

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

Análisis del efecto viscoeléctrico en un flujo electroosmótico que circula en un microcanal rectangular

TESIS Que para obtener el título de Ingeniero Mecánico

PRESENTA

Andrea Campeche Loza

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Edgar Ali Ramos Gómez



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2023

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Federico Méndez Lavielle.

Secretario: Dr. José Melesio Sánchez Huerta.

Vocal: Dr. Edgar Ali Ramos Gómez.

1^{*er*} Suplente: Dra. Evelyn Salazar Guerrero.

2^{do} Suplente: Dr. Ian Guillermo Monsivais Montoliu.

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Facultad de Ingeniería – UNAM.

TUTOR DE TESIS:

NOMBRE Dr. Edgar Ali Ramos Gómez.

Ruma Gime E. 21:

FIRMA.

AGRADECIMIENTOS.

Virginia Loza Hernández y Arturo Campeche Arellano, son los mejores padres que pude haber pedido a la vida, gracias por todo su arduo trabajo y amor incondicional, gracias a ustedes soy lo que soy.

Le agradezco a la facultad de ingeniería y la Universidad Nacional Autónoma de México por formarme durante ocho años de mi vida, por brindarme una visión diferente del mundo y darme los conocimientos y herramientas necesarias para ser una buena ingeniera y sobre todo profesionista responsable, congruente y consiente del mundo que me rodea. Gracias a la UNAM me llevo mucho aprendizaje personal e intelectual, pero sobre todo me llevo las experiencias que obtuve de todas las personas que conocí dentro de la institución, tuve maestros increíbles y compañeros que me enseñaron mucho, gracias a ella también conocí a Juan de Dios Juárez Alfaro quien es una persona maravillosa y en estos últimos años me ha ayudado a crecer en todos los sentidos, gracias por estar a mi lado Juan.

Le agradezco al Dr. Edgar Ali Ramos Gómez, por ser mi guía y darme las herramientas y conocimientos necesarios para el desarrollo de esta tesis, ha sido un excelente tutor, muy diligente, dedicado, paciente y con gran vocación.

Agradezco a DGAPA (UNAM) por el apoyo económico brindado para el desarrollo de esta tesis, ya que parte del financiamiento proviene del proyecto PAPIIT- IA100623 con el nombre de: Estudio teórico y numérico de las ecuaciones diferenciales involucradas en fenómenos eléctricos y electrocinéticos asociados a la micro y nano escala.

Índice.

Resumen	1
Capítulo 1	3
Introducción	3
1.1 Microfluídica	4
1.2 Antecedentes	6
Justificación	10
Objetivo	11
Capítulo 2. Formulación del problema	13
2.1 Formulación matemática	13
2.2. Condiciones de frontera	17
2.3. Análisis de orden de magnitud	18
2.4. Modelo matemático adimensional	20
2.4.1. Condiciones de frontera adimensionales	22
Capítulo 3. Resolución del método numérico	25
3.1. ¿Qué es FreeFem++?	25
3.2. ¿Cómo se rescribe una ecuación en su forma variacional?	29
3.3. Código	34
Capítulo 4. Análisis de resultados	39
4.1 Solución analítica	39
Capítulo 5. Conclusiones	61
Nomenclatura	63
Referencias	65

Resumen.

Hoy en día, existe un importante crecimiento en la microfluídica, por lo tanto, es fundamental expandir los conocimientos sobre el tema, ya que cuenta con diversos campos de aplicación en la Ingeniería, por este motivo, el presente trabajo está dedicado a un análisis del efecto viscoeléctrico en un flujo puramente electroosmótico que pasa a través de un microcanal de placas planas paralelas. El problema está centrado en analizar potenciales eléctricos inducidos altos ζ en las paredes del microcanal, dando lugar al efecto viscoeléctrico, que genera importantes cambios en los perfiles de velocidad y el caudal volumétrico con respecto al caso donde la viscosidad del fluido se mantiene constante. Cabe aclarar que al tratarse de un flujo puramente electroosmótico, no existen gradientes de presión inducidos, por lo que el movimiento del fluido se debe únicamente a fuerzas electrocinéticas.

Para poder analizar la hidrodinámica del fluido electrolítico en dos dimensiones, se identificaron las ecuaciones de cantidad de movimiento, continuidad, Poisson-Boltzmann y conservación de corriente, como las expresiones que rigen al sistema, y por practicidad se adimensionaron a partir de un análisis de orden de magnitud. Teniendo clara esta información, se hizo uso del software numérico gratuito FreeFem++, que mediante la técnica de elemento finito, obtuvo una solución numérica, que se plasmaría en gráficas para su análisis detallado.

A través de esta metodología, los principales resultados obtenidos, muestran como el efecto viscoeléctrico es relevante cuando se consideran potenciales eléctricos inducidos altos; es decir, para valores $\bar{\zeta} > 1$, cuando el parámetro viscoeléctrico adimensional \bar{f} incrementa, existe un importante decremento en los perfiles de la velocidad longitudinal adimensional \tilde{u} , aspecto que se ve claramente reflejado en el comportamiento del caudal volumétrico.

Capítulo 1.

En este primer capítulo se explica los principales conceptos y aplicaciones de la teoría electrocinética, así como el funcionamiento y la importancia de un flujo electroosmótico en los sistemas microelectromecánicos. Así mismo, se discute y analiza el estado del arte de los aportes más relevantes de los últimos años que la comunidad científica ha desarrollado en este campo de estudio. Finalmente, se detalla la justificación, motivación y objetivos de este trabajo.

Introducción.

El ser humano está lleno de necesidades, y con forme se satisfacen algunas se generan otras, por ello la tecnología está en constante evolución, siendo hoy en día los sistemas micromecánicas los más susceptibles a dichos cambios debido a la gran cantidad de aplicaciones en los que se utilizan para distintas áreas de la ciencia como: medicina, biomédica, química, farmacéutica e ingeniería; permitiendo cambios positivos y sustanciales en la sociedad.



Figura 1.1. Sistemas microelectromecánicos [1].

En general, la ingeniería permite la creación de dispositivos que nos ayudan a mejorar la calidad de vida, así como simplificarla, por ejemplo, para el transporte de fluidos en una tubería a macroescala, se hace uso de un dispositivo llamado "bomba hidráulica". Sin embargo, no es posible hacer el uso de una bomba hidráulica, para manipular fluidos a microescala (10^{-9} a 10^{-18} litros), así que se requiere elaborar herramientas que nos den esa capacidad, por ello, en las últimas décadas se crearon dispositivos microfluídicos conocidos como laboratorios en un microdispositivo *"lab-on-a-chip"*, sistemas bio-micro-eléctricos-mecánicos "*bioMEMS*" o microsistemas analíticos totales *"micro-TAS"*, que cada vez tienen mayor relevancia en la industria biotecnológica.

1.1 Microfluídica.

La microfluídica, es la ciencia e ingeniería que se ocupa de los fenómenos de transporte y los dispositivos basados en fluidos a escala de longitud microscópicas [2]. Es decir, que es la disciplina que estudia los sistemas de unas cuantas micras a cientos de micras que manipulan cantidades diminutas de fluido $(10^{-9} \text{ a } 10^{-18} \text{ litros})$, en consecuencia, el comportamiento de los microfluidos difiere de la teoría del flujo convencional debido a la pequeña escala en la que se maneja el sistema.

La escala importante para la microfluídica no es el tamaño total del dispositivo, sino la longitud, porque determina el comportamiento del flujo, por ello, una de sus principales ventajas es que maneja cantidades microscópicas de fluido, generando mayor rendimiento, menor tiempo de análisis, y nuevos efectos en el sistema [3]. Además, trabaja con flujo laminar, número de Reynolds menor a 100, que permite el control de los procesos y posibilita predecir el comportamiento del flujo [4].

Las ventajas antes mencionadas, hacen de la microfluídica la mejor opción para realizar las funciones de equipo de laboratorio convencional y de análisis químicos complejos que se hacen a microescala, sin su intervención, se requiere mucho equipo y recursos humanos que los manejen, así como un gran consumo de reactivos y tiempo de análisis [4]. Manz et al. son partidarios de la microfluídica en los laboratorios, y en la Quinta conferencia internacional de sensores y actuadores en estado sólido [5], indicaron que las ciencias de la vida y la química son los principales campos de aplicación de la microfluídica, pues, al tratarse de dispositivos pequeños, requieren muestras de fluidos diminutas, por lo que el gasto en consumo se reduce, tanto en reactivos como en muestras. Por otro lado, en el área de las bioseparaciones (separaciones biológicas), se usa la microfluídica, para el desarrollo de técnicas de separación a microescala, se plantea crear microdispositivos de diagnóstico portátiles que puedan usarse en casa o cualquier otro lugar, con el fin de que, en un futuro, los análisis de laboratorio de la vida cotidiana sean más eficientes y precisos [6]. Tal como se puede ver en las primeras líneas del trabajo, la microfluídica tiene un gran rango de aplicaciones, que van desde el área médica, química, en la ingeniería ambiental (detector de contaminantes) [7], hasta en procesos industriales tales como sensores que detecten defectos en una etapa de control de calidad [8].

Para todas las aplicaciones mencionadas, fue necesario responder a la pregunta, ¿Cómo se puede hacer el transporte de flujo dentro de un sistema tan diminuto?, evidentemente, el uso de bombas que operan a macroescala no son una opción, ya que se requieren enormes gradientes de presión para impulsar un fluido a través de un diámetro microscópico. De esta manera las fuerzas electrocinéticas han sido la mejor alternativa, ya que, al aplicar un campo eléctrico externo, se pueden manipular, cortar, transportar, mezclar, y separar gotas microscópicas de líquido en un chip microfluídico [4].

Para el transporte de microfluidos se recurre a los fenómenos electrocinéticos que ocurren cuando existe un movimiento tangencial del líquido con respecto a una superficie cargada adyacente [9]. Si el movimiento de una solución electrolítica en relación a una superficie estacionaria cargada se debe a la aplicación de un campo eléctrico externo, el fenómeno se denomina *electroósmosis*, pero si al aplicar el campo eléctrico la superficie y las macromoléculas cargadas se mueven relativos a un líquido en reposo, el fenómeno se llama *electroforesis*. El *potencial de corriente* es un fenómeno en donde el campo eléctrico se genera por el movimiento de un fluido ionizado que pasa a través de un capilar cargado y estacionario, mientras que, en el *potencial de sedimentación*, el campo eléctrico se produce por el movimiento de la superficie y sus partículas cargadas, relativo a un líquido ionizado estacionario.

Estos cuatro fenómenos electrocinéticos son los que se aplican con mayor frecuencia, y en la presente tesis se usa el efecto electroosmótico como fuerza motriz de nuestro fluido.

1.2 Antecedentes.

Masliyah y Bhattacharjee, estudiaron los principios del comportamiento y fundamentos que rigen a un flujo electroosmótico con fluidos newtonianos, y en su libro, "Fenómenos de transporte electrocinéticos y de coloides", explican que el simple contacto entre una solución ionizada y una superficie hecha de un material dieléctrico crea una doble capa eléctrica (Electric double layer, EDL por sus siglas en ingles). Profundizando, se trata de un líquido con cargas libres y una superficie con todas sus moléculas enlazadas, que, al entrar en contacto, el sólido adquiere una carga eléctrica, que atrae hacia la pared las cargas del fluido [3]. Los iones del líquido son fuertemente atraídos hacia la superficie, y se emparejan con las cargas de la pared para formar una capa muy delgada que adquiere el nombre de capa de Stern o capa estancada. La capa de Stern, influye en los iones del fluido creando una aglomeración de cargas del mismo signo que forman una capa difusa. Sumando la capa difusa y la estancada se crea la doble capa eléctrica [10].



Figura 1.2. Esquema de la doble capa eléctrica. El inciso "a" alude a la superficie cargada, el inciso "b" muestra la capa de Stern, y por último "c" muestra la capa difusa. La suma de b +c da como resultado la longitud de Debye λ_D que es el espesor de la doble capa eléctrica. Del lado derecho se muestra la relación del potencial inducido en función de la distancia [4].

En la Figura 1.2, se muestra una distribución aproximada de las cargas dentro de la solución electrolítica, y estas, se aglomeran en el contacto entre la pared del microcanal y el fluido, pero al irse alejando de la pared, la densidad de iones disminuye hasta llegar a un valor casi nulo en el centro del microcanal. Este comportamiento, genera un potencial inducido ψ , que adquiere su máximo valor en las paredes del microcanal, y al cual se le denomina ζ , y se reduce a cero cuando se llega al centro [11]. Además, entre la capa de Stern y difusa, existe un plano de deslizamiento, en él, se da el potencial inducido máximo ζ , pero al estar en una capa fija debido a la proximidad de las cargas, el potencial se considera igual que el de la pared [3,10].

El flujo electroosmótico, se promueve cuando los iones dentro de la doble capa eléctrica se ven afectados por una fuerza de Coulomb producida por un campo eléctrico que se aplica a lo largo de la superficie cargada. Esta fuerza, genera un movimiento en las cargas y por efecto viscoso el fluido también se moverá [12]. El flujo electroosmótico es uno de los mecanismos de bombeo más empleado en la microfluídica, esto por su fácil composición, ya que no requiere tantas partes mecánicas, además de ser confiable por su alta capacidad de bombear líquidos de manera eficiente en sistemas miniaturizados, por ello es el método más empleado en el área de la biotecnología hasta la ciencia ambiental [13].

