



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

Dinámica de Fluidos Complejos Obstaculizados

Tesis presentada al:

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de:

Maestro en Ciencias

(Física Aplicada)

por:

Lic. Samuel Hidalgo Caballero

asesorado por:

Dr. Felipe Pacheco Vázquez

Dr. Noe Herrera Pacheco

Puebla, Pue.,

Julio 2019

Título: Dinámica de Fluidos Complejos Obstaculizados

Estudiante: Samuel Hidalgo Caballero

COMITÉ

Dra. Honorina Ruiz Estrada
Presidente

Dra. Blanca Bermúdez Juárez
Secretario

Dra. Beatriz Bonilla Capilla
Vocal

M.C. Pedro Tolentino Eslava
Suplente

Dr. Felipe Pacheco Vázquez
Asesor

Dr. Noe Herrera Pacheco
Co-asesor

*A mis familiares y amigos, cuyo apoyo, cariño y constante motivación
han podido vencer las barreras de la distancia y el tiempo.*

Agradecimientos

A mis padres, por su apoyo incondicional y su invaluable esfuerzo para otorgarnos lo mejor de ellos desde nuestra infancia, procurando siempre nuestra salud y autorrealización personal.

A mi hijo, por ser la mayor motivación en mi vida, por su inocencia, alegría y amor que me llenan de felicidad y enaltecen mi compromiso como padre, para tratar de brindarle lo que a mí me fue otorgado.

A mi hermano, por darme un gran ejemplo de ser humano íntegro, tener el gusto de enseñarme y guiarme desde pequeño, querer tanto a mi hijo y hacernos saber que siempre podemos contar con él.

A mis asesores de tesis y de la estancia de investigación efectuada en el extranjero, por su gran guía e inmenso apoyo a lo largo de mi trabajo de investigación y su amplia disposición para discutir y aprender mucho de ellos, incluso más allá del ámbito científico.

A mi jurado de tesis, por sus críticas constructivas y su orientación brindada lo largo del desarrollo de mi trabajo de maestría, con la finalidad de mejorarlo.

A mis familiares y amigos, por cada uno de los momentos compartidos a lo largo de nuestras vidas, imprescindibles para que el día de hoy sea la persona que ustedes conocen.

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, por darme la oportunidad de ser parte del posgrado de Física Aplicada y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por la beca otorgada para realizar efectuar mis estudios de maestría, así como el complemento que me brindó para realizar una estancia en el Instituto de Tecnología de Rochester, USA.

Esta investigación fue realizada gracias al apoyo del Consejo de Ciencia y Tecnología del Estado de Puebla

ÍNDICE GENERAL

RESUMEN.....	11
1. INTRODUCCIÓN	12
2. FUNDAMENTOS DE MECÁNICA DE FLUIDOS, MICROFLUIDICA Y ELECTROKINÉTICA.....	15
2.1 Introducción.....	15
2.2 Ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos	16
2.2.1 Conservación de la masa.....	17
2.2.2 Conservación del momento	17
2.2.3 Ecuaciones constitutivas para un fluido Newtoniano	17
2.2.4 Las ecuaciones de Navier-Stokes	18
2.3 Solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes.....	19
2.3.1 Método de diferencias finitas de orden variable.....	19
2.3.2 Método de elemento finito.....	21
2.4 Microfluídica	25
2.5 Electrocinética	26
2.5.1 Capa eléctrica doble.....	27
2.5.2 Electroósmosis	30
2.5.3 Electroforesis.....	31
2.5.4 Dielectroforesis	31
3. PRIMER ESTUDIO: DESCARGA SIMULTÁNEA DE UNA MEZCLA DE GRANOS Y AGUA A TRAVÉS DE UN ORIFICIO.....	35
3.1 Introducción.....	35
3.2 Dispositivo experimental.....	37
3.3 Resultados y análisis.....	38
4. SEGUNDO ESTUDIO: ELECTROOSMOSIS, ELECTROFORESIS Y DIELECTROFORESIS EN MICROCANALES OBSTACULIZADOS.....	44
4.1 Introducción.....	44

4.2	Dispositivo experimental.....	44
4.3	Caracterización eléctrica de las partículas.....	46
4.4	Flujo de suspensiones granulares en un canal obstaculizado.....	48
4.4.1	Estimación numérica del potencial mínimo de atrapamiento.....	49
4.4.2	Búsqueda numérica de la señal óptima para la separación por carga.....	50
4.4.3	Resultados experimentales de la separación por carga.....	51
4.4.4	Búsqueda numérica de la señal óptima para la separación por tamaño.....	53
4.4.5	Separación de micropartículas con diferente tamaño.....	53
5.	CONCLUSIONES Y LOGROS OBTENIDOS	56
	ANEXOS 57	
A1.	Simulación de un flujo incompresible por diferencias finitas.....	57
A2.	Simulación de un flujo incompresible por elemento finito	60
A3.	Modelo numérico de la descarga mixta.....	62
	62
A4.	Búsqueda de señal óptima para la separación por carga.....	64
A5.	Búsqueda de la señal óptima para la separación por tamaño	66
A6.	Artículos publicados, enviados y en preparación.....	68
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	70

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1	Atascamiento de partículas en microcanales.....	12
1.2	Atrapamiento electrocinético en microcanales.....	13
2.1	Esfuerzos presentes en un elemento de fluido.....	18
2.2	Discretización de una región de estudio.....	19
2.3	Simulación de un flujo en una cavidad.....	21
2.4	Discretización implementada en elemento finito.....	22
2.5	Numeración de una región discretizada triangularmente.....	23
2.6	Simulación del flujo a través de un obstáculo.....	25
2.7	Simulación del flujo alrededor de un pez.....	25
2.8	Micromezcladora de fluidos.....	26
2.9	Experimentos de Reuss.....	27
2.10	Capa eléctrica doble.....	28
2.11	Perfiles hidrodinámico y electrosmótico.....	31
2.12	Esquema de la dielectroforesis en una partícula.....	32
2.13	Comparación entre la fuerza dielectroforética y la electrocinética....	33
3.1	Flujo en un medio poroso.....	36
3.2	Dispositivo para estudiar la descarga de granos y agua.....	38
3.3	Resultados normalizados de la descarga de granos y agua.....	39
3.4	Evolución del empaquetamiento a lo largo de la descarga.....	40
3.5	Altura del líquido y sólido a lo largo de la descarga mixta.....	41
3.6	Comparación entre datos experimentales y resultados numéricos...	42
4.1	Proceso de microlitografía en cuarto limpio.....	45
4.2	Control de calidad para las piezas fabricadas.....	45
4.3	Microscopio Leica DMI8.....	46
4.4	Análisis electrocinético de las partículas.....	47
4.5	Microcanales empleados para las mezclas binarias.....	49
4.6	Fuerza electroforética en los obstáculos.....	50
4.7	Fotografía de una mezcla de partículas de 2 μm	51
4.8	Separación utilizando una señal de sierra izquierda.....	52
4.9	Separación utilizando una señal de sierra derecha.....	52
4.10	Mezcla de partículas de 5 y 7.6 μm	53
4.11	Separación utilizando una señal sinusoidal.....	54
4.12	Separación utilizando una señal triangular.....	54

RESUMEN

En este trabajo se estudia el flujo de mezclas de partículas sólidas y agua dentro de conductos que presentan cambios en su sección transversal, obstaculizando su movimiento; esto con la finalidad de hallar un método eficaz para la separación y caracterización de las partículas inmersas, así como para determinar su razón de flujo. Se llevaron a cabo dos estudios, en el primero se analiza la dinámica de estos fluidos complejos que se mueven debido a una diferencia de presión y bajo la acción de la gravedad, para el caso de partículas de vidrio cuyo diámetro varía entre 100 y 650 μm que, dada su densidad, sedimentan en el líquido. Posteriormente, el resto de la investigación se centra en el estudio del flujo electrocinético de suspensiones de partículas de poliestireno cuyo diámetro varía entre 1 y 10 μm , encontrando un gran potencial de aplicación en el área biomédica, en particular, para la separación de bacterias, virus y células, así como otras entidades biológicas.

Se realiza un estudio experimental y numérico de ambos sistemas. El primero de ellos es modelado combinando la ecuación de la conservación de la masa y el principio de Bernoulli, tomando en cuenta la resistencia hidrodinámica debida al medio granular, expresada por la ley de Darcy. Por otro lado, el segundo sistema es modelado resolviendo directamente las ecuaciones de Navier-Stokes, de forma numérica, utilizando la aproximación de Debye-Hückel para la parte eléctrica, lo cual es válido en nuestras condiciones experimentales.

Finalmente, se propone un método de separación de micropartículas con diferente tamaño o carga eléctrica, por medio de la aplicación de campos eléctricos con corriente alterna a baja frecuencia en microcanales obstaculizados. Esto es posible gracias a la competición entre las fuerzas electroosmótica, electroforética y dielectroforética, con la ventaja de poder modularse en función del potencial eléctrico aplicado. Para ello se efectúa una búsqueda numérica de la señal que debe aplicarse para conseguir la microseparación en los dispositivos microfluídicos previamente fabricados. Esta última parte de la investigación es de relevante interés en el área biomédica y ha sido desarrollada en colaboración con el Laboratorio de Microfluídica del departamento de Ingeniería Biomédica del Instituto de Tecnología de Rochester (RIT), USA, donde se efectuó una estancia de 3 meses a lo largo del verano del 2018.

1. INTRODUCCIÓN

Los sistemas bifásicos líquido-sólido son importantes en una variedad de campos industriales, como el refinamiento de petróleo, la fabricación de papel, el procesamiento de alimentos, el transporte de lodos, el tratamiento de aguas residuales y, sin lugar a duda, en gran parte de la industria farmacéutica y cosmética [1]. El movimiento de las mezclas de líquido con materia granular a través de conductos estrechos ($d \leq 1\text{cm}$) presenta una dinámica que no puede determinarse de manera analítica, resolviendo las ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos. A su vez, estos fluidos complejos pueden ser desplazados de diversas maneras, por ejemplo, debido a un gradiente de presión o por la aplicación de un campo eléctrico dentro del conducto. Ambos flujos difieren fundamentalmente en la forma del perfil de velocidades [2], pero también en los posibles fenómenos físicos que aparecen en el seno del fluido, lo cual conlleva a un conjunto muy grande de aplicaciones, siendo el flujo electrocinético el que se ha empleado mayoritariamente en el área biomédica [3].

El flujo de una suspensión granular provocado por un gradiente de presión en un conducto puede verse afectado por la presencia de cambios geométricos en el mismo, generando una dinámica compleja, tal como se muestra en [4] para la descarga de un silo totalmente sumergido en un líquido. Esto puede ser aún más notorio cuando el flujo se desarrolla dentro de microcanales, ya que el movimiento depende notablemente de la fracción de volumen y de las características geométricas de los conductos [5]. Las partículas suspendidas pueden formar cúmulos y son capaces de obstruir el flujo de diversas maneras, tal como se observa en la figura 1.1.

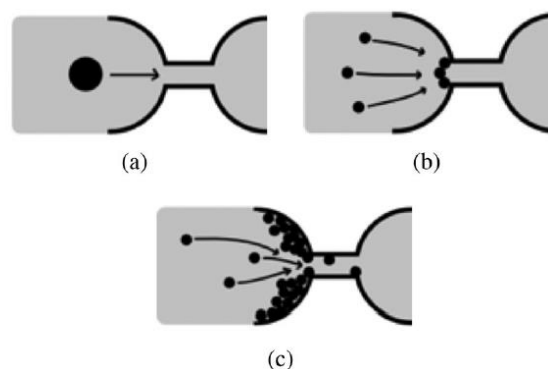


Figura 1. 1 Diversas formas de atascamiento de una suspensión granular [5]

Esta abrupta reducción en el flujo altera drásticamente la eficiencia en el transporte de material a través de los microconductos, los cuales pueden estar presentes en sistemas biológicos o en diversas aplicaciones tecnológicas. Si bien, los conductos con obstrucciones y los medios porosos a nivel macroscópico, han sido estudiados desde hace varias décadas para fluidos newtonianos, apenas se han iniciado estudios con fluidos complejos, lo cual abre las puertas para la investigación en este rubro, con posibles aplicaciones en la industria, así como en el área biomédica, donde las células pueden ser transportadas en suspensiones a través de canales de unas decenas de micrómetros hasta algunos milímetros en su sección transversal [6].

Por otro lado, el flujo de una suspensión granular provocado por la aplicación de un campo eléctrico resulta de la combinación de los fenómenos conocidos como electroósmosis y electroforesis. Además, si en el canal existen obstáculos o cambios en la sección transversal, también aparecerá la dielectroforesis, como resultado de la no uniformidad geométrica del campo eléctrico aplicado. Ambos fenómenos compiten, ya que presentan una distinta dirección de propagación y, a partir de cierta intensidad del campo eléctrico, la dielectroforesis predomina, puesto que su dependencia es de segundo orden respecto al mismo [3]. El resultado inminente es que cuando se alcanza esta intensidad de campo eléctrico, las partículas quedan atrapadas en determinadas regiones del microcanal, tal como se muestra en la Fig. 1.2.

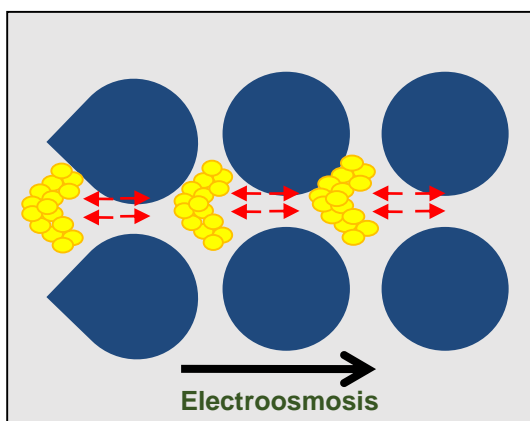


Figura 1. 2 Atrapamiento de partículas por dominio de la dielectroforesis (flechas rojas) sobre la electroósmosis (flecha negra)

El objetivo general de esta tesis es estudiar, experimentalmente y de forma numérica, la dinámica de fluidos complejos que se mueven en canales que presentan cambios en su sección transversal. Se realizan dos estudios distintos, el primero concerniente al flujo hidrodinámico de una mezcla de granos de vidrio y agua a través de un orificio circular y el segundo se centra en el flujo electrocinético de una suspensión muy diluida de partículas de poliestireno dentro de microcanales obstaculizados, esto con la finalidad de hallar un mecanismo de separación de micropartículas dependiendo su tamaño o carga eléctrica. El contenido del presente trabajo de investigación está organizado de la siguiente manera:

En el capítulo 2 se desarrollan las ecuaciones fundamentales que describen los dos tipos de flujo estudiados. Primero se exponen las ecuaciones constitutivas de la mecánica de fluidos hasta llegar a las ecuaciones de Navier-Stokes. Enseguida, se describen dos métodos computacionales muy utilizados para resolverlas: diferencias finitas y elemento finito. Posteriormente, se explica lo que se conoce como microfluídica y las aproximaciones que son válidas para simular el flujo en microcanales. Finalmente, se desarrolla la teoría de la electrocinética y de los fenómenos que aparecen cuando las suspensiones granulares son impulsadas por un campo eléctrico: electroósmosis, electroforesis y dielectroforesis.

En el capítulo 3 se desarrolla el primer estudio realizado, concerniente al flujo de una mezcla de granos de vidrio de 100 a 650 μm y agua, la cual es colocada dentro de un contenedor cilíndrico con una base intercambiable para tener diferentes tamaños de orificios por los cuales saldrá este fluido complejo debido a la diferencia de presión y al arrastre del medio granular por parte del líquido.

En el capítulo 4 se desarrolla el estudio primordial de la presente investigación: el flujo electrocinético de suspensiones de partículas de poliestireno dentro de microcanales obstaculizados. Al final del capítulo se propone un método de separación de micropartículas dependiendo su tamaño y carga eléctrica; para ello se utiliza corriente alterna de baja frecuencia.

Finalmente, en el capítulo 5 se dan las conclusiones de la presente investigación y los logros obtenidos, en particular los artículos publicados en revistas internacionales.

2. FUNDAMENTOS DE MECÁNICA DE FLUIDOS, MICROFLUIDICA Y ELECTROKINÉTICA

2.1 Introducción

El estudio del movimiento de los fluidos ha sido de gran interés para la humanidad, incluso desde los inicios de las grandes civilizaciones; sin embargo, un estudio más formal de estos fenómenos fue desarrollado hasta hace varios siglos por varios científicos e ingenieros tales como Newton, Bernoulli, Laplace, Darcy, Venturi, entre muchos otros. Estos resultados experimentales y algunos analíticos permitieron la formalización matemática conseguida por los científicos Louis Navier y Stokes, obteniendo sus famosas ecuaciones, ahora fundamentales en mecánica de fluidos. A pesar de ello, para la mayoría de los problemas reales solo una aproximación numérica es accesible en el caso de flujos laminares y, bajo ciertas consideraciones, en flujos turbulentos [7].

La manera común de definir a un fluido es como un medio continuo con la capacidad de cambiar de forma debido a que sus constituyentes poseen una cohesión débil. Una definición más formal sería que un fluido es una sustancia que se desplaza bajo la acción de un esfuerzo cortante, sin capacidad de restitución de su forma original [8]. La comprensión de la dinámica de los fluidos ha sido uno de los mayores avances de la física, las matemáticas y la ingeniería, con un auge notable en los últimos siglos, en gran parte por el interés en entender el flujo de líquidos y gases a través de tuberías o los movimientos de la atmósfera, el espacio y el océano, pero también, por el deseo de analizar la dinámica de los fluidos presentes en sistemas biológicos o en el ser humano, como el aparato circulatorio.

Al igual que muchas otras áreas del conocimiento, entender la mecánica de fluidos no ha sido una tarea sencilla ya que existen dos maneras de analizarlos, desde el punto de vista molecular, lo cual ha tenido un avance sorprendente en el último siglo desde la invención de la mecánica estadística, o partiendo de la hipótesis de medio continuo, donde las propiedades tales como la densidad, presión, temperatura, y la velocidad se toman bien definidas y varían continuamente desde un punto a otro, ignorando la naturaleza molecular de un fluido.

Una forma de determinar si se puede considerar al fluido de estudio como un continuo o si se deben aplicar las leyes de la mecánica estadística, es calculando el número de Knudsen, el cual se define como el cociente de la longitud de libre recorrido medio y una longitud característica del sistema:

$$K_n = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi \sigma^2 P L}, \quad (1)$$

donde T es la temperatura, P la presión del fluido, L una longitud característica, σ sección eficaz de colisión y k_B es la constante de Boltzmann. La gran mayoría de los fenómenos encontrados a escala macroscópica caen bien dentro de la aproximación del continuo donde $K_n \ll 1$; sin embargo, cuando se manejan volúmenes muy pequeños de fluido como los que estudia la nanofluídica, esta aproximación deja de ser buena y un estudio mecánico-estadístico se vuelve necesario. Asimismo, cuando los fluidos involucran la presencia de carga eléctrica en forma de especies iónicas disueltas, se requiere utilizar las herramientas de esta poderosa e importante rama de la física.

