

Efectos de advección caótica en microcanales.

Tutor: Dr. Marcos Vera Coello

Alumno: Jose Luis Rodríguez Beltrán.



Universidad Carlos III de Madrid
fluid mechanics research group



Resumen.....	3
1. Introducción.....	4
2. Antecedentes.....	7
3. Implementación numérica.....	21
3.1 Dimensiones y condiciones de operación.....	21
3.2 Condición de contorno en la entrada.....	24
3.3 Condición de contorno en la pared con ranuras.....	27
3.4 Implementación en Fluent.....	31
3.4.1 Implementación en Fluent: Mallado.....	32
3.4.4 Implementación en Fluent: problemas de convergencia.....	43
4. Resultados.....	47
4.1 Canal convencional sin ranuras.....	47
4.1.1 Canal convencional: Convergencia.....	48
4.1.2 Canal convencional: Flujo.....	49
4.2 Configuración ranuras tipo Kaplan.....	50
4.2.1 Configuración Kaplan: Convergencia.....	51
4.2.2 Configuración Kaplan: Flujo.....	52
4.2.3 Configuración Kaplan: Evolución del escalár.....	56
4.3 Configuración tipo Strook.....	59
4.3.2 Configuración Strook: Flujo.....	60
4.3.3 Configuración Strook: Evolución del escalár.....	64
4.3 Ejemplo: Microcanal con distintas superficies reactivas.....	65
5. Conclusiones.....	73
ANEXO A Código fuente de la User Defined Function.....	76
ANEXO B SUMMARY REPORT de Fluent.....	83
Bibliografía.....	91



Resumen

El propósito de este proyecto fin de carrera es realizar un estudio numérico del flujo y reproducir los resultados en un micromezclador del tipo SHM (Staggered Herringbone Mixer). Los micromezcladores SHM utilizan efectos de advección caótica para fomentar la mezcla en aplicaciones en las que por sus condiciones de operación existen dificultades para conseguir dicha mezcla. Estos efectos de advección caótica se consiguen gracias a una serie de ranuras realizadas en una de las superficies del canal. Para poder realizar el estudio numérico se han utilizado técnicas CFD, haciéndose uso del programa FLUENT. Frente a otros estudios de esta temática, en este se presenta la novedad de no realizar una simulación directa de estas ranuras sino que se emplea una condición de contorno equivalente. Los micromezcladores y en concreto los del tipo SHM tienen interesantes aplicaciones dentro de la ingeniería térmica que van desde micro-intercambiadores de calor hasta micro-pilas de combustible.



1. Introducción.

Se podría definir el mezclado como la acción de juntar o unir dos o más componentes hasta lograr un conjunto lo más homogéneo posible en el que la probabilidad de encontrar una partícula de cualquiera de los componentes iniciales es la misma en todo el conjunto. Este suceso ha estado típicamente relacionado con el fenómeno de la turbulencia y el caos, sobre todo al nivel macroscópico, pero hay estudios que han demostrado que también se puede obtener un patrón de comportamiento caótico para fomentar el mezclado en flujos laminares, un fenómeno conocido como advección caótica.

Si trasladamos estos conceptos de mezclado a aplicaciones de pequeños tamaños, cuyas longitudes características están entre 10 y 100 μm , nos encontramos en el campo de los micromezcladores.

En este contexto los micromezcladores resuelven un problema típico de estas escalas cuando utilizamos un canal simple en el que el mezclado se produce únicamente por difusión. En las aplicaciones, el tiempo de residencia en el canal es demasiado corto en comparación con el tiempo característico de mezcla. Esto ocurre siempre en casos en que el número de Péclet

$$Pe = \frac{Ul}{D}$$

basado en la velocidad media en el canal, U , la longitud característica transversal, l , y la difusividad másica, D , es grande frente a la unidad. A pesar de los pequeños valores de U y l utilizados en los micromezcladores, el número de Péclet puede llegar a hacerse muy grande cuando la difusividad másica de los distintos componentes es muy pequeña, como ocurre en el mezclado de polímeros o sustancias orgánicas. Hablando de manera más ortodoxa, en lugar del número de Péclet deberíamos referirnos al producto del número de Reynolds y el número de Schmidt

$$Re Sc = \frac{Ul}{\nu D}$$

ya que, siendo rigurosos, el número de Péclet se refiere generalmente al ámbito de la difusividad térmica. No obstante, mantendremos la notación utilizada habitualmente en la literatura y seguiremos refiriéndonos al número de Péclet.

Existe una relación lineal entre el número de Péclet (ó $Re \cdot Sc$) y la longitud necesaria para el mezclado, lo que dadas las condiciones típicas de operación puede derivar en longitudes excesivas si se emplea un microcanal simple.

Actualmente hay ya una gran variedad de micromezcladores entre los que se puede distinguir dos grandes grupos, los micromezcladores activos, en los que se utiliza la perturbación generada por un campo externo para el mezclado, y los pasivos en los que no es necesario aporte de energía exterior para el proceso de mezclado ya que este se realiza enteramente por difusión o advección caótica.

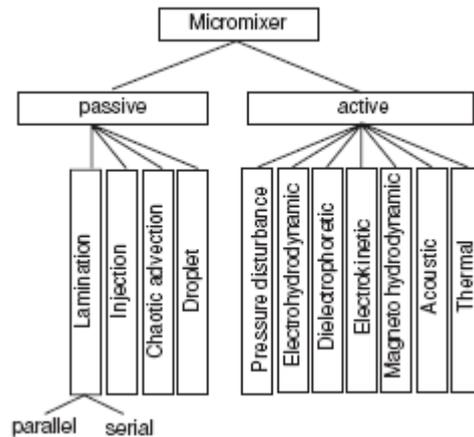


Figura 1 Clasificación esquemática micromezcladores.

De especial interés son los mezcladores pasivos, ya que por las pequeñas escalas a las que se trabaja y el tipo de aplicaciones en las que se usan es de especial importancia su simplicidad para operar, el bajo coste, la facilidad de construcción, la ausencia de partes móviles, así como su capacidad para funcionar únicamente a partir de un gradiente de presión.

Dentro del grupo de micromezcladores pasivos, en este estudio nos centraremos en un tipo concreto: los micromezcladores SHM (Staggered Herringbone Mixer) que reciben su nombre por la similitud entre la disposición de un conjunto de ranuras en la pared inferior del canal y una "espina de pescado" o una "espiga de trigo".

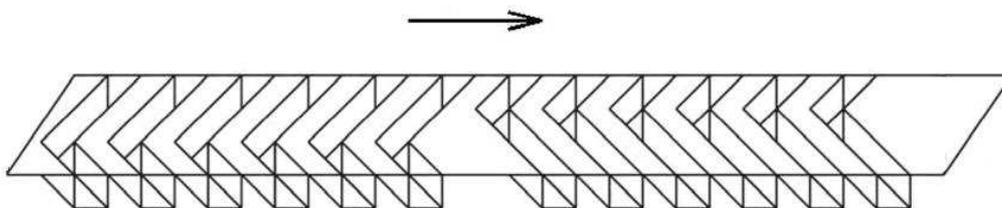


Figura 2 Patrón de ranuras de un micromezclador SHM.



Como veremos detalladamente más adelante es este patrón de ranuras el que generan una componente transversal en el flujo que da lugar a un mezclado por advección caótica, mucho mas efectivo que el puramente difusivo.

Ejemplos de alguna de las aplicaciones de los micromezcladores en general y del tipo SHM en particular son:

- Bioquímica y biotecnología: análisis y síntesis de ADN, suministro de fármacos, análisis médicos, etc.
- Química: homogenización de reactivos químicos en disoluciones.
- Tecnologías Energéticas:
 - Homogenización de flujos en aplicaciones con paredes reactivas como las pilas de combustible.
 - Favorecer la transferencia de calor en microintercambiadores de calor.

Una de las ventajas de los micromezcladores SHM es que pueden ser fabricados mediante procedimientos capa a capa basados en técnicas litográficas que no pueden aplicarse a otros micromezcladores de geometrías más complejas, como los de tipo 3d -Serpentine, Tesla structure, C-shape, o L – Shape, lo que supone una fabricación sencilla y un bajo precio. En cuanto a los materiales empleados, pueden emplearse desde silicona o materiales poliméricos por su compatibilidad biológica, hasta el aluminio para por ejemplo aplicaciones en las que la transferencia de calor juegue un papel importante.

El objetivo principal de este proyecto es diseñar, ejecutar y validar un modelo de simulación numérica de un micromezclador SHM utilizando una condición de contorno efectiva que sustituye a la pared con las ranuras. Como veremos mas adelante, la utilización de dicha condición de contorno supone un ahorro muy importante en el esfuerzo computacional. En cuanto a las condiciones de operación adelantamos que siempre se trabajara dentro del régimen laminar considerando un fluido de propiedades (ρ , μ , etc.) constantes. Con el fin de observar los efectos generados por las ranuras y la evolución de los gradientes de concentración se utiliza un escalar pasivo como marcador.



2. Antecedentes

Existen numerosos artículos que están relacionados con el problema objeto de este proyecto fin de carrera. A continuación se realizara una breve revisión de la bibliografía más relevante.

Aunque existen publicaciones anteriores que pudieran tener relación con tema de este estudio, tomaremos como referencia más antigua el artículo *Mixing, Chaotic Advection and Turbulence* de Julio M. Ottino, publicado en el *Annual Review of fluid mechanics* (1990). La intención del artículo es dar una visión general del advección caótica y el mezclado. Se proporciona una definición para mezclado, se analizan los distintos mecanismos que pueden originar el mezclado, y se introduce los fundamentos de la dinámica caótica, así como distintos ejemplos de mezclado caótico. Finalmente se analiza la vinculación de los flujos turbulentos al caos.

Nueve años después *Julyan H.E. Cartwright et al.* publican *An Introduction to Chaotic Advection*. Una revisión de distintos artículos en la que se proporciona una introducción a resultados teóricos, simulaciones numéricas y experimentos, acerca de la advección caótica en flujos en los que los campos de velocidades son: no estacionarios bidimensionales, y tridimensionales tanto estacionarios como no estacionarios.

El primer artículo que habla concretamente de micromezcladores tipo SHM es "*Chaotic Mixer for Microchannels*" de *Stroock et al.* publicado en 2002. Es una de las referencias básicas de este proyecto fin de carrera. Este artículo consta de una pequeña introducción en la que se explica la importancia de los micromezcladores, sus aplicaciones y los distintos tipos existentes para finalmente centrarse en el tipo SHM (Staggered herringbone mixer).

Como paso previo se presenta un primer experimento en el que se introducen dos disoluciones a la entrada del mezclador, una de ellas fluorescente. En la base de dicho mezclador se han mecanizado pequeñas ranuras que forman un ángulo oblicuo θ con respecto al eje longitudinal, con el fin de generar flujos transversales a partir de un gradiente de presión axial.

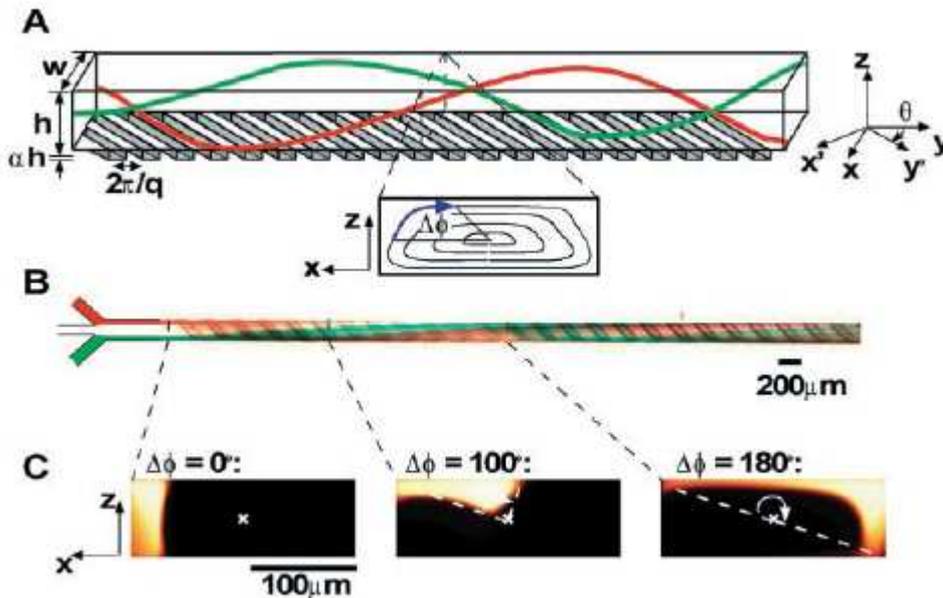


Figura 2.1 Flujo helicoidal generado por ranuras oblicuas situadas en el fondo del canal.

En un segundo experimento las ranuras en la base del canal se practican con un patrón como el que se puede ver en la siguiente figura.

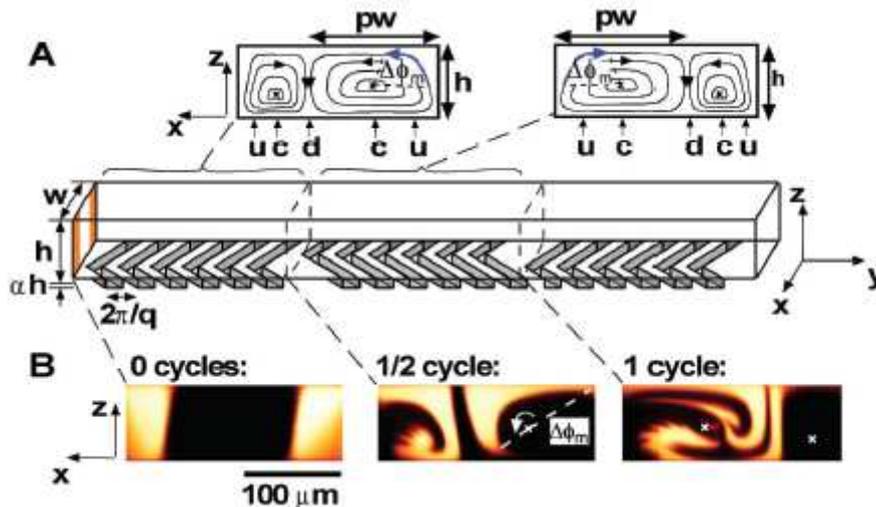


Figura 2.2 Esquema de un mezclador SHM y secciones transversales donde se muestra la evolución de la distribución de la disolución fluorescente inyectada a la entrada.

Como ya hemos visto, este es el tipo de mezclador denominado como Staggered Herringbone Mixer (SHM). Con este patrón de ranuras se consiguen secuencias de flujos locales rotacionales y extensionales.

La eficiencia en el mezclado esta controlada por dos parámetros, el grado de asimetría en las ranuras (p) y la amplitud de la rotación del fluido en cada medio ciclo ($\Delta\Phi$), determinados por la geometría de las ranuras.



Tras realizar varios ensayos con distintos números de Reynolds y Péclet ($Re \cdot Sc$, al tratarse de difusividad masica), se observa que para altos Pe ($< 2 \cdot 10^5$) la longitud para lograr un mezclado del $\sigma = 90\%$ se reduce hasta en un factor de 3 con respecto a el canal con aristas rectas. σ es un indicador del grado de mezclado y es calculado a partir de las imágenes de las secciones transversales de la siguiente manera, $\sigma = \sqrt{1 - \langle I \rangle^2}$ siendo I el valor en la escala de grises (entre 0 y 1) de un píxel y $\langle \rangle$ la media de todos los píxeles de la imagen. Se observa un buen mezclado para un numero de Reynolds dentro del rango ($0 < Re < 100$).

Finalmente en el artículo se analiza un caso concreto de aplicación en un reactor de proteínas en solución acuosa, y se menciona la posible utilización del mismo patrón de ranuras (Staggered Herringbone) en otras geometrías como capilares y conductos cilíndricos.

Un año después aparece la publicación "Flow over a Surface with parallel grooves" de C.Y.Wang, otra de las referencias básicas de este proyecto. Generalmente la condición de contorno para un fluido en una superficie usual es la de no deslizamiento, pero si en dicha superficie existen rugosidades con una longitud característica pequeña, la condición de contorno de no deslizamiento puede ser sustituida por una de deslizamiento parcial. El propósito del artículo de Wang es calcular los coeficientes de deslizamiento para una superficie con ranuras rectangulares equiespaciadas y de profundidad finita. Para ello se distinguen los siguientes casos:

Flujo de cortadura a lo largo de las ranuras.

La ecuación que gobierna el flujo es la ecuación de Laplace que normalizando la velocidad por $w = \frac{u}{L\tau/\mu}$ donde L es la longitud de un semiciclo de ranuras, τ el esfuerzo de cortadura y μ la viscosidad dinámica queda de la siguiente forma

$$w_{xx} + w_{yy} = 0 \quad \text{y} \quad w = 0$$

para todas las superficies sólidas y $w_y(x, \infty) = 1$ como condiciones de contorno.

Flujo de cortadura transversal las ranuras.

En esta ocasión se normaliza la función de corriente con el termino $L^2\tau/\mu$, siendo la ecuación que gobierna la ecuación biarmonica de Stokes

$\Delta\psi^4 = 0$ y $\psi_{yy} = 1$, $\psi_{yyy} = 0$ en el infinito además de velocidad cero en todas las superficies sólidas.

Esquinas, puntos singulares.

Las esquinas interiores son puntos singulares donde velocidad y cortante son cero, con un comportamiento local distinto, se recalcula para esta zona los flujos a través y a lo largo de las ranuras.

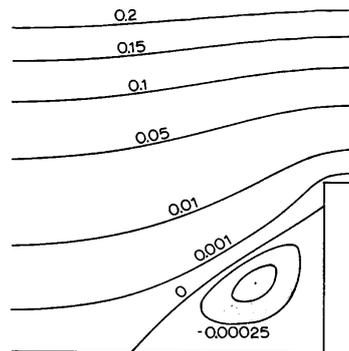


Figura 2.3 Líneas de corriente del flujo de cortadura transversal a las ranuras.

En este estadio se define un coeficiente normalizado de deslizamiento como:

$$\eta = \frac{S\mu}{L}$$

A partir de S , el coeficiente de deslizamiento sin normalizar, la viscosidad dinámica y la longitud de un semiciclo de ranuras. De manera numérica se obtienen las curvas con la evolución de η para flujo a lo largo de las ranuras, variando la profundidad del canal y a través de las ranuras, variando el ancho de la ranura.

Finalmente se aplican estos conceptos a un canal con ranuras que forman un ángulo θ con el eje longitudinal del mismo. Una de las conclusiones interesantes que se muestran es el efecto de la profundidad de las ranuras, según aumentamos ésta, los coeficientes de deslizamiento aumentan, pero como a partir de cierta profundidad (igual a la distancia periódica completa de una ranura) el comportamiento de los coeficiente es asintótico tomando valores constantes.

También del año 2003 " *Experimental test of scaling of mixing by chaotic advection in droplets moving through microfluidic channels*" de Helen Song, et al. cuyo propósito es observar el grado de mezclado que reproduce en un microcanal, en el que el fluido circula de manera no continua en forma de

gotas, y cuyo mecanismo de mezclado son constantes cambios de dirección que se producen de manera periódica, lo que ocasiona que el fluido, se reorienta y se “pliegue” sobre si mismo, de manera similar a como ocurriría en una transformación de baker.

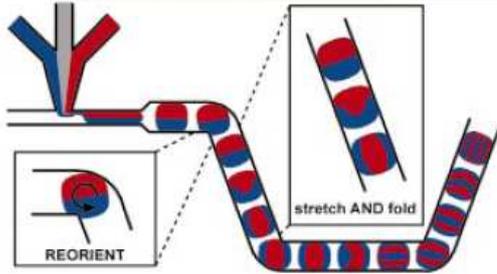


Figura 2.4 Esquema del mezclado mediante la transformación de baker.

Stroock vuelve a publicar en 2004 otro artículo sobre micromezcladores tipo SHM, “Investigation of the staggered herringbone mixer with a simple analytical model” En este artículo se presenta un modelo analítico para el flujo en los micromezcladores tipo SHM y se sugiere que se podría utilizar dicho modelo para dar las claves de un correcto diseño de estos micromezcladores. Con este fin se aproxima el micromezclador a un modelo “Lid –driven cavity model” en la que se aproxima el flujo neto transversal generado por las ranuras por una condición de contorno consistente en una velocidad de deslizamiento plana, aplicada en la superficie ranurada, y que es constante en la dirección transversal x hasta que las ranuras cambian de sentido con lo que la velocidad de deslizamiento también lo hace.

$$u_{floor}(x) = u_x(x, y = -1) = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)_{y=-1} = \begin{cases} -u_{slip}, & -\omega < x < -\omega + 2\omega r \\ -u_{slip}, & -\omega + 2\omega r < x < \omega \end{cases}$$

$$u_{floor}(x) = u_x(x, y = -1) = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)_{y=-1} = \begin{cases} -u_{slip}, & -\omega < x < \omega - 2\omega r \\ u_{slip}, & \omega - 2\omega r < x < \omega \end{cases}$$

Donde ψ es la función de corriente para el flujo transversal.

Con el fin de comparar los resultados se realiza una integración numérica con partículas trazadoras para este modelo y se comparan los resultados con los experimentales obtenidos en el artículo “Chaotic Mixer for Microchannels” (Stroock, 2002). En este trabajo no se tiene en cuenta la difusión molecular de las partículas trazadoras.

Del mismo año y de corte teórico, Wiggins & Ottino publican “Foundations of Chaotic Mixing” donde se estudian las bases del mezclado caótico sin tener en cuenta los mecanismos por los que este se lleva a cabo (ranuras,

electromagnético...). Hace uso de de los LTM's (Linked Twist Map) utilizado en la teoría de sistemas dinámicos para este análisis. En el artículo se establece una jerarquía de mezclados y se realizan numerosas definiciones para caracterizar el mezclado caótico.

Otro estudio ("Two fluid mixing in a microchannel" Zheng Liu et al.) en el cual se realiza una comparación entre tres tipos de micromezcladores con un mismo diámetro hidráulico y en los que el fluido recorre la misma longitud (no coincide con la longitud geométrica). Tres micromezcladores en los que se utiliza la advección caótica como mecanismo de mezclado.

Squarewave: microcanal en él que el fluido cambia de dirección en 90° periódicamente, siempre dentro del mismo plano.

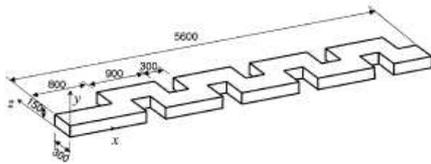


Figura 2.5 Microcanal tipo Squarewave.

3d -Serpentine: como el anterior con la diferencia de que en esta ocasión los cambios de sentido se producen en 3 direcciones espaciales.

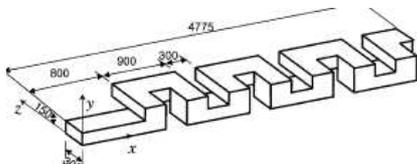


Figura 2.6 Microcanal tipo 3d-Serpentine.

Herringbone: en este caso el movimiento que contribuye al mezclado del fluido se produce a través de corrientes inducida por ranuras periódicas situadas en unos de las caras del canal.

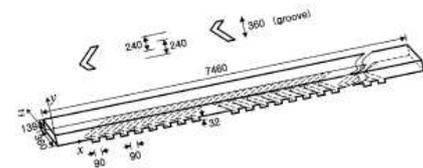


Figura 2.7 Microcanal tipo SHM.

De la comparación de los tres mezcladores se obtienen los peores resultados para el mezclador tipo squarewave, lo que lleva a hacer un estudio mas detallado de los tipos serpentine y herringbone a distintos números de Reynolds. Al pasar de $Re = 1$ a 10 no solo no se obtienen índices de advección caótica más altos, si no que se produce un peor mezclado al reducir el tiempo de residencia.

Ottino & Wiggins, vuelven a publicar un artículo "Introduction: mixing in microfluidics" de corte teórico en el que se introduce al mundo de los fluidos a pequeñas escalas (microfluidic), para luego centrarse en el mezclado en este ámbito, el problema de la difusividad frente a los términos convectivos. Se abordan las técnicas por las que puede ser llevado a cabo el mezclado. Por último se realiza una revisión sobre las publicaciones que hasta ese momento había acerca de este tema.

"A Barrier Embedded Chaotic Micromixer" de Sung Kim et al. y publicado en 2004. Artículo en el que se estudia un micromezclador tipo BEM (Barrier embedded Micromixer). Se trata de un microcanal con ranuras oblicuas situadas de manera periódica a largo de todo el fondo del canal, y con el fin de obtener un flujo helicoidal se introducen obstáculos en el techo del canal. Se compara el grado de mezclado que se obtiene en un micromezclador tipo BEM, con otros dos, uno ranuras oblicuas y sin los obstáculos en el techo (SGM, Slanted Grooved Micromixer) y otro simple de paredes lisas. Obteniéndose los mejores resultados en el tipo BEM.

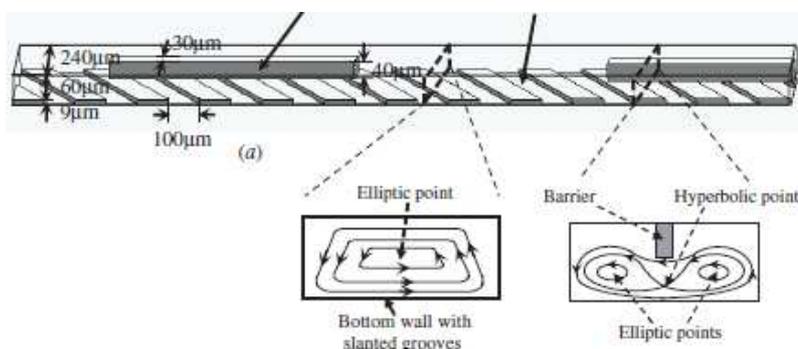


Figura 2.8 Microcanal tipo BEM.

Otro review publicado en 2004 ("Micromixers-a review", Nguyen & Wu) en el que se acomete un análisis del nivel de desarrollo actual de los micromezcladores, realizando una clasificación de tipos de estos. También se analizan las condiciones de operación en función de los números adimensionales (Reynolds, Peclet, Strouhal) y una breve exposición sobre algunos métodos de fabricación.

Ya en 2005 Junhui Lui et al. publican "Application of FCT to incompressible Flow" report del NRL (Naval Research Laboratory) que trata sobre la aplicación de los algoritmos FTC (Flux corrected Transport) en la resolución de las ecuaciones Navier Stokes en los siguientes cuatros casos:

- Microcanal bidimensional.
- Capa limite bidimensional.
- Cavity "flujo conducido" (lid driven cavity flow).
- 3D mezclador SHM.

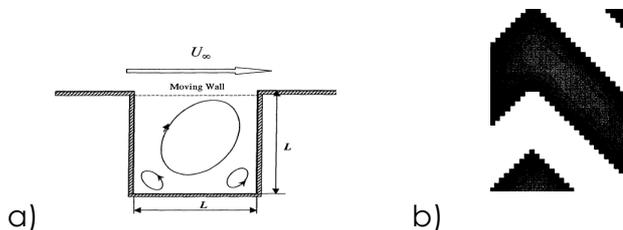


Figura 2.9 a) Lid driven cavity flow, b) Detalle de la malla escalonada empleada en la simulación de los mezcladores SHM.

