



UNIVERSIDAD MICHOCANA DE  
SAN NICOLÁS DE HIDALGO

INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**Sobre la Inestabilidad de Ruptura en Convección Inducida por Tensión Superficial**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:  
**MAESTRA EN CIENCIAS EN EL ÁREA DE FÍSICA**

PRESENTA:

**SUSANA HERNÁNDEZ CAMACHO**

ASESOR:

**DR. Ricardo Becerril Bárcenas**

MORELIA, MICHOACÁN FEBRERO DEL 2010.

# Agradecimientos

dedicada

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>5</b>
<b>1. Introducción.</b>	<b>8</b>
1.1. Inestabilidades hexagonal y deformacional. . . . .	11
1.2. Mecanismos y Escalas de Tiempo. . . . .	13
1.3. Análisis de estabilidad lineal . . . . .	15
<b>2. Modelo de Swift-Van Hook</b>	<b>21</b>
2.1. Análisis lineal de la ecuación de evolución. . . . .	27
<b>3. Base de Fourier y Chebyshev</b>	<b>29</b>
3.1. Introducción . . . . .	29
3.2. Base de Fourier . . . . .	31
3.2.1. Teorema de convolución . . . . .	33
3.2.2. Transformadas Discretas de Fourier . . . . .	34
3.2.3. Error de Aliasing. . . . .	36
3.3. Base de Chebyshev . . . . .	40
3.3.1. Transformaciones Discretas de Chebyshev . . . . .	44
<b>4. Esquema Numérico</b>	<b>46</b>
4.1. Método Espectral de Galerkin. . . . .	46

4.2. Método Espectral Tau. . . . .	48
4.3. Método Espectral de Colocación. . . . .	50
4.4. Condiciones de Frontera . . . . .	50
4.4.1. Condiciones de frontera periódicas . . . . .	51
4.4.2. Condiciones de frontera no periódicas. . . . .	63
4.5. Supresión de la inestabilidad Rayleigh-Taylor . . . . .	72
<b>5. Resultados Numéricos</b>	<b>76</b>
<b>6. Conclusiones y Trabajo Futuro</b>	<b>79</b>

## Resumen

El estudio sistemático de la convección en capas de fluidos que se calientan desde la base del contenedor y se enfrían en su parte superior se inició con los trabajos del físico francés Bénard en 1900 [2]. En condiciones de microgravedad o para capas muy delgadas (0.07 a 0.27 mm) aparece una inestabilidad de ruptura en lugar de la bien conocida inestabilidad hexagonal que estudió Bénard. El primer estudio experimental sobre esta inestabilidad de ruptura lo realizó S. Van Hook *et al* [18] y [19]. En la figura 1 se muestra un diagrama del sistema estudiado experimentalmente por Van Hook. Se tiene una capa de fluido en un recipiente, éste se calienta desde su base. Por arriba del fluido hay una capa de gas (generalmente aire) que se enfría. Una de las propiedades más importantes de la interfase líquido-gas  $\mathcal{S}$ , es la tensión superficial  $\sigma$ , que depende de los campos presentes como son la temperatura, campos eléctricos, concentraciones de alguna sustancia en el fluido, etc. En el sistema que trabajaremos sólo está presente el campo de temperaturas y  $\sigma = \sigma(T)$ , explícitamente, se asume  $d\sigma/dT = -\sigma_T$  donde  $\sigma_T$  es una constante positiva. De modo que la tensión superficial es linealmente dependiente de la temperatura y crece cuando la temperatura decrece. Como resultado de las variaciones de temperatura, sobre  $\mathcal{S}$  se generarán gradientes de tensión superficial y el líquido que esté en regiones calientes será arrastrado hacia regiones frías. Este es el mecanismo de termocapilaridad, también conocido como el efecto Marangoni, que induce el movimiento convectivo.

Lo que observaron en [19] es que para capas muy delgadas de líquido, el sistema desarrolla un estado deformacional (de la interfase  $\mathcal{S}$ ) que puede tomar la forma de una depresión localizada (un agujero) o una elevación localizada (un pico), que se desarrolle un agujero o un pico, depende del grosor de la capa de gas (aire) que se encuentra arriba del líquido, de la profundidad de la capa de líquido y de los coeficientes de difusión de la temperatura en el líquido y en el gas. El desarrollo de una depresión o una elevación ocasionan que la capa del fluido se rompa, por lo que a menudo se

hace referencia a este fenómeno como inestabilidad de ruptura.

En este trabajo, se hace una breve revisión del modelo hidrodinámico propuesto por Swift y Van Hook, que describe la inestabilidad Marangoni o de ruptura. El modelo hasta donde sabemos, no tiene solución analítica y debe resolverse numericamente, para ese fin, usamos métodos espectrales. Por ello se hace una exposición de estos métodos, y su implementación, primero con condiciones de frontera periódicas con una interfase liquido-gas plana, y luego con condiciones que siguen mejor el protocolo experimental [1], esto es, que la altura del líquido queda fijo en el menisco del contenedor (la altura del líquido queda fija en las paredes laterales del contenedor) y que la superficie inicial no es plana.

El propósito de revisar la convección producida por tensión superficial, el modelo Swift-Van Hook y los métodos espectrales, es el sentar las bases para el estudio del fenómeno de supresión de la inestabilidad de Rayleigh-Taylor por la imposición de un gradiente de temperatura que se demostró experimentalmente en 2001 por J. Burgess y colaboradores [3], aunque se predijo teóricamente desde 1986 [10]. En el trabajo de J. Burgess *et al* se reporta una discrepancia entre los resultados experimentales y la predicción teórica de las condiciones para las cuales se suprime la inestabilidad. La hipótesis que Burgess establece es que esa discrepancia podría explicarse con el hecho de que el líquido queda fijo en las paredes laterales. La presente tesis reúne las herramientas básicas para analizar, posteriormente, la inestabilidad de Rayleigh-Taylor y corroborar o descartar la hipótesis de Burgess.

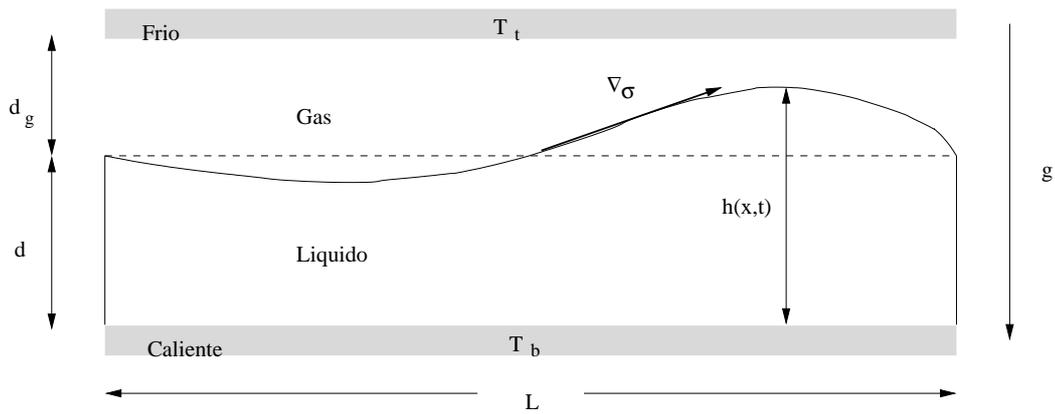


Figura 1: Bosquejo del sistema líquido-gas calentado desde la base del contenedor y enfriado desde arriba ( $T_b > T_t$ ). La longitud horizontal del contenedor es  $L$ ,  $d$  y  $d_g$  son las profundidades medias de las capas del líquido y del gas respectivamente y  $h(x,t)$  es la altura de la interfase líquido-gas. Puesto que la tensión superficial  $\sigma$  disminuye con el incremento de la temperatura, el líquido de regiones más bajas (más caliente y por tanto con menor tensión superficial) será jalado a regiones más elevadas (más frías y por tanto con mayor tensión superficial) generando movimiento convectivo.

# Capítulo 1

## Introducción.

La transferencia de calor es un proceso por el cual se intercambia energía en forma de calor entre distintos cuerpos o entre diferentes partes de un mismo cuerpo (o sistema) que están a distinta temperatura. El calor se transfiere básicamente de tres formas: por convección, radiación y por conducción. Aunque estos tres procesos pueden tener lugar simultáneamente, puede ocurrir que uno de los mecanismos predomine sobre los otros dos.

Cuando una capa de fluido en reposo se calienta desde la base y se enfría en la parte superior, se establece un gradiente de temperatura en la dirección vertical. El calor se difunde exclusivamente por conducción, y la temperatura del fluido depende linealmente de la coordenada vertical  $z$  desde un valor  $T(z = 0)$  hasta su valor  $T(z_{max})$ . En esta situación, la convección se produce porque la región inferior del fluido debido al aumento de temperatura se vuelve menos densa y experimenta una fuerza que tiende a elevarla desplazando al fluido que se encuentra en la parte superior y que está a menor temperatura y por lo tanto es más denso y tiende a hundirse estableciéndose así un flujo convectivo. La fuerza responsable de este flujo es el empuje por flotación.

La convección es un fenómeno con el que convivimos a diario y que se manifiesta en varios contextos, por ejemplo: la convección en meteorología se

produce por gradientes de temperatura amplificados cuando el sol calienta la tierra, teniéndose aire mas caliente en su superficie que en regiones más altas. El movimiento convectivo es ciertamente un factor importante en el comportamiento del clima; en las corrientes oceánicas la convección producida por gradientes de temperatura y salinidad también juega un papel determinante así como en el movimiento de las placas tectónicas las cuales a su vez determinan el movimiento de los continentes; en el contexto de la astrofísica, la convección juega un papel central en la transferencia de calor y materia en el interior de las estrellas. Es remarcable que lo básico de la dinámica de estos grandes flujos convectivos presentes en la naturaleza puede ser estudiado experimentalmente en un laboratorio con dimensiones mucho más pequeñas. Las observaciones de la formación de patrones convectivos datan desde los trabajos de Weber (1855) [20] y Thompson (1882) [17], pero fue el físico Bénard (1900) quien realizó las primeras investigaciones sistemáticas de convección en capas de fluidos calentadas desde abajo con la superficie superior expuesta al aire [2]. Él observó que en la superficie del fluido, se formaban celdas hexagonales que tenían la forma como de un panal de abejas en el cual el fluido subía por el centro de los hexágonos y bajaba por sus lados.

Para describir el mecanismo de la convección térmica inducida por flotación, nos fijamos en un elemento de fluido que está más caliente (y por tanto menos denso) que por una perturbación se encuentra en una región más fría (y por tanto más densa), este elemento, por ser menos denso que la región que lo rodea, experimentará una fuerza de empuje hacia arriba (principio de Arquímedes) y empezará a subir. Sin embargo, por efectos de difusión de calor, el elemento de fluido irá equilibrando su temperatura con sus alrededores, esto se realizará rápida o lentamente de acuerdo al coeficiente de difusión del fluido, y esa fuerza de empuje disminuirá y el elemento se empezará a parar, a esta desaceleración también contribuirá la viscosidad. Así que habrá una competencia entre el gradiente de temperatura por un lado (que desestabiliza al sistema) y la difusión y viscosidad que lo estabiliza (ver figura 1.1).

Dependiendo del gradiente de temperatura, la viscosidad y la rapidez de la difusión, el movimiento del elemento de fluido permanecerá o desaparecerá. Uno inicia con un estado conductivo, esto es, el calor se transporta sólo por difusión mientras el fluido esta en reposo. Si por una perturbación el fluido empieza a moverse, este movimiento puede decrecer y entonces el sistema regresa al reposo, en cuyo caso decimos que el sistema es estable, ó crecer y permanecer, en cuyo caso decimos que el sistema es inestable.

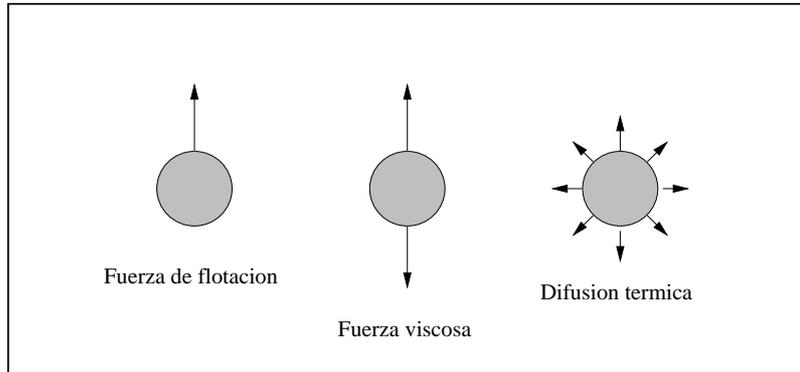


Figura 1.1: Mecanismo de flotación que genera movimiento convectivo. El gradiente de temperatura es desestabilizador, mientras que la difusión de calor y la viscosidad son estabilizadores.

Fue Rayleigh quien intentó explicar teóricamente las observaciones realizadas por Bénard. Rayleigh trató el problema como un problema de estabilidad [14] y encontró que la cantidad, que lleva su nombre, el número de Rayleigh  $R \propto \Delta T / \nu \kappa$  (donde  $\Delta T$  es el gradiente de temperatura,  $\nu$  es la viscosidad cinemática del fluido y  $\kappa$  es el coeficiente de difusión térmico) era el parámetro de control apropiado para la convección de Benárd llevada a cabo por el mecanismo de flotación. La importancia relativa de estos mecanismos se mide mediante el número adimensional de Rayleigh  $R$  que es una medida de las intensidades relativas del efecto desestabilizador de la flotación inducida por el gradiente de temperatura, y los efectos estabilizadores de la difusión y viscosidad. El número de Rayleigh tiene un valor crítico  $R_c$ ,

cuando al aumentar el valor de  $R$  (aumentando el gradiente de temperatura) se supera este valor crítico, se establece la convección, el fluido más caliente tiende a subir y el más frío tiende a bajar, pero no lo pueden hacer por el mismo sitio, esto hace que el fluido se divida en celdas convectivas. Rayleigh mostró que el flujo convectivo empieza con un número de onda  $q_c$  cuando  $R$  excede el valor  $R_c$ , el cual depende de las condiciones de frontera. La idea que la flotación es la causante de la convección se mantuvo por varios años, hasta que algunos autores estudiaron los efectos de los gradientes de tensión superficial (Pearson, 1958 [12]), en donde el parámetro relevante es el número de Marangoni  $M \equiv \sigma_T \Delta T d / \rho \nu \kappa$  (aquí  $\sigma_T$  es el coeficiente de temperatura de la tensión superficial). El número de Marangoni es una medida de las intensidades relativas del efecto desestabilizador de la termocapilaridad (inducida por el gradiente de temperatura), y el efecto estabilizador de la difusión (y viscosidad).

En capas de fluidos abiertas al aire, los mecanismos de tensión superficial y flotación pueden operar simultáneamente y producir flujos convectivos conjuntamente [8]. Para estimar cuál efecto es dominante uno puede fijarse en la razón entre el número de Marangoni y el número de Rayleigh  $\Gamma \equiv M/R = \sigma_T / \alpha g \rho d^2$ . Como  $\Gamma$  no depende de  $\Delta T$  es una cantidad fija durante un experimento. Resulta ser que  $\Gamma > 1$  es una condición necesaria pero no suficiente para que la termocapilaridad sea el efecto dominante sobre la flotación [7]. En gravedad terrestre, los flujos convectivos inducidos por termocapilaridad son dominantes en capas de fluidos muy delgadas, de otra manera, la flotación juega un papel significativo. En condiciones de microgravedad, la termocapilaridad es el mecanismo dominante que produce movimiento convectivo.

## 1.1. Inestabilidades hexagonal y deformacional.

La tensión superficial puede causar dos inestabilidades completamente diferentes: la inestabilidad hexagonal y la inestabilidad deformacional de onda

larga. En una de ellas, hay una transición desde el estado conductivo hacia celdas convectivas hexagonales, con un número de onda finito  $q = 2\pi d/\lambda$  donde  $\lambda$  es la longitud de onda característica de las celdas y  $d$  la profundidad media del fluido. Esta inestabilidad surge de las fluctuaciones de temperatura sobre la superficie libre. Como resultado de estas fluctuaciones, el fluido que está en regiones calientes de la superficie  $\mathcal{S}$  es arrastrado a regiones mas frías donde la superficie tiende a contraerse debido a una tensión superficial mas grande ( $d\sigma/dT < 0$ ). El fluido del interior del contenedor sube a la superficie para reemplazar al fluido que ha sido arrastrado a otro lugar sobre la superficie. Como el fluido que viene de abajo de la superficie es aún mas caliente que en esas regiones calientes de  $\mathcal{S}$ , la perturbación original de la temperatura se amplifica. Para gradientes de temperatura suficientemente grandes, la difusividad térmica no puede estabilizar al sistema y el movimiento se mantendrá. Nótese que no hay ninguna referencia a la gravedad, así que el mecanismo es independiente de la gravedad. Schatz y colaboradores realizaron experimentos con  $\Gamma = 40$  cuando la termocapilaridad es dominante usando capas de fluido de 0.419 mm de espesor, y encontraron una transición del estado conductivo al hexagonal en  $M_c = 84$  con buena concordancia con la teoría de estabilidad lineal [15].