Como ya se mencionó el flujo electroosmótico es de los principales mecanismos electrocinéticos, por ello en las últimas décadas se han desarrollado múltiples investigaciones que ayudan a conocerlo. Entre estas investigaciones se encuentra el estudio de Zhao et al. [14] que realizaron un análisis del flujo puramente electroosmótico de ley de potencia en un microcanal de hendidura, considerando un flujo newtoniano, con temperatura, presión, y viscosidad constantes. En esta investigación, lograron resolver la hidrodinámica del fluido, y mostraron los efectos que tiene λ_D , el índice de comportamiento del flujo, el espesor de la doble capa y el campo eléctrico aplicado, sobre el esfuerzo cortante en las paredes del microcanal. Se demostró por Xuan et al. [15] la dependencia de las propiedades termofísicas del fluido electroosmótico con la temperatura, esto gracias al estudio de los fenómenos de trasferencia de calor, sobre fluidos con una viscosidad constante. Mientras que Tang et al. [16] comprobaron que el calentamiento Joule repercute sobre los fluidos electrocinéticos. En este sentido, una investigación reciente es la desarrollada por Ramos [12] que estudiaron un flujo electroosmótico en un microcanal considerando los efectos inducidos de la presión y la temperatura, en el problema se considera una viscosidad constante y un potencial inducido de referencia igual al potencial inducido en el plano de deslizamiento, además toma en cuenta al efecto Joule. A través de su investigación llegó a que la temperatura afecta a la longitud de Debye, generando nuevos gradientes de temperatura longitudinales que cambian al campo de flujo del sistema. Así mismo, en 2019, Lizardi et al. [17], estudiaron el efecto de los cambios de temperatura en un flujo puramente electroosmótico en un microcanal de hendidura, para un flujo newtoniano, demostraron que la tasa de flujo volumétrico disminuye en comparación con una longitud de Debye uniforme, y los fuertes gradientes de presión inducida se alteran sensiblemente por el aumento de temperatura con respecto a una referencia.

Los artículos mencionados, examinan el flujo electroosmótico de superficies en contacto con fluidos, no obstante, se han realizado investigaciones de gases que circulan en un microcanal, tal es el caso de Monsivais et al [18] que, en 2018, analizaron la transferencia de calor conjugada entre un flujo de gas enrarecido y la pared inferior de un microcanal horizontal delgado. Otro estudio importante es el realizado en 1998 por Lyklema [10], que estudio la capa de Stern, en condiciones de viscosidad constante, para un fluido newtoniano y puramente electroosmótico, demostrando que ni la viscosidad ni la atracción de las cargas hacia las paredes del solido son las causantes de la formación de esta capa estancada, sin en cambio tiene una relación importante con la doble capa eléctrica.

Por otra parte, en esta investigación también se requiere saber que es el efecto viscoeléctrico en un flujo electroosmótico, Lyklema y Overbeek [17], explican que este efecto se produce cuando el aumento de la viscosidad η cerca de la superficie es causado por el campo eléctrico de la doble capa. La variación de la viscosidad cambia el comportamiento de la velocidad en relación a los casos en que η es constante, además, demostraron que depende del potencial inducido y un factor viscoeléctrico.

Existen estudios que se adentran en el efecto viscoeléctrico, tal es el caso de Lyklema [20], que estudia el proceso de deslizamiento en términos de efectos viscoeléctrico en combinación con el dominio de la estructura líquida y la electrocinética, declara que con el aumento de la viscosidad de un líquido polar causado por un campo aplicado *E*, el plano de deslizamiento se puede reemplazar por un aumento gradual de la fluidez a medida que aumenta la distancia desde la superficie. Por otro lado, Bazant y Sabri [21] deducen que la movilidad del fluido se reduce a gran voltaje $\zeta > \psi_c$, donde ψ_c representa un voltaje inducido de referencia, basándose solo en las propiedades dependientes del campo de un disolvente polar, además, argumentaron que la viscosidad puede aumentar a través del engrosamiento viscoeléctrico de un líquido dipolar con polarización transversal a la dirección de corte.

En 1961, se hizo una contribución muy importante por Lyklema y Overbeek, que estudiaron el efecto de la variabilidad de la viscosidad y la constante dieléctrica en la doble capa sobre soluciones acuosas tomando como fenómenos de prueba a la electroósmosis y la electroforesis. En su investigación buscaban correlacionar al potencial electrocinético que se da en el plano de deslizamiento y la caída de potencial total a través de la doble capa, para diluir la incertidumbre sobre la ubicación del plano de deslizamiento, la estructura del líquido y los efectos de la carga dentro del plano de deslizamiento. Descubrieron que la influencia del potencial inducido máximo ζ sobre la viscosidad es mucho más pronunciada que sobre la constante dieléctrica ϵ , por lo que la variación en la constante puede despreciarse. Notaron que las correlaciones viscosas si eran necesarias porque se veían afectadas por el aumento del potencial en la pared, por lo que esperaron una desviación del 10% en la viscosidad del agua para una intensidad de campo de $E = 2x10^7 V/m$, y con el fin de encontrar un valor aproximado de la constante viscoeléctrico del agua, Lyklema y Overbeek partieron de la ecuación de Reynols para la viscosidad de un líquido, y obtuvieron un valor de f = $10.2x10^{-12}\left[\frac{cm^2}{v^2}\right] = 10.2x10^{-16}\left[\frac{m^2}{v^2}\right]$. Tomando el valor de la viscosidad del agua sin efectos del campo eléctrico como referencia, observaron que con valores de potencial de la doble capa ζ de 1.4 [mV],14[mV], 88[mV], hay un incremento de la viscosidad del 2%, mientras que con valores de 3 [mV], 29[mV], 128 [mV], existe un incremento en la viscosidad de hasta un 10%. Derivado de las pruebas, observaron que la viscosidad depende del campo eléctrico inducido, por lo que proponen una relación entre $\eta y \psi$, la cual es: $\eta = \eta_0 \left(1 + f \left(\frac{d\psi}{dy}\right)^2\right)$ donde η_0 es la viscosidad aparente, y $\frac{d\psi}{dy}$ es la intensidad de campo de doble capa. Observaron que existe una capa deslizante con una transición gradual de fluidez total a fluidez cero, esta variación de la viscosidad puede deberse a la alta intensidad del campo electroestático [19].

Justificación.

Toda la literatura mencionada juega un papel importante para la expansión de los conocimientos de la teoría electrocinética y en especial del fenómeno electroosmótico, y sabiendo la importancia que va tomando esta nueva rama en la comunidad científica, es indispensable conocer y expandir los conocimientos sobre este campo. En el análisis del estado del arte, notamos que en la mayoría de las investigaciones se toma en cuenta a la viscosidad como una constante, y aunque existen estudios que exploren al efecto viscoeléctrico sobre un flujo electroosmótico, estos aún son pocos. En consecuencia, esta investigación se dedicó a expandir los conocimientos sobre el efecto viscoeléctrico de un flujo puramente electroosmótico sobre un fluido newtoniano que circula a través de un microcanal considerando la relación propuesta por Lyklema y Overbeek $\eta = \eta_0 \left(1 + f \left(\frac{d\psi}{dy}\right)^2\right)$, en donde la viscosidad cambia con respecto al factor viscoeléctrico y está en función de la variación del potencial eléctrico inducido.

Este estudio involucra a las ecuaciones que describen el comportamiento del flujo electroosmótico cuando existen potenciales altos inducidos en la pared del microcanal ζ . Debido al comportamiento de ζ , la ecuación de Poisson-Boltzmann que describe el comportamiento de las cargas no puede simplificase por la aproximación de Debye-Hückel, por lo tanto, la función seno-hiperbólico no se reduce a su argumento, y la densidad de carga queda expresada como $\rho_e = -2 zen_{\infty} \sinh\left(\frac{ze \psi}{k_BT}\right)$ [2,3]. Del mismo modo, la viscosidad del fluido η se ve afectada, y no será una constante como en las investigaciones documentadas, esto influye en el desarrollo de nuevos términos en la ecuación de cantidad de movimiento tanto en la dirección *y*, como en la dirección *x*. Por

otro lado, para analizar la mecánica de los fluidos debido al efecto viscoeléctrico, se introducen dos parámetros adimensionales, los cuales son: potencial inducido en la pared adimensional $\bar{\zeta}$, y el factor viscoeléctrico adimensional \bar{f} . Con el aumento de los parámetros mencionados, se espera obtener perfiles de velocidad diferentes al convencional, además se estima que con valores de $\bar{\zeta} > 1$, el efecto de \bar{f} será considerable sobre el sistema, reteniendo el fluido y disminuyendo su velocidad, mientras que los efectos del parámetro \bar{f} pueden ser despreciables cuando los valores de $\bar{\zeta}$ son menores a uno.

Este estudio es importante para el desarrollo de futuras investigaciones, ya que expande los conocimientos sobre el comportamiento de un flujo electroosmótico, de esta manera, también aporta a la microfluídica, no solo para su aplicación en la ingeniería, sino también, para su uso en el sector médico, farmacéutico, e industrial.

Objetivo

Analizar el efecto viscoeléctrico de un flujo electroosmótico que circula en un microcanal rectangular considerando potenciales inducidos altos en las paredes del sistema.

Capítulo 2. Formulación del problema.

Como segundo capítulo, se establecen las condiciones del problema, y las ecuaciones que lo describen. Para obtener la información necesaria de la física del problema, se implementa un análisis de orden de magnitud que parte de las ecuaciones que describen al sistema, el cual, permite reescribirlas a su forma adimensional.

2.1 Formulación matemática

La Figura 2.1, describe el sistema de estudio, en donde se usan coordenadas cartesianas y un modelo 2D (x, y), que tiene su origen en la entrada y centro de un microcanal rectangular con dimensiones geométricas de altura 2H y longitud L en donde 2 $H \ll L$, y un espesor en las paredes mucho menor a las magnitudes antes descritas. Dicho sistema está conformado por un microcanal dieléctrico, y un fluido ionizado, que al contacto entre ellos produce que las paredes se carguen negativamente, por lo que dentro del fluido existirá mayor densidad de protones formando una doble capa eléctrica, que es medida por la longitud de Debye λ_D . Conforme la distancia de la pared al centro se haga más grande, las cargas se reducen prácticamente a cero. Por otra parte, el simple contacto entre el material dieléctrico y la solución electrolítica crea una diferencia de cargas generando un potencial inducido ψ , que presenta su máximo valor en las paredes ζ y es cero en el centro del microcanal. Al aplicar un potencial externo ϕ , los protones dentro del fluido que se encuentran en las paredes del microcanal se ven atraídos, y por efecto viscoso, todo el fluido empieza a desplazarse [4].

Asumimos que el único mecanismo para generar el movimiento del fluido se debe al empleo de fuerzas electroosmóticas, que se producen debido a un campo eléctrico aplicado E_0 en dirección longitudinal, de magnitud $E_0 = \frac{\phi_0}{L}$, donde ϕ_0 es el potencial eléctrico aplicado [22]. El sistema es soportado en los extremos por dos depósitos de líquido que se encuentran a una temperatura y una presión de referencia T_0 y P_0 , respectivamente.

	000000000000000000000000000000000000	
κ	<u> </u>	
+	Θ Θ Θ Θ	-
_	$\downarrow \bigcirc \bigcirc$	_
	P_{ρ} $x \in \mathbb{O}$ O	
к	699392999999999999	
	l≁ L	
	Γ.	

Figura 2.1. Esquema de un flujo electroosmótico en un microcanal rectangular.

Para tener un completo entendimiento se agregan los siguientes supuestos e hipótesis:

- Se consideran propiedades constantes a excepción de la viscosidad, que dependen del potencial eléctrico inducido.
- Se considera flujo laminar, con números de Reynolds bajos, *Re* < 1.
- La carga en la doble capa eléctrica sigue la distribución de Poisson-Boltzmann.
- Se asume al fluido como un electrolito simétrico, $z_+ : z_-$.

Las paredes del microcanal no son conductoras de corriente eléctrica.

A continuación, se definen las ecuaciones en coordenadas cartesianas que describen un flujo electroosmótico. Como primera instancia se tiene la ecuación de continuidad, la ecuación de cantidad de movimiento en dirección x, y la ecuación de cantidad de movimiento en dirección y,

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{1}$$

$$\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y}\right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + E_x \rho_{e_x}$$
(2)

$$o\left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y}\right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + E_y \rho_{e_y}$$
(3)

donde τ_{ij} es el tensor de esfuerzos viscosos para un fluido newtoniano incompresible con propiedades constantes, sus componentes están dados por la siguiente expresión en notación índice: $\tau_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ [22]. Usando dicha expresión en notación cartesiana para los términos difusivos de la ecuación de momentum en dirección x + y y se obtienen los respectivos términos,

$$\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(2\eta \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right), \tag{4}$$

$$\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(2\eta \frac{\partial v}{\partial y} \right), \tag{5}$$

sustituyendo (4) y (5) en (2) y (3), llegamos a las expresiones de cantidad de movimiento que se usaron en este trabajo.