Para este último caso se utiliza una malla de 576000 puntos en la que las ranuras están simulados usando una malla en escalera. Entre alguna de las conclusiones notar que se produce una repetición periódica en el patrón de velocidades transversales para dos puntos idénticos de distintos ciclos, tendencia que se mantiene hasta velocidades medias en la dirección axial del canal de 100 cm/s.

"Investigation of the convective motion through a staggered herringbone at low Reynolds number flow" (2005) de Hassel & Zimmermann, artículo en el que se comparan los resultados obtenidos para distintas geometrías para una única ranura/resalto. Para ello se realiza simulación numérica de estas ranuras, y posteriormente se analizan los resultados de las distintas disposiciones de estas. Todo ello se estudia a distintos números de Re. Se dan también un par de definiciones con el fin de caracterizar el mezclado:

Se define helicidad como

$$\theta \rightarrow \cos(\theta) = \frac{u \cdot \omega}{|u| |\omega|}$$



y la densidad helicoidal

$$H = u \cdot \omega$$

Siendo el primero un buen indicador de la magnitud y sentido de la rotación del sistema.

Alguna de las conclusiones obtenidas son que se observa un incremento del flujo transversal al aumentar la profundidad de la ranura, alcanzando un máximo a partir del cual el incremento de las velocidades transversales es muy ligero a pesar de seguir aumentando la profundidad de la ranura (tal y como ya veíamos en el artículo de Wang), y que al incrementar el número de Reynolds en los casos de baja helicidad se observa un ligero aumento de esta sin una relación obvia entre la velocidad axial y la propia helicidad.

También de 2006 es "Computations of Chaotic Flows in micromixers " Report de C.R. Kaplan et al. Otro de los estudios básicos para este proyecto cuyo propósito es resolver el flujo advectivo que se generan en un micromezclador tipo SHM.

En primer lugar se simula un microcanal de paredes lisas en el que se añade un obstáculo triangular para estudiar el efecto del escalonado de la malla empleada (estudio de la resolución). Se compara el perfil desarrollado de velocidades axiales a lo largo de los ejes transversales y, z obtenido en la simulación numérica con el que se obtiene a partir de la solución analítica para el flujo desarrollado en un canal rectangular.

En segundo lugar se simula ya un micromezclador tipo SHM. En este estudio esta compuesto por dos ciclos de 12 ranuras cada uno, a su vez cada ciclo se divide en 2 semiciclos en los que el lado corto de las ranuras se sitúa alternativamente a derecha o izquierda.

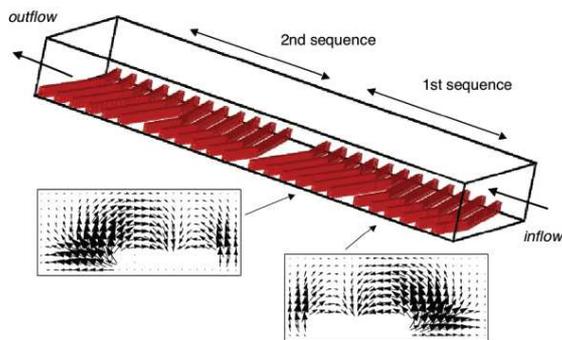


Figura 2.10 Esquema del microcanal SHM simulado por Kaplan et al.

Se procede resolviendo en un inicio el campo de velocidades. A continuación y con el fin de observar el fenómeno de advección se considera un conjunto de partículas trazadoras Lagrangianas liberadas en el fluido para en un siguiente paso utilizar un escalar pasivo como marcador. Salvo cerca de las paredes no hay mucha diferencia entre los resultados obtenidos con los escalares pasivos y las partículas trazadoras, mientras que con estas últimas los esfuerzos computacionales son mucho menores.

Se estudia la convergencia del escalar pasivo para los tamaños de celda de 5 μm , 2,5 μm , 1,25 μm . Analizando el compromiso entre elevar la resolución para ver las estrías en las islas de fluido que se producen en el micromezclador y el esfuerzo computacional que ello supone.

Del mismo año es "A microfluidic nanoliter mixer with optimized grooved structures driven by capillary pumping" (C. F. Chen et al.). Estudio sobre un microcanal en el que la fuerza impulsora del fluido es la tensión superficial – capilaridad. Para conseguir un mecanismo de mezclado se dota al canal de una serie de ranuras en la base del canal. La disposición de estas ranuras es asimétrica con respecto al eje de simetría axial del microcanal. Para poder reducir fuerzas rozamiento el fluido está confinado por superficies hidrofóbicas. Se concluye que para obtener un mezclado óptimo la profundidad de las ranuras con respecto al alto del canal debe ser de 2:1 y el ángulo de estas ranuras con respecto a la dirección axial del canal de 45°.

En 2006 Stroock junto con Kirtland y Mc Graw vuelve a publicar otro artículo relacionado con los micromezcladores SHM "Mass transfer to reactive boundaries from steady three-dimensional flows in microchannels". Paper en el que se estudia el efecto de las corrientes secundarias transversales sobre microcanales con paredes reactivas. Para ello se simula un micromezclador en el que se sustituye el fondo ranurado por una condición de contorno de

deslizamiento simple, y en el que la parte superior del canal es una pared reactiva.

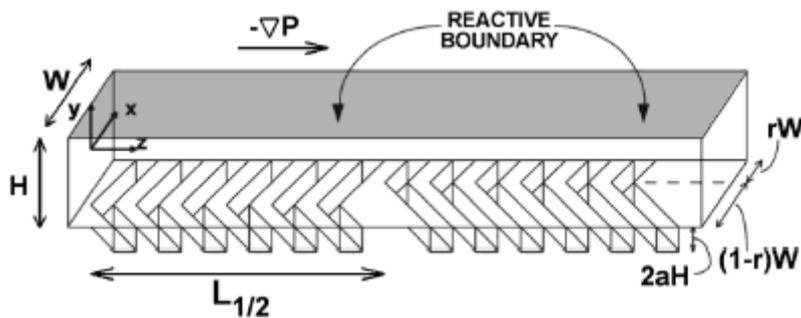


Figura 2.12 Microcanal tipo SHM con la pared superior reactiva.

Como indicador de la eficiencia en la transferencia de masa hacia la pared reactiva se utiliza el número de Sherwood Sh , que se define como:

$$Sh(z) = \frac{k(z)H}{D}$$

Donde, z es la dirección axial del canal D es la difusividad de las especies reactivas, H es la altura del canal y $k(z)$ es el coeficiente (promediado a lo ancho del canal) de transferencia de masa en la pared reactiva. Se concluye el trabajo dando como claves para un mayor eficiencia en el consumo de especies reactivas, un alto ratio del cortante transversal en la pared reactiva con su efecto sobre la capa límite y la eficacia en la homogenización de las especies reactivas en el resto del flujo.

Basándose en el artículo de Stroock, "Staggered Herringbone Mixer (SHM)" (2002 Science 295, 647), en "Staggered passive micromixers with fractal surface patterning" (Camesasca et al. 2006) se compara el efecto que produce un cambio en la distribución de las ranuras en el fondo del microcanal con respecto a la disposición usada por Stroock. Se sugiere un nuevo patrón para la distribución puntas de las ranuras basándose en la función de Weierstrass. Se concluye el artículo notando una mejora en el mezclado usando este tipo de geometrías con respecto a las geometrías periódicas habituales de los microcanales SHM.

Aún en 2006 se publica "Passive magnetic separator integrated with microfluidic mixer: demonstration of enhanced capture efficiency" de Lund-Olesen. Paper en el que se estudia como se puede mejorar la eficiencia de un separador magnético de partículas gracias a la integración en éste de un micromezclador tipo SHM. Se indica que esta mejora en la eficiencia se debe



a que se fuerza a las partículas magnéticas a situarse en las proximidades de las paredes del canal donde la velocidad es mas lenta que en la parte central del mismo.

Por ultimo hablaremos de "*Chaotic Advection in a Mixer with changing Geometry*". Artículo de Cox & Finn, del cual no tenemos fecha de publicación, y en el que se estudia la advección caótica que se produce en un recipiente circular en el que un numero arbitrario N de cilindros remueve un fluido considerado como altamente viscoso, y en un flujo bidimensional. Una solución en series del campo de velocidades, permite describir las trayectorias de las partículas del fluido bajo el movimiento de los cilindros. Se estudia la generación de "Caos topológico" aplicando un numero de más de dos cilindros y una topología adecuada.



Artículo	Autor	Año	Revista	Tema	Tipo de Análisis
Mixing, Chaotic Advection and Turbulence	Julio M. Ottino	1990	Annual Reviews. Fluid Mech	Advección Caótica	Teórico
An Introduction to Chaotic Advection	Cartwright et al.	1999	Mixing: Chaos and Turbulence	Advección Caótica	Teórico
Chaotic Mixer for Microchannels	Stroock et al.	2002	Science Magazine	SHM	Experimental
Flow over a Surface with parallel groves	C.Y.Wang	2003	Physics of Fluids	Grooves	Analítico / Numérico
Experimental test of scaling of mixing by chaotic advection	Song et al.	2003	Applied physics letters	Advección caótica	Experimental
Investigation of the staggered herringbone mixer with a simple analytical model	Stroock & McGraw	2004	The Royal Society	SHM	Analítico / Numérico
Foundations of Chaotic mixing	Wiggins & Ottino	2004	The Royal Society	Advección Caótica	Teórico
Two fluid mixing in a microchannel	Zheng et al.	2004	Inter. Journal of heat and fluid flow	Advección Caótica	Numérico
Introduction: mixing in microfluidics	Ottino & Wiggins	2004	The Royal Society	Advección Caótica	Review
A Barrier Embedded Chaotic Micromixer	Sung et al.	2004	Journal micromech. and microengineering	Grooves / Advección Caótica	Experimental
Micromixers-a review	Nguyen & Wu	2004	Journal micromech. and microengineering	Micromixers	Review
Investigation of the convective motion through a staggered herringbone at low Reynolds number flow	Hassel & Zimmermann	2005	Chemical Engineering Science	Grooves	Numérico
Aplication of FCT to incompressible Flow	Lui et al.	2005	NRL report	Grooves / SHM	Numérico
Computations of Chaotic Flows in micromixers	Kaplan et al.	2006	NRL report	SHM	Numérico



Artículo	Autor	Año	Revista	Tema	Tipo de Análisis
A microfluidic nanoliter mixer with optimized grooved structures driven by capillary pumping	Chen et al.	2006	Journal micromech. and microengineering	Grooves / advección Caótica	Experimental
Mass transfer to reactive boundaries from steady three-dimensional flows in microchannels	Kirtland et al.	2006	Physics of Fluids	SHM	Numérico
Staggered passive micromixers with fractal surface patterning	Camesasca et al.	2006	Journal micromech. and microengineering	Grooves / advección Caótica	Numérico
Passive magnetic separator integrated with microfluidic mixer: demonstration of enhanced capture efficiency	Lund-Olesen et al.	2006		SHM	Experimental
Chaotic Advection in a Mixer with changing Geometry	Cox & Finn			advección Caótica	Numérico

3. Implementación numérica.

Una vez se han introducido los micromezcladores SHM, y se han revisado los antecedentes se pasa a definir el problema concreto que aborda este trabajo. Se estudiarán dos configuraciones distintas para la superficie ranurada:

- El ancho de la parte ranurada es igual al ancho de la parte sin ranura. Esta es la configuración usada por Strook en su estudio, por lo que en lo sucesivo nos referiremos a ella como configuración tipo **Strook**.
- La proporción entre el ancho ranurado y sin ranurar es del 86% a favor del primero, configuración usada por Kaplan y su equipo, por lo que también la denominaremos tipo **Kaplan**.

3.1 Dimensiones y condiciones de operación.

En primer lugar vamos a definir las dimensiones, las condiciones de operación y los parámetros adimensionales del micromezclador que vamos a estudiar:

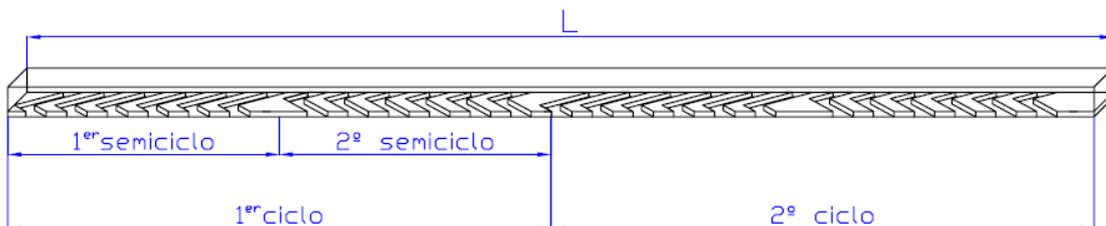


Figura 3.1 Esquema del canal completo y las correspondientes secuencias de ranuras

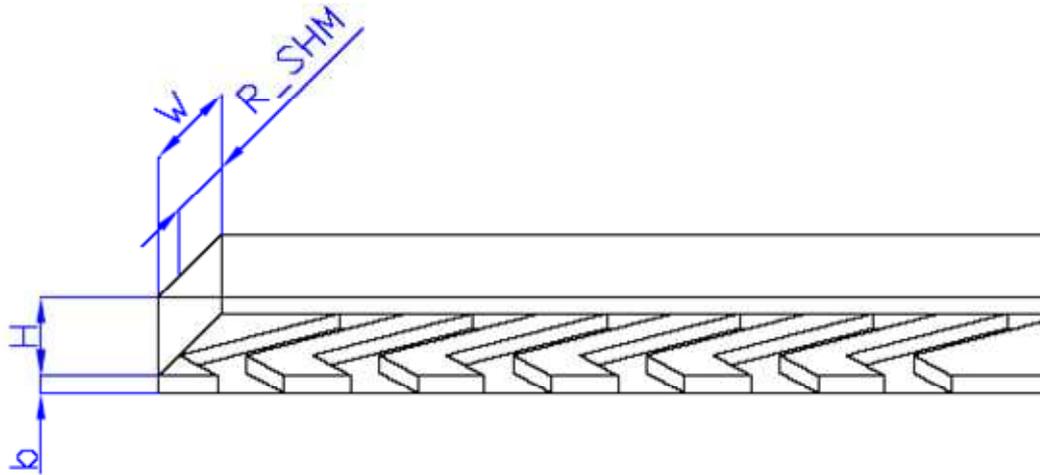


Figura 3.2 Primer semiciclo de ranuras.

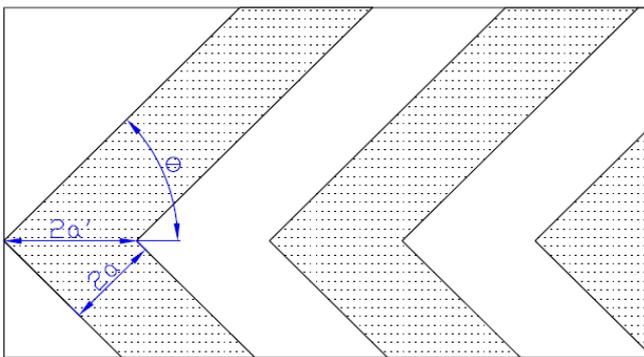


Figura 3.3 Ángulo de las ranuras con respecto a la dirección axial del canal.

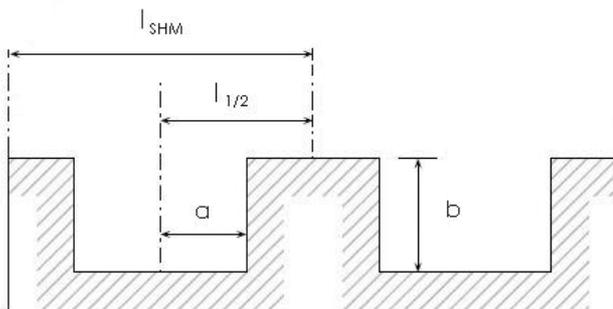


Figura 3.4 Principales parámetros geométricos de las ranuras practicadas en el fondo del canal.

Dimensiones:

Longitud canal	$L = 4000 \mu\text{m}.$
Anchura canal	$W = 200 \mu\text{m}.$
Altura canal	$H = 90 \mu\text{m}.$



Longitud de un semiciclo de ranuras $L_{SHM} = 1000 \mu\text{m}$.

Sección del ancho del canal con una misma orientación de las ranuras $R_{SHM} = 133,33 \mu\text{m}$.

Longitud de onda de las ranuras $l_{SHM} = 106,5 \mu\text{m}$.
 $l_{1/2} = 53,25 \mu\text{m}$.

Angulo de las ranuras con respecto al eje longitudinal $\theta = 45^\circ$.

Semiancho ranuras

- Strook $a = 26,51 \mu\text{m}$.
- Kaplan $a = 43,03 \mu\text{m}$.

Profundidad ranuras

- Strook $b = 22,96 \mu\text{m}$.
- Kaplan $b = 20,00 \mu\text{m}$.

Características fluido:

Densidad $\rho = 1000 \text{ Kg/m}^3$.

Viscosidad dinámica $\mu = \cdot 10^{-3} \text{ Kg/(m}\cdot\text{s)}$.

Condiciones de operación:

A partir de los números de Reynolds y Péclet empelados por Kaplan y Strook y las dimensiones del canal se calculan los siguientes parámetros para operar en las mismas condiciones que en los artículos de referencia.

Velocidad media axial $U = 0,01 \text{ m/s}$.

Difusividad del escalar $D = 1 \cdot 10^{-12} \text{ Kg/(m}\cdot\text{s)}$.

Definidas ya las condiciones de nuestro problema se puede ahora calcular los principales parámetros adimensionales



Relación de esbeltez $\varepsilon = \frac{W}{H} = 2,22$

Relación profundidad de las ranuras con altura canal $\alpha = \frac{b}{H} = 0,185$

Proporción del ancho total con una misma orientación de las ranuras $r_{SHM} = \frac{R_{SHM}}{W} = \frac{2}{3}$

Numero de Reynolds $Re = \frac{\rho UH}{\mu} = 0,9 \rightarrow$ Flujo laminar.

Numero de Péclét $Pe \approx Re Sc = \frac{UH}{\nu} \frac{\nu}{D} = 9 \cdot 10^5$

Relaciones geométricas de las ranuras

Strook

$$\tilde{a} = \frac{a}{l_{1/2}} = 0,5 \quad \tilde{b} = \frac{b}{l_{1/2}} = 0,433$$

Kaplan

$$\tilde{a} = \frac{a}{l_{1/2}} = 0,810 \quad \tilde{b} = \frac{b}{l_{1/2}} = 0,377$$

Existen en este trabajo otros parámetros adimensionales de especial relevancia como los coeficientes de deslizamiento de la pared ranurada pero que al ser más específicos e ir acompañados de una explicación serán expuestos en el apartado 3.2 de este proyecto.

3.2 Condición de contorno en la entrada.

Llegado este punto se plantean dos posibilidades para establecer la condición de contorno en la entrada del canal.

Por un lado se podría optar por utilizar un perfil uniforme de velocidades a la entrada y aguardar un margen razonable aguas abajo (de 2 a 3 H) a que el

perfil de velocidades este completamente desarrollado para implantar la condición de contorno con las ranuras.

En lugar de esto, con el fin de obtener mejores resultados y optimizar el esfuerzo computacional, se ha elegido la opción de implementar un perfil completamente desarrollado a la entrada del canal.

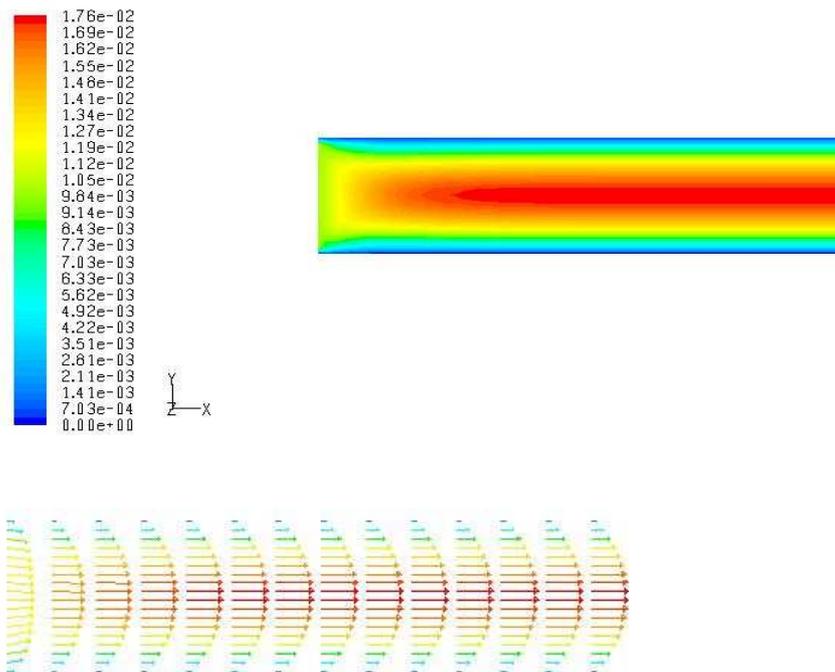


Figura 3.5 Vista de la sección de simetría axial de un canal rectangular en la que se aprecia la evolución del perfil de velocidades a partir de un perfil plano en la entrada. Velocidades expresadas en m/s.

Dadas las características del problema anteriormente expuestas podríamos considerar que nos encontramos en el caso de flujo unidireccional para un fluido incompresible bajo la acción de un gradiente de presión estacionario, conocido como corriente de Poiseuille, en un tubo de sección rectangular caso del que se dispone de solución analítica (Liñan 1967) que se expone a continuación.

Para obtener esta solución se parte de la ecuación que determina el movimiento estacionario en un conducto recto:

$$0 \approx p_l + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (1)$$

Donde p_l es el gradiente de presión motriz. La condición de contorno es que la velocidad es nula en todo el perímetro del canal:

$$u(y, z) = 0 \text{ para } \left\{ \begin{array}{l} y = 0; y = H \\ z = \frac{W}{2}; z = -\frac{W}{2} \end{array} \right\}$$

Utilizando en (1) las siguientes variables adimensionales

$$\xi = \frac{y}{H} - \frac{1}{2}; \quad \eta = \frac{z}{H}; \quad v = \frac{u}{u_c}; \quad \varepsilon = \frac{W}{H}.$$

donde $u_c = \frac{H^2 p_l}{\mu}$ es la velocidad característica del problema.

Observar que en el cambio de variable $y \rightarrow \xi$ además de dividir entre la longitud característica, se sustrae un medio de la misma con el fin de ajustar la ubicación del origen de coordenadas de este trabajo y el origen que toma el autor de la solución analítica empleada, como se indica en la figura 3.6.

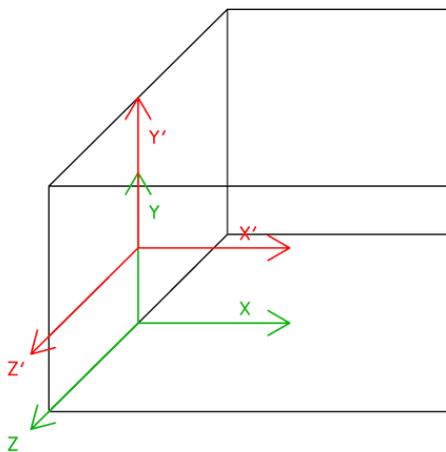


Figura 3.6 Posiciones de los distintos orígenes de coordenadas, en verde el empleado en este trabajo, en rojo el que se usa en la solución analítica de referencia.

Finalmente la ecuación (1) queda de la siguiente manera:

$$\left(\frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} \right) = -1 \quad (2)$$

Por otro lado el caudal que circula por el canal es:

$$Q = \int u dy dz = \frac{H^4 p_l}{\mu} \int v d\xi d\eta \quad (3)$$

Siendo la solución analítica

$$v = \frac{16}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (-1)^n \left[1 - \frac{\cosh\left[\frac{1}{2}(2n+1)\pi\eta\right]}{\cosh\left[\frac{1}{2}(2n+1)\pi\varepsilon\right]} \right] \left[\frac{\cos\left[\frac{1}{2}(2n+1)\pi\xi\right]}{(2n+1)^3} \right] \right\} \quad (4)$$

$$Q = \frac{H^4 p_l}{\mu} \frac{4\varepsilon}{3} \left\{ 1 - \frac{192}{\varepsilon\pi^5} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tanh\left[\frac{1}{2}(2n+1)\pi\varepsilon\right]}{(2n+1)^5} \right\} \quad (5)$$

3.3 Condición de contorno en la pared con ranuras.

La condición de contorno en la pared ranurada es el punto crítico de este trabajo. La sustitución de las ranuras por una condición de contorno efectiva supone una novedad frente otros estudios antecedentes a este proyecto.

El esfuerzo computacional que se realiza en simulaciones numéricas aumenta considerablemente al aumentar el número de celdas que contiene la malla del problema a resolver, y es precisamente aquí donde reside la principal ventaja de la condición de contorno particular de este trabajo porque gracias a ella se evita realizar un costo maldado de las ranuras.

El ahorro en celdas es muy importante. Dos factores que se dan en este tipo de micromezcladores por los que el mallado de las ranuras requiere un gran número de celdas son los siguientes:

- La longitud característica de las ranuras es mucho menor que la longitud del canal $\frac{a}{L} \ll 1$.

- Es precisamente en las ranuras donde tienen lugar fenómenos complejos como vórtices para los que es necesaria una alta densidad de celdas con el fin de obtener un buen resultado.

Como se puede ver en el artículo de C.Y.Wang (2003) es posible sustituir el efecto que produce una pared ranurada por velocidades efectivas de deslizamiento impuestas como condición de contorno en dicha pared. Estas velocidades efectivas se pueden expresar en forma de coeficientes adimensionales de deslizamiento que Wang calcula resolviendo el flujo cortante a lo largo y a través de las ranuras.

Los valores que alcanzan estos coeficientes son función de los parámetros \tilde{a} y \tilde{b} como se puede ver en la figuras 3.7, 3.8 y se han obtenido gracias a la resolución de las ecuaciones planteadas por Wang en cada uno de los casos a través de una rutina en Matlab implementada por el tutor de este proyecto Profesor Dr. Marcos Vera Coello.