En el segundo tipo de inestabilidad causada por tensión superficial, hay una transición del estado conductivo a la ruptura de la capa de fluido. La capa se rompe hacia “arriba” o hacia “abajo”, es decir, formando ya sea una depresión localizada (un agujero) o una elevación localizada (un pico). La inestabilidad deformacional de longitud de onda larga, surge de las fluctuaciones de la altura  $h(x, y)$  de la interfase líquido-gas  $\mathcal{S}$ , la cual induce variaciones en la temperatura de la superficie libre que a su vez genera gradientes de tensión superficial que amplifican las fluctuaciones. Para un gradiente de temperatura suficientemente grande la gravedad no puede estabilizar esta perturbación deformacional por lo que la interfase tiende a romperse. Esta es la inestabilidad que revisaremos en este trabajo. Los valores de  $\Gamma$  en [19] están en un rango de  $10^2$  y  $10^3$  así que  $R \ll R_c$ .

Parámetros	Simbolo
Tensión Superficial	$\sigma$
Coefficiente de Tensión Superficial( $-d\sigma/dT$ )	$\sigma_T$
Densidad del líquido	$\rho$
Difusividad Térmica del líquido	$\kappa$
Viscosidad Cinemática del líquido	$\nu$
Coefficiente de expansión térmica del líquido	$\alpha$
Conductividad Térmica del líquido	$k$
Conductividad Térmica del gas	$k_g$
profundidad media del liquido	$d$
profundidad media del gas	$d$

Tabla 1.1: Notación usada para las cantidades físicas que intervienen en la convección de ruptura inducida por tensión superficial.

## 1.2. Mecanismos y Escalas de Tiempo.

En un experimento de convección de Bénard existen tres mecanismos (termocapilaridad, gravedad y difusividad) los cuales son estabilizadores (la gravedad y la difusividad) y desestabilizadores (la termocapilaridad). Como se mencionó anteriormente, los mecanismos estabilizadores compiten con los efectos desestabilizadores debido a los diferentes tipos de fluctuaciones. El mecanismo de estabilización es diferente para cada una de las inestabilidades hexagonal y longitud de onda larga.

Debido a estos tres mecanismos, consecuentemente, existen tres escalas de tiempo asociadas con ellos, el tiempo termocapilar  $t_{termocap}^2 = \frac{\rho d^3}{\sigma_T \Delta T}$ , el gravitacional  $t_{grav}^2 = \frac{d}{g}$  y el difusivo  $t_{dif}^2 = \frac{d^4}{\nu \kappa}$ . La razón entre las escalas de tiempo difusivo y gravitacional se conoce como el número de Galileo

$$G \equiv \frac{t_{dif}^2}{t_{grav}^2} = \frac{gd^3}{\nu\kappa}, \quad (1.1)$$

que es una medida relativa de la intensidad de los dos mecanismos estabilizadores. El mecanismo estabilizador con la escala de tiempo más grande es el que determina el criterio del tipo de convección como se describe a continuación. Cuando  $G$  es grande,  $t_{grav}$  es pequeño, es decir, y la gravedad actúa rápidamente para estabilizar la inestabilidad deformacional manteniendo la interfase plana estabilizada. Por tanto, la convección hexagonal se vuelven la inestabilidad primaria. El parámetro relevante para determinar estabilidad en este caso es el número de Marangoni

$$M \equiv \frac{t_{dif}^2}{t_{termocap}^2} = \frac{\sigma_T \Delta T d}{\rho \nu \kappa}. \quad (1.2)$$

Cuando  $M$  es suficientemente grande, la termocapilaridad es suficientemente fuerte para derrotar la difusión iniciando así la convección hexagonal.

Por otro lado, cuando  $G$  es pequeño, la escala de tiempo difusiva  $t_{dif}$  es pequeña, así que las perturbaciones en la temperatura son rápidamente suprimidas, y la gravedad actúa relativamente lenta para estabilizar las inestabilidades deformacionales que se convierten en las primarias y conducen a la ruptura de la capa de fluido. En este caso, el parámetro relevante que determina el inicio de la inestabilidad es el así llamado número de Bond Dinámico Inverso

$$D \equiv \frac{t_{grav}^2}{t_{termocap}^2} = \frac{M}{G} = \frac{\sigma_T \Delta T}{\rho g d^2}. \quad (1.3)$$

Cuando  $D$  es suficientemente grande, el efecto de termocapilaridad es más fuerte que el efecto de la gravedad y por lo tanto la derrota, lo que ocasiona que el sistema se vuelva inestable para deformaciones de la interfase.

En la figura 4.2 se tiene el diagrama de estabilidad en el espacio de parámetros  $M - G$  con los límites entre el estado conductivo y las inestabilidades

hexagonal y deformacional. En el capítulo siguiente, exponemos el modelo desarrollado por Swift y Van Hook para el estudio de la inestabilidad de ruptura.

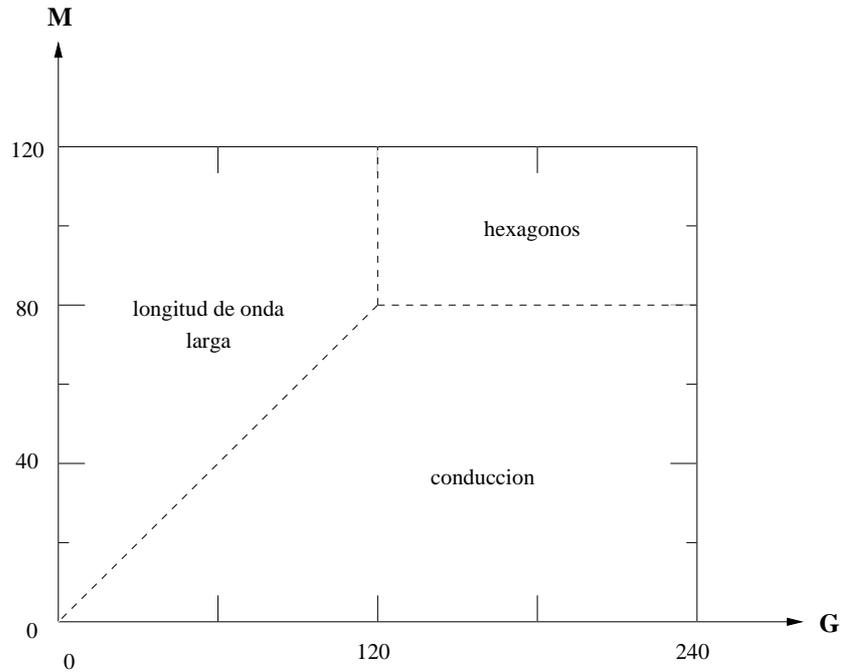


Figura 1.2: Diagrama de inestabilidades que muestra las regiones donde las inestabilidades deformacional y hexagonal surgen en el espacio  $M - G$ .

### 1.3. Análisis de estabilidad lineal

Para terminar este capítulo, haremos una exposición general y muy breve de la teoría de estabilidad lineal. La dinámica de un sistema ya sea físico, biológico, químico, económico, etc., generalmente se modela a través de un sistema de ecuaciones diferenciales que pueden surgir de leyes más fundamentales ó modelos empíricos. En mecánica de fluidos, la dinámica es gobernada por las ecuaciones de Navier-Stokes, o modelos derivados de ellas, para un

sistema mecánico, la dinámica será gobernada por las ecuaciones de Newton, Lagrange ó Hamilton, y así sucesivamente. El propósito de la teoría de estabilidad lineal, es estudiar bajo que condiciones un estado de un sistema (en nuestro caso, por ejemplo, el estado conductivo) es inestable ante pequeñas perturbaciones, es decir, las circunstancias bajo las cuales un estado del sistema sufrirá una transición a otro estado de movimiento. En cualquier sistema físico es inevitable la presencia de perturbaciones, aun cuando se tengan experimentos cuidadosamente controlados, éstas estarán presentes. Entonces la pregunta es si estas perturbaciones crecerán llevando al sistema a otro estado, en cuyo caso se dice que el sistema es inestable, ó si estas perturbaciones no crecerán y eventualmente se anularán, permaneciendo el sistema de este modo, en el mismo estado, en cuyo caso el sistema se dice que es estable.

Para tener una idea más clara al respecto, exponremos la idea central de la teoría de estabilidad lineal como aparecen en los libros de texto de dinámica no lineal y caos [16]. Dicho análisis se hace alrededor de los puntos fijos del sistema, en nuestro caso, el “punto” fijo sería el estado conductivo. En los textos, generalmente se realiza el análisis a ecuaciones de la forma  $\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$ , esto no debe extrañarnos pues siempre es posible escribir ecuaciones de orden superior en esta forma. Y es con este tipo de sistemas que hacemos aquí el análisis. Iniciamos con el caso 1-dimensional

$$\dot{x} = f(x), \tag{1.4}$$

donde  $f$  es una función de una sola variable real bien comportada (continua y su primera derivada también continua). Decimos que  $\tilde{x}$  es un punto fijo si  $f(\tilde{x}) = 0$ . Una vez localizados los puntos fijos, uno puede colocarse “cerca” de uno de ellos (en el punto  $x(t)$ ) y preguntarse por la evolución de  $x(t)$ . Este punto  $x(t)$  puede alejarse, acercarse, o mantenerse moviendo alrededor del punto fijo  $\tilde{x}$ . La clasificación de los puntos fijos se da en base a estos comportamientos de un punto “cercano”  $x(t)$ . Iniciemos analizando la estabilidad de un punto fijo  $\tilde{x}$  de la ecuación diferencial (1.4) considerando una perturbación alrededor del punto fijo  $\tilde{x}$ , que llamaremos  $\eta$ , la cual expresaremos como

$$\eta(t) = x(t) - \tilde{x}$$

así que  $x(t) = \eta(t) + \tilde{x}$  es un punto alejado de  $\tilde{x}$  por una "distancia"  $\eta$ , que consideraremos pequeña. Una pregunta natural es cómo evoluciona  $\eta(t)$  en el tiempo (o equivalentemente, cómo evoluciona un punto "cercano"  $x(t)$ ). Deseamos entonces obtener una ecuación para  $\eta$ , que será

$$\begin{aligned} \dot{\eta} &= \frac{d\eta}{dt} = \frac{d}{dt} [x(t) - \tilde{x}] = \frac{dx}{dt} \\ &= \dot{x}(t) = f(x) = f(\eta + \tilde{x}) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Hagamos una linealización de  $\dot{\eta}$  (es decir, despreciaremos los términos de orden iguales y superiores a  $\eta^2$ ) por medio de la expansión en serie de Taylor de  $f(\eta + \tilde{x})$

$$\dot{\eta} = f(\tilde{x}) + \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)_{\tilde{x}} (x - \tilde{x}) + \vartheta[(x - \tilde{x})^2]. \quad (1.6)$$

Si consideramos que  $\eta \ll 1$  podremos despreciar los términos de orden 2 y mayores, así la ecuación (1.6) nos queda

$$\dot{\eta} = f'(\tilde{x})\eta.$$

Resolviendo esta ecuación diferencial tendremos que  $\eta = \eta_0 e^{f'(\tilde{x})t}$ , donde  $\eta_0$ , la perturbación inicial, es una constante. Podemos ahora observar que su solución está determinada por el signo que tome  $f'(\tilde{x})$  entonces: si  $f'(\tilde{x}) > 0$ ,  $\eta$  crece, decimos que  $\tilde{x}$  es un punto inestable. Si  $f'(\tilde{x}) < 0$ ,  $\eta$  decrece, decimos que  $\tilde{x}$  es punto estable. Notamos que la estabilidad de un punto fijo, en el caso 1-dimensional, depende del signo de la primera derivada de la función  $f$  en el punto fijo bajo consideración. Para el caso de  $n$  variables, la derivada de la función ya no es simplemente un número, y necesitaremos otro criterio. A continuación analizamos el caso  $n$ -dimensional. Consideremos al sistema

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{f}(\vec{x}) \quad (1.7)$$

donde  $f : R^n \rightarrow R^n$ , es una función de clase  $C^1$ . En componentes (1.7) se ve como

$$\dot{\vec{x}} = \frac{d\vec{x}}{dt} = \begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \vdots \\ \dot{x}_n \end{pmatrix} = \vec{f}(\vec{x}(t)) = \begin{pmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{pmatrix},$$

decimos que  $\tilde{x}$  es un punto fijo si  $\vec{f}(\tilde{x}) = 0$ . Si consideramos un punto  $\vec{x}(t)$  cercano a  $\tilde{x}$ , éste lo escribiremos como

$$\vec{x}(t) = \tilde{x} + \vec{\eta} \quad (1.8)$$

Las componentes de cada vector son

$$\vec{x} = (x_1 x_2 \dots x_n), \quad \tilde{x} = (\tilde{x}_1 \tilde{x}_2 \dots \tilde{x}_n), \quad \vec{\eta} = (\eta_1 \eta_2 \dots \eta_n).$$

Ahora analicemos como cambia  $\vec{\eta}$  con respecto al tiempo. Derivando la ecuación (1.8) tenemos

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{d\tilde{x}}{dt} + \frac{d\vec{\eta}}{dt} = \frac{d\vec{\eta}}{dt}.$$

Desarrollando en serie de Taylor la  $i$ -ésima componente de  $\vec{f}(\vec{x})$  uno llega a

$$\dot{\eta}_i = f_i(\tilde{x}) + \frac{1}{j!} \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(\tilde{x})}{\partial x_j} \eta_j + \vartheta(\eta^2), \quad (1.9)$$

donde  $i = 1, 2, 3, \dots, n$ . Si consideramos que  $\eta \ll 1$  despreciaremos los términos de orden 2 en  $\eta$ , conservando sólo los términos lineales. De esta manera encontramos que la ecuación para  $\vec{\eta}(t)$  es

$$\dot{\eta}_i = \sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)_{\tilde{x}} \eta_j. \quad (1.10)$$

La matriz Jacobiana

$$\left( \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)_{\tilde{x}} = J, \quad (1.11)$$

se evalúa en el punto fijo  $\tilde{x}$ . La ecuación (1.10) escrita en forma matricial es

$$\dot{\vec{\eta}} = J\vec{\eta},$$

con la experiencia en el caso 1-dimensional, proponemos una solución de la forma

$$\vec{\eta} = \vec{\eta}_0 e^{\lambda t} \quad (1.12)$$

Este resultado nos conduce a un problema de valores propios:  $J\vec{\eta}_0 = \lambda\vec{\eta}_0$ . Los valores propios determinarán el carácter de un punto fijo.

Un ejemplo de linearización alrededor del punto fijo  $\vec{0}$ , lo veremos con el sistema

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f_1(x, y) = \mu x - y + xy^2 \\ \dot{y} &= f_2(x, y) = x + \mu y + y^3 \end{aligned} \quad (1.13)$$

La matriz Jacobiana es,

$$J = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} \\ f_{21} & f_{22} \end{pmatrix}_{\vec{0}} = \begin{pmatrix} \mu & -1 \\ 1 & \mu \end{pmatrix}$$

Donde  $f_{ij} = \partial f_i / \partial x_j$  y  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ . Como puede verse inmediatamente, la ecuación linealizada  $\dot{\vec{x}} = J\vec{x}$  es

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f_1(x, y) = \mu x - y \\ \dot{y} &= f_2(x, y) = x + \mu y \end{aligned}$$

que equivale a simplemente despreciar los términos no-lineales en (1.13). De esta última ecuación uno puede determinar los valores propios y vectores propios y determinar el tipo de punto fijo que se tiene. Una clasificación completa para el caso 2-dimensional se encuentra en [16]. Ya no la haremos aquí, el propósito de esta primera sección era dar nociones generales de la teoría de estabilidad lineal.

## Capítulo 2

# Modelo de Swift-Van Hook

Swift y Van Hook [19] derivaron una ecuación de evolución de la altura  $h(x, t)$  de la interfase liquido-gas a partir de las ecuaciones de conducción de calor, de Navier-Stokes, de continuidad, las condiciones de frontera de la velocidad y temperatura en la base del contenedor, la condición cinemática en la superficie de la interfase, las condiciones de frontera en la interfase del esfuerzo normal y tangencial, y la condición de frontera de la temperatura en la parte superior de contenedor. Su modelo toma en cuenta el efecto de la deformación sobre el perfil de la temperatura en la superficie  $\mathcal{S}$ . En el estado conductivo, cuando la superficie  $\mathcal{S}$  no se ha deformado, la diferencia uniforme de temperatura a lo largo de la capa de fluido  $\Delta T$  puede calcularse a partir de la temperatura en  $T_s$  y  $T_b$ . En efecto, de la conservación del flujo de calor en la interfase, se tiene

$$k \frac{(\Delta T)}{d} = k_g \frac{(\Delta T)_{gas}}{d_g} = k_g \frac{T_b - T_t - \Delta T}{d_g},$$

despejando  $\Delta T$  se tiene que

$$\Delta T = \frac{T_b - T_t}{1 + \frac{kd_g}{k_g d}}, \quad (2.1)$$

donde  $T_t$  y  $T_b$  son las temperaturas correspondientes a la parte inferior y parte superior respectivamente de nuestro sistema (ver figura 1). Se usa  $\Delta T$  dado por (2.1), como la diferencia de temperatura característica a través de la capa de fluido; además tomamos como la temperatura local de la interfase  $\mathcal{S}$  la dada por (2.1) con  $d \rightarrow h(x, y, t)$  y  $d_g/d \rightarrow [d_g/d - (h(x, y, t) - 1)]$ , o bien

$$T(x, y, z = h) = T_b - \frac{T_b - T_t}{1 + \frac{(d_g/d - h(x, y, t) + 1)k}{h(x, y, t)k_g}} = T_b - \frac{\Delta T h}{1 + F - Fh} \quad (2.2)$$

donde  $h(x, y, t)$  es adimensionaliza con  $d$ , y  $F$  está dado por

$$F = \frac{\frac{d}{d_g} - \frac{k_g d}{k d_g}}{1 + \frac{k_g d}{k d_g}}. \quad (2.3)$$

Como mencionamos anteriormente, el punto de partida para la deducción del modelo de Swift-Van Hook lo constituyen las ecuaciones de conducción de calor, de Navier-Stokes, de continuidad, las condiciones de frontera de la velocidad y temperatura en la base del contenedor, la condición cinemática en la superficie de la interfase, las condiciones de frontera en la interfase del esfuerzo normal y tangencial, y la condición de frontera de la temperatura en la parte superior del contenedor, a saber

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})T = \nabla^2 T \quad (2.4)$$

$$\frac{1}{Pr} \left[ \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} \right] = -\vec{\nabla}P + \nabla^2 \vec{u} - G\hat{z} \quad (2.5)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.6)$$

$$T = \vec{u} = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (2.7)$$

$$w = \frac{\partial h}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} h \quad \text{en } z = h \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial S}{\partial x_{t_i}} = \left( \frac{\partial u_n}{\partial x_{t_i}} + \frac{\partial u_{t_i}}{\partial x_n} \right) \quad (i = 1, 2) \quad \text{en } z = h \quad (2.9)$$

$$P - S \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = 2 \left( \frac{\partial u_n}{\partial x_n} \right) \quad \text{en } z = h \quad (2.10)$$

$$T = -\frac{1 + H}{H} \quad \text{en } z = 1 + \frac{d_g}{d} \quad (2.11)$$

en estas ecuaciones se ha escrito a la velocidad en componentes, siendo  $\vec{u}_\perp$  la componente horizontal y  $w$  la componente vertical, a demás

$$\vec{\nabla}_\perp \equiv \hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y} \quad (2.12)$$

notemos que como  $h(x, y)$  no depende de  $z$ , entonces  $\vec{\nabla} h = \vec{\nabla}_\perp h$ ,  $R_1$  y  $R_2$  son los radios de curvatura de la interface.

