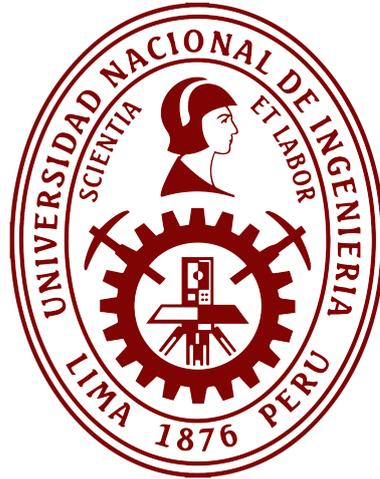


UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA
FACULTAD DE CIENCIAS



TESIS

**“DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UNA METODOLOGÍA
BASADA EN OPENFOAM PARA LA SIMULACIÓN EN
DISPOSITIVOS POR VOLÚMENES FINITOS DE
MEZCLADORES EN DISPOSITIVOS LAB ON A CHIP”**

**PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL DE:
INGENIERO FÍSICO**

ELABORADO POR:

ANDERSSON ANDREÉ ROMERO DEZA

ASESOR:

DR. GERMÁN YURI COMINA BELLIDO

LIMA - PERÚ

2022

Lista de Símbolos

Símbolo	Unidades	Descripción
δ	[m]	Diferencial de longitud
ρ	[kg/m ³]	Densidad
u	[m/s]	Velocidad en la dirección X
v	[m/s]	Velocidad en la dirección Y
w	[m/s]	Velocidad en la dirección Z
\vec{U}	[m/s]	Vector velocidad
τ_{ij}	[N/m]	Tensión viscosa
p	[Pa]	Presión
Γ	[cm ² /s]	Coefficiente de difusividad
Re	-	Número de Reynolds
We	-	Número de Weber
Bo	-	Número de Bond
Pe	-	Número de Péclet
Sc	-	Número de Schmidt
T	[°C]	Temperatura
k	[W/(mK)]	Conductividad térmica
A	[m ²]	Área
Φ	-	Campo de transporte a desarrollar

Agradecimientos

Este trabajo está dedicado a mis padres, Elizabeth y Jaime, quiénes con mucho esfuerzo me permitieron estudiar. A mis abuelos, Elsa y Teodulo, quiénes me educaron los primeros años de mi vida. Así también, a mi asesor German Comina quien con su guía pude encontrar mi camino en la microfluídica y a cada persona que me ayudó a crecer en este largo camino. Como mi compañera de vida Kriss.

Resumen

En el presente trabajo de tesis se desarrolla y valida una metodología para la simulación del comportamiento de fluidos en estructuras de dispositivos Lab-On-a-Chip (LOC) para microfluídica haciendo uso del paquete computacional de código abierto OpenFOAM® por medio del script basado en el método SIMPLE. El primer LOC tiene un mezclador en Y simple de 0.375 mm^2 de área transversal y el segundo es un mezclador caótico en Y con un área similar al anterior.

Para validar la simulación, se fabricaron los dispositivos LOC, imprimiendo los diseños con una impresora 3D fotolitográfica Anycubic Photon 2k LCD. Así mismo, se desarrolló un equipo de control de flujo utilizando un microcontrolador y otro de toma de imágenes para caracterizar experimentalmente la mezcla en los dispositivos LOC.

Se inyectaron flujos de 0.025 mm/s , 0.050 mm/s y 0.075 mm/s , tanto en la simulación con OpenFOAM y en los dispositivos reales. A través del procesamiento digital de imágenes, se calculó la desviación estándar en MATLAB y Python para hallar una correlación en la mezcla. Se encontró que para todos los flujos inyectados, la estructura del mezclador caótico permitió una mezcla total de los dos líquidos de entrada dentro del LOC. Y en el mezclador con estructura simple solo obtuvo una mezcla parcial, observándose flujo laminar hasta la salida de la estructura.

Abstract

This thesis work develops and validates a methodology for the simulation of fluid behaviour in Lab-On-a-Chip (LOC) device structures for microfluidics using the open source computational package OpenFOAM by means of a script based on the SIMPLE method. The CAD design of two LOC devices for microfluidics was carried out. The first LOC has a simple structure mixer with a cross-sectional area of 0.375 mm^2 and the second one is a chaotic mixer with a similar area to the previous one.

To validate the simulation, the LOC devices were fabricated by printing the designs with an Anycubic Photon 2k LCD photolithographic 3D printer. In addition, a flow control unit was developed using a microcontroller and an image acquisition unit to experimentally characterise the mixture in the LOC devices.

Flows of 0.025 mm/s , 0.050 mm/s and 0.075 mm/s were injected both in the OpenFOAM simulation and in the real devices. Through digital image processing, the standard deviation was calculated in MATLAB and Python to find a correlation in the mixture. It was found that for all flows, the chaotic mixer structure allowed a total mixing of the two input liquids within the LOC. And in the mixer with simple structure only partial mixing was obtained, observing laminar flow up to the exit of the structure.

Índice general

Lista de Símbolos	I
Agradecimientos	II
Resumen	III
Abstract	IV
1. Introducción	1
1.1. Justificación	1
1.2. Objetivos	2
1.2.1. Objetivo Principal	2
1.2.2. Objetivos Secundarios	2
2. Fundamento Teórico	3
2.1. Lab On A Chip	3
2.1.1. Generalidades	3
2.1.2. Técnicas de Fabricación	5
2.1.3. Micromezcladores	10
2.2. Mecánica de Fluidos	15
2.2.1. Ecuaciones de Fluidos	15
2.2.2. Constantes adimensionales en teoría de Fluidos	22
2.2.3. Ecuaciones Multifase	25
2.3. Método de Volúmenes Finitos y OpenFOAM	26
2.3.1. Método de Volúmenes Finitos	26

2.3.2.	OpenFOAM	29
2.4.	Conclusiones	33
3.	Simulaciones	35
3.1.	Modelamiento	35
3.1.1.	Diseño de la geometría	35
3.1.2.	SimpleFOAM	37
3.1.3.	Condiciones de frontera	37
3.1.4.	Parámetros	42
3.1.5.	Mallado	43
3.1.6.	ParaView	44
3.2.	Resultados obtenidos de la simulación	44
3.2.1.	Influencia del mallado en la simulación	45
3.2.2.	Influencia de la velocidad en la simulación	49
3.3.	Método para la cuantificación de la mezcla en los LOCs simulados y experimentales	52
3.4.	Conclusiones	55
4.	Sistema Experimental	57
4.1.	Descripción del sistema experimental	57
4.2.	Sistema de impresión 3D en resina	58
4.2.1.	Componentes del sistema de impresión	58
4.2.2.	Proceso de impresión, limpieza y curación	59
4.3.	Sistema de bombas de jeringas	61
4.3.1.	Subsistema Mecánico	61
4.3.2.	Subsistema Flúidico	62
4.4.	Sistema de adquisición de datos	63
4.5.	Conclusiones	64
5.	Resultados experimentales y Conclusiones Finales	65
5.1.	Descripción del experimento	65
5.2.	Estudio de la mezcla de fluidos en micromezcladores	66
5.2.1.	Cuantificación de la mezcla mediante procesamiento de imágenes	67

5.2.2. Comparación entre los resultados de la simulación y experimentales	69
5.3. Conclusiones	73
Bibliografía	75
Apéndice A	79
Código Python 1D Convección	79
Código OpenFOAM Convección	81
Apéndice B	87
Física de Poiseuille	87
Resultados OpenFOAM	88
Código Fluido de Poiseuille	90
Apéndice C	94
Microcanal de prueba	94
Código MATLAB	95
Análisis de datos de posición & tiempo	97
Velocidad 0.025 mm/s	97
Velocidad 0.050 mm/s	98
Velocidad 0.075 mm/s	98
Apéndice D	100
Microcanal de prueba	100
Interpretación de las imágenes	101
Apéndice E	104
Código de mezcla de fluidos en OpenFOAM	104

Índice de figuras

2.1. Representación de los sistemas Lab-On-a-Chip y un laboratorio tradicional.	4
2.2. Sistema de nanocables de silicio para la detección de biomarcadores cardiacos. (a) Chip matriz de dispositivo de nanocables de silicio (SiNW), integrado con un sistema de microfluídica para el intercambio de fluidos. (b) Esquema del diseño de la matriz de dispositivos SiNW en el chip. (c) Imagen SEM de un grupo de nanocables. [9]	6
2.3. Red de válvulas microfluídicas. [15]	6
2.4. Red de válvulas PDMS integradas a gran escala. (Parte superior) Válvulas abiertas y (parte intermedia) cerradas de 8×8 y $6 \times 6 \mu m^2$. (Parte inferior) demostración de válvulas dependientes de la geometría; el canal de flujo de la izquierda está cerrado mientras que el de la derecha permanece abierto cuando el ancho del canal de control es de $4 \mu m$. [6].	8
2.5. Dispositivos a base de papel. a) Bioensayo en un chip de papel [22]. b) Fabricación de canales multicapa [23].	9
2.6. Diagrama de una impresora 3D de resina en base a DLP [12].	10
2.7. Perturbación Electrohidrodinámica. El canal de mezcla mide 30 mm de largo, $250 \mu m$ de ancho y $250 \mu m$ de profundidad. [25]	11
2.8. Perturbación Dielectroforética [25]	12
2.9. Ilustración de una burbuja atrapada dentro de la estructura de <i>horse-shoe</i> y patrón de flujo alrededor de la membrana de la burbuja en presencia de ondas acústicas. [5]	13
2.10. Micromezclador de Enfoque Hidrodinámico. [19]	14

2.11. Experimento de micromezclador de gotas. Las gotas al moverse en un microcanal sinuosoidal mejora la mezcla. [29]	14
2.12. Micromezclador de Convección Caótica. A) Detalles del diseño del micromezclador. B) Mezclador de difusión profunda de $500 \mu\text{m}$ que muestra la mezcla de fluoresceína 1 mM con rodamina $B 1 \text{ mM}$ a $30 \frac{\mu\text{m}}{\text{min}}$. [5]	15
2.13. Entrada y salida de masa en un elemento de fluido. [31]	16
2.14. Componente de la tensión en las caras de un elemento de fluido. [31].	18
2.15. Componente de la tensión en la dirección x [31].	19
2.16. Esquema del flujo sobre una placa plana que muestra los regímenes del flujo: laminar, de transición y turbulento según el valor de Re [24].	22
2.17. Representación de un flujo impulsado en una cavidad cuadrada de lado L generado por la velocidad U impartida a su pared superior [24].	23
2.18. Isoconcentraciones de valores crecientes del número de Schmidt para la transferencia de masa por convección natural en el anillo entre cilindros horizontales concéntricos de secciones transversales rómbicas con mayor concentración de soluto en la pared interior [24].	24
2.19. Varilla unidimensional [31].	26
2.20. Volumen de control entorno a P [31].	27
2.21. Comparación entre la solución numérica y la solución analítica.	29
2.22. Resultado visual de la conductividad en una varilla.	32
2.23. Comparativa entre los resultados analítico, numérico y OpenFOAMv2012.	33
3.1. Estructura del micromezclador.	36
3.2. Sección del micromezclador simple en milímetros.	36
3.3. Sección del micromezclador caótico en milímetros.	36
3.4. Desarrollo gráfico del método SIMPLE. [31]	38
3.5. Condiciones de frontera del micromezclador.	42
3.6. <i>Coarse Meshing</i> , tamaño de celda $1e^{-2}$	43
3.7. <i>Fine Meshing</i> , tamaño de celda $1e^{-3}$	44
3.8. <i>Super Fine Meshing</i> , tamaño de celda $5e^{-4}$	44

