

Caos, Fluidos y Flujos

Luis Fernando Herrera Díaz*, Alfonso Conde**

RESUMEN

Desde hace aproximadamente 30 años, el mundo de la ciencia se revolucionó debido al nacimiento de un nuevo paradigma; a esta forma de ver el mundo se le conoce con el nombre de Teoría del Caos. En su corta vida, ya “ha tocado todas las ramas del conocimiento, incluyendo por supuesto la Ingeniería” dice Mora (1998). Es así como muchos de los reconocidos ingenieros, como Aris en el campo de los reactores químicos, Froment en catálisis heterogénea, Coppens, que investiga los fenómenos de difusión y reacción en las redes que presentan las Zeolitas, Julio Ottino en la mezcla de fluidos, han comenzado a replantear viejos esquemas a través de esta teoría. El presente artículo busca mostrar los principales conceptos en los que se basa la teoría del caos, a través de ejemplos sencillos y de mostrar principalmente dos de sus relaciones con la ingeniería química como son el flujo y la mezcla de fluidos.

ABSTRACT

During the last 30 years, the world of science has been revolutionized with the birth of a new paradigm: this form of seeing the world is known as The Chaos Theory. “In their short life it has already touched all the branches of knowledge, including Engineering” says Mora (1998). It is so that many of the will known engineers like Aris in the field of the chemical reactors, Froment in heterogeneous catalysis, Coppens who investigates the phenomena’s of diffusion-reaction in Zeolites, Julio Ottino in the mixing of fluids, have begun to improve old outlines through this theory. The present article seeks for to show the main concepts, in which the theory of chaos is based, through simple examples, showing mainly its relationships with chemical engineering, such as flow and mixing of fluids.

INTRODUCCIÓN

La forma que ha escogido la ciencia, y por tanto la ingeniería, para representar un fenómeno son los modelos, los cuales están contruidos por ecuaciones ya sean algebraicas o diferenciales; por esto gran parte de la formación de los científicos e ingenieros está dedicada a la resolución de

ecuaciones. Sin embargo, existen problemas en todo este esquema; primero, que no todas las ecuaciones diferenciales tienen solución analítica, y que son en su gran mayoría las ecuaciones diferenciales no lineales; segundo, los modelos para representar un fenómeno que ocurre en la naturaleza generalmente está construido con este tipo de ecuaciones. Finalmente, éstas presentan comportamientos extraños, que van desde el orden hasta el caos; de ahí el nombre que recibe la teoría que estudia dichos comportamientos.

Un fenómeno que reúne todas las características mencionadas anteriormente es el flujo de fluidos. Por la coexistencia de comportamientos laminares y turbulentos, el flujo de fluidos es a su vez de gran importancia en ingeniería química, ya que los procesos que involucran el flujo o mezcla de fluidos se encuentran presente en casi todas las operaciones y en todos los procesos, como en la producción de polímeros, pinturas, en la dispersión de agentes emulsificantes, suspensiones, etc.

Por otra parte, para el ingeniero químico, el concepto de flujo no es desconocido puesto que se encuentra al estudiar las ecuaciones de Bernoulli, la continuidad en los libros de mecánica de fluidos como en Crane (1992), la mezcla de fluidos en los procesos de transferencia de masa con los coeficientes de transferencia en Treybal (1991), los reactores químicos, a través de sus idealizaciones como el CSTR o mezcla completa, el PFR sin ningún tipo de mezclado, o las aproximaciones a través de los tiempos de residencia en Smith (1981), por nombrar algunos.

La relación que presenta el flujo de fluidos con el caos no se presenta únicamente con el número de Reynolds, puesto que las ecuaciones Navier – Stokes, encargadas de este modelo, presentan la no linealidad y el caos.

Además, Ottino (1994) encuentra que hoy en día el concepto de mezcla no tiene un uso general en todas las disciplinas; es así como los oceanógrafos y geofísicos utilizan el término para expresar remoción, los ingenieros que trabajan en polímeros,

*Ingeniero Químico, M. Sc.

**Ingeniero Químico, Ph.D, profesor Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Colombia.

como composición y los de procesos como agitación (concepto que se tratará en adelante).

Antes de entrar a dar una idea mejor acerca de qué es el caos, se presenta una pequeña definición sobre los sistemas dinámicos y cómo se relacionan con los modelos.

I. SISTEMAS DINÁMICOS

Cuando un modelo posee una variable que cambia en el tiempo, se dice que las ecuaciones que lo representan son un sistema dinámico. Dichos sistemas pueden ser discretos si cambian en períodos de tiempo finitos (años, meses, días, horas) y son representados por ecuaciones tipo algebraicas como se presenta en la ecuación (1)¹, por otra parte están los continuos representados por ecuaciones diferenciales como la ecuación (2). Dentro de estos últimos se reconocen los sistemas disipativos, caracterizados porque no mantienen su volumen en el espacio de fases, y los conservativos que contrario a los anteriores, sí conservan su volumen en el espacio de fases.

$$X_{n+1} = F(X) \tag{1}$$

$$\frac{\partial x}{\partial t} = F(x) \tag{2}$$

En el lenguaje de los sistemas dinámicos, X es un vector compuesto por todas aquellas variables que cambian en el tiempo; y se conoce como el vector de estado; la función F(X) es la ley de evolución que permite el cambio en el tiempo. Además si se integra un sistema dinámico, como la ecuación (2), se obtiene una función Φ denominada flujo, y se denota como:

$$x = \Phi(X) \tag{3}$$

De tal forma que se puede hablar de flujo únicamente para el caso de los sistemas dinámicos continuos. Como se puede ver en la figura 1(a), se presenta la trayectoria de una condición inicial llamada órbita sistemas dinámicos, y en la figura 1(b) se muestra un conjunto de órbitas o flujo del sistema.

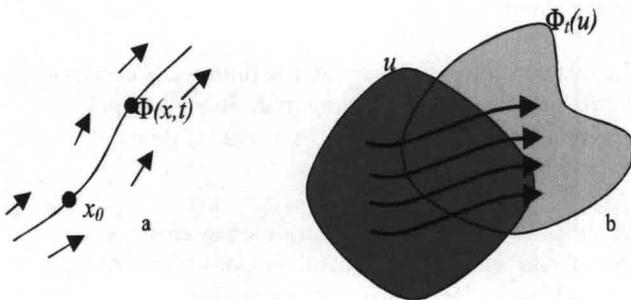


Figura 1. a) Órbita b) Flujo.

Es importante resaltar que dentro de los sistemas dinámicos conservativos se encuentran los sistemas hamiltonianos, los

cuales se caracterizan además por poseer una función H(X) denominada función de Hamilton o hamiltoniana, constante en el tiempo y que se relaciona con X² por medio de la ecuación (4)².

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial X_2}; \frac{\partial X_2}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial X_1} \tag{4}$$

Un ejemplo típico de estos sistemas es el caso del péndulo sin rozamiento, que se muestra en la figura 2.

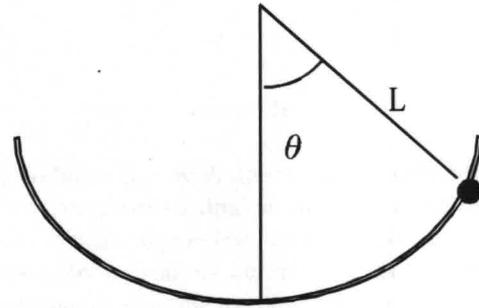


Figura 2. Esquema del péndulo sin rozamiento.