En las ecuaciones anteriores las variables que aparecen son adimensionalizadas de la siguiente manera: las longitudes son adimensionalizadas por  $d$ , el tiempo por  $d^2/\kappa$ , las velocidades por  $\kappa/d$ , la presión por  $\rho\nu\kappa/d^2$ , las temperaturas por  $\Delta T$ , la tensión superficial por  $\rho\nu\kappa/d$ , la aceleración gravitacional adimensional es el número de Galileo  $G$  y la altura de la interfase  $h(x, y)$  es adimensionalizada por la profundidad media del líquido  $d$ . Así, para el caso del estado no deformado  $h(x, y) = 1$ . En ausencia de deformación de la interface, la tensión superficial adimensional es  $S \equiv \sigma d/\rho\nu\kappa$ .

Se asume que la extensión horizontal  $L$  de la celda experimental es mucho más grande que  $d$  y  $d_g$  y en efecto este es el caso en los experimentos de Van Hook, ya que  $d_g$  es típicamente dos veces  $d$  y  $L/d > 100$ , esto implica que el número de onda fundamental  $q = 2\pi d/L$  es pequeño ( $0 < q \ll 1$ , o  $d \ll L$ ) y podría ser usado como un parámetro de pequeñez en una expansión de las ecuaciones. En base a esto se adoptan las siguientes escalas: todas las

derivadas temporales y espaciales en la dirección horizontal se consideran de  $O(q)$ ; mientras que las derivadas en la dirección vertical son de  $O(1)$ ,  $\vec{u}_\perp$  que es la componente horizontal de la velocidad es de  $O(1)$ ,  $w$  que es la componente vertical de la velocidad es de  $O(q)$ , la presión  $P$  es de  $O(q^{-1})$ , la tensión superficial adimensionalizada  $S$  es de  $O(q^{-3})$ ,  $\partial S/\partial T$  es de  $O(q^{-1})$ , la aceleración gravitacional adimensionalizada  $G$  es de  $O(q^{-1})$  y  $Pr > 1$ . Estos ordenes de escala son necesarios para que los tres efectos importantes (termocapilaridad, gravedad y tensión superficial) aparezcan en un orden más bajo. Al orden más bajo, las ecuaciones anteriores nos quedan de la siguiente manera:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{u}_\perp}{\partial z^2} = \vec{\nabla}_\perp P \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} + G = 0 \quad (2.15)$$

$$\vec{\nabla}_\perp \cdot \vec{u}_\perp + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.16)$$

$$T = \vec{u}_\perp = w = 0 \quad \text{en } z = 0 \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = w(h) - \vec{u}_\perp(h) \cdot \vec{\nabla} h \quad (2.18)$$

$$\vec{\nabla} h \cdot \vec{\nabla} S - \vec{\nabla} h \cdot \frac{\partial \vec{u}_\perp}{\partial z} = 0 \quad \text{en } z = h \quad (2.19)$$

$$\left[ \vec{\nabla} h \times \vec{\nabla}_\perp S - \vec{\nabla} h \times \frac{\partial \vec{u}_\perp}{\partial z} \right] \cdot \hat{z} = 0 \quad \text{en } z = h \quad (2.20)$$

$$P + S\nabla^2 h = 0 \quad \text{en } z = h \quad (2.21)$$

$$T = \frac{-h}{1 + F - Fh} \quad \text{en } z = h \quad (2.22)$$

Después de tomar en cuenta los ordenes de escala, con las ecuaciones resultantes del escalamiento, vamos a obtener paso a paso la ecuación no lineal de evolución para la altura  $h(x, y)$  de la interfase. De las ecuaciones (2.15) y (2.21) tenemos que

$$P(\vec{x}, t) = -S\nabla^2 h + G(h - z) \quad (2.23)$$

de la ecuación (2.14), tenemos que

$$\frac{\partial^2 \vec{u}_\perp}{\partial z^2} = -S\vec{\nabla}\nabla^2 h + G\vec{\nabla}h \quad (2.24)$$

integrando dos veces con respecto a  $z$  la ecuación (2.24) y aplicando la ecuación (2.17), tenemos que

$$\vec{u}_\perp = \left(-S\vec{\nabla}\nabla^2 h + G\vec{\nabla}h\right) \frac{z^2}{2} + \vec{a}(\vec{x}_\perp, t)z \quad (2.25)$$

para obtener la constante  $\vec{a}$  usamos la ecuación (2.19) y obtenemos que

$$\vec{u}_\perp = \left(-S\vec{\nabla}\nabla^2 h + G\vec{\nabla}h\right) \frac{z^2}{2} + z \left(S h \vec{\nabla}\nabla^2 h - G h \vec{\nabla}h + \vec{\nabla}_\perp S\right) \quad (2.26)$$

esta última ecuación satisface automáticamente la condición a la frontera dada por la ecuación (2.20). Usando las ecuaciones (2.16) y (2.17) para la componente vertical de la velocidad se tiene que

$$\begin{aligned} w &= \left(S\nabla^2\nabla^2 h - G\nabla^2 h\right) \frac{z^3}{6} \\ &- \frac{z^2}{2} \left[S\vec{\nabla} \cdot (h\vec{\nabla}\nabla^2 h) - G\vec{\nabla} \cdot (h\vec{\nabla}h) + \nabla_\perp^2 S\right] \end{aligned} \quad (2.27)$$

ahora, para obtener  $\partial h/\partial t$  usamos la ecuación (2.18) para  $T(x, y, z = h)$  y se tiene que

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left[ -\frac{DGh^2}{2} \vec{\nabla} T - \frac{Gh^3}{3} \vec{\nabla} h + \frac{h^3}{3Cr} \nabla^2 \vec{\nabla} h \right] = 0 \quad (2.28)$$

en esta última ecuación insertamos la ecuación (2.22) y multiplicando por  $3/G$  tenemos que

$$\frac{3}{G} \frac{\partial h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{3D}{2} \frac{(1+F)h^2 \vec{\nabla} h}{(1+F-Fh)^2} - h^3 \vec{\nabla} h + \frac{h^3}{GCr} \nabla^2 \vec{\nabla} h \right] = 0 \quad (2.29)$$

Con el fin de tener números enteros para el número de onda  $q$  rescalamos el dominio de  $x$  y de  $y$  en el intervalo de  $[0, 2\pi)$ , y rescalamos el tiempo por el factor  $G(L/2\pi d)^2/3$  a  $G(L/2\pi)^2/3\kappa$ , después de tomar en cuenta estos escalamientos tenemos que la ecuación de evolución dos dimensional para la altura  $h(x, y)$  del líquido es

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{3D}{2} \frac{(1+F)h^2 \vec{\nabla} h}{(1+F-Fh)^2} - h^3 \vec{\nabla} h + \frac{h^3}{B} \nabla^2 \vec{\nabla} h \right] &= 0 \quad (2.30) \\ \equiv \frac{\partial h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{J}(x, y, t) &= 0 \end{aligned}$$

donde  $D$  es el número de Bond dinámico inverso,  $F$  es el número de Biot dos-capas el cual describe el transporte de calor en la interfase (cuando  $F < 1/2$  se forman depresiones localizadas o agujeros y cuando  $F > 1/2$  se forman elevaciones localizadas o picos) y  $B$  es el número de Bond estático  $B \equiv \rho g(L/2\pi)^2/\sigma > 0$ . En la ecuación (2.30) aparecen los tres mecanismos que están presentes en la convección: termocapilaridad, gravedad y la tensión superficial y están representados respectivamente por cada uno de los tres términos no lineales dentro de los corchetes. Como el sistema líquido-gas está delimitado por dos placas, siempre se mantiene la restricción  $0 \leq h(x, y) \leq$

$(d + d_g)/d$ . Cabe mencionar que en los experimentos de Van Hook, uno de los valores más usado de  $B$  es  $B = 18$ .

Para condiciones de frontera periódicas la ecuación (2.30) satisface la ecuación de conservación del líquido

$$\int_0^{2\pi} (h(x) - 1)dx = 0, \quad (2.31)$$

la condición inicial  $h(x, t = 0)$  también satisfaga esta ecuación de continuidad.

## 2.1. Análisis lineal de la ecuación de evolución.

Vamos a asumir que la interfase es plana en su estado de conducción, de modo que  $h = 1$ , y le añadimos una pequeña perturbación  $\eta(x, t)$ , de modo que  $h = 1 + \eta$ , que sustituimos en la ecuación (2.30), si despreciamos los terminos de orden  $\eta^2$  y mayores, se llega a la ecuación linealizada

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \epsilon \nabla^2 \eta + \frac{1}{B} \nabla^2 \nabla^2 \eta = 0, \quad (2.32)$$

donde

$$\epsilon = \frac{3D(1 + F)}{2} - 1. \quad (2.33)$$

Si ahora asumimos una solución periódica

$$\eta(x, y, t) = \eta_{q_1, q_2} e^{\gamma_q t} e^{i(q_1 x + q_2 y)} \quad (2.34)$$

sustituyéndola en la ecuación linealizada obtenemos que la razón de crecimiento del modo  $q$ -ésimo (donde  $q^2 = q_1^2 + q_2^2$ ) es

$$\gamma_q = q^2 \left( \epsilon - \frac{q^2}{B} \right) \equiv q^2 \epsilon_q \quad (2.35)$$

el parámetro de control para un modo de número de onda finito  $q$  está representado por  $\epsilon_q$ . Cuando  $\gamma_q > 0$  el sistema es inestable, de lo contrario es estable.  $\gamma_q > 0$  si y solo si  $\epsilon - q^2/B$  es positivo. Para el primer modo ( $q = 1$ ) y el valor experimental  $B = 18$  la estabilidad marginal se tiene en  $D(1 + F) = 0.7037$ .

El análisis de estabilidad lineal de la ecuación de evolución solamente da el criterio del umbral de la inestabilidad con las ecuaciones linealizadas, es decir, con perturbaciones muy pequeñas. Para determinar cómo se desarrolla el sistema una vez que se hace inestable debe resolverse la ecuación de evolución no lineal. Para ello utilizamos métodos espectrales con la base de Chebyshev. En el siguiente capítulo hacemos una descripción general de estos métodos.

# Capítulo 3

## Base de Fourier y Chebyshev

### 3.1. Introducción

Muchas de las ecuaciones diferenciales parciales asociadas a teorías físicas son en general, imposibles de resolver analíticamente. La dificultad de resolver estas ecuaciones diferenciales parciales puede deberse a la presencia de fronteras irregulares o a la existencia de términos no lineales en las ecuaciones mismas, en estos casos es necesario recurrir a los métodos numéricos. Existen distintas formas de resolver ecuaciones diferenciales de forma numérica, las más populares son tres: Método de Diferencias Finitas, Método de Elementos Finitos y Métodos espectrales. Aunque en los últimos años se ha estado utilizando también con mucho éxito el método hidrodinámico de partículas suaves (SPH por sus siglas en inglés). Aquí vamos a utilizar Métodos Espectrales, éstos han probado ser una herramienta muy útil para simulaciones a gran escala en dinámica de fluidos y tienen aplicaciones en turbulencia, modelaje global del comportamiento climático y en la dinámica de los océanos, por mencionar sólo algunas de sus aplicaciones.

Los métodos espectrales se usan para encontrar soluciones numéricas a ecuaciones de la forma

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \mathcal{O}(x, t)u(x, t) \quad x \in \mathcal{D}, \quad (3.1)$$

$$B(x)u(x, t) = 0 \quad x \in \partial\mathcal{D}, \quad (3.2)$$

$$u(x, 0) = g(x) \quad x \in \mathcal{D}, \quad (3.3)$$

donde  $\mathcal{D}$  es el dominio espacial del sistema y  $\partial\mathcal{D}$  es su frontera,  $\mathcal{O}(x, t)$  es un operador diferencial que actúa sobre  $u$ ,  $B$  representa las condiciones de frontera y  $g(x)$  la condición inicial. La idea básica en los ME es buscar soluciones aproximadas al problema (3.1) - (3.3) como una serie truncada de una base de funciones  $\{\Phi_n(x)\}$  ortogonales suaves, esto es, la solución aproximada se propone de la forma

$$u_N(x, t) = \sum_{n=0}^N a_n(t)\Phi_n(x). \quad (3.4)$$

Así que aquí, las incógnitas son los coeficientes  $a_n$ . Una vez obtenidos los coeficientes la solución estará completa y no se tendrá ninguna discretización espacial, es decir, la solución se tendría en todo el dominio espacial. Esta característica contrasta con el método de diferencias finitas, donde la solución se da sólo en los puntos de la malla.

La elección del conjunto de funciones ortogonales que se van a utilizar para encontrar la solución aproximada, depende de las condiciones de frontera del sistema. Para condiciones de frontera periódicas se elige ordinariamente, la base de Fourier  $\Phi_n(x) = e^{ikx}$ . Para condiciones de frontera no periódicas, se utilizan polinomios ortogonales, por ejemplo los polinomios de Chebyshev, de Legendre, de Hermite, etcetera. Cuando hay simetría par o impar se usan las funciones coseno o seno respectivamente. Pero en generales, los polinomios de Chebyshev son la mejor opción, ya que estos se adaptan bien a condiciones de frontera arbitrarios y tienen a su disposición las Transformadas de Fourier Rápidas, pues estos polinomios son una serie de Fourier disfrazada.

La forma en que se encuentran los coeficientes  $a_n$  da lugar a los diferentes métodos espectrales, los más conocidos son: el método de Galerkin, el método Tau y el método de Colocación. Cómo usaremos la base de Chebyshev y ésta es una serie disfrazada de Fourier, en la siguiente sección daremos algunos elementos de estas bases.

## 3.2. Base de Fourier

La serie de Fourier de una función  $u(x)$  tiene la forma

$$u(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nx) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{sen}(nx), \quad (3.5)$$

donde los coeficientes estan dados por:

$$a_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} u(x) dx,$$

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} u(x) \cos(nx) dx,$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} u(x) \operatorname{sen}(nx) dx.$$

La serie de Furier se puede escribir en forma compleja como sigue

$$u(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{u}_n e^{inx} \quad (3.6)$$

donde los coeficientes  $\hat{u}_n$  se calculan con

$$\hat{u}_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} u(x) e^{-inx} dx \quad (3.7)$$

los coeficientes  $\hat{u}_n$  de la serie de Fourier compleja están relacionados con los coeficientes  $a_0$ ,  $a_n$  y  $b_n$  de la siguiente manera

$$\hat{u}_n = \begin{cases} a_0 & , \quad n = 0 \\ (a_n - ib_n)/2 & , \quad n > 0 \\ (a_{-n} + ib_{-n})/2 & , \quad n < 0 \end{cases}$$

Desde el punto de vista de los métodos espectrales, la pregunta relevante es cuán bien la serie truncada de Fourier

$$P_N u(x) = u_N(x) = \sum_{|n| \leq N/2} \hat{u}_n \exp(inx) \quad (3.8)$$

se aproxima a la función  $u(x)$ . Para responder esta pregunta recordamos primero un teorema bien conocido de análisis de Fourier,

*Si  $\sum_{|n| < \infty} |\hat{u}_n|^2 < \infty$  entonces la serie truncada converge en la norma  $L^2$*

$$\|u - P_N u\|_{L^2[\mathcal{D}]} \rightarrow 0 \quad \text{cuando } N \rightarrow \infty \quad (3.9)$$

El hecho de que la serie truncada converja implica que el error es dominado por la “cola” de la serie, es decir, se tiene que el error de truncación es

$$\|u - P_N u\|_{L^2[\mathcal{D}]}^2 = 2\pi \sum_{|n| > N/2} |\hat{u}_n|^2 \quad (3.10)$$

De modo que el error cometido al reemplazar  $u(x)$  con la serie truncada de Fourier de  $N$ -ésimo orden depende solamente de qué tan rápido decaen los coeficientes de la expansión de  $u(x)$  y a su vez, esto depende de la *suavidad* de la función. Otro resultado bien conocido en los textos de análisis de Fourier es

Si una función  $u(x)$ , sus primeras  $(m - 1)$  derivadas y sus extensiones periódicas son continuas y si su  $m$ -ésima derivada  $u^{(m)}(x) \in L^2[0, 2\pi]$  entonces para toda  $n \neq 0$  los coeficientes de Fourier  $\hat{u}_n$  de  $u(x)$  decaen como  $|\hat{u}_n| \propto \left(\frac{1}{n}\right)^m$ .