3.9. Muestra de las simulaciones y su dependencia del mallado en el dispositivo microfluídico simple. a) Elemento de mallado $1e^{-2}$. b) Elemento de mallado $1e^{-3}$. c) Elemento de mallado $5e^{-4}$	45
3.10. Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico simple, elemento de mallado con tamaño $1e^{-2}$ y velocidad 0.025 mm/s	46
3.11. Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico simple, elemento de mallado con tamaño $1e^{-3}$ y velocidad 0.025 mm/s	46
3.12. Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico simple, elemento de mallado con tamaño $5e^{-4}$ y velocidad 0.025 mm/s	47
3.13. Muestra de las simulaciones y su dependencia del mallado en el dispositivo microfluídico caótico. a) Elemento de mallado $1e^{-2}$. b) Elemento de mallado $1e^{-3}$. c) Elemento de mallado $5e^{-4}$	47
3.14. Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico caótico, elemento de mallado con tamaño $1e^{-2}$ y velocidad 0.025 mm/s	48
3.15. Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico caótico, elemento de mallado con tamaño $1e^{-2}$ y velocidad 0.025 mm/s	48
3.16. Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico caótico, elemento de mallado con tamaño $5e^{-4}$ y velocidad 0.025 mm/s	49
3.17. Resultados en dispositivo microfluídico simple con velocidad 0.025 mm/s	50
3.18. Resultados en dispositivo microfluídico simple con velocidad 0.05 mm/s	50
3.19. Resultados en dispositivo microfluídico simple con velocidad 0.075 mm/s	51
3.20. Resultados en dispositivo microfluídico caótico con velocidad 0.025 mm/s	51
3.21. Resultados en dispositivo microfluídico caótico con velocidad 0.05 mm/s	52
3.22. Resultados en dispositivo microfluídico caótico con velocidad 0.075 mm/s	52
3.23. Descomposición en colores primarios en el dispositivo microfluídico simple. Resultado experimental. a1) Imagen original, b1) Imagen en Rojo, c1) Imagen en Verde, d1) Imagen en azul. Resultado simulado. a2) Imagen original, b2) Imagen en Rojo, c2) Imagen en Verde, d2) Imagen en azul.	53

3.24. Evolución del nivel de mezcla simulado en el dispositivo microfluídico simple.	54
3.25. Evolución del nivel de mezcla simulado en el dispositivo microfluídico caótico.	54
4.1. Esquema del sistema experimental.	58
4.2. Impresora Photon para impresiones en resina, dibujada en Inventor.	59
4.3. Partes internas de la impresora Photon, dibujada en Inventor.	60
4.4. Componentes del sistema de bombas de jeringas.	61
4.5. Controlador para las bombas.	62
4.6. Componentes del sistema de adquisición de datos.	63
5.1. Resultados experimentales en el dispositivo microfluídico simple. a) velocidad 0.025 mm/s, b) velocidad 0.050 mm/s, c) velocidad 0.075 mm/s	66
5.2. Resultados experimentales en el dispositivo microfluídico caótico. a) velocidad 0.025 mm/s, b) velocidad 0.050 mm/s, c) velocidad 0.075 mm/s	67
5.3. Evolución del nivel de mezcla en el dispositivo microfluídico simple experimental.	68
5.4. Evolución del nivel de mezcla en el dispositivo microfluídico caótico experimental.	69
5.5. Comparación en el dispositivo microfluídico simple.	70
5.6. Comparación en el dispositivo microfluídico caótico.	71
5.7. Comparación de la desviación estándar en el dispositivo microfluídico simple.	72
5.8. Comparación de la desviación estándar en el dispositivo microfluídico caótico.	72
9. Resultado de la velocidad en un fluido de Poiseuille.	88
10. Resultado de la presión en un fluido de Poiseuille.	89
11. Desarrollo de la velocidad en una sección transversal.	89
12. Desarrollo de la presión a lo largo del eje x	90

13.	Microcanal recto.	94
14.	Capturas de las medidas con velocidad 1.1963 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa	97
15.	Resultado cálculo de velocidad a partir de imágenes 1.1963 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa	97
16.	Capturas de las medidas con velocidad 2.3926 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa	98
17.	Resultado cálculo de velocidad a partir de imágenes 2.3926 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa	98
18.	Capturas de las medidas con velocidad 3.589 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa	99
19.	Resultado cálculo de velocidad a partir de imágenes 3.589 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa	99
20.	Dispositivo de prueba.	100
21.	Vista superior del dispositivo de prueba.	101
22.	Vista lateral total del dispositivo de prueba.	102
23.	Vista lateral parcial del dispositivo.	103
24.	Vista superficial para observar la rugosidad.	103

Índice de cuadros

2.1. Números y discretización.	30
2.2. Dominio computacional.	31
2.3. Campo de operación.	31
2.4. Solucionadores de sistemas de ecuaciones lineales.	31
4.1. Componentes del sistema de impresión.	58
4.2. Componentes internas de la impresora Photon mostrado en la Figura 4.3.	59
4.3. Componentes del sistema mecánico de las bombas de jeringas mostrado en la Figura 4.4.	61
4.4. Componentes del sistema de adquisición de datos en la Figura 4.6. . .	64

Capítulo 1

Introducción

En el presente trabajo de tesis se desarrolla y valida una metodología para la simulación del comportamiento de fluidos en estructuras de dispositivos Lab-On-a-Chip (LOC) para microfluídica haciendo uso del paquete computacional de código abierto OpenFOAM[®]. Se realizó el diseño CAD de dos dispositivos LOC para microfluídica. El primer LOC tiene un mezclador en Y simple de 0.375 mm^2 de área transversal y el segundo es un mezclador caótico en Y con un área similar al anterior.

Para validar la simulación, se fabricaron los dispositivos LOC, imprimiendo los diseños con una impresora 3D fotolitográfica. Así mismo, se desarrolló un equipo de control de flujo y otro de toma de imágenes para caracterizar experimentalmente la mezcla en los dispositivos LOC.

Se inyectaron flujos de 0.025 mm/s , 0.050 mm/s y 0.075 mm/s , tanto en la simulación con OpenFOAM y en los dispositivos reales. Encontrándose que para todos los flujos, la estructura del mezclador caótico permitió una mezcla total de los dos líquidos de entrada dentro del LOC. Y en el mezclador simple solo se obtuvo una mezcla parcial, observándose flujo laminar hasta la salida de la estructura.

1.1. Justificación

Los dispositivos Lab-On-a-Chip (LOC) son de gran importancia al realizar pruebas diagnósticas, estos permiten efectuar los procesos de un laboratorio

biológico en un chip; sin embargo, el desarrollo de estos sistemas LOC requiere, de forma clásica, de laboratorio y equipamiento sofisticados, y que además podrían utilizarse sistemas de fabricación aditiva como impresoras 3D en un cuarto blanco. Dependiendo de las dimensiones de la geometría de los elementos internos de LOC, se requiere o se tiene la necesidad de un estudio previo utilizando simulación con framework libre, para guiar la fabricación y los posibles efectos que se encuentren en el camino. En esta tesis se realiza un procedimiento universal para el desarrollo de sistemas de microfluídica utilizando framework libre.

1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivo Principal

El objetivo de la presente tesis es el desarrollo y validación de una metodología basada en OpenFOAM para la simulación por volúmenes finitos de estructuras de mezcla en dispositivos Lab On a Chip para microfluídica.

1.2.2. Objetivos Secundarios

- Elaboración de un método para realizar la simulación del comportamiento de fluidos en estructuras de dispositivos Lab-On-a-Chip usando OpenFOAM.
- Fabricación de prototipos de dispositivos LOC para microfluídica, con estructuras de mezcla usando una impresora 3D de resina.
- Desarrollo de un sistema para la caracterización de LOCs para microfluídica.
- Comparación del método de simulación, con la medición experimental en LOCs con estructuras de mezcla.

Capítulo 2

Fundamento Teórico

Un dispositivo Lab-on-A-Chip (LOC) para microfluídica permite el procesamiento de pequeñas cantidades de líquidos dependiendo de la configuración de sus canales interiores. En el presente capítulo se brindará un resumen de las ecuaciones de mecánica de fluidos que gobiernan la física en el interior de un LOC, los materiales de fabricación y una introducción a la simulación numérica con OpenFOAM®.

2.1. Lab On A Chip

2.1.1. Generalidades

En 1990 Manz et. al. [21] se acuñó el concepto de Sistema de Análisis Total Miniaturizado (μ -TAS). El cual se refirió a un dispositivo modular miniaturizado que realiza el pretratamiento y medición de muestras. Los μ -TAS se fabricaban utilizando la tecnología de fabricación para circuitos integrados en silicio y se reportaron aplicaciones para la biología molecular y militares en la detección de sustancias peligrosas. A partir de estos usos, se introdujo el término Lab-On-a-Chip (LOC) que se usa como sinónimo para μ -TAS [12].

La microfluídica es "la ciencia y la técnica que permite la manipulación de pequeñas cantidades de fluido (10^{-9} hasta 10^{-18} litros)" [32].

Los dispositivos LOC para microfluídica permiten que en una pequeña área se

puedan hacer análisis complejos de muestras líquidas con resultados similares a los hechos con equipamiento y laboratorios convencionales.

Estos dispositivos tienen varias ventajas como: Usar volúmenes pequeños de muestras y reactivos, permite implementar las etapas de toma de muestra, preparación de muestra y medición en un dispositivo desechable. Cuenta con una fácil integración dentro de un ecosistema de internet de las cosas, a través de su uso con dispositivos ubicuos como los SmartPhones, entre otras. Existe extensa bibliografía del uso de Lab-On-a-Chips para microfluídica en aplicaciones biomédicas [27], alimentarias [30], sintetización de materiales [26], y últimamente en modelos de órganos a través de los llamados Organ-On-a-Chip [7].

Existen diversas técnicas para la fabricación de dispositivos Lab-On-a-Chip y ellas dependen del material a usar como la estructura del LOC y su aplicación final.

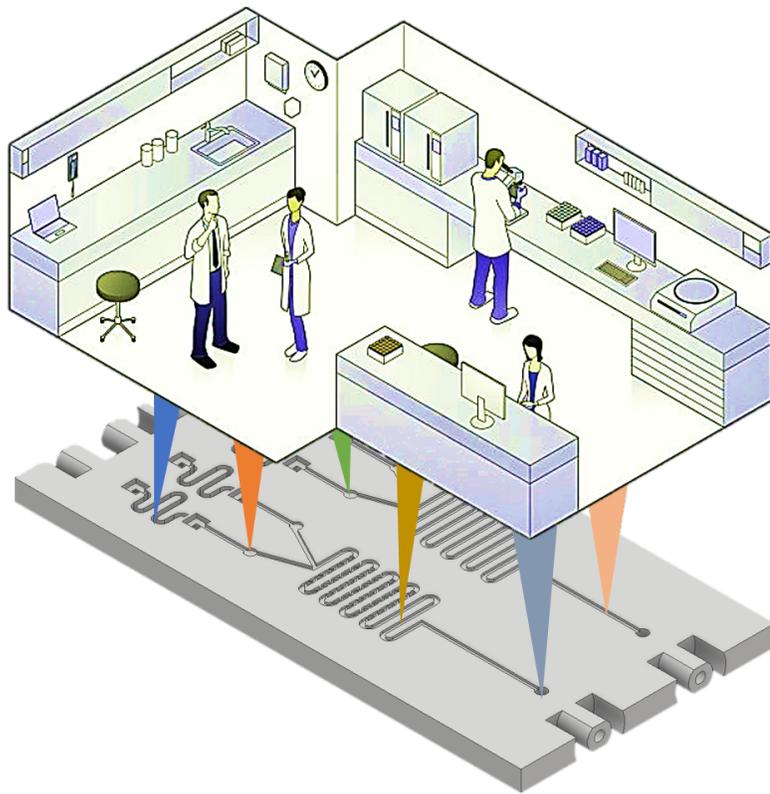


Figura 2.1: Representación de los sistemas Lab-On-a-Chip y un laboratorio tradicional.