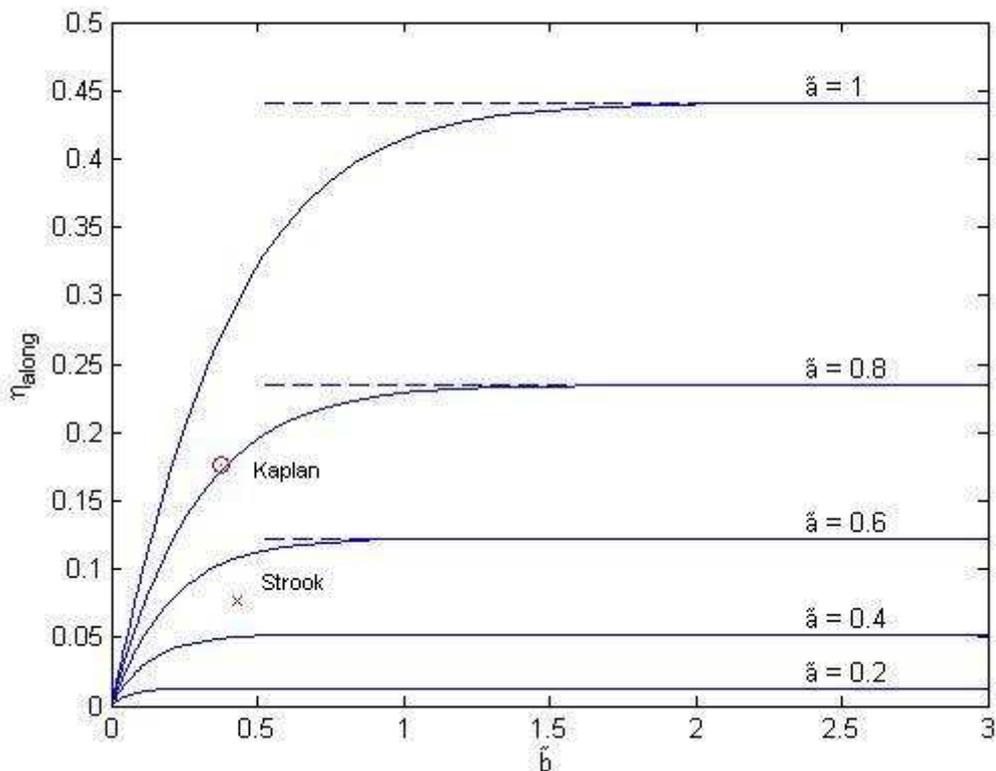


Figura 3.7 Coeficientes de deslizamiento a lo largo de las ranuras para distintos valores de \tilde{a} y \tilde{b} . Se marcan los valores concretos que se utilizan en este estudio.

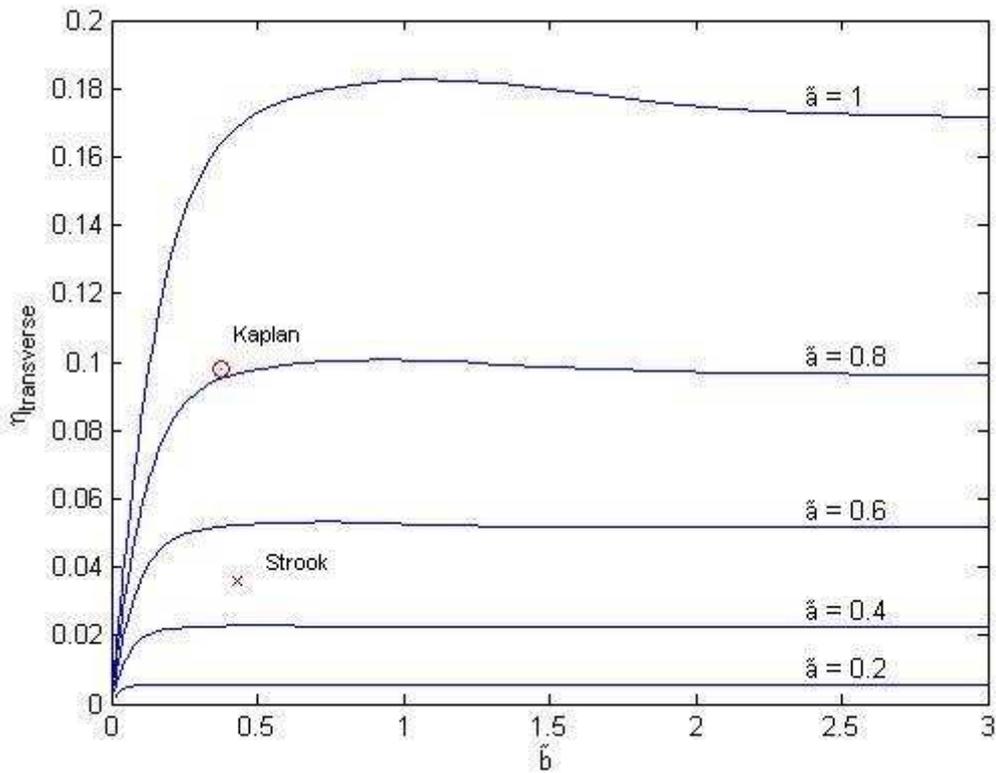


Figura 3.8 Coeficientes de deslizamiento transversales a las ranuras para distintos valores de \tilde{a} y \tilde{b} . Se marcan los valores concretos analizados.

Para las configuraciones de Strook y Kaplan y sus correspondientes parámetros \tilde{a} y \tilde{b} se obtienen los siguientes valores para los coeficientes de deslizamiento:

Strook

- Coeficiente de deslizamiento a lo largo de las ranuras

$$\eta_a(\tilde{a}, \tilde{b}) = 0,0771$$

- Coeficiente de deslizamiento transversal a las ranuras

$$\eta_t(\tilde{a}, \tilde{b}) = 0,0359$$



Kaplan

- Coeficiente de deslizamiento a lo largo de las ranuras

$$\eta_a(\tilde{a}, \tilde{b}) = 0,1761$$

- Coeficiente de deslizamiento transversal a las ranuras

$$\eta_t(\tilde{a}, \tilde{b}) = 0,0978$$

A partir de los cuales se pueden obtener las velocidades efectivas de deslizamiento

$$u_a^0 = \frac{\eta_a}{\mu} l_{1/2} \tau_a \quad u_t^0 = \frac{\eta_t}{\mu} l_{1/2} \tau_t \quad (6)$$

donde τ_a y τ_t se calculan a partir del tensor de esfuerzos viscosos en el fondo del canal y teniendo en cuenta el ángulo que forman las ranuras con la dirección axial del canal

$$\vec{\tau} = \vec{\tau}' \cdot \vec{n} = \vec{\tau}' \cdot \vec{e}_y = \mu \frac{\partial u_x}{\partial y} \vec{e}_x + \mu \frac{\partial u_z}{\partial y} \vec{e}_z = \tau_x \vec{e}_x + \tau_z \vec{e}_z \quad (7)$$

que descomponiendo en las direcciones paralela y transversal a las ranuras

$$\tau_a = \tau_x \cos \theta + \tau_z \operatorname{sen} \theta \quad (8)$$

$$\tau_t = \tau_x \operatorname{sen} \theta - \tau_z \cos \theta$$

Finalmente la velocidad efectiva de deslizamiento resulta

$$\begin{aligned}
 \bar{u}^0 &= u_a^0 (\cos \theta \bar{e}_x + \sin \theta \bar{e}_z) + u_t^0 (\sin \theta \bar{e}_x - \cos \theta \bar{e}_z) \\
 &= \frac{\eta_a l_{1/2}}{\mu} (\tau_x \cos \theta + \tau_z \sin \theta) (\cos \theta \bar{e}_x + \sin \theta \bar{e}_z) + \frac{\eta_t l_{1/2}}{\mu} (\tau_x \sin \theta - \tau_z \cos \theta) (\sin \theta \bar{e}_x - \cos \theta \bar{e}_z) \\
 &= l_{1/2} \left[\frac{\partial u_x}{\partial y} (\eta_a \cos^2 \theta + \eta_t \sin^2 \theta) + \frac{\partial u_z}{\partial y} (\eta_a - \eta_t) \sin \theta \cos \theta \right] \bar{e}_x \\
 & l_{1/2} \left[\frac{\partial u_x}{\partial y} (\eta_a - \eta_t) \sin \theta \cos \theta + \frac{\partial u_z}{\partial y} (\eta_a \cos^2 \theta + \eta_t \sin^2 \theta) \right] \bar{e}_z \tag{9}
 \end{aligned}$$

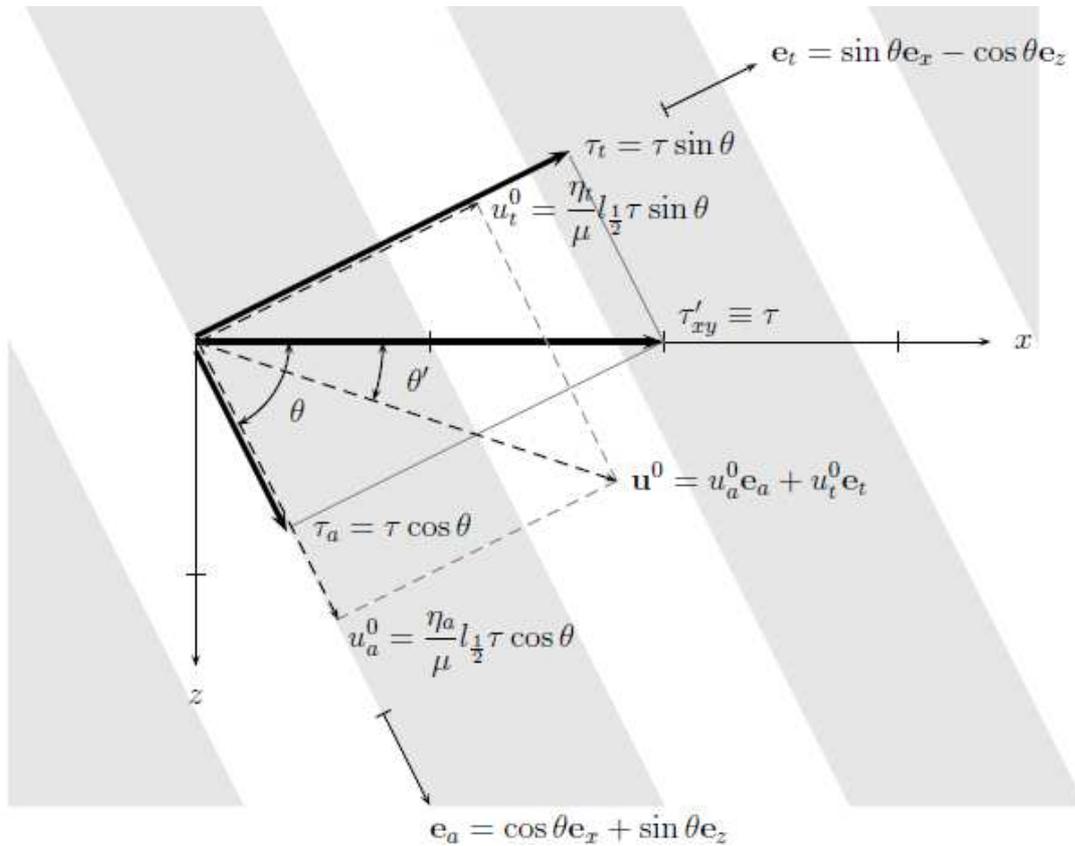


Figura 3.9 Velocidades efectivas de deslizamiento en relación con la orientación θ de las ranuras.

3.4 Implementación en Fluent.

Definido el problema y expuestas de manera analítica las condiciones de contorno particulares, el siguiente paso es implementar numéricamente el problema para su resolución. Para ello se recurre al software especializado para CFD (Computational Fluid Dynamics) **Fluent** versión 6.3.26.



3.4.1 Implementación en Fluent: Mallado.

Como paso previo a empezar a trabajar con Fluent es necesario realizar un mallado del microcanal a estudiar, para lo que se emplea el programa informático **Gambit** versión 2.2.30.

La característica principal de la malla es el número de celdas del que esta compuesta. Como ya veíamos antes este es un valor crítico, un mayor número de celdas supone una mayor resolución numérica, y una solución más exacta. El inconveniente es que la capacidad de cálculo es limitada y el esfuerzo computacional aumenta con el número de celdas de la malla. Existe por lo tanto un compromiso entre una resolución numérica aceptable y esfuerzo computacional necesario para llegar a ella, lo que significa a efectos prácticos que disponemos de un número limitado de celdas.

Con el fin de obtener los mejores resultados posibles se seguirá la siguiente estrategia:

- Se utilizará una malla inicial con la correspondiente distorsión para resolver el campo fluido en canal. Una vez resuelto y sobre esta misma malla se resolverá la evolución del escalar aplicado en la entrada a lo largo del canal.
- Partiendo de la solución de la solución del campo fluido anterior se refinara toda la malla en Fluent y se resolverá únicamente la evolución del escalar.

La malla inicial empleada consta de un total de 121600 celdas/ 132020 nodos

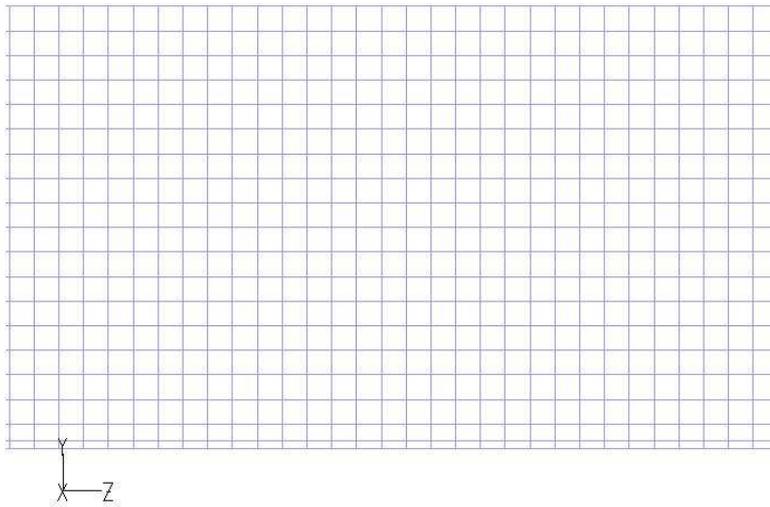


Figura 3.10 Esquema de la malla empleada en cualquier sección transversal de canal.

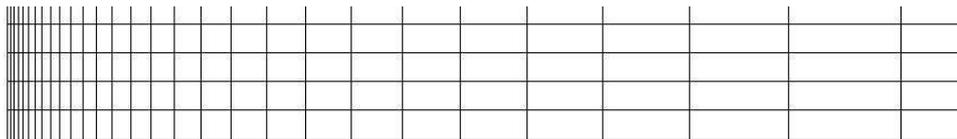


Figura 3.11 Mallado longitudinal en la zona inicial del canal, en la figura inferior se muestra en detalle la distorsión en las primeras celdas de la malla.

Tal y como se puede ver en las figura 3.10 se ha empleado una mayor densidad de celdas en la zona inferior del canal, que es precisamente donde se sitúa la superficie que posee velocidades de deslizamiento efectivas como condición de contorno. La concertación de celdas aquí es crítica, como ya vimos anteriormente las velocidades efectivas de deslizamiento se calculan a partir los valores de los cortantes $\frac{\partial u_x}{\partial y}$, $\frac{\partial u_z}{\partial y}$ en el fondo del canal. Para

calcular estos cortantes se emplearon dos estrategias con similares resultados:

- Utilizar una aproximación con un esquema de primer orden a partir de las velocidades en el centro de la celda y en la cara adyacente al fondo de canal:

$$\frac{\partial u_x}{\partial y} = \frac{u_{cara} - u_0}{y_{cara} - y_0} \quad (10)$$

Donde u_{cara} y u_0 son las velocidades en las caras y en el centro de las celdas adyacentes al fondo respectivamente y el termino $y_{cara} - y_0$ es la distancia entre las caras y el centro de las celdas.

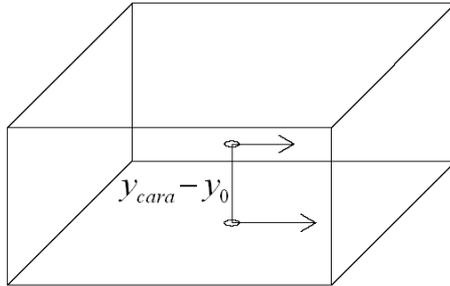


Figura 3.13 Distancia relativa entre los centros de las caras y de las celdas.

- A partir de los esfuerzos viscosos en el fondo del canal:

$$\frac{\partial u_x}{\partial y} = \frac{F_{vis}}{S_{cara} \mu} \quad (11)$$

Donde F_{vis} son las fuerzas generadas por los esfuerzos viscosos en cada cara y S_{cara} es el área de cada cara.

En cualquiera de los dos casos la altura de las celdas próximas al fondo del canal no debe ser demasiado grande con el objeto de obtener de unos resultados lo más preciso posible.

En la figura 3.11 se observa una malla con distorsión en el tramo inicial del canal, donde se reduce la longitud en dirección axial de las celdas. Se tomo la decisión de analizar este tipo de configuración porque a pesar de que se impone un perfil desarrollado de velocidades a la entrada del canal se encontraron pequeñas irregularidades en las proximidades a la propia entrada con una malla inicial que no contaba con distorsión en el tramo inicial ($x < 200 \mu\text{m}$). En la figura 3.14 se observan estas irregularidades en el tramo inicial del canal.

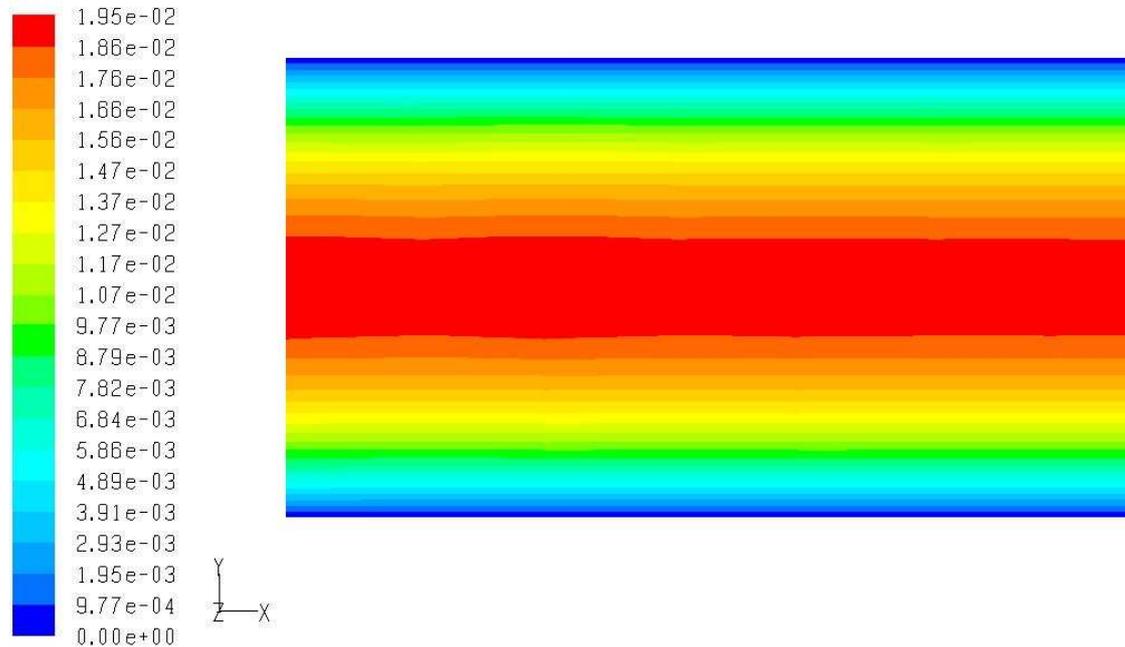


Figura 3.14 Perfil de velocidad axial en el tramo inicial del canal ($x < 200 \mu\text{m}$). Expresados en m/s.

De aquí surgió la idea de comparar el perfil de velocidades de la solución analítica con los obtenidos en Fluent utilizando la malla inicial sin distorsión y una segunda malla distorsionada en el tramo inicial. Para esta comparación, se vuelve a recurrir al programa Matlab, al cual se exportaron los datos obtenidos en Fluent y donde se implementó la solución analítica de referencia. Como la solución analítica es un perfil de velocidades adimensionales y su origen de coordenadas se establece en el centro de la sección de entrada del flujo (recordar figura 3.6), tenemos que adaptar los datos de Fluent para que sea posible dicha comparación.

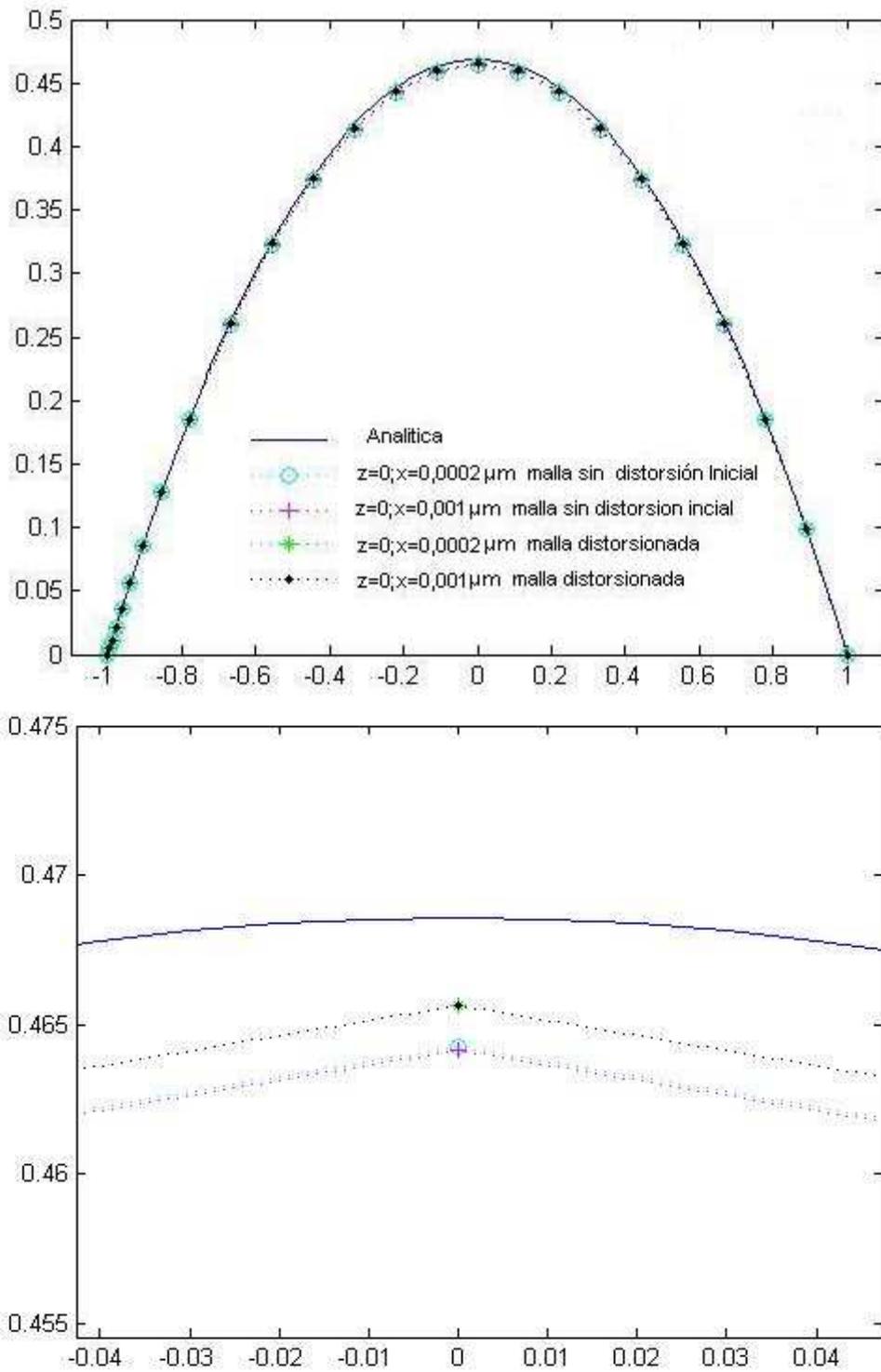


Figura 3.15 Perfiles de velocidades obtenidos en Fluent frente a la solución analítica.



En la figura 3.15 se observa la solución analítica (azul) y perfiles planos en dos secciones del canal, una situada al comienzo del canal ($x = 200 \mu\text{m}$, $0 < y < 9 \cdot 10^{-5}$, $z = 0$) y la otra al final del primer ciclo ($x = 1000 \mu\text{m}$, $0 < y < 9 \cdot 10^{-5}$, $z = 0$). Los resultados que se obtienen en las dos secciones para una misma malla son los mismos, lo que era esperado y nos indica que al menos el perfil de velocidades implementado es coherente.

La mayor diferencia entre la solución analítica y los valores de Fluent se produce en el vértice del perfil de velocidades, allí el error relativo para el caso de la malla sin distorsión es de 0,94% y 0,62% para el caso distorsionado.

Llegado a este punto surge la siguiente cuestión ¿Merece la pena realizar la distorsión inicial en la malla? En este proyecto se opta por continuar trabajando con la malla sin distorsión en el tramo inicial puesto que la distorsión supone un 13,75% más de celdas, que aunque es una cifra aún bastante razonable, la mejora con respecto a la solución analítica entre las dos mallas es muy pequeña y a la vez el error relativo cometido sigue siendo razonable en el peor de los casos. Añadir además que en el posterior refinamiento el número de celdas se multiplica por 8, por lo que un ahorro en esta malla inicial puede ser muy importante.

En una segunda fase, suponiendo el campo fluido resuelto el problema ahora es analizar el grado de advección caótica que conseguimos, para lo que se implementa un escalón pasivo a la entrada del conducto a estudiar, tal y como se explicara en el siguiente apartado 3.3.2. El escalón se distribuye formando patrones complejos, como islas de fluido, por lo que es necesario una alta resolución para poder observar estos fenómenos con cierto grado de detalle.

Consiguientemente y como ya se adelantaba, se procede a refinar y conseguir así una mayor resolución. Se recuerda que en esta segunda fase solo se va a resolver la evolución del escalón en el conducto, problema lineal, mucho más sencillo de solucionar y computacionalmente mucho más asequible, de ahí que se pueda llevar a cabo este refinamiento de la malla.

Por cada celda de la malla inicial se obtienen 8 celdas de la malla refinada. Traducido en número de las 121600 celdas iniciales se pasa a un total de 972800 celdas para la malla refinada. El tamaño de celda en la zona regular (Zona sin la distorsión cerca de la superficie que simula las ranuras) es de $12,5 \times 2,5 \times 2,5 \mu\text{m}$

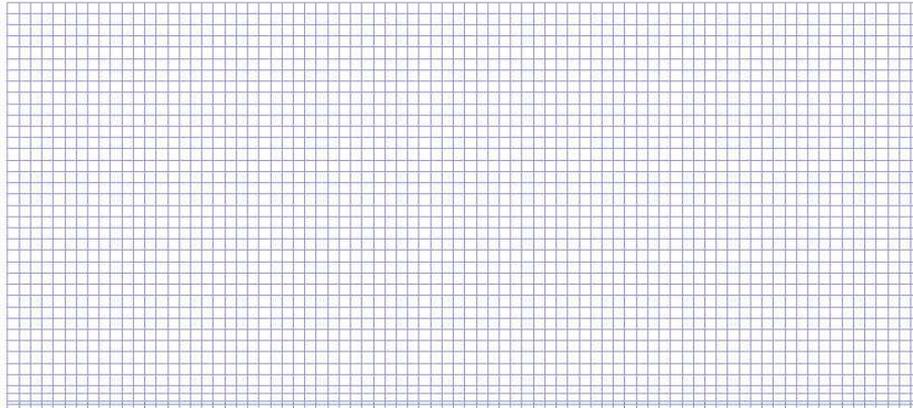


Figura 3.16 Malla en una sección transversal del canal.