Una vez satisfecha la hipótesis de medio continuo, existen dos enfoques que nos permiten estudiar la dinámica de un fluido, la descripción de Lagrange, en honor al físico y matemático francés Joseph-Louis Lagrange (1736-1813) y la descripción de Euler, en honor al matemático suizo Leonhard Euler (1707-1783). En la descripción Lagrangiana se sigue cada elemento del fluido, de manera que busquemos funciones que nos den la posición y otras propiedades de la partícula fluida (mucho más grande que a la escala molecular) en cada instante, entonces debemos seguir la trayectoria de cada una de ellas durante todo el flujo. En la descripción Euleriana se emplea un marco de referencia fijo en relación con el del fluido que está en movimiento, así el tiempo y la posición se utilizan como variables independientes. Se trata de una descripción de campo, debido a que nos interesamos en un punto particular en el espacio, sin preocuparnos en la partícula de fluido que pasó por ahí. Por esta razón, la teoría de la mecánica de fluidos suele desarrollarse considerando un enfoque Euleriano [8].

2.2 Ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos

Las ecuaciones que rigen el movimiento de un fluido provienen de las que modelan la mecánica de los medios continuos y consisten básicamente en ecuaciones de conservación y

ecuaciones constitutivas. Las ecuaciones de conservación se derivan del principio de conservación de la masa, del momento lineal y de la energía. Por otro lado, las ecuaciones constitutivas relacionan los esfuerzos en el fluido con su tasa de deformación y, como su nombre lo dice, dependen de la naturaleza de este.

2.2.1 Conservación de la masa

Considere una masa específica de fluido de volumen arbitrario. Si se sigue esta masa a medida que fluye, se observará que su tamaño y forma puede cambiar, pero no la cantidad de materia encerrada. Este es el principio de conservación de la masa o ecuación de continuidad y se expresa, utilizando la notación de Einstein, como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k) = 0, \quad (2)$$

donde ρ es la densidad del fluido y u_k son las componentes de su velocidad.

2.2.2 Conservación del momento

El principio de conservación del momento proviene de la aplicación de la segunda ley de Newton a un elemento de fluido; es decir, la tasa de cambio del momento de una masa de fluido es igual a la fuerza externa neta f_i que actúa sobre esa masa. Así, la relación matemática que expresa lo anterior, para un volumen de control dado, es:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho u_i dV + \oint_{\partial V} \rho u_i (u_j n_j) dA = \oint_{\partial V} \sigma_{ij} dA_j + \int_V f_i dV, \quad (3)$$

donde n_j es un vector normal a la superficie que encierra nuestro volumen de control y σ_{ij} es el tensor de esfuerzos. Claramente, el lado izquierdo posee una parte temporal y otra convectiva, mientras que el lado derecho representa las fuerzas internas y externas que están causando la aceleración.

2.2.3 Ecuaciones constitutivas para un fluido Newtoniano

Al aplicar las leyes de conservación de la masa y del momento a un elemento de fluido se obtuvieron las ecuaciones (2) y (3), teniendo así un mayor número de incógnitas que de ecuaciones. Por consiguiente, a fin de obtener un conjunto completo de ecuaciones, se debe hallar una expresión para el tensor de esfuerzos σ_{ij} , el cual está relacionado con el tensor de

deformación y éste forma parte de las relaciones constitutivas del fluido. En primera instancia, se considera un fluido Newtoniano, donde existe una respuesta lineal entre la tasa de deformación y el esfuerzo aplicado. En la Fig. 2.1 se dibuja un volumen infinitesimal de fluido donde se analizan los esfuerzos σ_{ij} , presentes sobre el mismo.

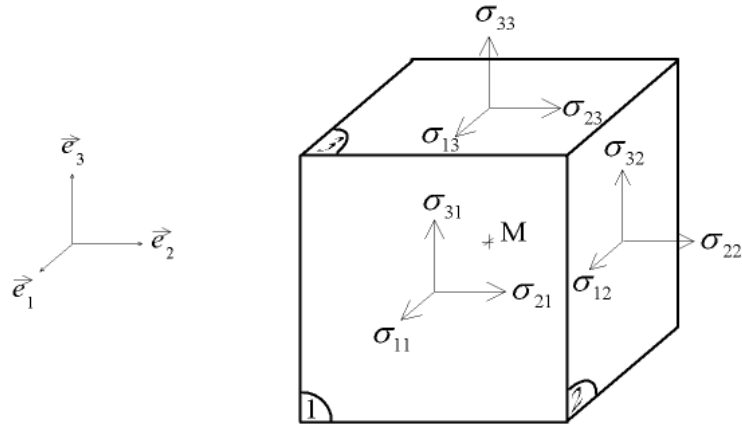


Figura 2. 1 Esfuerzos presentes en un elemento diferencial de fluido

Para un fluido Newtoniano se tiene que:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \eta \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (4)$$

2.2.4 Las ecuaciones de Navier-Stokes

Al combinar la ecuación de conservación del momento (3), junto con la relación constitutiva (4) obtenemos las famosas ecuaciones de Navier-Stokes, en forma diferencial estas se escriben como:

$$\frac{\partial(\rho u_j)}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial u_j}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \rho f_j, \quad (5)$$

y, para un fluido incompresible se simplifican a:

$$\rho \frac{\partial u_j}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial u_j}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \eta \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i^2} + \rho f_j \quad (6)$$

En el caso especial de efectos viscosos insignificantes, las ecuaciones de Navier-Stokes se convierten en las denominadas ecuaciones de Euler:

$$\rho \frac{\partial u_j}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial u_j}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho f_j \quad (7)$$

2.3 Solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes mostradas en (5) no pueden resolverse de forma analítica para la gran mayoría de geometrías y problemas. Una manera de encontrar una solución aproximada se consigue por medio de discretizaciones. Estos métodos de discretización convierten las ecuaciones diferenciales en algebraicas, las cuales se pueden resolver utilizando métodos numéricos. A continuación, se describen brevemente dos métodos clásicos: diferencias finitas y elemento finito, pues ambos son muy utilizados para buscar una solución a este tipo de ecuaciones.

2.3.1 Método de diferencias finitas de orden variable

El método de diferencias finitas fue uno de los primeros algoritmos desarrollados para resolver ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, esto se debe a su sencillez y relativa facilidad para su implementación en cualquier lenguaje de programación. En esta técnica cierta región de interés es discretizada para formar un mallado con N puntos y las derivadas se transforman en aproximaciones por serie de Taylor alrededor cada punto definido (ver Fig. 2.2).

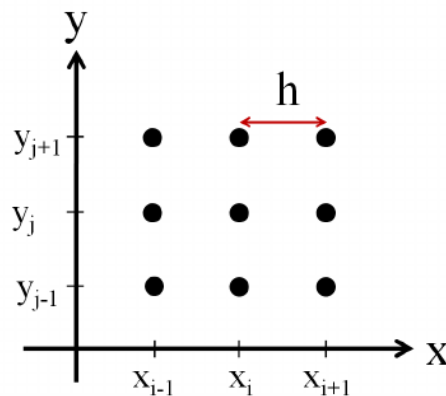


Figura 2. 2 Discretización uniforme de una región de estudio

Para incrementar la precisión en la solución se puede optar por aumentar el número de puntos en la discretización de la malla o también se puede aumentar el orden en el desarrollo de serie de Taylor. Usualmente, se opta por la primera opción generando un mallado más grande, sin embargo, esto involucra un mayor número de ecuaciones y, por consiguiente, mayor tiempo de cálculo. Otra manera de aumentar la precisión se consigue incrementando el orden de aproximación en la serie de Taylor para cada punto de la red, esto a costa de ir haciendo más complejo el algoritmo, como se explica a continuación.

La derivada de una función f con respecto a la variable x en el punto $[i, j]$ puede ser aproximada como:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \sum_k a_{ik} f(k, j), \quad (8)$$

donde los coeficientes a_{ik} se obtienen por el desarrollo en serie de Taylor alrededor del punto $[i, j]$ (ver fig. 2.2). A continuación, se muestra la expresión de la derivada considerando una aproximación de orden 2, 4 y 8, respectivamente:

$$\frac{\partial u_{i,j}}{\partial x} = \frac{1}{2h} [u_{i+1,j} - u_{i-1,j}] \quad (9)$$

$$\frac{\partial u_{i,j}}{\partial x} = \frac{1}{12h} [u_{i-2,j} - 8u_{i-1,j} + 8u_{i+1,j} - u_{i+2,j}] \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{i,j}}{\partial x} = \frac{1}{840h} \{ & [3u_{i-4,j} - 32u_{i-3,j} + 168u_{i-2,j}] \\ & + [-4u_{i-1,j} + 4u_{i+1,j} - 168u_{i+2,j}] + [32u_{i+3,j} - 3u_{i+4,j}] \} \end{aligned} \quad (11)$$

La ecuación (11) muestra la complejidad del algoritmo para aproximaciones a órdenes superiores. Escribiendo esta ecuación para cada punto del mallado, que representa la discretización de la región, se obtiene un sistema de N incógnitas. Para una malla cuadrada de lado n , se obtendrán $N = n^2$ ecuaciones, por cada variable. En 2 dimensiones, las ecuaciones de Navier-Stokes, para el régimen estacionario e incompresible tienen como incógnitas P , u_1 y u_2 ; por consiguiente, partiendo del algoritmo previo, se obtienen $3n^2$ ecuaciones algebraicas, donde podemos agregar las condiciones presentes en los puntos correspondientes a la frontera de nuestra región de interés.

Esta idea nos motivó a implementar un algoritmo general para poder resolver las ecuaciones de Navier-Stokes, para un flujo estacionario e incompresible, el cual fue probado con el problema clásico de la tapa deslizante en 2D, donde un líquido está contenido en una región cuadrada y solamente la parte superior se desliza de forma horizontal, generando un vórtice central y otros vórtices secundarios en función del número de Reynolds. A continuación, se muestra la solución a las ecuaciones de Navier-Stokes para simular el problema de la tapa deslizante en 2 dimensiones para cuatro números de Reynolds variando de 400 a 5000. Se utilizó una aproximación de orden 4 en el desarrollo en serie de Taylor para las derivadas. El detalle del programa se puede consultar en el Anexo A1.

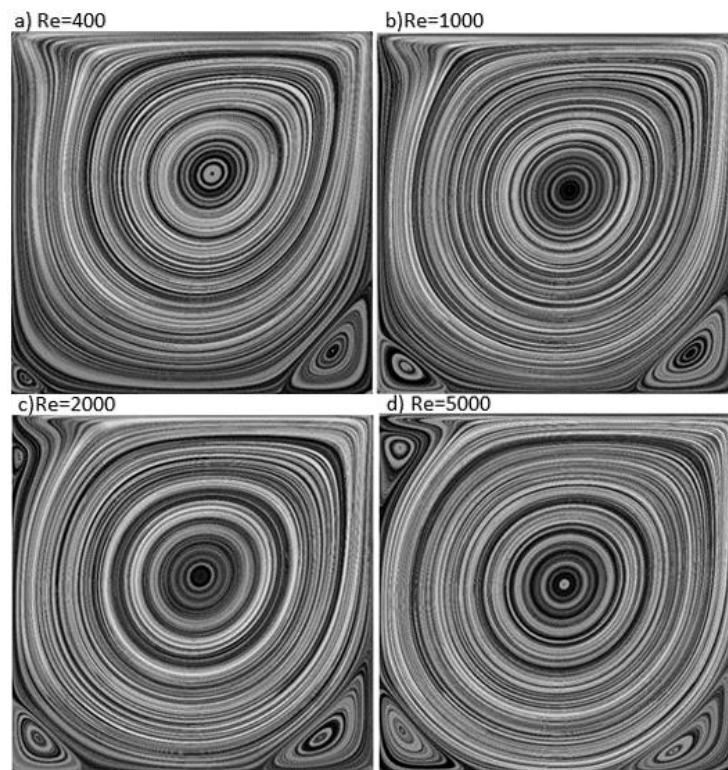


Figura 2. 3 Líneas de flujo correspondientes a la solución del problema de la tapa deslizante en 2D para $Re = (a)400$, $(b)1000$, $(c)2000$ y $(d)5000$

2.3.2 Método de elemento finito

Otro método numérico muy utilizado para resolver ecuaciones diferenciales en derivadas parciales es el elemento finito. Hoy en día, dicho método es considerado como una de las

técnicas más convenientes y bien establecidas para la solución de problemas complejos en diferentes campos de la ingeniería, donde varios procesos físicos pueden estar combinados, generando lo que actualmente se conoce como la multifísica. El éxito del elemento finito se basa, en gran medida, en la flexibilidad de la discretización espacial de la región de interés y la solución efectiva de las ecuaciones resultantes de la transformación integral del sistema inicial. A continuación, se explica brevemente este método, aplicándolo directamente a las ecuaciones de Navier-Stokes para el caso estacionario e incompresible. Para un mayor detalle y formalismo matemático del método se puede consultar [9] - [11]. Al igual que en el método de diferencias finitas, la primera parte consiste en la discretización de nuestra región de estudio. Sin embargo, la diferencia sustancial es que en este caso la discretización se hace dividiendo la región en subregiones triangulares. A continuación, se muestra un ejemplo de mallado generado para estudiar un flujo incompresible a través de un obstáculo en un canal.

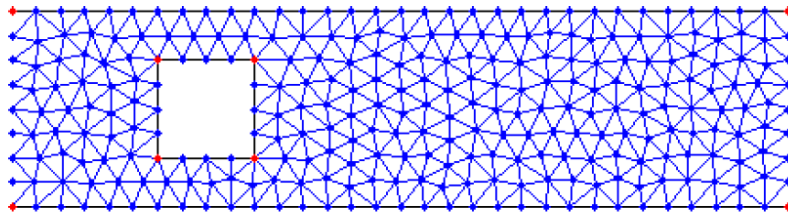


Figura 2. 4 Discretización triangular implementada en el elemento finito

Esta discretización se puede hacer de manera automática en programas como Matlab y COMSOL-Multiphysics. Una vez obtenido el mallado, se enumera de forma arbitraria cada área, tal como se muestra en la figura 2.5, agregando puntos en los vértices y en la parte media del lado de cada triángulo. Posteriormente, se procede a transformar el sistema de ecuaciones diferenciales original en uno algebraico, para ello se utiliza la formulación variacional [10].

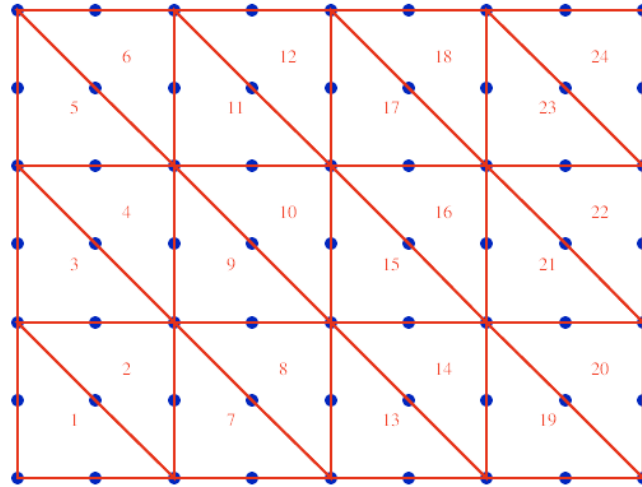


Figura 2. 5 Ejemplo de numeración de una región de estudio, la cual es dividida en subregiones triangulares, agregando puntos en los vértices y la parte media de sus lados

Para nuestro estudio central se utilizan microcanales, por lo que el número de Reynolds es mucho menor a 1, y estamos interesados en el régimen estacionario, así que las ecuaciones (2) y (6) se simplifican a:

$$\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0 \quad (12)$$

$$-\eta \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i^2} + \frac{\partial p}{\partial x_j} = \rho f_j \quad (13)$$

Ahora, se debe proponer una aproximación para u_j y p en cada triángulo. Dado que el sistema de ecuaciones (12) y (13) posee derivadas primeras para p y segundas para u_j , el modelo más simple es una función lineal para p y una cuadrática para u_j . La prueba matemática formal sobre la existencia, unicidad, y estabilidad de la solución para estas funciones se encuentra a lo largo de los capítulos 2 y 4 de [9]. Así, ambas variables pueden ser aproximadas por:

$$p(x, y) = \sum_{\text{vértices}} c_i \varphi_i(x, y), \quad (14)$$

$$u_j(x, y) = \sum_{\substack{\text{vértices}+ \\ \text{puntos medios}}} a_{ji} \psi_i(x, y), \quad (15)$$

donde:

$$\varphi_i(x, y) = A_i x + B_i y + C_i \quad (16)$$

$$\psi_i(x, y) = D_i x^2 + E_i y^2 + F_i x + G_i y + H_i, \quad (17)$$

tales que:

$$\varphi_i(x_j, y_j) = \psi_i(x_j, y_j) = \delta_{ij}. \quad (18)$$

Por consiguiente, los coeficientes $A_i - H_i$ se obtienen explícitamente en función de los nodos en el mallado obtenido al discretizar la región, como aquella que se muestra en la figura 2.4.

Finalmente, para obtener el sistema de N ecuaciones, con N igual al número de nodos se puede utilizar la forma variacional de este método [10], donde primero se multiplican ambos lados de las ecuaciones (12) y (13) por las funciones φ_i y ψ_i , respectivamente. Enseguida se integran sobre la región de interés, aplicando las condiciones en los nodos de la frontera:

$$\iint_{\Omega} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \varphi_i dx_i = 0 \quad (19)$$

$$\iint_{\Omega} \left(-\eta \frac{\partial^2 u_j}{\partial^2 x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_j} \right) \psi_i dx_i = \rho \iint_{\Omega} f_j \psi_i dx_i \quad (20)$$

Esto se hace para cada φ_i y ψ_i , generando un sistema de ecuaciones algebraicas al aproximar las integrales numéricamente. Dicho sistema se puede resolver de forma matricial en Matlab, por ejemplo. A lo largo del curso de Biofísica Computacional se resolvieron varios problemas de ecuaciones en derivadas parciales implementando el método de elemento finito en Matlab y COMSOL-Multiphysics. En este trabajo se optó por simular el movimiento de los fluidos empleando este último, dada la rapidez de cálculo y la flexibilidad para agregar cualquier mecanismo de impulso de fluido, en particular un flujo electrocinético.

A continuación, se muestra la simulación de un flujo estacionario incompresible a través de un obstáculo circular para $Re=0.01$, en un canal de 0.4 mm de espesor. Los colores representan

la magnitud de la velocidad, normalizada. El detalle del código implementado en Matlab se encuentra en el anexo A.2.