2.1.2. Técnicas de Fabricación

2.1.2.1. Técnicas Tradicionales

2.1.2.1.1. Silicio Esta técnica consiste en establecer una máscara de dióxido de silicio (SiO_2) o nitruro de silicio (Si_3N_4) sobre el silicio, para salvaguardar las superficies del silicio que no van a ser modificadas. Posteriormente, los micro canales y estructuras son grabadas directamente en el silicio por erosión utilizando reactivos químicos, tales como el hidróxido de potasio (KOH), tetrametil amonio hidroxido (TMAH) y etileno diamida (TDP) . Donde la erosión depende de la orientación de los planos cristalinos del silicio, presentando una menor velocidad para el plano (1 1 1).

Para evitar que los elementos erosivos graben ciertas partes del silicio, esta técnica requiere el uso de una máscara. Estas, requieren condiciones especiales, como un cuarto limpio con facilidades de cuarto oscuro, sputtering de alto vacío, equipos para wet etching, equipos para proyección en ultra-alta-resolución, etc. La fotolitografía es un proceso de grabado en medio líquido, el cual involucra el uso de un polímero resistente a los ácidos (photoresist). Durante el proceso de grabado en seco, se hace uso de una máscara sólida fabricada principalmente de cromo, con orificios y ranuras que dejan pasar a los iones, donde esto erosionaran la superficie del silicio. Los orificios y ranuras deben ser del tamaño de las estructuras micro/nano-métricas y deben ser fabricados a una ultra-alta-resolución. [13]

2.1.2.1.2. Vidrio En este proceso, el grabado se realiza erosionando la superficie del vidrio a través del uso de soluciones químicas como ácido hidrofúorídrico (HF) o HF en combinación con ácido nítrico (HNO_3) y agua. El perfil de los canales obtenidos es del tipo isotópico, puesto que el vidrio no cuenta con estructura cristalina alguna. En éste tipo de fabricación se usan máscaras de oro y cromo, fabricadas con canales y agujeros con los tamaños que deberán tener las micro/nano estructuras sobre el vidrio. El problema del vidrio como material es, la falta de reproducibilidad en los microcanales, causada por que el estrés mecánico entre las superficies del vidrio induce una erosión en direcciones preferenciales. [13]

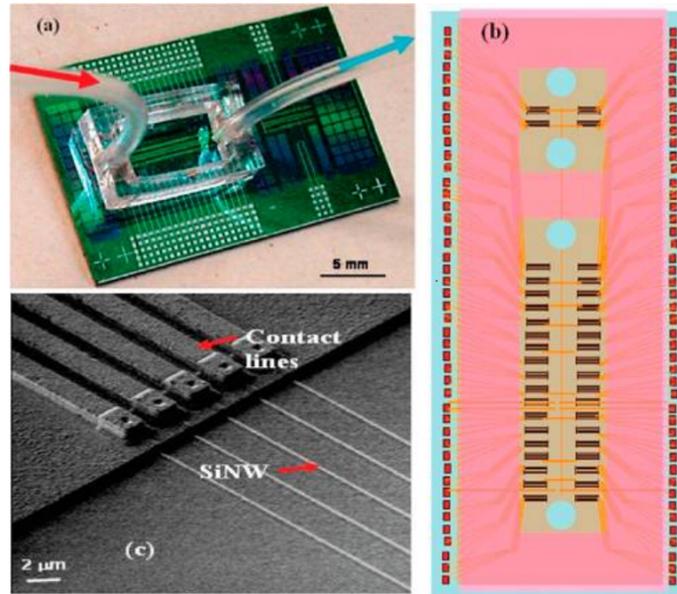


Figura 2.2: Sistema de nanocables de silicio para la detección de biomarcadores cardiacos. (a) Chip matriz de dispositivo de nanocables de silicio (SiNW), integrado con un sistema de microfluídica para el intercambio de fluidos. (b) Esquema del diseño de la matriz de dispositivos SiNW en el chip. (c) Imagen SEM de un grupo de nanocables. [9]

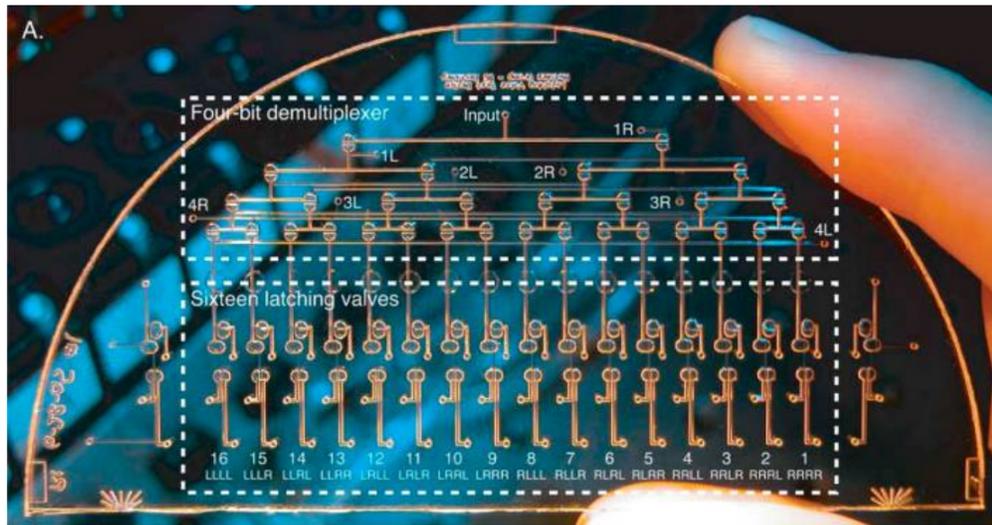


Figura 2.3: Red de válvulas microfluídicas. [15]

2.1.2.1.3. Elastómeros En la actualidad, los materiales poliméricos se han convertido en los más promisorios para el desarrollo de Lab-On-a-Chips, debido a su bajo costo, fácil fabricación y compatibilidad bioquímica. Los materiales como el poli-metil metacrilato (PMMA) y el poli-dimetil siloxano (PDMS) son ampliamente usados para el desarrollo de estructuras para microfluídica. Sin embargo, para la micro fabricación éstos LOC en base a polímeros, necesitan también de una máscara sobre el cual se dan los procesos de polimerización y/o endurecimiento. Las máscaras se fabrican usando: litografía suave (soft lithography), galvanoplastia en silicio y grabado por iones reactivos. En la litografía suave, se usa una técnica de recubrimiento para esparcir sobre un sustrato un reactivo químico sensible a la luz y que se endurece cuando le llega luz (photoresist positivo). Posteriormente se proyecta una imagen binaria de ultra-altaresolución con longitud de onda en el rango UV, esto endurece al photoresist en las zonas transparentes definidas por la imagen. Más adelante el conjunto se revela usando un solvente que elimina todo el photoresist que no fue iluminado con luz UV, quedando sobre el sustrato la máscara que será usada para fabricar LOCs de polímeros.

La fabricación de LOCs en plástico usando PDMS involucra la creación de la mezcla monómero: elastómero en razón 10:1. Luego de colocar la mezcla de PDMS en una cámara de bajo vacío para quitarle el gas contenido en la misma, se la vierte sobre el molde fabricado por litografía suave y el conjunto se lleva a un horno para la curación del PDMS. Luego se separan el molde de la estructura de PDMS quedando el PDMS micro/nano estructurado.

Si bien es cierto, ésta técnica es muy usada actualmente para la fabricación de LOCs, requiere de la fabricación de una máscara, la cual usa photoresist, spin-coating e instalaciones de cuarto oscuro y para dimensiones pequeñas necesita un cuarto limpio.[13]

2.1.2.1.4. Papel A inicios del siglo veinte, Martin and Synge (Premio nobel en química 1959) inventaron la cromatografía en papel.

En el año 2008 Whitesides et. al [32], reportaron el uso de un photoresist hidrófobo para definir paredes de separación en un sustrato de papel, además de la inclusión de compuestos para la detección colorimétrica de proteínas. Estos dispositivos para microfluídica basados en papel combinan la simplicidad de la cromatografía en papel

con la complejidad de los dispositivos LOC, éste concepto se conoce ahora como Lab-On-a-Paper (LOP). Actualmente se reportan diferentes métodos para generar paredes de material hidrófobo en sustratos de papel de tal manera de definir canales. Sin embargo, dichos procesos de fabricación se basan en el uso un photoresist.

Uno de los procesos de fabricación se basa en impregnar a un sustrato de papel con photoresist hidrófobo, y luego de usar una máscara y luz UV para crear zonas hidrófobas para estructurar regiones donde el líquido pueda impregnarse. El otro proceso involucra el uso de una impresora de cera para crear dichas estructuras. Sin embargo, la limitación de LOP radica en que solo puede resistir una carga de líquido, luego de ello el LOP se vuelve inservible. Posteriormente se recorta a la forma deseada y se agrega los reactivos necesarios para hacer la detección. [13]

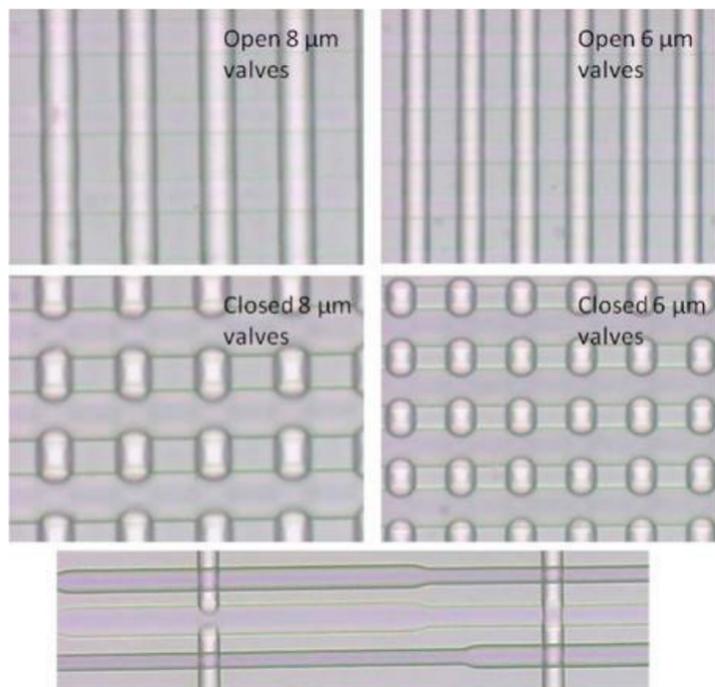


Figura 2.4: Red de válvulas PDMS integradas a gran escala. (Parte superior) Válvulas abiertas y (parte intermedia) cerradas de 8×8 y $6 \times 6 \mu m^2$. (Parte inferior) demostración de válvulas dependientes de la geometría; el canal de flujo de la izquierda está cerrado mientras que el de la derecha permanece abierto cuando el ancho del canal de control es de $4 \mu m$. [6].