$L^2[0, 2\pi]$  puede escribirse como  $L^2[-\pi, \pi]$  dependiendo de donde se haya definido la serie de Fourier. ¿Qué pasa si  $u(x) \in C^\infty[0, 2\pi]$ ? En ese caso  $\hat{u}_n$  decae más rápido que cualquier potencia negativa de  $n$ , esta propiedad se conoce como *convergencia espectral*. Se sigue que entre más suave sea la función más rápido converge la serie truncada.

### 3.2.1. Teorema de convolución

Para ecuaciones no lineales, a menudo es necesario conocer los coeficientes de la expansión de un producto de funciones cuyos coeficientes de sus expansiones respectivas ya se conocen, es decir dadas dos funciones  $f$  y  $g$  que pueden ser representadas en la base de Fourier  $\Phi_n(x) = e^{inx}$

$$f_N(x) = \sum_{|n| \leq N/2} \hat{f}_n \Phi_n(x) \quad y \quad g_N(x) = \sum_{|m| \leq N/2} \hat{g}_m \Phi_m(x), \quad (3.11)$$

entonces, para el producto  $P(x) = (fg)(x)$  tenemos que

$$P(x) = \sum_k p_k \Phi_k(x) = \sum_{|n| \leq N/2} \hat{f}_n \Phi_n(x) \sum_{|m| \leq N/2} \hat{g}_m \Phi_m(x) \quad (3.12)$$

Si multiplicamos por  $\Phi_l^*(x) = e^{-ilx}$  e integramos en el dominio de la función, debido a la ortogonalidad de la base de Fourier, los coeficientes  $p_k$  estarán dados por

$$p_k = \sum_{k=m+n} \hat{f}_n \hat{g}_m, \quad (3.13)$$

Este resultado constituye el teorema de convolución para la base de Fourier y puede llegar a ser útil; sin embargo, no son tan eficientes numericamente hablando, y son prácticamente imposibles de aplicar para no linealidades como

$$P(x) = \frac{1}{1 - u + u^2} \frac{du}{dx}, \quad (3.14)$$

donde dados los coeficientes de la expansión de  $u$  y de su derivada, el cálculo de los coeficientes de la expansión de  $P(x)$ , es decir los  $p_n$ , resulta prácticamente imposible con teoremas de convolución. Por otra parte, las series de Fourier de una función arbitraria  $u(x)$  requieren de la evaluación de los coeficientes

$$\hat{u}_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) e^{-inx} dx,$$

que en general no se conocen en forma cerrada y deben aproximarse. Estas dos inconveniencias se pueden superar con *las transformadas discretas* de Fourier, las cuales introducimos en la siguiente sección. No obstante, hay un precio a pagar: la introducción de los errores de aliasing, que también discutiremos.

### 3.2.2. Transformadas Discretas de Fourier

Las transformadas discretas de Fourier (TDF), se definen con base en una discretización del dominio espacial:  $\{x_j = 2\pi j/N\}$  con  $j = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ , su definición es

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-ikx_j} \quad k = -N/2, \dots, N/2 - 1 \quad (3.15)$$

que vendría a ser el análogo de los coeficientes de la serie de Fourier para una función  $u(x)$

$$\hat{u}_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) e^{-inx} dx \quad (3.16)$$

Se puede mostrar que la fórmula de inversión de (3.15) es

$$u(x_j) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \tilde{u}_k e^{ikx_j} \quad 0 \leq j \leq N-1. \quad (3.17)$$

donde estamos pensando que  $N$  es par. (3.17) sería el equivalente de

$$u(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \hat{u}_k e^{ikx} \quad (3.18)$$

La transformación (3.17) se conoce como la transformada inversa discreta de Fourier, y (3.15) la transformada directa discreta de Fourier. Como consecuencia de (3.17) se define el *polinomio interpolante trigonométrico* de orden  $N/2$  de  $u$  en los nodos  $x_j$  como

$$I_N u(x) = \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} \tilde{u}_n e^{inx}, \quad (3.19)$$

es decir, evaluando  $I_N$  en los nodos  $x_j$ , se tiene que  $I_N(x_j) = u(x_j)$  con  $j = 0, \dots, N-1$ . (3.19) también se conoce como *serie de Fourier discreta* de  $u$ .

Las TDF (3.15) y (3.17), pueden pensarse como un mapeo entre el conjunto de  $N$  cantidades complejas  $\{u(x_j)\}_{j=0, \dots, N-1}$  y el conjunto de  $N$  números complejos  $\{\tilde{u}_k\}_{k=-N/2, \dots, N/2-1}$ . Es decir, a cualquier función  $u(x)$  evaluada en la red  $x_j$  puede obtenerse sus coeficientes discretos  $\tilde{u}_k$  via (3.15) y también, dados los coeficientes discretos  $\tilde{u}_k$ , pueden encontrarse los valores de  $u$  en  $x_j$  via (3.17). Esto llega a ser muy útil por dos razones, la primera es que, como ya hemos mencionado, los coeficientes continuos  $\hat{u}_k$  no siempre pueden obtenerse en forma analítica cerrada y deben aproximarse, pero aún puede haber dificultades para su obtención numérica para algunas funciones.

La segunda razón tiene que ver con el manejo de no linealidades, que como hemos mencionado, para no linealidades tipo “producto”, puede realizarse con formulas de convolución, pero que puede llegar a ser más eficiente (y a veces la única forma) usando transformadas discretas de Fourier. regresando a la primera razón, la TDF (3.15) nos permite encontrar una aproximación (sencilla de calcular numericamente) a los coeficientes  $\hat{u}_k$  de la serie continua (3.18):

$$\tilde{u}_k \text{ puede considerarse una aproximación a } \hat{u}_k$$

La transformación discreta de Fourier (TDF) (3.15) y (3.17) requiere de  $\mathcal{O}(N^2)$  operaciones, pero se realiza eficientemente con el algoritmo de la *transformada de Fourier rápida* en  $5N \log_2(N)$  operaciones.

### 3.2.3. Error de Aliasing.

Los modos discretos de Fourier se basan en los puntos  $x_j = 2\pi j/N$  donde  $N$  es un número par, podemos observar que el  $(n+Nm)$ -ésimo modo es indistinguible del  $n$ -ésimo modo, pues

$$e^{i(n+Nm)x_j} = e^{inx_j} e^{i2\pi m j} = e^{inx_j} \quad (3.20)$$

a este fenómeno se le conoce como *aliasing*.

Si la serie de Fourier de  $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{u}_n e^{inx}$  converge a  $u(x)$  en cada nodo  $x_j$ , entonces (3.20) implica

$$\tilde{u}_k = \hat{u}_k + \sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq 0}}^{\infty} \hat{u}_{k+Nm} \quad k = -N/2, \dots, N/2 - 1 \quad (3.21)$$

En efecto, si la serie  $\sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{u}_k e^{ikx}$  converge a  $u(x)$  en cada nodo  $x_j$ , entonces

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_k &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-ikx_j} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \left( \sum_{k'=-\infty}^{\infty} \hat{u}_{k'} e^{ik'x_j} \right) e^{-ikx_j} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{k'=-\infty}^{\infty} \hat{u}_{k'} \left( \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(k'-k)x_j} \right) = \hat{u}_k + \sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq 0}}^{\infty} \hat{u}_{k+Nm}, \quad (3.22)
\end{aligned}$$

donde en el último paso se usó la propiedad de ortogonalidad discreta

$$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ipx_j} = \begin{cases} 1 & , \quad p = Nm \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ 0 & , \quad \text{otro caso} \end{cases}, \quad (3.23)$$

que es el análogo de la ortogonalidad del caso continuo

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ikx} e^{-ilx} dx = \delta_{kl}. \quad (3.24)$$

Una formulación equivalente de la ecuación (3.21) es  $I_N u = P_N u + R_N u$  donde

$$R_N u = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \left( \sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq 0}}^{\infty} \hat{u}_{k+Nm} \right) e^{ikx} \quad (3.25)$$

es el error de Aliasing, con  $k = -N/2, \dots, N/2 - 1$ .

Entonces, si expandemos una función  $u(x)$  en serie de Fourier, para ambos casos continuo y discreto, la diferencia entre los coeficientes  $\hat{u}_k$  y  $\tilde{u}_k$  es el error de aliasing. Este error disminuye drásticamente cuando  $N$  es suficientemente grande.

Pero en el caso de no linealidades, el error de Aliasing no disminuye al aumentar  $N$ , por el contrario el error aumenta como se describe a continuación. Consideremos dos funciones  $u(x)$  y  $v(x)$  que tienen expansión en serie de Fourier, entonces su producto  $u(x)v(x) = w(x)$  también tendrá una expansión en serie, tenemos que determinar quienes son los coeficientes de la

expansión del producto  $w(x)$  en términos de los coeficientes de la expansión de  $u(x)$  y de  $v(x)$

$$u(x) = \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} \hat{u}_m e^{imx} \quad , \quad v(x) = \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} \hat{v}_n e^{inx} \quad (3.26)$$

cuyos coeficientes respectivos son

$$\hat{u}_m = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) e^{-imx} dx \quad , \quad \hat{v}_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} v(x) e^{-inx} dx \quad (3.27)$$

la expansión en serie para el producto  $w(x) = (uv)(x)$  es  $w(x) = u(x)v(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \hat{w}_k e^{ikx}$ , como ya vimos, los coeficientes son

$$\hat{w}_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} w(x) e^{-ikx} dx \quad (3.28)$$

sustituyendo las expansiones de  $u$  y de  $v$  en la ecuación (3.28) y usando la ortogonalidad de la base de Fourier, tenemos el producto de convolución

$$\hat{w}_k = \sum_{\substack{m+n=k \\ |m|, |n| \leq N/2}} \hat{u}_m \hat{v}_n \quad (3.29)$$

Para el caso discreto tenemos que

$$u(x_j) = \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} \tilde{u}_m e^{imx_j} \quad , \quad v(x_j) = \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} \tilde{v}_n e^{inx_j} \quad (3.30)$$

cuyos coeficientes respectivos están dados por

$$\tilde{u}_m = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-imx_j} \quad , \quad \tilde{v}_n = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} v(x_j) e^{-inx_j} \quad (3.31)$$

La expansión en serie para el producto  $w(x) = (uv)(x)$  es

$$w(x_j) = u(x_j)v(x_j) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \tilde{w}_k e^{ikx_j} \quad (3.32)$$

donde

$$\tilde{w}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} w(x_j) e^{-ikx_j} \quad (3.33)$$

¿Cuál es la diferencia entre los coeficientes  $\hat{w}_k$  y  $\tilde{w}_k$ ? De la ecuación (3.33) tenemos que

$$\tilde{w}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} w(x_j) e^{-ikx_j} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j)v(x_j) e^{-ikx_j} \quad (3.34)$$

usando las expansiones continuas de  $u$  y  $v$  evaluadas en los puntos  $x_j$

$$\begin{aligned} \tilde{w}_k &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} \hat{u}_m e^{imx_j} \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} \hat{v}_n e^{inx_j} \right] e^{-ikx_j} \\ &= \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} \hat{u}_m \hat{v}_n \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(m+n-k)x_j}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

utilizando la propiedad (3.23)

$$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ipx_j} = \begin{cases} 1 & , \quad p = Nm \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ 0 & , \quad \text{otro caso} \end{cases} \quad (3.36)$$

tenemos que

$$\tilde{w}_k = \hat{w}_k + \sum_{m+n=k \pm N} \hat{u}_m \hat{v}_n. \quad (3.37)$$

Esto es para el caso de no linealidades cuadráticas. El segundo término de la ecuación (3.37) es el error de Aliasing. Este error aumenta si aumentamos

el valor de  $N$  en la transformada de Fourier Discreta. La manera de eliminar este error es usando  $M$  puntos en lugar de  $N$  en la transformada de Fourier Discreta, con la condición  $M \geq 3N/2$  y los puntos  $x_j$  ahora serán  $y_j = 2\pi j/M$  con  $j = 0, 1, 2, \dots, M-1$ , entonces la transformada de Fourier discreta para las funciones  $u(x)$  y  $v(x)$  serán

$$u(y_j) = \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} \tilde{u}_k e^{iky_j} \quad , \quad v(y_j) = \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} \tilde{v}_k e^{iky_j} \quad (3.38)$$

donde  $\tilde{u} = \hat{u}$  y  $\tilde{v} = \hat{v}$  para  $|k| \leq N/2$  y  $\tilde{u} = \tilde{v} = 0$  para  $|k| > N/2$ .

### 3.3. Base de Chebyshev

Los polinomios de Chebyshev del primer tipo  $T_n(x)$  con  $n = 0, 1, 2, \dots$  son las funciones propias de problema de Sturm-Liouville particular

$$\left( \sqrt{1-x^2} T_n'(x) \right)' + \frac{n^2}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) = 0. \quad (3.39)$$

Usualmente se normaliza  $T_n$  de tal forma que  $T_n(1) = 1$  y entonces

$$T_k(x) = \cos(k \cos^{-1} x) \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.40)$$

Su dominio es evidentemente  $[-1, 1]$ . Si hacemos  $x = \cos \theta$ , se tiene que  $T_k(x) = \cos k\theta$ , de modo que los polinomios de Chebyshev son funciones coseno “disfrazados”, así que varias relaciones matemáticas y teoremas bien conocidos del sistema de Fourier pueden adaptarse fácilmente al sistema de Chebyshev. De la relación  $T_k(x) = \cos k\theta$ , cuando  $k = 0$  se tiene inmediatamente que  $T_0(x) = 1$ , cuando  $k = 1$ ,  $T_1(x) = \cos \theta = \cos(\cos^{-1} x) = x$ . Partiendo de  $T_0$  y  $T_1$ , y de la relación de recurrencia

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \quad (3.41)$$

se pueden generar polinomios de Chebyshev de grados superiores. (3.41) se obtiene directamente de la relación trigonométrica  $\cos(k+1)\theta + \cos(k-1)\theta = 2\cos\theta\cos k\theta$ . Los polinomios de Chebyshev son mutuamente ortogonales en su dominio de definición con respecto al peso  $w = (1-x^2)^{-1/2}$ . Esta condición se lee

$$(T_k, T_j)_w \equiv \int_{-1}^1 T_k(x)T_j(x)w dx = \frac{\pi}{2}c_k\delta_{k,j}. \quad (3.42)$$

donde  $\delta_{k,j}$  es la delta de Kronecker y  $c_k$  está dado por

$$c_k = \begin{cases} 2 & , \quad k = 0 \\ 1 & , \quad k \geq 1 \end{cases} \quad (3.43)$$

La relación (3.42) es fácil de verificar con identidades trigonométricas: como  $x = \cos\theta$ ,  $dx = -\sin\theta d\theta$ , así que

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 T_i(x)T_j(x)\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} &= \int_0^\pi \cos(i\theta)\cos(j\theta)d\theta \\ &= \frac{1}{2}\int_0^\pi [\cos(i+j)\theta + \cos(i-j)\theta] d\theta. \end{aligned} \quad (3.44)$$

La última integral es sencilla de hacer. Considerando cada uno de los casos, primero, cuando  $i \neq j$ , es inmediato verificar que la integral se anula. Cuando  $i = j \neq 0$ , se tiene

$$\int_{-1}^1 T_i(x)T_j(x)\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{1}{2}\int_0^\pi \cos(2j\theta)d\theta + \frac{1}{2}\int_0^\pi d\theta = \frac{\pi}{2}.$$

Y finalmente cuando  $i = j = 0$

$$\int_{-1}^1 T_i(x)T_j(x)\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{1}{2}\int_0^\pi d\theta + \frac{1}{2}\int_0^\pi d\theta = \theta\Big|_0^\pi = \pi.$$

En el momento de considerar condiciones de frontera, las siguientes propiedades de  $T_n(x)$  son muy útiles

$$T_n(\pm 1) = (\pm 1)^n \quad , \quad T'_n(\pm 1) = (\pm 1)^{n+1} n^2 \quad (3.45)$$

Otra propiedad que usaremos más adelante en relación a la conservación de masa es

$$\int_{-1}^1 T_n(x) dx = \frac{nT_{n+1}(x)}{n^2 - 1} - \frac{xT_n(x)}{n - 1}. \quad (3.46)$$

La expansión de una función  $u$  en la base de Chebyshev se escribe

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n T_n(x), \quad (3.47)$$

y debido a la ortogonalidad de  $T_k$  los coeficientes se obtienen multiplicando (3.47) por  $T_k$  e integrando

$$a_k = \frac{2}{\pi c_k} \int_{-1}^1 u(x) \frac{T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (3.48)$$

Si definimos la función periódica y par  $\tilde{u}(\theta) = u(\cos \theta)$ , entonces  $\tilde{u}(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos n\theta$  y la serie en términos de Chebyshev de  $u$  corresponde a la serie coseno de  $\tilde{u}$ . Más aún, si  $u$  es  $C^\infty$  puede mostrarse que  $\tilde{u}$  es infinitamente diferenciable y periódica con todas sus derivadas en  $[0, 2\pi]$ , y como para el sistema de Fourier, para el de Chebyshev también se tiene que *los coeficientes de Chebyshev para funciones suficientemente suaves decaen más rápido que el decaimiento algebraico*.