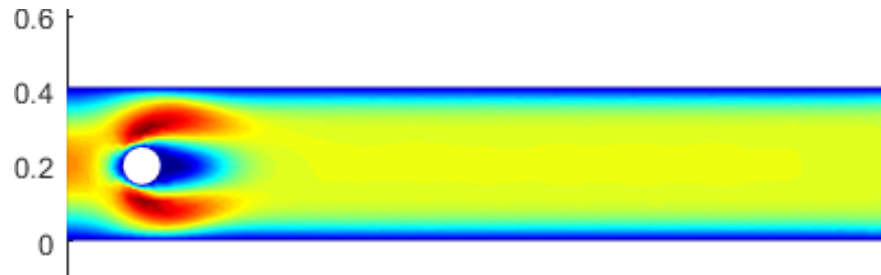


Figura 2. 6 Simulación del flujo a través de un obstáculo circular en un canal de 0.4mm

Asimismo, se muestra una simulación de un flujo laminar alrededor de un pez, el cual puede ser visto como un obstáculo de geometría elíptica. Esta simulación fue realizada en COMSOL-Multiphysics, y es parte de una presente colaboración con la facultad de biología de la BUAP para investigar la correlación entre la fatiga de estos animales y su potencial reproductivo.

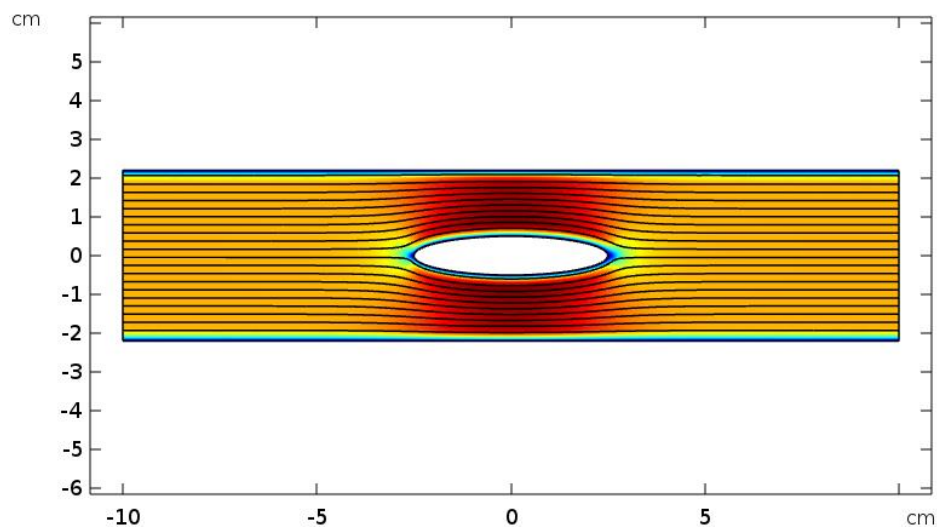


Figura 2. 7 Simulación del flujo a través de un pez en un canal de 4cm

2.4 Microfluídica

La microfluídica es una rama de la mecánica de fluidos que se ocupa del estudio y la manipulación de pequeños volúmenes de fluidos, generalmente menores al μL , los cuales

están confinados geoméricamente (Fig. 2.8), en dispositivos que poseen conductos cuyo espesor es de unas micras hasta algunos milímetros. Esta disciplina se desarrolla en un ambiente concomitante entre biología, física, química e ingeniería, aprovechando los avances de la microelectrónica para su realización y automatización.

En escalas micrométricas, las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido incompresible se pueden simplificar despreciando los términos inerciales, obteniendo las ecuaciones (12) y (13). El régimen de flujo es predominantemente laminar, caracterizado por un bajo número de Reynolds ($Re \ll 1$). Los fenómenos de difusión dentro de estos canales están bien controlados y permiten el desarrollo de aplicaciones tales como micro mezcladores o generadores de gradientes de concentración, entre muchas otras [6].

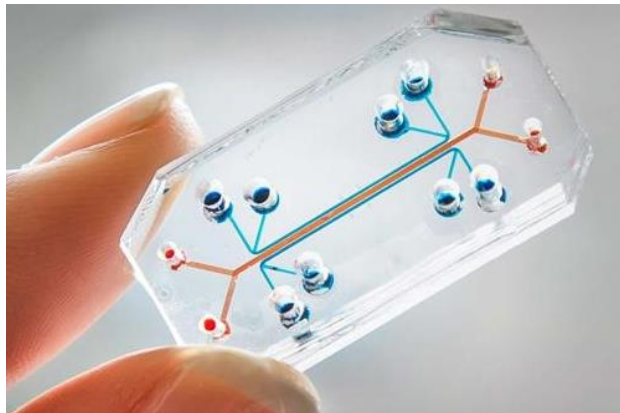


Figura 2. 8 Ejemplo de un dispositivo microfluídico donde se mezclan dos fluidos

2.5 Electrocinética

Hace más de dos siglos y, solamente algunos años después de la invención de la batería eléctrica, un científico alemán de nombre Carl Friedrich Reuss, profesor en la Universidad de Moscú, realizó dos experimentos sencillos con un aparato que consistía en un tubo en U con dos electrodos conectados a una pila voltaica. En el primero de ellos colocó un tapón de arcilla en el interior del tubo y descubrió que, al aplicar un voltaje, el nivel del agua subía en una parte del tubo. En el segundo experimento, colocó arena de cuarzo sobre el tapón de arcilla y encontró que las partículas de arcilla migraban a través de la capa de arena

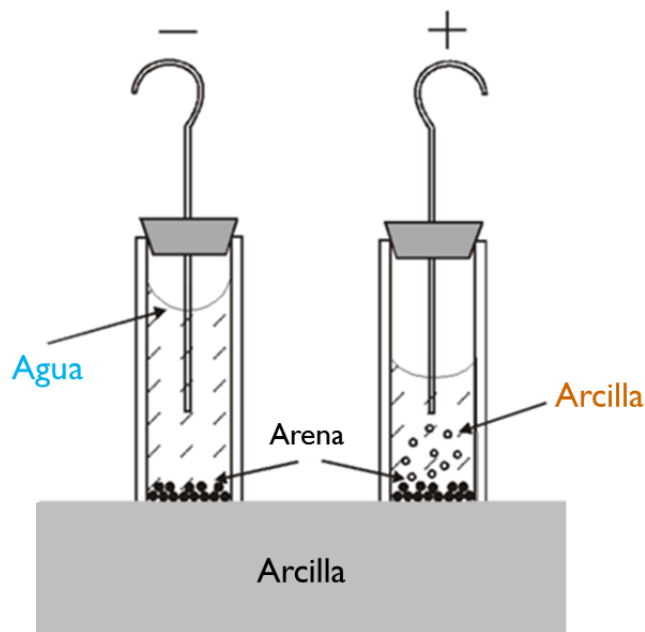


Figura 2. 9 Experimentos de Reuss en 1809

Estos simples experimentos marcaron el inicio del estudio de lo que hoy se denomina electrocinética. En la actualidad, dichos fenómenos se conocen como electroforesis y electroósmosis, respectivamente. Los fenómenos inversos existen y se llaman potencial de sedimentación y potencial de corriente, respectivamente.

En general, se puede definir a los fenómenos electrocinéticos como todos aquellos que involucran el movimiento de un fluido tangencialmente a una superficie sólida cargada eléctricamente. En los últimos años se han desarrollado muchas aplicaciones de la electrocinética, sin embargo, en el año 1937 el químico sueco Tiselius encontró probablemente una de las más importantes, ya que fue capaz de separar mezclas de proteínas y gracias a ello fue galardonado con el Premio Nobel de Química en 1948.

2.5.1 Capa eléctrica doble

Los fenómenos electrocinéticos son una consecuencia de un proceso de polarización que tiene lugar en la interfaz entre un sólido y un líquido donde aparecen cargas opuestas. En el sólido, la carga se puede generar por adsorción selectiva de la solución o por ionización de las moléculas presentes en la superficie. Esta carga atrae contraiones de la solución y, consecuentemente, se forma una doble capa eléctrica (Fig. 2.10). La primera capa corresponde a la carga superficial y se conoce como la capa de Stern o de Helmholtz. La

segunda capa está compuesta de contraiones que están apantallando a la primera capa. Estos iones se ven menos afectados por la carga superficial y son móviles, por esta razón esta segunda capa se denomina capa difusa o capa de Gouy-Chapman [12].

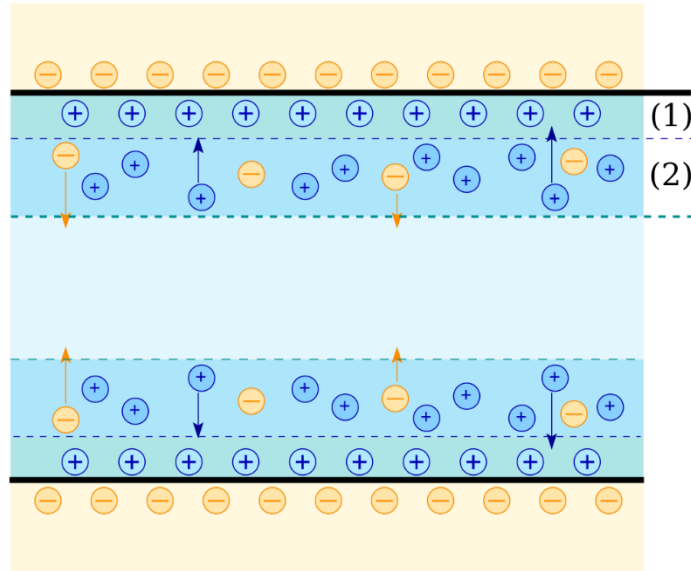


Figura 2. 10 Capa eléctrica doble presente entre la pared de un conducto cargado negativamente y el seno del fluido. Se aprecia la carga superficial (1) y carga difusa (2)

Las ecuaciones fundamentales que gobiernan los fenómenos electrocinéticos se pueden obtener combinando la mecánica de fluidos, el electromagnetismo y la mecánica estadística [12]. La distribución del potencial eléctrico ψ en el seno del fluido debe satisfacer la ecuación de Poisson, la cual se obtiene a partir de la primera ecuación de Maxwell del electromagnetismo, la ley de Gauss, y queda expresada como:

$$\nabla^2 \psi = - \frac{\rho_e}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \quad (21)$$

donde ρ_e representa la densidad volumétrica de carga eléctrica, ε_0 es la permitividad eléctrica en el vacío y ε_r es la permitividad relativa del líquido.

Para poder resolver la ecuación de Poisson (21) necesitamos otra relación para la densidad de carga. Dado que se trata de un electrolito donde las especies iónicas se encuentran sometidas a una agitación térmica, podemos asumir una distribución de Boltzmann en función de la temperatura:

$$\rho_e = \sum_i n_0 \left(-z_i e \cdot \exp \left[-\frac{z_i e \psi}{k_b T} \right] \right), \quad (22)$$

donde n_0 representa la densidad de carga en bulto, lejos de la superficie, $z_i e$ es la carga asociada a la especie iónica y k_b es la constante de Boltzmann.

Combinando las ecuaciones (21) y (22) llegamos a la ecuación de Poisson-Boltzmann:

$$\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla^2 \psi = \sum_i n_0 \left(z_i e \cdot \exp \left[-\frac{z_i e \psi}{k_b T} \right] \right) \quad (23)$$

Ésta es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden no lineal y, en general, no puede ser resuelta de forma analítica; sin embargo, si desarrollamos a primer orden el término exponencial que aparece en el lado derecho, estaremos haciendo lo que se conoce como aproximación Debye-Huckel [12] y esta ecuación tiene solución analítica, al menos para geometrías sencillas como un plano y una esfera.

Para un plano cargado se obtiene:

$$\psi = \zeta_w \exp[-y/\lambda] \quad (24)$$

Para una esfera cargada de radio a se obtiene:

$$\psi = \zeta_p a \cdot \frac{\exp[-(r-a)/\lambda]}{r} \quad (25)$$

En ambos casos se presenta un decaimiento exponencial para el potencial eléctrico con un parámetro lambda $\lambda = \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r k_b T}{\sum_i n_0 (z_i^2 e^2)} \right)$, conocido longitud de Debye y representa el espesor de la capa doble. Para el caso del agua con un pH de 6.5 en un electrolito 1-1, a 298 K esta longitud es inferior a 1 micra.

Las constantes ζ_w y ζ_p se conocen como potencial zeta de pared y de la partícula, respectivamente. Ambos valores se aproximan al valor del potencial eléctrico en la superficie sólida.

2.5.2 Electroósmosis

La electroósmosis se refiere al movimiento de un fluido inducido por un campo eléctrico. Este flujo se puede modelar utilizando las ecuaciones de Navier-Stokes (6) con la fuerza externa $f_i = \rho E$ proveniente del campo eléctrico. Por otro lado, de la ecuación (21) se obtiene que $\rho = -\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla^2 \psi$ y esto permite hallar una solución exacta en dos dimensiones para la velocidad del fluido bajo la aplicación de un campo uniforme perpendicular a la superficie cargada. En este caso la ecuación (13), se simplifica a:

$$\eta \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 y}, \quad (26)$$

lo cual, al integrarse desde 0 hasta y , con la condición de no deslizamiento en la pared se obtiene:

$$u(y) = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r E}{\eta} (\psi(y) - \zeta_w) \quad (27)$$

No obstante, de acuerdo con la expresión encontrada para $\psi(y)$ en (24), el potencial eléctrico decrece exponencialmente y a partir $y > 3\lambda$ $\psi(y) \ll \zeta_w$ por lo que la ecuación para la velocidad lejos de la pared es:

$$u(y) \cong - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r \zeta_w}{\eta} E = \mu_{EO} E \quad (28)$$

El término $\mu_{EO} = - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r \zeta_w}{\eta}$ se denomina movilidad electroosmótica y experimentalmente es el factor lineal del cambio en la velocidad del fluido conforme se incrementa el campo eléctrico.

Cabe destacar que el perfil de velocidades para el caso de un flujo electroosmótico es constante a lo largo de la sección transversal, a diferencia del perfil parabólico encontrado en un flujo debido a un gradiente de presión, mejor conocido como flujo de Poiseuille (Fig. 2.10).

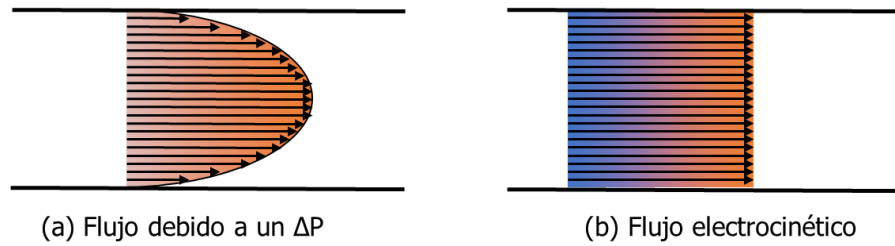


Figura 2. 11 Perfiles de velocidades de un flujo de Poiseuille y uno Electroosmótico

2.5.3 Electroforesis

La electroforesis corresponde al movimiento de partículas dispersas en relación con un fluido bajo la influencia de un campo eléctrico espacialmente uniforme. De manera similar a cómo se hizo con la electroósmosis se puede modelar la electroforesis, combinando las ecuaciones (13) y (21) en coordenadas polares, obteniendo la velocidad de una partícula impulsada por un campo eléctrico radial:

$$v(r) = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r E}{\eta} (\psi(r) - \zeta_p) \quad (29)$$

Análogamente al caso electroosmótico, considerando que $\psi(r)$ decae exponencialmente, si $r > 3\lambda$ $\psi(r) \ll \zeta_p$, entonces la ecuación anterior se puede simplificar, lejos de la superficie a:

$$v(r) = -\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r \zeta_p}{\eta} E = \mu_{EP} E \quad (30)$$

Donde μ_{EP} se denomina movilidad electroforética y mide la respuesta lineal entre la velocidad de la partícula y la magnitud del campo aplicado.

2.5.4 Dielectroforesis

Otro fenómeno electrocinético aparece sobre una partícula suspendida cuando se aplica un campo eléctrico no uniforme (geoméricamente) en el seno del fluido; las partículas son polarizadas eléctricamente y debido a la asimetría de la densidad de líneas de campo sobre ellas genera un empuje cuya dirección depende de la polarizabilidad de las partículas respecto a la del medio (Fig. 2.12). Este fenómeno es conocido como dielectroforesis y, en general

compite con la electroósmosis y la electroforesis presentes siempre que hay un campo eléctrico.

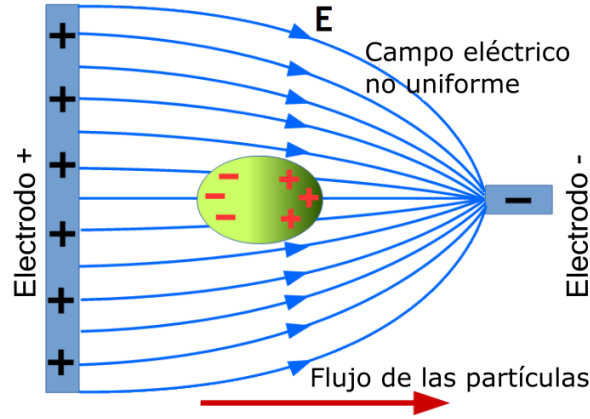


Figura 2. 12 Esquema de la dielectroforesis sobre una partícula

Con ayuda de la figura anterior se puede hallar la fuerza neta experimentada por una partícula, situada en el punto \vec{r} vista como un dipolo de longitud d y momento dipolar de magnitud $p=qd$:

$$\vec{F}_{DEP} = q\vec{E}(\vec{r} + \vec{d}) - q\vec{E}(\vec{r}) \quad (31)$$

Ahora, haciendo un desarrollo en serie de Taylor a primer orden:

$$\vec{F}_{DEP} = q\vec{E}(\vec{r}) + q\vec{d} \cdot \nabla \vec{E}(\vec{r}) - q\vec{E}(\vec{r}) = \vec{p} \cdot \nabla \vec{E}(\vec{r}) \quad (32)$$

Dado que la esfera es dieléctrica y no está cargada inicialmente, la ecuación de Poisson (21) se convierte en la ecuación de Laplace y, en coordenadas esféricas, para una simetría axial queda expresada como:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (33)$$

Cuya solución está dada por los polinomios de Legendre $P_\ell(\cos \theta)$:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} \left[A_l \left(\frac{r}{a} \right)^l + B_l \left(\frac{a}{r} \right)^{l+1} \right] P_l(\cos \theta) \quad (34)$$

Y al aplicar las condiciones de frontera para el campo eléctrico, se obtiene la solución fuera de la esfera, tal como se detalla en [13]:

$$\psi = E a^3 \left(\frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_p + 2\varepsilon_m} \right) \frac{\cos \theta}{r^2} - E r \cos \theta \quad (35)$$

Lo cual corresponde a la suma de un potencial eléctrico que es proporcional al producido por un dipolo eléctrico y al ya presente debido el campo eléctrico uniforme en la dirección axial. De aquí se deduce que la polarización es proporcional $\left(\frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_p + 2\varepsilon_m} \right)$, el cual es denominado factor de Clausius-Mossotti.