3.4.2 Implementación en Fluent: condición de contorno en la entrada.

Fluent contiene una lista de condiciones de contorno estándar que se usan habitualmente en todo tipo de simulaciones. El problema es que la condición de contorno en la entrada que necesitamos en este trabajo es demasiado compleja como para que estuviese en esa lista de condiciones estándar, no queda más remedio que confeccionarla a medida gracias a una utilidad del Fluent que lo permite, las denominadas User Defined Function (UDF).

Las UDF son un conjunto de subrutinas programadas en lenguaje C que una vez compiladas o interpretadas por Fluent pueden ser llamadas en distintas partes de una simulación, como, por ejemplo, la definición de una condición de contorno.

Para este trabajo solo se utilizó una UDF que contiene todos los procedimientos extraordinarios necesarios, separados en distintos bloques. En el anexo A podemos ver el código fuente en C de esta UDF.

Dentro del bloque condición de contorno a la entrada se pueden diferenciar dos apartados, por un lado el perfil desarrollado de velocidades y por el otro la definición en la entrada del canal del escalar pasivo que se usará como marcador.

Para el perfil de velocidades desarrollado a la entrada solo hubo que trasladar a lenguaje C la solución analítica de referencia. Teniendo en cuenta que dicha solución, tal y como se puede ver en las ecuaciones (4) y (5), contiene sumatorios de infinitos términos, se optó por sumar términos hasta llegar a un nivel de tolerancia mínimo para el error relativo en el caudal (ec. (5)) previamente fijado. Con el error por debajo de ese nivel se da por válida la solución numérica. Concretamente se tomó un valor de $9 \cdot 10^{-5}$ para esta tolerancia.

En el apartado anterior se realizaron cálculos (figura 3.15) para determinar la idoneidad de la malla empleada en el tramo inicial, comparando los perfiles de velocidades de la solución analítica y los obtenidos en Fluent. Valiéndose de ese mismo análisis se puede decir que la tolerancia empleada es suficiente ya que existen otros factores que introducen un error en la solución de mayor magnitud como es la malla empleada.

La definición de los escalares a la entrada tampoco se puede hacer de manera directa en Fluent, es necesario implementarlo en la UDF. Puesto que es en la entrada del canal donde se “inyecta” este marcador correspondientemente se debe implementar este marcador dentro del procedimiento para la condición de contorno en la entrada.

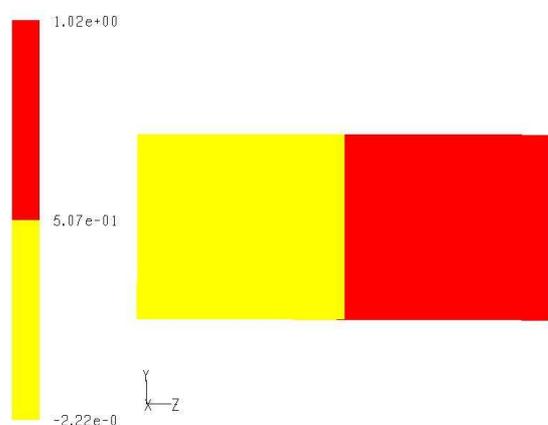


Figura 3.17 Distribución del escalar pasivo en la sección de entrada del canal.

Como se observa en la figura 3.17 el escalar toma los siguientes valores:

- 1 para $z > 0$.
- 0 para $z < 0$.

La idea es ver como evoluciona este marcador a lo largo del canal, para lo que se analizara la distribución de este en distintas secciones. Gracias al marcador se podrá evaluar de manera cualitativa la advección caótica y el grado de mezclado que se consigue.

3.4.3 Implementación en Fluent: condición de contorno en la pared ranurada.

Implementar la condición de contorno en la pared ranurada ha sido bastante más complicado. Entre otras dificultades se tuvieron que resolver problemas en la convergencia de la solución que en las versiones iniciales de esta condición de contorno se originaban y que más adelante en el apartado 3.4.4 se explicará como se superaron.

El primer paso es definir como es la distribución de las ranuras en el fondo del canal. Aunque en este trabajo se sustituyen las ranuras por velocidades de deslizamiento efectivas, igualmente hay que definir la distribución del ángulo θ en fondo del canal.

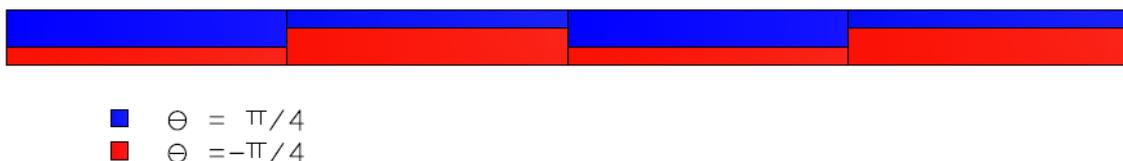


Figura 3.17 Patrón del ángulo θ en el fondo del canal.

Puesto que esta distribución del ángulo θ es fija y no depende en absoluto del resultado de las iteraciones, la definición de este patrón se realiza una sola vez antes de comenzar la resolución iterativa, almacenándose en memoria, con el fin de reducir en la medida de lo posible el tiempo por iteración.

Definidos ya los ángulos, el siguiente paso es calcular las velocidades de deslizamiento efectivas en el fondo del canal de acuerdo con la ecuación (9) vista en el apartado 3.2. Precisamente se explico en ese apartado como se

obtenían las pendientes de los perfiles de velocidad $\frac{\partial u_x}{\partial y}$, $\frac{\partial u_z}{\partial y}$ a partir de los esfuerzos viscosos, en concreto la función de Fluent F_STORAGE_R_N3V es la que nos proporciona la fuerza de cizalladura en cada celda. Como muestra se incluye a continuación el fragmento del código de la UDF correspondiente al cálculo de las pendientes de los perfiles de velocidad:

```

/* Calculates wall velocity gradients using shear forces */
shear_force_x = -F_STORAGE_R_N3V(f, t, SV_WALL_SHEAR)[0];
shear_force_z = -F_STORAGE_R_N3V(f, t, SV_WALL_SHEAR)[2];
shear_stress_x = shear_force_x/face_area;
shear_stress_z = shear_force_z/face_area;
Uy = shear_stress_x/mu;
Wy = shear_stress_z/mu;

```

Calculados las pendientes de los perfiles de velocidad en la fondo del canal y de acuerdo con la ecuación (9) se pueden calcular ya las velocidades de deslizamiento efectivas en esta superficie.

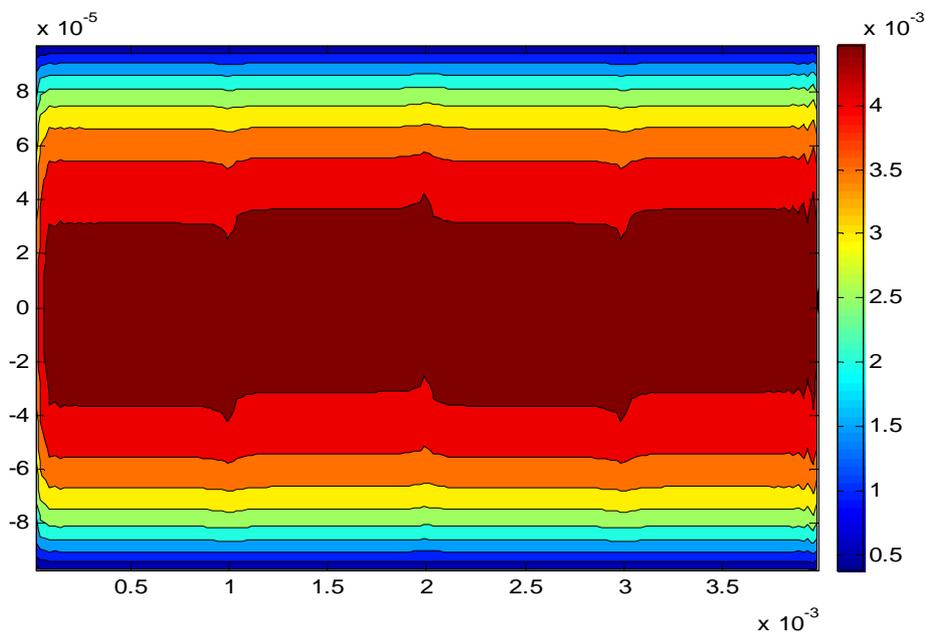


Figura 3.18 Patrón de velocidades [m/s] efectivas de deslizamiento en la dirección axial en la superficie que simula las ranuras.

En la figura 3.18 se representan las velocidades efectivas de deslizamiento longitudinales correspondientes al primer término de la ecuación (9). Las velocidades en la parte central de esta superficie son las que presentan un mayor valor que se reduce al aproximarse a las paredes. En esta figura

también se observa la aparición de oscilaciones en las proximidades de las secciones de entrada y salida. Estas oscilaciones tienen su origen en la imposición de las velocidades de deslizamiento efectivas demasiado cerca de los bordes de entrada y salida, siendo necesaria una transición más suave.

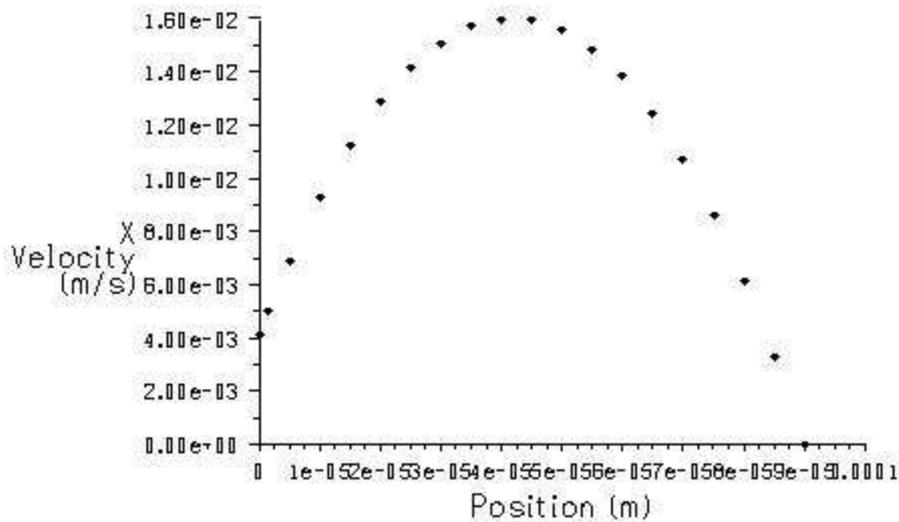


Figura 3.19 Perfil de velocidades axiales en el segmento de coordenadas $X=0.5\text{mm}$; $0 \leq Y \leq 0.09\text{mm}$; $Z=0.05\text{ mm}$.

Podría llamar la atención el hecho de que las velocidades sean positivas a pesar de que lo que se está simulando sea una superficie que presenta obstáculos a la circulación del fluido a modo ranuras. En realidad este hecho depende de la posición del plano virtual (simulado) con respecto a las ranuras.

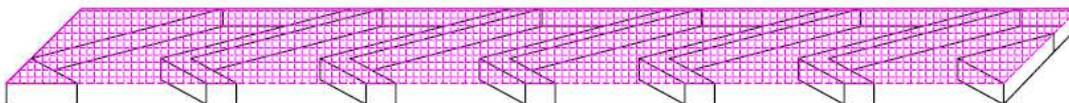


Figura 3.20 Superficie sobre la que se sitúa el plano virtual en el que se imponen las velocidades efectivas de deslizamiento.

Como en este trabajo la altura a la que se sitúa este plano virtual es la correspondiente a la parte superior de las ranuras, lo que se “encontraría” el fluido en un canal con ranuras reales sería zonas sin ranurar en las que la condición de adherencia supondría velocidades nulas, y zonas ranuradas donde ya no tenemos una superficie sólida sino más fluido en movimiento, y una velocidad no nula positiva es decir a favor de la circulación del flujo en dirección axial.

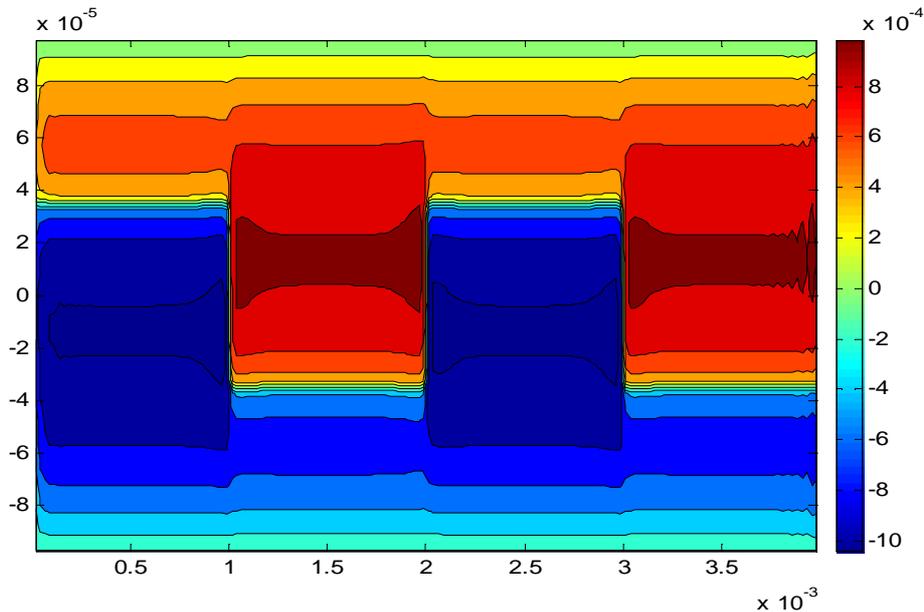


Figura 4.21 Patrón de velocidades [m/s] efectivas de deslizamiento en la dirección transversal en la superficie que simula las ranuras.

Las velocidades transversales (figura 3.20) presentan un patrón en el que se puede ver claramente la influencia del ángulo θ . De igual modo que en caso anterior la velocidades presentan mayores valores en la zona central y aminoran con la cercanía de los lados del canal. Estas velocidades empujan al fluido hacia los lados del canal. Un análisis más detallado de las figuras 3.18 y 3.20 se hará en el capítulo 4 del presente trabajo.

3.4.4 Implementación en Fluent: problemas de convergencia.

Una de las partes que más ha costado en el desarrollo de este proyecto fin de carrera ha sido lograr la convergencia de los residuos. En los primeros intentos por simular el comportamiento en el canal se obtenían las siguientes graficas de residuos:

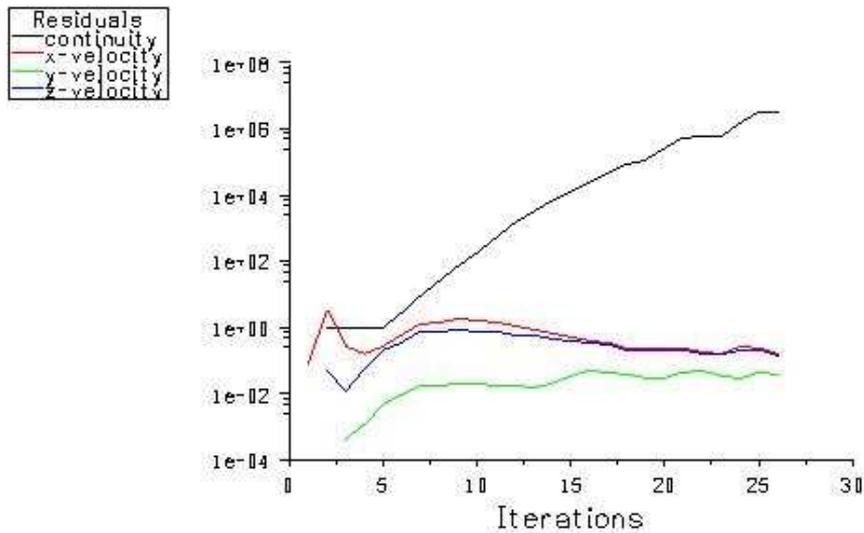


Figura 3.22 Evolución de los residuos antes de tomar las medidas para la convergencia del caso.

Como se puede observar los residuos para la velocidad axial y las velocidades transversales no convergen y los residuos para la continuidad son crecientes. Analizando las causas que podrían ocasionar esta divergencia e inestabilidad de los residuos se llegó a la conclusión que en problema reside en la manera de calcular las velocidades efectivas de deslizamiento. Estas velocidades son función de de las pendientes de los perfiles de velocidad en la misma superficie donde se imponen con lo que el error que se produce en el calculo de estas velocidades se propaga y crece resultado inestable el modelo.

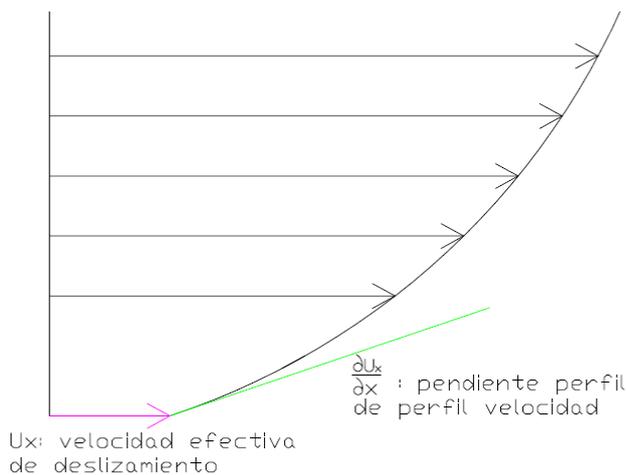


Figura 3.23 Esquema en el que se muestran las velocidades efectivas de deslizamiento y la pendiente del perfil de velocidad asociado.



Con el fin de solucionar este problema se opta por calcular las velocidades efectivas de deslizamiento en todas las iteraciones, sino cada un numero determinado de ciclos. Se procede de de la siguiente manera:

1. En las primeras iteraciones se calcula el campo fluido como en un canal usual sin velocidades efectivas de deslizamiento.
2. Transcurridas un numero **n** de iteraciones (en los casos analizados en este proyecto **n** toma un valor de 40 iteraciones) se calculan las velocidades efectivas de deslizamiento y se almacenan en memoria.
3. Se continúa iterando utilizando los valores de las velocidades anteriormente calculados y almacenados en memoria y que por lo tanto se mantienen constantes durante el ciclo de **n** iteraciones.
4. Se vuelven a recalculan las velocidades efectivas y se vuelven a mantener constantes durante un ciclo de **n** iteraciones.

Como medida complementaria a esta secuencia de calculo iterativo y también con el fin de lograr la convergencia de los residuos se implementó dentro del código de la UDF un factor de relajación a la hora de imponer las velocidades efectivas de deslizamiento cada vez que se recalculan, siguiendo el siguiente esquema:

$$U_{impuesta} = U_{antigua} - fr \cdot (U_{antigua} - U_{recalculada})$$

Donde fr es el factor de relajación aplicado que tomará un valor de 0,25 en los estudios realizados en este trabajo.

Al aplicar este proceso se obtienen unas graficas de evolución de residuos con un patrón parecido a la función conocida como dientes de sierra. Los picos corresponden a las iteraciones en las que se recalculan las velocidades de deslizamiento.

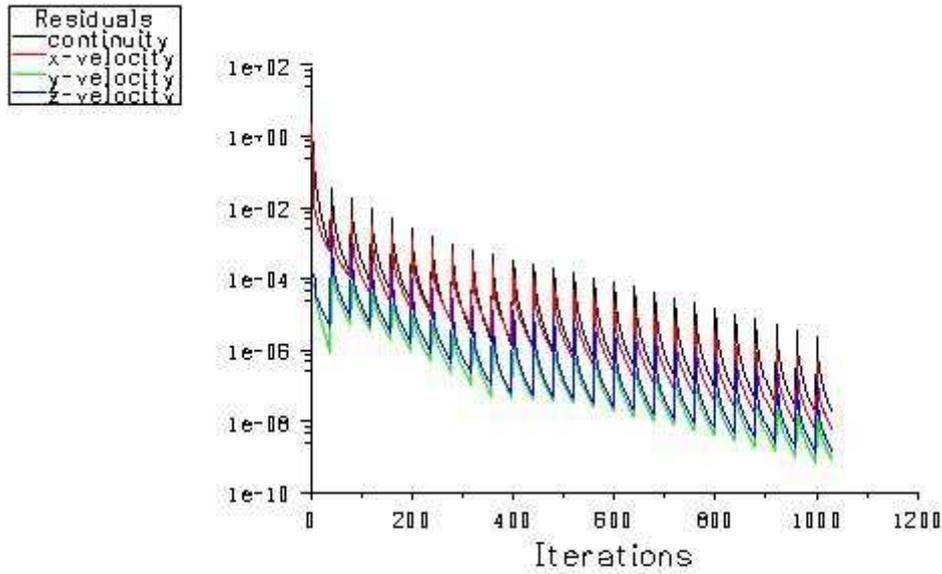


Figura 3.24 Evolución de los residuos después de aplicar las medidas para la convergencia del caso.

En lo que a la evolución de los residuos del escalar se refiere una vez resuelto el campo fluido la convergencia del escalar es inmediata, en unas pocas iteraciones se alcanza valores de residuos:

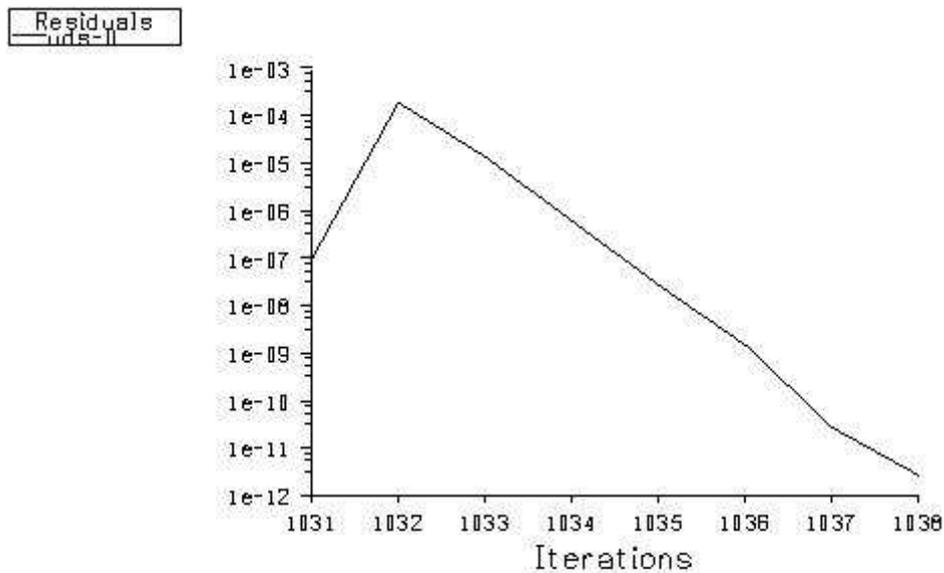


Figura 3.25 Evolución de los residuos asociados al la resolución del escalar.

Antes de dar por finalizado este análisis de la convergencia se quiere resaltar que como paso previo a ejecutar este modelo de convergencia en "dientes de sierra" se realizaron distintas pruebas cambiando discretizaciones, modelos de acoplamiento entre presión y velocidad, factores de relajación propios de Fluent, sin ningún resultado positivo



4. Resultados

En este capítulo se presentarán y analizarán los resultados del modelo para un micromezclador tipo SHM desarrollado en los anteriores capítulos. Con el objeto de contrastar este modelo se compararán estos resultados con el artículo de referencia, "Computations of Chaotic Flows in Micromixers" de C.R. Kaplan, Así mismo también se compararán los resultados que se obtienen utilizando las dos configuraciones para las ranuras anteriormente expuestas, tipo Kaplan y tipo Strook. Como paso previo y para poder apreciar el efecto que producen las ranuras se mostrará brevemente el campo de velocidades y la evolución del escalar en un canal convencional.

4.1 Canal convencional sin ranuras.

Si se elimina el efecto de las ranuras en el tipo de canal que se está estudiando se trataría de una situación conocida y de la que ya se conoce solución, tal y como se vio en el apartado 3.2, dicha solución es la correspondiente a un canal rectangular con flujo unidireccional. Aun así por comodidad a la hora de comparar resultados se ha procedido a simular en Fluent un canal en estas condiciones.

4.1.1 Canal convencional: Convergencia

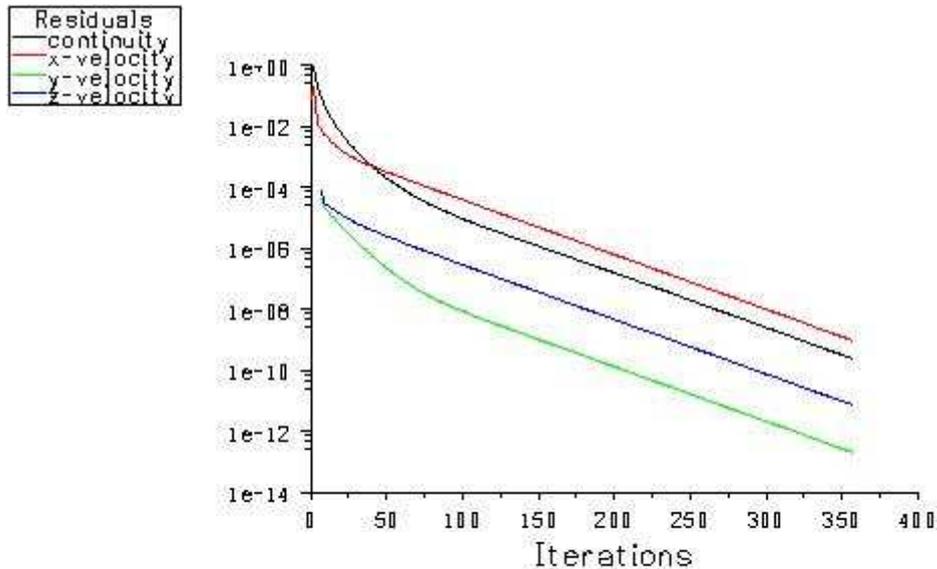


Figura 4.1 Evolución de los residuos para en el canal sin ranuras.

En la figura 4.1 se representa la evolución de los residuos para la ecuación de la continuidad y las velocidades correspondientes a las direcciones X, Y, Z. Al tratarse de un canal "convencional" sin ranuras, en el que tenemos un flujo laminar sencillo no es de extrañar que converja rápidamente y de manera estable. En 354 iteraciones y un tiempo de computación de 20 minutos en un ordenador personal convencional los valores de los residuos de los componentes anteriormente citados bajan todos de 10^{-9} .

A modo de comprobación también se realiza un balance de masa entre las secciones de entrada y salida cuyo resultado se presenta a continuación:

Mass Flow Rate	(kg/s)
outflow.2	-1.8002111e-07
velocity_inlet.1	1.8002111e-07
Net	1.5881868e-22

Resultado que se considera adecuado en base a que el balance de masa en términos relativos (dividiendo el resultado del balance entre el flujo de entrada o salida) es del orden de de 10^{-16} , valor muy por debajo de los residuos antes calculados.