Al resolver ecuaciones diferenciales parciales, aparecerá la derivada de la función  $\partial_x u = u'$ , ésta también puede expandirse

$$u'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(1)} T_n(x), \quad (3.49)$$

y es deseable obtener los coeficientes de la derivada  $u'$ , es decir  $a_n^{(1)}$ , a partir de los coeficientes de la expansión de  $u$ , los  $a_n$ . La relación trigonométrica

$2 \sin \theta \cos k\theta = \sin(k+1)\theta - \sin(k-1)\theta$  nos permitirá esto, esta relación tiene su contraparte en el sistema de Chebyshev

$$2T_k(x) = \frac{1}{k+1}T'_{k+1}(x) - \frac{1}{k-1}T'_{k-1}(x), \quad (3.50)$$

y de aquí se obtiene la muy importante relación de recurrencia

$$c_k a_k^{(1)} = a_{k+2}^{(1)} + 2(k+1)a_{k+1}, \quad 0 \leq k \leq N-1 \quad (3.51)$$

donde  $c_k$  está dada por (3.43).

Si se considera la serie truncada  $u_N(x) = \sum_{k=0}^N a_k T_k(x)$  que es un polinomio de grado  $N$ , entonces la derivada  $u'$  es de grado  $N-1$ , de modo que  $u'(x) = \sum_{k=0}^{N-1} a_k^{(1)} T_k(x)$  y por tanto  $a_n^{(1)} = 0$  para  $n \geq N$ , este hecho debe tomarse en cuenta al usar (3.51), donde uno empieza con  $k = N-1$  y va disminuyendo el valor del índice hasta llegar a  $k = 0$ . En general, los coeficientes de la expansión de la  $q$ -ésima derivada pueden obtenerse a partir de los coeficientes de la  $(q-1)$ -ésima derivada con

$$c_k a_k^{(q)} = a_{k+2}^{(q)} + 2(k+1)a_{k+1}^{(q-1)}. \quad (3.52)$$

Aunque en los libros de texto hay expresiones explícitas para calcular los coeficientes de las expansiones de al menos las primeras dos derivadas de  $u$ , a saber

$$a_k^{(2)} = \frac{1}{c_k} \sum_{\substack{p=k+2 \\ (p+k) \text{ par}}}^N p(p^2 - k^2)a_p, \quad a_k^{(1)} = \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ (p+k) \text{ impar}}}^N p a_p, \quad (3.53)$$

la forma más eficiente de hacerlo es usando (3.52).

En un problema específico, si se tiene una condición inicial  $u(x, t=0) = g(x)$ , se pueden calcular formalmente los coeficientes  $a(t=0)$  de esta condición inicial a través de (3.48)

$$a_k(0) = \frac{2}{\pi c_k} \int_{-1}^1 u(x, 0) \frac{T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx.$$

En un problema no lineal, que tenga por ejemplo términos como  $P(x) \equiv u \partial_x u$ , uno se pregunta por los coeficientes de  $P(x)$  (que llamaremos  $p_k$ ) en términos de los coeficientes  $a_k$  de  $u(x)$  y  $a_k^{(1)}$  de  $\partial_x u$ . La respuesta se da por una fórmula de convolución, análoga a la de Fourier, que no es difícil demostrar

$$p_k = \frac{1}{2} \sum_{k=|n-m|} a_n a_m^{(1)} + \frac{1}{2} \sum_{k=n+m} a_n a_m^{(1)} \quad (3.54)$$

Para no linealidades de la forma de productos, aunque (3.54) no sea muy eficiente, puede usarse. Sin embargo, para otro tipo de no linealidades, su uso, resultaría imposible. También, como en el caso de Fourier, tener una expresión analítica de los coeficientes (3.54) que puede llegar a ser muy complicado. Estas dos limitaciones se resuelven con la ayuda de las transformaciones discretas de Chebyshev que revisamos brevemente en la siguiente sección. Nuevamente, el precio a pagar al introducir la transformada discreta es la introducción del error de aliasing.

### 3.3.1. Transformaciones Discretas de Chebyshev

Las transformadas discretas de Chebyshev, se definen con base en una discretización del dominio espacial,  $x_j = \cos(\pi j/N)$  con  $j = 0, 1, 2, \dots, N$ , su definición es

$$\tilde{a}_k = \sum_{j=0}^N \frac{2}{N c_k} u(x_j) T_k(x_j), \quad (3.55)$$

La relación inversa es  $u(x_j) = \sum_{k=0}^N \tilde{a}_k T_k(x_j)$  con  $j = 0, 1, \dots, N$ . Estas dos relaciones constituyen un mapeo entre el espacio físico y el espectral en el sentido de que, dados los valores de la función en  $x_j$  se obtienen los de los

coeficientes  $\tilde{a}_k$  y viceversa. Los coeficientes  $\tilde{a}_n$  son una aproximación a  $a_n$ , estos están relacionados por

$$\tilde{a}_k = a_k + \sum_{\substack{j=2mN \pm k \\ j > N}} a_j \quad (3.56)$$

Como en la base de Fourier, el error de aliasing decae para  $N$  suficientemente grandes. Cuando se tienen no linealidades, el error se elimina con la regla de los 2/3. Para calcular los coeficientes de la condición inicial, utilizaremos (3.55). En el siguiente capítulo, exponemos los métodos espectrales mas conocidos. Para el problema físico que estudiamos en este trabajo, usaremos el método de Tau.

# Capítulo 4

## Esquema Numérico

La idea básica en los métodos espectrales es buscar soluciones aproximadas como una serie truncada de un conjunto de funciones  $\{\Phi_n(x)\}$  ortogonales, de modo que la solución aproximada se propone de la forma

$$u_N(x, t) = \sum_{n=0}^N a_n(t) \Phi_n(x). \quad (4.1)$$

Y las incógnitas son los coeficientes  $a_n$ , que al ser obtenidos se tendría la solución en todo el dominio espacial.

La forma en que se encuentran los coeficientes  $a_n$  determina los diferentes métodos espectrales, siendo los más conocidos el método de Galerkin, el método Tau, y el método de Colocación.

### 4.1. Método Espectral de Galerkin.

Supongamos que tenemos una ecuación diferencial de la forma  $\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = O(x,t)u(x,t)$  donde  $O(x,t)$  es un operador espacial diferencial, al sustituir en esta ecuación la expansión

$$u_N(x, t) = \sum_{n=0}^N a_n(t) \Phi_n(x) \quad (4.2)$$

se obtiene el así llamado residuo  $R(x, t, a_n)$ , el cual no se anula ya que  $u_N$  es una solución aproximada

$$R(x, t, a_n) = \frac{\partial u_N(x, t)}{\partial t} - O(x, t)u_N(x, t) \neq 0. \quad (4.3)$$

Al igual que para cualquier función bien comportada, la función residual puede expandirse en términos de una serie truncada del mismo conjunto ortogonal de funciones, entonces

$$R(x, t, a_0, \dots, a_N) = \sum_{k=0}^{\infty} r_k(a_0, \dots, a_N) \Phi_k(x). \quad (4.4)$$

Debido a la ortogonalidad de la base de funciones  $\Phi_k(x)$  los coeficientes  $r_k$  se determinan por el producto interno

$$r_n = (R, \Phi_n) = \int R \Phi_n(x) w(x) dx, \quad (4.5)$$

donde  $w$  es el peso del conjunto ortogonal.

En el método espectral de Galerkin, se pide que el residuo sea pequeño en el sentido de que los primeros  $N+1$  términos de la serie se anulen, pues todos los  $r_k$  para  $k > N$  son muy pequeños para  $N$  grandes. Ya que cuando desarrollamos una función bien comportada en términos de una serie truncada de un conjunto ortogonal de funciones  $\Phi_n$ , los coeficientes de la expansión decrecen rápidamente, entonces, la función queda caracterizada por los primeros coeficientes de la serie. Así que forzar que los primeros coeficientes  $r_k$  sean cero, minimiza el residuo  $R$ . Entonces, en el límite en el que  $N \rightarrow \infty$ ,  $R(x) \rightarrow 0$ , y por lo tanto la solución debe converger muy rápido a la solución exacta. Dicho de otra manera, para minimizar el residuo se pide que

$$(R, \Phi_n) = 0 \quad \text{para} \quad n = 0, 1, \dots, N \quad (4.6)$$

Otra propiedad importante del método Galerkin es que se pide que la base de funciones ortogonales (o un arreglo de esta) que se utilizan en la expansión en serie, cumplan las condiciones de frontera. Por ejemplo, cuando se tiene un problema con condiciones de frontera periódicas, lo natural es elegir una base de Fourier, aunque es posible utilizar otras bases.

## 4.2. Método Espectral Tau.

El método Tau al igual que el método Galerkin utiliza una solución aproximada  $u_N(x, t)$  en términos de una serie de funciones ortogonales de la forma

$$u_{N+k}(x, t) = \sum_{n=0}^{N+k} a_n(t) \Phi_n(x) \quad (4.7)$$

donde  $k$  es el número de condiciones de frontera del problema y  $N$  es el número de términos en la expansión. La diferencia principal entre (4.7) para la aproximación Tau y (4.2) para la aproximación Galerkin es que las funciones  $\Phi_n$  en (4.7) no requieren satisfacer individualmente las condiciones de la frontera. Entoces, el método Tau es una versión modificada del método Galerkin para poder incorporar eficientemente las condiciones de frontera en la solución aproximada (4.7). Resolveremos la ecuación de calor para ilustrar la implementación del método

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad |x| \leq 1 \quad (4.8)$$

con las condiciones de frontera  $u(\pm 1, t) = 0$  y condición inicial  $u(x, 0) = \frac{1}{2}(1 - x^2) \sin 2\pi x$ . Desarrollamos  $u(x, t)$  de la manera usual  $u_N(x, t) = \sum_{n=0}^N a_n(t) T_n(x)$ . Para minimizar el residuo:  $R(x, t) = \frac{\partial u_N}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_N}{\partial x^2}$  uno demanda que  $R(x, t)$  sea ortogonal al espacio expandido por  $\{T_k(x)\}_{k=0}^{N-2}$ , es decir

$$\int_{-1}^1 R(x, t) T_k(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0 \quad 0 \leq k \leq N-2 \quad (4.9)$$

debido a la ortogonalidad de los polinomios  $T_k(x)$ , la integral anterior se convierte en

$$\dot{a}_k = a_k^{(2)} \quad 0 \leq k \leq N - 2 \quad (4.10)$$

donde  $a_k^{(2)}$  son los coeficientes de la expansión de la segunda derivada de  $u(x, t)$  con respecto a la variable espacial  $x$ , y son funciones de los coeficientes  $a_k$ , es decir  $a_k^{(2)} = f_k(a_n)$ . Como se está proponiendo  $u_N$  como un polinomio de grado  $N$ , su segunda derivada será de grado  $N - 2$ , es por eso que en (4.10), el índice  $k$  corre sólo de 0 a  $N - 2$  y se evolucionan en el tiempo  $a_0, \dots, a_{N-2}$ , los dos últimos coeficientes  $a_N$  y  $a_{N-1}$  se evalúan a cada paso temporal usando las condiciones de frontera.

Como ya se ha mencionado, la manera más eficiente de calcular  $a_k^{(2)}$  es usando la relación de recurrencia  $c_k a_k^{(2)} = a_{k+2}^{(2)} + 2(k+1)a_{k+1}^{(1)}$ . Las condiciones de frontera  $u(x = -1, t) = u(x = 1, t) = 0$  en términos de los coeficientes son

$$u(-1, t) = \sum_{n=0}^N a_n = 0 \quad , \quad u(1, t) = \sum_{n=0}^N (-1)^n a_n = 0 \quad (4.11)$$

donde se usó la propiedad  $T_k(\pm 1) = (\pm 1)^{-k}$ . (4.11) es equivalentes al par de ecuaciones

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}} a_n = 0 \quad , \quad \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}} a_n = 0. \quad (4.12)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales (4.10) evoluciona los coeficientes  $a_n$  con  $0 \leq n \leq N - 2$ , y con las condiciones de frontera expresadas en (4.12) a cada paso de tiempo se encuentran  $a_N$  y  $a_{N-1}$ , sin pérdida de generalidad podemos asumir que  $N$  es par y así

$$a_N = - \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-2} a_n \quad , \quad a_{N-1} = - \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^{N-3} a_n \quad (4.13)$$

### 4.3. Método Espectral de Colocación.

En el Método espectral de Colocación también conocido como aproximación pseudoespectral, se trabaja con  $N+1$  puntos de colocación,  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_N$   $N$  puntos en el dominio  $D$ . Sean  $\Phi_n(x)$  para  $n = 0, 1, \dots, N$  una base para la aproximación. En el método de colocación se sustituye la expansión

$$u_N(x, t) = \sum_{n=0}^{N-1} a_n \phi_n(x) \quad (4.14)$$

en el sistema  $O(u_N(x_i)) = f(x_i)$  donde  $O(u_N(x_i))$  es un operador diferencial (espacial), que junto con las condiciones de frontera forman un sistema lineal de ecuaciones  $(N + 1) \times (N + 1)$  para los coeficientes  $a_n$ . La aplicación de este método a la ecuación de Helmholtz y a la de Burguess, puede verse en [6].

### 4.4. Condiciones de Frontera

Vamos a trabajar con el caso unidimensional de la ecuación de evolución para la altura de la interfase

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{3D}{2} \frac{(1+F)h^2}{(1+F-Fh)^2} \frac{\partial h}{\partial x} - h^3 \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{h^3}{B\pi^2} \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} \right] &= 0 \\ \equiv \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{J}(x, t) &= 0. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Como la resolveremos con la base de Chebyshev que tienen un dominio  $[-1, 1]$  y originalmente el dominio es  $[-\pi, \pi]$ , se hizo un reajuste en la variable espacial, dandonos por resultado un factor  $\pi$  multiplicando a  $B$ . Como (4.15) es de cuarto orden en la derivada espacial, entonces necesitamos cuatro condiciones de frontera para poder resolverla. Trabajaremos con dos tipos de condiciones de frontera, primero usaremos condiciones de frontera periódicas, pero usaremos los polinomios de Chebyshev. Aunque lo común sería

emplear la base de Fourier, vamos a usar Chebyshev para familiarizarnos con esta base, pues usaremos además, unas condiciones de frontera no periódicas que mejor reproducen el protocolo experimental usado por Van-Hook. Ambas condiciones de frontera y su implementación, las exponemos en las siguientes dos secciones.

#### 4.4.1. Condiciones de frontera periódicas

En esta sección vamos a proponer condiciones de frontera periódicas para resolver la ecuación. Se proponen condiciones de frontera periódicas porque simplifican el análisis de la ecuación de evolución. Para condiciones de frontera periódicas, la ecuación anterior y con una condición inicial  $h(x, t = 0)$  que satisfaga sea periódica, automáticamente se satisface la ecuación de conservación del líquido

$$\int_0^{2\pi} (h(x) - 1)dx = 0$$

La minimización del residuo, nos dará un conjunto de ecuaciones de evolución para  $a_0, \dots, a_{N-4}$ , a saber

$$\dot{a}_k = - \left\{ \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} \right\}_k \quad 0 \leq k \leq N - 4. \quad (4.16)$$

Partiremos de un perfil plano (cuando  $\Delta T = 0$ ), y le agregaremos una perturbación. De modo que la solución aproximada  $h$  escrita en términos de los polinomios de Chebyshev se lee

$$h(x, t) = 1 + \eta(x, t) = \sum_{n=0}^N a_n(t) T_n(x) \quad (4.17)$$

y las condiciones de frontera periódicas implican que:

$$\eta^{(i)}(-1, t) = \eta^{(i)}(1, t) \quad i = 0, 1, 2, 3 \quad (4.18)$$

entonces, podemos escribir a las cuatro condiciones  $\eta^{(i)}(-1) = \eta^{(i)}(1)$  ( $\eta^{(0)}$  es la perturbación sin derivar) en términos de los coeficientes de la expansión  $a_k(t)$ . Como  $h(x, t)$  es un polinomio de grado  $N$ , entonces  $h^{(i)}$  es un polinomio de grado  $N-i$ . Veamos que pasa para las condiciones de frontera para cada valor de  $i$ :

- Para  $i=0$ :

$$\eta(-1, t) = \eta(1, t) \quad (4.19)$$

o equivalentemente

$$\eta(-1, t) = \sum_{j=0}^N (-1)^j a_j(t) = \eta(1, t) = \sum_{j=0}^N a_j(t) \quad (4.20)$$

lo cual resulta en

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \text{ impar}}}^{N-1} a_j = 0 \quad (4.21)$$

- Para  $i=1$ :

$$h^{(1)}(-1, t) = h^{(1)}(1, t) \quad (4.22)$$

o equivalentemente

$$h^{(1)}(-1, t) = \sum_{j=0}^N (-1)^j a_j^{(1)}(t) = h^{(1)}(1, t) = \sum_{j=0}^N a_j^{(1)}(t) \quad (4.23)$$

lo cual resulta en

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \text{ impar}}}^{N-1} a_j^{(1)} = 0 \quad (4.24)$$

- De manera similar para  $i=2$  e  $i=3$  se tiene que:

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \text{ impar}}}^{N-3} a_j^{(2)}(t) = 0 \quad (4.25)$$

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \text{ impar}}}^{N-3} a_j^{(3)}(t) = 0 \quad (4.26)$$

Tenemos cuatro ecuaciones que están en términos de los coeficientes  $a_j^{(i)}(t)$  para  $i = 0, 1, 2, 3$  respectivamente, lo que queremos hacer es escribir las condiciones de frontera periódicas solamente en términos de los coeficientes  $a_j(t)$ . Entonces, vamos a escribir a las ecuaciones (4.24), (4.25) y (4.26) en términos de los coeficientes  $a_j(t)$ . Para esto vamos a hacer uso de algunas de las propiedades de la sección anterior para los polinomios de Chebyshev.