Sustituyendo esta polarización lineal respecto al campo eléctrico en la ecuación (32) y utilizando la identidad vectorial:

$$\nabla(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) = (\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{E} + \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}) + \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}) \quad (36)$$

Se obtiene:

$$\vec{F}_{DEP} \propto \nabla(\vec{E} \cdot \vec{E}) = 2\pi a^3 \left(\frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_p + 2\varepsilon_m} \right) \nabla \|\vec{E}\|^2 \quad (37)$$

De esta última ecuación se concluye que la fuerza dielectroforética es de segundo orden respecto al campo eléctrico; además, es proporcional al volumen de la partícula. Asimismo, es importante destacar que no depende de la dirección del campo eléctrico, por lo que siempre compite con la electroósmosis y la electroforesis, tal como se observa en la siguiente figura, de manera esquematizada.

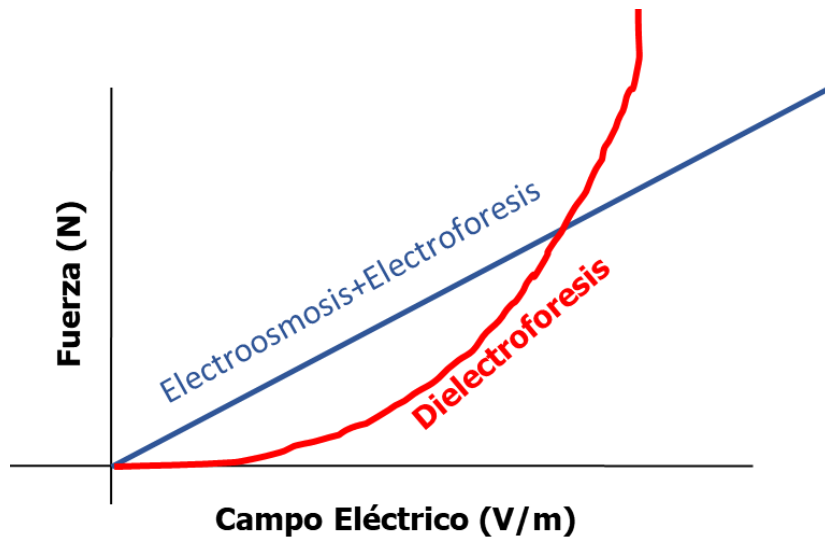


Figura 2. 13 Comparación cualitativa de la fuerza dielectroforética, contra la electrosmótica y la electroforética.

3. PRIMER ESTUDIO: DESCARGA SIMULTÁNEA DE UNA MEZCLA DE GRANOS Y AGUA A TRAVÉS DE UN ORIFICIO

3.1 Introducción

El flujo de un líquido que sale a través de un orificio pequeño localizado en el fondo de un contenedor fue estudiado por Evangelista Torricelli en 1643 [14], quién demostró que la velocidad de la salida del líquido varía conforme a la raíz cuadrada de la altura inicial. Por otra parte, la descarga de un silo lleno con materia granular presenta un flujo prácticamente constante, descrito por la ley de Beverloo [15], propuesta en 1961, la cual depende del cociente entre el diámetro de los granos y el orificio, pero no de la altura de la columna de material por encima del orificio. Aquí, se propone estudiar el flujo de una mezcla de granos con agua, ya que no existe una expresión analítica para la descarga heterogénea.

La complejidad del estudio de la dinámica de un sistema heterogéneo, donde hay granos y agua, depende en gran parte de las propiedades de la fase sólida. En este caso los granos tienen una densidad mayor a dos veces la del agua, por lo cual ocurre sedimentación y aglomeración de éstos, comportándose como un medio poroso en movimiento relativo al del fluido, debido a la erosión de los granos.

Un medio poroso se define como aquél que presenta espacios vacíos en su interior, teniendo un mínimo de interconexión entre sí (tortuosidad) para permitir el paso de un fluido a través de éste (Fig. 3.1). Materiales comunes como la arena, las rocas, el café puro o incluso una esponja son ejemplos de medios porosos. Entender la dinámica del flujo en su interior es un proceso crucial para muchas aplicaciones tecnológicas, en particular, en la industria petroquímica, geológica, farmacéutica y biomédica. Ejemplos de esta última son el crecimiento de tejidos, influenciado por el transporte de nutrientes y, la dinámica del flujo sanguíneo o hemodinámica, la cual está involucrada en la mayoría de los procesos fisiológicos en los vertebrados [16].

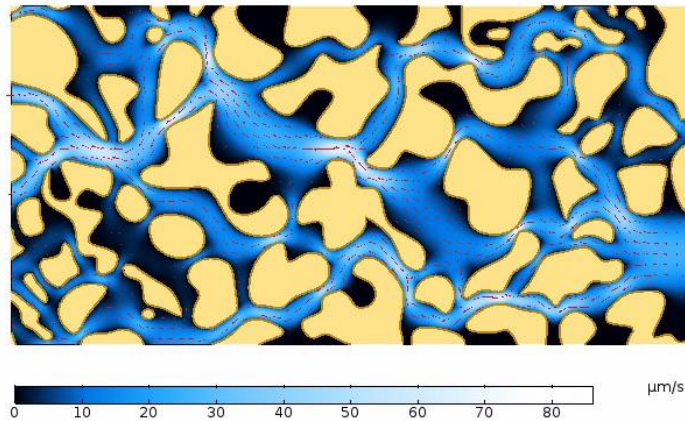


Figura 3.1 Simulación en 2D de un flujo en un medio poroso por FEM [16]

Usualmente, el flujo a través de un medio poroso ha sido estudiado partiendo de las ecuaciones de Navier-Stokes para el caso de fluidos incompresibles y estacionarios [6], considerando la respuesta lineal del flujo promedio respecto al gradiente de presión. Dicha relación se conoce como la ley de Darcy, en honor al ingeniero francés Henry Darcy [17], quien estudió, en 1856, el flujo de agua a través de los filtros de arena. Esta ecuación es:

$$\Delta P = \frac{\eta L Q}{k A} \quad (38)$$

Donde ΔP es la pérdida de presión después de que el fluido atraviesa una longitud L del medio poroso, η es la viscosidad dinámica, Q es el flujo o caudal volumétrico, A es el área transversal del conducto, y k es la permeabilidad del medio, la cual depende de la tortuosidad de este.

Si el medio poroso es una cama de partículas esféricas, la permeabilidad queda expresada por la relación de Kozeny-Carman [18]:

$$\Delta k = \frac{\epsilon^3 d^2}{180(1 - \epsilon)^2} \quad (39)$$

quedando en función de la porosidad ϵ y del diámetro medio de las partículas d . Sin embargo, esta relación no es adecuada cuando las partículas son grandes [19], por esta razón, la permeabilidad suele ser determinada experimentalmente y, en general, presenta propiedades de anisotropía cuando se considera un flujo en dos o tres dimensiones [20].

Dado que no existe un modelo teórico para el flujo de sistemas heterogéneos y solamente la descarga de un silo totalmente sumergido en líquido fue analizada en [4], se propone estudiar la descarga combinada de granos y agua, con la peculiaridad de que los granos sedimentan y caen por acción de la gravedad y el arrastre del agua; sin embargo, debido al confinamiento existe cierta resistencia al flujo de éstos a través del orificio. Esta parte de la investigación se llevó a cabo en colaboración con la estudiante de doctorado Andrea Margarita Cervantes, quién efectuó los experimentos aquí mostrados. La contribución del proponente de esta tesis fue realizar el análisis teórico del sistema físico y se propuso un modelo para describir la dinámica de la descarga combinada de granos y agua cuando hay una reducción abrupta en la sección transversal de un silo.

3.2 Dispositivo experimental

Se utilizó un cilindro transparente de 4,4 cm de diámetro y 60 cm de altura, con un fondo plano de acrílico intercambiable con distintos tamaños de apertura $D = 3.1, 4.3, 5.4$ y 6.3 ± 0.1 mm. El contenedor se colgó verticalmente de un medidor de fuerza fijo Omega DFG-335 como se muestra esquemáticamente en la figura 3.1 (a), esto nos permitió medir el peso del sistema cada 0.2 s, como función del tiempo para tres tipos de descarga: 1) granos de vidrio ($\rho_s = 2.66 \pm 0.01$ g/cm³), 2) agua pura ($\rho_l = 1 \pm 0.01$ g/cm³) y 3) granos sedimentados en agua. Los experimentos se realizaron utilizando agua desionizada a temperatura ambiente y cuatro tamaños de grano, previamente tamizados, $d=100\pm 25, 250\pm 40, 480\pm 35$ y 690 ± 70 μm . En el caso combinado se utilizó una columna granular de 26 ± 0.2 , cm y el resto del cilindro fue llenado con agua hasta 52 ± 0.2 cm. Los videos fueron filmados con ayuda de dos cámaras laterales para ver la dinámica dentro y fuera del contenedor cilíndrico.

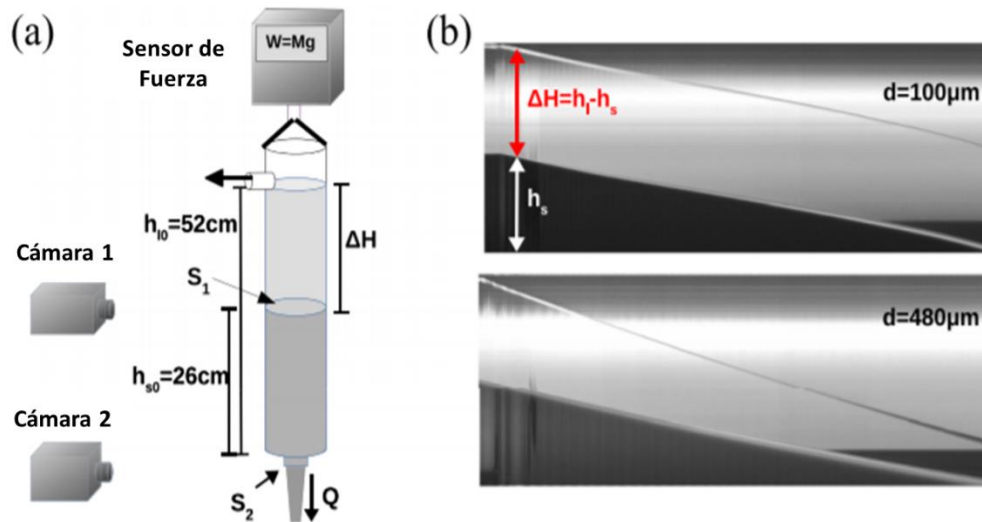


Figura 3.2 (a) Dispositivo experimental. (b) Variación del nivel de líquido y el nivel del medio granular para la descarga de las mezclas, con $d=100\ \mu\text{m}$ y $480\ \mu\text{m}$ a través de una abertura de $D = 3.1\ \text{mm}$.

En la figura 3.2 (b) se muestra un montaje que nos permite observar la evolución de la descarga combinada para el caso de los granos de $100\ \mu\text{m}$ y $480\ \mu\text{m}$ a través de un orificio de 3.1mm . Claramente se puede apreciar que para las partículas de $100\ \mu\text{m}$ la distancia entre el nivel de agua h_l y el nivel del medio granular h_s es prácticamente constante mientras que para los granos $480\ \mu\text{m}$, h_l disminuye más rápido que h_s , lo cual indica que la dinámica presenta una importante dependencia respecto a la relación d/D .

3.3 Resultados y análisis

La dinámica de los 3 tipos de descargas estudiadas se puede apreciar en la siguiente figura, donde se grafica la evolución de la masa, normalizada con la masa inicial, a lo largo de la descarga. Nótese que el caso de la descarga simultánea se encuentra siempre entre el régimen hidrostático y el seco.

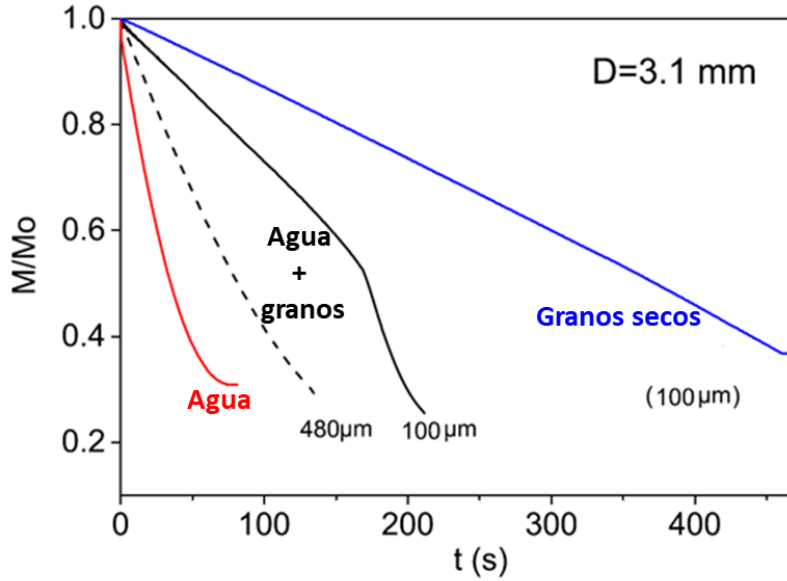


Figura 3.3 Descarga de granos secos (azul), agua pura (rojo) y granos con agua (negro)

Modelo para la descarga simultánea del medio granular y agua

Consideremos al medio granular como un medio poroso de espesor h_s , variable en el tiempo, por el cual fluye el agua. De acuerdo con la ley de Darcy, $\Delta P = \eta h_s v_r / \kappa$ donde $v_r = v_1 - v_s$ la velocidad relativa del líquido respecto a la del medio granular; además, considerando que las partículas de vidrio son esféricas, la permeabilidad está dada por la relación de Kozeny-Carman $k = \epsilon^3 d^2 / (180(1 - \epsilon)^2)$. Ahora, aplicando el teorema de Bernoulli al líquido en la parte superior e inferior de la columna de agua, mostrada en la figura 3.2 (a):

$$\rho_l g h_l - \frac{\eta}{\kappa} h_s (v_1 - v_s) = \frac{\rho_l}{2} (v_2^2 - v_1^2) \quad (40)$$

Por otro lado, de la ecuación de continuidad para el líquido en la superficie superior S_1 e inferior S_2 se obtiene:

$$S_1 v_1 = \epsilon S_2 v_2 \quad (41)$$

Sustituyendo esta relación y la expresión para la permeabilidad en la ecuación anterior se llega:

$$\rho_l g h_l - 180 \frac{\eta(1 - \epsilon)^2}{\epsilon^3 d^2} h_s (v_1 - v_s) = \frac{\rho_l}{2} \left(\frac{S_1}{\epsilon S_2} - 1 \right) v_1^2 \quad (42)$$

Para poder resolver esta última ecuación hace falta conocer la porosidad ϵ y una relación entre la velocidad del líquido v_l y la del sólido v_s . Primero hallemos la porosidad en función de la masa medida por medio del sensor de fuerza. Como sabemos que $\epsilon = 1 - \varphi$, siendo φ la fracción de empaquetamiento del medio granular, entonces la masa total queda expresada como:

$$M = S_1 h_s (\rho_s \varphi + \rho_l (1 - \varphi)) + \rho_l S_1 (h_l - h_s) \quad (43)$$

Donde h_l y h_s corresponden a la altura del líquido y sólido, respectivamente. Despejando φ se obtiene:

$$\varphi = \frac{M - \rho_l S_1 h_l}{(\rho_s - \rho_l) S_1 h_s} \quad (44)$$

De los videos se obtuvieron los valores para h_l y h_s . A continuación, se muestra la gráfica para el factor de empaquetamiento en función de la altura de la parte sólida h_s :

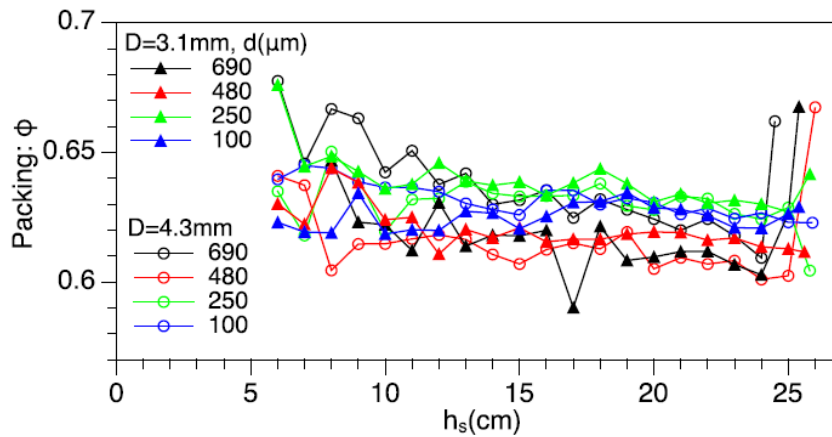


Figura 3.4 Factor de empaquetamiento φ en función de la altura de los granos

Como se puede observar, el empaquetamiento fluctúa entorno al valor promedio que es $\varphi = 0.63 \pm 0.02$, por lo cual para el resto del análisis consideramos una porosidad $\epsilon = 0.37 \pm 0.02$.

Por otro lado, del análisis de los videos se graficó la diferencia entre las alturas $\Delta h = h_l - h_s$ en función de h_s y se obtuvo una relación lineal de la forma $\Delta h = a + b h_s$ tal como se observa en la siguiente figura, donde todos los datos colapsan en una sola línea recta.

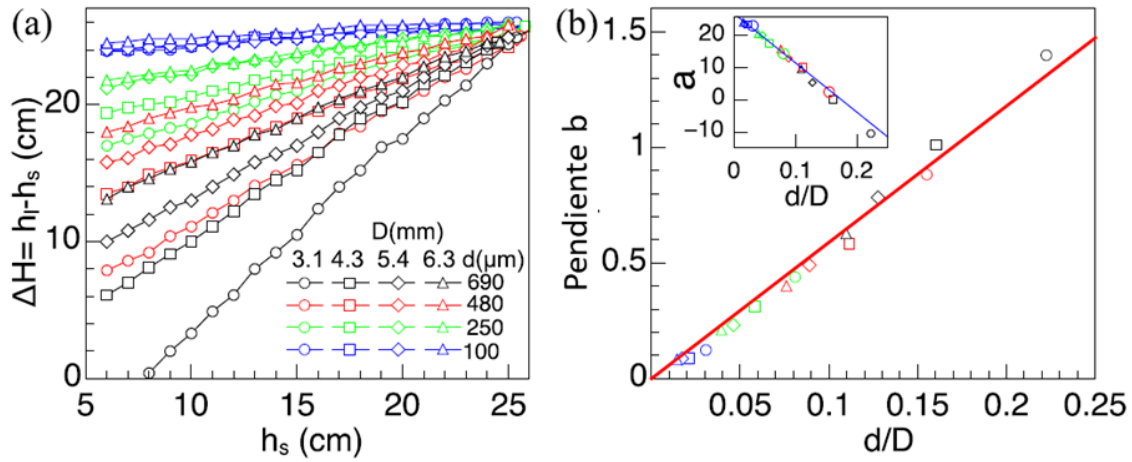


Figura 3.5 (a) Diferencia de alturas entre el líquido y sólido en función de la altura del sólido a lo largo de la descarga para diferentes D y d . (b) Relación lineal encontrada en función de la relación d/D .