Las ecuaciones de dicho sistema, según J. Guckenheimer (1983), son:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= w \\ \dot{w} &= -\frac{1}{L} \text{sen } \theta \end{aligned} \tag{5}$$

con el hamiltoniano que en este caso representa la energía del sistema, dado por la ecuación:

$$H = \frac{w^2}{2} + (1 - \text{cos } \theta) \tag{6}$$

Integrando el sistema de ecuaciones 5 se obtiene el siguiente diagrama de fases:

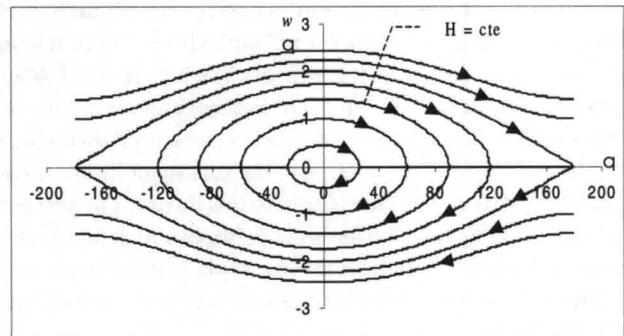


Figura 3. Diagrama de fases para el péndulo sin rozamiento. Cada línea corresponde a una función de Hamilton que indica la energía del sistema y es igual a una constante.

¹ La función F varía según el sistema de ecuaciones.

² Para el caso de X = {X₁, X₂}.

³ H varía según el sistema de ecuaciones. Además, estos sistemas son muy importantes en los sistemas que involucran flujo de fluidos.

II. DETERMINISMO Y PROBABILISMO

En su búsqueda de conocimiento, el hombre ha encontrado en las leyes de la física el mejor sustento, pues con ellas ha podido relacionar sucesos del pasado con los que ocurrirán en el futuro, como el poder predecir un eclipse conociendo la posición del sol, la luna y la tierra en un instante pasado; a dichos sistemas se les llama determinísticos, y se caracterizaban por poseer pocos grados de libertad. Uno de sus mayores exponentes fue Laplace (citado por James P. Crutchfield, J. Doyné Farmer, Norman H. Packard y Robert S. Shaw 1990), quien expresó en 1776: *“Una inteligencia que conociera todas las fuerzas que animan a la naturaleza, así como la situación respectiva de los seres que la componen,... podría abarcar en una sola fórmula los movimientos de los cuerpos más grandes del universo y los del átomo más ligero; nada le resultaría incierto, y tanto el futuro como el pasado estarían presentes a sus ojos”*.

Por otra parte, existían otros sistemas que poseían gran cantidad de grados de libertad, como los movimientos atmosféricos, que se les consideraba probabilísticos debido a que sólo se podía conocer un estado futuro con cierta seguridad. Sin embargo, existen otros sistemas anómalos que parecían saltaban del determinismo al probabilismo, como el flujo de fluidos debido a la presencia de los regímenes laminar y turbulento.

Desde hace ya varios años se rompió este viejo paradigma. La primera vez fue en 1927, con Heisenberg y su principio de incertidumbre. La segunda a finales del siglo XIX, cuando Henri Poincaré descubre la sensibilidad a las condiciones iniciales como se puede ver en Green (1996) que recoge muy bien dichos trabajos. Sin embargo, nadie se preocuparía realmente de este fenómeno hasta que Edward Lorenz (23,24), meteorólogo del MIT, re-descubre dicho efecto en sistemas de ecuaciones no lineales hacia el año 1960. Por otra parte, Mandelbrot (27,28) trabajaba en el centro de investigaciones Thomas J. Watson de la IBM, y al estudiar los comportamientos anómalos que se presentaban en modelos económicos, llega a reconocer la auto-repetición a cualquier escala encontrando el mundo de los fractales. Es así como todos estos aportes permiten el nacimiento de la que hoy se conoce como la teoría del caos.

Esta teoría ya ha alcanzado tal importancia que J. Gleick (1982) dice: *“El siglo XX será recordado por tres cosas: la relatividad, la mecánica cuántica y el Caos; la relatividad que elimina la ilusión newtoniana del espacio-tiempo absoluto; la teoría cuántica que elimina el sueño newtoniano de los procesos medidos y controlados, y el caos que elimina la fantasía laplaciana de la predicción determinista.”*

La teoría del caos muestra simplemente algo que desde la física de Newton se mantenía relegado: la calidad de la información. Por ejemplo, cuando se calcula la trayectoria de una bala en el aire nunca se consideran efectos como la velocidad del viento o la incidencia de la gravedad de la luna, pero, ¿qué sucedería si al introducir dichos efectos se obtuvieran resultados totalmente diferentes? Comportamientos como éstos

se consideran anómalos y se presentan en muchos modelos matemáticos como los atmosféricos, para los cuales se creía que la falta de precisión en las predicciones se solucionaría al crear ordenadores mucho más potentes que permitieran hacer los cálculos con mayor exactitud.

Sin embargo, la teoría del caos ofrece una explicación a todos estos comportamientos anómalos que no se habían podido entender a partir de la calidad de información y la naturaleza de las ecuaciones. Primero, al intentar hacer cualquier medición siempre se estará sujeto a tener un margen de error; segundo, cuando dicha información se alimenta a un sistema dinámico no lineal, el error se incrementa en forma exponencial con cada cálculo que se haga⁴, de tal forma que después de cierto período de tiempo los resultados que se obtienen están totalmente desfasados de lo que realmente sucede, presentando además un comportamiento aparentemente aleatorio. Estas dos causas hacen que a valores extremadamente cercanos de condiciones iniciales se obtengan respuestas totalmente diferentes. A dicho fenómeno se le conoce con el nombre de sensibilidad a las condiciones iniciales, y se ha recogido en lo que se conoce con el nombre de efecto mariposa. Según Lorenz (1979), *“el aleteo de una mariposa en Pekín hoy, puede causar un huracán en Nueva York el próximo mes”*⁵.

III. SISTEMAS DINÁMICOS DISCRETOS Y LA ECUACIÓN CUADRÁTICA

Como se indicó anteriormente, la forma que poseen los sistemas dinámicos discretos está dada por la ecuación (1). En ingeniería química se encuentran ecuaciones que presentan esta forma en operaciones como la adsorción en un arreglo de cascada a contracorriente (véase figura 4), para la cual el balance de soluto para cada etapa está dado por la ecuación (7).

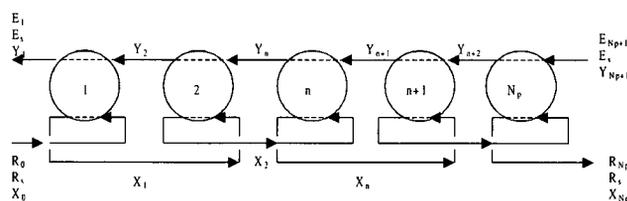


Figura 4. Cascada a contracorriente de varias etapas.

$$X_{n+1} = \frac{Y_{NP+1}}{m} - AX_{NP} - AX_n \quad (7)$$

⁴ Se dice que el incremento en el error es exponencial debido a la relación que existe entre las ecuaciones lineales y las no lineales dadas a través del teorema de Hartman-Grobman (véase Guckenheimer (1986; 13), el cual dice que si los valores propios de la linealización de un sistema en un punto X son diferentes de cero o imaginarios puros, entonces la linealización del sistema es topológicamente equivalente en alguna vecindad del punto de equilibrio X. Partiendo de dicha equivalencia y sabiendo que la solución de un sistema lineal dado como: $\frac{dX}{dt} = AX$ es igual a $X(X_0, t) = e^{tA} X_0$ se puede ver que tomando dos condiciones iniciales distintas, sus flujos se separarán en forma exponencial.