Haciendo uso de la relación de recurrencia para los coeficientes  $a_k^{(1)}$

$$a_k^{(1)}(t) = \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}} pa_p \quad (4.27)$$

donde

$$c_k = \begin{cases} 2 & , \quad k = 0 \\ 1 & , \quad k \geq 1 \end{cases}$$

podemos escribir a la ecuación (4.24) como:

$$\sum_{k=1}^{N-1} a_k^{(1)}(t) = \sum_{k=1}^{N-1} \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}} pa_p(t) = \sum_{\substack{j=2 \\ j \text{ par}}}^N \alpha_j^{(1)} a_j(t) \quad (4.28)$$

ya tenemos a la ecuación (4.24) escrita en términos de los coeficientes  $a_j(t)$ , ahora, vamos a calcular quienes son los  $\alpha_j^{(1)}$  para  $j$  par, para esto vamos a deducir una ecuación de recurrencia, nuevamente hacemos uso de la ecuación

(4.27) y debemos tomar en cuenta que  $c_k = 1$  para  $k \geq 1$ , en los siguientes calculos para simplificar un poco la notación vamos a escribir simplemente  $a_j$  teniendo en mente que  $a_j = a_j(t)$  entonces, partiendo de la ecuación (4.24) tenemos que

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{N-1} a_k^{(1)} &= \sum_{k=1}^{N-1} \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^N pa_p = \sum_{k=1}^{N-1} 2 \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^N pa_p = 2 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p \text{ par}}}^N pa_p = \\
&= 2\{ 2a_2 + 4a_4 + 6a_6 + \dots + (N-2)a_{N-2} + Na_N + \\
&\quad + 4a_4 + 6a_6 + \dots + (N-2)a_{N-2} + Na_N + \\
&\quad + 6a_6 + \dots + (N-2)a_{N-2} + Na_N + \\
&\quad \cdot \\
&\quad \cdot \\
&\quad \cdot \\
&\quad + Na_N \} = \\
&= 2 \left\{ 2a_2 + 2 \cdot 4a_4 + 3 \cdot 6a_6 + \dots + \frac{(N-2)}{2}(N-2)a_{N-2} + \frac{N}{2}Na_N \right\} = \\
&= \{ 2 \cdot 2a_2 + 4 \cdot 4a_4 + 6 \cdot 6a_6 + \dots + (N-2)(N-2)a_{N-2} + NNa_N \} = \\
&= \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^N k^2 a_k
\end{aligned}$$

entonces, la ecuación (4.24) se puede escribir como:

$$\sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} a_k^{(1)} = \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^N \alpha_k^{(1)} a_k = 0 \tag{4.29}$$

donde

$$\alpha_k^{(1)} = k^2 \quad (4.30)$$

la ecuación (4.30) es la ecuación de recurrencia para los  $\alpha_k^{(1)}$ ,  $k = 2, 4, 6, \dots, N$ .

Para deducir una ecuación de recurrencia para los  $\alpha_j^{(2)}$  correspondientes a la ecuación (4.25) procedemos de la siguiente manera:

de la ecuación (4.25) tenemos que

$$\sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} a_k^{(2)} = 0$$

hacemos uso nuevamente de la ecuación (4.27), con el siguiente cambio

$$a_k^{(2)} = \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{N-2} p a_p^{(1)}, \quad k \geq 0$$

entonces

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} a_k^{(2)} &= 2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{N-2} p a_p^{(1)} = \\ &= 2 \{ 2a_2^{(1)} + 4a_4^{(1)} + 6a_6^{(1)} + \dots + (N-2)a_{N-2}^{(1)} + \\ &\quad + 4a_4^{(1)} + 6a_6^{(1)} + \dots + (N-2)a_{N-2}^{(1)} + \\ &\quad \cdot \\ &\quad \cdot \\ &\quad \cdot \\ &\quad + (N-2)a_{N-2}^{(1)} \} = \\ &= 2 \left\{ 2a_2^{(1)} + 2 \cdot 4a_4^{(1)} + 3 \cdot 6a_6^{(1)} + \dots + \frac{(N-2)}{2}(N-2)a_{N-2}^{(1)} \right\} = \end{aligned}$$

$$= \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^{N-2} k^2 a_k^{(1)}$$

hacemos uso nuevamente de la ecuación (4.27)

$$a_k^{(1)} = \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^N pa_p, \quad k \geq 0$$

y tenemos que

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^{N-2} k^2 a_k^{(1)} &= \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^{N-2} k^2 \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{N-1} pa_p = 2 \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^{N-2} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{N-1} k^2 pa_p = \\ &= 2\{ 2^2 [3a_3 + 5a_5 + 7a_7 + \dots + (N-1)a_{N-1}] + \\ &\quad 4^2 [ \quad +5a_5 + 7a_7 + \dots + (N-1)a_{N-1}] + \\ &\quad 6^2 [ \quad \quad +7a_7 + \dots + (N-1)a_{N-1}] + \\ &\quad \quad \quad \cdot \\ &\quad \quad \quad \cdot \\ &\quad \quad \quad \cdot \\ &\quad (N-2)^2 [ \quad \quad \quad \quad + (N-1)a_{N-1}] \} = \\ &= 2\{ 2^2 \cdot 3a_3 + (2^2 + 4^2)5a_5 + (2^2 + 4^2 + 6^2)7a_7 + \dots + \\ &\quad + \dots + (2^2 + 4^2 + 6^2 + \dots + (N-2)^2)(N-1)a_{N-1} \} = \\ &= 2 \sum_{\substack{k=3 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} ka_k \sum_{\substack{p=2 \\ p \text{ par}}}^{k-1} p^2 \end{aligned}$$

entonces, la ecuación (4.25) se puede escribir como:

$$\sum_{k=1}^{N-3} a_k^{(2)} = \sum_{\substack{k=3 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} \alpha_k^{(2)} a_k \quad (4.31)$$

donde

$$\alpha_k^{(2)} = 2k \sum_{\substack{p=2 \\ p \text{ par}}}^{k-1} p^2 \quad (4.32)$$

la ecuación (4.32) es la ecuación de recurrencia para los  $\alpha_k^{(2)}$ ,  $k = 3, 5, 7, \dots, N-1$ .

Se procede de la misma manera para deducir la ecuación de recurrencia para los  $\alpha_j^{(3)}$  correspondientes a la ecuación (4.26), de la ecuación (4.32) se tiene que

$$\sum_{k=1}^{N-3} a_k^{(3)} = 0$$

y hacemos uso de la ecuación (4.27) con el siguiente cambio

$$a_k^{(3)} = \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{N-2} p a_p^{(2)}, \quad k \geq 0$$

recordemos que  $c_k = 1$  para  $k \geq 1$ , entonces

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N-3} a_k^{(3)} &= 2 \sum_{k=1}^{N-3} \sum_{p=k+1}^{N-2} p a_p^{(2)} \\ &= 2 \{ 2a_2^{(2)} + 4a_4^{(2)} + 6a_6^{(2)} + \dots + (N-2)a_{N-2}^{(2)} + \\ &\quad + 4a_4^{(2)} + 6a_6^{(2)} + \dots + (N-2)a_{N-2}^{(2)} + \\ &\quad + 6a_6^{(2)} + \dots + (N-2)a_{N-2}^{(2)} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \dots \\
& \dots \\
& \dots + (N-2)a_{N-2}^{(2)} \} = \\
= 2 \left\{ 2a_2^{(2)} + 2 \cdot 4a_4^{(2)} + 3 \cdot 6a_6^{(2)} + \dots + \frac{(N-2)}{2}(N-2)a_{(N-2)}^{(2)} \right\} = \\
& = \sum_{k=2}^{N-2} k^2 a_k^{(2)}
\end{aligned}$$

ahora, vamos a hacer uso de la ecuación

$$a_k^{(2)} = \frac{1}{c_k} \sum_{\substack{p=k+2 \\ p+k \text{ par}}}^N p(p^2 - k^2)a_p, \quad k \geq 0$$

entonces

$$\begin{aligned}
\sum_{k=2}^{N-2} k^2 a_k^{(2)} &= \sum_{k=2}^{N-2} k^2 \sum_{p=k+2}^N p(p^2 - k^2)a_p \\
&= 2^2 [4(4^2 - 2^2)a_4 + 6(6^2 - 2^2)a_6 + \dots + N(N^2 - 2^2)a_N] + \\
& \quad 4^2 [ \quad \quad \quad +6(6^2 - 4^2)a_6 + \dots + N(N^2 - 4^2)a_N] + \\
& \quad \dots \\
& \quad \dots \\
& \quad \dots \\
& (N-2)^2 [ \quad \quad \quad N(N^2 - (N-2)^2)a_N] + \\
& = 2^2(4^2 - 2^2)4a_4 + [2^2(6^2 - 2^2) + 4^2(6^2 - 4^2)] 6a_6 + \\
& \quad + [2^2(8^2 - 2^2) + 4^2(8^2 - 4^2) + 6^2(8^2 - 6^2)] 8a_8 + \\
& + \dots + [2^2(N^2 - 2^2) + 4^2(N^2 - 4^2) + \dots + (N-2)^2(N^2 - (N-2)^2)] Na_N
\end{aligned}$$

$$= \sum_{k=4}^N a_k k \sum_{p=2}^{k-2} p^2 (k^2 - p^2)$$

entonces, podemos escribir a la ecuación (4.26) como:

$$\sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} a_k^{(3)} = \sum_{\substack{k=4 \\ k \text{ par}}}^N \alpha_k^{(3)} a_k \quad (4.33)$$

donde

$$\alpha_k^{(3)} = k \sum_{\substack{p=2 \\ p \text{ par}}}^{k-2} p^2 (k^2 - p^2) \quad (4.34)$$

esta última ecuación es la ecuación de recurrencia para los  $\alpha_j^{(3)}$ ,  $k = 4, 6, 8, \dots, N$ .

Para deducir la ecuación de recurrencia para los  $\alpha_k^{(2)}$  pudimos haber sustituido directamente la ecuación

$$a_k^{(2)} = \frac{1}{c_k} \sum_{\substack{p=k+2 \\ p+k \text{ par}}}^N p(p^2 - k^2) a_p, \quad k \geq 0 \quad (4.35)$$

en la ecuación (4.25) de la siguiente manera

$$\sum_{k=1}^{N-3} a_k^{(2)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} \frac{1}{c_k} \sum_{\substack{p=k+2 \\ p+k \text{ par}}}^{N-1} p(p^2 - k^2) a_p = \sum_{\substack{k=3 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} k a_k \sum_{\substack{p=1 \\ p \text{ impar}}}^{k-2} (k^2 - p^2) = \sum_{\substack{k=3 \\ k \text{ ampar}}}^{N-3} \alpha_k^{(2)} a_k$$

donde

$$\alpha_k^{(2)} = k \sum_{\substack{p=1 \\ p \text{ impar}}}^{k-2} (k^2 - p^2) \quad (4.36)$$

esta ecuación es válida para  $k = 3, 5, 7, \dots, N - 3$ . La ecuación (4.36) es diferente a la ecuación de recurrencia (4.32) pero ambas nos dan el mismo

valor para cada  $\alpha_k^{(2)}$ , esto es fácil de verificar sustituyendo por ejemplo  $k=3$ , 5 y 7 en estas dos ecuaciones.

Para deducir la relación de recurrencia para los  $\alpha_k^{(3)}$  se puede proceder de otra forma:

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} a_k^{(3)} &= 2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{N-2} p a_p^{(2)} = \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^{N-2} k^2 a_k^{(2)} = \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^{N-2} k^2 2 \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{N-1} p a_p^{(1)} = \\
&= 4 \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^{N-2} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{N-1} \sum_{\substack{l=p+1 \\ l+p \text{ par}}}^N k^2 p l a_l \\
&= 4 \sum_{\substack{k=4 \\ k \text{ par}}}^N k a_k \sum_{\substack{p=2 \\ p \text{ par}}}^{k-2} \left( \sum_{\substack{l=p+1 \\ l+p \text{ par}}}^{k-1} p^2 l \right) = \sum_{\substack{k=4 \\ k \text{ par}}}^N \alpha_k^{(3)} a_k
\end{aligned}$$

donde

$$\alpha_k^{(3)} = 4k \sum_{\substack{p=2 \\ p \text{ par}}}^{k-2} \left( \sum_{\substack{l=p+1 \\ l+p \text{ par}}}^{k-1} p^2 l \right) \quad (4.37)$$

La ecuación (4.37) es diferente de la ecuación de recurrencia (4.34) pero nuevamente ambas ecuaciones nos dan el mismo valor para cada  $\alpha_k^{(3)}$ . Con estas ecuaciones de recurrencia podemos conocer todos los  $\alpha_j^k$ , con  $k = 0, 1, 2, 3$ .

Ya tenemos a las cuatro condiciones de frontera periódicas  $h^{(i)}(-1) = h^{(i)}(1)$  para  $i = 0, 1, 2, 3$  en términos de los coeficientes  $a_k$  y podemos formar dos sistemas de ecuaciones con dos incógnitas cada uno y cuyas incógnitas serán los coeficientes  $a_N$ ,  $a_{N-1}$ ,  $a_{N-2}$  y  $a_{N-3}$ , estos coeficientes se calculan como se describe a continuación en términos de los coeficientes  $a_k$  para  $0 \leq k \leq N-4$ .

De las ecuaciones (4.21), (4.24), (4.25) y (4.26) escritas en términos de los coeficientes  $a_k$  tenemos que:

$$a_1 + a_3 + a_5 + \dots + a_{N-3} + a_{N-1} = 0 \quad (4.38)$$

$$\alpha_2^{(1)} a_2 + \alpha_4^{(1)} a_4 + \alpha_6^{(1)} a_6 + \dots + \alpha_{N-2}^{(1)} a_{N-2} + \alpha_N^{(1)} a_N = 0 \quad (4.39)$$

$$\alpha_3^{(2)} a_3 + \alpha_5^{(2)} a_5 + \alpha_7^{(2)} a_7 + \dots + \alpha_{N-3}^{(2)} a_{N-3} + \alpha_{N-1}^{(2)} a_{N-1} = 0 \quad (4.40)$$

$$\alpha_4^{(3)} a_4 + \alpha_6^{(3)} a_6 + \alpha_8^{(3)} a_8 + \dots + \alpha_{N-2}^{(3)} a_{N-2} + \alpha_N^{(3)} a_N = 0 \quad (4.41)$$

de las ecuaciones (4.38) y (4.40) tenemos que

$$a_{N-3} + a_{N-1} = a = -(a_1 + a_3 + a_5 + \dots + a_{N-5})$$

$$\alpha_{N-3}^{(2)} a_{N-3} + \alpha_{N-1}^{(2)} a_{N-1} = b = -\left(\alpha_3^{(2)} a_3 + \alpha_5^{(2)} a_5 + \alpha_7^{(2)} a_7 + \dots + \alpha_{N-5}^{(2)} a_{N-5}\right)$$

y de las ecuaciones (4.39) y (4.41) tenemos:

$$\alpha_{N-2}^{(1)} a_{N-2} + \alpha_N^{(1)} a_N = c = -\left(\alpha_2^{(1)} a_2 + \alpha_4^{(1)} a_4 + \alpha_6^{(1)} a_6 + \dots + \alpha_{N-4}^{(1)} a_{N-4}\right)$$

$$\alpha_{N-2}^{(3)} a_{N-2} + \alpha_N^{(3)} a_N = d = -\left(\alpha_4^{(3)} a_4 + \alpha_6^{(3)} a_6 + \alpha_8^{(3)} a_8 + \dots + \alpha_{N-4}^{(3)} a_{N-4}\right)$$

y obtenemos así dos sistemas de ecuaciones cada uno con dos incógnitas y los términos independientes son  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$ .

Para el sistema de ecuaciones:

$$a_{N-3} + a_{N-1} = a$$

$$\alpha_{N-3}^{(2)} a_{N-3} + \alpha_{N-1}^{(2)} a_{N-1} = b$$

se tiene que:

$$a_{N-3} = \frac{a\alpha_{N-1}^{(2)} - b}{\alpha_{N-1}^{(2)} - \alpha_{N-3}^{(2)}} \quad (4.42)$$

$$a_{N-1} = \frac{b - a\alpha_{N-3}^{(2)}}{\alpha_{N-1}^{(2)} - \alpha_{N-3}^{(2)}} \quad (4.43)$$

y para el sistema:

$$\alpha_{N-2}^{(1)}a_{N-2} + \alpha_N^{(1)}a_N = c$$

$$\alpha_{N-2}^{(3)}a_{N-2} + \alpha_N^{(3)}a_N = d,$$

se tiene que:

$$a_{N-2} = \frac{c\alpha_N^{(3)} - d\alpha_N^{(1)}}{\alpha_{N-2}^{(1)}\alpha_N^{(3)} - \alpha_{N-2}^{(3)}\alpha_N^{(1)}} \quad (4.44)$$

$$a_N = \frac{d\alpha_{N-2}^{(1)} - c\alpha_{N-2}^{(3)}}{\alpha_{N-2}^{(1)}\alpha_N^{(3)} - \alpha_{N-2}^{(3)}\alpha_N^{(1)}} \quad (4.45)$$

donde de acuerdo con las ecuaciones de arriba:

$$a = -\sum_{k=1}^{N-5} a_k \quad b = -\sum_{k=3}^{N-5} \alpha_k^{(2)} a_k$$

$$c = -\sum_{k=2}^{N-4} \alpha_k^{(1)} a_k \quad d = -\sum_{k=4}^{N-4} \alpha_k^{(3)} a_k.$$

#### 4.4.2. Condiciones de frontera no periódicas.

En [19] se tiene una buena concordancia entre los resultados experimentales de los valores de  $D(1 + F)$  para los cuales aparece la inestabilidad de ruptura y la predicción teórica que asume condiciones de frontera periódicas y una superficie de la interfase plana: Esta concordancia es muy buena para profundidades del fluido mayores de 0.015 cm; sin embargo, los resultados experimentales se desvían significativamente de la teoría para capas más delgadas (menores de 0.015 cm), a veces hasta en un cuarenta por ciento. Esta desviación se pensó podría tener como origen, que las condiciones de frontera periódicas no reflejaban el protocolo experimental, y en efecto, ese resultó ser el caso [1].