De igual forma se mantiene la relación lineal para las velocidades del líquido y del sólido y se encuentra que:

$$v_l \cong \left(1 + 6 \frac{d}{D}\right) v_s \quad (45)$$

Sustituyendo esta relación en la ecuación (42) se llega finalmente a la ecuación diferencial:

$$\rho_l g h_l - 1080 \frac{\eta(1 - \epsilon)^2}{\epsilon^3 d} h_s \frac{dh_s}{dt} = \frac{\rho_l}{2} \left(\frac{S_1}{\epsilon S_2} - 1\right) \left(1 + 6 \frac{d}{D}\right)^2 \left(\frac{dh_s}{dt}\right)^2 \quad (46)$$

La cual fue resuelta numéricamente en Mathematica (Ver anexo A.3). A continuación, se muestra una comparación entre los resultados experimentales y los numéricos, para simular la descarga mixta, considerando los 4 diámetros de partículas utilizadas (a) y los 4 diámetros de los orificios dados (b).

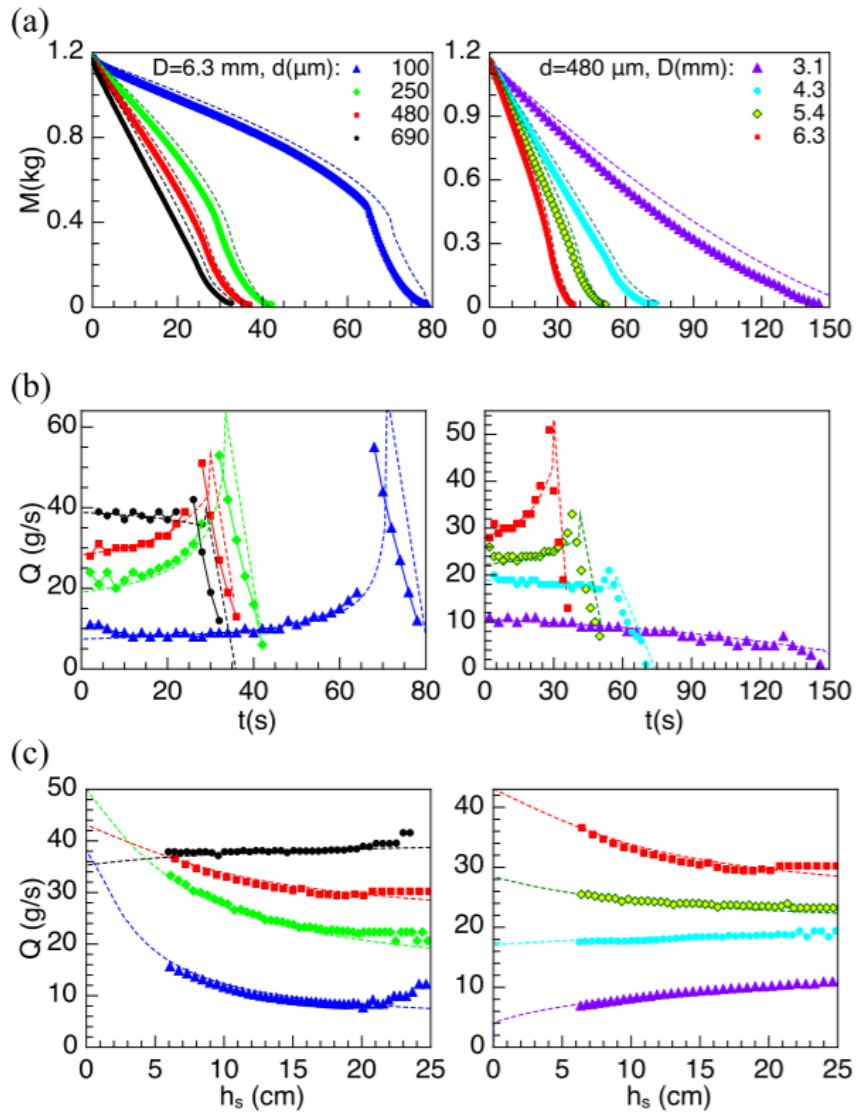


Figura 3.6 Comparación de datos experimentales (puntos) y resultados numéricos obtenidos (líneas punteadas) de a) M vs t , b) Q vs t , y c) Q vs h_s para diferentes valores de D y d

Discusión

Como se puede observar en los resultados experimentales y numéricos, los cuales se muestran en la figura anterior, existe una transición entre la descarga bifásica y monofásica, lo cual se refleja en un cambio abrupto en el flujo másico, disminuyendo conforme el tamaño de grano aumenta, lo cual permite que el agua se descargue rápidamente. Para el caso de $D=3.1$ mm y $d=690$ μm , una parte del medio granular se queda estancada ya que el agua alcanza al material y se genera una mezcla rígida debido a las fuerzas cohesivas de origen capilar. Por otro lado, al variar D/d encontramos que los granos comienzan a fluir a partir de

que $D/d > 3.6 \pm 0.4$, lo cual es menor que para el caso seco, donde $D/d > 4.8 \pm 0.4$ cuando las partículas son esféricas [21].

A pesar de su relativa sencillez, el modelo numérico se ajusta muy bien a los datos experimentales, siendo capaz de predecir la dinámica para varios tamaños del grano. En este sentido, es importante destacar que para granos muy pequeños el flujo se mantiene casi constante una buena parte de la descarga, mientras que para granos más grandes la mezcla se acerca al comportamiento hidrostático, dependiendo del tamaño del orificio y el diámetro del grano.

La competencia entre la presión hidrostática del líquido y la resistencia hidrodinámica del medio granular determina el flujo de la mezcla granular hasta que el sistema se vuelve hidrodinámico.

Durante la preparación de los experimentos notamos que los granos de $690\mu\text{m}$ tardan mucho menos en sedimentarse que los de $100\mu\text{m}$ y cuando se da la descarga mixta los granos pequeños hacen que la mezcla se comporte como una suspensión granular, pudiéndose asociar una viscosidad dinámica efectiva y el análisis del flujo se puede realizar integrando las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido viscoso. Esta hipótesis se plantea comprobar en futuros experimentos utilizando partículas aún más pequeñas que las utilizadas en la presente investigación.

4. SEGUNDO ESTUDIO: ELECTROOSMOSIS, ELECTROFORESIS Y DIELECTROFORESIS EN MICROCANALES OBSTACULIZADOS

4.1 Introducción

En la actualidad existe una gran necesidad de pequeños sistemas capaces de separar y concentrar muestras en diversas áreas, en particular, para efectuar pruebas médicas y ambientales. Los dispositivos de dielectroforesis basados en aisladores resultan ser buenos candidatos para la separación y concentración de partículas [3]. Estos dispositivos se basan en la dielectroforesis, la electroforesis y la electroósmosis. Como se explica en el capítulo anterior, la dielectroforesis depende del tamaño de las partículas y la polarización cuando son expuestas a un campo eléctrico no uniforme espacialmente-. Por otro lado, la electroósmosis produce la migración de partículas debido al movimiento del líquido y, finalmente, la electroforesis complementa la migración de estas. Así, las fuerzas electrocinéticas se encuentran en constante competición.

En estudios anteriores [22] se ha demostrado que estos dispositivos son útiles para separar y concentrar partículas y células usando corriente continua. Al aplicar una corriente alterna de baja frecuencia se puede conseguir el paso selectivo de partículas en función de la carga o el tamaño de estas, optimizando así su purificación. En esta sección se estudia el movimiento de suspensiones de partículas de poliestireno cuyo diámetro varía de 1 a 10 μm , colocadas en microcanales, fabricados previamente en el laboratorio de microfluídica del RIT, y sometidas a campos eléctricos en corriente alterna una frecuencia menor a 10 Hz. Primero se realiza una caracterización eléctrica de las partículas en canales simples (sin obstáculos) y posteriormente se procede a la microseparación de mezclas binarias colocadas en microcanales obstaculizados, por medio de una señal eléctrica alternante que se determina con ayuda de simulaciones numéricas, para hallar la forma ideal del voltaje para lograr la separación.

4.2 Dispositivo experimental

Los experimentos fueron realizados en microcanales fabricados con polidimetilsiloxano (PDMS), empleando técnicas de microlitografía suave estándar en cuarto limpio [23]. Los microcanales tienen 10,16 mm de largo, 0,88 mm de ancho, 40 μm de profundidad y contienen varias entradas y salidas (Fig. 4.1a). El acabado litográfico se realiza mediante una cámara ultravioleta y posteriormente es controlado por medio de un microscopio electrónico (Fig. 4.2a).

A partir de estos moldes se elaboran dispositivos microfluídicos cubriendo los canales elaborados en PDMS con una placa circular de vidrio templado previamente recubierta con PDMS para así tener todas las paredes del mismo material. Para sellarlas se utilizó un tratamiento de plasma. Los pasos necesarios para llevar a cabo la fabricación de estos dispositivos se muestran en la siguiente figura.

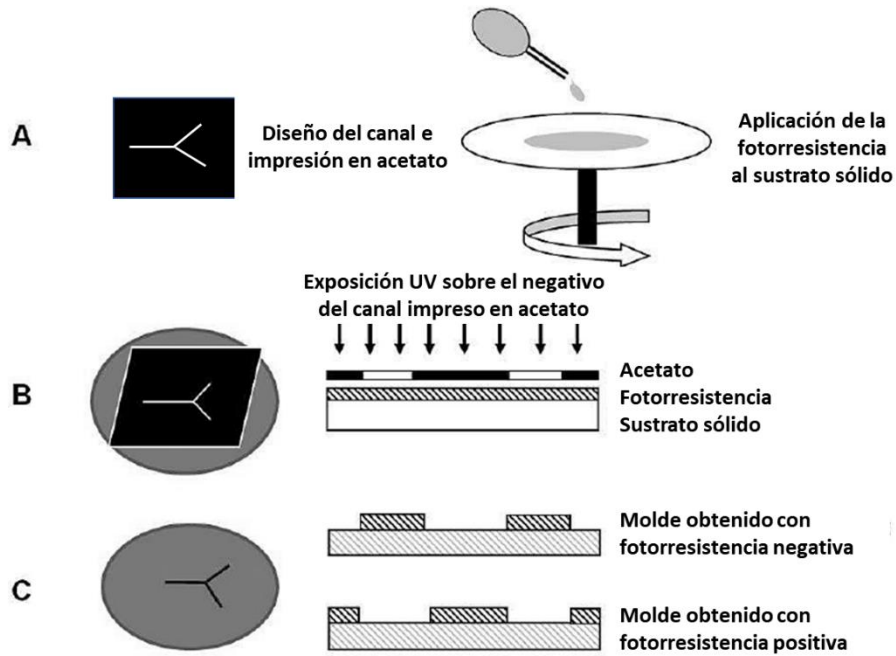


Figura 4. 1 Pasos necesarios para la fabricación de los dispositivos microfluídicos por litografía en cuarto limpio.

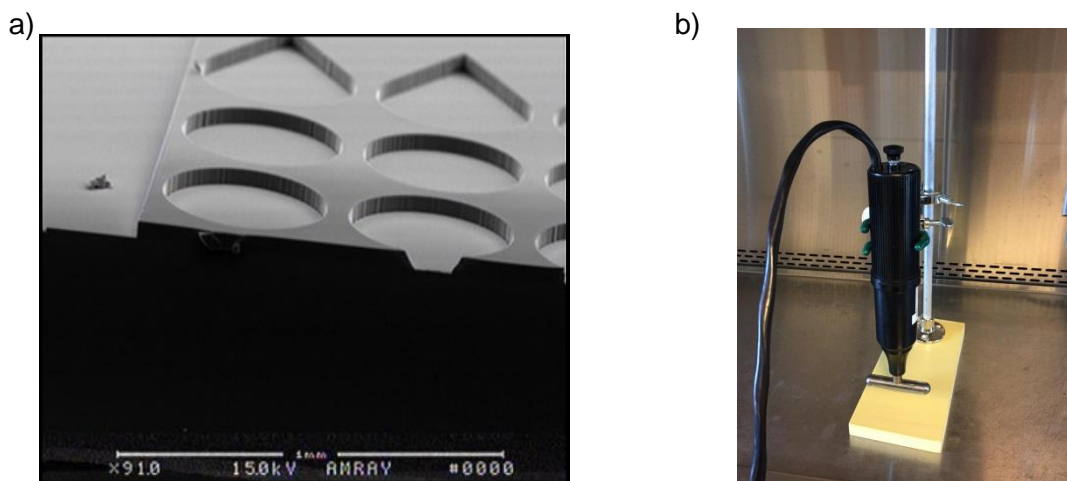


Figura 4. 2 a) Control de calidad llevado a cabo por medio de microscopía electrónica de los microcanales y b) plasma utilizado para sellar los dispositivos fabricados en PDMS

4.3 Caracterización eléctrica de las partículas

La primera parte de los experimentos electrocinéticos corresponde a la caracterización eléctrica de las partículas suspendidas. Para dicho estudio se utilizaron canales simples, con una sola entrada y una sola salida (fig. 4.4a). Se analizaron un total de 15 tipos distintos de partículas de poliestireno fluorescentes con diámetros de 1 a 20 μm (Tabla 4.1). Las suspensiones de partículas variaron en concentración de $3.2 \pm 0.2 \times 10^6$ partículas / ml. Los medios de suspensión se hicieron a partir de agua desionizada con 0,05% en volumen de surfactante Tween 20, para reducir la adhesión de partículas y la adición de KOH 0,1 M, para producir un pH de 6,0 a 6,5 y una conductividad de $25,3 \pm 0,1 \mu\text{S} / \text{cm}$. El comportamiento de las micropartículas se observó con un microscopio invertido Leica DMi8 (Fig. 4.3) y se aplicaron potenciales eléctricos de corriente continua (CC) con un generador de alto voltaje (Modelo HVS6000D, LabSmith, Livermore, CA).



Figura 4. 3. Visualización de los experimentos realizada con microscopio Leica DMi8

Para cada tipo de partícula se midió la velocidad media por medio de velocimetría de imágenes de partículas (PIV), utilizando un plugin de ImageJ, para diferentes campos eléctricos y con ello se calcularon las movilidades electrocinéticas para todas las partículas. El flujo electroosmótico se caracterizó independientemente utilizando la técnica descrita en [24], y así, combinando las ecuaciones (28) y (30), se obtuvieron las movilidades electroforéticas, las cuales se resumen en la tabla 4.1, después de haber medido la respuesta lineal para diferentes

campos eléctricos aplicados y al incluir las constantes involucradas. Estos parámetros eléctricos fueron utilizados en el resto del estudio para realizar las simulaciones y también para cuantificar el poder de separación de la técnica implementada en los canales microfluidicos obstaculizados.

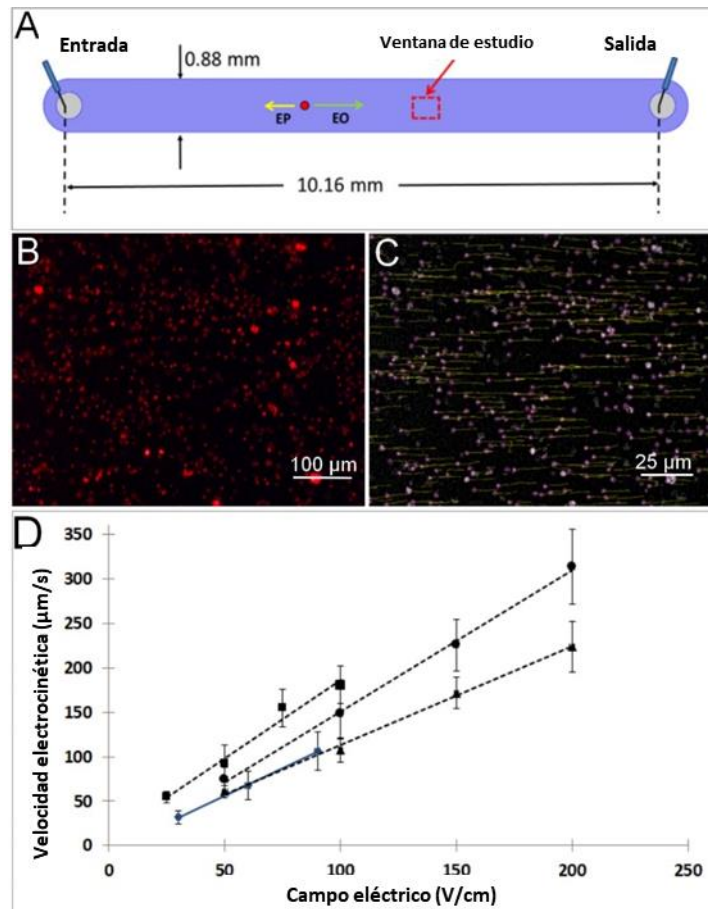


Figura 4. 4 Análisis electrocinético de las partículas suspendidas. A) Características geométricas del microconducto fabricado, B) Fotografía de una suspensión de partículas con diámetro $d=1 \mu\text{m}$. C) Seguimiento de las trayectorias utilizando PIV. D) Velocidad de las partículas como función del campo eléctrico aplicado.

Tabla 4. 1. Valores de los potenciales ζ_p para las partículas analizadas

Muestra	Diámetro (μm)	Color	Marca	Grupo Funcional	ζ_p (± 2 mV)
1	1.00	Rojo	Invitrogen	Carboxilada	-75
2	1.00	Verde	Invitrogen	Sulfatada	-76
3	1.00	Rojo	Invitrogen	Aminada	-5
4	1.00	Verde	Magsphere	Aminada	4
5	1.05	Verde	Magsphere	Carboxilada	-77
6	1.10	Naranja	Magsphere	Non-funcional	-35
7	2.00	Rojo	Magsphere	Non-funcional	6
8	2.00	Rojo	Invitrogen	Carboxilada	-81
9	2.00	Rojo	Invitrogen	Carboxilada	-74
10	2.00	Verde	Magsphere	Carboxilada	-65
11	5.00	Verde	Magsphere	No funcional	-79
12	5.00	Verde	Magsphere	Carboxilada	-55
13	7.60	Naranja	Magsphere	Carboxilada	-56
14	9.70	Naranja	Magsphere	Carboxilada	-46
15	10.00	Rojo	Invitrogen	Carboxilada	-77

4.4 Flujo de suspensiones granulares en un canal obstaculizado

Para este estudio se prepararon dos tipos de mezclas de partículas suspendidas las cuales fueron colocadas en canales con múltiples reservorios, (fig. 4.5). La primera mezcla fue preparada con partículas de poliestireno de 10 y 9.7 μm (14 y 15 de la tabla 4.1), mientras que la segunda fue preparada con partículas de 5 y 7.6 μm (12 y 13 de la tabla 4.1). Las suspensiones de partículas variaron en concentración de 3.4 - 7.3 x 10⁷ partículas / ml. Los medios de suspensión se hicieron a partir de agua DI con 0,05% en volumen de Tween 20, para reducir la adhesión de partículas y la adición de KOH 0,1 M, para producir un pH de 6,0 a 6,5 y una conductividad de 25,3 \pm 0,1 μS / cm. El comportamiento de las micropartículas se observó con un microscopio invertido Leica DMI8 y se aplicaron potenciales eléctricos de

corriente continua (CC) con un generador de alto voltaje (Modelo HVS6000D, LabSmith, Livermore, CA).

