

Inestabilidades de density finger miscible en medios de reacción-difusión-convección

Proyecto de Máster. Curso 2009-11. Máster Oficial en Enxeñaría Matemática

Autor: Darío Martín Escala

Tutores: María Elena Vazquez Cendón, Alberto Pérez Muñuzuri

ABSTRACT

Al mezclar fluidos miscibles de distintas densidades y/o diferentes coeficientes de difusión, pueden generarse diversas inestabilidades en la interfase de contacto de ambos. Estas inestabilidades pueden separarse entre las que son puramente hidrodinámicas como las inestabilidades de *Rayleigh-Taylor* o difusión doble [1], y las que pueden producirse a partir de la generación de reacciones químicas al entrar en contacto ambos fluidos [2],

En este trabajo se realizó una comparación cualitativa entre los resultados experimentales y los obtenidos mediante simulación numérica para los casos puramente hidrodinámicos y se compararon resultados simulados con los que pueden observarse en la bibliografía citada para el caso en que la inestabilidad se lleva a cabo por una reacción química bimolecular sencilla de la forma $A + B \rightarrow C$, en donde A, B y C son las especies químicas en juego.

Los modelos involucrados se desarrollaron a partir del arreglo experimental de dos fluidos miscibles confinados en una celda Hele-Shaw. Los casos de estudio analizados dependen tanto de la densidad como de los coeficientes de difusión de las especies involucradas (ver figura 1).

En todos los casos, los modelos matemáticos asociados fueron resueltos utilizando métodos numéricos como diferencias finitas y volúmenes finitos, implementando el software comercial Flow-3D® v9.3.2.