4.1.2 Canal convencional: Flujo.

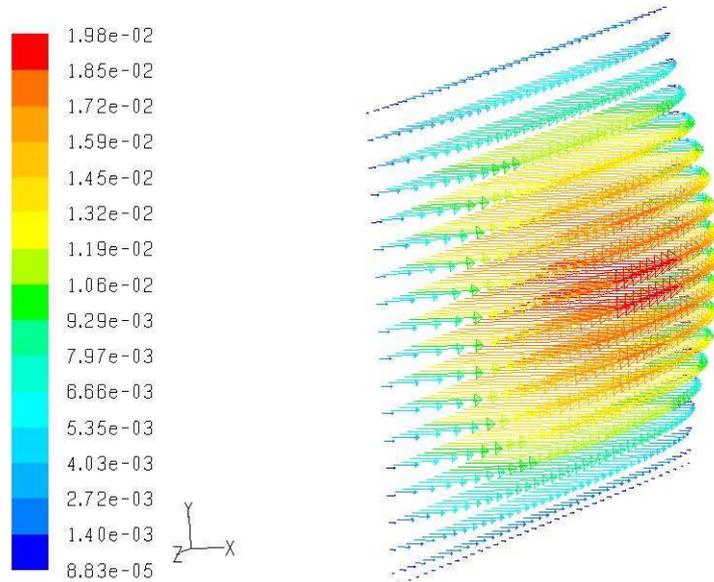


Figura 4.2 Vectores de velocidad en una sección intermedia del canal sin ranuras.

Como ya se adelantó en el apartado 3.4.1, el perfil de velocidades en tipo de canal tiene una forma parabólica donde las velocidades más altas se dan en el centro de la sección transversal del canal. Se puede comprobar en la figura 4.2 como efectivamente al ser un canal sin ranuras en ninguna superficie el flujo es unidireccional.

4.1.3 Canal convencional: evolución del escalar

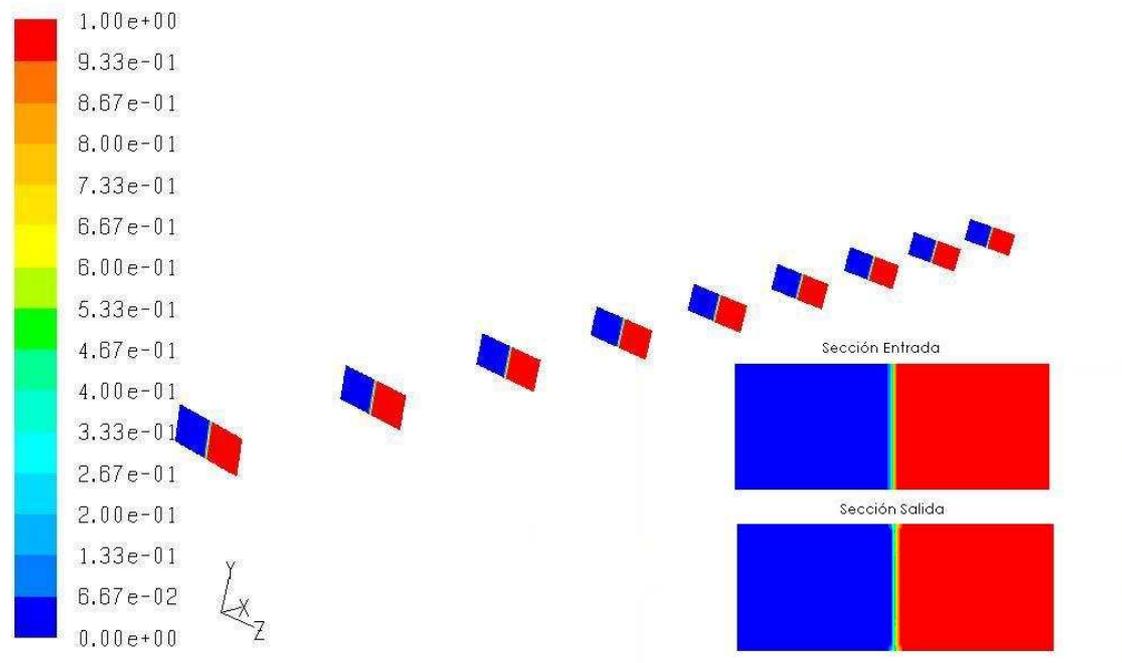


Figura 4.3 Evolución del escalar en el canal sin ranuras.

En el canal sin ranuras la distribución escalar no sufre ningún cambio a su paso por el mismo, se debe recordar que la difusividad empleada es muy baja, de ahí que tampoco se produzca mezclado puramente difusivo. La interfase entre los dos valores que toma el escalar es un efecto no deseado propio de la difusividad numérica ocasionada por el tamaño mínimo de celda que es posible emplear.

4.2 Configuración ranuras tipo Kaplan

Visto los resultados que se obtendrían en un canal sin ranuras es el momento de estudiar los resultados que se obtienen con la configuración de ranuras usadas por Kaplan y su equipo

4.2.1 Configuración Kaplan: Convergencia.

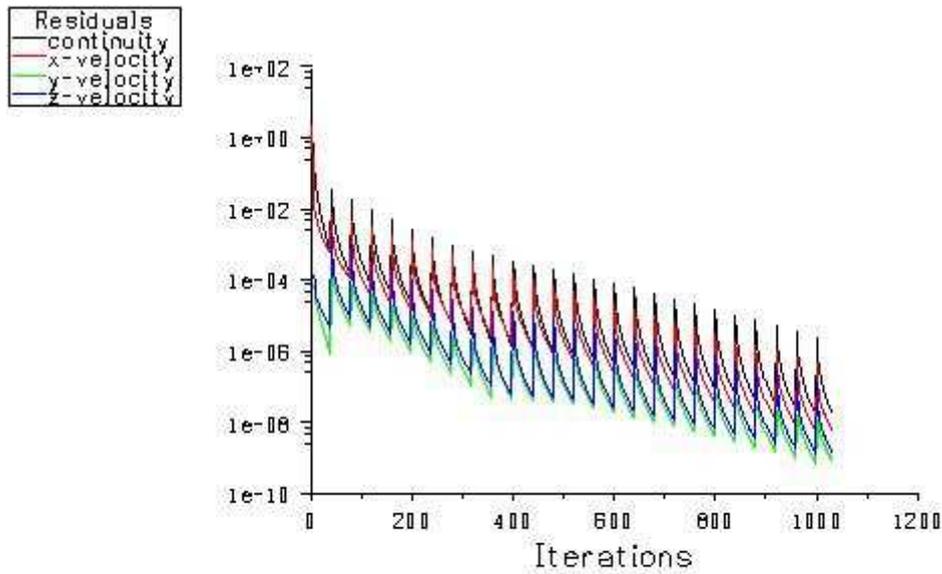


Figura 4.4 Evolución de los residuos en un canal con ranuras tipo Kaplan.

La grafica de residuos aquí expuesta ya fue vista en apartados anteriores en los que se hablaba de los problemas de convergencia que se han tenido durante la realización de este estudio. Añadir que para calcular estas 1030 iteraciones fue necesario un tiempo de una hora y quince minutos aproximadamente ejecutado el caso en un equipo informático convencional.

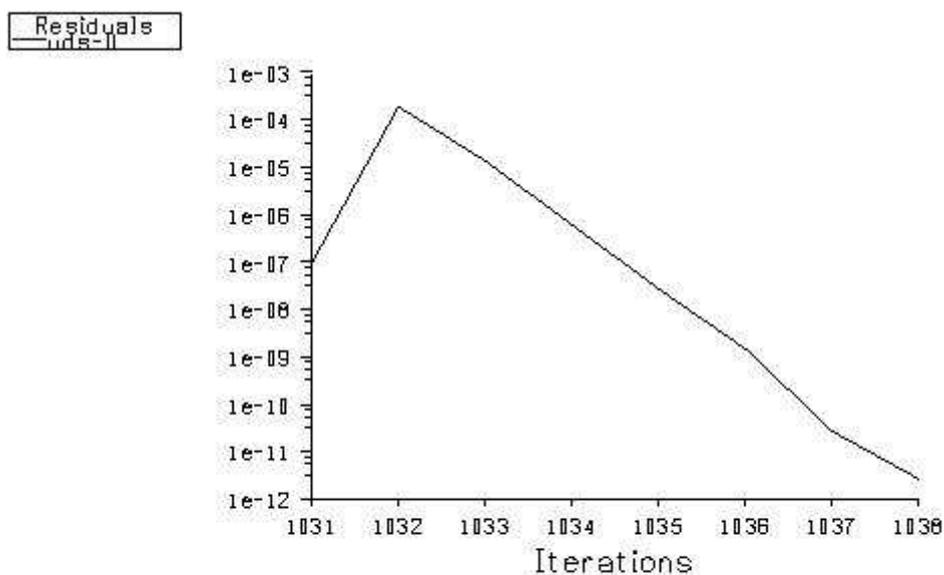


Figura 4.5 Evolución de los residuos en el cálculo de la distribución del escalar.

Al ser la resolución del escalar un problema lineal no es de extrañar que la convergencia hasta un valor mínimo (en este caso se tomo 10^{-11}) se produzca en tan solo unas pocas iteraciones.

Mass Flow Rate	(kg/s)
outflow.2	-1.8002111e-07
velocity_inlet.1	1.8002111e-07
Net	2.646978e-23

El balance de masa como en el caso del canal sin ranuras resulta ser no nulo pero si muy pequeño por lo que se puede considerar adecuado.

4.2.2 Configuración Kaplan: Flujo.

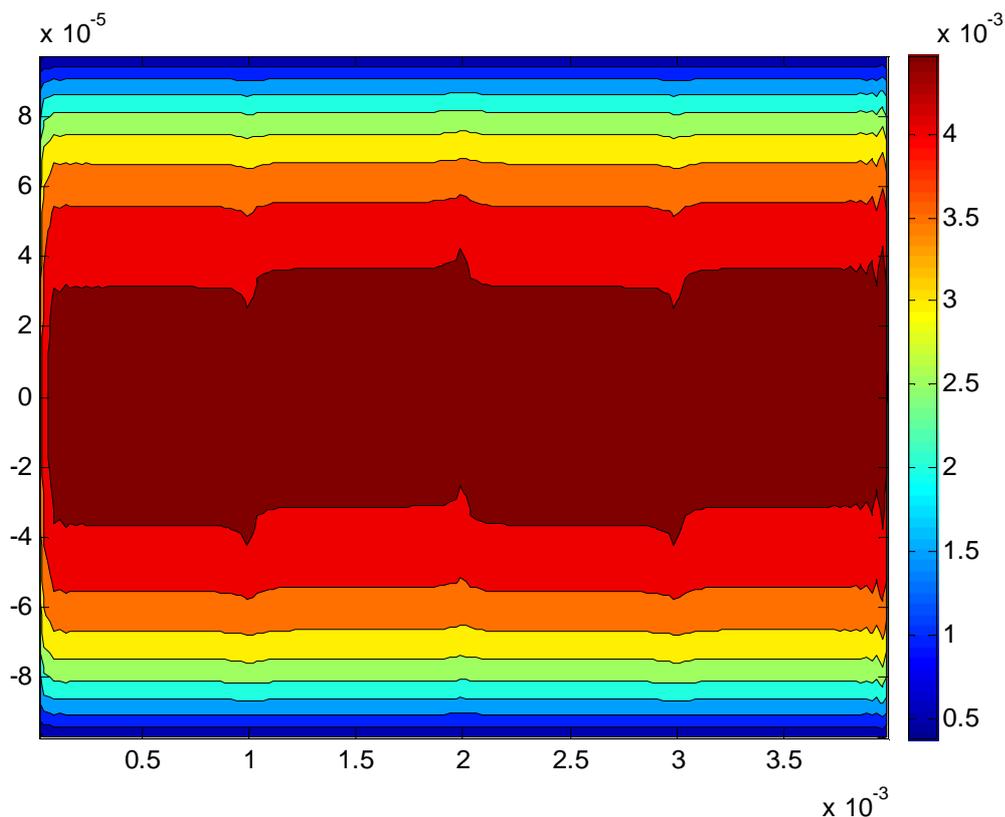


Figura 4.6 Patrón de velocidades [m/s] efectivas de deslizamiento en la dirección X en la superficie que simula las ranuras

Las figuras 4.6 y 4.7 representan las velocidades efectivas de deslizamiento en las direcciones X, Z.

En cuanto a la primera de las figuras decir que en ella se aprecian irregularidades en cada uno de los semiciclos del canal, probablemente debidas al cambio de ubicación del punto donde el ángulo θ cambia de $\frac{\pi}{4}$ a $-\frac{\pi}{4}$. Las velocidades máximas tienen lugar en el centro del canal, con un valor de entre 4 y 5 mm/s, es decir un orden por debajo de la velocidad máxima del canal para esta dirección.

Las velocidades en la dirección Z son algo menores, aproximadamente cuatro veces más pequeñas que las velocidades en X. En el patrón de estas velocidades se puede ver claramente reflejado el patrón del ángulo θ . Como ya se vio, los valores mas altos se dan en la zona central del canal, reduciendo su valor hasta cero al llegar al los lados del canal.

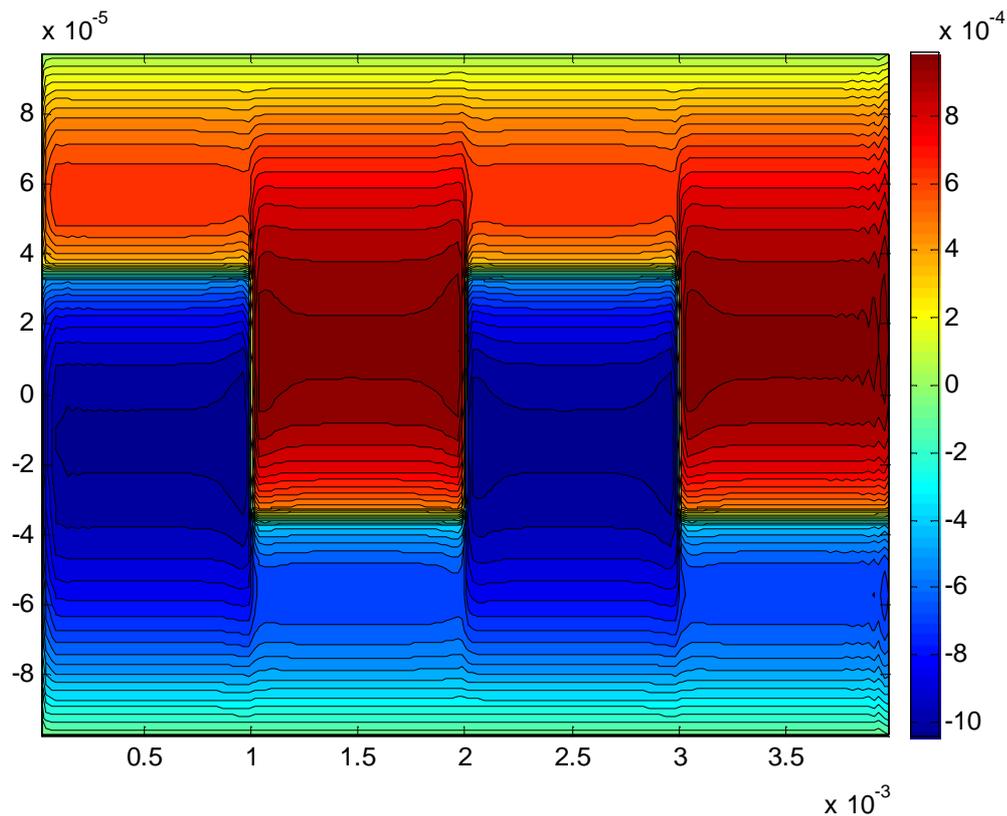


Figura 4.7 Patrón de velocidades [m/s] efectivas de deslizamiento en la dirección Z en la superficie que simula las ranuras.

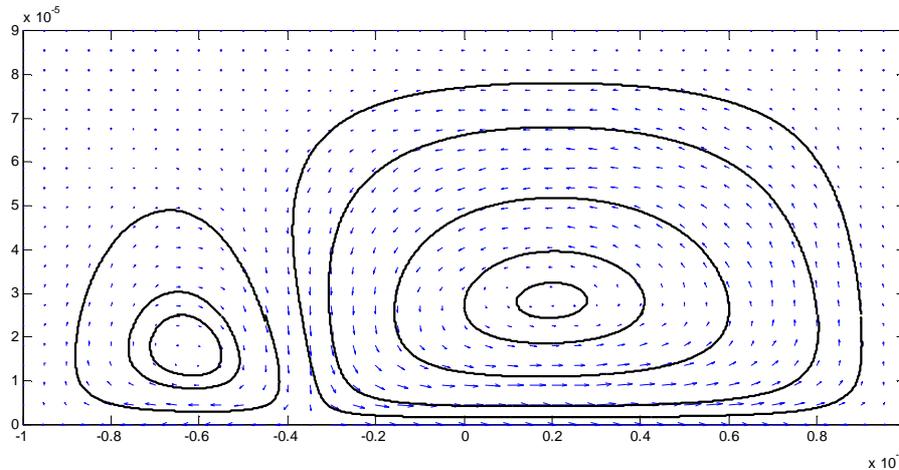


Figura 4.8 Vectores de velocidad y líneas de corriente en un plano transversal situado en $x = 1,5\text{mm}$. El tamaño de los vectores es proporcional a la magnitud de la velocidad en las direcciones transversales Y, Z .

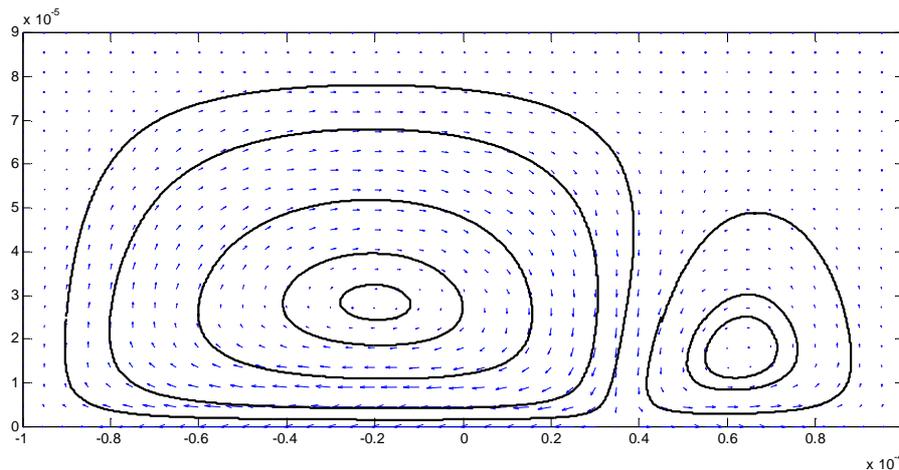


Figura 4.9 Vectores de velocidad y líneas de corriente en un plano transversal situado en $x = 2,5\text{mm}$. El tamaño de los vectores es proporcional a la magnitud de la velocidad en las direcciones transversales Y, Z .

De las figuras 4. 8 y 4. 9 se puede extraer interesante información acerca del comportamiento del fluido según no alejamos de superficie de las ranuras en dirección de Y crecientes. Se observa como el movimiento es intenso en la zona más próxima a dicha superficie atenuándose fuertemente al alejarse de ella.

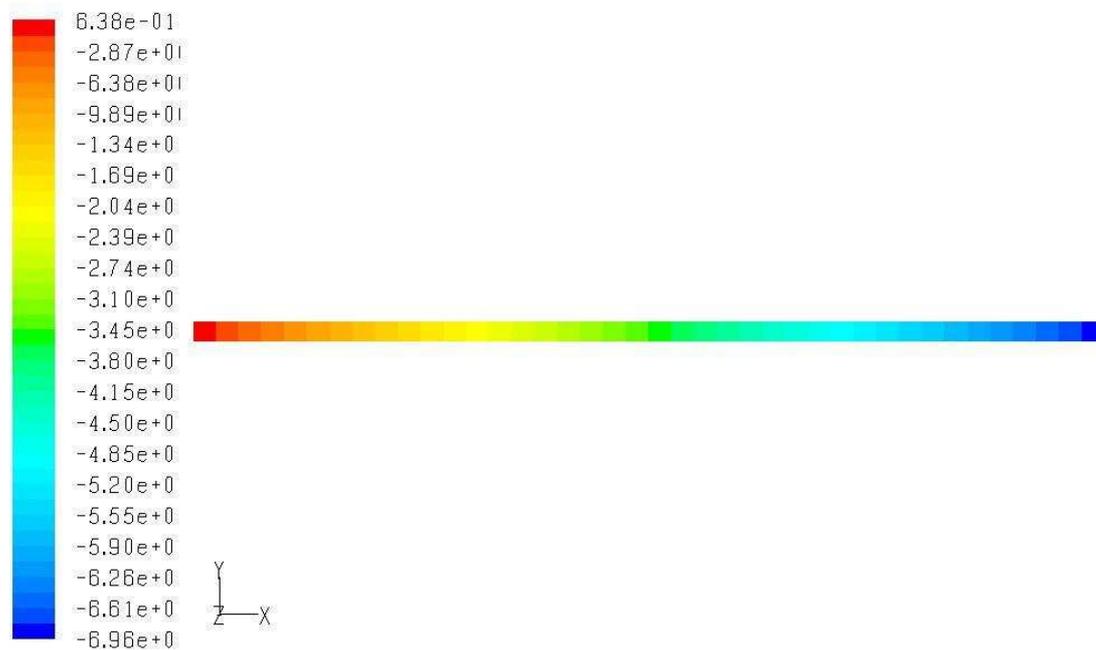


Figura 4.10 Evolución del a presión estática a lo largo del canal [Pa].

De la presión estática decir que reduce su valor gradualmente según se avanza por el canal. El decremento de presión es el aporte exterior necesario como elemento motriz para que estas condiciones de flujo sean posibles en este canal.

Integral Static Pressure	(pascal)(m2)
outflow.2	-1.2486781e-06
velocity_inlet.1	8.9923144e-09
Net	-1.2396858e-06

4.2.3 Configuración Kaplan: Evolución del escalar.

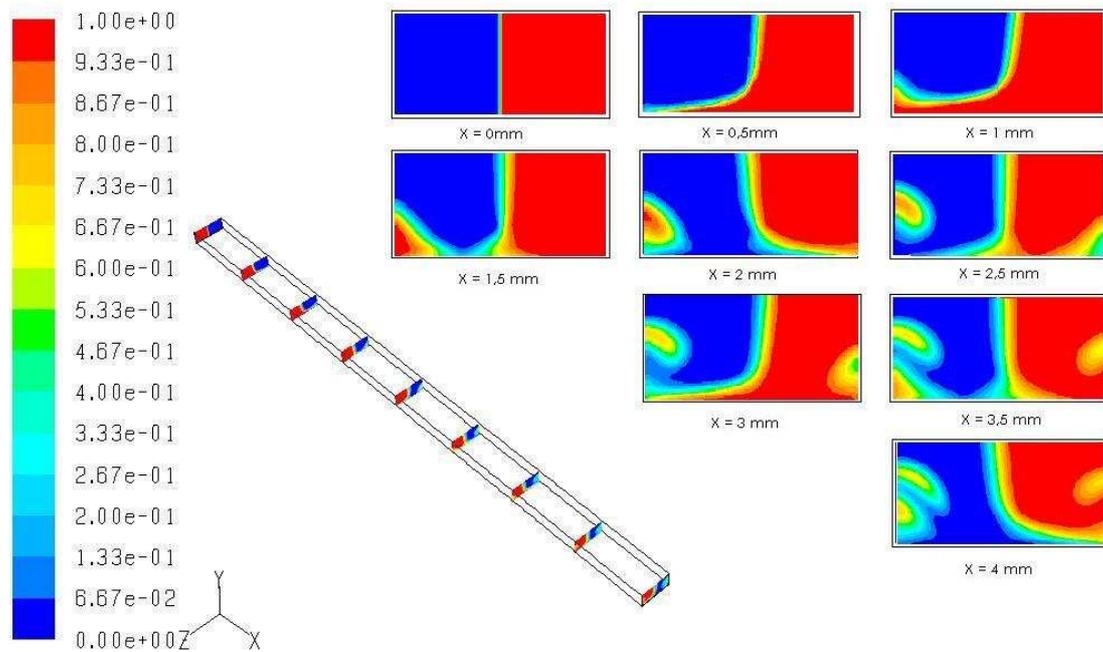


Figura 4.11 Evolución del escalar a lo largo del canal.

Las figuras 4.11, 4.12, 4.19 y 4.20 representan los resultados principales de este trabajo. En ellas se visualiza el comportamiento del escalar a lo largo de canal, y por lo tanto dan la posibilidad de analizar de manera cualitativa el grado de advección caótica en el canal. Además, en el caso concreto de la configuración de ranuras actual, constituye la manera de poder validar el modelo desarrollado aquí mediante la comparación de estos mismos resultados con los que obtuvieron Kaplan y su equipo en el Naval Research Laboratory.

Las velocidades que las ranuras generarían desplazan el fluido hacia los lados del canal, pero no de manera simétrica, si no que en cada uno de los semiciclos la cantidad de flujo desplazado es mayor en dirección de Z positivas o negativas alternativamente. Este moviendo hace que tengan lugar islas de fluido con valor opuesto de escalar al mayoritario en la zona en que se encuentran. Es precisamente este fenómeno el que logra que en el tipo de canales SHM se produzca un grado de mezclado mucho mayor en un canal simple de paredes lisas.

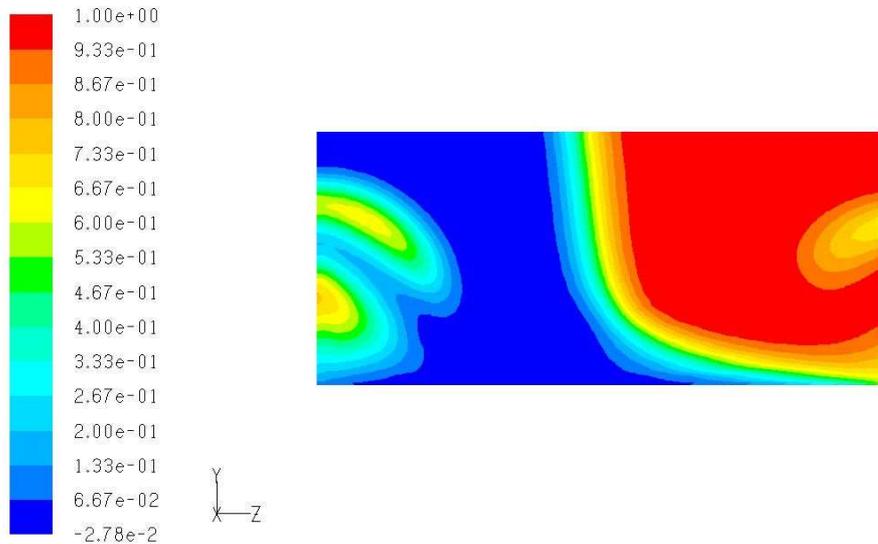


Figura 4.12 Distribución del escalar en la sección de salida.

Comparando estos resultados con los obtenidos por Kaplan y su equipo se puede llegar a la conclusión de que ambos son muy similares. Las evoluciones en las distribuciones de los escalares a lo largo de los canales que ocurren en ambos modelos mantienen una gran semejanza, si bien es verdad que parece que en el modelo de Kaplan el grado de advección caótica es algo mayor, hecho que se aprecia en la mayor longitud de las islas de fluido y su localización más cercana al techo del canal.