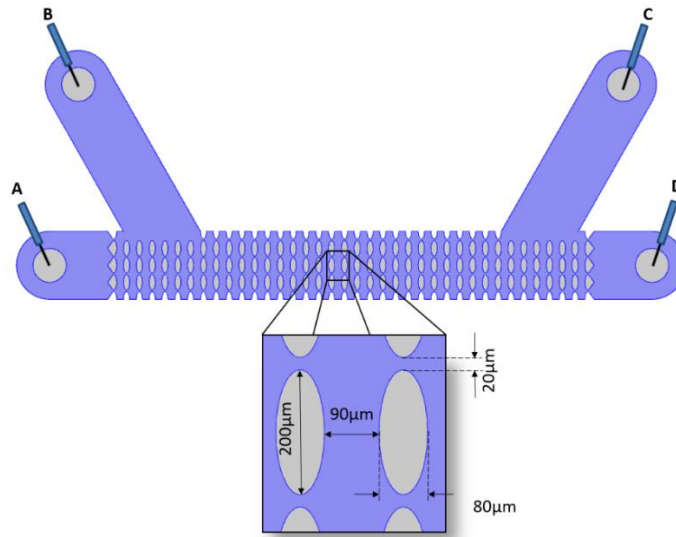


Figura 4. 5 Microcanales empleados para el estudio del flujo electrocinético de mezclas binarias

4.4.1 Estimación numérica del potencial mínimo de atrapamiento

La magnitud de la fuerza electroforética se puede obtener con el gradiente del cuadrado del campo eléctrico, para ello es necesario resolver la ecuación de Poisson tomando en cuenta la geometría del microcanal. Esta se resolvió utilizando el método de elemento finito, implementado en COMSOL-Multiphysics. A continuación, se ilustra la magnitud de la fuerza electroforética cerca de los obstáculos en los microcanales, obtenida numéricamente para un campo eléctrico uniforme. El rojo corresponde al valor máximo de la misma.

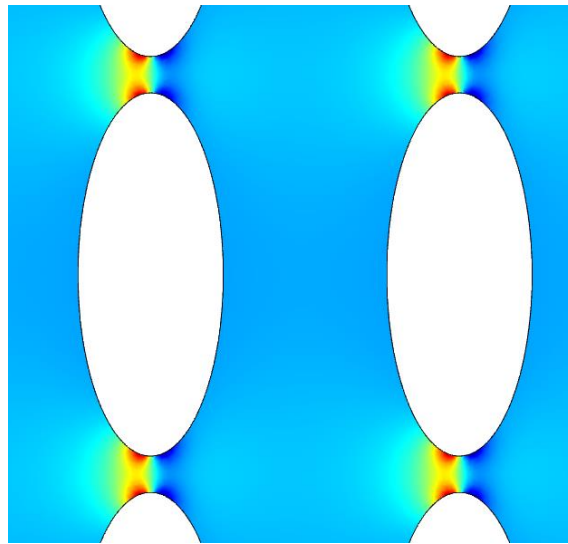


Figura 4. 6 Distribución de la fuerza electroforética cerca de los obstáculos

4.4.2 Búsqueda numérica de la señal óptima para la separación por carga

Lo más importante para conseguir la separación de micropartículas es el tipo de señal que se va a aplicar en el microcanal y habiendo un sinfín de posibilidades para la misma, no podemos experimentar todas las señales directamente en el microdispositivo, en primera instancia por el costo que esto llevaría y, en segunda, por el tiempo necesario para barrer un buen conjunto de señales. Por consiguiente, las simulaciones numéricas son esenciales para probar una señal y posteriormente llevarla al experimento. Así, con la finalidad de llevar a cabo un estudio automatizado, se realizó un programa en Matlab, capaz de probar diferentes señales periódicas candidatas para conseguir la microseparación. Este algoritmo se hizo para la separación por carga y también para la separación por tamaño. A continuación, se describe brevemente el método de búsqueda.

Con ayuda de las propiedades eléctricas obtenidas experimentalmente, la potencial zeta de las partículas ya es conocido y en las simulaciones realizadas en COMSOL, se añadieron estos parámetros para predecir el potencial mínimo de atrapamiento para cada una de las partículas de la tabla 4.1. Así, delimitamos un rango de amplitudes posible para cada par de partículas. Posteriormente el voltaje de corrimiento nos permite modular el pase selectivo de las partículas, quedándose atrapadas aquellas con menor movilidad electrocinética. Finalmente, la frecuencia fue elegida entre 0.1 Hz y 10 Hz, tratando de evitar efectos inerciales y al mismo tiempo obtener una buena velocidad de filtración de partículas.

4.4.3 Resultados experimentales de la separación por carga

Para este estudio se utilizaron partículas de 2 micras de diámetro y su potencial ζ_p de $65\pm 2\text{mV}$ y $74\pm 2\text{mV}$, respectivamente (ver tabla 4.1). En la siguiente figura se muestra la distribución de esta mezcla de partículas a lo largo del microcanal obstaculizado.

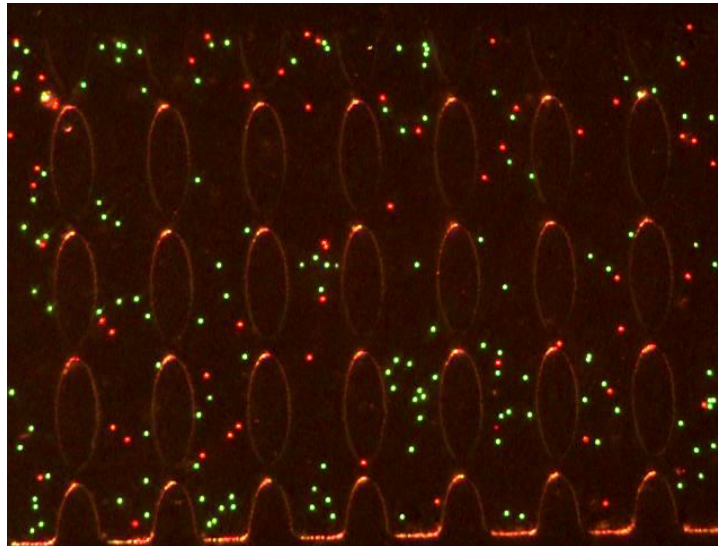


Figura 4. 7 Mezcla de partículas de $2\mu\text{m}$ de diámetro colocadas en el microcanal obstaculizado

Después de estimar el potencial eléctrico necesario para generar atrapamiento de las partículas, se aplicaron distintas formas de señal. Haciendo variar la amplitud y la frecuencia, optimizando la separación de las micropartículas con cada una de ellas. En este caso, las señales asimétricas fueron las que consiguieron una mejor separación de partículas con diferente carga eléctrica y mismo tamaño. A continuación, se muestran dos ejemplos de señal que obtuvieron éxito.

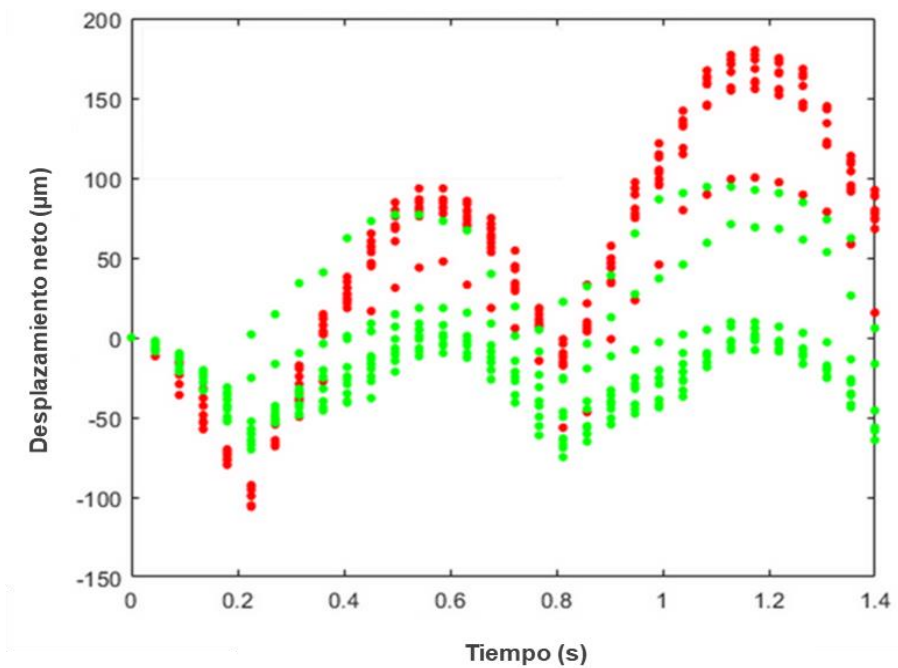


Figura 4. 8 Desplazamiento neto de las partículas de 2 μm aplicando una señal diente de sierra izquierdo de 650V de amplitud, 600ms de periodo y un offset de 100V

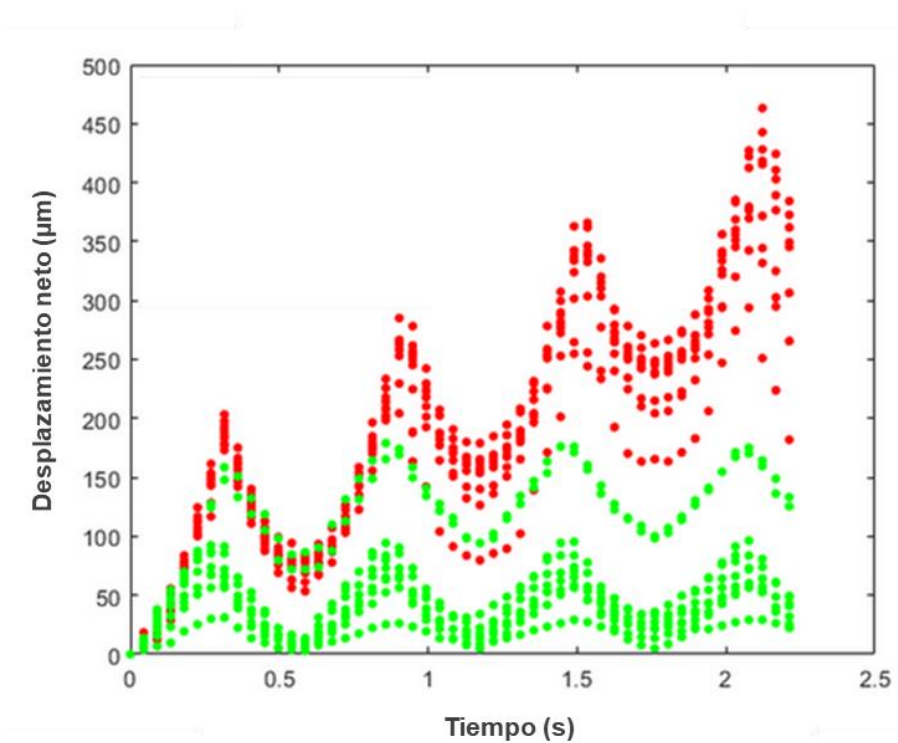


Figura 4. 9. Desplazamiento neto de las partículas de 2 μm aplicando una señal diente de sierra derecho de 650V de amplitud, 600ms de periodo y un offset de 100V

4.4.4 Búsqueda numérica de la señal óptima para la separación por tamaño

Dado que la dielectroforesis es un fenómeno de segundo orden respecto al campo eléctrico y proporcional al volumen de la partícula, este tipo de separación es mucho más sencilla. Se utiliza un algoritmo similar al explicado para la separación por carga, con la única diferencia de que el potencial de atrapamiento en este caso es muy distinto debido a la diferencia de tamaño. Para hacer una comparación, la magnitud de la fuerza dielectroforética para una partícula de $10\mu\text{m}$ es mil veces mayor que la de una partícula de $1\mu\text{m}$. A pesar de ello, la señal debe modularse para evitar efectos inerciales importantes. El algoritmo se detalla en el Anexo A4.

4.4.5 Separación de micropartículas con diferente tamaño

Para este estudio se utilizaron partículas de 5 y 7.6 micras de diámetro y su potencial ζ_p de $55\pm 2\text{mV}$ y $56\pm 2\text{mV}$, respectivamente (ver tabla 4.1). La técnica de microseparación propuesta se basa principalmente en la diferencia del potencial de atrapamiento para partículas con distinto tamaño, incluso cuando poseen un potencial zeta cercano. Esto es posible gracias a que la fuerza dielectroforética depende del volumen de las partículas. A continuación, se muestra una imagen típica de la mezcla de partículas dispuesta en el microcanal obstaculizado.

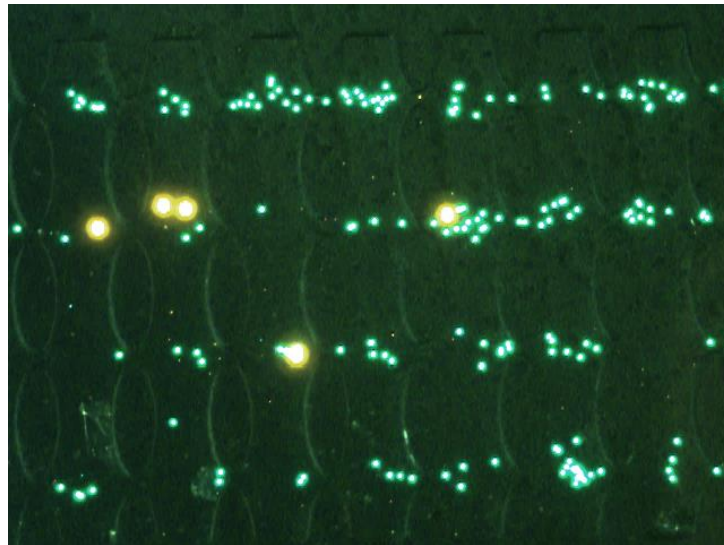


Figura 4. 10 Mezcla de partículas de 5 y 7.6 μm de diámetro colocadas en el microcanal obstaculizado

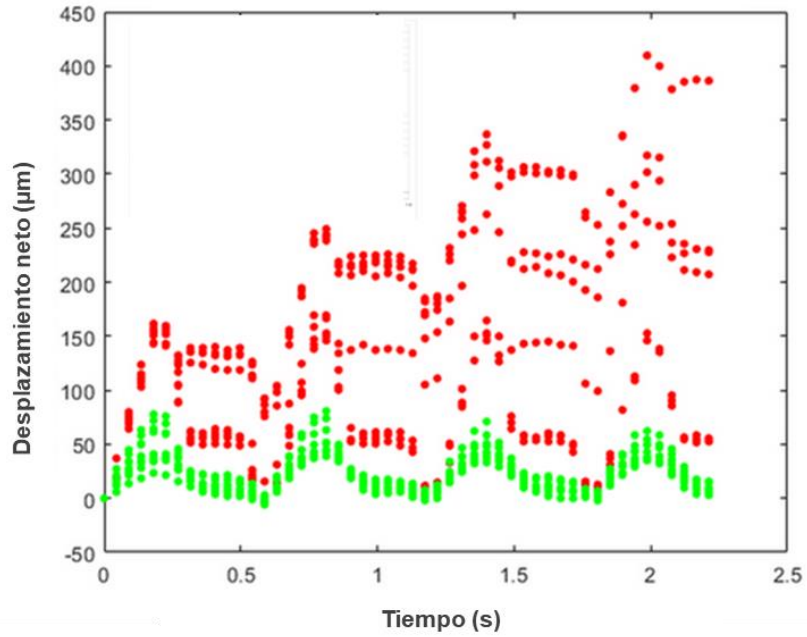


Figura 4. 11 Desplazamiento neto de las partículas de 5 µm (verdes) y 7 µm (rojas), aplicando una señal sinusoidal de 1300V de amplitud, 600ms de periodo y un offset de -600V

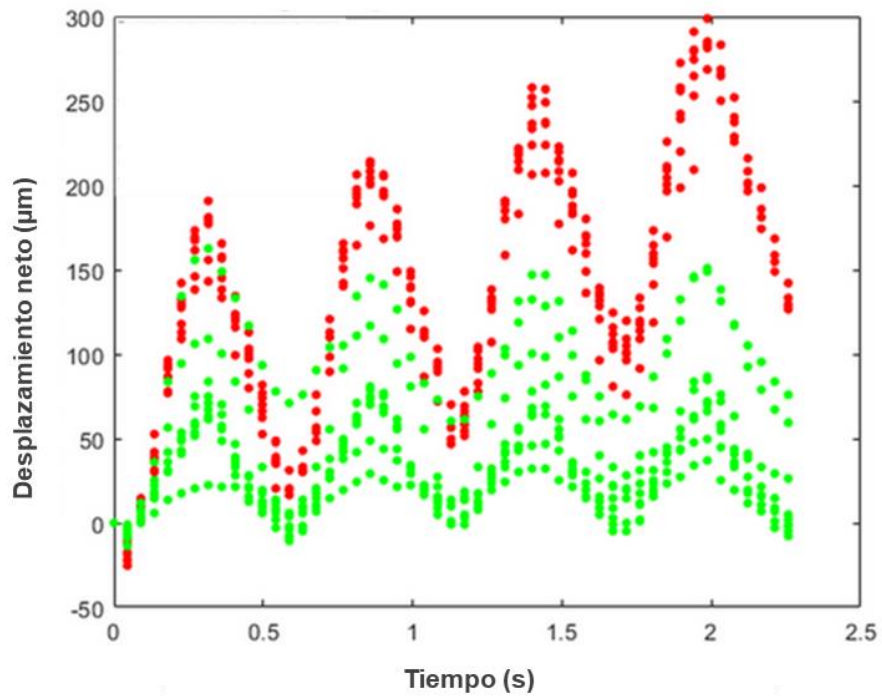


Figura 4. 12 Desplazamiento neto de las partículas de 5 µm (verdes) y 7 µm (rojas), aplicando una señal triangular de 650 V de amplitud, 600ms de periodo y un offset de -100V

Como se puede observar en las figuras anteriores, se consiguió exitosamente la separación de micropartículas con diferente tamaño y carga eléctrica. Las simulaciones computacionales fueron esenciales para poder predecir el tipo de señal eléctrica que debe aplicarse en función de las propiedades físicas de las mezclas de partículas analizadas. Evidentemente, se puede optimizar el proceso de separación y esto será el trabajo de tesis de doctorado de uno de los estudiantes de posgrado en ingeniería biomédica del Instituto de Tecnología de Rochester, con quien se mantiene la colaboración para la redacción del artículo de microseparaciones con señales de corriente alterna de baja frecuencia.