Ecuación de cantidad de movimiento en dirección x,

$$\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y}\right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(2\eta\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\eta\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right)\right) + E_x\rho_{e.}$$
(6)

Ecuación de cantidad de movimiento en dirección y,

$$\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y}\right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\eta\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right)\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(2\eta\frac{\partial v}{\partial y}\right) + E_y\rho_e, \quad (7)$$

donde *u* y *v* representan la velocidad del fluido en dirección *x* y *y*, respectivamente, *P* es la presión del fluido. Además, ρ , η y ρ_e son la densidad del fluido, la viscosidad del fluido y la densidad de carga, respectivamente. E_x y E_y son las componentes de la intensidad de campo eléctrico y se definen de la siguiente manera:

$$E_x = -\frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial x}, \quad E_y = -\frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial y},$$
 (8)

donde Φ simboliza al potencial total existente en el sistema, y considerando la relación lineal que existe entre el potencial eléctrico aplicado ϕ e inducido en las paredes del microcanal ψ , se tiene la siguiente expresión,

$$\Phi(x, y) = \phi(x) + \psi(y). \tag{9}$$

Por otra parte, se considera que la viscosidad es una función del potencial eléctrico inducido de acuerdo con Lyklema y Overbeek como $\eta = \eta_0 \left(1 + f \left(\frac{d\psi}{dy}\right)^2\right)$, donde η_0 es la viscosidad de referencia, y *f* el factor viscoeléctrico [19].

A símil a la Ley de la conservación de la energía, existe la propiedad de la conservación de la carga que se presenta en fenómenos electrocinéticos, por lo tanto, se genera la siguiente expresión,

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) = 0, \tag{10}$$

suponiendo que la conductividad eléctrica (σ) es una constante, se obtiene la divergencia del potencial eléctrico aplicado,

$$\nabla \cdot \nabla \phi = 0. \tag{11}$$

El potencial aplicado solo depende y varía con respecto a la dirección x, por tal motivo,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0. \tag{12}$$

Como ϕ solo depende de la dirección x se considera como una diferencial exacta, por lo que la ecuación de la conservación de la corriente se expresa como,

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = 0. \tag{13}$$

Para describir el comportamiento del potencial ψ , se hace uso de la ecuación de Poisson–Boltzmann. Dicha ecuación se muestra a continuación,

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\frac{\rho_e}{\epsilon},\tag{14}$$

donde ϵ es la permitividad dieléctrica del fluido, y ρ_e es la densidad de carga que se define como,

$$\rho_e = -2 \, zen_\infty \sinh\left(\frac{ze\,\psi}{k_B T}\right),\tag{15}$$

donde z es la valencia de la solución electrolítica, *e* la carga elemental, k_B la constante de Boltzmann, *T* es la temperatura a 298.15 K, y n_{∞} la concentración iónica de la solución. Todas las propiedades antes mencionadas se consideran uniformes, a excepción de la densidad de carga eléctrica, ya que esta depende del potencial eléctrico inducido. Cabe mencionar, que para un potencial en la pared muy pequeño $\zeta < 25mV$, es posible usar la linealización de Debye–Hückel en la ecuación de Poisson–Boltzmann, en nuestra investigación no es el caso, ya que los valores de ζ son considerables y la función hiperbólica de la densidad de carga no puede reducirse a su argumento [3].

2.2. Condiciones de frontera

Las ecuaciones que describen el fenómeno físico están acompañadas de las siguientes condiciones de frontera, aclarando que el movimiento del fluido es exclusivamente por la aplicación del campo eléctrico, y por tal motivo, no existe un gradiente de presión aplicado o inducido, lo que se le conoce en la literatura como un flujo puramente electroosmótico.

Se presentan las condiciones de frontera para el campo eléctrico aplicado en la entrada y salida del microcanal además de las condiciones del potencial eléctrico inducido, donde en las paredes es el máximo ζ , y conforme se acerca al centro del microcanal tiende a cero. Se consideró una presión constante e igual tanto en la entrada como en la salida del sistema. Al tener simetría en nuestro microcanal, el comportamiento del potencial eléctrico y las velocidades tanto en *x* como en *y*, es igual desde el centro hacia la pared superior, así como desde el mismo punto de referencia hacia la pared inferior. En las paredes del microcanal se presenta la condición de no deslizamiento.

$$\phi(x=0) = \phi_0,\tag{16}$$

$$\phi(x=L)=0,\tag{17}$$

$$\psi(y = H) = \zeta, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y}\Big|_{y=0} = 0,$$
 (18)

$$u(y = \pm H) = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial y}\Big|_{y=0} = 0, \tag{19}$$

$$v(y = \pm H) = 0, \quad \left. \frac{\partial v}{\partial y} \right|_{y=0} = 0,$$
 (20)

$$P(x = 0) = P(x = L, y) = P_0.$$
 (21)

2.3. Análisis de orden de magnitud.

Para la descripción física de nuestro problema, se recurre a un análisis de orden de magnitud, con esto se determinan las escalas características que se usaran para definir las variables adimensionales. Este paso es importante porque permite predecir el comportamiento de un flujo electroosmótico.

Para la longitud y altura se definen las siguientes escalas características,

$$x \sim L, \quad y \sim H. \tag{22}$$

En la dirección longitudinal, se consideró que el potencial eléctrico característico es el generado por el máximo campo eléctrico aplicado. Para la dirección transversal, el potencial característico es el inducido por el simple contacto entre el material dieléctrico y el fluido ionizado que llega a su valor máximo en las paredes del microcanal. Por lo tanto, para los potenciales se definen las siguientes escalas características,

$$\phi \sim \phi_0, \quad \psi \sim \zeta \,. \tag{23}$$

Si se considera en la ecuación (6), una viscosidad constante η_0 , observamos que la fuerza motriz que induce el movimiento del fluido es una fuerza eléctrica producida por el campo eléctrico, que genera el movimiento de este, y el término viscoso en dirección transversal es el que se opone a este efecto, por ende, se obtiene la siguiente aproximación,

$$\rho_e E_x \sim \eta_0 \frac{\partial^2 u}{\partial v^2},\tag{24}$$

quedando el orden de magnitud de la siguiente manera

$$\rho_e E_x \sim \eta_0 \frac{u_c}{\lambda_D^2}.$$
(25)

Para la escala característica de la velocidad en dirección longitudinal se requiere definir la velocidad máxima que puede haber en un flujo electroosmótico dentro de un microcanal, de esta forma la velocidad característica está dada por la siguiente expresión,

$$u_c \sim \psi_c \frac{\epsilon}{\eta_0} E_0 \tag{26}$$

$$u_c \sim \psi_c \frac{\epsilon}{\eta_0} \frac{\phi_0}{L},\tag{27}$$

donde ψ_c es el potencial inducido característico, que surge del argumento de la función hiperbólica presente en la densidad de carga y queda definido como: $\psi_c = \frac{k_B T}{ze}$. Sustituyendo a ψ_c en (27) se obtiene la escala característica de la velocidad en dirección x.

$$u_c \sim \frac{k_B T}{ze} \frac{\epsilon}{\eta_0} \frac{\phi_0}{L} \tag{28}$$

$$u_c = -\psi_c E_0 \frac{\epsilon}{\eta_0} \tag{29}$$

Por otro lado, para conocer la escala perteneciente de la velocidad en la dirección *y*, se toma la ecuación de continuidad,

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{30}$$

donde la velocidad máxima en dirección "x" es u_c , así como la que pertenece a la dirección y que es v_c . Para las distancias, la longitud característica en x es L, mientras que para la dirección y es H. Omitiendo los signos y despejando a v_y se obtiene la ecuación (33) que es la escala característica de la velocidad en dirección transversal.

$$\frac{v_c}{H} \sim \frac{u_c}{L} \tag{31}$$

$$v_c \sim \frac{u_c H}{L} \tag{32}$$

$$v_c = \frac{u_c H}{L} \tag{33}$$

De la ecuación de cantidad de movimiento se observar que puede existir un gradiente de presión, pero este seria a causa del campo eléctrico, por consiguiente, se pueden relacionar estos dos términos dando como resultado la escala característica de la presión,

$$\rho_e E_x \sim \frac{\partial P}{\partial x},\tag{34}$$

al sustituir la ecuación (25) en (34) queda la siguiente aproximación,

$$\frac{\partial P}{\partial x} \sim \eta_0 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \tag{35}$$

$$\frac{\Delta P}{L} \sim \eta_0 \frac{u_c}{H^2},\tag{36}$$

por lo tanto, la expresión (38) muestra la escala característica de la presión.

$$\Delta P \sim \eta_0 \frac{u_c L}{H^2} \tag{37}$$

$$\Delta P = \eta_0 \frac{u_c L}{H^2} \tag{38}$$

2.4. Modelo matemático adimensional.

A partir del previo análisis de orden de magnitud, se proponen las siguientes variables adimensionales,

$$\chi = \frac{x}{L}, \quad Y = \frac{y}{H}, \quad \tilde{\phi} = \frac{\phi}{\phi_0}, \quad \tilde{\psi} = \frac{\psi}{\psi_c},$$

$$\tilde{u} = \frac{u}{u_c}, \quad \tilde{v} = \frac{vL}{Hu_c}, \quad \tilde{P} = \frac{(P - P_0)H^2}{u_c L\eta_0},$$
(39)

donde u_c es la velocidad máxima del flujo electroosmótico, y fue definida en el análisis de orden de magnitud. Con dichas variables adimensionales y tomando en cuenta todo el análisis adimensional se llega a la ecuación de continuidad que describe la física del flujo,

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} = 0, \tag{40}$$

despejando y sustituyendo las variables adimensionales (39) en las ecuaciones (6) y (7) se obtienen las ecuaciones de cantidad de movimiento en dirección x y y,

$$\begin{split} \beta R_e \left(\tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial Y} \right) \\ &= -\frac{\partial \tilde{P}'}{\partial \chi} + \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{d\tilde{\psi}}{dY} \right)^2 \right] \left(\beta^2 \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial Y^2} \right) \\ &+ 2\beta^2 \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\left(\frac{d\tilde{\psi}}{dY} \right)^2 \right) \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} \\ &+ \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \frac{\partial}{\partial Y} \left(\left(\frac{d\tilde{\psi}}{dY} \right)^2 \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial Y} + \beta^2 \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \chi} \right) - \tilde{\kappa}^2 \sinh(\tilde{\psi}) \frac{d\tilde{\phi}}{d\chi}, \end{split}$$
(41)
$$& \beta^3 R_e \left(\tilde{u} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \chi} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} \right) \\ &= -\frac{\partial \tilde{P}'}{\partial Y} + \beta^2 \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{d\tilde{\psi}}{dY} \right)^2 \right] \left(\beta^2 \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial Y^2} \right) \\ &+ \beta^2 \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\left(\frac{d\tilde{\psi}}{dY} \right)^2 \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial Y} + \beta^2 \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \chi} \right) \\ &+ 2\beta^2 \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \frac{\partial}{\partial Y} \left(\left(\frac{d\tilde{\psi}}{dY} \right)^2 \right) \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y}, \end{split}$$

donde \tilde{P}' es la presión osmótica inducida dada por: $\tilde{P}' = \tilde{P} + \frac{1}{2\bar{c}} \left(\frac{d\tilde{\psi}}{dY}\right)^2$.

De igual forma, las ecuaciones (39) son acopladas a la ecuación de Poisson-Boltzmann que describe el comportamiento de las partículas y del potencial eléctrico, para obtener su forma adimensional que se muestra a continuación,

$$\beta^2 \bar{c} \frac{d^2 \tilde{\phi}}{d\chi^2} + \frac{d^2 \tilde{\psi}}{dY^2} = \bar{\kappa}^2 \sinh(\tilde{\psi}), \qquad (43)$$

para la ecuación que estudia el comportamiento del campo eléctrico se tiene a la conservación de corriente en su forma adimensional,

$$\frac{d^2\tilde{\phi}}{d\chi^2} = 0. \tag{44}$$

De las ecuaciones anteriores, los parámetros adimensionales quedan definidos como,

$$Re = \frac{\rho u_c H}{\eta_0}, \quad \kappa^2 = \frac{2z^2 e^2 n_\infty}{\epsilon k_B T}, \quad \bar{\kappa} = \kappa H, \quad u_c = -\psi_c \frac{\epsilon}{\eta_0} \frac{\phi_0}{L},$$
$$\psi_c = \frac{k_B T}{ze}, \quad \bar{f} = f \left(\frac{k_B T}{ze} \kappa\right)^2, \quad E_0 = \frac{\phi_0}{L}, \quad \bar{c} = \frac{\phi_0}{\psi_c}, \quad \beta = \frac{H}{L}, \quad (45)$$

donde *Re* es el número de Reynolds, κ es el inverso de la longitud de Debye, u_c es la velocidad máxima a la que va nuestro flujo, ψ_c es el potencial característico y de referencia, E_0 es el valor máximo del campo eléctrico en el microcanal, c es la relación entre el potencial de referencia aplicado e inducido, β es la relación entre las dimensiones características del microcanal, \bar{f} es el factor viscoeléctrico adimensional.