⁵ El efecto mariposa, aun cuando es una exageración, recoge muy bien el concepto de desviación a las condiciones iniciales.

Donde:

$$A = R_j/mE_s$$

$$m = Y_{n+1}/X_{n+1}$$

R = Flujo de disolvente que no se difunde en la fase R.

E = Flujo de disolvente que no se difunde en la fase E.

X = Concentración de A en la fase R.

Y = Concentración de A en la fase E.

- Estos Sistemas Pueden Presentar Caos así:

Un sistema dinámico discreto que presenta muy bien todos los fenómenos que conducen al caos, y que se encuentra en casi todos los libros sobre sistemas dinámicos y caos, es la ecuación cuadrática [ecuación (8)], conocida también como la ecuación logística, cuyos usos varían desde la modelación de población de plagas por entomólogos hasta el cambio de frecuencia que presentan algunos genes por genetistas.

$$X_{n+1} = \alpha X_n (1 - X_n) \tag{8}$$

Para demostrar el carácter caótico de esta ecuación, se toman varios valores de α , dos valores iniciales $X_{0(1)}$, $X_{0(2)}$ y se evoluciona el sistema hasta X_{100} (figura 5). Cuando α toma el valor de 2 y $X_{0(1)} = 0,2$ y $X_{0(2)} = 0,8$ (figura 5 a) se encuentra al poco tiempo que los dos resultados convergen a una respuesta $X_{100} = 0,5$. Se habla entonces de que existe un punto fijo atractor en 0,5 pues todos los valores iniciales que se tomen conducirán finalmente a él. Si se aumenta $\alpha = 3,2$, y con fines demostrativos se toman $X_{0(1)} = 0,2$ y $X_{0(2)} = 0,200001$, se observa que la tendencia oscila entre dos valores 0,513 y 0,799 (figura 5 b).

Cuando se encuentra que un valor se repite después de cierto tiempo se le llama un punto periódico, cuyo período es definido por el número de puntos que están en el ciclo. Se puede observar además que para los valores de $\alpha = 2$ y $\alpha = 3,2$ el período cambia de 1 a 2; a este tipo de cambio se le conoce con el nombre de duplicación de período.

Si α es 3,5, se presenta una nueva duplicación de período cuyos valores son 0,500; 0,875; 0,383; 0,827 (figura 5 c). Si α es 3,63, se duplica nuevamente el período y los valores son 0,305; 0,769; 0,643; 0,833; 0,505; 0,907 (figura 5 d). Se observa, como sería lógico pensar, que al tener las dos condiciones iniciales bastante cerca, la respuesta final es la misma. Sin embargo, en la medida en que α se acerca a 4, el sistema duplica sus períodos rápidamente hasta que al llegar a 4 la periodicidad se pierde. Los resultados en cada iteración se diferencian cada vez más hasta llegar el momento en que pareciera que cada resultado no tuviera nada que ver con el anterior, sino que fuesen colocados simplemente al azar; se dice entonces que el sistema es aperiódico. Si se toman valores de $X_{0(1)}$ de 0,2 y $X_{0(2)} = 0,2000000001$ (mil veces más cercanos que los anteriores) se encuentra que $X_{100(1)} = 0.8755$ y $X_{100(2)} = 0,2587$, los cuales están separados por una diferencia del 70%. Si un sistema se comporta de esta manera se dice entonces que es caótico (figura 5 e).

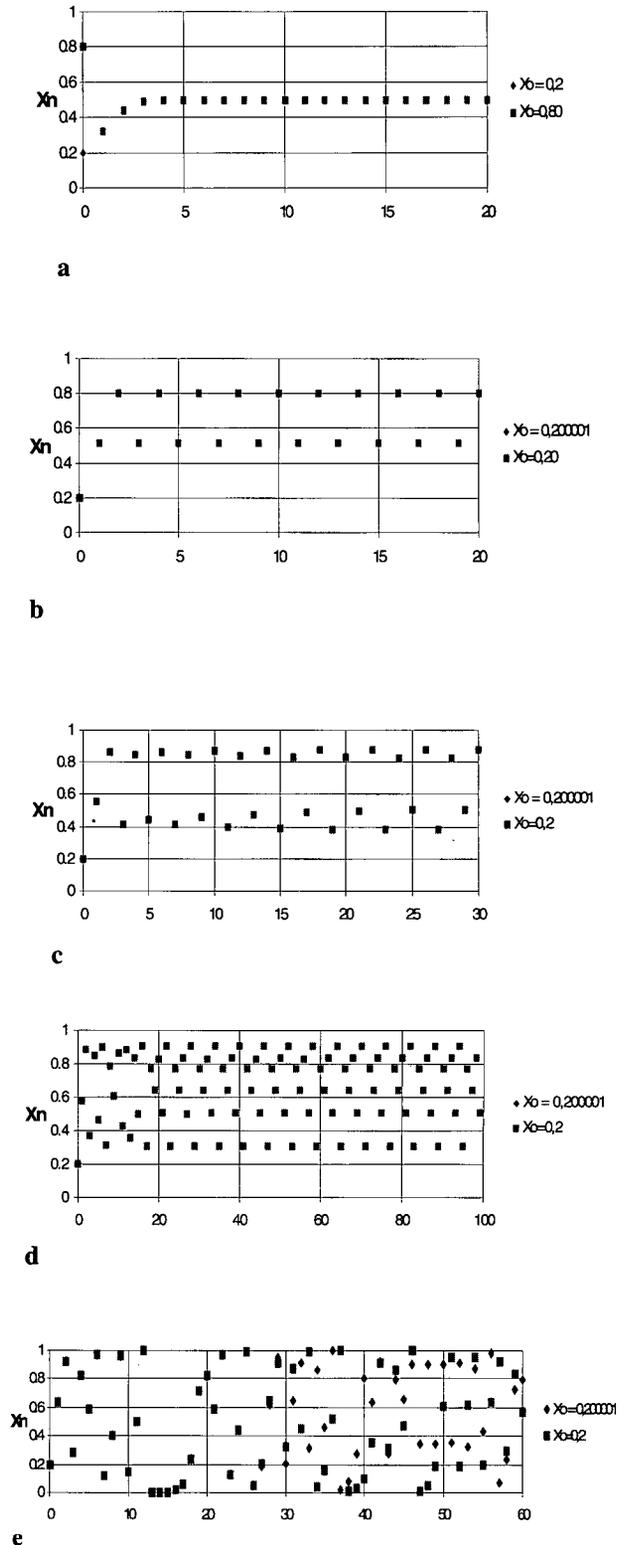


Figura 5. Gráficas de número de iteraciones vs. X_n para la ecuación cuadrática.

Con el fin de observar mejor el comportamiento de dichos sistemas se acostumbra a graficar los valores del parámetro α vs. la tendencia de los últimos valores de X_n . Dicha gráfica se conoce con el nombre de diagrama de bifurcación.