5. CONCLUSIONES Y LOGROS OBTENIDOS

En este trabajo se ha estudiado, de forma numérica y experimental, la dinámica de suspensiones granulares que se mueven a través de conductos obstaculizados debido a cambios en su sección transversal o a la presencia de postes en su interior. El movimiento de los fluidos ha sido generado de dos maneras: 1) por medio de un gradiente de presión establecido por el campo gravitacional y 2) aplicando un campo eléctrico en el interior de un microcanal obstaculizado.

En el primer estudio, correspondiente al flujo de materia granular sedimentada en agua, se encontró que la mezcla se comporta como un medio poroso en movimiento, cuya resistencia hidrodinámica varía en función de las características físicas de los granos y también del orificio circular, pudiéndose asociar una viscosidad dinámica para el régimen laminar. La descarga relativa entre granos y líquido resultó ser linealmente proporcional y el parámetro determinante para el flujo es la razón entre los diámetros de las partículas y el orificio, pudiendo fluir más fácilmente en menores aperturas, respecto a las de un silo lleno con un medio granular seco. Finalmente, el modelo basado en el principio de Bernoulli, la ley de Darcy y la conservación de la masa, fue suficiente para predecir correctamente la dinámica para los tamaños de grano estudiados.

En el segundo estudio, concerniente al flujo electrocinético, por un lado, se diseñó e implementó un método experimental para determinar la potencial zeta de partículas micrométricas, por otra parte, al estudiar este mismo flujo en un canal obstaculizado, se demostró que la dielectroforesis es capaz de modular la migración de las partículas empleando corriente alterna de baja frecuencia y gracias a ello se consiguieron separaciones de micropartículas que tienen distinto tamaño o carga superficial. Para lograr una separación fue necesaria una búsqueda numérica de las señales óptimas para dicho fin, lo cual se pudo comprobar separando distintas mezclas de partículas, con diferente tamaño o carga eléctrica.

Como resultado de la presente investigación fueron redactados 4 artículos de investigación, los cuales se muestran en el anexo A6. Dos de ellos ya fueron publicados en las revistas internacionales *Physics of Fluids*, *IOP* y *Electrophoresis*, de *Wiley & Sons*. Otro de los artículos se encuentra en proceso de arbitraje en el *European Journal of Physics* y el último artículo será enviado a *Analytical Chemistry*.

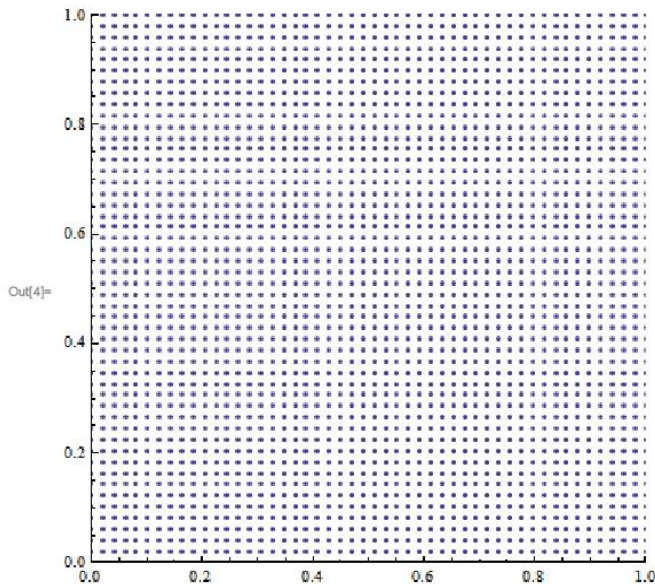
ANEXOS

A1. Simulación de un flujo incompresible por diferencias finitas

Solución Numérica de las Ecuaciones de Navier-Stokes por FDM de orden variable

Primero definimos la malla donde se realizará la simulación del flujo. En este caso es una malla cuadrada de 50 puntos por lado

```
In[1]= puntos = 50;  
nx = N@Range[0, 1, 1 / (puntos - 1)];  
malla = Flatten[Outer[List, nx, nx], 1];  
ListPlot[malla, AspectRatio -> 1, PlotRange -> {{0, 1}, {0, 1}}] // Rasterize
```



En cada uno de estos puntos de malla, las velocidades (u , v) y la presión p debe calcularse. Esto significa que cada punto contiene tres incógnitas. Debemos asociarles un único un nombre.

```
In[5]= nL = Length[malla];  
varsU = Table[Unique[u$], {nL}];  
varsV = Table[Unique[v$], {nL}];  
varsP = Table[Unique[p$], {nL}];
```

In[9]=

El segundo paso en el algoritmo es encontrar una aproximación a las derivadas:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \sum a_{ij} u(x_j, y_j).$$

Esta es la aproximación por diferencias finitas. Los coeficientes se pueden calcular utilizando la serie tradicional de Taylor. NDSolve tiene una función de utilidad llamada NDSolve`FiniteDifferenceDeriva-

tive que calcula estos coeficientes automáticamente. Aquí hay un ejemplo para un orden 2 de aproximación:

```

In[19]= umalla = h Range[0, 8];
opt = "DifferenceOrder" → 2;
Thread[{Thread[Map[f'[#] &, umalla] == NDSolve`FiniteDifferenceDerivative[
    Derivative[1], umalla, Map[f, umalla], opt]]] // Grid

```

$$f'[0] = -\frac{3f[0]}{2h} + \frac{2f[h]}{h} - \frac{f[2h]}{2h}$$

$$f'[h] = -\frac{f[0]}{2h} + \frac{f[2h]}{2h}$$

$$f'[2h] = -\frac{f[h]}{2h} + \frac{f[3h]}{2h}$$

$$f'[3h] = -\frac{f[2h]}{2h} + \frac{f[4h]}{2h}$$

```

Out[21]=

```

$$f'[4h] = -\frac{f[3h]}{2h} + \frac{f[5h]}{2h}$$

$$f'[5h] = -\frac{f[4h]}{2h} + \frac{f[6h]}{2h}$$

$$f'[6h] = -\frac{f[5h]}{2h} + \frac{f[7h]}{2h}$$

$$f'[7h] = -\frac{f[6h]}{2h} + \frac{f[8h]}{2h}$$

$$f'[8h] = \frac{f[6h]}{2h} - \frac{2f[7h]}{h} + \frac{3f[8h]}{2h}$$

Entonces, con la ayuda de NDSolve`FiniteDifferenceDerivative, el sistema de las ecs. de Navier-Stokes se puede convertir en un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales. Para la discretización, necesitamos las matrices asociadas a la primera y segunda derivadas en x e y. La precisión de la aproximación de la diferencia finita se puede especificar mediante la opción "DifferenceOrder". Un valor de 4 significaría que la aproximación es precisa en el cuarto orden.

```

In[12]= opt = "DifferenceOrder" → 2;
dfdx = NDSolve`FiniteDifferenceDerivative[{1, 0}, {nx, nx}, opt][
    "DifferentiationMatrix"];
dfdy = NDSolve`FiniteDifferenceDerivative[{0, 1}, {nx, nx}, opt][
    "DifferentiationMatrix"];
d2fdx2 = NDSolve`FiniteDifferenceDerivative[{2, 0}, {nx, nx}, opt][
    "DifferentiationMatrix"];
d2fdy2 = NDSolve`FiniteDifferenceDerivative[{0, 2}, {nx, nx}, opt][
    "DifferentiationMatrix"];

```

Con las variables definidas y las matrices calculadas, las ecuaciones algebraicas no lineales se construyen como:

```

Reynolds = 100;
eqnsU = varsU * (dfdx.varsU) + varsV * (dfdy.varsU) +
    dfdx.varsP - (1/Reynolds) * ((d2fdx2 + d2fdy2).varsU);
eqnsV = varsU * (dfdx.varsV) + varsV * (dfdy.varsV) +
    dfdy.varsP - (1/Reynolds) * ((d2fdx2 + d2fdy2).varsV);
eqnsCont = dfdx.varsU + dfdy.varsV;

```

Observe que el número de Reynolds se toma como 100 para este ejemplo.

Ahora solamente hace falta tener en cuenta las condiciones de contorno. Para hacer esto, necesitamos encontrar los puntos de malla que se encuentran en el límite Y los números de ecuación asociados con ellos. Esto se puede hacer como

```
fronteras = DeleteDuplicates@
  Flatten[Position[malla, #] & /@ {{0., y_}, {1., y_}, {x_, 0.}, {x_, 1.}}];
tapa = Flatten@Position[malla, {x_, 1.}];
paredes = Complement[fronteras, tapa];
```

Ahora que se conocen las posiciones de los límites, se deben aplicar las siguientes condiciones de contorno:

$$\begin{aligned} u(0,y)=u(1,y)=u(x,0)=0, \\ u(x,1)-1=0, \\ v(0,y)=v(1,y)=v(x,0)=v(x,1)=0. \end{aligned}$$

La incorporación de las condiciones de contorno implica una sustitución de las ecuaciones discretizadas con los valores en la frontera

```
eqnsU[[fronteras]] = varsU[[fronteras]];
eqnsU[[tapa]] = varsU[[tapa]] - 1;
eqnsV[[fronteras]] = varsV[[fronteras]];
eqnsCont[[tapa[[1]]]] = varsP[[tapa[[1]]]];
```

Con la discretización completa, podemos proceder a resolver el sistema. Para hacer esto, todas las ecuaciones discretizadas deben unirse en un gran sistema de ecuaciones. Esto significa que el sistema final a resolver será $3n$, donde n es el número de puntos de malla. El 3 viene del hecho de que estamos resolviendo tres variables desconocidas en cada punto de malla. Entonces, para una malla de 100×100 , resolveremos simultáneamente 30,000 ecuaciones.

```
Ecuaciones = Join[eqnsU, eqnsV, eqnsCont];
Variables = Join[varsU, varsV, varsP];
```

```
Length /@ {Ecuaciones, Variables}
```

```
Out[30]= {7500, 7500}
```

La función FindRoot se puede utilizar para resolver este sistema de forma aproximada con la precisión establecida con la opción PrecisionGoal.

```
sol = Variables /. FindRoot[Ecuaciones, Thread[{Variables, 1}], PrecisionGoal -> 4];
```

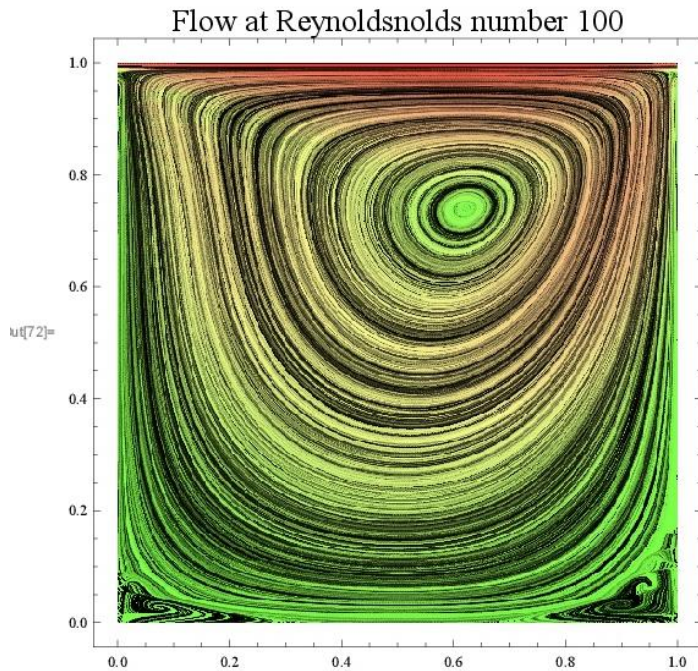
Las velocidades se calcularon en puntos discretos. Usando la función Interpolación, la solución discreta se puede convertir en una función continua.

```
h[32]= {usoltemp, vsoltemp, psoltemp} = Partition[sol, nL];
usol = Interpolation@Join[malla, Transpose@List@usoltemp, 2];
vsol = Interpolation@Join[malla, Transpose@List@vsoltemp, 2];
psol = Interpolation@Join[malla, Transpose@List@psoltemp, 2];
```

Podemos visualizar la interpolación utilizando LineIntegralConvolutionPlot, que genera visualizaciones

de flujo muy atractivas.

```
h[36]= LineIntegralConvolutionPlot[{{usol[x, y], vsol[x, y]}, {"noise", 500, 500}},  
  {x, 0, 1}, {y, 0, 1}, LineIntegralConvolutionScale -> 3,  
  ColorFunction -> "RoseColors",  
  PlotLabel -> Style[Text["Flow at Reynoldsnolds number 100"], 18]]
```



Este algoritmo puede adaptarse para el estudio de fluidos complejos obstaculizados, cambiando las respectivas condiciones de contorno, asumiendo que se conoce un modelo para la viscosidad.

A2. Simulación de un flujo incompresible por elemento finito

Este programa fue desarrollado en el curso de biofísica computacional.

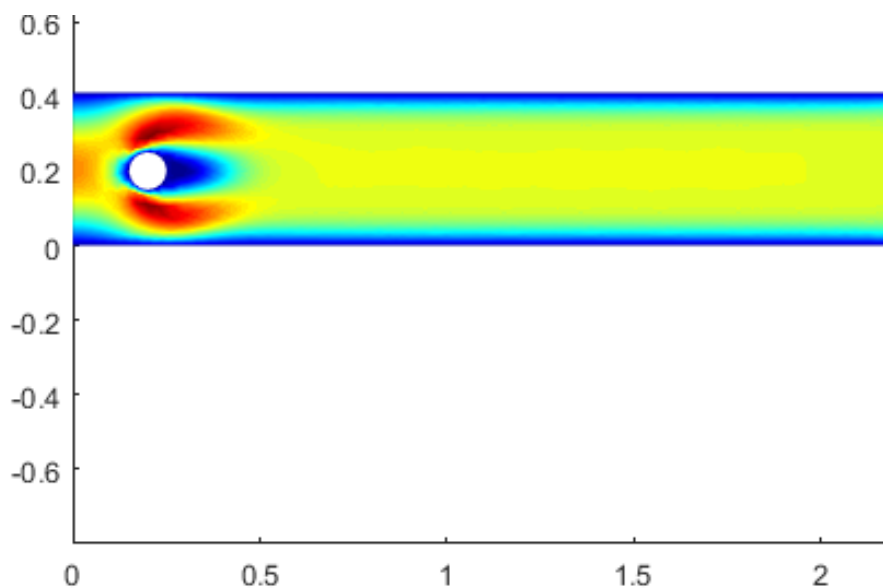
```
function NSChorinSolver()  
channel=DFGg();  
[p,e,t]=initmesh(channel,'hmax',0.03);  
np=size(p,2);  
x=p(1,:); y=p(2,:);  
out=find(x>2.199); % nodes on outflow  
wgts=zeros(np,1); % big weights  
wgts(out)=1.e+6;  
R=spdiags(wgts,0,np,np); % diagonal penalty matrix  
in =find(x<0.001); % nodes on inflow  
bnd=unique([e(1,:) e(2,:)]); % all nodes on boundary  
bnd=setdiff(bnd,out); % remove outflow nodes  
mask=ones(np,1); % a mask to identify no-slip nodes  
mask(bnd)=0; % set mask for no-slip nodes to zero  
x=x(in); % x-coordinate of nodes on inflow
```

```

y=y(in); % y-
Umax=0.3; % maximum inflow velocity
g=zeros(np,1); % no-slip values
g(in)=4*Umax*y.*(0.41-y)/0.41^2; % inflow profile
[A,unused,M]=assema(p,t,1,0,1);
Bx=ConvectionAssembler2D(p,t,ones(np,1),zeros(np,1));
By=ConvectionAssembler2D(p,t,zeros(np,1),ones(np,1));
dt=0.01; % time step
nu=0.001; % viscosity
V=zeros(np,1); % x-velocity
U=zeros(np,1); % y
for l=1:100
% assemble convection matrix
C=ConvectionAssembler2D(p,t,U,V);
% compute tentative velocity
U=U-dt*(nu*A+C)*U./M;
V=V-dt*(nu*A+C)*V./M;
% enforce no-slip BC
U=U.*mask+g;
V=V.*mask;
% solve PPE
P=(A+R)\-(Bx*U+By*V)/dt;
% update velocity
U=U-dt*(Bx*P)./M;
V=V-dt*(By*P)./M;
%pdesurf(p,e,t,'flowdata',[U V]),axis equal,pause(.1)
%pdecont(p,t,P),axis equal,pause(.1)
%sqrt(U.*U+V.*V)
pdeplot(p,e,t,'XYData',U,'ColorMap','jet'),axis equal,pause(0.05)
end

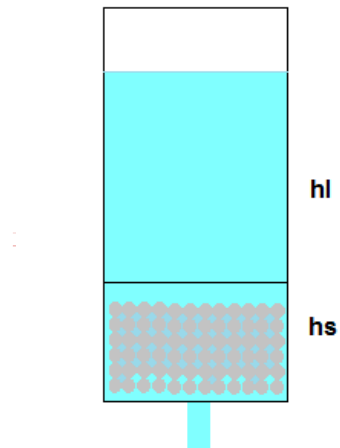
```

El resultado se muestra a continuación, donde los ejes representan las dimensiones físicas, en cm. El número de Reynolds es 300 en este ejemplo.