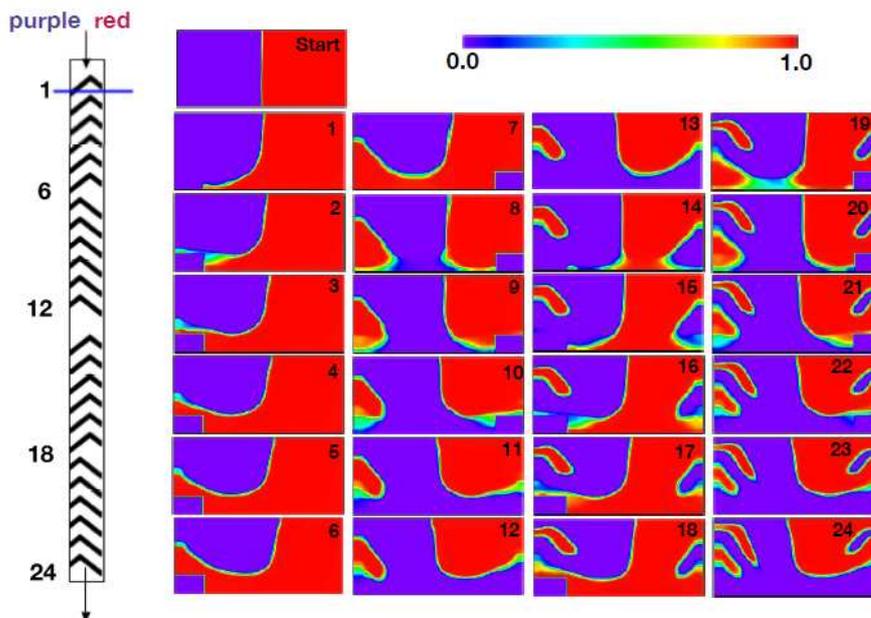


Figura 4.13 Resultados de la advección caótica en un canal SHM presentados en el artículo de C.Kaplan.

En cuanto a la interfase que separa las dos grandes áreas de escalar se observa un estrechamiento de esta entorno a la altura $y = 20 \mu\text{m}$, efecto especialmente notorio en las secciones situadas en $X = 1,5 \text{ mm}$, 2 mm y $2,5 \text{ mm}$. Fijándose en las figuras 4.14 y 4.15 se puede ver como el estrechamiento se sitúa a la misma altura que los vórtices, siendo el flujo convectivo más intenso en esta zona

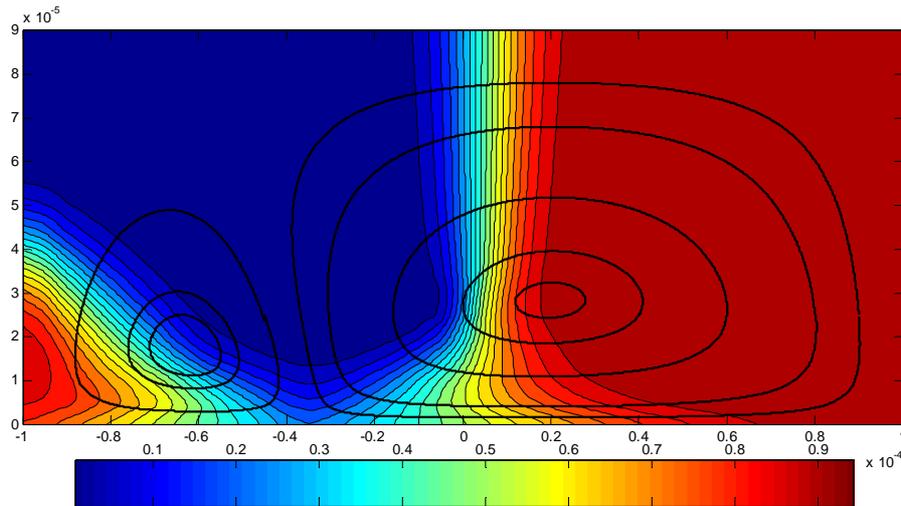


Figura 4.14 Distribución de escalar y líneas de corriente en la sección situada en $x = 1,5 \text{ mm}$

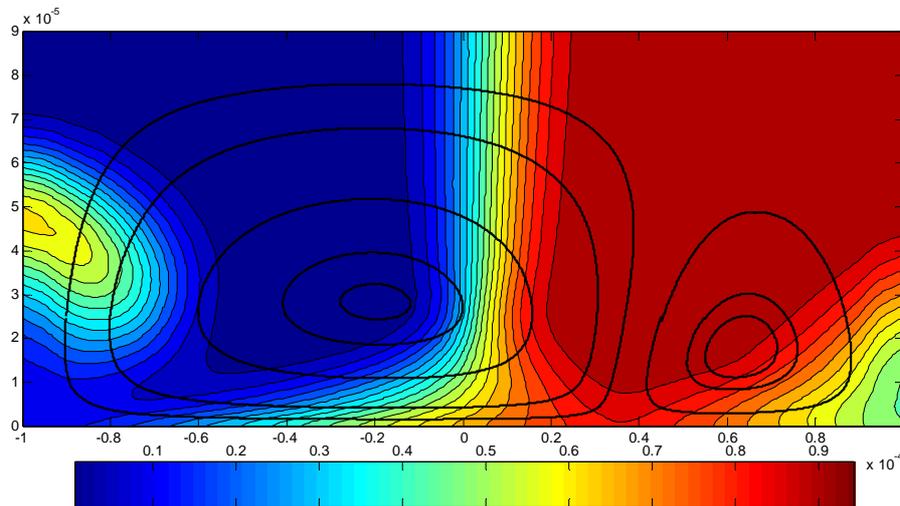


Figura 4.15 Distribución de escalar y líneas de corriente en la sección situada en $x = 2,5 \text{ mm}$

4.3 Configuración tipo Strook.

El siguiente paso es analizar la influencia que puede tener un patrón distinto de ranuras. Como ya se vio con anterioridad Strook utiliza un patrón de ranuras en el que la parte ranurada y la parte sin ranurar tienen la misma dimensión.

4.3.1 Configuración Strook: Convergencia.

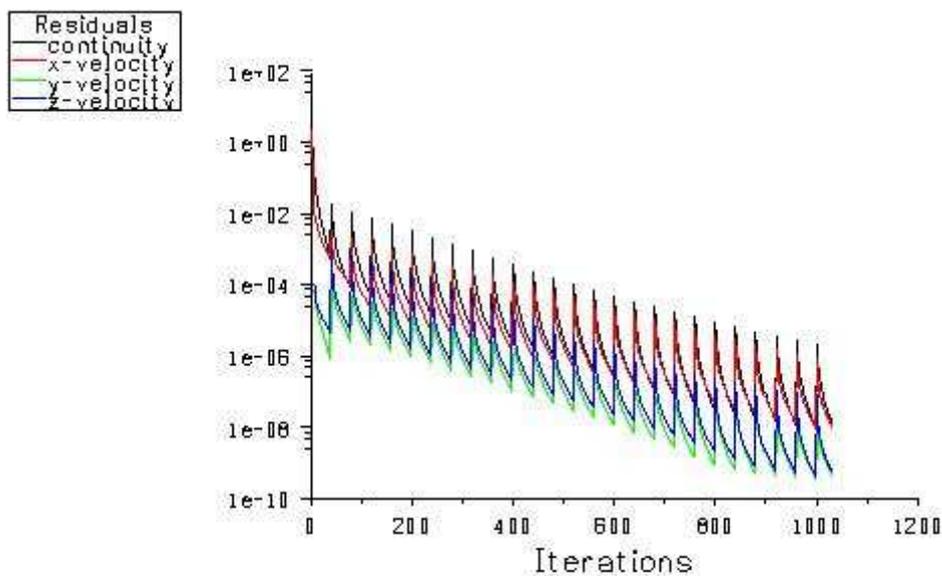


Figura 4.16 Evolución de los residuos en un canal con ranuras tipo Kaplan.

No es de extrañar que la convergencia en ambos modelos sea idéntica, es lógico pensar que las posibles diferencias entre un modelo y otro no son suficientes como para que se produzca un cambio en la convergencia de los residuos. Así mismo la magnitud del balance de flujos másicos también es parecida en ambos casos.

Mass Flow Rate	(kg/s)
outflow.2	-1.8002111e-07
velocity_inlet.1	1.8002111e-07
Net	1.8528846e-22

4.3.2 Configuración Strook: Flujo.

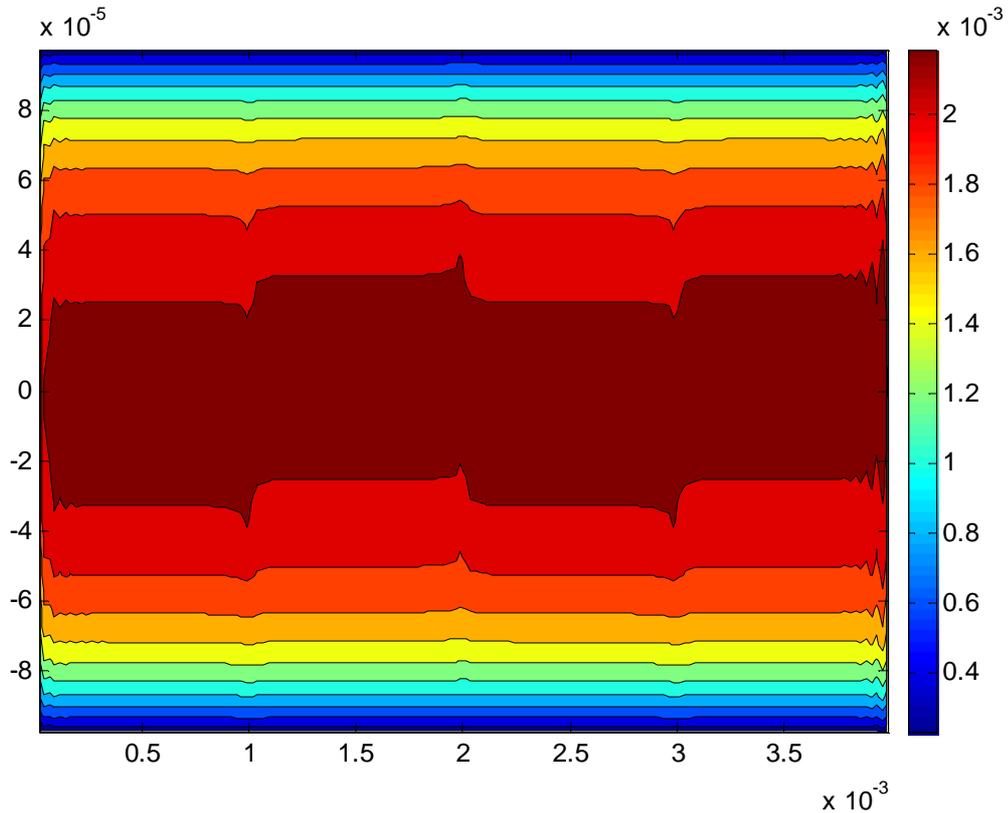


Figura 4.17 Patrón de velocidades [m/s] efectivas de deslizamiento en la dirección X en la superficie que simula las ranuras

Las velocidades en la dirección X son menores que en caso Kaplan, aproximadamente la mitad. Algo esperado teniendo en cuenta que los coeficientes de deslizamiento η_a y η_t son para el caso de Strook casi la tercera parte que en el caso Kaplan.

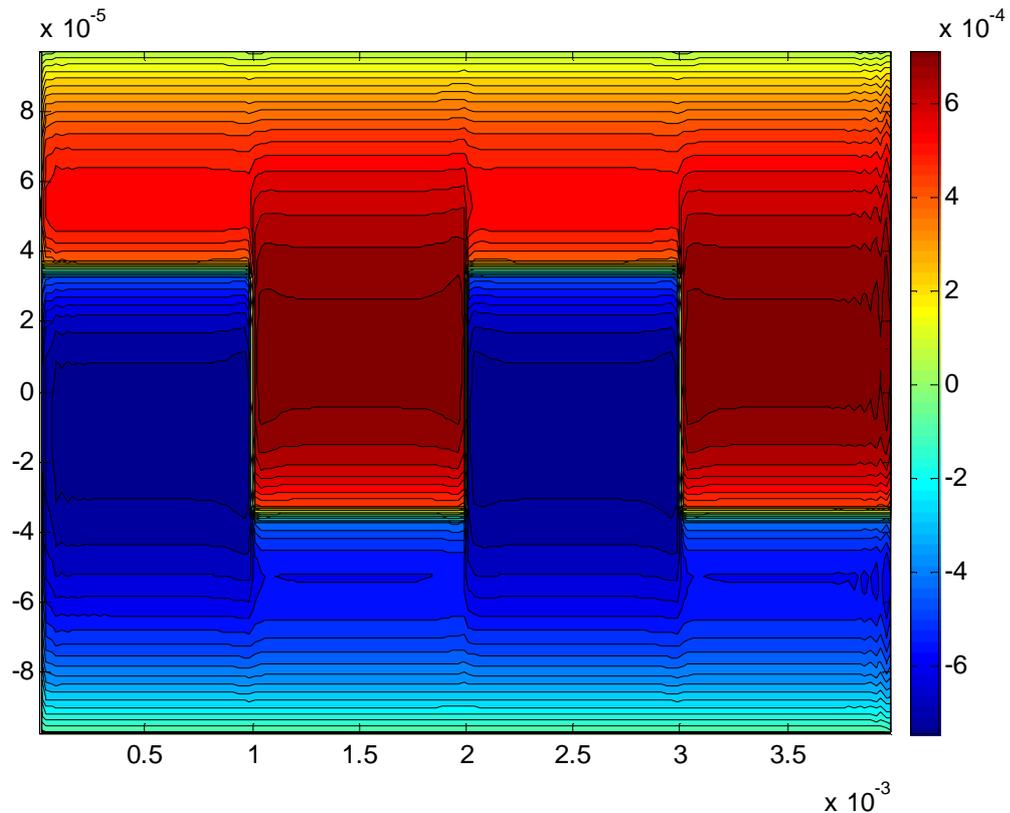


Figura 4.18 Patrón de velocidades [m/s] efectivas de deslizamiento en la dirección Z en la superficie que simula las ranuras.

Las velocidades en la dirección Z también sufren un decremento, sin embargo este es mucho menor que el que se ve en la dirección X, las diferencias en este caso son de aproximadamente un 30% en favor de caso Kaplan.

En cuanto a los vectores de velocidad y las líneas de corriente mostrados en las figuras 4.17 y 4.18 presentan patrones análogos que en la configuración tipo Kaplan.

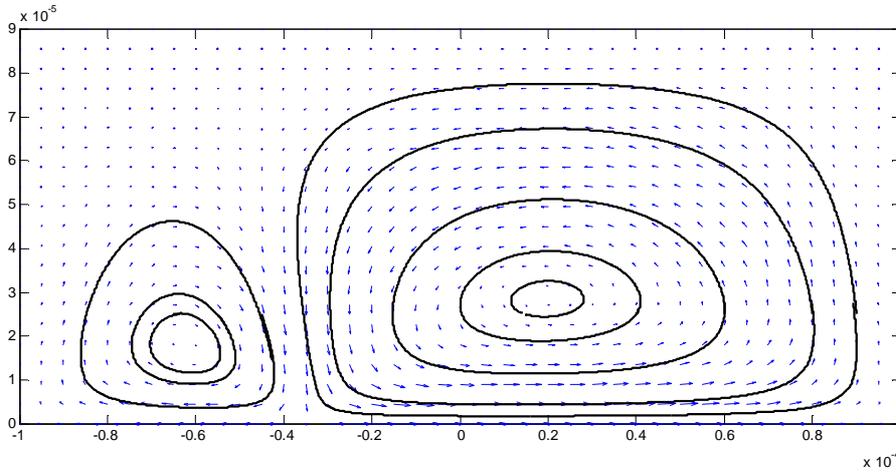


Figura 4.19 Vectores de velocidad y líneas de corriente en un plano transversal situado en $x = 1,5\text{mm}$. El tamaño de los vectores es proporcional a la magnitud de la velocidad en las direcciones transversales Y, Z .

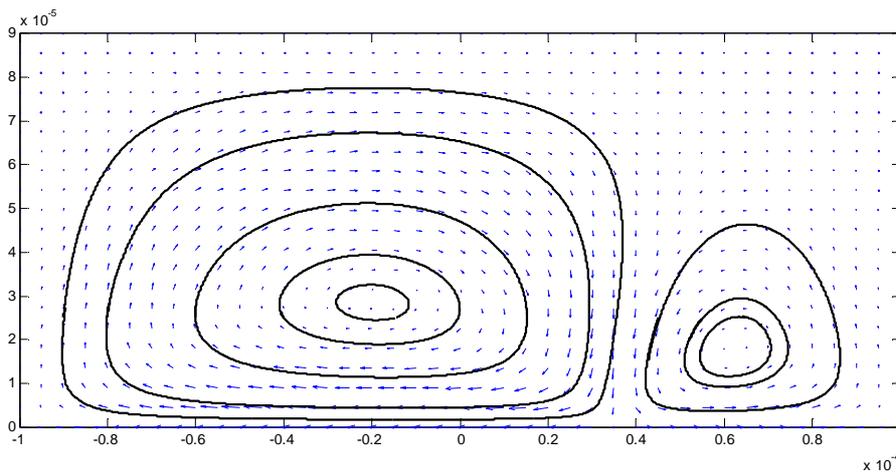


Figura 4.20 Vectores de velocidad y líneas de corriente en un plano transversal situado en $x = 2,5\text{mm}$. El tamaño de los vectores es proporcional a la magnitud de la velocidad en las direcciones transversales Y, Z .

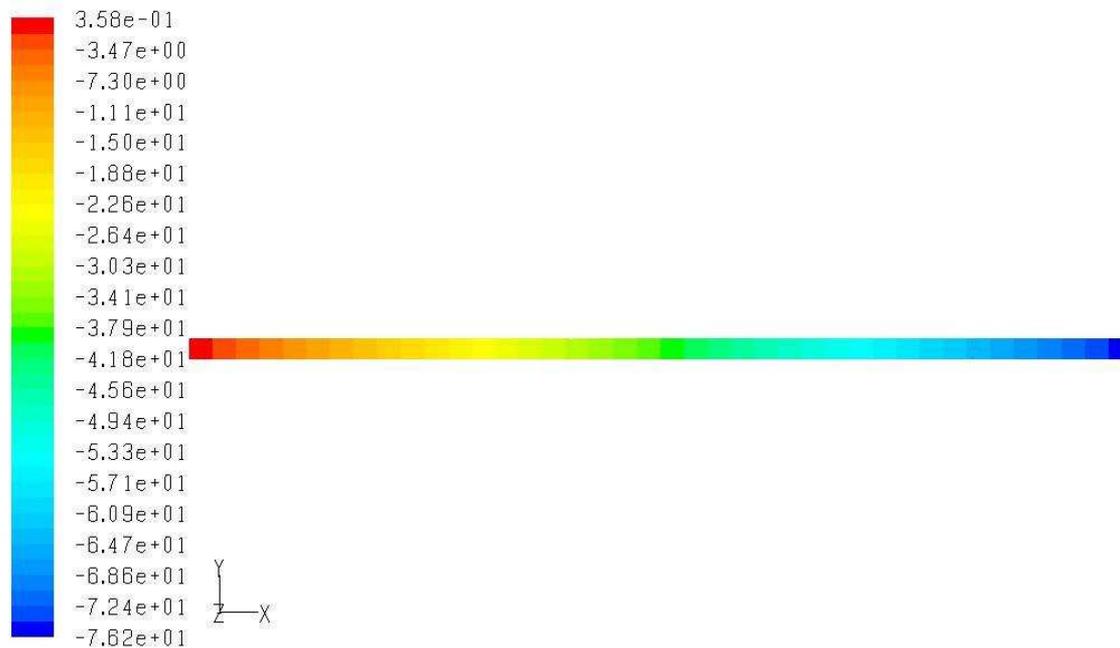


Figura 4.21 Evolución del a presión estática a lo largo del canal [Pa].

La diferencia de presiones estáticas entre la sección de salida y la de entrada tiene un valor parecido al de caso Kaplan, si bien es un 10% mayor para el presente caso. Si se comparan ambos resultados con los que se obtendrían en un canal sin ranuras, se llega a la conclusión de que es precisamente en el canal sin ranuras donde es necesario un mayor gradiente de presión motriz, aunque pueda parecer contradictorio hay que tener en cuenta que los canales con ranuras constan de una sección mas amplia (ver figura 3.20), razón por la cual la configuración de Kaplan es la que requiere un menor gradiente de presión debido al mayor ancho de la ranuras.

Integral	
Static Pressure	(pascal)(m2)
outflow.2	-1.3686782e-06
velocity_inlet.1	4.9651367e-09
Net	-1.3637131e-06

Consumos de escalar			
Caso	Canal sin ranuras	Canal ranuras tipo Kaplan	Canal ranuras tipo Strook
Gradiente presión [Pa]	1,4826334E-06	1,2396858E-06	1,3637131E-06

4.3.3 Configuración Strook: Evolución del escalar

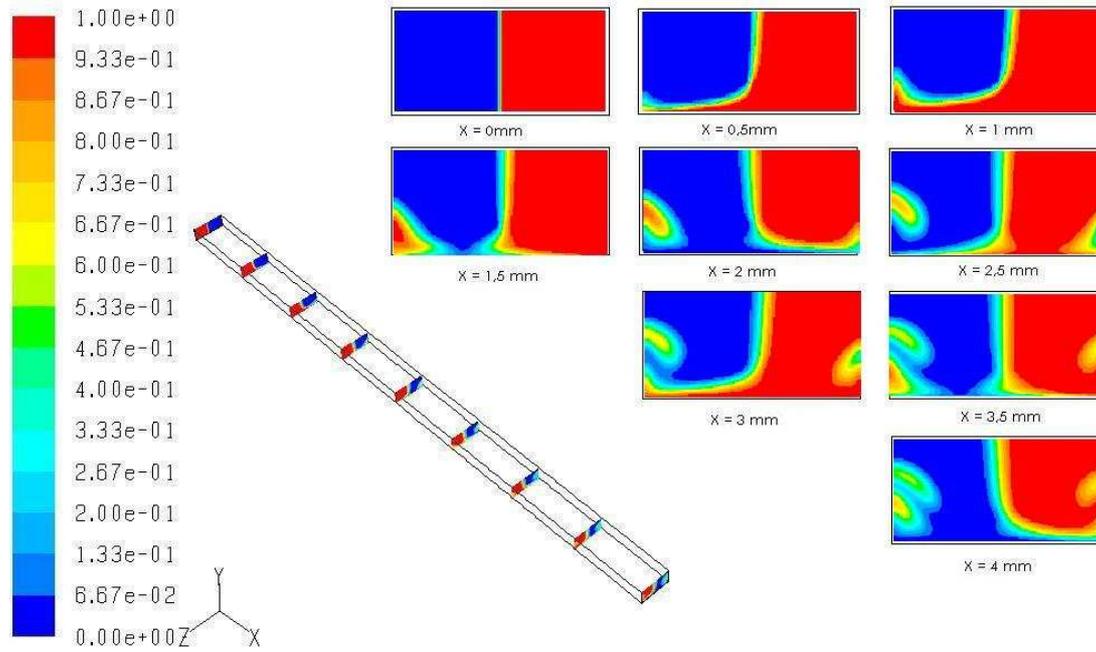


Figura 4. 22 Evolución del escalar a lo largo del canal.

En cuanto a la evoluciones en la distribución del escalar a lo largo del canal, vemos que las diferencias entre ambas configuraciones son realmente pequeñas. Se piensa que una posible explicación para este hecho sea que a pesar de que las velocidades en la dirección Z son aproximadamente un 30 % mayores para la configuración Kaplan, también los son las velocidades en la dirección X lo que resulta en contra del movimiento que se trata de conseguir.

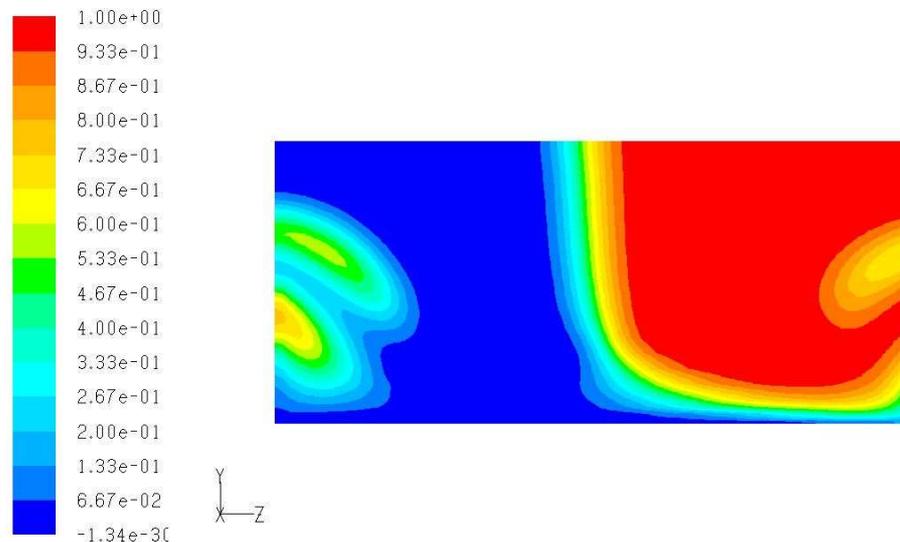


Figura 4.23 Distribución del escalar en la sección de salida.

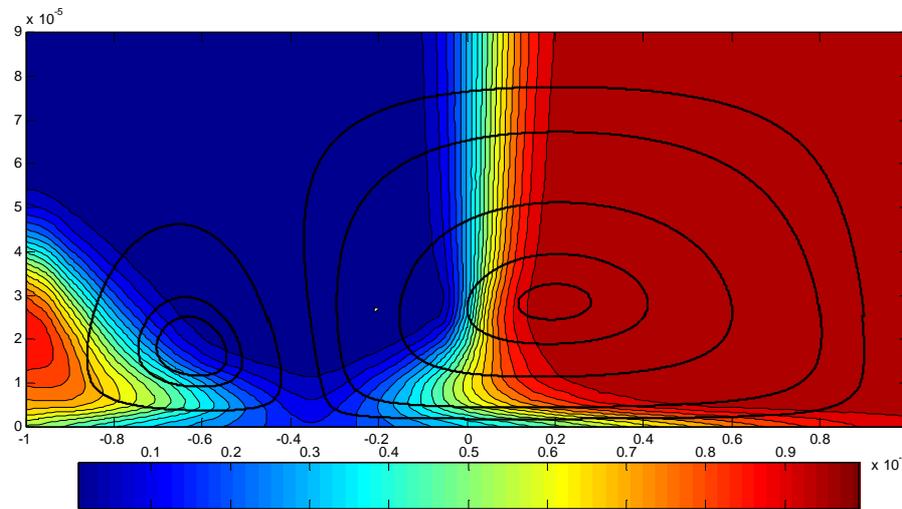


Figura 4.24 Distribución de escalar y líneas de corriente en la sección situada en $x = 1,5 \text{ mm}$

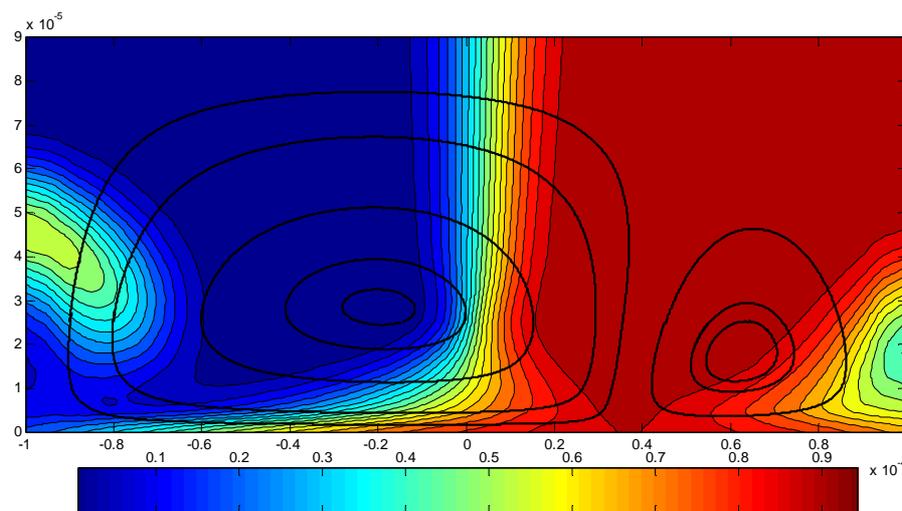


Figura 4.25 Distribución de escalar y líneas de corriente en la sección situada en $x = 2,5 \text{ mm}$

Al igual que se veía con anterioridad para el caso Kaplan, se producen de igual manera estrechamientos en la interfase central del escalar debidos a una mayor intensidad del flujo convectivo en las proximidades de los vórtices.