2.4.1. Condiciones de frontera adimensionales.

Las ecuaciones que describen la física del problema están asociadas a las siguientes condiciones de frontera, que se obtuvieron sustituyendo en las condiciones (16),(17),(18),(19),(20) y (21) las variables adimensionales antes presentadas. El resultado son las siguientes condiciones de frontera adimensionales.

$$\tilde{\psi}(Y=1) = \frac{\zeta}{\psi_c} = \bar{\zeta},\tag{46}$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial Y} \right|_{Y=0} = 0 \tag{47}$$

$$\tilde{\phi}(\chi = 0) = 1, \qquad \tilde{\phi}(\chi = 1) = 0$$
 (48)

$$\tilde{\phi}(\chi = 1) = 0 \tag{49}$$

$$\widetilde{u}(Y=1) = 0; \left. \frac{\partial \widetilde{u}}{\partial Y} \right|_{Y=0} = 0$$
(50)

$$\tilde{v}(Y=1) = 0; \quad \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y}\Big|_{Y=0} = 0$$
 (51)

$$\tilde{P}(\chi = 0) = 0 \tag{52}$$

En la Tabla 2.1 se puede ver el valor de las propiedades físicas, así como los parámetros geométricos para el microcanal, mismos que serán usados para obtener los parámetros adimensionales del presente análisis que se muestran en la Tabla 2.2.

Parámetro	Valor	Unidad
L	$\sim 10^{-2}$	m
Н	50 - 200	μm
E_0	~10 ³	V/m
k_B	0.61 - 0.7	$W/(m\cdot K)$
Т	298.15	K
ϵ	$\sim 10^{-10}$	$C/(V\cdot m)$
${\eta}_0$	$10^{-3} - 10^{-1}$	$kg/(m \cdot s)$
ρ	~10 ³	kg/m^3
λ_D	1 - 10	nm
f	$10^{-17} - 10^{-15}$	m^2/V^2

Tabla 2.1. Propiedades de transporte y parámetros geométricos.

Tabla 2.2. Parámetros adimensionales del presente análisis.

Parámetro	Valor
Re	0.1
$ar{\mathcal{K}}$	40
β	0.01
Ē	1000
$ar{f}$	0.00-0.08
$\bar{\zeta}$	0.5-3.0

Capítulo 3. Resolución del método numérico.

En este capítulo se presenta la descripción del software de uso libre llamado FreeFem++, así como la implementación de la formulación débil del sistema de ecuaciones diferenciales que modela a un flujo electroosmótico para ser resuelto numéricamente mediante la técnica de elemento finito.

3.1. ¿Qué es FreeFem++?

En este trabajo se busca resolver de forma numérica el fenómeno físico del efecto de la viscosidad como una función del potencial eléctrico en un flujo electroosmótico que es descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales parciales. Para lograr este fin, se recurre al uso de un software de uso libre, llamado *FreeFem++;* herramienta numérica que usa el método de elementos finitos para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales parciales. Este programa está diseñado para resolver sistemas de ecuaciones lineales y estacionarios, sin embargo, y debido a su fácil implementación permite resolver ecuaciones no lineales y dependientes del tiempo con ayuda de scripts ejecutados por el propio usuario. [25]

Como se observa en el sistema de ecuaciones diferenciales (40), (41), (42), (43), y (44), se trata de un sistema no lineal, y cada una de las variables son altamente dependientes entre sí, por lo que requieren un método iterativo que resuelva de forma simultánea el sistema, por tal motivo se usa *FreeFem++* que es un lenguaje de programación escrito en C++ y que tiene la capacidad de optimizar la solución aproximada de cada una de las incógnitas que conforman al sistema: $\tilde{\psi}, \tilde{\phi}, \tilde{u}, \tilde{v}$.[25]

El análisis de elementos finitos es un método numérico, que permite obtener soluciones aproximadas describiendo la relación entre los cambios de las variables del problema, a través de un modelo matemático dado por ecuaciones diferenciales que gobiernan el comportamiento del sistema. Este método toma geometrías muy sencillas y pequeñas del cuerpo a analizar, en este caso sería el microcanal. Dichos fragmentos pueden ser trías o quads como se muestran en la figura 3.1, estos son subdominios de análisis que están gobernados por el mismo modelo matemático que domina a todo el cuerpo, en consecuencia, ya no es relevante la geometría del sistema completo, ya que nuestros subsistemas tienen una geometría sencilla. La idea es aplicar el principio de superposición sobre las soluciones de todos los subdominios con que se descomponga el dominio de análisis original [26].



Fig.3.1. Geometrías más comunes que se adoptan para describir los subconjuntos o elemento finitos que conforman al sistema global.



Figura 3.2. Malla que describe el espacio por el cual pasa el fluido en el microcanal.

En resumen, se puede decir que un elemento finito, es un subdominio de análisis descrito por un conjunto de nodos, los cuales son puntos que se les asocian variables por determinar. Los nodos, son variables discretas ya que son puntos, es decir que tienen una posición específica (coordenadas x, y), a la cual se asocian grados de libertad (GDL), que son variables por determinar en un problema [26]. Por último, se denomina

malla, al conjunto de elementos finitos que intentan describir un dominio de análisis, para nuestra investigación, se construyó una malla con 80000 elementos triangulares y una convergencia de $1x10^{-8}$ para cada variable, ya que así se obtienen variaciones mínimas y buenas fluctuaciones en los resultados. Estos parámetros fueron así establecidos debido a un análisis de malla.

En la figura 3.2 se muestra la malla que describe el espacio de análisis de este trabajo, se observa que con el adimensionamiento de las variables independientes la región en la cual se describe el comportamiento del flujo electroosmótico queda reducido a un cuadrado que va de cero a uno tanto en χ como en Y. La magnitud máxima que puede alcanzar x y y es L y H respectivamente, por tal motivo al estar en el centro del microcanal χ y Y serán cero, y tendrá el valor de uno cuando x y y adquieran los valores de las magnitudes $L y H_{\underline{i}}$

Para generar la malla en FreeFemm++, se usa la orden **mesh**, y con **square** se asegura una malla cuadrada uniforme de trías, con numeración de los lados de 1,2,3, y 4 para base, derecha, superior, e izquierda con un sentido antihorario. Para generar la malla usando **square**, se requiere definir el contorno de la superficie, es decir los límites del microcanal, los cuales son $\chi_{máx} = 1$, y $Y_{máx} = 1$, que empieza en $\chi_{mín} = 0$, y $Y_{mín} = 0$ la geometría es creada por funciones de rectas tanto en *x* como en *y*. El código se muestra a continuación,

```
int nn=200;
real x0=0., x1=1.;
real y0=0., y1=1.;
```

func xdist=x0+(x1-x0)*x;// Función que se requiere para definir las paredes 1 y 3 func ydist=y0+(y1-y0)*y;// Función que se requiere para definir las paredes 2 y 4

mesh Th=square (nn,nn,[xdist,ydist]);

donde nn declara cuantos elementos tendrá cada segmento, y Th es la referencia que se le asigna a la malla. Este código genera la malla que se muestra en la Figura 3.2.

Para encontrar los grados de libertad, se requiere la solución discreta y después se interpola la solución completa, a través de un proceso de *ensamble* que es un principio de superposición aplicado a un dominio modelado de manera discreta por elementos finitos, de forma sencilla es la suma o acumulación de todos los subdominios. La solución de cada subdominio está dada por un sistema de ecuaciones lineales que relaciona todos los grados de libertad, en donde el número de ecuaciones es el número de nodos, a esto se le da el nombre de *matriz de rigidez*, la cual es simétrica. Gracias a la *conectividad* de los elementos finitos, se puede obtener una matriz ensamblada que da una solución completa. La conectividad de cada elemento dice cómo van conectados los grados de libertad dentro de la matriz de ensamble, es decir que ayuda a ver la posición de los nodos y como es que cada elemento está conectado entre sí. [27]

¿Cómo se define un problema? Para que FreeFem++ entienda y pueda resolver los problemas, estos deben de estar descritos en su forma variacional. La forma variacional se constituye por una forma bilineal a(u, v), y una forma lineal l(f, v), y condiciones de contorno o de frontera [24]. La parte bilineal está conformada por las segundas derivadas, mientras que la parte lineal la conforma la función lineal, por lo tanto, en FreeFem++ la expresión general queda como,

solve P(u, v) = a(u, v) - l(f, v)

+(condiciones de frontera);

La forma variacional se obtiene multiplicando la expresión a resolver por una variable auxiliar e integrando el resultado sobre el dominio (malla + frontera). Hay que aclarar que *f* puede representar efectos externos que afectan a nuestro sistema y que en este software son conocidos como términos fuentes, por ejemplo: efecto de calentamiento Joule, propiedades variables, etc. Después se hace uso de las identidades de Green que disminuye el grado de la ecuación diferencial multiplicándolo por la parcial de la función auxiliar. A continuación, se presenta la primera y segunda identidad de Green,
$$\int_{\Omega} f \nabla^2 g d\sigma = \oint_{\partial \Omega} (f \nabla g) \cdot N d\Omega - \int_{\Omega} \nabla f \nabla g d\Omega, \qquad (53)$$

$$\int_{\Omega} (f \nabla^2 g - g \nabla^2 f) d\sigma = \oint_{\partial \Omega} ((f \nabla g) \cdot N - (g \nabla f) \cdot N) d\Omega,$$
(54)

donde f, g son dos funciones lineales y continuas dentro del dominio Ω y su frontera $\partial \Omega$, así como N se refiere a la normal perpendicular a la superficie, y $d\sigma$ es la diferencial de arco. En el presente trabajo se hace uso de condiciones de frontera tipo Dirichlet y Newman en donde se especifica los valores de la solución que necesita la frontera del dominio [28].

3.2. ¿Cómo se rescribe una ecuación en su forma variacional?

Para llegar a la forma variacional de la ecuación de la cantidad de movimiento en x adimensional se tomó término por término, y aplicó la ecuación (53) a los términos difusivos y de presión reescritos como,

$$-\frac{\partial \tilde{P}^{n+1}}{\partial \chi} + \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y}\right)^2\right] \left(\beta^2 \frac{\partial^2 \tilde{u}^{n+1}}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 \tilde{u}^{n+1}}{\partial Y^2}\right),\tag{55}$$

donde \tilde{P}^{n+1} , \tilde{u}^{n+1} , son la presión y la velocidad en el presente. Cuando se multiplica una variable auxiliar u_{aux} a todos los términos difusivos se obtiene la expresión,

$$u_{aux}\left[-\frac{\partial\tilde{P}^{n+1}}{\partial\chi} + \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}}\left(\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial Y}\right)^{2}\right]\left(\beta^{2}\frac{\partial^{2}\tilde{u}^{n+1}}{\partial\chi^{2}} + \frac{\partial^{2}\tilde{u}^{n+1}}{\partial Y^{2}}\right)\right]$$
$$= -u_{aux}\frac{\partial\tilde{P}^{n+1}}{\partial\chi}$$
$$+ u_{aux}\left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}}\left(\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial Y}\right)^{2}\right]\left(\beta^{2}\frac{\partial^{2}\tilde{u}^{n+1}}{\partial\chi^{2}} + \frac{\partial^{2}\tilde{u}^{n+1}}{\partial Y^{2}}\right),$$
(56)

que al integrarse sobre el dominio Ω , y usando Green para poder encontrar \tilde{u} se rescribe la ecuación de momentum adimensional en x en su forma variacional,

$$-\int_{\Omega} u_{aux} \frac{\partial \tilde{P}^{n+1}}{\partial \chi} d\Omega + \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y}\right)^{2}\right] \int_{\Omega} \left(\beta^{2} u_{aux} \frac{\partial^{2} \tilde{u}^{n+1}}{\partial \chi^{2}} + u_{aux} \frac{\partial^{2} \tilde{u}^{n+1}}{\partial Y^{2}}\right) d\Omega \\ = \int_{\Omega} \tilde{P}^{n+1} \frac{\partial u_{aux}}{\partial \chi} d\Omega \qquad (57) \\ - \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y}\right)^{2}\right] \int_{\Omega} \left(\beta^{2} \frac{\partial u_{aux}}{\partial \chi} \frac{\partial \tilde{u}^{n+1}}{\partial \chi} + \frac{\partial u_{aux}}{\partial Y} \frac{\partial \tilde{u}^{n+1}}{\partial Y}\right) d\Omega,$$

con los siguientes términos fuentes,

$$\int_{\Omega} u_{aux} \xi_u d\Omega \,, \tag{58}$$

donde ξ_u viene dado por la siguiente expresión,

$$\xi_{u} = 2\beta^{2} \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^{2} \right) \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}} \frac{\partial}{\partial Y} \left(\left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^{2} \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial Y} + \beta^{2} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \chi} \right) - \tilde{\kappa}^{2} \sinh\left(\tilde{\psi} \right) \left(\frac{d\tilde{\phi}}{d\chi} + \bar{c}^{-1} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \chi} \right).$$
(59)

Para los términos convectivos, no se puede aplicar el teorema de Green, por ello FreeFem++ maneja un comando llamado **convect** que permite la resolución de estos términos, en consecuencia, el programa requiere que se reescriba la expresión con la siguiente estructura,

$$\frac{u^{n+1}}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta t} convect([u^n, v^n], \Delta t, u^n),$$
(60)

aplicándolo a los términos convectivos de momentum adimensional en x obtenemos,

$$\frac{\tilde{u}^{n+1}}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta t} \left[\tilde{u}^n - \Delta t \beta R_e \left(\tilde{u}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} + \tilde{v}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} \right) \right], \tag{61}$$

que al multiplicar e integrar sobre el dominio genera lo siguiente,

$$\int_{\Omega} \left(u_{aux} \frac{\tilde{u}^{n+1}}{\Delta t} - u_{aux} \frac{1}{\Delta t} \left[\tilde{u}^n - \Delta t \beta R_e \left(\tilde{u}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} + \tilde{v}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} \right) \right] \right) d\Omega$$

$$= \int_{\Omega} \left(\alpha u_{aux} \tilde{u}^{n+1} - u_{aux} \alpha \left[\tilde{u}^n - \Delta t \beta R_e \left(\tilde{u}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} + \tilde{v}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} \right) \right] \right) d\Omega,$$
(62)

donde \tilde{u}^n y \tilde{v}^n son las velocidades en el pasado, Δt es la diferencial del tiempo y $\alpha = \frac{1}{\Delta t}$ es su inversa.