A3. Modelo numérico de la descarga mixta

Mixed Analysis



$$\frac{dp}{dx} = -\frac{180\mu u(1-\epsilon)^2}{d_p^2 \epsilon^3}$$

$$\dot{m} = 0.58\rho^o g^{0.5} (D - kd_p)^{2.5}$$

Physical Model ;

```
Simplify DSolve[hs'[t] == A B h1'[t] + hs'[t], hs[0] == hs0, hs[t], t]
.. hs. t. : hs0 + B hs0 A t + B h1. 0. + B h1. t.
          B
DSolve[hs'[t] == A B h1'[t] + hs'[t], hs[0] == hs0, hs[t], t]
```

Particular Solutions;

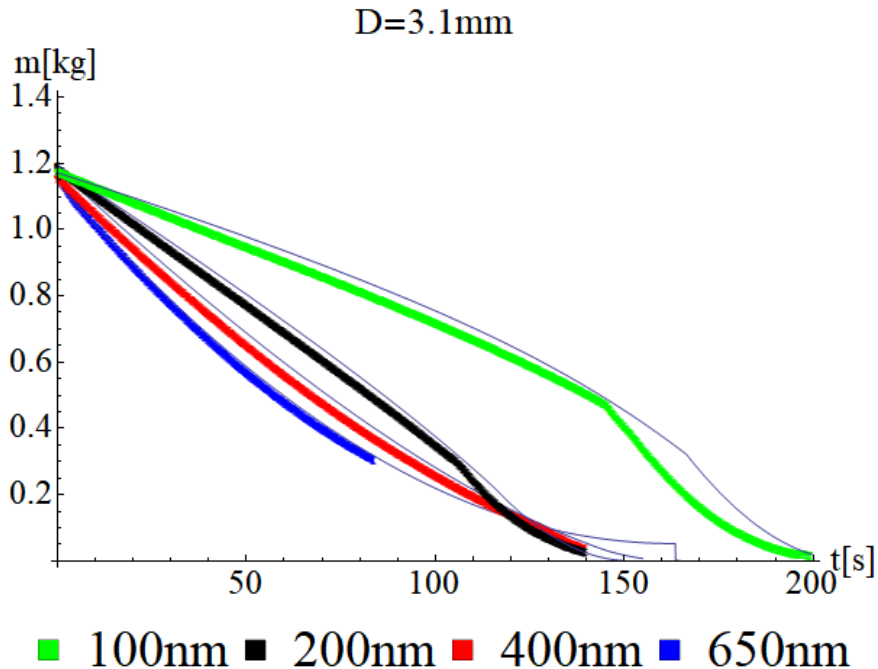
```
0.38;
0.8 10^3;
d 690 10^6;
180 1 10^2;
d^2 3;
hs0 0.24;
h10 0.5;
s1 0.00152;
s2 0.0000035;
r s2 s1;
g 9.8;
1000;
B 1.4;
```

```

ns600
Plot Piecewise S1 Evaluate hl t hs . s Evaluate hs . s S1 2.66 1 , t td ,
S1 Sqrt h0 2 S2 Sqrt 2 g S1^2 S2^2 t td 2 ^2, t td , t, 0, 165 ,
PlotRange All ;
ns600D
Flatten
Table Piecewise S1 Evaluate hl t hs . s Evaluate hs . s S1 2.66 1 , t td ,
S1 Sqrt h0 2 S2 Sqrt 2 g S1^2 S2^2 t td 2 ^2, t td , t, 0, 165, 1 ;
mD ListInterpolation ns600D ;
Qh600 Table 100 Evaluate hs . s 1 , 1000 mD t , t, 0, td, 1 ;
Qt600
Flatten
Table
Piecewise 1000 mD t , t td ,
S1 2000 Sqrt h0 2 S2 Sqrt 2 g S1^2 S2^2 t td 2 S2 Sqrt 2 g S1^2 S2^2 ,
t td , t, 0, 155, 1 ;
Plot 1000 mD t , t, 0, 155
F6 Show ListLinePlot Qh600 , ListPlot Qh600E , AxesOrigin 0, 0 , PlotRange All
ListPlot Qt600
Show m600Exp, ns600, AxesOrigin 0, 0 , PlotRange 0, 165 , 0, 2 , ImageSize 600

```

Análogamente se calculó el flujo para cada tamaño de partícula en el mismo programa. A continuación, se muestran las masas en función del tiempo. Las líneas de color representan los experimentos y las continuas los resultados numéricos.



A4. Búsqueda de señal óptima para la separación por carga

%Signal Sweep

%DC offset

```
VDC_min = 50;  
VDC_max = 200;  
VDC_space = 5;
```

%Period

```
P_min = .1;  
P_max = 1;  
P_space = .05;
```

%Half amplitude voltage

```
VHA_min = 500;  
VHA_max = 800;  
VHA_space = 5;
```

% Input parameters

```
Vtrap = 800; %volts %% Minimum trapping voltage  
dtrap = -10; %microns %% Distance of particles from the post centerline when at Vtrap
```

%%This is for the a 1cm channel and is simply the slope of the particle speed in microns vs voltage

```
Mg = 1.4428; %microns/Volt*seconds %% Mobility of green particles  
Mr = 2.0129; %microns/Volt*seconds %% Mobility of red particles
```

%size of sweeps

```
m = 1+(VHA_max-VHA_min)/VHA_space;  
n = 1+(VDC_max-VDC_min)/VDC_space;  
h = 1+(P_max-P_min)/P_space;
```

% Filling output tensors with zeros to make program run faster

```
data_Xf = zeros(m,n,h); %% Distance of closest particles to the post centerline when trapping voltage is reached.  
data_Xfr = zeros(m,n,h); %% Distance the red particles move while the green particles are trapped
```

%values for percentage notifications

```
per10 = round(h*.1);  
per20 = round(h*.2);  
per30 = round(h*.3);  
per40 = round(h*.4);  
per50 = round(h*.5);  
per60 = round(h*.6);  
per70 = round(h*.7);  
per80 = round(h*.8);  
per90 = round(h*.9);
```

j = 0; %Period sweep counter

for P = P_min:P_space:P_max %period sweep

```
    j = j+1;  
    k = 0; %DC offset sweep counter
```

```
        for VDC = VDC_min:VDC_space:VDC_max %DC offset sweep
```



```

k = k+1;
i = 0; %Half amplitude sweep counter

for VHA = VHA_min:VHA_space:VHA_max %Half amplitude sweep

    i = i+1;

    if VDC+VHA > Vtrap %model only works if particles are trapping

        V = @(t) VDC + VHA*sin(t*2*pi/P); %applied signal

        % Calculated values

        t3a = 0.5*P*asin((Vtrap - VDC)/VHA)/pi;
        t0 = (P/2)-t3a; %end of trapping (start of cycle)
        t2 = 0.5*P*asin((-VDC)/VHA)/pi+P; %signal starts to go positive
        t1 = (P/2)-t2+P; %signal starts to go negative
        t3 = t3a+P; %Start of trapping
        t4 = t0+P; %end of cycle end of trapping

        % Calculating distance traveled

        A1 = integral(V,t0,t1);
        A2 = integral(V,t1,t2);
        A3 = integral(V,t2,t3);
        A4 = integral(V,t3,t4);

        Anet = A1+A2+A3;

        X3r = dtrap + Anet*Mr; %distance of red particles from post centerline
        X3g = dtrap + Anet*Mg; %distance of green particles from post centerline

        % Data processing

        if (X3r > 0) && (X3g < 0) %check to make sure if one particle is on each side the posts
            if X3r > -X3g %use whichever distance is lower for X final
                Xf = -X3g;

            else
                Xf = X3r;
            end

            Xfr = A4*Mr; %

        else
            Xf = 0;
            Xfr = 0;
        end

        else
            Xf = 0;
            Xfr = 0;
        end

        data_Xf(i,k,j) = Xf;
        data_Xfr(i,k,j) = Xfr;

    end
end

```

```
end
end
end
```

```
[Vdc, Vha, p] =
meshgrid(VDC_min:VDC_space:VDC_max,VHA_min:VHA_space:VHA_max,P_min:P_space:P_max);
```

A5. Búsqueda de la señal óptima para la separación por tamaño

```
%Signal Sweep
```

```
%DC offset
VDC_min = 10;
VDC_max = 500;
VDC_space = 5;
```

```
%Period
P_min = .1;
P_max = 1;
P_space = .05;
```

```
%Half amplitude voltage
VHA_min = 200;
VHA_max = 1400;
VHA_space = 5;
```

```
% Input parameters
Vtrap = 40; %volts %% Minimum trapping voltage
dtrap = -10; %microns %% Distance of particles from the post centerline when at Vtrap
```

```
%%This is for the a 1cm channel and is simply the slope of the particle speed in microns vs voltage
Mg = f(green); %microns/Volt*seconds %% Mobility of green particles
Mr = g(red); %microns/Volt*seconds %% Mobility of red particles
```

```
%size of sweeps
m = 1+(VHA_max-VHA_min)/VHA_space;
n = 1+(VDC_max-VDC_min)/VDC_space;
h = 1+(P_max-P_min)/P_space;
```

```
% Filling output tensors with zeros to make program run faster
data_Xf = zeros(m,n,h); %% Distance of closest particles to the post centerline when trapping voltage is reached.
data_Xfr = zeros(m,n,h); %% Distance the red particles move while the green particles are trapped
```

```
j = 0; %Period sweep counter
```

```
for P = P_min:P_space:P_max %period sweep
```

```
    j = j+1;
    k = 0; %DC offset sweep counter
```

```
    for VDC = VDC_min:VDC_space:VDC_max %DC offset sweep
```

```
        k = k+1;
```

```

i = 0; %Half amplitude sweep counter

for VHA = VHA_min:VHA_space:VHA_max %Half amplitude sweep

    i = i+1;

    if VDC+VHA > Vtrap %model only works if particles are trapping

        V = @(t) VDC + VHA*sin(t*2*pi/P); %applied signal

        % Calculated values

        t3a = 0.5*P*asin((Vtrap - VDC)/VHA)/pi;
        t0 = (P/2)-t3a; %end of trapping (start of cycle)
        t2 = 0.5*P*asin((-VDC)/VHA)/pi+P; %signal starts to go positive
        t1 = (P/2)-t2+P; %signal starts to go negative
        t3 = t3a+P; %Start of trapping
        t4 = t0+P; %end of cycle end of trapping

        % Calculating distance traveled

        A1 = integral(V,t0,t1);
        A2 = integral(V,t1,t2);
        A3 = integral(V,t2,t3);
        A4 = integral(V,t3,t4);

        Anet = A1+A2+A3;

        X3r = dtrap + Anet*Mr; %distance of red particles from post centerline
        X3g = dtrap + Anet*Mg; %distance of green particles from post centerline

        % Data processing

        if (X3r > 0) && (X3g < 0) %check to make sure if one particle is on each side the posts
            if X3r > -X3g %use whichever distance is lower for X final
                Xf = -X3g;

                else
                    Xf = X3r;
                end

                Xfr = A4*Mr; %
            else
                Xf = 0;
                Xfr = 0;
            end

        else
            Xf = 0;
            Xfr = 0;
        end

        data_Xf(i,k,j) = Xf;
        data_Xfr(i,k,j) = Xfr;

    end
end
[Vdc, Vha, p] =
meshgrid(VDC_min:VDC_space:VDC_max,VHA_min:VHA_space:VHA_max,P_min:P_space:P_max);

```

A6. Artículos publicados, enviados y en preparación

1. Hidalgo-Caballero, S., Bonilla-Capilla B. & Bermudez, B. (2018). Variable finite order difference method to simulate 2D incompressible flows. *European Journal of Physics*. (Enviado)

A variable order finite difference method to simulate 2D steady incompressible flows

S. Hidalgo-Caballero^{1,a}, B. Bonilla-Capilla², and B. Bermúdez³

¹ Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 18 sur y San Claudio, 72570, Puebla, Mexico

² Cátedras CONACYT Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Av. San Claudio y 18 sur, 72570, Puebla, México

³ Facultad de Ciencias de la Computación, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 14 sur y San Claudio, 72570, Puebla Mexico

Received: date / Revised version: date

Abstract. A variable finite difference method employing a single grid of 101×101 points is implemented to simulate the two-dimensional steady square lid-driven cavity flow for Reynolds numbers in the range of $100 \leq Re \leq 10000$. The governing Navier-Stokes equations are solved in primitive variables and a higher order of approximation is achieved by taking more neighbors around each grid point for the calculation of the derivatives as the Reynolds number increases. Finally, the convergence of this method is compared with the classic stream function-vorticity formulation, which uses different grid sizes, and the present algorithm is able to obtain similar results in less computation time. Thus, this technique can be used to easily simulate incompressible flows for moderate Reynolds numbers in computers with modest memory capabilities.

2. Cervantes Álvarez A., Hidalgo-Caballero, S. & Pacheco-Vázquez, F (2018). The simultaneous discharge of liquid and grains from a silo. *Physics of Fluids*. (Publicado y Editor's Suggestion)

PHYSICS OF FLUIDS 30, 043302 (2018)



The simultaneous discharge of liquid and grains from a silo

A. M. Cervantes-Álvarez, S. Hidalgo-Caballero, and F. Pacheco-Vázquez^{a)}

Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla 72570, Mexico

(Received 15 January 2018; accepted 15 March 2018; published online 3 April 2018)

The flow rate of water through an orifice at the bottom of a container depends on the hydrostatic pressure whereas for a dry granular material it is nearly constant. But what happens during the simultaneous discharge of grains and liquid from a silo? By measuring the flow rate as a function of time, we found that (i) different regimes appear, going from the constant flow rate to a hydrostatic-like discharge depending on the aperture size and grain diameter, (ii) the mixed material is always discharged faster than dry grains but slower than liquid, (iii) for the mixture, the liquid level drops faster than the grain level, but they are always linearly proportional to one another, and (iv) a sudden growth in the flow rate happens during the transition from a biphasic discharge to a single phase discharge. These results are associated to the competition between the decrease in hydrostatic pressure above the granular bed and the hydrodynamic resistance. A model combining Darcy's law with Bernoulli and mass conservation equations is proposed, and the numerical results are in good agreement with experiments. *Published by AIP Publishing.* <https://doi.org/10.1063/1.5022485>

INTRODUCTION

The clepsydra was an ancient device used to measure the passage of time based on the slow discharge of water through an orifice at the bottom of a graduated vessel. Its origin is unknown, but presumably it appeared in China about six thousand years ago.¹ The markings in this antiquity are

Even in unconventional systems of repelling particles, Q_g is constant during the discharge.^{14,15}

In all the above studies, the interstitial medium is air and its presence was neglected or assumed to be equivalent to the discharge of dry grains in vacuum. Only recently, the discharge of silos totally submerged in water was considered.^{16–18} Under these conditions, the flow rate is not constant unless the fill-

3. Hidalgo-Caballero, S., Lentz, C. J., & Lapizco-Encinas, B. H. (2018). Assessment of submicron particle zeta potential in simple electrokinetic microdevices. *Electrophoresis*. (Publicado)

Electrophoresis 2018, 00, 1–5

1

Samuel Hidalgo-Caballero^{1,2}
Cody Justice Lentz¹
Blanca H. Lapizco-Encinas¹ 

Short Communication

Assessment of submicron particle zeta potential in simple electrokinetic microdevices

¹Microscale Bioseparations Laboratory and Biomedical Engineering Department, Rochester Institute of Technology, Rochester, NY, USA

²Facultad de Ciencias Físicas Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México

The present communication illustrates the use of simple electrokinetic devices for the assessment of the zeta potential of submicron polystyrene particles. A combination of manual and automatic particle tracking was employed. This approach allows for characterizing particles in the same conditions and devices in which they can be separated, e.g. dielectrophoretic separations; making the resulting data readily applicable.

Received October 9, 2018
Revised November 8, 2018
Accepted November 21, 2018

Keywords:

Electrical charge / Electrokinetics / Electrophoresis / Submicron particles / Zeta potential
DOI 10.1002/elps.201800425



Additional supporting information may be found online in the Supporting Information section at the end of the article.

Particle migration is an important research area in microfluidic devices, in particular, when working with electric field driven techniques, one crucial property is the particle zeta potential (ζ_p). This parameter accounts for the electrical charge present on a particle, as it characterizes the electrical double layer (EDL) around the particle [1]. Particle zeta potential determines the electrophoretic mobility (μ_{EP}) and the electrophoretic migration of a particle. Differences in

White et al. [8] employed CE experimentation to determine the ζ_p of polystyrene particles in order to assess particle conductivity and predict dielectrophoretic behavior. Other studies have been focused on characterizing the relationship between electrophoretic migration and particle size [7, 9] with simultaneous determination of ζ_p and zeta potential of the channel surface (ζ_w) [1, 10]. Recognized research groups in the field of CE have dedicated considerable attention to the

4. Lentz, C. J., Hidalgo-Caballero, S., & Lapizco-Encinas, B. H. (2018) Low frequency AC signals for dielectrophoresis in microfluidic devices. (*En preparación*)

Aunado a lo anterior, se realizó una colaboración con los miembros del laboratorio de materia granular y mecánica de fluidos para estudiar numéricamente, la respuesta mecánica de estructuras magnéticas tridimensionales, utilizando métodos de minimización de la energía, lo cual culminó en la publicación:

5. Hidalgo-Caballero, S., Escobar-Ortega, Y. Y., Becerra-Deana, R. I., Salazar, J. M., & Pacheco-Vázquez, F. (2019). Mechanical properties of macroscopic magnetocrystals. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 479, 149-155.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Seader, J. D., Henley, E. J., & Roper, D. K. (1998). Separation process principles.
- [2] Tamayol, A., & Bahrami, M. (2009, January). Analytical solutions for laminar fully-developed flow in microchannels with non-circular cross-section. In ASME 2009 Fluids Engineering Division Summer Meeting (pp. 1323-1333).
- [3] Lapizco-Encinas, B. H., Simmons, B. A., Cummings, E. B., & Fintschenko, Y. (2004). Dielectrophoretic concentration and separation of live and dead bacteria in an array of insulators. *Analytical chemistry*, 76(6), 1571-1579.
- [4] Wilson, T. J., Pfeifer, C. R., Mesyngier, N., & Durian, D. J. (2013). Granular discharge rate for submerged hoppers. *arXiv preprint arXiv:1307.2812*.
- [5] Dressaire, E., & Sauret, A. (2017). Clogging of microfluidic systems. *Soft Matter*, 13(1), 37-48.
- [6] Whitesides, G. M. (2006). The origins and the future of microfluidics. *Nature*, 442(7101), 368.
- [7] Batchelor, G. K. (2000). An introduction to fluid dynamics. Cambridge university press.
- [8] Kundu, P. K., Cohen, I. M., & Dowling, D. W. (2008). Fluid Mechanics 4th.
- [9] Larson, M. G., & Bengzon, F. (2013). The finite element method: Theory, implementation, and applications (Vol. 10). Springer Science & Business Media.
- [10] Yeo, Y. K. (2017). Chemical Engineering Computation with MATLAB®. CRC Press.
- [11] Dokos, S. (2017). Modelling Organs, Tissues, Cells and Devices: Using MATLAB and COMSOL Multiphysics. Springer.
- [12] Levin, Y. (2004). Introduction to statistical mechanics of charged systems. *Brazilian journal of physics*, 34(3B), 1158-1176.
- [13] Jackson, J. D. (1999). Classical electrodynamics.
- [14] Torricelli's theorem. Encyclopædia Britannica. Encyclopædia Britannica Online
- [15] W.A. Beverloo, H.A. Leniger, J. van de Velde, Chem. Eng. Sci. 15 (1961) 260-269.
- [16] Secomb, T. W. (2016). Hemodynamics. *Comprehensive Physiology*.
- [17] Darcy, H. (1856). *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. Paris: Dalmont.
- [18] Carman, P. C. (1937). Fluid flow through granular beds. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 15, 150-166.
- [19] Hansen, D. (2004). Discussion of " On the use of the Kozeny Carman equation to predict the hydraulic conductivity of soils". *Canadian Geotechnical Journal*, 41(5), 990-993.
- [20] Oda, (1985). Permeability tensor for discontinuous rock masses. *Geotechnique*, 35(4), 483-495.
- [21] Zuriguel, I., Garcimartín, A., Maza, D., Pagnaloni, L. A., & Pastor, J. M. (2005). Jamming during the discharge of granular matter from a silo. *Physical Review E*, 71(5), 051303.
- [22] Cummings, E. B., & Singh, A. K. (2003). Dielectrophoresis in microchips containing arrays of insulating posts: theoretical and experimental results. *Analytical chemistry*, 75(18), 4724-4731.
- [23] Madou, M. J. (2002). Fundamentals of microfabrication: the science of miniaturization. CRC press.
- [24] Saucedo-Espinosa, M. A., & Lapizco-Encinas, B. H. (2016). Refinement of current monitoring methodology for electroosmotic flow assessment under low ionic strength conditions. *Biomicrofluidics*, 10(3), 033104.