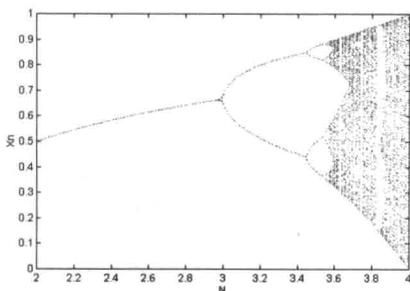


Figura 6. Diagrama de bifurcación para la ecuación logística. En el intervalo $a \in [2, 2.95]$ se encuentra que con todos los valores $(0, 1)$ iniciales se tiende a una sola respuesta, llamado punto fijo. En $a = 2.96$, el comportamiento de la ecuación cambia drásticamente ya que pasa de un punto fijo a un ciclo de período 2, a dicho punto se le llama punto de bifurcación. $a \in [2.96, 3.43]$ ciclo de período 2, $a \in [3.43, 3.54]$ ciclo de período 4, $a > 3.54$ caos.

En dichos diagramas se puede observar mejor cómo la duplicación de períodos conduce al caos. Sistemas con duplicación de períodos se han encontrado en el comportamiento de un CSTR, para reacciones exotérmicas y endotérmicas (Kahlert, Rossler y Varma, 1981).

Existen, sin embargo, otras formas de equilibrio, como el sistema depredador-presa, cuyas ecuaciones están dadas en (9).

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= (A - BY)X \\ \frac{dY}{dt} &= (CX - D)Y \end{aligned} \quad (9)$$

Donde:

X es proporcional a la cantidad de presas.

Y es proporcional a la cantidad de depredadores.

A, B, C, D son constantes del sistema.

Tomando como especie depredadora los linces y la depredada los conejos, si en un determinado momento se incrementa el número de linces, éstos aumentarán su consumo de conejos hasta que al disminuir el alimento, los linces empiezan a morir, permitiendo así el crecimiento de conejos; así, en un tiempo futuro, existirá un equilibrio dinámico entre la cantidad de linces y de conejos. A esta forma de estabilidad se le conoce con el nombre de ciclo límite (véase J. Briggs y F. D. Peat, 1994).

Con el fin de ilustrar el ciclo límite, para este sistema se tomó como condición inicial $X_0 = 19, Y_0 = 30$ y los parámetros $A = 0, 1, B = 0, 05, C = 0, 1, D = 1$, obteniendo de esta forma la figura 7.

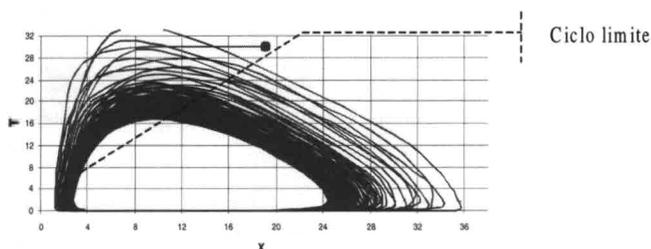


Figura 7. Ciclo límite para el sistema depredador-presa. El punto indica la condición inicial.

Cuando una bifurcación ocurre de punto fijo a ciclo límite es llamada bifurcación de Hopf. Dicho tipo de bifurcaciones se presenta en sistemas de ecuaciones como los de Van Der Pol, utilizada en circuitos eléctricos, como lo presenta J. Guckenheimer (1983).

Ante este fenómeno, “el caos”, surge un sentimiento de desconsuelo, ya que a pesar de tener las ecuaciones y sus condiciones iniciales, no podemos conocer exactamente un estado futuro.

El sistema de ecuaciones estudiado por Edward Lorenz (Sparrow, 1982), que permitió analizar el fenómeno del caos, lo obtuvo al intentar modelar el comportamiento atmosférico debido a una diferencia de temperaturas (ecuación).

Sin embargo, al analizar el sistema partiendo de múltiples estados iniciales reconoce su naturaleza globalmente estable, es decir que aun cuando cambios mínimos en las condiciones iniciales dan discrepancias grandes en los valores finales de iteración, éstos siempre se encuentran en una región del espacio de fases, como si fuera un imán que recogiera todas las trayectorias a una sola región; por tal razón se denominó atractor, y como dicha figura presentaba formas extrañas, se denominó finalmente atractor extraño⁶.

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= \sigma(Y - X) \\ \frac{dY}{dt} &= sX - Y - XZ \\ \frac{dZ}{dt} &= XY - bZ \end{aligned} \quad (10)$$

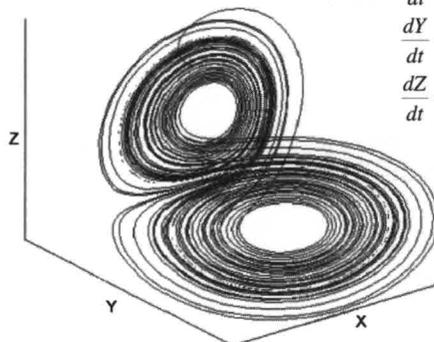


Figura 8. Atractor extraño de Lorenz.

Donde:

X es proporcional a la velocidad de ascenso del aire.

Y es proporcional a la diferencia de temperaturas entre el aire que asciende y el que desciende.

Z es proporcional a la desviación del gradiente lineal de temperatura.

t es el tiempo.

$\sigma = 10, s = 28, b = 8/3$ son constantes propias del sistema.

El hecho de que dichos sistemas presentan estabilidad global permitió dar nuevas esperanzas a nuestra capacidad de predecir el comportamiento futuro. Por tal razón, el tratamiento de los sistemas dinámicos ha virado, de conocer un estado futuro a partir de una ecuación diferencial bajo ciertas condiciones iniciales, al estudio cualitativo de la ecuación a través del flujo y las regiones estables e inestables.

⁶ Dicha expresión fue utilizada por primera vez por James Gleick (1988: 141) en Ruelle David y Takens Floris (1971).

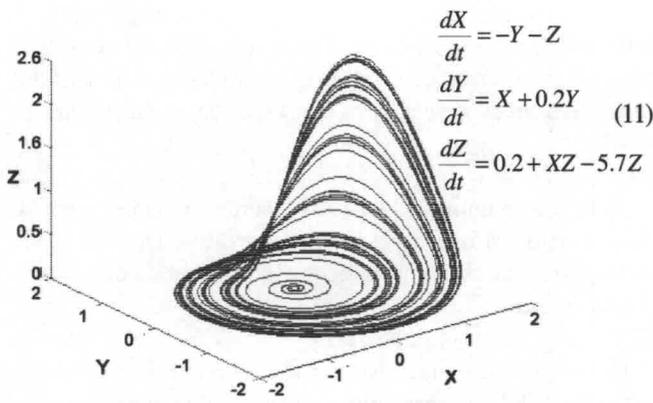


Figura 9. Atractor de Rössler. Es otro atractor extraño, el cual se ha encontrado en el flujo de fluidos y algunas cinéticas de reacción.

IV. FRACTALES

Dentro del lenguaje del caos, además del concepto de atractor extraño, surge la palabra fractal, creada por Benoit Mandelbrot (1977, 1987). Los fractales se pueden describir como las figuras que resultan de la evolución de un sistema dinámico caótico.

Dichas figuras poseen dos características principalmente; la primera es la auto-similitud (véase figura 10), es decir que a cualquier tamaño de escala se encontrará la misma figura siempre, y la segunda, que poseen dimensión no entera.