Uniendo las partes en la forma variacional para el momentum adimensional en *x*, se obtiene la siguiente ecuación en su forma débil,

$$\int_{\Omega} \left(\alpha u_{aux} \tilde{u}^{n+1} - u_{aux} \alpha \left[\tilde{u}^n - \Delta t \beta R_e \left(\tilde{u}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} + v \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} \right) \right] \right) d\Omega + \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^2 \right] \int_{\Omega} \nabla \tilde{u}^{n+1} \cdot \nabla u_{aux} d\Omega - \int_{\Omega} \tilde{P}^{n+1} \frac{\partial u_{aux}}{\partial \chi} d\Omega = \int_{\Omega} \xi_u \cdot u_{aux} d\Omega.$$
(63)

Por otro lado, para resolver la ecuación de continuidad adimensional, FreeFrem++ propone añadir un término de estabilización εP para fijar la parte constante de la presión, por lo que nuestra ecuación queda como,

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} + \varepsilon \tilde{P} = 0, \tag{64}$$

donde ε es una constante que se multiplica por la presión *P*, que al considerarse cero $\varepsilon = 0$ se obtiene la ecuación de continuidad adimensional. En este caso se toma a la función auxiliar de la presión como *P*_{aux}, la cual se multiplicará por la ecuación de continuidad adimensional,

$$P_{aux}\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} + \varepsilon \tilde{P}\right) = 0, \tag{65}$$

que al integrar con respecto al dominio la relación queda como,

$$\int_{\Omega} P_{aux} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} + \varepsilon \tilde{P} \right) d\Omega$$
$$= \int_{\Omega} \left(P_{aux} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + P_{aux} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} + \varepsilon \tilde{P} P_{aux} \right) d\Omega, \tag{66}$$

$$\int_{\Omega} \left(P_{aux} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + P_{aux} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} + \varepsilon \tilde{P} P_{aux} \right) d\Omega = 0.$$
(67)

Ya que el problema es altamente no lineal, se recurre a un tiempo ficticio, que ayuda a darle estabilidad al código, por tal motivo las ecuaciones se rescriben en su forma transitoria. A continuación, se muestran las ecuaciones adimensionales que rigen a nuestro sistema en su forma débil y reescritas de una manera en que se puedan introducir al software para que este sea capaz de resolverlas.

Ecuación de cantidad de movimiento adimensional en x, en su forma débil,

$$\int_{\Omega} \left(\alpha u_{aux} \tilde{u}^{n+1} - u_{aux} \alpha \left[\tilde{u}^n - \Delta t \beta R_e \left(\tilde{u}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} + \tilde{v}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} \right) \right] \right) d\Omega + \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^2 \right] \int_{\Omega} \nabla \tilde{u}^{n+1} \cdot \nabla u_{aux} d\Omega - \int_{\Omega} \tilde{P}^{n+1} \frac{\partial u_{aux}}{\partial \chi} d\Omega$$
(68)
$$= \int_{\Omega} \xi_u \cdot u_{aux} d\Omega.$$

Ecuación de cantidad de movimiento adimensional en y, en su forma débil,

$$\int_{\Omega} \left(\alpha v_{aux} \tilde{v}^{n+1} - v_{aux} \alpha \left[\tilde{v}^n - \Delta t \beta^3 R_e \left(\tilde{u}^n \frac{\partial \tilde{v}^n}{\partial Y} + \tilde{v}^n \frac{\partial \tilde{v}^n}{\partial Y} \right) \right] \right) d\Omega + \left[1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^2 \right] \int_{\Omega} \left(\beta^4 \frac{\partial \tilde{v}_{aux}}{\partial \chi} \frac{\partial \tilde{v}^{n+1}}{\partial \chi} + \beta^2 \frac{\partial \tilde{v}_{aux}}{\partial Y} \frac{\partial \tilde{v}^{n+1}}{\partial Y} \right) d\Omega$$
(69)
$$- \int_{\Omega} \tilde{P}^{n+1} \frac{\partial v_{aux}}{\partial Y} d\Omega = \int_{\Omega} \xi_v \cdot v_{aux} d\Omega.$$

Ecuación de continuidad adimensional en su forma débil,

$$\int_{\Omega} \left(P_{aux} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + P_{aux} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} + \varepsilon \tilde{P} P_{aux} \right) d\Omega = 0.$$
 (70)

Las ecuaciones de conservación de carga y de Poisson – Boltzmann adimensionales en su forma débil al ser expresiones con términos en común, se agrupa los términos donde se presenta la variable $\tilde{\phi}$, y se crea la expresión (71) que facilita su ingreso al programa porque de esta forma solo se requiere encontrar una variable.

$$\int_{\Omega} \phi_{aux} \left(\frac{\tilde{\phi}^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \tilde{\phi}^{n+1}}{\partial \chi} \frac{\partial \phi_{aux}}{\partial \chi} + 0 \left(\frac{\partial \tilde{\phi}^{n+1}}{\partial Y} \frac{\partial \phi_{aux}}{\partial Y} \right) \right) d\Omega$$
(71)
= 0

Agrupando los términos que contienen a la variable $\tilde{\psi}$, se obtiene la siguiente ecuación,

$$\int_{\Omega} \psi_{aux} \left(\frac{\tilde{\psi}^{n+1} - \psi^{n}}{\Delta t} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \left(\beta^{2} \frac{\partial \tilde{\psi}^{n+1}}{\partial \chi} \frac{\partial \psi_{aux}}{\partial \chi} + \frac{\partial \tilde{\psi}^{n+1}}{\partial Y} \frac{\partial \psi_{aux}}{\partial Y} \right) d\Omega$$
(72)
$$= \int_{\Omega} \xi_{\psi} \cdot \psi_{aux} d\Omega.$$

Términos fuentes para cantidad de movimiento adimensional en x y y, y Poisson – Boltzmann adimensional:

$$\xi_{u} = 2\beta^{2} \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^{2} \right) \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \chi} + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}} \frac{\partial}{\partial Y} \left(\left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^{2} \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial Y} + \beta^{2} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \chi} \right) - \tilde{\kappa}^{2} \sinh\left(\tilde{\psi} \right) \left(\frac{d\tilde{\phi}}{d\chi} + \bar{c}^{-1} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \chi} \right),$$
(73)

$$\xi_{\nu} = \beta^{2} \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^{2} \right) \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial Y} + \beta^{2} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \chi} \right) + 2\beta^{2} \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^{2}} \frac{\partial}{\partial Y} \left(\left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right)^{2} \right) \frac{\partial \tilde{v}}{\partial Y} - \tilde{\kappa}^{2} \bar{c}^{-1} \sinh\left(\tilde{\psi} \right) \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial Y} \right),$$
(74)

$$\xi_{\psi} = \bar{\kappa}^2 \sinh(\psi). \tag{75}$$

3.3. Código.

La ecuación de Navier Stokes contiene los términos de la ecuación de continuidad, momento en x y y, por lo que la podemos rescribir en una sola orden en FreeFem++, dicha orden se escribe como **problem**, y se ingresó al programa de la siguiente forma.

La orden "**problem**" define el problema variacional construyendo el sistema lineal, y asociándole una manera de invertirlo, donde NS es el nombre que se le asocia al problema, *u*,*v*, y *press* son las variables que se quieren conocer(velocidad en dirección *x*,*y*, y la presión), y *uf*,*vf*,*pf* son las variables auxiliares. *Solver=UMFPACK* nos indica que queremos resolver el problema variacional a través de un resolutor lineal *UMFPACK* que es un método directo que permite manejar cualquier tipo de matriz mediante una factorización LU [29,30].

Se ingresan los términos convectivos al programa de la siguiente forma.

Recordemos la parte convectiva del momentum adimensional en *x* en su forma débil (68),

$$\int_{\Omega} \left(\alpha u_{aux} \tilde{u}^{n+1} - u_{aux} \alpha \left[\tilde{u}^n - \Delta t \beta R_e \left(\tilde{u}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} + \tilde{v}^n \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial \chi} \right) \right] \right) d\Omega,$$
(76)

aplicamos la orden **convect**, que tiene la estructura antes descrita en la expresión (60), por lo que nuestra orden queda como,

- int2d(Th)(convect([up,vp],-dt*Re*e,up)*uf*alpha)

donde **ind2d(Th)**, se refiere a que la función se resolverá sobre un espacio 2D sobre la malla Th, es decir que se trata de un problema bidimensional. Aplicando el mismo proceso para el termino convectivo del momento en "y" en su forma débil,

$$\int_{\Omega} \left(\alpha v_{aux} \tilde{v}^{n+1} - v_{aux} \alpha \left[\tilde{v}^n - \Delta t \beta^3 R_e \left(\tilde{u}^n \frac{\partial \tilde{v}^n}{\partial Y} + \tilde{v}^n \frac{\partial \tilde{v}^n}{\partial Y} \right) \right] \right) d\Omega,$$
(77)

se ingresa como,

-int2d(Th)(convect([up,vp],-dt*Re*pow(e,3),vp)*vf*alpha)

donde, alpha = 1/dt, $up = \tilde{u}^n$, $vp = \tilde{v}^n$, $e = \beta$, $dt = \Delta t$.

Para los términos difusivos y de presión presentes en la forma débil de la ecuación de momento tanto en "x" como en "y", se tiene que,

+int2d(Th)(fg1*(pow(e,2)*dx(u)*dx(uf)+dy(u)*dy(uf)))//Termino difusivo en dirección "x".

donde,

Los términos fuentes para la ecuación débil de momento en x dentro del programa quedan descritos como,

mientras que los términos fuentes para la ecuación débil de momento en y son:

donde,

fgv2=2.*pow(e,2)*(ff/pow(kappa,2))*dy(potdypsi)*dy(v);

fgu3=(ff/pow(kappa,2))*dy(potdypsi)*((pow(e,2))*dx(v)+dy(u));

fgv3=pow(e,2)*(ff/pow(kappa,2))*dx(potdypsi)*((pow(e,2))*dx(v)+dy(u));

fk2=pow(kappa,2)*sinh(psi)*dx(phi);.

Con las ecuaciones de Poisson – Boltzmann y conservación de carga se busca conocer las variables $\tilde{\psi}$ y $\tilde{\phi}$, por lo que las expresiones (71),(72), se ingresan al programa de la siguiente forma,

para $\tilde{\phi}$,

+on(C4,phi=1.);,

para $\tilde{\psi}$,



Una vez definido NS, phipo, y psicu, cada uno de estos problemas son ingresados a un ciclo implementado en C++ para que sea resuelto nuestro sistema de ecuaciones diferenciales a través de cada uno de los elementos mediante la convergencia solicitada.



Figura 3.3. Simulación en FreeFem++ del perfil de velocidad del efecto viscoeléctrico sobre un flujo puramente electroosmótico.

Capítulo 4. Análisis de resultados.

En este capítulo se discuten los resultados obtenidos de manera numérica, en donde se describe a detalle cada una de las gráficas obtenidas, así como su interpretación física de cada uno de los conceptos seguidos a lo largo de este trabajo. Así mismo, se comparan los resultados y se discute cual es la influencia de los parámetros adimensionales más importantes de este análisis.

4.1 Solución analítica.

En las tablas 2.1 y 2.2 se muestran los valores geométricos y los parámetros adimensionales, respectivamente que se consideraron para la solución numérica implementada en el programa FreeFem++ y con base en esto, se discuten los siguientes resultados.

En la Figura 4.1 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal *Y*, con $\bar{\zeta} = 3.0 \text{ y} \bar{f} = 0.08$, para distintos valores de χ . Tal y como se puede observar, se consideran los valores más altos del potencial eléctrico inducido adimensional $\bar{\zeta}$ y el factor viscoeléctrico adimensional \bar{f} , ya que bajo estas condiciones se pueden esperar las influencias más relevantes del efecto viscoeléctrico. Tal y como se aprecia en los tres perfiles de la velocidad, numéricamente existen diferencias máximas de 0.25×10^{-3} y mínimas de 0.2×10^{-3} entre los valores que llegan a alcanzar los perfiles hidrodinámicos, por lo que prácticamente podemos asegurar que la velocidad \tilde{u} se comporta de igual manera a lo largo de la coordenada longitudinal. Tomando en cuenta los comentarios anteriores, está de más realizar gráficos que modelen el comportamiento de la velocidad adimensional a lo largo de distintos puntos del microcanal, por ello todos nuestros resultados y análisis se realizaron en la posición de χ =0.6, la cual fue seleccionada de forma aleatoria.