En el experimento, Van Hook y colaboradores, tenían sólo un contenedor de altura fija (0.2 cm), y variaban la profundidad media del fluido *sobre llenando* y *medio llenando* la celda convectiva para tener diferentes profundidades medias del fluido (ver figura ??). Así que aún en ausencia de un gradiente de temperatura ( $D = 0$ ) se tiene un perfil inicial no plano. Además, está el hecho físico de que el líquido quedaba fijo en las paredes laterales del contenedor, es decir,  $h(x \pm 1, t) = h_0$ . Como todas las longitudes se escalaron con  $d$ ,  $h_0 = 0.02 \text{ cm}/d$ . Así que  $h_0 > 1$ , o equivalentemente  $d < 0.02 \text{ cm}$ , corresponde a el *medio llenado* del contenedor,  $h_0 < 1$  ( $d > 0.02 \text{ cm}$ ) al *sobre llenado*. Tenemos así dos condiciones de frontera. Las otras dos vienen de la conservación de fluido, la cual es

$$\int_{-1}^1 (h(x, t) - 1) dx = 0 \quad (4.46)$$

Si se integra la ecuación de evolución de Swift-Van Hook sobre el dominio  $[-1, 1]$  entonces

$$\frac{d}{dt} \int_{-1}^1 h(x, t) dx = -J(x, t)|_{-1}^1, \quad (4.47)$$

debe anularse, y ese sería el caso con tal de que la condición inicial satisficiera

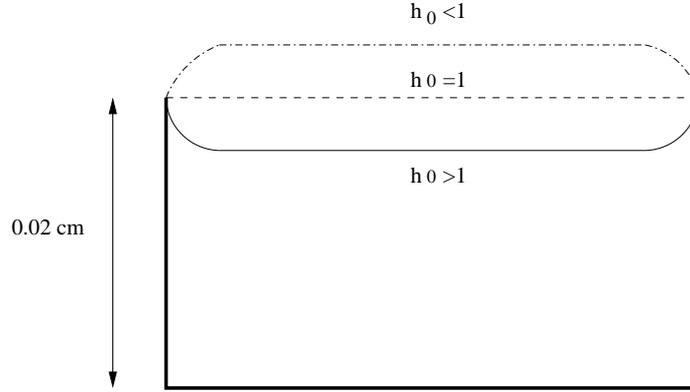


Figura 4.1: La celda convectiva experimental tenía una profundidad de 0.02 cm. A fin de tener diversos valores de la profundidad media del fluido con el mismo contenedor, se medio llenaba o se sobre llenaba la celda, teniendose así un perfil no pleno aún en ausencia de gradientes de temperatura, y además el fluido quedaba “pegado” a la misma altura en las paredes laterales de la celda.

(4.46) y que  $J(-1) = J(1) \equiv C(t)$ . Entender el significado físico de  $J$  ayuda a determinar el valor de  $C$ . Para ello, recordamos que en los últimos pasos de la derivación del modelo de Swift-Van Hook, se obtuvo la velocidad horizontal

$$\vec{u}_{\perp} = \left( -S_0 \vec{\nabla} \nabla^2 h + G \vec{\nabla} h \right) \frac{z^2}{2} + z \left( S_0 h \vec{\nabla} \nabla^2 h - Gh \vec{\nabla} h + \vec{\nabla}_{\perp} S_0 \right). \quad (4.48)$$

Si ahora integramos

$$\begin{aligned} \int_0^h \vec{u}_{\perp} dz &= \left( -S_0 \vec{\nabla} \nabla^2 h + G \vec{\nabla} h \right) \frac{h^3}{6} + \frac{h^2}{2} \left( S_0 h \vec{\nabla} \nabla^2 h - Gh \vec{\nabla} h + \vec{\nabla}_{\perp} S_0 \right) \\ &= \left( S_0 \frac{h^3}{3} \vec{\nabla} \nabla^2 h - \frac{h^3}{3} \vec{\nabla} h - \frac{h^2}{2} DG \nabla T \right). \end{aligned} \quad (4.49)$$

donde se tomó en cuenta que  $\vec{\nabla} S = {}_D G \vec{\nabla} T$  y la ecuación (2.28), y se inmediato se ve que  $J(x, t)$  es proporcional a esta integral, la cual es el flujo de

fluido en la dirección horizontal. Así que  $\vec{J} = \text{constante} \int_0^h \vec{u}_\perp dz$ . Como  $J(x, t)$  es el flujo neto a través de una lineal vertical en  $x$ ,  $C \neq 0$  correspondería a un flujo neto a través de las paredes laterales y por tanto a través de la celda convectiva. En los experimentos el sistema era cerrado con ningún flujo neto horizontal, consecuentemente, la única alternativa es  $C = 0$ . Resumiendo, las condiciones de frontera que mejor reproducen el protocolo experimental son

$$h(x = \pm 1) = h_0 \quad , \quad J(x \pm 1) = 0 \quad (4.50)$$

Podemos escribir a  $h(x, t)$  como una expansión en serie en términos de los polinomios de Chebyshev  $T_k(x)$ , es decir,

$$h(x, t) \simeq \sum_{k=0}^N T_k(x) a_k(t) \quad (4.51)$$

donde  $N$  es un entero par. Las condiciones de frontera  $h(x = \pm 1) = h_0$  en términos de los coeficientes  $a_k(t)$  son

$$\sum_{k=0}^N a_k = h_0 \quad (4.52)$$

$$\sum_{k=0}^N (-1)^k a_k = h_0 \quad (4.53)$$

el término  $(-1)^k$  surge de utilizar la propiedad  $T_k(\pm 1) = (-1)^k$ . De la suma de las ecuaciones (4.52) y (4.53) tenemos

$$\sum_{k=0}^N a_k = h_0 \quad k \text{ par} \quad (4.54)$$

y de la resta tenemos

$$\sum_{k=1}^{N-1} a_k = 0 \quad k \text{ impar} \quad (4.55)$$

Las condiciones de frontera  $J(x = \pm 1) = 0$  escritas en términos de los coeficientes  $a_k$  son

$$J(-1) = \tilde{\epsilon} \sum_{n=0}^{N-1} (-1)^n a_n^{(1)} + \frac{h_0}{\pi^2 B} \sum_{n=0}^{N-3} (-1)^n a_n^{(3)} = 0 \quad (4.56)$$

$$J(1) = \tilde{\epsilon} \sum_{n=0}^{N-1} a_n^{(1)} + \frac{h_0}{\pi^2 B} \sum_{n=0}^{N-3} a_n^{(3)} = 0 \quad (4.57)$$

donde  $a_n^{(1)}$  y  $a_n^{(3)}$  son los coeficientes correspondientes a  $h^{(1)}$  y  $h^{(3)}$  respectivamente y

$$\tilde{\epsilon} = \frac{3D(1+F)}{2(1+F-Fh_0)^2} - h_0. \quad (4.58)$$

De la suma de las ecuaciones (4.56) y (4.57) tenemos

$$\tilde{\epsilon} \sum_{n=0}^{N-2} a_n^{(1)} + \frac{h_0}{\pi^2 B} \sum_{n=0}^{N-4} a_n^{(3)} = 0 \quad n \text{ par} \quad (4.59)$$

y de la resta

$$\tilde{\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} a_n^{(1)} + \frac{h_0}{\pi^2 B} \sum_{n=1}^{N-3} a_n^{(3)} = 0 \quad n \text{ impar} \quad (4.60)$$

aquí usamos las relaciones de recurrencia obtenidas en la sección anterior

$$\sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^{N-1} a_n^{(1)} = \sum_{\substack{k=2 \\ k \text{ par}}}^N \alpha_k^{(1)} a_k, \quad \alpha_k^{(1)} = k^2 \quad (4.61)$$

$$\sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^{N-3} a_n^{(2)} = \sum_{\substack{k=3 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} \alpha_k^{(2)} a_k, \quad \alpha_k^{(2)} = 2k \sum_{\substack{p=2 \\ p \text{ par}}}^{k-1} p^2 \quad (4.62)$$

$$\sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^{N-3} a_n^{(3)} = \sum_{\substack{k=4 \\ k \text{ par}}}^N \alpha_k^{(3)} a_k, \quad \alpha_k^{(3)} = k \sum_{\substack{p=2 \\ p \text{ par}}}^{k-2} p^2(k^2 - p^2) \quad (4.63)$$

también ocupamos las siguientes relaciones:

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-2} a_n^{(1)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} \alpha_k^{(1)} a_k, \quad \alpha_k^{(1)} = k^2 \quad (4.64)$$

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-4} a_n^{(3)} = \sum_{\substack{k=3 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} \alpha_k^{(3)} a_k, \quad \alpha_k^{(3)} = k \sum_{\substack{p=1 \\ p \text{ impar}}}^{k-2} p^2(k^2 - p^2) \quad (4.65)$$

las dos últimas ecuaciones de recurrencia se obtienen de la siguiente manera:

para la ecuación (4.64) se tiene

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-2} a_n^{(1)} = \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-2} \frac{2}{c_n} \sum_{\substack{p=n+1 \\ p+n \text{ impar}}}^{N-1} p a_p$$

donde  $c_k = 2$  para  $k=0$  y  $c_k = 1$  en otro caso. Desarrollando ambas sumas y agrupando términos tenemos que

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-2} a_n^{(1)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} k^2 a_k = \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} \alpha_k^{(1)} a_k$$

y para la ecuación (4.65) se tiene

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-4} a_n^{(3)} = \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-4} \frac{2}{c_n} \sum_{\substack{p=n+1 \\ p+n \text{ impar}}}^{N-3} p a_p^{(2)}$$

desarrollando las sumas y agrupando términos se tiene que

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-4} a_n^{(3)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} k^2 a_k^{(2)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-3} k^2 \frac{1}{c_k} \sum_{\substack{p=k+2 \\ p+k \text{ par}}}^{N-1} p(p^2 - k^2) a_p$$

desarrollando ambas sumas y agrupando términos se llega a

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-4} a_n^{(3)} = \sum_{\substack{k=3 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} k a_k \sum_{\substack{p=1 \\ p \text{ impar}}}^{k-2} p^2 (k^2 - p^2) = \sum_{\substack{k=3 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} \alpha_k^{(3)} a_k$$

Usando las relaciones anteriores en las ecuaciones (4.59) y (4.60) tenemos que

$$\tilde{\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} \alpha_n^{(1)} a_n + \frac{h_0}{\pi^2 B} \sum_{n=3}^{N-1} \alpha_n^{(3)} a_n = 0 \quad n \text{ impar} \quad (4.66)$$

$$\tilde{\epsilon} \sum_{n=2}^N \alpha_n^{(1)} a_n + \frac{h_0}{\pi^2 B} \sum_{n=4}^N \alpha_n^{(3)} a_n = 0 \quad n \text{ par} \quad (4.67)$$

De las ecuaciones (4.54), (4.55), (4.66) y (4.67) vamos a despejar a los coeficientes  $a_N$ ,  $a_{N-1}$ ,  $a_{N-2}$  y  $a_{N-3}$  los cuales representan las cuatro condiciones de frontera en la expansión en serie de la función  $h$ .

Para la primera condición,  $h(x = \pm 1) = h_0$ , tenemos que

$$\sum_{k=0}^N a_k = h_0 \quad (k \text{ par}) \quad (4.68)$$

$$\sum_{k=1}^{N-1} a_k = 0 \quad (k \text{ impar}) \quad (4.69)$$

Nos interesan los coeficientes  $a_N$ ,  $a_{N-1}$ ,  $a_{N-2}$  y  $a_{N-3}$  que corresponden a las cuatro condiciones de frontera y vamos a obtenerlos. Primero, de la ecuación (4.68) tenemos que

$$\sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ par}}}^N a_k = a_N + a_{N-2} + \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ par}}}^{N-4} a_k = h_0$$

entonces,

$$a_N + a_{N-2} = h_0 - \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ par}}}^{N-4} a_k \quad (4.70)$$

de la ecuación (4.69) tenemos que:

$$\sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-1} a_k = a_{N-1} + a_{N-3} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-5} a_k = 0$$

entonces,

$$a_{N-1} + a_{N-3} = - \sum_{\substack{k=1 \\ k \text{ impar}}}^{N-5} a_k \quad (4.71)$$

Para  $J(x = \pm 1) = 0$  tenemos que:

$$\tilde{\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} \alpha_n^{(1)} a_n + \frac{h_0}{\pi^2 B} \sum_{n=3}^{N-1} \alpha_n^{(3)} a_n = 0 \quad (n \text{ impar}) \quad (4.72)$$

$$\tilde{\epsilon} \sum_{n=2}^N \alpha_n^{(1)} a_n + \frac{h_0}{\pi^2 B} \sum_{n=4}^N \alpha_n^{(3)} a_n = 0 \quad (n \text{ par}) \quad (4.73)$$

Sea  $A = \frac{h_0}{\pi^2 B}$ , entonces, de la ecuación (4.72) tenemos que

$$\tilde{\epsilon} \sum_{n=1}^{N-1} \alpha_n^{(1)} a_n + A \sum_{n=3}^{N-1} \alpha_n^{(3)} a_n =$$

$$\begin{aligned}
&= \tilde{\epsilon} \left[ \alpha_{N-1}^{(1)} a_{N-1} + \alpha_{N-3}^{(1)} a_{N-3} \right] + \tilde{\epsilon} \sum_{n=1}^{N-5} \alpha_n^{(1)} a_n + \\
&+ A \left[ \alpha_{N-1}^{(3)} a_{N-1} + \alpha_{N-3}^{(3)} a_{N-3} \right] + A \sum_{n=3}^{N-5} \alpha_n^{(3)} a_n = 0
\end{aligned}$$

entonces,

$$\begin{aligned}
a_{N-1} \left[ \tilde{\epsilon} \alpha_{N-1}^{(1)} + A \alpha_{N-1}^{(3)} \right] + a_{N-3} \left[ \tilde{\epsilon} \alpha_{N-3}^{(1)} + A \alpha_{N-3}^{(3)} \right] &= \quad (4.74) \\
= -\tilde{\epsilon} \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^{N-5} \alpha_n^{(1)} a_n - A \sum_{\substack{n=3 \\ n \text{ impar}}}^{N-5} \alpha_n^{(3)} a_n
\end{aligned}$$

de la ecuación (4.73) tenemos que

$$\begin{aligned}
&\tilde{\epsilon} \sum_{n=2}^N \alpha_n^{(1)} a_n + A \sum_{n=4}^N \alpha_n^{(3)} a_n = \\
&= \tilde{\epsilon} \left[ \alpha_N^{(1)} a_N + \alpha_{N-2}^{(1)} a_{N-2} \right] + \tilde{\epsilon} \sum_{n=2}^{N-4} \alpha_n^{(1)} a_n + \\
&+ A \left[ \alpha_N^{(3)} a_N + \alpha_{N-2}^{(3)} a_{N-2} \right] + A \sum_{n=4}^{N-4} \alpha_n^{(3)} a_n = 0
\end{aligned}$$

entonces,

$$\begin{aligned}
a_N \left[ \tilde{\epsilon} \alpha_N^{(1)} + A \alpha_N^{(3)} \right] + a_{N-2} \left[ \tilde{\epsilon} \alpha_{N-2}^{(1)} + A \alpha_{N-2}^{(3)} \right] &= \quad (4.75) \\
= -\tilde{\epsilon} \sum_{\substack{n=2 \\ n \text{ par}}}^{N-4} \alpha_n^{(1)} a_n - A \sum_{\substack{n=4 \\ n \text{ par}}}^{N-4} \alpha_n^{(3)} a_n
\end{aligned}$$

Sean

$$B = -\tilde{\epsilon} \sum_{n=1}^{N-5} \alpha_n^{(1)} a_n - A \sum_{n=3}^{N-5} \alpha_n^{(3)} a_n \quad n \text{ impar} \quad (4.76)$$

$$C = -\tilde{\epsilon} \sum_{n=2}^{N-4} \alpha_n^{(1)} a_n - A \sum_{n=4}^{N-4} \alpha_n^{(3)} a_n \quad n \text{ par} \quad (4.77)$$

$$B1 = \tilde{\epsilon} \alpha_{N-1}^{(1)} + A \alpha_{N-1}^{(3)}, \quad B2 = \tilde{\epsilon} \alpha_{N-3}^{(1)} + A \alpha_{N-3}^{(3)} \quad (4.78)$$

$$C1 = \tilde{\epsilon} \alpha_N^{(1)} + A \alpha_N^{(3)}, \quad C2 = \tilde{\epsilon} \alpha_{N-2}^{(1)} + A \alpha_{N-2}^{(3)} \quad (4.79)$$

entonces, las ecuaciones (4.74) y (4.75) se pueden escribir como:

$$a_{N-1} B1 + a_{N-3} B2 = B \quad (4.80)$$

$$a_N C1 + a_{N-2} C2 = C \quad (4.81)$$

Con las ecuaciones (4.70), (4.71), (4.80) y (4.81) formamos dos sistemas de ecuaciones cada uno con dos incognitas

$$a_N + a_{N-2} = D \quad (4.82)$$

$$a_N C1 + a_{N-2} C2 = C \quad (4.83)$$

donde  $D = h_0 - \sum_{k=0}^{N-4} a_k$ ,  $k$  par. Para este sistema de ecuaciones la solución es

$$a_N = \frac{DC2 - C}{C2 - C1} \quad (4.84)$$

$$a_{N-2} = \frac{C - DC1}{C2 - C1} \quad (4.85)$$

el otro sistema de ecuaciones es

$$a_{N-1} + a_{N-3} = E \quad (4.86)$$

$$a_{N-1}B1 + a_{N-3}B2 = B \quad (4.87)$$

donde  $E = -\sum_{k=1}^{N-5} a_k$ ,  $k$  impar. La solución es

$$a_{N-1} = \frac{EB2 - B}{B2 - B1} \quad (4.88)$$

$$a_{N-3} = \frac{B - EB1}{B2 - B1}. \quad (4.89)$$

Una última palabra antes de dejar este capítulo. La conservación de masa  $\int_{-1}^1 \eta(x)dx = 0$  puede expresarse en términos de los coeficientes de la expansión de  $h(x, t)$ , y ésta puede llegar a ser de utilidad futura. Utilizando la propiedad (3.46) para los polinomios de Chebyshev, esto es

$$\int_{-1}^1 T_n(x)dx = \frac{nT_{n+1}(x)}{n^2 - 1} - \frac{xT_n(x)}{n - 1}$$

podemos mostrar que la conservación de masa es equivalente a

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^N \frac{a_n}{n^2 - 1} = 0. \quad (4.90)$$

## 4.5. Supresión de la inestabilidad Rayleigh-Taylor

Una capa de fluido suspendida desde el techo de una habitación goteará, como cualquiera que tenga goteras en casa puede decirlo. En general, la interfase entre una capa de fluido arriba de una de gas, es inestable. La supresión de esta inestabilidad puede lograrse al hacer oscilar el contenedor verticalmente [21], y se predijo que también se lograría con gradientes de temperatura [10].

