of Chemical Physics*, 115(16):7783–7792, 2001.
- [7] Paz Padilla and Søren Toxvaerd. Spinodal decomposition under shear flow. *The Journal of chemical physics*, 106(6):2342–2347, 1997.
- [8] Eugene C Eckstein, Douglas G Bailey, and Ascher H Shapiro. Self-diffusion of particles in shear flow of a suspension. *Journal of Fluid Mechanics*, 79(1):191–208, 1977.
- [9] Amitabha Chakrabarti, Raúl Toral, and James D Gunton. Late stages of spinodal decomposition in a three-dimensional model system. *Physical Review B*, 39(7):4386, 1989.
- [10] Dennis C Rapaport and Dennis C Rapaport Rapaport. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press, 2004.
- [11] Shiyi Chen and Gary D Doolen. Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual review of fluid mechanics*, 30(1):329–364, 1998.
- [12] Raymond Kapral. Multiparticle collision dynamics: Simulation of complex systems on mesoscales. *Advances in Chemical Physics*, 140:89–146, 2008.

- [13] G Gompper, T Ihle, DM Kroll, and RG Winkler. Multi-particle collision dynamics: A particle-based mesoscale simulation approach to the hydrodynamics of complex fluids. In *Advanced computer simulation approaches for soft matter sciences III*, pages 1–87. Springer, 2009.
- [14] A Malevanets and R Kapral. Continuous-velocity lattice-gas model for fluid flow. *EPL (Europhysics Letters)*, 44(5):552, 1998.
- [15] Kay Tucci and Raymond Kapral. Mesoscopic model for diffusion-influenced reaction dynamics. *The Journal of chemical physics*, 120(17):8262–8270, 2004.
- [16] Aiguo Xu, G Gonnella, and A Lamura. Phase-separating binary fluids under oscillatory shear. *Physical Review E*, 67(5):056105, 2003.
- [17] Federico Corberi, Giuseppe Gonnella, and Antonio Lamura. Spinodal decomposition of binary mixtures in uniform shear flow. *Physical Review Letters*, 81(18):3852, 1998.
- [18] Jörg Lauger, Christian Laubner, and Wolfram Gronski. Correlation between shear viscosity and anisotropic domain growth during spinodal decomposition under shear flow. *Physical review letters*, 75(19):3576, 1995.
- [19] AJ Wagner and JM Yeomans. Phase separation under shear in two-dimensional binary fluids. *Physical Review E*, 59(4):4366, 1999.
- [20] G Gonnella and A Lamura. Long-time behavior and different shear regimes in quenched binary mixtures. *Physical Review E*, 75(1):011501, 2007.
- [21] Akira Onuki. Phase transitions of fluids in shear flow. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9(29):6119, 1997.
- [22] Paz Padilla, Søren Toxvaerd, and J Stecki. Shear flow at liquid–liquid interfaces. *The Journal of chemical physics*, 103(2):716–724, 1995.