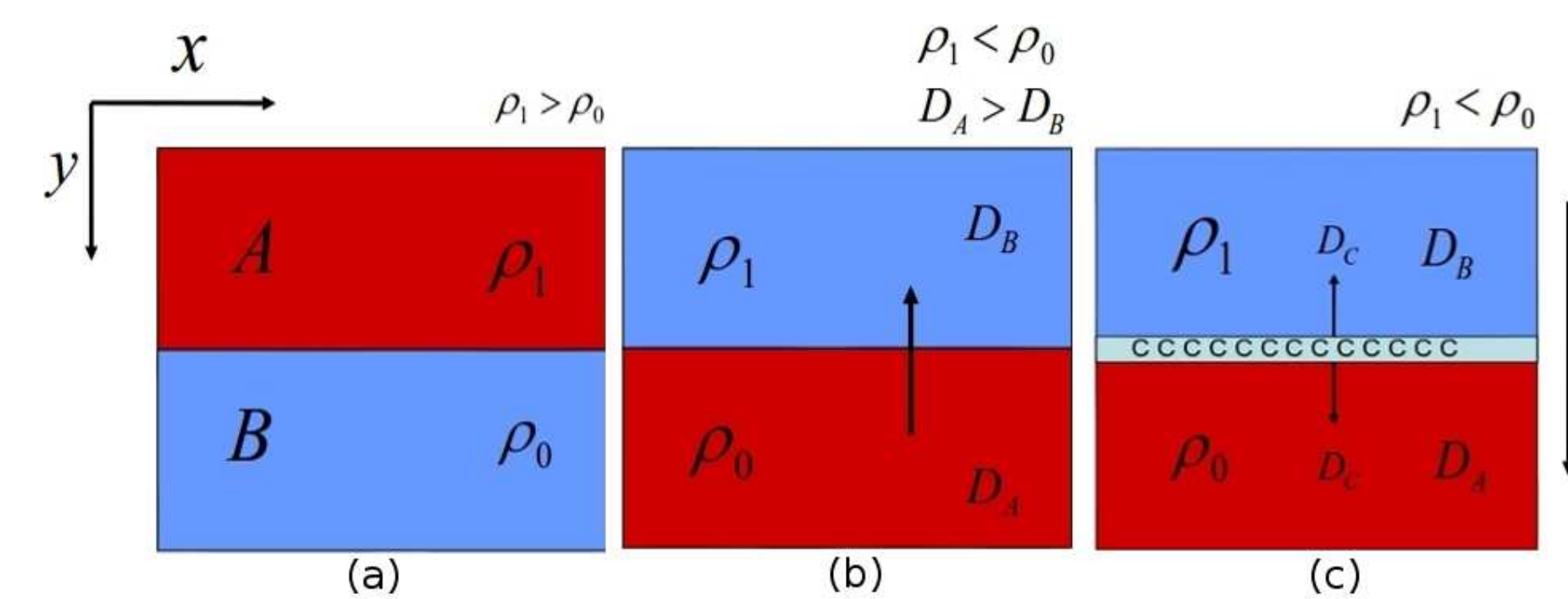


Fig. 1: Sistemas de estudio. (a) Inestabilidad de Rayleigh-Taylor. (b) Inestabilidad de difusión doble. (c) Inestabilidad producida por la generación de una tercer especie C en la interfase de contacto. Se muestran las coordenadas y el sistema de referencia, así como la relación entre las densidades ρ_i y los coeficientes de difusión D_i