Una perturbación en la profundidad de la capa de liquido produce regiones mas gruesas, donde la interfase se hace más caliente y regiones mas delgadas, donde la intefase se hace más fría. Como la tensión superficial disminuye al incrementarse la temperatura, el fluido es “jalado” a lo largo de la interfase de las regiones más calientes a regiones más frías (ver figura ??). La termocapilaridad actúa como agente estabilizador.

Recientemente, Burgess y colaboradores ?? realizaron experimentos sobre la estabilización de una capa de fluido suspendida de una superficie (de “cabeza”), que es gravitacionalmente inestable. La figura ?? es un diagrama de su experimento. Ellos encontraron que cuando una diferencia de temperatura vertical  $T_b - T_t > 0$  está arriba de un valor critico, la fuerza restauradora que proporcionada por la tensión superficial dependiente de la temperatura puede estabilizar a la capa.

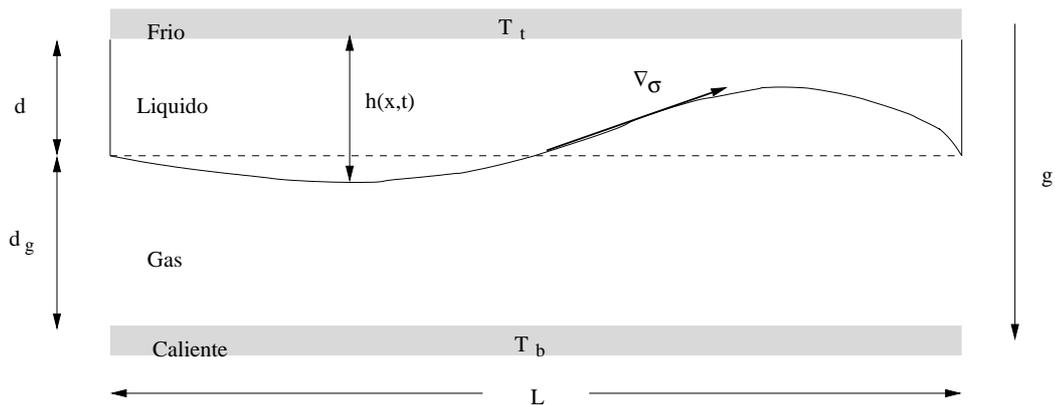


Figura 4.2: Geometría de la capa de fluido suspendida con un gradiente de temperatura que logra estabilizar a la capa.

El análisis usa una versión modificada del modelo de Swift-Van Hook. Con un cambio de signo del gradiente de temperatura y los terminos de aceleración gravitacional, la ecuación de evolución para la profundidad del liquido  $h$  se aplica a la inestabilidad de Rayleigh-Taylor. La ecuación de evolución es

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \frac{M}{2} \frac{(1+F)h^2 \nabla h}{(1+F-Fh)^2} - \frac{G}{3} h^3 \nabla h - \frac{S}{3} h^3 \nabla^2 \nabla h \right), \quad (4.91)$$

multiplicando ambos lados de la ecuación por  $3/G$  y sustituyendo  $M = DG$ ,  $G = gd^3/\nu\kappa$  y  $S = \sigma d/\rho\nu\kappa$ , la ecuación anterior se reescribe como

$$\frac{3}{G} \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \frac{3D}{2} \frac{(1+F)h^2 \nabla h}{(1+F-Fh)^2} - h^3 \nabla h - \frac{1}{q_{cap}^2} h^3 \nabla^2 \nabla h \right\} \quad (4.92)$$

donde  $q_{cap} = \sqrt{\frac{\rho g d^2}{\sigma}}$ .

Para realizar el estudio de la estabilidad lineal, nos fijamos en la ecuación linealizada que es

$$\frac{3}{G} \frac{\partial h}{\partial t} + \epsilon \nabla^2 h + \frac{1}{q_{cap}^2} \nabla^2 \nabla^2 h = 0 \quad (4.93)$$

donde  $\epsilon = \frac{-3D}{2}(1+F) + 1$ .

Asumiendo una solución de la forma  $h(x, y, t) = 1 + \eta_{q_1, q_2} e^{\gamma t} e^{i(q_1 x + q_2 y)}$ , se tiene que la razón de crecimiento del modo  $q$ -ésimo es

$$\gamma(q) = \frac{G}{3} q^2 \left[ \epsilon - \left( \frac{q}{q_{cap}} \right)^2 \right] \quad (4.94)$$

donde  $\epsilon$  se puede escribir como  $\epsilon = [(\Delta T)_c - \Delta T]/(\Delta T)_c$  la temperatura reducida,  $q$  es el número de onda de la perturbación y

$$(\Delta T)_c = \frac{2}{3} \frac{\rho g d^2}{\sigma_T} \frac{(1 + d_g k/dk_g)^2}{(k/k_g)(1 + d_g/d)}. \quad (4.95)$$

Burgess y colaboradores reportan que hay una discrepancia entre el análisis de estabilidad lineal dado arriba (que con los parametros usados en sus experimentos, se esperaría que fuera  $\Delta T = 14.9$  K, en este caso  $d_g = 0.0275$  cm) y su resultado experimental ( $\Delta T = 9.7$  K). En sus experimentos hay un

extremo del contenedor en el cual el liquido queda “pegado”, es decir no varía la altura de la capa de fluido en ese extremo, y conjeturan que este puede ser un factor determinante en la discrepancia, lo cual no se toma en cuenta en el análisis de estabilidad lineal bosquejado arriba. También llevaron a cabo mediciones de la inestabilidad para tres profundidades de la capa de aire y encontraron que la diferencia entre el  $\Delta T$  observado en el umbral de la inestabilidad y el valor que se predice teóricamente, cambia signos en  $F \approx 1/2$ . Específicamente, para  $d_g = 0.0275$  cm ( $F = 0.35$ ),  $d_g = 0.0206$  cm ( $F = 0.45$ ) y  $d_g = 0.0183$  cm ( $F = 0.65$ ), el  $\Delta T$  observado en el umbral estaba 30 % abajo, 10 % abajo y 30 % arriba del valor teórico, respectivamente. En el estudio realizado en [1] para el caso no invertido, se encontró que la dependencia del umbral de la inestabilidad con la forma del perfil de la interfase, era mínima para  $|F - 1/2|$  pequeños, y era considerable para  $|F - 1/2|$  grandes. La condición de que la interfase se mantuviera a la misma altura en las paredes laterales del contenedor, resultó ser crucial en la determinación de la forma de la interfase estable. La conjetura de Burgess, es que esta última condición debe explorarse para ver si eso explica la discrepancia mencionada en sus experimentos.

En la siguiente sección se reportan algunos resultados numéricos con el código construido, y perspectivas para el código que aún está en construcción.

# Capítulo 5

## Resultados Numéricos

Para el estudio de la convección producida por tensión superficial con el modelo de Swift-Van Hook

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{3D}{2} \frac{(1+F)h^2}{(1+F-Fh)^2} \frac{\partial}{\partial x} - h^3 \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{h^3}{B} \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} \right] &= 0 \quad (5.1) \\ &\equiv \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{J}(x,t)}{\partial x} = 0, \end{aligned}$$

resolvemos la ecuación con condiciones de frontera periódicos, usando el método de Tau en la base de los polinomios de Chebyshev. En este método, la minimización del residuo nos conduce a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias para los coeficientes  $a_0, \dots, a_{N-4}$ , específicamente

$$\dot{a}_n = -J_n^{(1)} \quad 0 \leq n \leq N-4, \quad (5.2)$$

donde  $J_n^{(1)}$  son los coeficientes de la expansión en términos de los polinomios de Chebyshev, de la primera derivada de la función  $J(x,t)$ . Las condiciones de frontera determinan los coeficientes restantes  $a_N, a_{N-1}, a_{N-2}$  y  $a_{N-4}$ , estos están dados por (4.42), (4.43), (4.44) y (4.45). La evolución temporal de los coeficientes la llevamos a cabo con el paquete CVODE para ecuaciones rígidas y no-rígidas, publicado en 1996 [5]. Resolvemos (5.1) y llevamos

acabo el análisis de estabilidad lineal alrededor de la interfase plana usando pequeñas perturbaciones  $h(x, t) = 1 + \eta(x, t)$  con  $\eta$  elegida principalmente como  $A \cos(\pi x)$ , con  $A = 0.01$  o más pequeña, aunque también usamos otras condiciones iniciales. El propósito de este análisis, del cual ya sabemos su resultado, fue probar si el código estaba trabajando correctamente. Se encontró el mismo umbral de la inestabilidad que el encontrado teóricamente  $D(1 + F) = 0.703$ . Sabemos que es necesario realizar un estudio matemático formal de la convergencia del método espectral aplicado a la ecuación (5.1) y no desestimamos su importancia. Siguiendo la teoría de estabilidad y convergencia expuestos por ejemplo, en el capítulo 6 del libro de Canuto, *et al* [4], planeamos realizar este análisis en un trabajo futuro.

De las corridas del código, se desprende un hecho ya observado por Van Hook, que los picos se forman para  $F > \approx 1/2$ , y los agujeros para  $F < \approx 1/2$ . Ejemplos de éstos se muestran en las figuras ?? y ??. Cerca de la  $F = 1/2$ , la diferencia entre pico y agujero es ambigua. También observamos que el tamaño de los picos y agujeros depende del número de Bond  $B$ , que da la magnitud relativa entre gravedad y tensión superficial. Tensiones superficiales grandes ( $B$  pequeñas) evita la formación de estructuras muy “picudas”, inversamente, tensiones superficiales pequeñas ( $B$  grandes) permite la formación de estructuras puntiagudas.

Con las condiciones de frontera periódicas, podemos hacer la evolución de la ecuación para la inestabilidad de Rayleigh-Taylor. En la figura se muestra ....

En el capítulo anterior, sentamos las bases para la reproducción de los resultados de la referencia [1], donde se mostró que las condiciones de frontera no-periódicas (deducidas aquí en detalle) usadas para el modelo de Swift-Van Hook, explican cualitativamente, las divergencias de resultados entre teoría y experimento en la convección inducida por tensión superficial (vease figura 3 de la referencia [1]). Para el estudio de la supresión de la inestabilidad de Rayleigh-Taylor, debermos encontrar las condiciones de frontera apropiadas para tal experimento. Creemos que estas son:

$$h(x = -1) = h_0 \quad , \quad J(x = \pm 1), \quad (5.3)$$

pero como en el otro extremo, el liquido no esta “pegado” a la pared lateral, necesitamos una condición más. Ésta puede ser la conservación de la masa (5.4), que dedujimos anteriormente, explicitamente

$$\sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^N \frac{a_n}{n^2 - 1} = 0. \quad (5.4)$$

# Capítulo 6

## Conclusiones y Trabajo Futuro

En este trabajo se realizó

1. Una revisión de la convección inducida por tensión superficial, que para capas muy delgadas de fluido conducen a la inestabilidad de ruptura.
2. Bosquejamos también la deducción del modelo de Swift-Van Hook, e hicimos una revisión de los métodos espectrales que usamos para resolver dicha ecuación.
3. Escribimos un código para resolver la ecuación de Swift-Van Hook con condiciones de frontera periódicas y dedujimos explícitamente las condiciones de frontera que mejor modelan el protocolo experimental.
4. Realizamos con este código, el análisis de estabilidad lineal, reproduciendo el valor teórico del umbral de esta inestabilidad.
5. Observamos que los picos se forman para  $F > \approx 1/2$ , y los agujeros para  $F < \approx 1/2$ , en concordancia con las observaciones.
6. Observamos que el tamaño de los picos y agujeros depende de  $B$ . Para  $B$  pequeñas se evita la formación de estructuras muy “picudas”, para  $B$  grandes, se permite la formación de estructuras puntiagudas.

El trabajo por realizar en el futuro es

1. Ver si, usando las condiciones de frontera no-periódicas deducidas en este trabajo, junto con la inclusión de no-uniformidades en el gradiente de temperatura y en el pegado del líquido en las paredes laterales, así como el análisis 2-dimensional llevan a una mejor concordancia entre los resultados experimentales y teóricos que los mostrados en ([1]).
2. Determinar las mejores condiciones de frontera que mejor se adapten al protocolo experimental en la supresión de la inestabilidad de Rayleigh-Taylor, implementarlas y realizar un análisis de estabilidad numérico para determinar si la conjetura de Burgess es correcta o no.

Las bases sentadas en esta tesis, nos permitirán realizar estos dos puntos aquí mencionados.

# Bibliografía

- [1] R. Becerril, S. Van Hook, J. Swift “The influence of interface profile on the onset of long-wavelength Marangoni convection” *Phys. of Fluids* **10**, 3230 (1998).
- [2] H. Bénard, “Les turbillons cellulaires dans une nappe liquide”, *Re. Gén. Sci. Pure Appl.* **11**, 1261-1271, 1309-1328 (1900).
- [3] John M. Burgess, Anne Juel, W. D. McCormick, J. B. Swift, y Harry L. Swinney. “Suppression of Dripping from a Ceiling” *Phys. Rev. Letts.* **86**, 1203 (2001).
- [4] C. Canuto, M. Hussaini, A. Quarteroni, T. Zang, “Spectral Methods, Fundamentals in Single Domains”, Springer Verlag (2006).
- [5] S. D. Cohen y A.C. Hindmarsh “Cvode, a stiff/nonstiff ode solver in C”. *Comput. Phys.* **10**, 138 (1996).
- [6] Susana Hernández, Alonso Espinoza, Francisco Guzmán y Ricardo Becerril, “Some applications of spectral methods to solve partial differential equations in physics” artículo en preparación para ser enviado a la *Rev. Mex. Fis. E* (sección enseñanza).
- [7] S. H. Davis and G. M. Homsy “Energy stability theory for free-surface problems: buoyancy-thermocapillary layers” *J. Fluid Mech.* **98**, 527 (1980).

- [8] D. A. Nield “ Surface tension and buoyancy effects in cellular convection”  
J. Fluid Mech. **19**, 341 (1964).
- [9] M. C. Cross, P. C Hohenberg, “Pattern Formation Outside of Equilibrium”, Rev. Mod. Phys. **65**, 851 (1993).
- [10] B. Kopbosynov and V. Pukhnachev. Fluid Mech. Sov. Res **15**, 11 (1986).
- [11] Paul Manneville, “Dissipative Structures and Weak Turbulence ”, Perspectives in Physics (1990).
- [12] J. R. Pearson, “On convection cells induced by surface tension”. J. Fluid Mech. **4**, 489 (1958).
- [13] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery, “Numerical Recipies in C”, Editorial Cambridge University Press, (1992).
- [14] Lord Rayleigh. “On convection currents in a horizontal layer of fluid when the higher temperature is on the under side” Phil. Mag. **32**, 529 (1916).
- [15] M.F. Schatz, S.J. Van Hook, W.D. McCormick, J.B. Swift y H.J. Swinney. “Onset of surface tension driven Bénard convection” Phys. Rev. Lett. **75**, 1938 (1995).
- [16] Strogatz, “Nonlinear dynamics and chaos” Westview (2000).
- [17] (a) J. Thompson, Proc. Glasg. Phil. Soc., vol 13, 464 (1882). (b) J. Thompson, “On certain curious motions observable at the surfaces of wine and other alcoholic liquors”, Phil. Mag. (Ser. 4) **10**, 330 (1855).
- [18] S.J. Van Hook, M.F. Schatz, W.D. McCormick, J.B. Swift y H.J. Swinney. “Long-wavelength instability in surface-tension driven Bérnard convection” Phys. Rev. Lett. **75**, 45 (1995)

- [19] S.J. Van Hook, M.F. Schatz, J.B. Swift, W.D. McCormick, y H.J. Swinney. “Long-wavelength surface-tension driven Bérnard convection: experiment and theory” *J. Fluid Mech.* **345**, 45 (1997).
- [20] E. H. Weber. *Ann. Phys. Chemie.* **94**, 447 (1855).
- [21] G. H. Wolf, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 444 (1970).