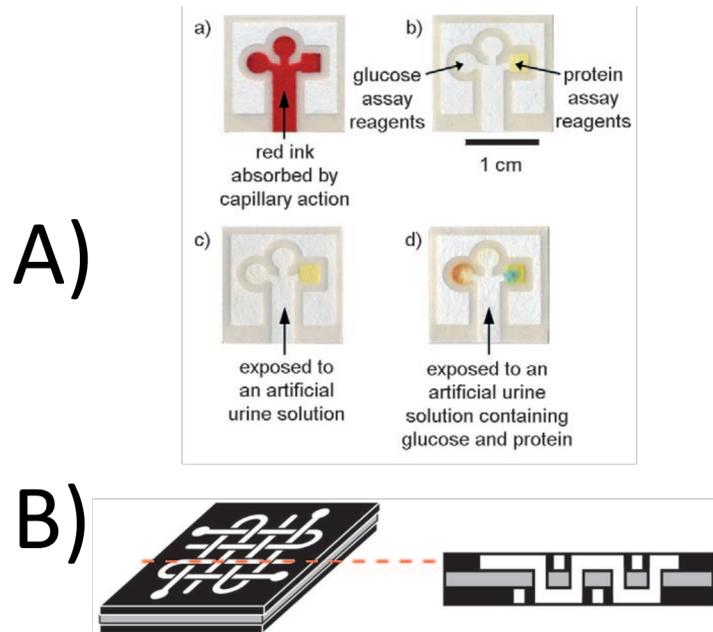


Figura 2.5: Dispositivos a base de papel. a) Bioensayo en un chip de papel [22]. b) Fabricación de canales multicapa [23].

2.1.2.2. Técnicas Modernas

2.1.2.2.1. Estereolitografía 3D La estereolitografía es un proceso de manufactura aditivo, que produce estructuras tridimensionales mediante la solidificación de un foto-polímero capa por capa.

La técnica en particular utilizada en este trabajo es la del Procesamiento Digital de la Luz (DLP). La impresora DLP modula la luz mediante un dispositivo digital de microespejos (DMD). El DMD está compuesto por una matriz 2D de espejos microscópicos que se mueven de forma independiente y, cuando se iluminan, desvían la luz reflejada en diferentes direcciones. Este DMD y un conjunto de lentes (chip DLP) garantizan que cada píxel blanco de la imagen de la capa, se enfoque en el fondo del tanque de resina, y los píxeles negros de la imagen se enfocan en otro lugar, creando un contraste suficiente para exponer sólo los píxeles brillantes.[12]

El proceso se detalla con mayor precisión en el capítulo 3.

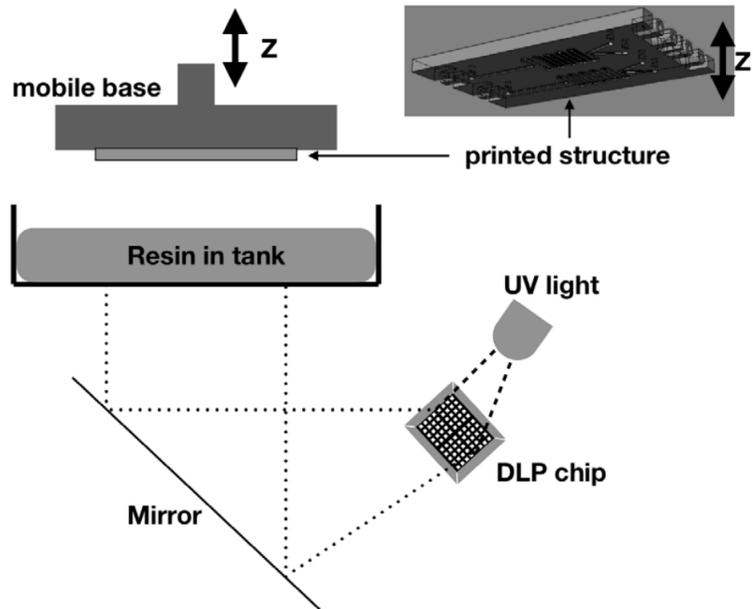


Figura 2.6: Diagrama de una impresora 3D de resina en base a DLP [12].

2.1.3. Micromezcladores

En esta subsección, se revisan los diferentes tipos de micromezcladores, tanto pasivos como activos. Debido a la investigación, se enfocó más en los micromezcladores pasivos.

2.1.3.1. Micromezcladores Activos

Los Micromezcladores Activos se utilizan una fuente externa como entrada de energía. Estas fuentes de energía externas, según Volker Hessel [17], son:

- Ultrasonido
- Acústico
- Vibraciones inducidas por burbujas
- Inestabilidades electrocinéticas
- Variación periódica del caudal

- Fusión de gotitas inducida por electrohumectación
- Membranas vibratorias piezoeléctricas
- Perturbación magnetohidrodinámica
- Perturbación electrohidrodinámica
- Perturbación Dielectroforética
- Microválvulas/bombas integradas y otras.

2.1.3.1.1. Perturbación Electrohidrodinámica En la estructura del micromezclador con perturbación electrohidrodinámica, se colocan electrodos a lo largo del canal de mezcla. Se coloca una serie de alambres de titanio en dirección perpendicular al canal de mezcla [25], como se ve en la Figura 2.7.

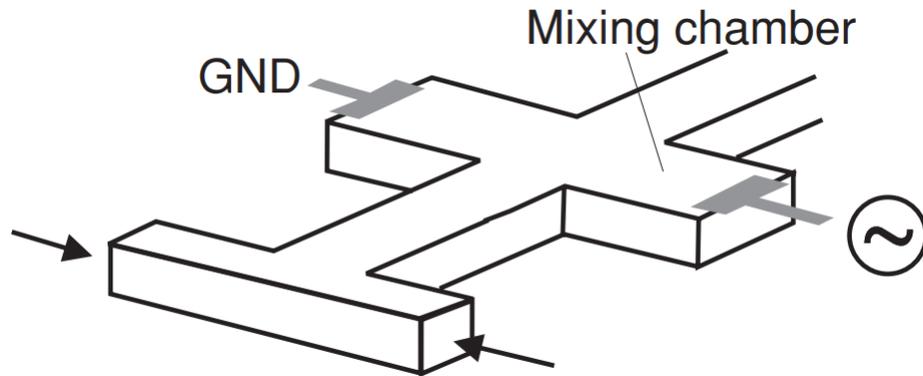


Figura 2.7: Perturbación Electrohidrodinámica. El canal de mezcla mide 30 mm de largo, 250 μm de ancho y 250 μm de profundidad. [25]

2.1.3.1.2. Perturbación Dielectroforética La dielectroforesis, es la polarización de una partícula con respecto a su medio circundante en un campo eléctrico no uniforme. Este efecto hace que la partícula se mueva hacia y desde un electrodo [17], como se ve en la Figura 2.8.

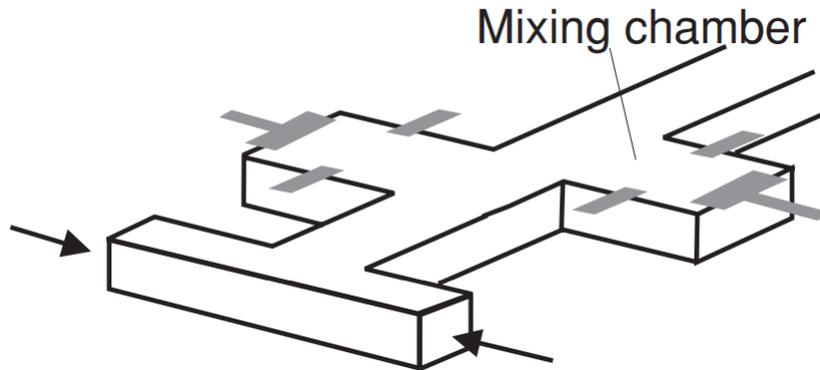


Figura 2.8: Perturbación Dielectroforética [25]

2.1.3.1.3. Perturbación Magnetohidrodinámica El efecto magnetohidrodinámico, se realiza en presencia de un campo magnético externo, los voltajes de corriente continua aplicados sobre los electrodos, generan fuerzas de Lorentz, que a su vez inducen un movimiento de mezcla en la cámara. [25]

2.1.3.1.4. Acústico En un micromezclador acústico, las ondas ultrasónicas son generadas por transductores acústicos y se propagan dentro del medio fluido. Existen dos formas de introducir microcorriente acústica en microcanales (Figura 2.9). Uno de estas es generando una burbuja o estructura de borde afilado, que experimenta vibración dentro de un campo de sonido. La otra forma, utiliza directamente la onda acústica de superficie. [17]

2.1.3.2. Micromezcladores Pasivos

Un segundo tipo de micromezcladores, utiliza la energía de flujo debido a la acción de bombeo o al potencial hidrostático, se utiliza para reestructurar un flujo de una manera que resulte en una mezcla más rápida. Estos micromezcladores, según Hessel [17], son:

- Arreglos interdigitales de láminas múltiples
- Conceptos de división y recombinación (SAR)
- Mezcla caótica por formación de remolinos y plegamiento

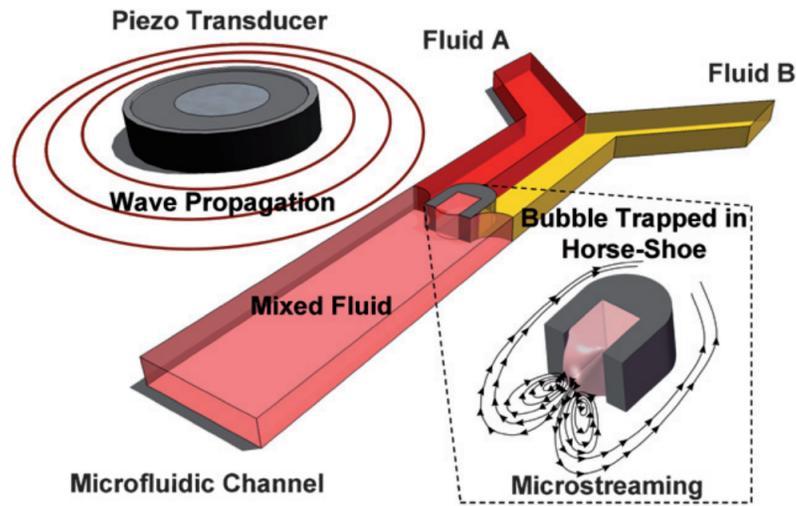


Figura 2.9: Ilustración de una burbuja atrapada dentro de la estructura de *horse-shoe* y patrón de flujo alrededor de la membrana de la burbuja en presencia de ondas acústicas. [5]

2.1.3.2.1. Micromezclador de Enfoque Hidrodinámico La mezcla por enfoque hidrodinámico, se basa en el principio de reducción en la ruta de mezcla. Generalmente, estos micromezcladores están diseñados con tres entradas. La solución de muestra suministrada desde la entrada central se concentra en un flujo de chorro estrecho, sometido por los fluidos de las entradas laterales (Figura 2.10). Basado en la teoría de la difusión:

$$t = \frac{L^2}{D}$$

Dónde D es el coeficiente de difusión de las moléculas, L es la distancia de difusión, reducir L reducirá el tiempo de mezcla. Normalmente, estos micromezcladores enfocan el flujo de la muestra solamente en la dimensión horizontal. Este posee las ventajas de un tiempo de mezcla corto y un bajo consumo de muestra. [20]