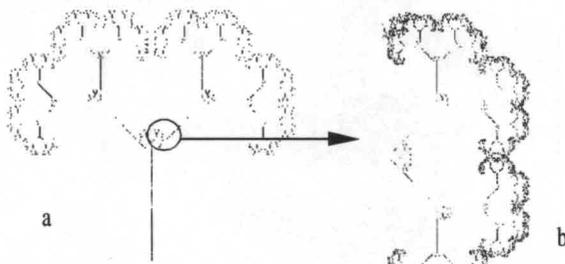


Figura 10. Un árbol fractal. a) Todo el árbol; b) la parte derecha del árbol interno ampliada. Se puede observar la auto-similitud al comparar a) y b), esta última con un mayor grado de acercamiento

Para introducir el concepto de dimensión no entera, es conveniente comenzar por definir el concepto de dimensión. Si se le pregunta a una persona por cuántas dimensiones tiene un cuadrado, instantáneamente responde que dos. Al pedirle una explicación al porqué de su respuesta, agrega: “el cuadrado tiene dos dimensiones porque tiene largo y ancho”, y a partir de esta respuesta considera que ya todo está dicho acerca del tema. Lo que sucede realmente es que nunca se piensa en qué significa el largo y el ancho.

Cuando se asigna largo, alto y ancho a un objeto o a una figura, lo que realmente se está construyendo es una estructura vectorial con tres vectores linealmente independientes, los cuales permiten

definir un espacio a través de su combinación lineal. En el caso del cuadrado pueden definir dos vectores $X_1 = \{1,0\}$ y $X_2 = \{0,1\}$ a los que se les conoce como largo y ancho. Finalmente se puede definir la dimensión como el número de vectores linealmente independientes, con los cuales se puede crear un espacio. De acuerdo con esta definición, los valores que pueden asignarse a la dimensión son siempre enteros positivos.

Una vez comprendido el concepto de dimensión, se puede introducir la noción de dimensión fractal, a través del conjunto de Cantor. Éste consiste en tomar una línea recta de longitud 1, dividirla en tres partes cada una de 1/3, y posteriormente eliminar el segmento interior. Este mismo sistema se aplica a cada uno de los dos fragmentos restantes, y así sucesivamente hasta el infinito (véase figura 11).

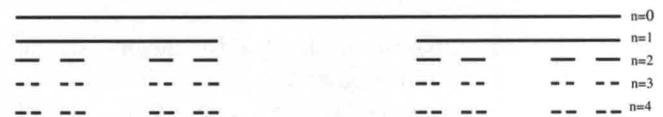


Figura 11. Conjunto de Cantor.

Se demostró matemáticamente que la cantidad de puntos que aparecen en la iteración $n = \infty$, es la misma que la que tendría una línea normal. Surgió entonces la duda, ¿qué dimensión tiene en conjunto de puntos de la iteración $n = \infty$, si por un lado es casi una línea que tiene dimensión uno y por otro está constituida de puntos cuya dimensión es cero? Para resolver dicha pregunta Mandelbrot propuso calcular una dimensión de la siguiente manera, se divide la figura en ϵ partes y se cuenta cuántas de esas divisiones están siendo ocupadas por la figura (N), de tal forma que la dimensión fractal se calcula como:

$$D = \frac{\log N}{\log \epsilon} \quad (12)$$

Donde:

N es el número de partes que quedan de la figura original.
 ϵ es el número de partes en los que se divide la figura original.

Calculando la dimensión fractal para el conjunto de Cantor se tiene entonces lo siguiente: se divide la figura en tres partes, luego $\epsilon = 3$, de las cuales sólo dos son ocupadas por una línea recta, es decir, $N = 2$ como se ve en la figura 12. Es así como la dimensión fractal del conjunto de Cantor es:

$$D = \frac{\log 2}{\log 3} = 0,63$$

Es decir, no es un punto de dimensión cero ni es una línea de dimensión uno.



Figura 12. Cálculo de la dimensión fractal para el conjunto de Cantor. $\epsilon = 3$ y $N = 2$.

Finalmente se puede entender el concepto de la dimensión fractal como una forma de cuantificar el grado de irregularidad, o escabrosidad de un objeto, que se encuentra construido en un espacio de dimensión n .

⁷ Ruelle, físico que estableció la necesidad de la existencia de los atractores extraños, los describió como fractales aun cuando no sabía que dichas figuras existieran (véase VII. Flujo de fluidos a través del caos).

¿Pero cuál es la importancia de los fractales? Al ver la distribución de poros en una partícula, se encuentra que no todos ellos tienen el mismo tamaño, que no son perfectamente cilíndricos, que existen poros dentro de poros, y éstos a su vez dentro de otros, indicando que más que parecerse a un cilindro (geometría que se tomaba como base para algunos modelos), tiene características fractales. En la actualidad, Coppens y Froment (1995) ya han presentado modelos de poro fractal en partículas catalíticas con el fin de calcular la tortuosidad máxima de la pastilla catalítica. En el campo de los fluidos, Beniot Mandelbrot encontró que la turbulencia también tiene características fractales, ya que en el flujo se presentan remolinos dentro de remolinos (véase A. Mora, 1998).

V. ¿QUÉ PRODUCE EL FLUJO Y MEZCLADO?

Un flujo puede ser inducido de diferentes formas; por diferencia de presión, diferencia de temperatura, o por la acción de un esfuerzo cortante. Por otra parte, el mezclado se puede entender como el resultado del estiramiento y plegamiento de líneas de materia.

Una forma de visualizarlo es imaginando el movimiento que describe la esencia que un panadero agrega a la masa; inicialmente el panadero hace un “charco” de esencia en la masa, luego amasa la harina estirándola y doblándola sobre sí misma, creando líneas de esencia denominadas líneas de materia que en cada estirado y doblado disminuyen su espesor, a medida que se mezclan, hasta ser imperceptibles al ojo humano; se dice entonces que la esencia está totalmente mezclada con la harina.

Dicho proceso ha resultado ser lo bastante complejo como para poder atacarlo desde el punto de vista teórico; por tal razón la ciencia y la ingeniería han tenido que hacer desarrollos experimentales que permitan un acercamiento estadístico al fenómeno. Sin embargo, dice Ottino (1994) que esto particulariza el estudio de manera tal, que no se pueden sacar conclusiones de índole general.

VI. ACERCAMIENTOS A LA MEZCLA DE FLUIDOS

Las bases estadísticas se fundamentan en el análisis para dos componentes, uno en mayor proporción que el otro y ambos con igual tamaño de partícula, de manera tal que una mezcla perfecta sigue una distribución binomial, la cual se expresa como una función de probabilidad dada en la ecuación (13) (por la presencia de sólo dos tipos de partículas). Si se comparan entonces los dos primeros momentos estadísticos⁸ [la media y la varianza, ecuación (14)] de la distribución binomial y los de una mezcla cualquiera, se puede estimar el grado de mezclado obtenido.

$$P(x) = \frac{n!}{(n-b)!b!} p^b (1-p)^{n-x} \tag{13}$$

$$\sigma^2 = \frac{p(1-p)}{n} \tag{14}$$

Donde:

- P* es la probabilidad de tener una mezcla de composición *x*.
- b* es el número de partículas del componente en menor proporción.
- n* es el número de partículas totales en la mezcla.
- p* es la fracción total de las partículas en menor proporción dentro de la mezcla.
- x* está definida como (*b/n*).