Un aspecto interesante para resaltar es que la velocidad máxima a lo largo de la coordenada transversal no se obtiene en Y = 0, sino en Y = 0.8675 aproximadamente, cabe destacar, que este punto está muy próximo a las paredes del microcanal (Y = 1), punto en donde se cuenta con el máximo potencial inducido.



Figura 4.1. Perfiles de velocidad adimensional a lo largo de la coordenada trasversal *Y*, con un potencial eléctrico inducido adimensional en la pared alto $\bar{\zeta} = 3$, y un coeficiente viscoeléctrico adimensional de $\bar{f} = 0.08$, para diferentes valores de la posición longitudinal $\chi = 0.2, 0.4 y 0.6$.

En esta ocasión la figura 4.2 muestra los perfiles del potencial eléctrico inducido adimensional $\tilde{\psi}$, a lo largo de la coordenada transversal *Y*, con $\bar{f} = 0$ y $\chi = 0.6$, para seis valores del parámetro adimensional $\bar{\zeta} = 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, y$ 3. Se observa que para cualquier valor de $\bar{\zeta}$, el comportamiento de $\tilde{\psi}$ desde el centro del microcanal a *Y* = 0.8675, tiene un comportamiento casi lineal, con variaciones despreciables entre los diferentes perfiles. A partir de *Y* = 0.8675 aproximadamente, el potencial inducido adimensional se incrementa exponencialmente, acercándose a un valor máximo $\bar{\zeta}$ en la pared del microcanal (*Y* = 1). Estos resultados son esperados debido a que el potencial $\tilde{\psi}$ obedece a la ecuación de Poisson-Boltzmann, donde se obtiene un potencial igual a cero en el centro del microcanal y un valor máximo en las paredes de este.

Se puede observar que entre las curvas obtenidas con $\bar{\zeta} = 0.5$ y $\bar{\zeta} = 1.0$, para una misma posición de *Y* el valor de $\tilde{\psi}$ es más grande para $\bar{\zeta} = 1$. Si comparamos las curvas

con los diferentes valores de $\bar{\zeta}$, y una misma posición en la coordenada transversal mayor a 0.8675, podemos ver que, con el aumento del potencial inducido adimensional en la pared, los incrementos en $\tilde{\psi}$ con respecto a *Y* son más grandes. Por otra parte, entre $\bar{\zeta} = 0.5$ y $\bar{\zeta} = 1.0$, se pueden ver importantes cambios entre los valores de $\tilde{\psi}$ con respecto a un mismo valor de la posición *Y*, pero entre $\bar{\zeta} = 1.5$, $\bar{\zeta} = 2$, $\bar{\zeta} = 2.5$ y $\bar{\zeta} = 3$, la diferencia entre los valores de $\tilde{\psi}$ para un mismo valor de *Y*, son más pequeñas.



Figura 4.2. Perfiles del potencial inducido adimensional $\tilde{\psi}$, como función de la coordenada adimensional *Y*, para seis valores del parámetro adimensional $\bar{\zeta} = 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, y$ 3, con un factor viscoeléctrico adimensional nulo $\bar{f} = 0$, en la coordenada longitudinal $\chi = 0.6$.

En la Figura 4.3 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal *Y* en $\chi = 0.6$, con $\bar{\zeta} = 0.5$, para diferentes valores de \bar{f} , que va desde 0 a 0.08. En esta gráfica notamos que conforme \bar{f} va aumentando la velocidad del fluido va disminuyendo, lo cual cumple con la física del problema ya que \bar{f} representa el factor viscoeléctrico adimensional, y de acuerdo con la ecuación

constitutiva para viscosidad, al aumentar el valor de \overline{f} existirá un incremento en la viscosidad, propiciando una caída en los valores de los perfiles de la velocidad; es decir, a mayores valores de \overline{f} , la velocidad disminuye.



Figura 4.3. Perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada $\overline{f} =$ adimensional Y para ocho valores diferentes de 0.00, 0.001, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.07 *y* 0.08, partir de parámetros а los adimensionales $\chi = 0.6 \text{ y} \overline{\zeta} = 0.5$.

Podemos ver que la curva que describe el comportamiento de la velocidad adimensional a lo largo de *Y* es de tipo parabólico, donde su valor máximo se encuentra en el centro del microcanal, que va desde 0.7323 para un $\bar{f} = 0.00$, hasta 0.7258 con $\bar{f} = 0.08$, con un promedio de decrementos entre cada uno de los valores de \bar{f} de 0.0009314. La disminución de \tilde{u} , es gradual desde el centro del microcanal hasta aproximadamente un valor de *Y* = 0.95, donde tiene una notoria caída a cero para \tilde{u} en la pared del microcanal a causa de la condición de no deslizamiento.



Figura 4.4. Perfiles de velocidad adimensional a lo largo de la coordenada transversal *Y*, para ocho valores diferentes de $\bar{f} = 0.00, 0.001, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.07 y 0.08$, con valores en los parámetros adimensionales de $\chi = 0.6 \text{ y} \bar{\zeta} = 1.0$.

En la Figura 4.4 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal *Y* cuando $\chi = 0.6$ y $\bar{\zeta} = 1.0$, para ocho diferentes valores de \bar{f} . Se observa un comportamiento desordenado, e inconsistente ya que \tilde{u} no disminuye conforme \bar{f} aumenta. Al centro del microcanal el comportamiento de \tilde{u} para los valores de \bar{f} que van de 0 a 0.05, tienen diferencias muy pequeñas del orden de 2×10^{-5} , por lo que el efecto de la viscosidad en estas condiciones es casi nulo.

En la gráfica interna superior se observa que la velocidad adimensional se ve afectada por el factor viscoeléctrico adimensional a partir de Y = 0.4675, en donde \tilde{u} disminuye con el aumento de \bar{f} , los decrementos entre los perfiles son mucho más notorios con diferencias aproximadas de 0.0008.

Ya que la diferencia de \tilde{u} entre los perfiles para diferentes valores de \bar{f} es despreciable, se considera que el promedio de la velocidad adimensional es de aproximadamente $\tilde{u} =$ 1, al centro del microcanal. Estos resultados han sido presentados en múltiples estudios [11][17][21][22], donde la viscosidad es considerada constante, por lo que al compararse notamos que el perfil de velocidad adimensional presenta un comportamiento de un fluido tipo tapón, en donde \tilde{u} tiene cambios diminutos hasta aproximadamente el *Y* = 0.94, donde a partir de ese punto la velocidad cae a cero por la condición de no deslizamiento.

Para esta investigación la viscosidad es variable, pero con efectos casi nulos para un $\bar{\zeta} =$ 1, notando en la Figura 4.4 que con el aumento del factor viscoeléctrico adimensional, no existen diferencias significativas entre los distintos perfiles de \tilde{u} , obteniendo así, el comportamiento clásico para un flujo puramente electroosmótico que se da a causa de potenciales inducidos bajos, $\zeta \leq 1$.



Figura 4.5. Perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada transversal adimensional *Y*, para ocho valores diferentes de $\bar{f} = 0.00, 0.001, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.07 y 0.08$, con valores en los parámetros adimensionales de $\chi = 0.6$ y $\bar{\zeta} = 1.5$.

En la Figura 4.5 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal *Y* en $\chi = 0.6$, y $\bar{\zeta} = 1.5$, para ocho diferentes

valores de \overline{f} . Para un fluido donde el potencial eléctrico inducido en la pared es de 1.5, la velocidad adimensional a lo largo de *Y* ya no presenta un comportamiento tipo tapón, esto debido a que la velocidad en el centro del microcanal va en aumento hasta llegar a un valor máximo en la posición *Y* = 0.8725, y disminuye de manera notoria hasta llegar a cero en la pared del microcanal.

Se aprecia que la diferencia en el decremento de la velocidad entre los perfiles es mucho mayor que en el caso de $\bar{\zeta} = 1$, ya que estas tienden a decrementos promedios de 21.9×10^{-3} , que empieza a ser una diferencia significativa, ya que las velocidades que se manejan son pequeñas. Un aspecto relevante a diferencia de la figura anterior es que al aumentar el valor del factor viscoeléctrico la velocidad disminuye. Esta situación se debe a que cuando aumenta el factor viscoeléctrico, la viscosidad aumenta, propiciando que la velocidad disminuya. Este comportamiento se mantiene para cualquier valor en la coordenada transversal.

A diferencia de la figura anterior, el efecto viscoeléctrico tiene una importante relevancia para potenciales inducidos altos, $\bar{\zeta} \ge 1.5$. Esto también se puede corroborar en el punto donde se alcanza la mayor velocidad (Y=0.8725), ya que como en la figura 4.1, cuando estamos trabajando con potenciales inducidos altos, la máxima velocidad no se encuentra en el centro del microcanal sino muy cercano a las paredes del mismo. Tal y como se puede observar, el efecto viscoeléctrico va a propiciar una disminución en la velocidad aspecto que también se verá reflejado en el caudal.

En la Figura 4.6 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal Y en $\chi = 0.6$, con $\bar{\zeta} = 2.0$, para ocho diferentes valores de \bar{f} . Cuando el potencial eléctrico inducido adimensional en la pared tiene un valor de 2.0, la diferencia de \tilde{u} es mucho más notoria en comparación al comportamiento que presentaba con un $\bar{\zeta} = 1.5$, su comportamiento ya no es tipo tapón, y al igual que el análisis de la Figura 4.5, la velocidad del fluido va aumentando hasta llegar a su valor máximo en Y = 0.8675 aproximadamente, y desciende de forma abrupta hasta $\tilde{u} = 0$, en la pared.



Figura 4.6. Perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada transversal adimensional Υ, para ocho valores diferentes de $\bar{f} =$ 0.00, 0.001, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.07 y 0.08, con valores en los parámetros adimensionales de $\chi = 0.6$ y $\overline{\zeta} = 2.0$.

Tal y como ya se comentó en las líneas anteriores, los perfiles de la velocidad entre la figura 4.5 y 4.6 son similares, sin embargo, en este último caso si analizamos por cada uno de los valores de \bar{f} ; por ejemplo, cuando $\bar{f} = 0$ en la figura 4.5, la velocidad en el centro del microcanal es de aproximadamente 1.2677, mientras que en la figura 4.6, para el mismo caso, la velocidad es de aproximadamente 1.7678. Este comportamiento prevalece a lo largo de la coordenada transversal y para distintos valores del factor viscoeléctrico. Así como en su momento se comentó que el factor viscoeléctrico propicia una importante caída en los perfiles de la velocidad, hay que aclarar que al aumentar el potencial inducido en las paredes del microcanal, provocará un importante aumento en los valores que alcanza la velocidad.

Observamos que la mayor diferencia de velocidades es de 0.05733, y se da entre los perfiles de velocidad adimensional obtenidos con los factores viscoeléctrico de \bar{f} =

 $0.00 \text{ y} \bar{f} = 0.01$, y el menor cambio entre los perfiles se reduce a 0.3357 y se da entre $\bar{f} = 0.07 \text{ y} \bar{f} = 0.08$. En este caso la diferencia entre los perfiles ya no es igual, \tilde{u} va disminuyendo conforme el factor viscoeléctrico aumenta, y el cambio en el valor adimensional de la velocidad se da entre los valores de \bar{f} mas pequeños, y el decremento de la velocidad entre perfiles va siendo menor conforme el factor aumenta.



Figura 4.7. Perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada transversal adimensional *Y*, para ocho valores diferentes de $\bar{f} = 0.00, 0.001, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.07 y 0.08$, con valores en los parámetros adimensionales de $\chi = 0.6$ y $\bar{\zeta} = 2.5$.

En la Figura 4.7 nuevamente se muestran los perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada adimensional *Y*, en $\chi = 0.6$ y con $\overline{\zeta} = 2.5$, para ocho diferentes valores de \overline{f} . En este caso $\overline{\zeta}$ se incrementó y con ello la velocidad aumento con respecto al caso donde $\overline{\zeta} = 2.0$. Este comportamiento se mantiene para los distintos valores del factor viscoeléctrico. Tal y como a ocurrido en las gráficas anteriores, la velocidad aumenta al incrementar $\overline{\zeta}$ y disminuye a mayores valores de \overline{f} , alcanzando el mayor valor de la velocidad en las cercanías de las paredes del microcanal.

Observamos que los perfiles de velocidad entre las figuras 4.6 y 4.7 son similares, sin embargo, en este último caso los valores de la velocidad a lo largo de *Y* son más altos por cada uno de los valores de \overline{f} ; por ejemplo, cuando $\overline{f} = 0$ en la figura 4.6, la velocidad en el centro del microcanal es de aproximadamente 1.7678, mientras que en la figura 4.7, para el mismo caso, la velocidad es de aproximadamente 2.2678.



Figura 4.8. Perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada transversal adimensional Υ. ocho valores diferentes de para f =0.00, 0.001, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.07 y 0.08, valores parámetros con los en adimensionales de $\chi = 0.6$ y $\overline{\zeta} = 3.0$.

En la Figura 4.8 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal Y en $\chi = 0.6$ y con $\bar{\zeta} = 3.0$, para ocho diferentes valores de \bar{f} . Observamos que al centro del microcanal y con $\bar{f} = 0$, el incremento en la velocidad adimensional es de 0.5 con respecto a la velocidad adimensional en las mismas condiciones, pero con un $\bar{\zeta} = 2.5$. Este comportamiento es el mismo para potenciales inducidos altos con diferentes valores de \bar{f} .