2.1.3.2.2. Micromezclador de Gotas Dentro de dispositivos de microfluídica, las gotitas se pueden generar fácilmente, estas permiten que se lleven a cabo reacciones bioquímicas dentro de un espacio con un volumen en el rango de los microlitros. (Figura 2.11) Las microgotas tienen las ventajas de poseer una alta

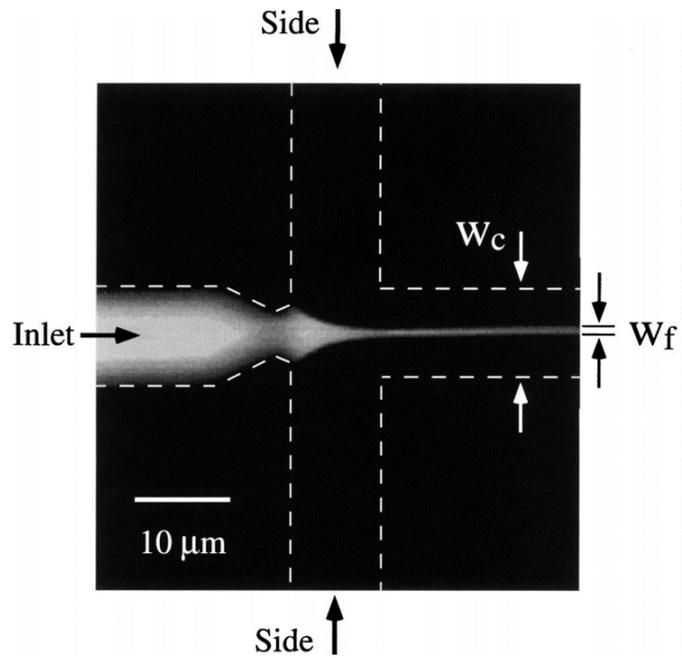


Figura 2.10: Micromezclador de Enfoque Hidrodinámico. [19]

respuesta en el tiempo y un bajo consumo de muestra para la investigación de la cinética de reacciones bioquímicas. [20]

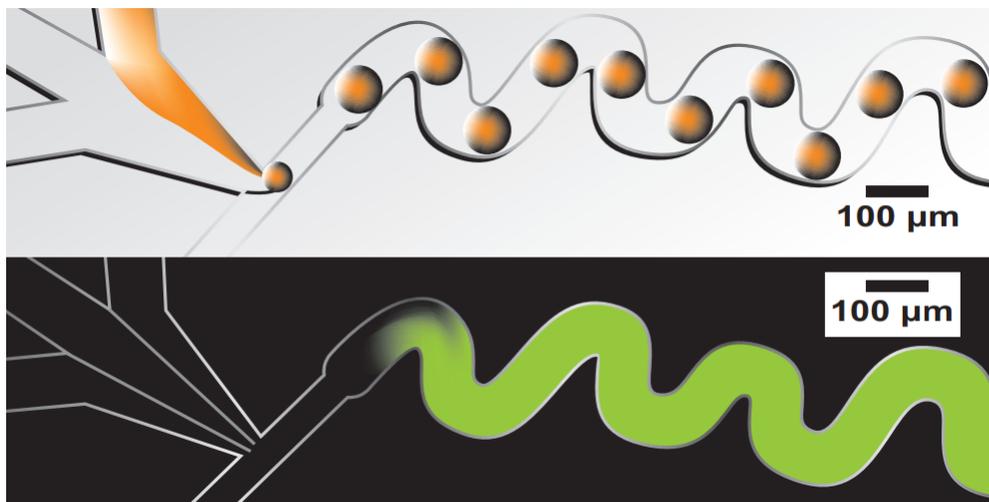


Figura 2.11: Experimento de micromezclador de gotas. Las gotas al moverse en un microcanal sinusoidal mejora la mezcla. [29]

2.1 .3.2.3. Micromezclador de Convección Caótica La convección caótica es generada, principalmente, por la forma de los canales que pliegan, estiran, dividen y rompen el flujo laminar sobre la sección transversal del canal. Aunque estos micromezcladores mostraron un buen rendimiento de mezcla a bajo Reynolds, el tiempo de mezcla todavía estaba en una escala de tiempo de milisegundos. Alternativamente, algunos micromezcladores se diseñaron para mezclar soluciones a un Reynolds relativamente alto, micromezclador en *zigzag* (Figura 2.12) y mejoraron el tiempo de mezcla de $16 \mu s$ a $5,5 \mu s$ ($Re = 100$). [20]

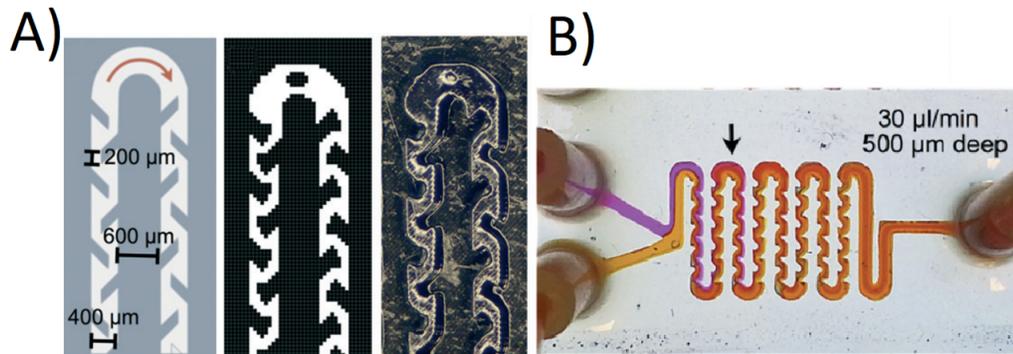


Figura 2.12: Micromezclador de Convección Caótica. A) Detalles del diseño del micromezclador. B) Mezclador de difusión profunda de $500 \mu m$ que muestra la mezcla de fluoresceína 1 mM con rodamina B 1 mM a $30 \frac{\mu m}{min}$. [5]

2.2. Mecánica de Fluidos

2.2.1. Ecuaciones de Fluidos

2.2.1.1. Conservación de la Masa

En un elemento de fluido, el cual puede ser un volumen en un microcanal de un LOC, la masa se conserva. De acuerdo a Versteeg y Malalasekera [31]:

Tasa de aumento de masa en el elemento fluido	=	Tasa neta de flujo de masa en el elemento fluido
---	---	--

En el elemento de fluido, la razón de aumento de masa es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\delta_x\delta_y\delta_z) = \frac{\partial\rho}{\partial t}\delta_x\delta_y\delta_z \quad (2.1)$$

Donde, ρ es la densidad del líquido, t es el tiempo y δ es el diferencial de desplazamiento en los ejes coordenados. Se asume un elemento de fluido como un volumen de control. En la Figura 2.13, se observa el caudal másico en un elemento de fluido, a través de una cara; la cuál viene dada por el producto de la componente de la velocidad normal, el área de la cara y la densidad del fluido. El flujo entrante tiene signo positivo y el flujo saliente, signo negativo. La razón de cambio total de flujo de masa en el elemento de fluido es igual a la suma de tasas de flujo másicos de entrada, menos la suma de tasas de flujo másico de la salida, en cada una de las caras. El caudal másico total en un elemento de fluido se expresa matemáticamente como:

$$\begin{aligned} & \left(\rho u - \frac{1}{2} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \delta x\right) \delta y \delta z - \left(\rho u + \frac{1}{2} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \delta x\right) \delta y \delta z - \\ & \left(\rho v - \frac{1}{2} \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \delta y\right) \delta x \delta z - \left(\rho v + \frac{1}{2} \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \delta y\right) \delta x \delta z - \\ & \left(\rho w - \frac{1}{2} \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \delta z\right) \delta x \delta y - \left(\rho w + \frac{1}{2} \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \delta z\right) \delta x \delta y \end{aligned} \quad (2.2)$$

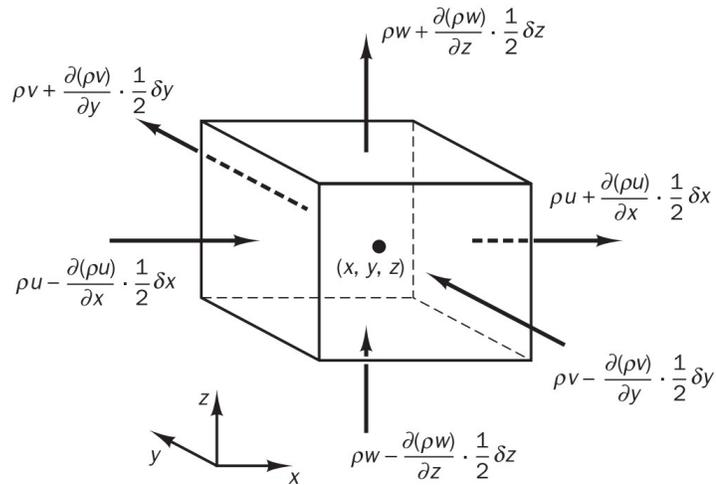


Figura 2.13: Entrada y salida de masa en un elemento de fluido. [31]

En el lado izquierdo de la igualdad, se tiene todos los términos del balance de masa resultante. Esta expresión se divide por el elemento de volumen $\delta x \delta y \delta z$. Esto produce:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (2.3)$$

Donde, u, v, w son velocidades en las direcciones x, y, z respectivamente. En una notación más compacta $\bar{U} = \langle u, v, w \rangle$, se puede escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \bar{U} = 0 \quad (2.4)$$

La ecuación 2.4, es la ecuación de conservación de masa tridimensional para un fluido compresible. Para un fluido incompresible, como la cual se trabajará en esta tesis, la densidad ρ es constante y la ecuación 2.4 se convierte en [31]:

$$\boxed{\bar{\nabla} \cdot \bar{U} = 0} \quad (2.5)$$

2.2.1.2. Conservación de la Cantidad de Movimiento

La ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento está en base a la *Segunda Ley de Newton*. De acuerdo a Versteeg y Malalasekera [31]:

Tasa de cambio de momento de una partícula de fluido	=	Suma de fuerzas sobre la partícula de fluido
--	---	--

Se distinguen dos tipos de fuerzas en las partículas del fluido. Fuerzas superficiales que actúan directamente sobre la superficie del elemento fluido, como: fuerzas debido a la presión, fuerzas de viscosidad y fuerzas gravitacionales. Así también, las fuerzas de cuerpo que actúan directamente sobre la masa volumétrica del elemento fluido, como: fuerza centrífuga, fuerza de Coriolis y fuerza electromagnética. Es una práctica común resaltar la contribución de la fuerza superficial como términos separados en la ecuación del momento e incluir el efecto de las fuerzas del cuerpo como términos fuente.