RESULTADOS

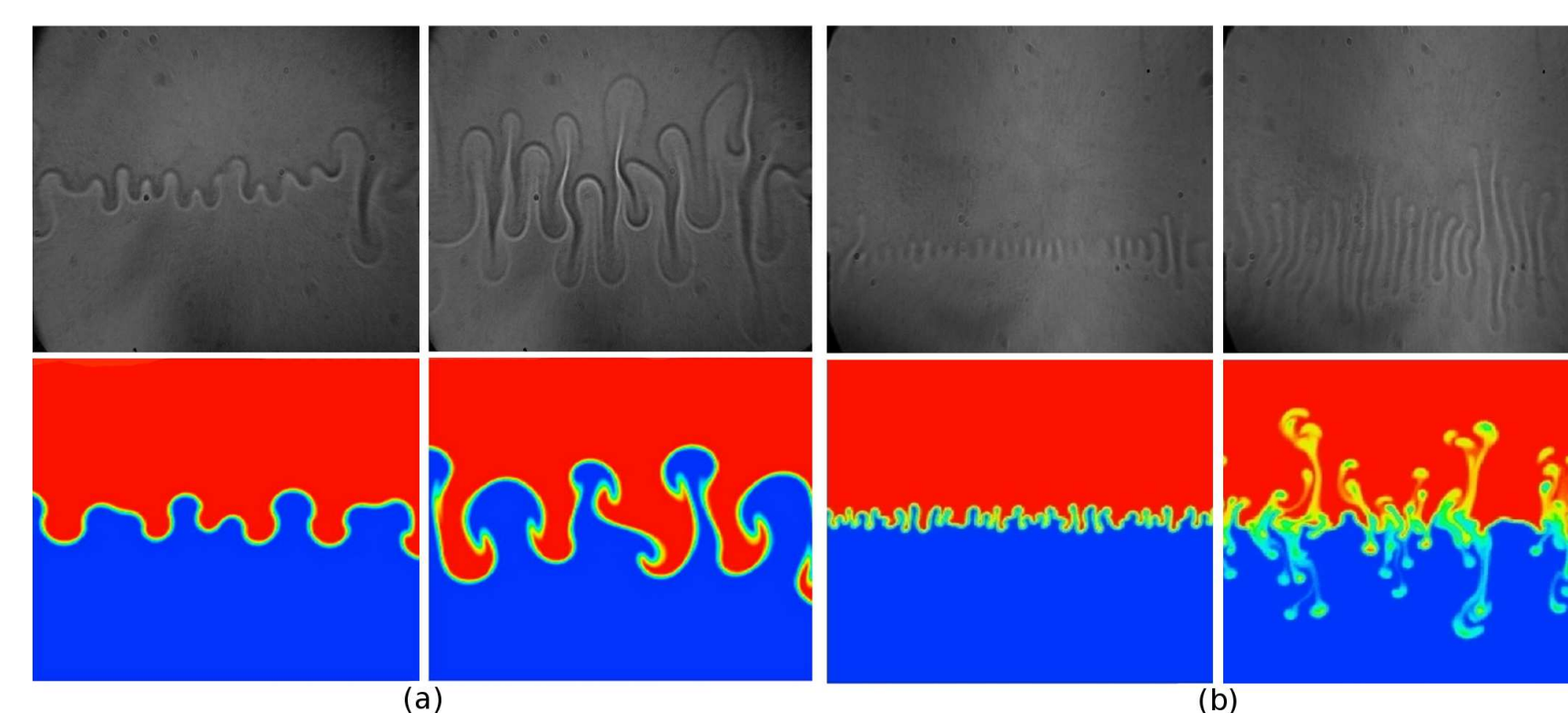


Fig. 2: (a) Comparaciones entre los resultados experimentales (imágenes en blanco y negro) y los obtenidos mediante simulación numérica (imágenes a color) para la inestabilidad de: (a) Rayleigh-Taylor. (b) Difusión doble.

En la figura 2 se aprecia la similitud existente entre los pa-

trones experimentales y numéricos, demostrando la eficacia tanto del modelo matemático como de los esquemas numéricos empleados.

Para el caso en donde la inestabilidad es generada por una reacción química, los resultados se muestran en la figura 3. Estos resultados pueden ser directamente comparados con los que se presentan en las referencias [2] y puede verse la similitud en los comportamientos, que en este caso dependen básicamente de la relación entre la densidad y los coeficientes de difusión del producto C y los reactivos A y B.

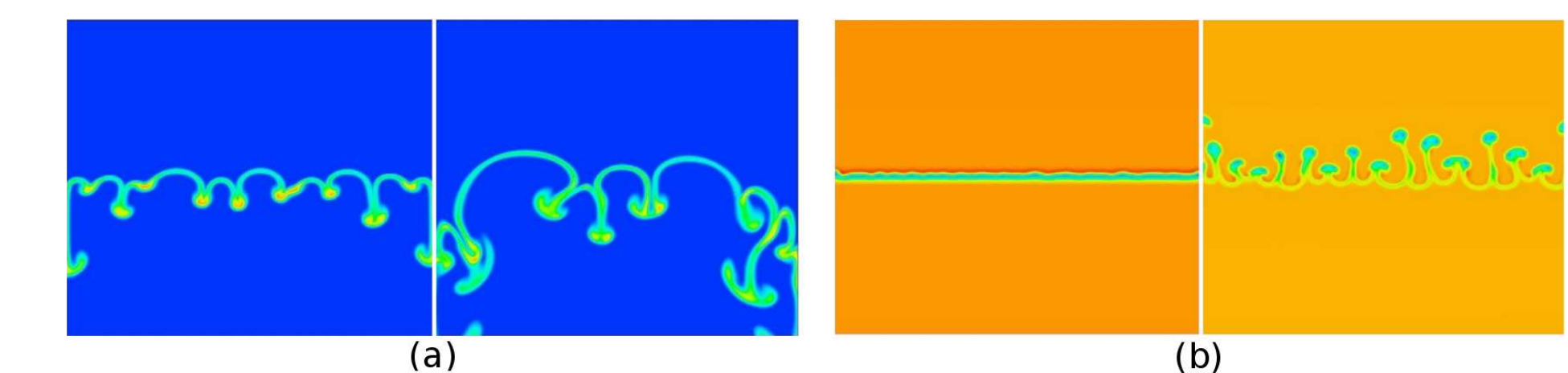


Fig. 3: Dos comportamientos diferentes obtenidos para el caso en donde la inestabilidad se produce por acción de una reacción química. (a) C es más denso que A y B. (b) C es menos denso que A y B

REFERENCIAS

- [1] PMJ Trevelyan *et al.* Buoyancy-driven instabilities of miscible two-layer stratifications in porous media and Hele-Shaw cells. *Journal of Fluid Mechanics*, 670(1):3865, 2011.
- [2] C. Almarcha *et al.* Chemically driven hydrodynamic instabilities. *Physical review letters*, 104(4):44501, 2010.