De este marco de trabajo nacen tres conceptos importantes en la mezcla de fluidos: uniformidad de mezclado, entendida como el grado de homogeneidad que presenta la mezcla en conjunto; escala de segregación, la cual mide qué tan grandes son estas islas, y la intensidad de segregación, que indica la desviación de la concentración entre una isla y el total de la mezcla. Sin embargo, dichas medidas tienen un problema intrínseco: la escala del examen. Si se toma una mezcla que a la vista sea homogénea y se pasa a través de un microscopio, se encuentra que dicha homogeneidad se pierde y aparecerán islas e islas dentro de estas mismas según se continúe aumentando la escala de examen (véase figura 13). La pregunta sería entonces, ¿Qué grado de examen se debe utilizar para analizar una mezcla? Todo dependerá entonces de la razón por la cual se mezcla, es decir, si se necesita por ejemplo una pintura, el grado de mezclado que se requiere como mínimo es el que a simple vista permita ver la pintura totalmente homogénea, así sea que a menor escala (microscopio, por ejemplo) aparezcan islas. Por otro lado, si la mezcla se utiliza para la protección de rayos ultravioleta (*uv*) como es el caso de los polímeros, aunque aparentemente esté homogénea a simple vista, permite el paso de los *uv*. Por tal razón, un buen grado de mezclado se dará en el momento en que las partículas de protector estén tan unidas que un rayo *uv* no pueda pasar entre ellas.

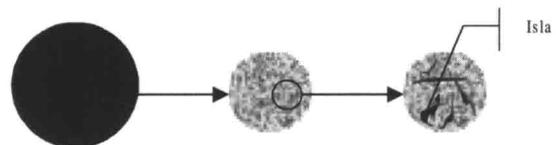


Figura 13. Uniformidad de la mezcla y escala del examen. a) homogénea, b) aparición de pequeñas diferencias de concentración, c) islas de mayor concentración.

Pese a esos problemas intrínsecos, existen trabajos basados en el acercamiento estadístico, como los de Best y Tomfohrde (1959) que desarrollan un método para medir la dispersión del negro de humo en polietileno; Weldenbaum (1958), que caracteriza la distribución de un sólido en un líquido por medio de la varianza o la media, y Lacey (1954), que define un índice de mezclado basado únicamente en la estadística.

⁸ Los momentos de una variable aleatoria *X* son los valores esperados de ciertas funciones de *X*. Éstos forman una colección de medidas descriptivas que caracterizan la distribución de probabilidad de *X*, de tal forma que el primer momento es conocido como la media, el segundo como la varianza, el tercer momento es la asimetría, etc.

Al buscar una aproximación teórica a la mezcla de fluidos, se deben tener en cuenta, primero, la naturaleza del fluido, y segundo, el movimiento que éste desarrolla, es decir el flujo. Dichos conceptos están relacionados de la siguiente manera:

El estudio de los fluidos se basa principalmente en su reología, es decir, la relación que existe entre la aplicación de un esfuerzo cortante τ y la velocidad de deformación. Cuando un esfuerzo cortante actúa sobre un fluido, éste se deforma como se presenta en la figura 14; se puede tener entonces una medida de su deformación, midiendo el grado de desplazamiento en x y su relación con la distancia en y . Dicha relación se designa como (γ) [ecuación (15)].

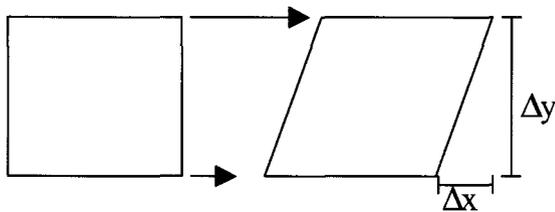


Figura 14. Concepto de gama (γ): Cuando se somete un cuerpo a un esfuerzo cortante, éste hace que una parte del cuerpo se desplace con mayor rapidez que otra, lo cual ocasiona una deformación. Dicha deformación es necesaria para llevar un buen proceso de mezcla.

$$\gamma = \frac{\Delta x}{\Delta y} \quad ; \quad \gamma = \frac{dx}{dy} \tag{15}$$

Cuando la relación entre el esfuerzo cortante y la variación de la deformación con el tiempo es lineal, se dice que el fluido es newtoniano [ecuación (15)]⁹, y la constante de proporcionalidad es conocida como la viscosidad (μ).

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{dv_x}{dy} \tag{16}$$

El flujo de fluidos se rige por la ecuación de transferencia de *momentum*, la cual resulta de un balance de fuerzas sobre un elemento diferencial de fluido, como se explica en Bird R. Byron, Stewart Warren E., Lightfoot Edin N. (1964), y cuya ecuación es [ecuación (17)]¹⁰:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \right] = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho g \tag{17}$$

Para un fluido newtoniano, la ecuación (17) se puede escribir, según Bird R. Byron, Stewart Warren E., Lightfoot Edin N. (1964), así¹¹ :

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \right] = -\nabla P + \mu (\nabla^2 \mathbf{v}) + \rho g \tag{18}$$

Donde:
 μ es la viscosidad del fluido. ρ es la densidad del fluido.
 P es la presión. g es la gravedad.
 v es el componente de la velocidad, en x , y o z . τ es el esfuerzo cortante.

Otros trabajos que poseen el mismo enfoque teórico son Taylor (1934), donde se hace un análisis de la mezcla como el estiramiento de gotas; Browthman, Wollan, Feldman (1945), quienes proponen cinéticas de área interfacial, y Eckart (1948), que estudia la mezcla por temperatura en los océanos.

VII. FLUJO DE FLUIDOS A TRAVÉS DEL CAOS

A partir del surgimiento del caos han aparecido trabajos que buscan una aproximación a través de esta teoría, debido a que presentan esa transición entre el orden (laminar) y el caos (turbulencia).

En la década de los cuarenta, Landau¹² imaginaba el camino a la turbulencia como una secuencia de bifurcaciones; más tarde, en 1948, Eberhard Hopf, basado en esta idea, crea un modelo matemático en el cual las bifurcaciones que conducen a la turbulencia son dinámicas. Su secuencia consistía básicamente en la siguiente serie de pasos: a) a velocidades bajas de flujo se encontraba un punto fijo, es decir que si se alteraba en algo el flujo, rápidamente éste regresaba a su velocidad normal; b) al aumentar la velocidad ocurría una bifurcación a un ciclo límite; c) al continuar aumentando, se encontraba un toro de tres dimensiones; d) si se seguía aumentando la velocidad, aparecían toros de mayor dimensión. Harry Swinney y Jerry Gollut, diez años después, estudian el flujo dentro de dos cilindros concéntricos¹³, con el fin de corroborar las ideas de Landau y Hopf, encontrando que la secuencia de bifurcaciones que proponía Hopf no era correcta, pues al llegar a un toro de tres dimensiones y seguir aumentando la velocidad, éste se descomponía en una dinámica más compleja en la que continuamente se creaban y destruían toros de tamaños más pequeños. Por otra parte, las ideas de Landau estaban cimentadas en la acumulación de ritmos competidores, algo como pequeños sonidos que separados tienen un ritmo, pero que al unirlos son sólo ruido ininteligible. En 1971, David Ruelle, junto con Floris Takens, proponen que con sólo tres movimientos independientes se puede generar la turbulencia que intentaba explicar Landau con su idea de acumular frecuencias. Ruelle propone además que el movimiento desarrollado en la turbulencia debe estar encerrado en el espacio de fases por un atractor extraño. Dicho atractor debía tener, sin embargo, una característica muy importante, pues como una órbita podría estar encerrada en una región del espacio de fases, sin nunca repetirse y nunca cruzarse a sí misma, para producir esto ellos concluyeron que debería ser una línea infinitamente larga pero encerrada en una región finita. Lo que ellos no sabían

⁹ La variación de gama con respecto al tiempo se puede escribir como:

$$\dot{\gamma} = \frac{d(dx/dy)}{dt} \Rightarrow \frac{d(dx/dt)}{dy} \Rightarrow \frac{dv_x}{dy}$$

¹⁰ Donde: $\nabla \cdot \mathbf{s} = \sum_i \delta_i \frac{\partial s_i}{\partial x_i}$ y $\text{div}(\boldsymbol{\tau}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \sum_i \delta_i \left\{ \sum_j \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right\}$ en coordenadas rectangulares.