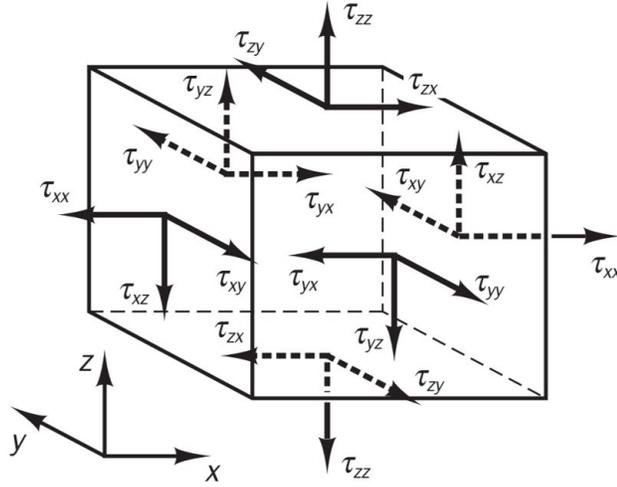


Figura 2.14: Componente de la tensión en las caras de un elemento de fluido. [31].

La tensión en un elemento de fluido se define en términos de la presión y los nueve componentes de la tensión viscosa, como se muestra en la Figura 2.14. La presión, la componente normal de la tensión, es denotada por p . La tensión viscosa es denotada por τ . La notación de sufijo τ_{ij} se utiliza para describir la dirección de la tensión viscosa. El sufijo i y j en τ_{ij} indica que la componente de tensión actúa en la dirección j en una superficie normal a la dirección i .

Se considera la fuerza en la componente x , producidas por la presión p y las componentes de la tensión τ_{xy} , τ_{yz} y τ_{zx} , como se muestra en la Figura 2.15.

En la tensión superficial, la magnitud de la fuerza resultante es el producto de la tensión y el área. Las fuerzas alineadas con la dirección de un eje coordenado, obtienen el signo positivo y las que se encuentran en dirección opuesta, signo negativo. La fuerza resultante que actúa en la dirección x , de los componentes de la tensión, es la suma de fuerzas sobre el elemento de fluido en las caras derecha e izquierda en el eje x [31]. La cuál viene dada por:

$$\begin{aligned} & \left[\left(p - \frac{1}{2} \frac{\partial p}{\partial x} \delta x \right) - \left(\tau_{xx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \delta x \right) \right] \delta y \delta z + \left[- \left(p + \frac{1}{2} \frac{\partial p}{\partial x} \delta x \right) \right. \\ & \left. + \left(\tau_{xx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \delta x \right) \right] \delta y \delta z = \left(- \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z \end{aligned} \quad (2.6)$$

De manera similar, la fuerza resultante en la dirección x , de las componentes de

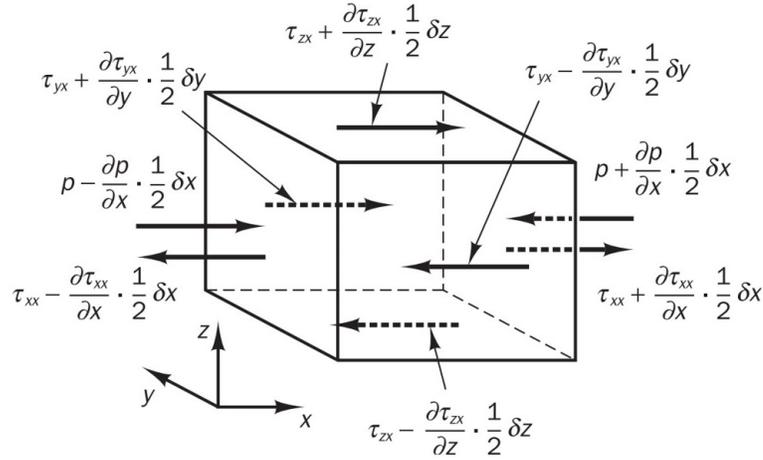


Figura 2.15: Componente de la tensión en la dirección x [31].

la tensión, que actúan en las caras frontal y trasera, es dada por:

$$-\left(\tau_{yx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \delta y\right) \delta x \delta z + \left(\tau_{yx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \delta y\right) \delta x \delta z = \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \delta x \delta y \delta z \quad (2.7)$$

La fuerza resultante en la dirección x , de los componentes de la tensión, que actúan en las caras superior e inferior es:

$$-\left(\tau_{zx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \delta z\right) \delta x \delta y + \left(\tau_{zx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \delta z\right) \delta x \delta y = \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \delta x \delta y \delta z \quad (2.8)$$

Sumando las ecuaciones 2.6, 2.7 y 2.8; dividiendo por el volumen $\delta x \delta y \delta z$, la fuerza total por unidad de volumen en la dirección x , viene dada por:

$$\frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \quad (2.9)$$

Sin considerar las fuerzas del cuerpo en mayor detalle, su efecto global se puede incluir definiendo una fuente S_{Mx} del momento en x por unidad de volumen por unidad de tiempo al final de la ecuación 2.9. De manera similar, la cantidad de movimiento (la fuerza total por unidad de volumen) en y y en z , pueden ser representadas de la misma manera como en la dirección x . Las siguientes ecuaciones

describen la cantidad de movimiento con término fuente en las direcciones del eje coordenado. Sin embargo, en esta tesis, los efectos de las fuerzas de cuerpo se desligan en las simulaciones.

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (2.10)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{zy}}{\partial z} + S_{My} \quad (2.11)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{zz})}{\partial z} + \frac{\partial\tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yz}}{\partial y} + S_{Mz} \quad (2.12)$$

2.2.1.3. Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones que gobiernan la mecánica de fluidos, tiene como incógnitas adicionales las componentes viscosas de la tensión τ_{ij} . La forma más práctica de las ecuaciones de conservación de momento en fluidos se obtienen introduciendo las tensiones viscosas τ_{ij} . Esta tensión, en fluidos, puede expresarse como la tasa de deformación local o la tasa de deformación total. En flujos tridimensionales, la razón de deformación local se descompone en la razón de deformación lineal y la razón de deformación volumétrica. En esta tesis, los fluidos son incompresibles ($\rho=\text{constante}$) e isotérmicos, además la viscosidad (μ) y la viscosidad cinemática (ν) son constantes [34]. En un fluido de modelo newtoniano, las tensiones viscosas son proporcionales a las razones de deformación.

$$\tau_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij} \quad (2.13)$$

Donde ϵ_{ij} es la definición de la tasa de deformación. Las nueve componentes del tensor de deformación viscosa, son:

$$\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

Sustituyendo el tensor 2.14 en las ecuaciones 2.10, 2.11, 2.12 y realizando cálculos,

se obtienen las **Ecuaciones de Navier-Stokes**. [31]

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 u + S_{Mx} \quad (2.15)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \nabla^2 v + S_{My} \quad (2.16)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \nabla^2 w + S_{Mz} \quad (2.17)$$

En una notación más compacta $\bar{U} = \langle u, v, w \rangle$, $\bar{S}_M = \langle S_{Mx}, S_{My}, S_{Mz} \rangle$, se puede escribir como:

$$\boxed{\rho \frac{D\bar{U}}{Dt} = -\bar{\nabla} p + \mu \nabla^2 \bar{U} + \bar{S}_M} \quad (2.18)$$

esta es la ecuación de Navier Stokes en un sistema cartesiano.

2.2.1.4. Ecuación Escalar de Transporte

Esta ecuación describe como transportar una cantidad escalar en un espacio delimitado. Este transporte puede ser, concentración química, propiedades de un material o temperatura. Desde un punto de vista matemático, también se denomina ecuación de convección-difusión, una PDE de primer orden, dada por [4]:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\Phi \bar{U} \rho) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \Phi) + S_\Phi \quad (2.19)$$

Donde, Γ es el coeficiente de difusividad. El primer término, es el término trascendente, que explica la acumulación de Φ en el volumen de control. El segundo término, es el término convectivo, explica el transporte de Φ debido a la existencia del campo de velocidad (\bar{U}). El tercer término, es el término difusivo, explica el transporte de Φ debido a sus gradientes. El cuarto término, es el término fuente, el cuál genera o disminuye alguna cantidad. Esta ecuación también puede ser aplicada en la ecuación de conservación de la energía. [2]

2.2.2. Constantes adimensionales en teoría de Fluidos

2.2.2.1. Número de Reynolds

Según Mangani et al. [24], el número de Reynolds (Re) es definido como:

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (2.20)$$

y puede interpretarse como una medida de la relación entre las *Fuerzas de Inercia* y las *Fuerzas viscosas* en los flujos. Si los flujos están en la misma dirección, entonces el número de Reynolds muestra las características de la capa límite del flujo. Si los flujos se definen de manera que la difusión sea en la dirección transversal de la corriente, como se muestra en la Figura 2.16, entonces, Re denota el régimen del flujo (es decir, laminar, transitorio o turbulento). La Figura 2.17 es un ejemplo que muestra el campo de flujo para diferentes valores del número de Reynolds. Las líneas de corriente que se muestran en la Figura 2.17 indican que la fuerza del flujo aumenta a medida que aumenta Re .

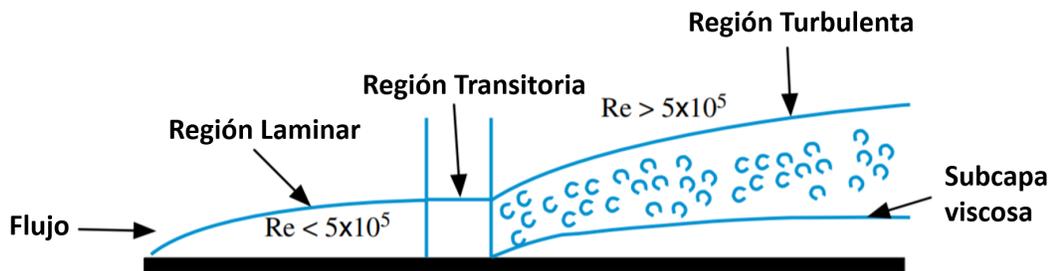


Figura 2.16: Esquema del flujo sobre una placa plana que muestra los regímenes del flujo: laminar, de transición y turbulento según el valor de Re [24].

2.2.2.2. Número de Weber

Según Mangani et al. [24], el número de Weber (We) es definido como:

$$We = \frac{\rho U^2 L}{\sigma} \quad (2.21)$$

Donde, U (m/s) es la velocidad y L (m) la longitud característica, y σ es la tensión

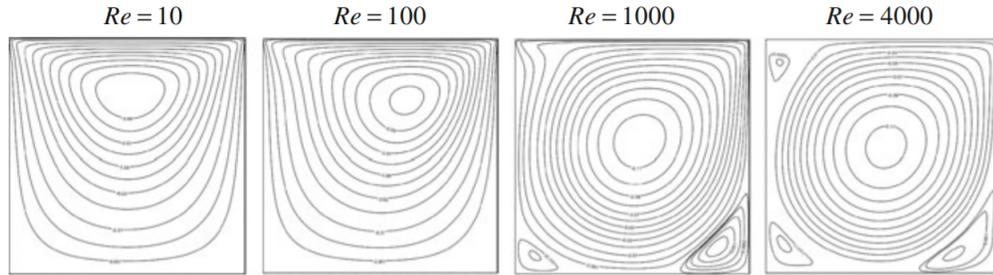


Figura 2.17: Representación de un flujo impulsado en una cavidad cuadrada de lado L generado por la velocidad U impartida a su pared superior [24].

superficial en (N/m). El número de Weber, representa la relación entre la inercia y las fuerzas de tensión superficial, es útil para analizar flujos multifásicos que involucran interfaces entre dos fluidos diferentes, con superficies curvas como burbujas o gotas.