4.3 Ejemplo: Microcanal con distintas superficies reactivas.

A modo de ejemplo se estudiara en este apartado el comportamiento de un microcanal con distintas superficies reactivas en las que se consume una de las especies en el fluido que circula por el propio microcanal. El objeto de este pequeño ejemplo es comprobar la eficiencia de un canal tipo SHM ante un



consumo de especies no homogéneo que origine gradientes de concentración.

Se modelizará el ejemplo de la siguiente manera:

- La especie que se consume en las paredes reactivas es representada por el valor 1 en el escalar introducido a la entrada del canal. A diferencia de los casos anteriores la distribución de este escalar es homogénea en toda la entrada.
- Las paredes reactivas se han implementado en Fluent imponiéndoles la condición de que el escalar toma un valor de 0 al entrar en contacto con ellas. Esto significaría un consumo total de la especie al contactar con la superficie reactiva. Se han analizado distintas configuraciones:
 - La superficie reactiva se sitúa en el techo del canal.
 - La superficie reactiva esta compuesta por las cuatro paredes laterales del canal.
 - La superficie reactiva se sitúa en el fondo del canal coincidiendo con la superficie ranurada.

En este caso el valor de la difusividad pasa de 10^{-12} a 10^{-7} kg/m s con fin de tener en cuenta también los efectos puramente difusivos, permaneciendo el resto de parámetros igual que en caso correspondiente a la configuración tipo Kaplan estudiado en el apartado 4.2 de este proyecto.

Para obtener los resultados no ha sido necesario realizar una simulación completa de cada caso ya que, al no cambiar el campo fluido, se pueden utilizar los resultados para este anteriormente calculados en la configuración Kaplan como punto de partida calculando solo la evolución del escalar en cada caso.

Aclarar también que la intención de apartado es la obtención de unos resultados preliminares, siendo necesario un planteamiento más complejo del problema para obtener resultados más rigurosos. Un ejemplo de ello es el tratamiento que aquí se le da la superficie ranurada en relación al consumo de escalar. En este estudio dicha pared se implementa como una superficie plana en la que el escalar se consume de manera uniforme cuando en la

realidad no sería así por la geometría de las propias ranuras, siendo necesario el desarrollo de una condición de contorno que refleje un consumo efectivo de escalar como ya se hizo con las velocidades.

A continuación se presentan los resultados que se obtienen en canales con distintas paredes reactivas tal y como se explico al inicio. Para poder evaluar de manera cualitativa y cuantitativa el grado de mejora en el consumo de escalar se incluyen los resultados que se obtienen en un canal sin ranuras con las mismas superficies reactivas.

En primer lugar veremos los resultados que la superficie reactiva es el techo del canal.

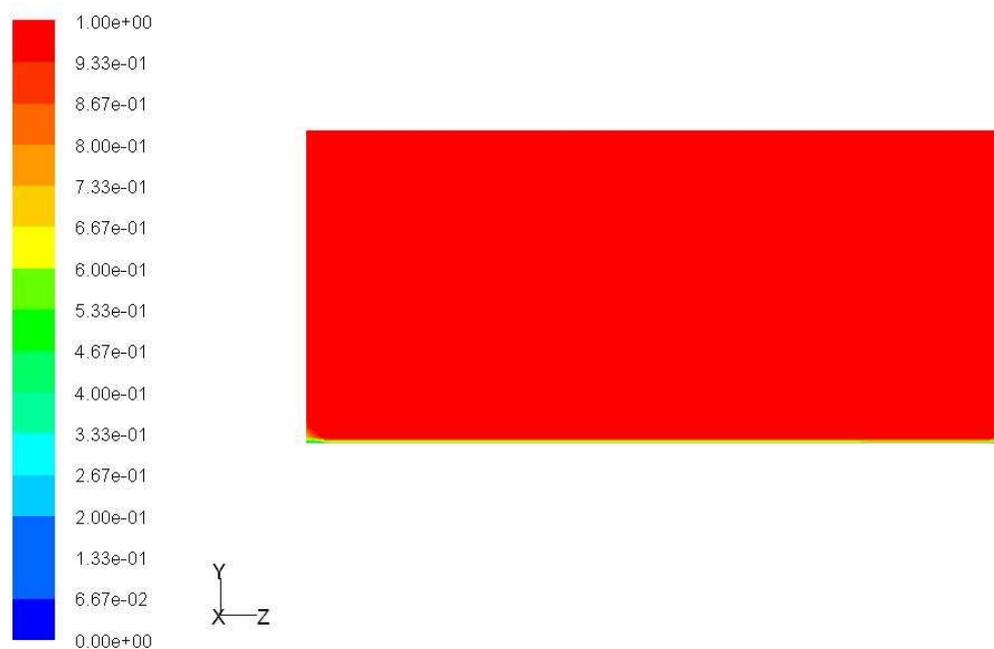


Figura 4.26 Distribución de escalar en la sección de entrada.

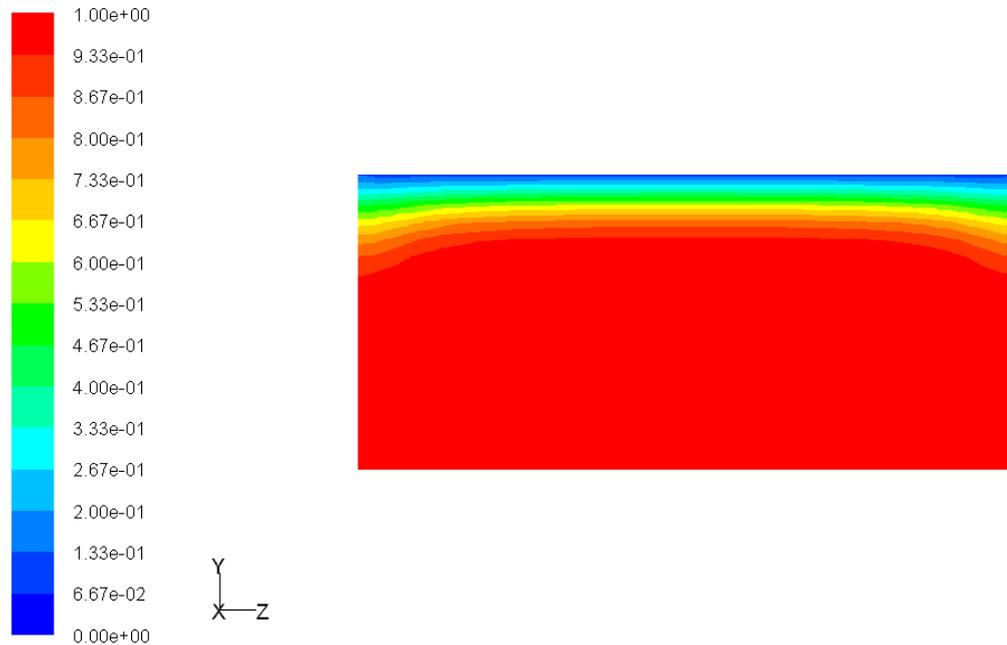


Figura 4.27 Distribución del escalar en la sección de salida en un canal de paredes lisas y pared superior reactiva.

En la figuras 4.22 y 4 .23 se puede apreciar como el consumo de escalar a lo largo del canal prácticamente solo se produce en el cuarto superior del mismo, siendo la difusión del escalar insuficiente para que este se consuma en zonas mas alejadas de la superficie reactiva. Despreciando los efectos que se producen en las esquinas y el borde inferior se puede decir que la sección de entrada que se representa en la figura 4.22 es común en todos los casos. La intención de esta figura es representar la homogeneidad en la distribución del escalar en la sección de entrada.

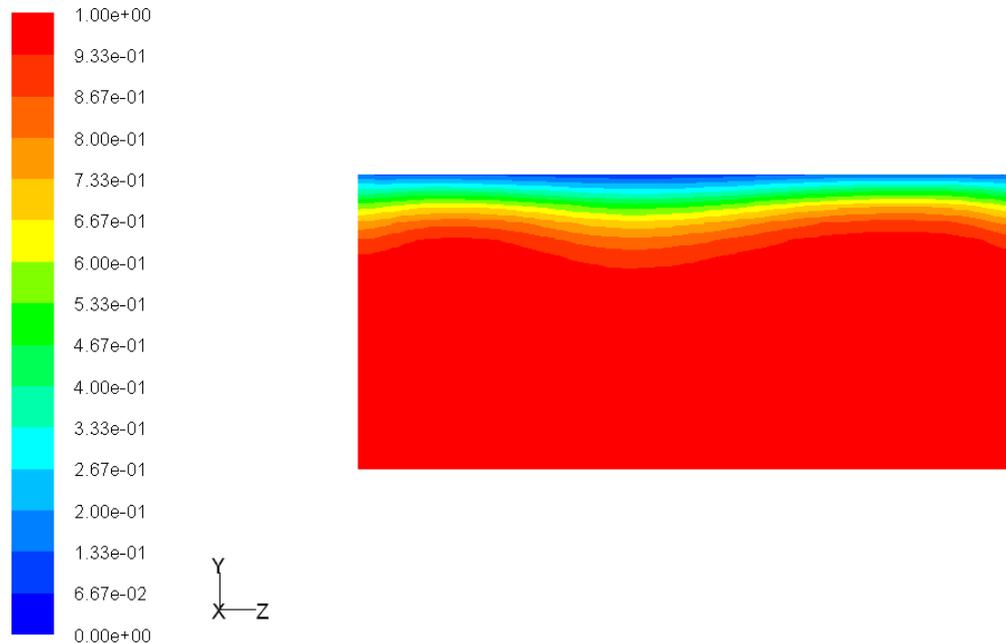


Figura 4.28 Distribución del escalar en la sección de salida en un canal sin ranuras y pared inferior reactiva.

El efecto de las ranuras en el consumo de escalar en esta configuración es mínimo, algo que se puede ver en la figura 4.24 y en la tabla 4.1. Esta baja efectividad de las ranuras no sorprende ya se ha visto en anteriores análisis de este proyecto como el movimiento de advección caótica generado por las ranuras apenas llegaba al zona más alta del canal.

Sin embargo si el consumo de escalar se produce en las cuatro paredes laterales del canal los resultados que se obtienen son mucho mejores, prueba de ello son las figuras 4.25 y 4.26 en las que se puede observar la diferencia entre la aplicación o no de las ranuras. Debido a que la difusividad empleada sigue teniendo valores bajos el escalar del centro del canal sigue sin ser consumido pero el área que este ocupa se reduce considerablemente. El fluido que es evacuado por el efecto de las ranuras hacia los laterales izquierdo y derecho del canal hace que sea en estas zonas donde se produce un mayor recorte del área de escalar sin consumir.

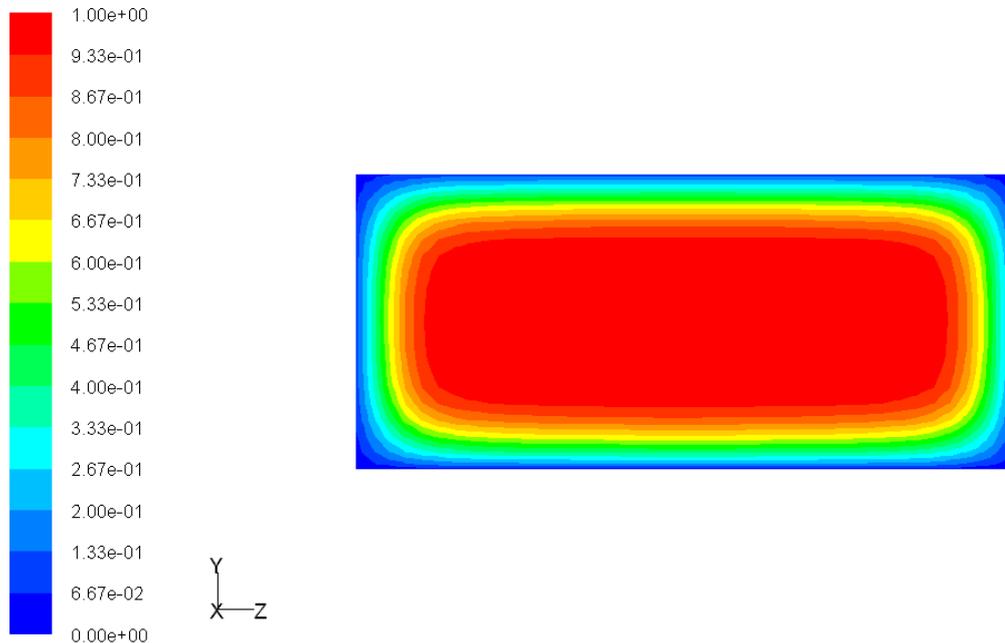


Figura 4.29 Sección de salida en un canal sin ranuras en el que la superficie reactiva la componen las cuatro paredes laterales.

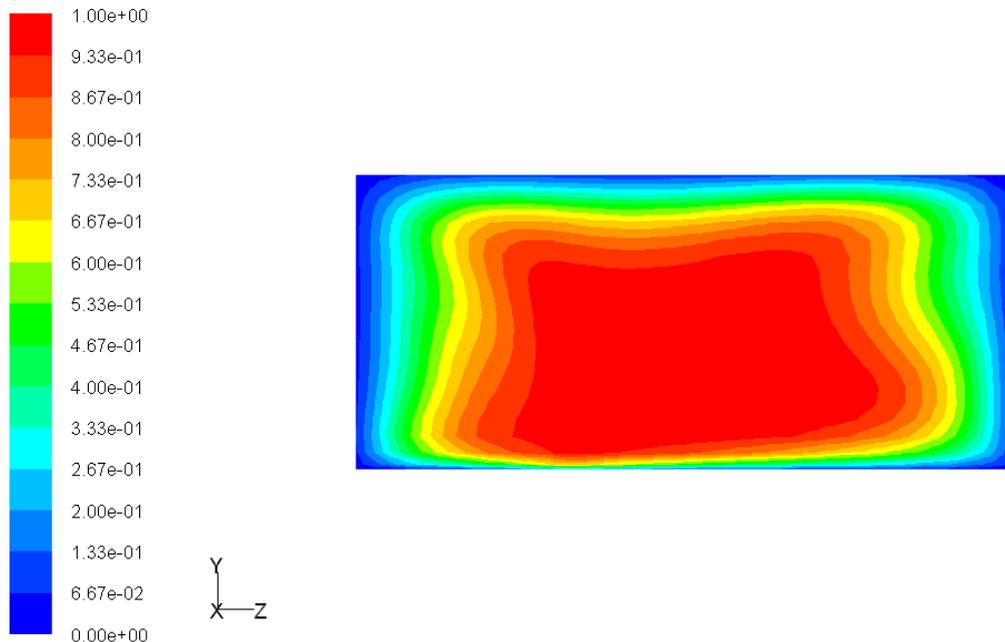


Figura 4.30 Sección de salida en un canal con ranuras con ranuras en la pared inferior y en el que la superficie reactiva la componen las cuatro paredes laterales.

El efecto de evacuación del escalar consumido hacia los laterales se puede apreciar mucho mejor en las siguientes figuras 4.27 y 4.28 correspondientes a canales en los que la superficie reactiva se encuentra únicamente en la pared inferior, por lo que en las paredes laterales izquierda y derecha no hay

consumo a pesar de lo cual son en sus proximidades donde más escalar consumido encontramos. Este es el caso en el que mayor efecto relativo tiene la superficie ranurada sobre el consumo de escalar, lo que era de esperar puesto que el efecto del campo fluido es además de evacuar el escalar consumido, impulsar el escalar sin consumir hacia la zona reactiva.

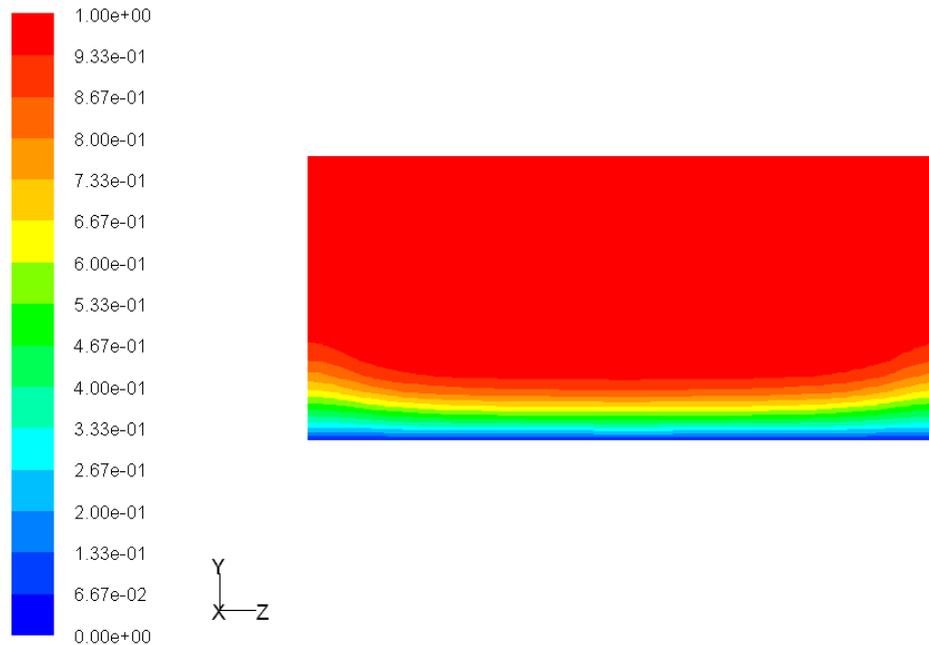


Figura 4.31 Distribución del escalar en la sección de salida en un canal con ranuras en la pared inferior y pared superior reactiva.

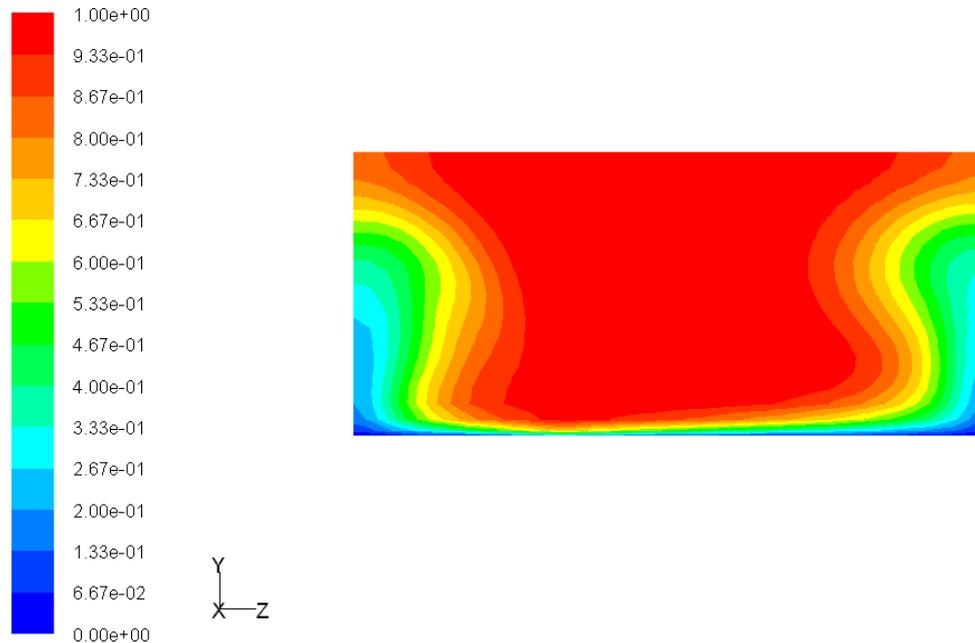


Figura 4.32 Distribución del escalar en la sección de salida en un canal con ranuras superficie reactiva en la pared inferior.

Por ultimo se incluye una tabla donde se recoge el balance de masa del escalar en las distintas configuraciones que se han analizado en este ejemplo. Como ya se advirtió con anterioridad el caso en el que el consumo de escalar se produce en la pares inferior se produce un incremento de un 172 % a favor del canal con efectos de advección caótica.

Consumos de escalar						
Caso	Consumo en el techo canal		Consumo en suelo canal		Consumo en suelo, techo y laterales	
	Sin ranuras	Con ranuras	Sin ranuras	Con ranuras	Sin ranuras	Con ranuras
sección entrada	1,796037E-07	1,796036E-07	1,799814E-07	1,799819E-07	1,792985E-07	1,792985E-07
sección salida	-1,718287E-07	-1,716714E-07	-1,720059E-07	-1,582480E-07	-1,591328E-07	-1,466139E-07
balance	7,774930E-09	7,932200E-09	7,975490E-09	2,173393E-08	2,016575E-08	3,268459E-08
% consumido	4,33%	4,42%	4,43%	12,08%	11,25%	18,23%
mejora por ranuras		2,02%		172,51%		62,08%

Tabla 4.1 Resumen con los consumos de escalar en los distintos casos.



5. Conclusiones

En la introducción ya se habló de los microcanales SHM, se describieron, se comentaron sus usos actuales y las posibles futuras aplicaciones. Por ello es importante lograr un modelo que reproduzca un canal de este tipo sin necesidad de construirlo físicamente. Este modelo permitiría adelantar los resultados que se obtendrían en un canal real en las posibles futuras aplicaciones y evaluar las posibles mejoras que se lograrían en aplicaciones actuales utilizando distintas configuraciones del canal. Se recuerda que el objeto del presente proyecto fin de carrera es precisamente el diseño, implantación y ejecución de dicho modelo. Presentados ya el diseño e implementación modelo, obtenidos y analizados los resultados es el momento de sacar conclusiones de todo ello.

Para validar el modelo, en el capítulo 4 del presente trabajo se comparan los resultados arrojados por este modelo y los que obtuvieron C.Kaplan y su equipo con el suyo, asumiendo esos resultados como buenos. Se recuerda que este estudio que se usa como referencia fue desarrollado en el Naval Reserach Laboratory entidad con mas de 80 años de experiencia y que cuneta con una plantilla de 2500 personas. Por otro lado la doctora Carolyn R. Kaplan contó con la colaboración del articulo de referencia con Elain S. Oran una de las expertas a nivel mundial de calculo computacional en mecánica de fluidos y combustión, de ahí que considere la referencia como valida. Como ya se vio la semejanza en las evoluciones del marcador al lo largo de ambos modelos es muy alta, razón por la cual se piensa que se el modelo del presente trabajo se ha diseñado, implementado y ejecutado de manera correcta y que los resultados arrojados por el pueden tomarse como validos, ya que en ambos modelos las condiciones del fluido, las dimensiones del canal, el régimen utilizado, y demás parámetros son iguales. Hubiera sido interesante haber comparado los resultados no solo de manera cualitativa si no también cuantitativa pero el problema es que en el artículo de Kaplan no se presentan resultados de este tipo. De todos modos hay que tener en cuenta que las distribuciones de escalar que se producen son bastante complejas y son fruto de un campo de velocidades concreto, no pudiendo obtenerse si no se hubiese simulado bien el canal SHM.

Una de las ventajas del modelo del presente estudio es que el esfuerzo computación que requiere es mucho mas menor que en el que modelo de



Kaplan. Mientras que los resultados modelo de este trabajo fueron obtenidos tras una hora y quince minutos aproximadamente, Kaplan emplea, para la misma resolución en las secciones transversales 10 horas de tiempo de reloj en 40 procesadores. Este ahorro se debe a la implementación de las ranuras como una condición de contorno en vez de realizar una simulación completa de ellas, lo que a su vez permite reducir a un quinto el número de celdas en la dirección axial.

De la comparación entre las dos configuraciones para las ranuras aquí estudiadas es sorprendente ver como apenas hay diferencias entre las distribuciones del escalar en ambos casos, a pesar de que los coeficientes de deslizamiento son hasta 3 veces más grandes en la configuración Kaplan, y las velocidades transversales un 30% más altas. Los dos factores a los que se atribuye tal hecho son, el incremento de la velocidad de deslizamiento en la dirección axial en el caso Kaplan, y el efecto atenuador que sufren las velocidades transversales según nos alejamos de la superficie de las velocidades de deslizamiento.

Podría surgir la duda de por que no se han comparado los resultados de la configuración Strook con el artículo de referencia correspondiente. Pues bien, los experimentos que realizó el doctor Strook fueron hechos con un canal real y marcadores fluorescentes y para presente trabajo se optó por comparar los resultados otros que también fueran producto de una simulación computacional. Además el número de Reynolds en el trabajo de Strook es distinto al empleado en el presente trabajo, y aunque como se ha visto en distintos artículos analizados en el capítulo 2, existe cierta independencia entre el grado de advección caótica y el número de Reynolds siempre y cuando este se encuentre dentro de ciertos límites, no sería riguroso comparar los resultados operando en distintas condiciones.

De los resultados de los casos con superficies reactivas hay que destacar que el mayor incremento de consumo de escalar entre un canal de paredes lisas y el canal SHM equivalente se produce cuando la superficie reactiva se sitúa en la misma pared donde están practicadas las ranuras. Por otro lado si la superficie reactiva se sitúa en la pared opuesta se ha visto que no se produce una mejoría notable en el consumo de escalar.



Por ultimo se quiere plantear las futuras actuaciones que se podrían llevar a cabo tomando como inicio este proyecto fin de carrera:

- Trabajar en la convergencia del modelo intentando que esta se produzca sin que sea necesario utilizar factores de relajación, ni tener que congelar la condiciones de contorno durante determinado número de ciclos.
- Realizar un estudio parametrico analizando el grado de advección caótica en distintas configuraciones (dimensiones del canal, dimensiones y ubicación de las ranuras, $Re...$). En esta dirección de trabajo se han encontrado los artículos "*A combinatorial approach to microfluidic Mixing*" (Howell et al.), "*Toolbox for the design of optimized microfluidic components*"(Mott et al.), "*A microfluidic mixer with grooves placed on the top and bottom of the channel* " (Howell et al.) en los que se la superficie ranurada ocupa mas de una pared y en los que los patrones de las ranuras son distintos a los empleados en este trabajo.
- Seguir desarrollando el modelo en el que existen paredes reactivas evaluando la mejora en la transferencia de masa o calor que se podría lograr usando un canal SHM frente a otro tipo de canales en aplicaciones con gradientes de concentración o temperatura. Para este último caso habría que implementar en el presente modelo los cambios necesarios para que también se tuviera en cuenta de la ecuación de la energía.