En la figura interior, la cual le fue aplicada un zoom entre los valores de Y = 0.0 y Y = 0.6, se puede observar cómo los perfiles de la velocidad disminuyen conforme el factor viscoeléctrico aumenta, existiendo un decremento importante en los valores que alcanza la velocidad en el centro del microcanal, obteniendo la mayor diferencia entre $\bar{f} = 0$ y $\bar{f} = 0.01$, que es de aproximadamente 0.2329, y la menor diferencia entre $\bar{f} = 0.07$ y $\bar{f} = 0.08$ con un valor de aproximadamente 0.0683.

Tabla 4.1. Diferencias de la velocidad adimensional al centro del microcanal $|\Delta|$, cuando $\bar{f} = 0$, para seis valores de $\bar{\zeta}$.

Figura	ζ	ũ	Δ
4.3	0.5	0.732	0.267
4.4	1.0	0.999	
			0.266
4.5	1.5	1.265	
			0.505
4.6	2.0	1.770	
			0.500
4.7	2.5	2.270	
			0510
4.8	3.0	2.780	0.510
1	1		

En resumen, tal y como se muestra en la Tabla 4.1, la diferencia de \tilde{u} para $\bar{\zeta} = 0.5$ y $\bar{\zeta} = 1.0$, cuando $\bar{f} = 0.00$ al centro del microcanal es de 0.267, por lo que \tilde{u} tuvo un incremento del 36%. Para un valor de $\bar{\zeta} = 1.5$, la velocidad adimensional aumenta 27% con respecto al valor de \tilde{u} cuando $\bar{\zeta} = 1.0$, mientras que de $\bar{\zeta} = 1.5$ a $\bar{\zeta} = 2.0$ el incremento es de 40%, pero este aumenta solo el 28% entre $\bar{\zeta} = 2.0$ y $\bar{\zeta} = 2.5$, en donde \tilde{u} para $\bar{\zeta} = 2.5$, aumenta 23% su valor para un $\bar{\zeta} = 3.0$. El mayor efecto que tiene el incremento de $\bar{\zeta}$, se presenta entre los valores de 1.5 y 2.0, ya que el incremento de la velocidad adimensional es del 40% su valor, para el resto de los valores en $\bar{\zeta}$, los incrementos de \tilde{u} son mayores del 20% pero menores al 40%.

Desde la figura 4.3 a la figura 4.8 se reconoce que el potencial eléctrico inducido adimensional en la pared propicia un amento en la velocidad del fluido, incluso cuando el factor viscoeléctrico adimensional no tiene presencia. Cuando \bar{f} toma valores diferentes de cero la velocidad adimensional disminuye conforme el factor viscoeléctrico adimensional aumenta, que es el comportamiento esperado, ya que, al aumentar el factor viscoeléctrico, la resistencia del fluido a moverse también se incrementa, por lo tanto, la velocidad disminuye. Dichos cambios son más notorios cuando el potencial adimensional inducido máximo es mayor o igual a 1.5, antes de este valor los decrementos pueden ser despreciables. Para todas las pruebas con $\bar{\zeta} \ge 1.5$, los decrementos más notorios, se dan cuando \bar{f} es menor a 0.04, a partir de este valor la caída de velocidad no es tan grande y va disminuyendo con el aumento de \bar{f} .



Figura 4.9. Perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada adimensional *Y*, y una posición longitudinal de $\chi = 0.6$, con un $\bar{f} = 0.00$, para seis valores de $\bar{\zeta}$ los cuales son: 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, *y* 3.0.

Para continuar con el análisis de \tilde{u} a lo largo de Y en un valor de la coordenada longitudinal adimensional $\chi = 0.6$ para diferentes valores de $\bar{\zeta}$ y un valor constante de \bar{f} , se crearon los siguientes gráficos que van desde la Figura 4.9 a la Figura 4.16.

En la Figura 4.9 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal *Y* cuando $\chi = 0.6$ y $\bar{f} = 0.00$, para seis diferentes valores de $\bar{\zeta}$. Se aprecia que con el aumento de $\bar{\zeta}$ la velocidad adimensional a lo largo de *Y* también aumenta. Entre los perfiles evaluados con $\bar{\zeta} = 0.5, 1.0, y 1.5$ en el centro del microcanal, \tilde{u} tiene incrementos de aproximadamente 0.2670, mientras que para los perfiles de \tilde{u} evaluados con los valores más altos de $\bar{\zeta}$, que van desde 1.5 a 3.0, el incremento en \tilde{u} es de aproximadamente 0.5. Se observa que para un $\bar{\zeta} = 0.5$, el perfil puede ser descrito por una curva de tipo parabólica al igual que la figura 4.3. El perfil de velocidad adimensional para un $\bar{\zeta} = 1.0$ describe el comportamiento típico de un flujo puramente electroosmótico, mientras que el resto de los perfiles tienen un valor



Figura 4.10. Perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada adimensional *Y*, y una posición longitudinal adimensional de $\chi = 0.6$, con un $\bar{f} = 0.01$, para seis valores de $\bar{\zeta}$ los cuales son: 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, *y* 3.0.

de \tilde{u} al centro del microcanal que va incrementando a lo largo de la coordenada transversal hasta llegar a su valor máximo aproximadamente en Y = 0.8725, donde empieza su decremento exponencial hasta llegar a cero en las paredes del microcanal.



Figura 4.11. Perfiles de velocidad adimensional \tilde{u} en función de la coordenada adimensional *Y*, y una posición longitudinal adimensional de $\chi = 0.6$, con un factor viscoeléctrico adimensional $\bar{f} = 0.02$, para seis valores del potencial inducido en la pared adimensional $\bar{\zeta}$ los cuales son: 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, *y* 3.0.

En la Figura 4.10 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal *Y* cuando $\chi = 0.6$ y $\bar{f} = 0.01$, para seis diferentes valores de $\bar{\zeta}$. Tal y como en la figura anterior, para un valor fijo del factor viscoeléctrico al aumentar el potencial inducido adimensional $\bar{\zeta}$, el valor de \tilde{u} también lo hace. El incremento más notorio de los valores de \tilde{u} a lo largo de *Y* se da entre los perfiles de $\bar{\zeta}=1.5$ y $\bar{\zeta}=2.0$, como ejemplo, el valor de \tilde{u} es de aproximadamente 1.2474 en el centro del microcanal para un $\bar{\zeta} = 1.5$, mientras que, bajo las mismas condiciones, pero con un $\bar{\zeta} = 2.0$ el valor de \tilde{u} es de aproximadamente 1.7104. El aumento de \tilde{u} entre los perfiles de velocidad adimensional con valores de $\bar{\zeta} = 0.5$, 1.0 y 1.5, tienen incrementos

pequeños en comparación a los de $\bar{\zeta} = 2.0, 2.5$, y 3.0. Al igual que la figura 4.9, el perfil de \tilde{u} cuando $\bar{\zeta} = 0.5$ describe que la velocidad adimensional disminuye de forma paulatina y suave a lo largo de Y desde un valor máximo de aproximadamente 0.7314 del centro del microcanal, y cuando Y es mayor a 0.8725, la velocidad adimensional desciende hasta cero en la pared de este. El perfil que alcanza la mayor velocidad es el que se obtuvo con un $\bar{\zeta} = 3.0$, con un valor aproximado de $\tilde{u} = 2.5349$ en el centro del microcanal. Cundo $\bar{\zeta}$ toma el valor de 1.0, vemos qué el flujo tiene un comportamiento tipo tapón, pero al igual que en la Figura 4.9, este comportamiento se modifica para valores de $\bar{\zeta}$ mayores a 1.0, dicho comportamiento también lo vemos en el análisis de la Figura 4.3 a la Figura 4.8.



Figura 4.12. Perfiles de velocidad adimensional \tilde{u} en función de la coordenada adimensional *Y*, y una posición longitudinal adimensional de $\chi = 0.6$, con un factor viscoeléctrico adimensional $\bar{f} = 0.03$, para seis valores del potencial inducido en la pared adimensional $\bar{\zeta}$ los cuales son: 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, *y* 3.0.



Figura 4.13. Perfiles de velocidad adimensional \tilde{u} en función de la coordenada adimensional *Y*, y una posición longitudinal adimensional de $\chi = 0.6$, con un factor viscoeléctrico adimensional $\bar{f} = 0.04$, para seis valores del potencial inducido en la pared adimensional $\bar{\zeta}$ los cuales son: 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, *y* 3.0.

En las Figuras 4.11 y 4.12 se muestran los perfiles de velocidad adimensional en función de la coordenada transversal adimensional *Y*, para $\bar{f} = 0.02$ y $\bar{f} = 0.03$ respectivamente, evaluando en seis valores de $\bar{\zeta}$ qué van desde 0.5 a 3.0, en una posición longitudinal adimensional $\chi=0.6$. De las figuras 4.11 y 4.12, notamos un flujo tipo tapón para $\bar{\zeta}=1.0$, mientras que el comportamiento para $\bar{\zeta}$ mayor o igual a 1.5, es de una velocidad adimensional que aumenta paulatinamente a lo largo de *Y* hasta un valor máximo en aproximadamente Y = 0.8725 en donde desciende hasta llegar a cero en la pared del microcanal. Vemos el mayor incremento de velocidad adimensional entre los perfiles de velocidad obtenidos con los potenciales $\bar{\zeta} = 1.5$ y $\bar{\zeta} = 2.0$. Para el perfil de velocidad adimensional con $\bar{\zeta} = 3.0$, y al centro del microcanal, \tilde{u} es de aproximadamente 2.3529 con un $\bar{f} = 0.02$, y \tilde{u} es de aproximadamente 2.206 para un $\bar{f} = 0.03$. Estas velocidades adimensionales, son menores al valor de \tilde{u} en las mismas condiciones para un $\overline{f} = 0.01$. Con esta comparación se observa que el valor de la velocidad adimensional va disminuyendo con el aumento del factor viscoeléctrico. Se observa que con el aumento de \overline{f} , los perfiles de velocidad descritos por $\overline{\zeta} = 0.5$ y $\overline{\zeta} = 1.0$, no tiene cambio en los valores de la velocidad a lo largo de Y, mientras que para los perfiles con $\overline{\zeta} \ge 1.5$, la velocidad a lo largo de Y disminuye con el aumento de \overline{f} . Siguiendo esta lógica, se deduce que con el aumento de \overline{f} los perfiles de velocidad se van acercando al obtenido con un $\overline{\zeta} = 1.0$, no en comportamiento, pero si en los valores que puede alcanzar.



Figura 4.14. Perfiles de velocidad adimensional \tilde{u} en función de la coordenada adimensional *Y*, y una posición longitudinal adimensional de $\chi = 0.6$, con un factor viscoeléctrico adimensional $\bar{f} = 0.05$, para seis valores del potencial inducido en la pared adimensional $\bar{\zeta}$ los cuales son: 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, *y* 3.0.

En las Figuras 4.13, 4.14, 4.15 y 4.16 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional \tilde{u} como una función de la coordenada transversal *Y* en $\chi = 0.6$, con $\bar{f} = 0.04, 0.05, 0.07, y 0.08$, respectivamente, para seis diferentes valores de $\bar{\zeta}$. De estas cuatro figuras al igual que las últimas dos analizadas, se observan los perfiles para la

velocidad longitudinal cuando el valor de $\bar{\zeta}$ cambia para un solo valor de \bar{f} . Además, con el aumento de \bar{f} , la velocidad adimensional va disminuyendo su valor, que es la consecuencia de la dependencia de la viscosidad al factor viscoeléctrico. Al igual que las figuras 4.9, 4.10, 4.11 y 4.12, los perfiles de velocidad para un $\bar{\zeta}$ de 0.5,1.0,1.5,2.0,2.5 y 3.0, son descritos por las mismas curvas que en las figuras 4.13,4.14, 4.15 y 4.16. El objetivo de comentar estas cuatro figuras en un mismo párrafo es no ser repetitivo con la física del problema, ya que como se puede observar, el comportamiento hidrodinámico de un flujo electroosmótico viscoeléctrico depende del potencial inducido en las paredes y el parámetro adimensional \bar{f} , es decir; de las Figuras 4.9 a 4.16 los resultados nos muestran el mismo comportamiento de la velocidad



Figura 4.15. Perfiles de velocidad adimensional \tilde{u} en función de la coordenada adimensional *Y*, y una posición longitudinal adimensional de $\chi = 0.6$, con un factor viscoeléctrico adimensional $\bar{f} = 0.07$, para seis valores del potencial inducido en la pared adimensional $\bar{\zeta}$ los cuales son: 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, *y* 3.0.

adimensional en función de Y, además, notamos que la diferencia de velocidad entre los perfiles con $\bar{\zeta} = 0.5$ y $\bar{\zeta} = 1.0$ no es tan grande como el incremento de \tilde{u} entre los

perfiles mayores a $\bar{\zeta} = 1.5$. Cuando $\bar{\zeta}$ adquiere el valor de 1.0, la velocidad adimensional tiene un decremento mínimo a lo largo de *Y* hasta aproximadamente *Y* = 0.92, en donde cae a cero por la condición de frontera, a este comportamiento se le otorga el nombre de flujo puramente electroosmótico o también conocido como flujo tapón. Para los perfiles con $\bar{\zeta} = 1.0$, el factor viscoeléctrico adimensional tiene un efecto casi nulo sobre la velocidad adimensional del fluido, por lo que la viscosidad en estas condiciones aun y cuando se incremente o disminuya, no tiene repercusiones importantes sobre el sistema.