2.2.2.3. Número de Bond

Según Hall [16], el número de Bond (Bo) es definido como:

$$Bo = \frac{\rho L^2 g}{\sigma} \quad (2.22)$$

Donde, g es la gravedad, ρ es la densidad y σ es la tensión superficial. El número de Bond (o de EOTVOS), relaciona la fuerza de gravedad dividida por la fuerza de tensión superficial en procesos de atomización, movimiento de burbujas/gotas y el flujo capilar.

2.2.2.4. Número de Péclet

El número de Péclet (Pe) es definido como la relación entre la tasa de transporte advectivo de una cantidad física y su tasa de transporte difusivo. Para el caso del transporte de masa, el número de Péclet viene dado por:

$$Pe = \frac{UL}{D} = Re \cdot Sc \quad (2.23)$$

Donde, D es la difusividad de masa y Sc el número de Schmidt. En este caso, Pe es equivalente al producto del número de Reynolds por el número de Schmidt. [24]

2.2.2.5. Número de Schmidt

El número de Schmidt es definido como:

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (2.24)$$

Representa la relación entre la difusividad del momento ν y la difusividad de la masa D . Físicamente, el Sc relaciona los espesores de las capas límite hidrodinámicas y de transferencia de masa. Un ejemplo que muestra el efecto del número de Schmidt se muestra en la Figura 2.18. [24]

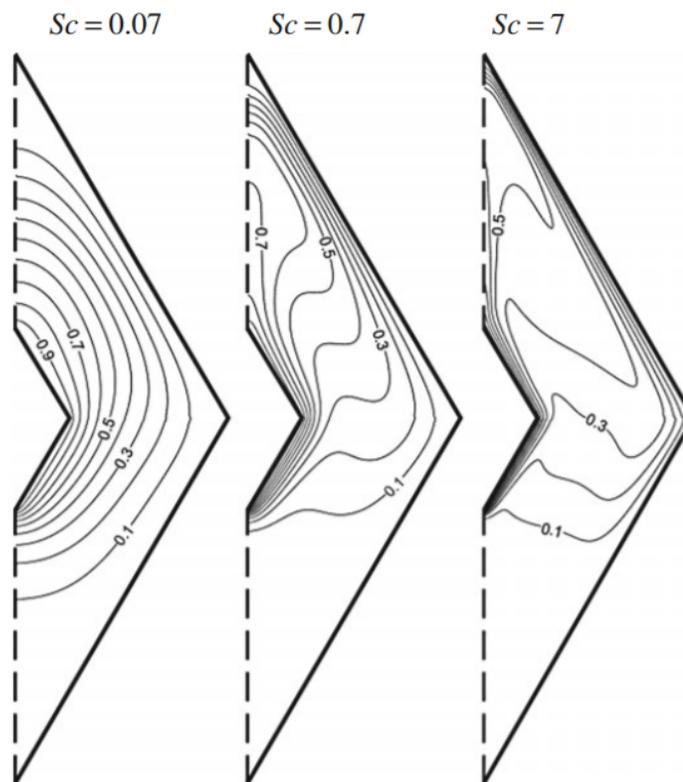


Figura 2.18: Isoconcentraciones de valores crecientes del número de Schmidt para la transferencia de masa por convección natural en el anillo entre cilindros horizontales concéntricos de secciones transversales rómbicas con mayor concentración de soluto en la pared interior [24].

La Figura 2.18 representa la transferencia de masa por convección natural en el espacio anular entre dos tubos horizontales de secciones transversales rómbicas.

2.2.3. Ecuaciones Multifase

Cuando existen múltiples fases (o fluidos) en la simulación; según Gregor Cerne et al.[8], es necesario realizar un seguimiento de interfaz o una captura de interfaz. Para manejar las interacciones de los múltiples fluidos, utilizamos el método de Volumen de Fluidos (VOF).

Para cada componente en un fluido, introducimos una fracción de volumen. Si V , en un dominio computacional, es un volumen de una celda y $\alpha(\bar{x}, t)$ es una fracción de volumen, entonces la fracción de volumen para dos fluidos es definido como [8]:

$$\alpha(\bar{x}, t) = \begin{cases} 1, & \bar{x} \in \Omega_l \\ 0, & \text{otro.} \end{cases} \quad (2.25)$$

donde Ω_l es el dominio cubierto por el fluido i .

La fracción de volumen discreto es:

$$\alpha_i = \frac{1}{V} \int_V \alpha(\bar{x}, t) dV \quad (2.26)$$

donde i denota el

i-ésimo fluido en el sistema.

La ecuación de advección-difusión para el volumen de fracciones de fluidos miscibles, está dada por: [28]

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{U} \alpha) = \nabla \cdot \left(\left[D + \frac{D_t}{Sc} \right] \nabla \alpha \right) \quad (2.27)$$

donde α es la fracción parcial del primer fluido, \bar{U} es la velocidad de la mezcla, ρ es la densidad del fluido, D es el coeficiente de difusividad entre los fluidos, D_t es la turbulencia generada por la difusión molecular y Sc es el Número de Schmit.

La ecuación 2.27, tiene como restricciones:

La ecuación de densidad:

$$\rho = \alpha \rho_1 + (1 - \alpha) \rho_2 \quad (2.28)$$

La ecuación de viscosidad:

$$\mu = \alpha\mu_1 + (1 - \alpha)\mu_2 \quad (2.29)$$

La suma de las fracciones de volúmenes debe ser 1 ($\alpha_1 + \alpha_2 = 1$). [18]

2.3. Método de Volúmenes Finitos y OpenFOAM

2.3.1. Método de Volúmenes Finitos

El método de volúmenes finitos, es un método para solucionar ecuaciones diferenciales parciales de aproximación ponderada. A continuación se dará un ejemplo del uso del método de volúmenes finitos para resolver el problema de conducción de calor en una varilla.

Este ejemplo consiste en un problema de conducción por calor sin fuente generadora, en una varilla aislada con una conductividad térmica $k = 1000 \frac{W}{mK}$, con sección transversal $A = 10 \times 10^{-3} m^2$. Cuyos extremos se mantienen a temperaturas constantes de $T_A = 100 \text{ }^\circ\text{C}$ y $T_B = 500 \text{ }^\circ\text{C}$, respectivamente. El problema unidimensional, como se muestra en la Figura 2.19, se rige por ecuación 2.30.

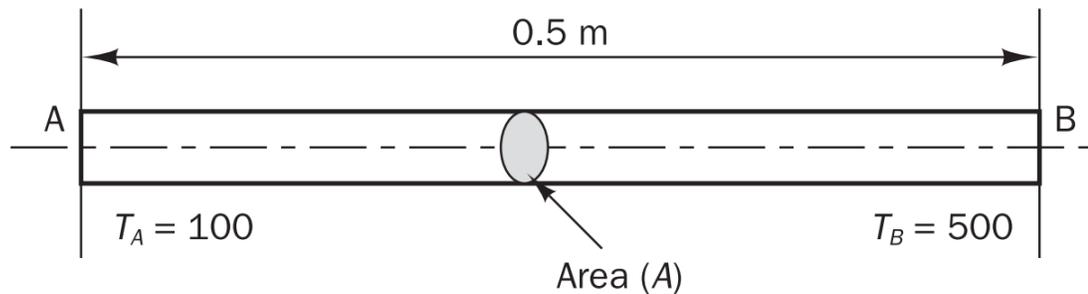


Figura 2.19: Varilla unidimensional [31].

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) = 0 \quad (2.30)$$

donde, T es la temperatura, k es la conductividad térmica.

Siguiendo los pasos, según Versteeg y Malalasekera [31]. Se integra alrededor de un volumen de control.

Reduciendo el cálculo a una dimensión y utilizando el volumen de control de la Figura 2.20, la ecuación 2.30 se reduce a:

$$\int_{CV} \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) = 0 \quad (2.31)$$

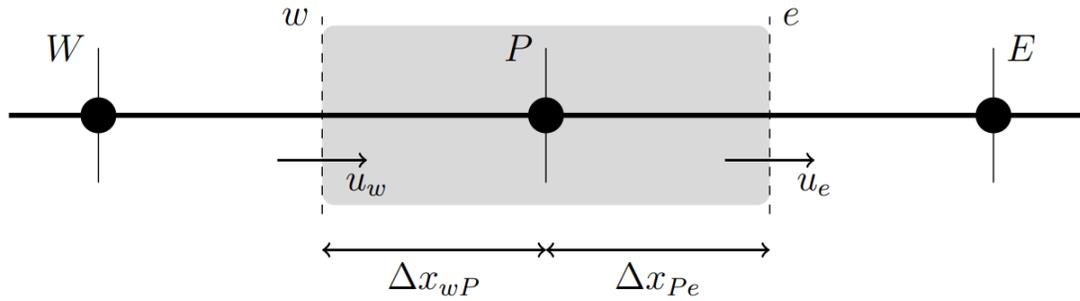


Figura 2.20: Volumen de control entorno a P [31].

La discretización para los nodos internos, es de la siguiente manera:

$$\left(\frac{k_e}{\delta x_{PE}} A_e + \frac{k_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) T_P = \left(\frac{k_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) T_W + \left(\frac{k_e}{\delta x_{PE}} A_e \right) T_E \quad (2.32)$$

La conductividad térmica ($k_e = k_w = k$), con distancia de separación entre nodo y nodo es δx y el área transversal ($A_e = A_w = A$), son constantes. Por lo que la discretización queda como:

$$\boxed{a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E} \quad (2.33)$$

con:

a_W	a_E	a_P
$\frac{k}{\delta x} A$	$\frac{k}{\delta x} A$	$a_W + a_E$

S_u y S_P son cero en este caso ya que no existe una fuente de energía.

Los nodos extremos requieren un análisis cuidadoso. La integración en el nodo 1 (T_A) está dado por:

$$kA \left(\frac{T_E - T_P}{\delta x} \right) - kA \left(\frac{T_P - T_A}{\delta x/2} \right) = 0 \quad (2.34)$$

Reorganizando la discretización.

$$\left(\frac{k}{\delta x} A + \frac{2k}{\delta x} A \right) T_P = 0 \cdot T_W + \left(\frac{k}{\delta x} A \right) T_E + \left(\frac{2k}{\delta x} A \right) T_A \quad (2.35)$$

El término fuente en la frontera es identificado como $(S_u + S_P T_P)$ con $S_u = (2kA/\delta x)T_A$ y $S_P = -2kA/\delta x$.