¹¹ Donde: $\nabla^2 \mathbf{s} = \sum_i \delta_i \frac{\partial^2 s_i}{\partial x_i^2}$ en coordenadas rectangulares.

¹² Científico ruso que ganó el premio Nobel por sus estudios en el helio super fluido.

¹³ G. I. Taylor había estudiado ya este mecanismo de flujo en 1923, encontrando las corrientes denominadas Couette-Taylor.

era que más adelante, en 1975 Mandelbrot crearía la palabra fractal. En 1974, después de que Gollub y Swinney se reunieran con Ruelle, concluyen que las ideas de Landau eran equivocadas y aceptan las de Ruelle. Más adelante, con la confirmación de la existencia de atractores extraños, las ideas de Ruelle toman mayor solidez.

VIII. ESTUDIOS

Dentro de los estudios que se llevan a cabo en el campo del flujo de fluidos se presentan principalmente dos ramas: el fenómeno de la turbulencia y la mezcla de fluidos.

Dentro de la turbulencia, uno de los estudios que más llama la atención es la turbulencia anormal, es decir turbulencia que se presenta a bajas velocidades. Para analizar este fenómeno G. Ahlers y R. P. Behringer (1978) tomaron un fluido y lo colocaron entre dos placas paralelas, induciendo un flujo por diferencia de temperaturas entre las placas (véase figura 15a); dicho movimiento consistía en la formación de rodillos debido a la ascensión de fluido de menor densidad y el descenso de otro de mayor densidad.

Para visualizar flujo utilizaron rayos de luz que pasaban a través de los cilindros, como indica la figura, de forma tal que los rodillos actuaran como lentes, teniendo así un patrón de líneas claras y oscuras, que indicaban la posición de cada uno de los rodillos. De esta forma, en régimen turbulento las líneas claras y oscuras (véase figura 15b) se rompían o unían, moviéndose erráticamente. A este tipo de turbulencia donde siempre subsiste una organización se llama turbulencia de fase. Lo que G. Ahlers y R. P. Behringer descubrieron fue que cuando el fluido tiene número de Prandtl [NPr , ecuación (19)], cercano a la unidad dicha turbulencia aparece a velocidades de flujo muy bajas, lo cual rompe con el esquema de que sólo a velocidades altas se produce turbulencia.

En 1981, E. D. Siggia y A. Zippelius proponen que la inestabilidad de los rodillos es debida a la presencia de flujos transversales entre ellos. En 1986, Alain Pocheau y sus colaboradores inducen un flujo transversal en un fluido con NPr lejano a la unidad, con el fin de corroborar las ideas de E.D. Siggia y A. Zippelius, encontrando una respuesta afirmativa. Actualmente se estudia este fenómeno en los gases, donde el flujo transversal es creado aparentemente por la inestabilidad propia del sistema.

$$NPr = \frac{C_p \mu}{k} \tag{19}$$

Donde:

C_p : capacidad calorífica.

μ : viscosidad.

k : conductividad térmica.

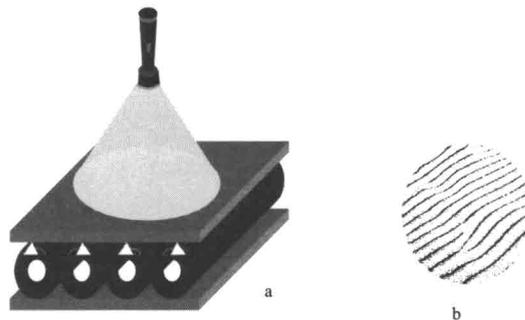


Figura 15. a) Rodillos formados por el flujo entre dos placas a diferente temperatura. b) Esquema de las regiones claras y oscuras, que indican la posición de los cilindros. Si ocurre turbulencia, dichas líneas se rompen o se unen con movimientos erráticos.

En el campo de la mezcla de fluidos en régimen laminar, proceso de importancia en el procesamiento de polímeros, Ottino ha intentado aproximaciones a través de los sistemas dinámicos. Él argumenta que en toda mezcla existen tres zonas: la primera, la región activa de mezcla caracterizada por movimientos rápidos con cruce de componentes, por lo cual es la región que mayor aporte hace al proceso; las regiones estancadas caracterizadas por estar separadas de la región principal por líneas de corriente, movimientos lentos y su carácter difícil de predecir, pero con formas geométricas conocidas que deben tener los mezcladores para minimizar su existencia, y regiones aisladas que se diferencian de las anteriores porque están separadas de los límites, no se pueden identificar por velocidades bajas de flujo, poseen mezclado interno que disminuyen la eficiencia global del mezclado.

La principal relación que establece Ottino (D. V. Khakar, H. Rising, J. M. Ottino, 1986) radica en el estudio de puntos periódicos, elípticos e hiperbólicos formados por las variedades (entendidas como espacios geométricos suaves, líneas, superficies, sólidos; véase figura 16), que producen la ecuación de Navier-Stokes y su relación con las regiones aisladas de flujo (figura 17).

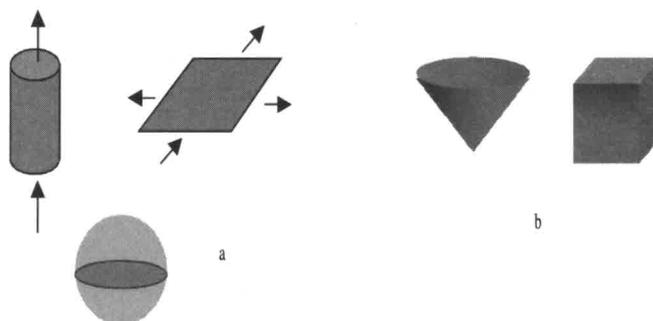


Figura 16. a) Son variedades. b) No son variedades.

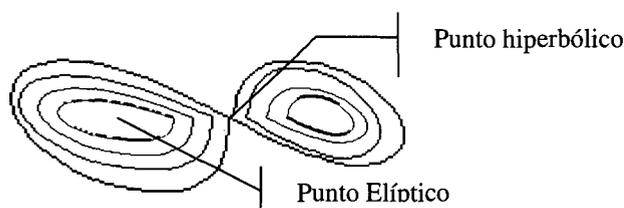


Figura 17. Variedades que se presentan en un esquema de mezcla.

Su trabajo, como lo indica Ottino (1994), es dar respuesta a las siguientes preguntas:

- ¿Cuáles son los mecanismos dominantes del mezclado?
- ¿Qué características del mezclado pueden predecirse computacionalmente?
- ¿Cuáles son las mejores formas de definir y medir un material bien mezclado?
- ¿Se pueden predecir las *regiones aisladas*?, ¿puede asegurarse su ausencia?
- ¿Sin el uso de modelos detallados de flujo, hay técnicas capaces de permitir una visualización de las regiones de flujo?
- ¿Las *regiones aisladas* pueden tener un uso práctico, como por ejemplo, crear región de descarga controlada dentro del mezclado?