ANEXO A Código fuente de la User Defined Function.

```
#include "udf.h"
#include <stdio.h>

/* Channel geommetry */
real Hac      = 90.0e-6;      /* channel height */
real Wac      = 200.0e-6;    /* channel width */
real dagdl    = 0.0e0;      /* agdl channel thickness (for DMFCs!) */
real L_SHM    = 1.0e-3;     /* streamwise length of SHM halp-period */
real r_SHM    = 0.6666666e0; /* SHM fraction of channel width */
real l_SHM    = 106.06e-6;   /* SHM grooves wavelength */
real theta_op = 0.7854;     /* SHM grooves angle (45) */
/*real theta_op = 0.9764;    /* SHM grooves optimum angle (59.95°) */
real U_in     = 1e-2;       /* average inlet flow velocity */
real eta_a    = 0.1761;    /* along-the-grooves slip coefficient */
real eta_t    = 0.0978;    /* transverse-to-the-grooves slip coefficient */
/* see C.Y.Wang, Phys.Fluids 15(5)1114, 2003 */

/* The assumed values of eta_a/t correspond to the following groove geometry */
/* a      = 0.5 * l_m;      SHM grooves half-width (0.5*l_m) */
/* b      = 0.5 * l_m;      SHM grooves height (0.5*l_m) */

/* Numerical parameters */
real tol_newton = 1e-5;     /* admitted numerical error in inlet bc */
real iter_check = 40;      /* number of iterations between grooves wall */
/* bc update */

real relax_fac = 0.25;     /* under relaxation factor for grooves wall */
/* bc update */

int iter_x     = 0;        /* x-iterations counter variable */
int iter_z     = 0;        /* z-iterations counter variable */

/* Universal constants */
real PI        = 3.1415926535e0; /* number PI */

/*-----*/
/* #1. BOUNDARY CONDITION GENERATION IN THE CHANNEL INLET */
/*-----*/

DEFINE_PROFILE(developed_inlet_velocity, t, j)
{
    face_t f;

    int n, n_iter;

    real X[ND_ND];
    real y, z, u, u_c, Q_c;
    real eta, xi, DQ_bar, Du_bar, Q_bar, u_bar, Q_in;
    real epsilon, nPi, tol;

    if (!Data_Valid_P()) return;

    epsilon = Wac/Hac;

    /* Calculation of the dimensionless flow rate Q_bar and */
    /* characteristic flow rate Q_c = Q_in/Q_bar */
}
```



```
Q_bar = 0.0;
n = 0;
Q_in = U_in * Hac * Wac;

for(tol = 1; tol > tol_newton; tol = DQ_bar/Q_bar)
{
    DQ_bar = tanh((2*n+1)*PI*epsilon/2)/pow(2*n+1,5);
    Q_bar = Q_bar + DQ_bar;
    n = n + 1;
}
Q_bar = (4*epsilon/3)*(1 - 192/(epsilon*pow(PI,5))*Q_bar);
Q_c = Q_in/Q_bar;
u_c = 4*Q_c/(Hac*Hac);

n_iter = n;

begin_f_loop(f, t)
{
    F_CENTROID(X, f, t);
    y = X[1];
    z = X[2];
    eta = z/(Hac/2);
    xi = (y-(dagdl+Hac/2))/(Hac/2);

    u_bar = 0.0;

    /* Velocity value calculation */
    for(n = 0; n < n_iter; n++)
    {
        nPi = (2*n+1)*PI/2;
        Du_bar = pow(-1,n)*(1-cosh(nPi*eta)/cosh(nPi*epsilon))*(cos(nPi*xi)/pow(2*n+1,3));
        u_bar = u_bar + Du_bar;
    }
    u_bar = 16/pow(PI,3)*u_bar;
    u = u_c*u_bar;

    F_PROFILE(f, t, j) = u;
}
end_f_loop(f, t)
}

DEFINE_PROFILE(flat_inlet_velocity, t, j)
{
    face_t f;

    if (!Data_Valid_P()) return;

    begin_f_loop(f, t)
    {
        F_PROFILE(f, t, j) = U_in;
    }
    end_f_loop(f, t)
}

DEFINE_PROFILE(scalar_0_inlet_profile, t, j)
{
    face_t f;
```



```
real z;
real X[ND_ND];

if (! Data_Valid_P()) return;

begin_f_loop(f, t)
{
  F_CENTROID(X, f, t);
  z = X[2];
  if ( z > 0.0)
    F_PROFILE(f, t, j) = 1.0;
  else
    F_PROFILE(f, t, j) = 0.0;
}
end_f_loop(f, t)
}

DEFINE_PROFILE(scalar_1_inlet_profile, t, j)
{
  face_t f;
  real y;
  real X[ND_ND];

  if (! Data_Valid_P()) return;

  begin_f_loop(f, t)
  {
    F_CENTROID(X, f, t);
    y = X[1];
    if (y > Hac/2)
      F_PROFILE(f, t, j) = 1.0;
    else
      F_PROFILE(f, t, j) = 0.0;
  }
  end_f_loop(f, t)
}

/*-----*/
/* #2. CALCULATION OF theta AND WALL VELOCITY GRADIENTS AT THE */
/*                               GROOVED WALL                       */
/*-----*/
DEFINE_ON_DEMAND(init_grooves)
{
  Domain *d;
  Thread *t, *t0;
  FILE *fp;
  cell_t c0;
  face_t f;

  real l_m      = l_SHM/2;          /* SHM grooves half-wavelength (l_SHM/2) */

  real face_area, mu, x, y, z, y0, theta;
  real shear_force_x, shear_force_z, shear_stress_x, shear_stress_z;
  real dudy_s, dudy_l, dwdy_s, dwdy_l;
  real u_l_x, u_l_z, u_s_x, u_s_z, u_0, u_wall, w_0, w_wall;

  real XX[ND_ND], XX0[ND_ND];
```



```
int Zone_ID = 4; /* Zone ID corresponding to the grooved wall where we calculate */
                /* viscous stress, as obtained from the bc panel */

d = Get_Domain(1);
t = Lookup_Thread(d,Zone_ID);

/*Open data file theta.txt to store in there theta values*/
fp = fopen("theta.txt", "w" );
fprintf(fp, " X   Z   THETA\n");

begin_f_loop(f, t)
{
    c0 = F_C0(f, t);
    t0 = THREAD_T0(t);

    /* Calculates face area */
    F_AREA(XX, f, t);
    face_area = NV_MAG(XX);

    /* Calculates viscosity at the cell adjacent to the face */
    mu = C_MU_L(c0, t0);

    /* Calculates face and adjacent cell coordinates */
    F_CENTROID(XX, f, t);
    C_CENTROID(XX0, c0, t0);
    x = XX[0];
    y = XX[1];
    z = XX[2];
    y0 = XX0[1];

    /* Calculates theta and stores it in UDMI(10) */
    if (sin(PI*x/L_SHM) >= 0 && z <= Wac * (r_SHM - 0.5))
        theta = - theta_op;
    else if (sin(PI*x/L_SHM) < 0 && z <= Wac * (0.5 - r_SHM))
        theta = - theta_op;
    else
        theta = theta_op;

    C_UDMI(c0, t0, 1) = theta;
    F_UDMI(f, t, 1) = theta;

    /* print theta values in theta.txt*/
    fprintf(fp, "%G %G %G\n", x,z,C_UDMI(c0,t0,1));
}
end_f_loop(f, t)

fclose(fp);

iter_x = 0;
iter_z = 0;
}
```



```
/*=====*/
/* #3. BOUNDARY CONDITION AT THE GROOVED WALL (CHANNEL TOP) */
/*=====*/

DEFINE_PROFILE(wall_x_velocity, t, p)
{
    cell_t c0;
    Thread *t0;
    face_t f;
    FILE *fp;
    real XX[ND_ND], XX0[ND_ND];
    real face_area, mu, x, y, z, theta, Uy, Wy, aux_u_x;
    real shear_stress_x, shear_stress_z, shear_force_x, shear_force_z;
    real l_m = l_SHM/2; /* half SHM grooves wavelength */

    /* Iteration counter */
    iter_x = iter_x + 1;

    /*Open data file wall_x_velocity.txt to store velocity values*/
    fp = fopen("wall_x_velocity.txt", "w" );
    fprintf(fp, " X Z Wall_x_velocity \n");

    begin_f_loop(f, t)
    {
        c0 = F_C0(f, t);
        t0 = THREAD_T0(t);

        /* Calculates face coordinates */
        F_CENTROID(XX, f, t);
        x = XX[0];
        y = XX[1];
        z = XX[2];

        /* Retrieves theta from stored value */
        theta = C_UDMI(c0,t0,1);

        /* Boundary condition calculation runs every "iter_check" iterations */
        if (iter_x == iter_check)
        {
            /* Calculates face area */
            F_AREA(XX, f, t);
            face_area = NV_MAG(XX);

            /* Calculates viscosity at the cell adjacent to the face */
            mu = C_MU_L(c0, t0);

            /* Calculates wall velocity gradients using shear forces */
            shear_force_x = -F_STORAGE_R_N3V(f, t, SV_WALL_SHEAR)[0];
            shear_force_z = -F_STORAGE_R_N3V(f, t, SV_WALL_SHEAR)[2];
            shear_stress_x = shear_force_x/face_area;
            shear_stress_z = shear_force_z/face_area;
            Uy = shear_stress_x/mu;
            Wy = shear_stress_z/mu;
        }
    }
}
```



```
        /* Calculates effective x slip velocity generated by the grooves */
        aux_u_x = (l_m)*(Uy*(eta_a*cos(theta)*cos(theta)+eta_t*sin(theta)*sin(theta)) +
Wy*((eta_a-eta_t)*sin(theta)*cos(theta)));

    /* Stores updated z slip velocity in F_UDMI(2) with underrelaxation factor
relax_fac */
    F_UDMI(f, t, 2) = F_UDMI(c0, t0, 2) + relax_fac*(aux_u_x - F_UDMI(c0, t0, 2));

    C_UDMI(c0, t0, 2) = C_UDMI(c0, t0, 2) + relax_fac*(aux_u_x - C_UDMI(c0, t0, 2));

}
F_PROFILE(f, t, p) = C_UDMI(c0,t0,2);

/* print wall_x_velocity values in wall_x_velocity.txt*/
fprintf(fp, "%G %G %G\n", x,z,C_UDMI(c0,t0,2));
}
end_f_loop(f, t)

/* iter_x counter inicialization */
if (iter_x >= iter_check)
{
    printf("\n Updating effective x slip velocity at grooves wall ... ");
    iter_x = 0;
}

fclose(fp);
}

DEFINE_PROFILE(wall_z_velocity, t, p)
{
    cell_t c0;
    Thread *t0;
    face_t f;
    FILE *fp;
    real XX[ND_ND], XX0[ND_ND];
    real face_area, mu, x, y, z, theta, Uy, Wy, aux_u_z;
    real shear_stress_x, shear_stress_z, shear_force_x, shear_force_z;
    real l_m = l_SHM/2; /* half SHM grooves wavelength */

    /* Iteration counter */
    iter_z = iter_z + 1;

    /*Open data file wall_z_velocity.txt to store velocity values*/
    fp = fopen("wall_z_velocity.txt", "w" );
    fprintf(fp, " X   Z   Wall_z_velocity \n");

    begin_f_loop(f, t)
    {
        c0 = F_C0(f, t);
        t0 = THREAD_T0(t);

        /* Calculates face coordinates */
        F_CENTROID(XX, f, t);
        x = XX[0];
        y = XX[1];
        z = XX[2];
    }
}
```



```
/* Retrieves theta from stored value */
theta = C_UDMI(c0,t0,1);

/* Updates grooves wall boundary condition every iter_check iterations */
if (iter_z == iter_check)
{
    /* Calculates face area */
    F_AREA(XX, f, t);
    face_area = NV_MAG(XX);

    /* Calculates viscosity at the cell adjacent to the face */
    mu = C_MU_L(c0, t0);

    /* Calculates wall velocity gradients using shear forces */
    shear_force_x = -F_STORAGE_R_N3V(f, t, SV_WALL_SHEAR)[0];
    shear_force_z = -F_STORAGE_R_N3V(f, t, SV_WALL_SHEAR)[2];
    shear_stress_x = shear_force_x/face_area;
    shear_stress_z = shear_force_z/face_area;
    Uy = shear_stress_x/mu;
    Wy = shear_stress_z/mu;

    /* Calculates effective z slip velocity from wall shear stress */
    aux_u_z = (l_m)*(Wy*(eta_t*cos(theta)*cos(theta)+eta_a*sin(theta)*sin(theta)) +
    Uy*((eta_a-eta_t)*sin(theta)*cos(theta)));

    /* Stores updated z slip velocity in F_UDMI(3) with underrelaxation factor
    relax_fac */
    F_UDMI(f, t, 3) = F_UDMI(c0, t0, 3) + relax_fac*(aux_u_z - F_UDMI(c0, t0, 3));
    C_UDMI(c0, t0, 3) = C_UDMI(c0, t0, 3) + relax_fac*(aux_u_z - C_UDMI(c0, t0, 3));
}
F_PROFILE(f, t, p) = C_UDMI(c0, t0, 3);

/* print wall_z_velocity values in wall_z_velocity.txt*/
fprintf(fp, "%G %G %G\n", x,z,C_UDMI(c0,t0,3));
}
end_f_loop(f, t)

/* iter_z counter inicialization */
if (iter_z >= iter_check)
{
    printf("\n Updating effective z slip velocity at grooves wall ... \n\n");
    iter_z = 0;
}

fclose(fp);
}
```



ANEXO B SUMMARY REPORT de Fluent.

A continuación se presenta el summary report extraído directamente de Fluent donde se resumen todas las propiedades del caso con configuración de ranuras tipo NRL sin haberse realizado el refinamiento de la malla. El resto de casos aquí estudiados cuentan con características similares, haciéndose notar a lo largo de este proyecto los cambios particulares que cada una de ellas. Por ello y por la larga extensión del summary report se ha decidido solo presentar el correspondiente a este caso.



Summary_Report.txt

FLUENT
 Version: 3d, dp, pbns, lam (3d, double precision, pressure-based, laminar)
 Release: 6.3.26
 Title:

Models

Model	Settings
Space	3D
Time	Steady
Viscous	Laminar
Heat Transfer	Disabled
Solidification and Melting	Disabled
Species Transport	Disabled
Coupled Dispersed Phase	Disabled
Pollutants	Disabled
Pollutants	Disabled
Soot	Disabled

Boundary Conditions

Zones

name	id	type
fluid	2	fluid
wall.6	3	wall
wall.5	4	wall
wall.4	5	wall
wall.3	6	wall
outflow.2	7	outflow
velocity_inlet.1	8	velocity-inlet
default-interior	10	interior

Boundary Conditions

fluid

Condition	Value
-----------	-------

Material Name	water-liquid
Specify source terms?	no
Source Terms (x-momentum) (y-momentum) (z-momentum) (uds-0))	((mass)
Specify fixed values?	no
Local Coordinate System for Fixed Velocities	no
Motion Type	0
X-velocity Of Zone (m/s)	0
Y-velocity Of Zone (m/s)	0
Z-velocity Of Zone (m/s)	0
Rotation speed (rad/s)	0
X-Origin of Rotation-Axis (m)	0



Y-Origin of Rotation-Axis (m)	0
Z-Origin of Rotation-Axis (m)	0
X-Component of Rotation-Axis	0
Y-Component of Rotation-Axis	0
Z-Component of Rotation-Axis	1
Deactivated Thread	no
Porous zone?	no
Conical porous zone?	no
X-Component of Direction-1 Vector	1
Y-Component of Direction-1 Vector	0
Z-Component of Direction-1 Vector	0
X-Component of Direction-2 Vector	0
Y-Component of Direction-2 Vector	1
Z-Component of Direction-2 Vector	0
X-Component of Cone Axis Vector	1
Y-Component of Cone Axis Vector	0
Z-Component of Cone Axis Vector	0
X-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	1
Y-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Z-Coordinate of Point on Cone Axis (m)	0
Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
Relative Velocity Resistance Formulation?	yes
Direction-1 Viscous Resistance (1/m ²)	0
Direction-2 Viscous Resistance (1/m ²)	0
Direction-3 Viscous Resistance (1/m ²)	0
Choose alternative formulation for inertial resistance?	no
Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0
C0 Coefficient for Power-Law	0
C1 Coefficient for Power-Law	0
Porosity	1

wall.6

Condition	Value
Enable shell conduction?	no
Wall Motion	0
Shear Boundary Condition	0
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes



```

Apply a rotational velocity to this wall?          no
Velocity Magnitude (m/s)                          0
X-Component of Wall Translation                    1
Y-Component of Wall Translation                    0
Z-Component of Wall Translation                    0
Define wall velocity components?                   no
X-Component of Wall Translation (m/s)              0
Y-Component of Wall Translation (m/s)              0
Z-Component of Wall Translation (m/s)              0
                                                    (0)
                                                    value
Rotation Speed (rad/s)                            0
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)             0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)             0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)             0
X-Component of Rotation-Axis Direction            0
Y-Component of Rotation-Axis Direction            0
Z-Component of Rotation-Axis Direction            1
X-component of shear stress (pascal)               0
Y-component of shear stress (pascal)               0
Z-component of shear stress (pascal)               0
Specularity Coefficient                            0

wall.5
Condition                                          Value
-----
--
Enable shell conduction?                          no
Wall Motion                                        1
Shear Boundary Condition                          0
Define wall motion relative to adjacent cell zone? yes
Apply a rotational velocity to this wall?          no
Velocity Magnitude (m/s)                          0
X-Component of Wall Translation                    1
Y-Component of Wall Translation                    0
Z-Component of Wall Translation                    0
Define wall velocity components?                   yes
X-Component of Wall Translation (m/s)              (profile udf
all_x_velocity)
Y-Component of Wall Translation (m/s)              0
Z-Component of Wall Translation (m/s)              (profile udf
all_z_velocity)
                                                    (0)
profile )))
Rotation Speed (rad/s)                            0
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)             0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)             0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)             0

```



X-Component of Rotation-Axis Direction	0
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1
X-component of shear stress (pascal)	0
Y-component of shear stress (pascal)	0
Z-component of shear stress (pascal)	0
Specularity Coefficient	0

wall.4

Condition	Value
Enable shell conduction?	no
Wall Motion	0
Shear Boundary Condition	0
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes
Apply a rotational velocity to this wall?	no
Velocity Magnitude (m/s)	0
X-Component of wall Translation	1
Y-Component of wall Translation	0
Z-Component of wall Translation	0
Define wall velocity components?	no
X-Component of wall Translation (m/s)	0
Y-Component of wall Translation (m/s)	0
Z-Component of wall Translation (m/s)	0
	(0)
	value
Rotation Speed (rad/s)	0
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
X-Component of Rotation-Axis Direction	0
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1
X-component of shear stress (pascal)	0
Y-component of shear stress (pascal)	0
Z-component of shear stress (pascal)	0
Specularity Coefficient	0

wall.3

Condition	Value
Enable shell conduction?	no
Wall Motion	0
Shear Boundary Condition	0
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes
Apply a rotational velocity to this wall?	no
Velocity Magnitude (m/s)	0
X-Component of wall Translation	1
Y-Component of wall Translation	0
Z-Component of wall Translation	0
Define wall velocity components?	no
X-Component of wall Translation (m/s)	0
Y-Component of wall Translation (m/s)	0
Z-Component of wall Translation (m/s)	0
	(0)
	value
Rotation Speed (rad/s)	0
X-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (m)	0



```
Z-Position of Rotation-Axis Origin (m)      0
X-Component of Rotation-Axis Direction      0
Y-Component of Rotation-Axis Direction      0
Z-Component of Rotation-Axis Direction      1
X-component of shear stress (pascal)        0
Y-component of shear stress (pascal)        0
Z-component of shear stress (pascal)        0
Specularity Coefficient                     0
```

outflow.2

```
Condition      Value
-----
Flow rate weighting  1
                  (0)
                  value
```

velocity_inlet.1

```
Condition      Value
-----
Velocity Specification Method      2
Reference Frame                     0
Velocity Magnitude (m/s)           (profile udf
developed_inlet_velocity)
Coordinate System                   0
X-Velocity (m/s)                   0
Y-Velocity (m/s)                   0
Z-Velocity (m/s)                   0
X-Component of Flow Direction      1
Y-Component of Flow Direction      0
Z-Component of Flow Direction      0
X-Component of Axis Direction      1
Y-Component of Axis Direction      0
Z-Component of Axis Direction      0
X-Coordinate of Axis Origin (m)    0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)    0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)    0
Angular velocity (rad/s)           0
                                     (1)
                                     (((profile udf
scalar_0_inlet_profile) (constant . 0)))
is zone used in mixing-plane model? no
```

default-interior

```
Condition      Value
```



Solver Controls

Equations

Equation	Solved
Flow	no
User Scalar 0	yes

Numerics

Numeric	Enabled
Absolute Velocity Formulation	yes

Relaxation

Variable	Relaxation Factor
Pressure	0.30000001
Density	1
Body Forces	1
Momentum	0.69999999
User Scalar 0	1

Linear Solver

Variable	Solver Type	Termination Criterion	Residual Reduction Tolerance
Pressure	V-Cycle	0.1	
X-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.7
User Scalar 0	Flexible	0.1	0.7

Pressure-Velocity Coupling

Parameter	Value
Type	SIMPLE

Discretization Scheme

Variable	Scheme
Pressure	Standard
Momentum	Second Order Upwind
User Scalar 0	Second Order Upwind

Solution Limits

Quantity	Limit
Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10
Minimum Temperature	1
Maximum Temperature	5000

Material Properties

Material: water-liquid (fluid)

Property	Units	Method	Value(s)
----------	-------	--------	----------



Density	kg/m ³	constant	998.20001
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	4182
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.6
Viscosity	kg/m-s	constant	0.001003
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.0152
L-J Characteristic Length	angstrom	constant	0
L-J Energy Parameter	k	constant	0
Thermal Expansion Coefficient	1/k	constant	0
Degrees of Freedom		constant	0
UDS Diffusivity (constant . 1))	kg/m-s	defined-per-uds	((uds-1
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: aluminum (solid)

Property	Units	Method	Value(s)
Density	kg/m ³	constant	2719
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	871
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	202.4



Bibliografía

1. **A Barrier Embedded Chaotic Micromixer**, Dong Sung Kim, Seok Woo Lee, Tai Hun Kwon y Seung S. Lee, *Journal micromechanics. and microengineering*, 14, 798–805, 2004.
2. **A combinatorial approach to microfluidic Mixing**, Peter B Howell Jr, David R. Mott, Frances S Ligler, Joel P Golden, Carolyn R Kaplan y Elaine S Oran, *J. micromechanics microengineering*, 18, 115019, 2008.
3. **A microfluidic mixer with grooves placed on the top and bottom of the Channel**, Peter B. Howell, Jr., David R. Mott, Stephanie Fertig, Carolyn R. Kaplan, Joel P. Golden, Elaine S. Oran y Frances S. Ligler, *Lab Chip*, 5, 524–530, 2005.
4. **A microfluidic nanoliter mixer with optimized grooved structures driven by capillary pumping**, C. F. Chen, C. F. Kung, H. C. Chen, C C Chu, C. Chang y F. G. Tseng, *Journal micromechanics. and microengineering*, 16,1358–1365, 2006.
5. **An Introduction to Chaotic Advection**, Julyan H. E. Cartwright, Mario Feingold, y Oreste Piro, *Mixing: Chaos and Turbulence*, Eds. H. Chat´e, E.Villermaux, & J. M. Chomez, Kluwer, 307–342, 1999
6. **Aplication of FCT to incompressible Flow**, Junhui Lui Carolyn R. Kaplan, David R. Mott, Elaine S. Oran. Naval Research Laboratory report, 2006.
7. **CFD Online**, <http://www.cfd-online.com/>.
8. **Chaotic Advection in a Mixer with changing Geometry**, Stephen M. Cox, Matthew D. Finn, http://fluid.ippt.gov.pl/ictam04/text/sessions/docs/FM22/10497/FM22_10497.pdf
9. **Chaotic Mixer for Microchannels**, Abraham D. Stroock, Stephan K. W. Dertinger, Armand Ajdari, Igor Mezic Howard A. Stone, George M. Whitesides, *Science Magazine*, Vol 25, 647-651, 2002.



10. **Computations of Chaotic Flows in micromixers**, Carolyn R. Kaplan, Junhui Lui, David R. Mott, Elaine S. Oran. Naval Research Laboratory report, 2006
11. **Experimental test of scaling of mixing by chaotic advection**, Helen Song, Michelle R. Bringer, Joshua D. Tice, Cory J. Gerdtz, and Rustem F. Ismagilov, Applied physics letters Vol. 83, Nº. 22, 2006.
12. **Flow over a Surface with parallel groves** , C.Y.Wang , Physics of Fluids, Vol. 15, Nº 5, 1114-1121, 2003.
13. **Fluent 6.3 Documentation.**
14. **Foundations of Chaotic mixing**, Stephen Wiggins y Julio M. Ottino, The Royal Society, 362, 937–970, 2004.
15. **Introduction: mixing in microfluidics**, Stephen Wiggins y Julio M. Ottino, The Royal Society, 362, 923–935, 2004.
16. **Investigation of the convective motion through a staggered herringbone at low Reynolds number flow**, D.G. Hassell, W.B. Zimmerman, Chemical Engineering Science, 61, 2977–2985, 2006
17. **Investigation of the staggered herringbone mixer with a simple analytical model**, Abraham D. Stroock y Gregory J. McGraw, The Royal Society, 362, 971–986, 2004.
18. **Mass transfer to reactive boundaries from steady three-dimensional flows in microchannels**, Joseph D. Kirtland, Gregory J. McGraw, Abraham D. Stroock, Physics of Fluids, 18, 073602, 2006.
19. **Mecánica de Fluidos**, A. Liñan, ETSI Aeronáuticos, Sección de Publicaciones, 1967.
20. **Micromixers-a review**, Nam-Trung Nguyen y Zhigang Wu, Journal micromech. and microengineering, R1–R16, 2005.
21. **Mixing, Chaotic Advection and Turbulence**, Julio M. Ottino, Annual Reviews. Fluid Mech, 22, 1990.



-
22. **Passive magnetic separator integrated with microfluidic mixer: demonstration of enhanced capture efficiency**, T. Lund-Olesen, H. Bruus, and M.F. Hansen, publicado en el congreso Electro Mechanical Systems, 2006.
 23. **Staggered passive micromixers with fractal surface patterning**, Marco Camesasca, Miron Kaufman y Ica Manas-Zloczower, Journal micromech. and microengineering, 16, 2298–2311, 2006.
 24. **Two fluid mixing in a microchannel**, Ying Zheng Liu, Byoung Jae, Kim, Hyung Jin Sung, Inter. Journal of heat and fluid flow, 25 ,986–995, 2004.