Figura 4.16. Perfiles de velocidad adimensional \tilde{u} en función de la coordenada adimensional *Y*, y una posición longitudinal adimensional de $\chi = 0.6$, con un factor viscoeléctrico adimensional $\bar{f} = 0.08$, para seis valores del potencial inducido en la pared adimensional $\bar{\zeta}$ los cuales son: 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, *y* 3.0.

Como parte final de este trabajo de tesis, se analiza el comportamiento del caudal \tilde{Q} como una función del potencial inducido $\bar{\zeta}$. La finalidad de este último análisis es ver como el efecto viscoeléctrico mejora o afecta en la hidrodinámica de este tipo de sistemas.



Figura 4.17. Perfiles de flujo volumétrico como función del potencial inducido adimensional $\bar{\zeta}$, para ocho valores diferentes del parámetro adimensional del factor viscoeléctrico $\bar{f} = 0.00, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.07 y 0.08$.

En la Figura 4.17 se muestran los perfiles de caudal como una función del potencial inducido adimensional $\bar{\zeta}$, para ocho diferentes valores de \bar{f} . Los perfiles nos muestran que para un $\bar{f} = 0.00$ el comportamiento del caudal adimensional a lo largo de $\bar{\zeta}$ es casi lineal, partiendo de un valor inicial de aproximadamente 0.97 hasta un valor máximo de aproximadamente 2.78 para un valor máximo de $\bar{\zeta} = 3.0$, en este caso la velocidad en el fluido se incrementa tal como se muestran en la tabla 4.1, donde se observa que sin la existencia del factor viscoeléctrico, el potencial inducido afecta a la velocidad del fluido, y por ende al caudal, es decir; para $\bar{\zeta} = 3.0$ con $\bar{f} = 0.00$, el sistema alcanza la máxima velocidad y el máximo caudal. Sin embargo, conforme el valor del parámetro viscoeléctrico adimensional aumenta, el caudal va disminuyendo. Este comportamiento se mantiene para cualquier valor de $\bar{\zeta}$, a excepción de cuando $\bar{\zeta} = 1.0$, que sin importar el valor de \bar{f} , todos los perfiles llegan al mismo valor. Tal y como se ha visto en el análisis de estas diecisiete figuras, el efecto viscoeléctrico se compone de dos partes, al

aumentar $\bar{\zeta}$ aumenta la velocidad y por ende el caudal, mientras que conforme \bar{f} aumenta, la velocidad disminuye. Intuitivamente, y con la finalidad de mejorar el rendimiento de estos sistemas microelectromecánicos, se consideraría valores altos del potencial inducido en las paredes del microcanal propiciando un mayor incremento en el caudal del mismo, sin embargo, antes de proponer esta situación, se debe de hacer un minucioso análisis del efecto Joule, debido, a que al trabajar con corriente eléctrica existirá un incremento en la temperatura del fluido, aspecto indeseable en la mecánica de fluidos y la transferencia de calor para esto sistemas.

Capítulo 5. Conclusiones.

En este trabajo se desarrolló un análisis numérico mediante la técnica de elementos finitos con la ayuda del software FreeFem++, del efecto viscoeléctrico en un flujo puramente electroosmótico que circula en un microcanal rectangular. Para este fin se hizo uso de las ecuaciones diferenciales parciales que permiten modelar a los fenómenos electrocinéticos; las cuales son: ecuación de continuidad, momentum en x y y, Poisson-Boltzmann y conservación de carga. Además, se considera a la viscosidad del fluido como una función del potencial eléctrico inducido.

Dentro de los resultados obtenidos, se observa el comportamiento típico de la velocidad longitudinal \tilde{u} a lo largo de la coordenada trasversal Y para un flujo viscoeléctrico cuando $\bar{\zeta} = 1$, las cuales son condiciones en las que se realizan muchas investigaciones sobre el tema, ya que el efecto de \bar{f} sobre la viscosidad es prácticamente nulo y por ello se considera a la viscosidad como una constante. La incidencia de $\bar{\zeta}$ mayor a la unidad, simboliza un incremento de la velocidad adimensional, aun cuando, se tiene un factor viscoeléctrico nulo.

Si el potencial inducido máximo adimensional $\bar{\zeta}$ es menor a uno, la velocidad adimensional disminuye su valor, y sigue un perfil parabólico que desciende hasta llegar a cero en las paredes. El efecto de \bar{f} es insignificante para valores de $\bar{\zeta} \leq 1$, pero este parámetro repercute en \tilde{u} cuando $\bar{\zeta} > 1$. Con el incremento del parámetro \bar{f} se disminuye el valor de la velocidad adimensional ya que la resistencia del fluido toma más fuerza, pero esto sólo pasa cuando el potencial inducido máximo adimensional es mayor a uno.

Analizar la mecánica de los fluidos en los sistemas microelectromecánicos, es muy diferente a la teoría en las escalas macro, debido a la gran cantidad de efectos moleculares y de pared que pueden existir en la escala micro. Para este problema en particular, analizamos como la viscosidad repercute sobre el sistema planteado, donde la velocidad no va desde un punto máximo en el centro a cero en las paredes, como en los fluidos a escalas convencionales, sino que parte de una velocidad inicial en el centro del microcanal, y aumenta a un valor máximo casi al final de este, para después caer a cero justo en la pared, debido a la condición de no deslizamiento. El efecto viscoeléctrico afecta el comportamiento de la velocidad a lo largo de la coordenada Y, debido a que cuando el factor viscoeléctrico \overline{f} aumenta, la viscosidad también lo hará, provocando que la velocidad del fluido disminuya y, por ende, el caudal también lo hará.

Tal y como se comentó en las líneas anteriores, en la teoría electrocinética existe una gran variedad de efectos que pueden ser estudiados; dentro de estos se encuentra el efecto del deslizamiento en las paredes del microcanal, la cual, puede ser analizada mediante una condición de frontera de tipo 2, en donde se especifican los valores de la derivada de una solución tomada sobre la frontera o contorno del dominio, y también como una función de la viscosidad, permitiendo como trabajo a futuro analizar el efecto viscoeléctrico en un fluido electroosmótico que circula en un microcanal con deslizamiento en las paredes.

Nomenclatura.

- ψ Potencial eléctrico inducido [V].
- ψ_c Potencial inducido característico[V].
- ϕ Potencial eléctrico aplicado [V].
- ϕ_0 Potencial eléctrico aplicado máximo [V].
- ζ_0 Potencial inducido máximo [V].
- Φ Potencial eléctrico total [V].
- *E* Campo eléctrico $\left[\frac{v}{m}\right]$.
- σ Conductividad eléctrica $\left[\frac{A}{Vm}\right]$.
- ρ_e Densidad de carga $\left[\frac{c}{m^3}\right]$.

$$\rho$$
 Densidad de la solución $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$.

- ϵ Permitividad dieléctrica del fluido $[\frac{F}{m}]$.
- *L* Longitud del micro canal [*m*].
- λ_D Longitud de Debye [*m*].
- H Altura del centro a las paredes del micro canal [*m*].
- *z* Valencia de la solución electrolítica.
- *e* La carga elemental [*C*].
- k_B Constante de Boltzmann $\left[\frac{J}{k}\right]$.
- T Temperatura [K].
- n_{∞} Concentración iónica de la solución $[m^{-3}]$.

- u, v Velocidad del fluido en x y $y\left[\frac{m}{s}\right]$.
- P Presión [*Pa*].
- η Viscosidad $\left[\frac{kg}{ms} \circ Pa * s\right]$.
- f Factor viscoelectrico $\left[\frac{m^2}{V^2}\right]$
Referencias.

- [1] Klasco, Mike. The Coming Impact of MEMS Audio in 2020. *Voice Coil*, Diciembre 2019.
- [2] Worz, O., et al. Microreactors a New Efficient Tool for Reactor Development, *Chemical Engineering Technology*, Vol. 24, 2000, pp. 24–29.
- [3] Nam-Trung Nguyen and Steven T. Wereley. *Fundamentals and Applications of Microfluidics*. ARTECH HOUSE, 2006.
- [4] Jacob H. Masliyah and Subir B. *Electrokinetic and Colloid Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, Canadá 2006.
- [5] Hessel, V., Hardt, S., and Lowe, H. *Chemical Micro Process Engineering*, Weinheim: Wiley-VCH, 2004
- [6] B. H. Lapizco-Encinas (2013). Microfluidics applications in bioseparations. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 7:205–214.
- [7] Nikolajsen, R.P.H., Chirica, G.S., Fintschenko, Y. y Kutter, J.P. (2006). Electro-driven separation methods on chips. *En Separation methods in microanalytical systems*. (J. P. Kutter and Y. Fintschenko, eds.), Pp. 261-317, CRC Press, Boca Raton, FL.
- [8] Andersson, H. y van den Berg, A (2003). Microfluidic devices for cellomics: A review. *Sensors and Actuators B-Chemical* 92(3), 315-325.
- [9] J. Lyklema. Fundamentals of Interface and Colloid Science, Vol. II Solid-Liquid Interfaces. *Academic Press*, 2001. Pag 476.
- [10] J. Lyklema, S. Rovillard and J.De Conick (1998). Electrokinetics: The Properties of the Stagnant Layer Unraveled. *Langmuir: The ACS Journal of Surfaces and Colloids*. Vol. 14.
- [11] Bocquet. L and Barrat. J.L (2007). Flow boundary conditions from nano- to microscales. *The Royal Society of Chemistry*. DOI: 10.1039/b616490k.
- [12] Ramos. E.A. *Análisis del Flujo Electro-Osmótico en un Microcanal Considerando los Efectos Inducidos de la Presión y la Temperatura*. UNAM, 2016.
- [13] Alizadeh A, Hsu WL, Wang M, Daiguji H (2020) *Electroosmotic flow: From microfuidics* to nanofuidics. *Electrophoresis.* <u>https://doi.org/10.1002/elps.202000313</u>

- [14] C. Zhao, A. Zholkovskij, J. H. Masliyah, and C. Yang (2008). Analysis of electroosmotic flow of power-law fluids in a slit microchannel. *Journal of Colloid and Inteface* Science, 326:503–510.
- [15] X. Xuan, B. Xu, D. Sinton, and D. Li. (2004). Electroosmotic flow with joule heating effects. *Miniaturisation for Chemistry, Biology, & Bioengineering Lab Chip*, 4:230– 236.
- [16] G. Y. Tang, C. Yang, J. C. Chai, and H. Q. Gong (2004). Joule heating effect on electroosmótico flow and mass species transport in microcapillary. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47:215–227.
- [17] Lizardi JJ, Ramos EA, Méndez F (2019) Numerical analysis for temperature changes in an electro-osmotic fow in a microchannel. *J Thermophys Heat Transf* 33(3):663. https://doi.org/10.2514/1.T5489
- [18]Monsivais I, Lizardi J, Méndez F (2018). Conjugate termal creep flow in a thin
microchannel.IntJTermalSci124:227.https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2017.10.012
- [19] J. Lyklema and J. Th. G. Overbeek (1961). On The Interpretation Of Electrokinetic Potentials. *Journal Of Colloid Science* 16, 501—512.
- [20] J. Lyklema. On the slip process in electrokinetics. Colloids and Surfaces A: *Physicochemical and Engineering Aspects* 92 (1994) 41-49
- [21] Martin Z. Bazant, Mustafa Sabri Kilic, Brian D. Storey and Armand Ajdari. Towards an understanding of induced-charge electrokinetics at large applied voltages in concentrated solutions. *Advances in Colloid and Interface Science* 152 (2009) 48– 88.
- [22] E.A. Ramos, O. Bautista, J.J. Lizardi and F. Mendez (2017). A perturbative thermal analysis for an electro-osmotic flow in a slit microchannel based on a Lubrication theory. *International Journal of Thermal Sciences*. Vol. 11, Pag 499 510.
- [23] Yunus A. Cengel, John M.Cimbala. *Mecánica de Fluidos Fundamentos y Aplicación*. MaGraw-Hill. México, 2006. Pag: 428.
- [24] D. A. Saville 1977. Electrokinetic effects with small particles. Ann. *Rev. Fluid Mech.*, 9:321–337
- [25] Hecht Frederic 2023. *Manual de FreeFemm++*.
- [26] BHATTI, M. A. *Fundamental Finite Element Analysis ans Aplications. Hoboken*, New Jersey. John Wiley & Sons. 2005.

- [27] ZIENKLEWICZ, O. C TAYLOR, R. L. And Fox, D. D., *The Finite Element Method for Solid and Structural Mechanics*. 7th Edition, Oxford Elsevier Butterworth-Heinemann, 2014.
- [28] T. Apóstol, *"Calculus"*, Vol. II, Ed. Revert, Massachusetts 1960.
- [29] Davis. Timoty. Algorithm 832: UMFPACK V4.3 An unsymmetric pattern multifrontal metrhod. ACM Transactions on Mathematical Software, Vol 30. https://doi.org/10.1145/992200.992206
- [30] Gerald, C., y Wheatley, P. Análisis numérico con aplicaciones. P. Hall. 2000