XI. ESTUDIOS Y PERSPECTIVAS EN COLOMBIA

Esta teoría ha marcado tan fuertemente el mundo de la ciencia y sus aplicaciones, que algunos la comparan con la teoría de la relatividad o la mecánica cuántica. Es así como actualmente en países desarrollados se llevan a cabo trabajos basados en este nuevo paradigma en todas las áreas de la Ingeniería Química, como termodinámica, transferencia de masa y energía, cinética química, catálisis, etc. Actualmente en Colombia las universidades que poseen grupos interesados en el estudio de la teoría del caos son: la Universidad de los Andes, a través del grupo dirigido por el doctor Philippe Binder en el estudio del caos cuántico. La Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá, en diferentes grupos: en el Departamento de Física, con el grupo de sistemas hamiltonianos y complejidad dirigido por el profesor Diógenes Campos, en el estudio de caos clásico y cuántico, el Departamento de Química, con los trabajos en reacciones oscilantes dirigidos por el profesor Daniel Barragán y Alfredo Gómez; en Ingeniería Civil se encuentran los ingenieros Pervys Rengifo y Carlos Velazco, quienes estudian las aplicaciones de los fractales en su ramo; en Ingeniería Eléctrica se encuentra el profesor Hernando Díaz, quien estudia el control de los sistemas caóticos y el control en sistemas caóticos, y en Ingeniería Química, el trabajo de tesis de Antonio Mora titulado "Aproximación a la ciencia de la ingeniería química desde la teoría del caos y la geometría fractal", dirigido por el Ph.D. Luis Carballo, y actualmente se adelanta el trabajo de tesis del ingeniero Luis Herrera titulado "Acercamiento a la mezcla de fluidos a través de los sistemas dinámicos y la teoría del caos", dirigido por el Ph.D. ingeniero Alfonso Conde.

Como se ha visto a través de los últimos años, el impacto de esta teoría ha hecho que sea deber del ingeniero conocer por lo menos la forma como dicha teoría afecta su rama del conocimiento, para no quedar atrapado en la historia de la Ingeniería Química.

BIBLIOGRAFÍA

1. BERENSTERN, I., "Correlaciones cuantitativas estructura propiedad: Descriptores topológicos para cetonas y parámetros dinámicos en un oscilador químico". Tesis de Química de la Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 1999.
2. BEST, W. G., TOMFOHRDE, H. F., *S.P.E. Journal*, 139, 1959.
3. BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N., *Fenómenos de transporte*, Ed Reverte, 1964.
4. BRESLER, L., *et al.*, "Isolated mixing regions: origin, robustness and control". En: *Chem Eng Sci.*, 1997, Vol. 52: 1623-163.
5. BRIGGS, J. y PEAT, F. D., *Espejo y Reflejo*. Editorial Gedisa, 1994.
6. BROTHMAN, A., WOLLAN, G. N., FELDMAN, S. M., "New analysis provides formula to solve mixing problems". En: *Chem. Metall. Eng.*, 1945, 52: 102-106.
7. CANAVOS, G. C., *Probabilidad y Estadística. Aplicaciones y Métodos*, McGraw Hill, 1990.
8. COPPENS, M., FROMENT, G., "Diffusion and reaction in a fractal catalyst pore I Geometrical aspects". *Chem. Eng. Sci.*, 1995, 50: 1013.
9. ———, "Diffusion and reaction in a fractal catalyst pore II diffusion and first-order reaction". En: *Chem. Eng. Sci.*, 1995, 50: 1027.
10. ———, "Diffusion and reaction in a fractal catalyst pore III Applications to the simulation of vinyl acetate production from ethylene". En: *Chem. Eng. Sci.*, 1995, 50: 4897.
11. CRANE, *Flujo de fluidos en válvulas, accesorios y tuberías*, McGraw-Hill, 1992.
12. CRUTCHFIELD, J. P., *et al.*, *Caos*. Libros de Investigación y ciencia. Orden y Caos, 1990, pp. 78-90.
13. ECKART, C., "An analysis of the stirring and mixing process in incompressible fluids". En: *J. Marine Res.*, 1948, VII: 265-75.
14. GLEICK, J., *Caos "Meking a new science"*, Penguin Books, 1982.
15. ———, *Caos. La creación de una ciencia*. Ed. Seix Barral, 1988.
16. GREEN, J. B., "Poincare and the Three Body Problem (History of Mathematics, V. 11)". En: *Amer Mathematical Society*, 1996.
17. ———, "Poincare and the three bodys problem". En: *American Mathematical Society*.
18. GUCKENHEIMER, J., *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*. Springer-Verlag, 1986.
19. HOPF, E., "A mathematical example displaying features of turbulence". En: *Comm. Pure Appl. Math.*, 1948, 1: 303.
20. KAHLERT, C., ROSSLER, O., VARMA, A., "The stirred tank forced". En: *Chem. Eng. Sci.*, 1981, 41: 1549.
21. KHAKHAR, D. V., RISING, H., OTTINO, J. M., "Analysis of chaotic mixing in two model systems". En: *J. Fluid Mech.*, 172: 419-51.
22. LANDAU, L. D. "On the problem of turbulence: Colective Papers of L. D. Landau". En: *Trad. Ing.*, D. Ter Haar, Nueva York, Pergamon, 1965.
23. LORENZ, "Deterministic nonperiodic flow". En: *Journal of the Atmospheric Sciences*, 1963, 20: 130-41.
24. ———, "The Mechanics of Vacillation". En: *Journal of the Atmospheric Sciences*. 1963, 20: 448-64.
25. ———, *The Problem of Deducing the Climate from the Governing Equations*. Telus. 1964, 16: 1-11.

- 26.———, "Predictability: Does the flap of a butterfly's wings in Brazil set off a tornado in Texas?". *Discurso pronunciado en la reunión anual de la American Association for the Advancement of Science en Washington*, 29 de septiembre de 1979.
27. MANDELBROT, *The Fractal Geometry of Nature*, New York, Freeman, 1977.
- 28.———, *Los Objetos Fractales; Forma, Azar y Dimensión*. Barcelona, Tusquets editores, 1987.
29. MCKELVEY, J. M., *Polymer Processing*. John Wiley and Sons, 1962.
30. MORA, A., "Aproximación a la ciencia de la ingeniería química desde la teoría del caos y la geometría fractal". Tesis de Maestría en Ingeniería Química de la Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 1998.
31. OTTINO, J. M., *Mezcla de fluidos*. Libros de Investigación y ciencia. Orden y Caos, 1994, pp. 117-126.
32. LACEY, P. M. C., *J. Appl. Chem.*, 1954, 4: 257.
33. PERRY, W. L., *Álgebra lineal con aplicaciones*. McGraw-Hill, 1990.
34. POCHEAU, A. "En las raíces de la turbulencia". En: *Mundo científico*, Vol. 8(78): 317-319.
35. RAÑADA, A. F., *Movimiento Caótico*. Libros de Investigación y ciencia. Orden y Caos, 1994, 66-77.
36. RUELLE, D. y TAKENS, F., "On the nature of turbulence". En: *Communications in Mathematical Physics*, 1971, 20: 167-92.
37. SMITH, J. M., *Chemical engineering kinetics*. McGraw-Hill, 1981.
38. SPARROW, *The Lorenz equations, Bifurcations, Chaos, and Strange Attractors*. Springer-Verlag, 1982.
39. TAYLOR, G. I., "The formation of emulsions in definable fields of flow". En: *Proc. Roy. Soc., Lond.*, 1934, A146: 501-23.
40. TREYBAL, R. E., *Operaciones de transferencia de masa*. McGraw-Hill, 1991.
41. WEIDENBAUM, S. S., "Mixing of Solids" En: *Advances in Chemical Engineering*. Vol. II, editado por T. B. Drew and J. W. Hoopes, Academic Press, 1958.