Queda la forma:

$$\boxed{a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + S_u} \quad (2.36)$$

con:

a_W	a_E	a_P	S_P	S_u
0	$\frac{kA}{\delta x}$	$a_W + a_E - S_P$	$-\frac{2kA}{\delta x}$	$\frac{2kA}{\delta x} T_A$

Para el nodo en el otro extremo (T_B), procedemos de manera similar.

$$-kA \left(\frac{T_P - T_W}{\delta x} \right) + kA \left(\frac{T_B - T_P}{\delta x/2} \right) = 0 \quad (2.37)$$

Reorganizando la discretización.

$$\left(\frac{k}{\delta x} A + \frac{2k}{\delta x} A \right) T_P = 0 \cdot T_E + \left(\frac{k}{\delta x} A \right) T_W + \left(\frac{2k}{\delta x} A \right) T_B \quad (2.38)$$

Nos queda de la forma:

$$\boxed{a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + S_u} \quad (2.39)$$

con:

a_W	a_E	a_P	S_P	S_u
$\frac{kA}{\delta x}$	0	$a_W + a_E - S_P$	$-\frac{2kA}{\delta x}$	$\frac{2kA}{\delta x}T_B$

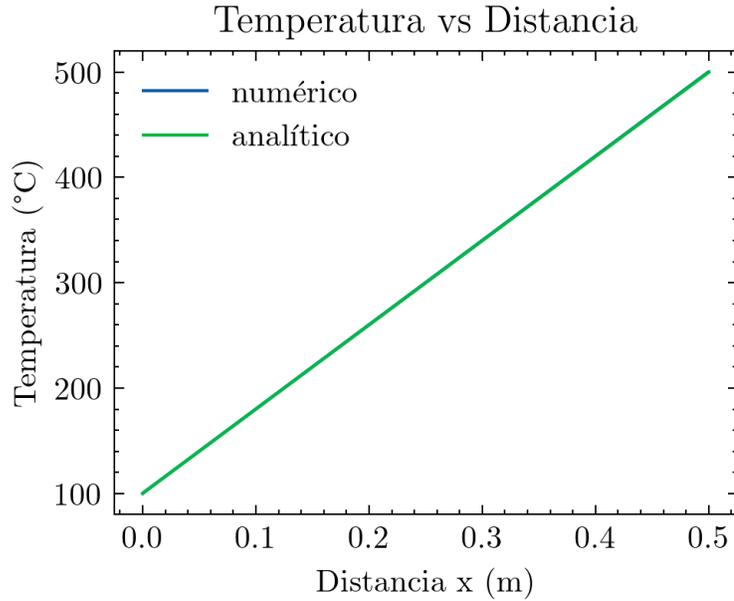


Figura 2.21: Comparación entre la solución numérica y la solución analítica.

Con esto se escribe un sistema algebraico a resolver, los detalles del código se explicarán con mayor precisión en los Apéndices.

Por otro lado, la solución analítica es:

$$T(x) = \left(\frac{T_B - T_A}{L} x \right) + T_A \quad (2.40)$$

Como se aprecia en la Figura 2.21, el nivel de exactitud es bastante elevado y de acuerdo con Versteeg [31], corroboramos que el *Método de Volúmenes Finitos* ofrece una solución óptima.

2.3.2. OpenFOAM

OpenFOAMv2012 (*Open source Field Operation And Manipulation*) es un *framework* desarrollado en C++ y es orientado a objetos, con este se pueden

desarrollar múltiples *solvers* para problemas en mecánica de medio continuo con un enfoque en la discretización basada en volúmenes finitos. Esta biblioteca cuenta con un conjunto de clases y objetos que permiten manipular mallas, geometrías y técnicas de discretización a un alto nivel de codificación. En las tablas 2.1, 2.2, 2.3 y 2.4 se presentan las principales clases de OpenFOAMv2012. Estas clases permiten a los programadores construir una variedad de algoritmos.

Otra característica de OpenFOAM es la sobrecarga de operadores que permite que los algoritmos se expresen de forma natural. Por ejemplo, la discretización de la ecuación de transporte para un escalar genérico (Φ) está dada por: [24]

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\Phi\bar{U}\rho) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\Phi) + P\Phi - C \quad (2.41)$$

que se puede escribir en OpenFOAM como:

Código 2.1: Script para resolver la ecuación de transporte simple

```

1      (
2      fvm::ddt(phi)
3      + fvm::div(mDot, phi)
4      - fvm::laplacian(Dphi, phi)
5      ==
6      fvm::Sp(P, phi)
7      - fvc::(C)
8      );

```

Objeto	Tipo de Dato	Clase OpenFOAM
Interpolación	Diferencian Esquemas	surfaceInterpolation
Discretización explícita	ddt, div, grad, curl	fvc::
Discretización implícita	ddt,d2dt2, div, laplacian	fvm::

Cuadro 2.1: Números y discretización.

El operador $fvm :: div$, toma el flujo convectivo como un campo definido sobre las caras de los elementos de control y $\phi(\Phi)$ como el campo variable definido

Objeto	Tipo de Dato	Clase OpenFOAM
VARIABLES	VARIABLES PRIMITIVAS	scalar, vector, tensor
Componentes de mallado	Point, face, cell	point, face, cell
Mallado Volumen Finito	Mallado computacional	fvMesh, polyMesh
Tiempo	Tiempo de almacenamiento	Time

Cuadro 2.2: Dominio computacional.

Objeto	Tipo de Dato	Clase OpenFOAM
Campo	Lista de valores	Field<template>
Dimensiones	Dimensiones del set up	dimensionSet
Campo Variable	Campo + mallado + frontera + dominio	GeometricField
Algebra	+, -, pow, =, sin, cos, ...	field operators

Cuadro 2.3: Campo de operación.

Objeto	Tipo de Dato	Clase OpenFOAM
Matriz Sparse	Coefficientes de la matriz y manipulación	lduMatrix, fvMatrix
Solucionador Iterativo	Solucionadores de matrices iterativas	lduMatrix::solver
Precondicionador	Matriz precondicionada	lduMatrix::preconditioner

Cuadro 2.4: Solucionadores de sistemas de ecuaciones lineales.

sobre los centros de la celda, y devuelve un sistema de ecuaciones que representa la discretización del operador de convección. Los espacios de nombres *fvm* :: y *fv* :: permiten la evaluación de una variedad de operadores. El operador explícito *fv*, devuelve un campo equivalente basado en los valores reales del campo. Por ejemplo, el operador *fv* :: $div(\Phi)$ devuelve un *geometricField* equivalente en el que cada celda contiene el valor de la divergencia de la variable (Φ).

El operador implícito *fvm*, en cambio, define la discretización implícita de

volumen finito en términos de matrices. Por ejemplo, `fvm::laplacian(Φ)` devuelve una *fvMatrix* en la que todos los coeficientes se basan en la discretización de volumen finito del laplaciano. El papel de los operadores `fvm::` y `fv::` es construir un sistema de ecuaciones que representan la forma discretizada de (2.31) sobre cada elemento de la malla. El proceso de discretización produce un sistema de ecuaciones en forma matricial.

Se realiza un segundo ejemplo, continuando con el ya realizado en la subsección anterior.

Se resuelve ahora la ecuación (2.31), utilizando un archivo OpenFOAMv2012. El código general se detallará en los Apéndices.

La principal parte del código es *Código 2.2*, dónde se escribe como resolver la Ecuación de Laplace en OpenFOAM.

Código 2.2: Script para resolver la ecuación de Laplace

```
1      (  
2      fvm::laplacian(T)  
3      );
```

Se obtiene un resultado gráfico (Figura 2.22).



Figura 2.22: Resultado visual de la conductividad en una varilla.

Utilizando todos los resultados hallados en uno solo, esta sería la Figura 2.23. Verificando así la eficacia de OpenFOAM para resolver aplicaciones de Mecánica de Fluidos.

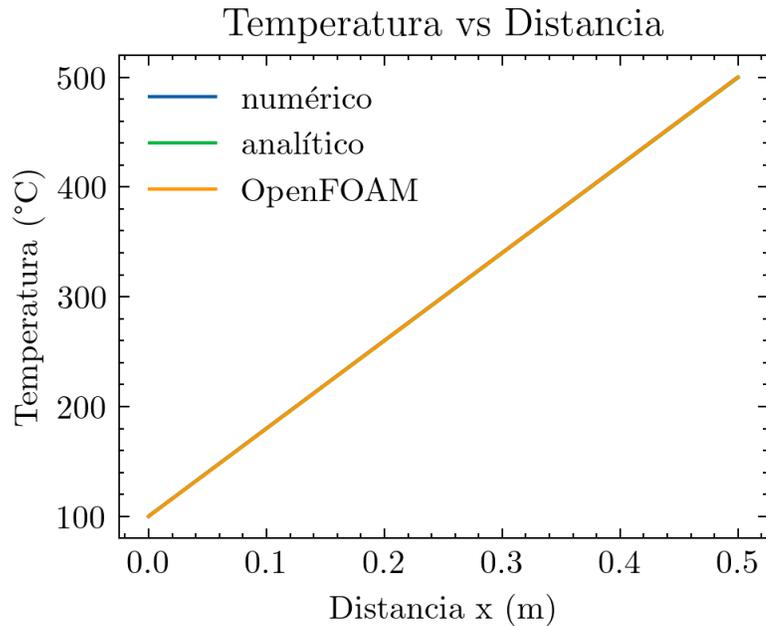


Figura 2.23: Comparativa entre los resultados analítico, numérico y OpenFOAMv2012.

2.4. Conclusiones

En este capítulo se detallaron diversos conceptos que serán de ayuda para llevar a cabo la investigación. Se estudiaron los dispositivos microfluídicos (Lab-On-a-Chip). Partiendo desde las ventajas para su desarrollo, como lo son el analizar cantidades pequeñas de muestras y su bajo costo de fabricación. Así también, los materiales con los cuales se pueden elaborar, donde actualmente los más utilizados son en base a papel y resina. Así mismo, el estudio de los micromezcladores. Describiendo que existen dos tipos: Los micromezcladores pasivos y activos. Este entendimiento es de suma importancia, ya que este trabajo está basado en un micromezclador caótico pasivo.

Se comprendieron las ecuaciones gobernantes de los fluidos, como las ecuaciones de Navier Stokes, continuidad y transporte; aquí se desarrolló minuciosamente cada una para entender la física detrás las mismas. Así mismo, la interpretación de los números adimensionales. Tales como, el número de Reynolds, Weber, Bond, Péclet y Schmidt. También, la ecuación multifase y su relación con la ecuación de difusión.

Seguidamente, se asentó sobre el método de volúmenes finitos, como un método de discretización optimizado para fluidos. Tomando como ejemplo, la conductividad térmica en un varilla; realizando el análisis analítico y numérico. Obteniendo resultados muy próximos.

Finalmente, una introducción a OpenFOAM, como el framework *Open Source* basado en volúmenes finitos. Se detallaron: los esquemas, los operadores, las clases y adicionalmente un segundo ejemplo de la conductividad térmica en un varilla. En este ejemplo, se comparó el resultado con OpenFOAM y los previos. Obteniendo cercanía en los resultados. Verificando así el funcionamiento de OpenFOAM.

De esta manera, se cubren los conceptos necesarios para ejecutar y entender los procesos físicos que conlleva esta tesis.

Capítulo 3

Simulaciones

La simulación de mezcla de dos fluidos es un elemento importante en esta tesis. Para ello se utilizó el framework libre OpenFOAM, basado en volúmenes finitos. Esto permitió tener una flexibilidad en el mallado y la configuración del código.

3.1. Modelamiento

3.1.1. Diseño de la geometría

Los diseños de los Lab-On-a-Chip (LOC) para esta investigación, están basados en micromezcladores estáticos, específicamente en micromezcladores pasivos caóticos. El diseño de los canales y de la estructura son una adaptación de los LOC mostrados en los trabajos *PDMS lab-on-a-chip fabrication using 3D printed templates* [10] y *3D Printed Unibody Lab-on-a-Chip: Features Survey and Check-Valves Integration* [11] (Figura 3.1) del Dr. Comina.

En este trabajo se realiza una comparación entre dos tipos de micromezcladores que se diferencian principalmente en la geometría. El primer tipo de dispositivo microfluídico mantiene una geometría elemental, donde se tiene un serpentín simple con dos entradas y una salida (Figura 3.2). Por otro lado, el segundo dispositivo microfluídico presenta una geometría con protuberancias que aceleran la mezcla y la advección caótica; ambos mezcladores tienen dos entradas para los fluidos y una salida para la mezcla (Figura 3.3).

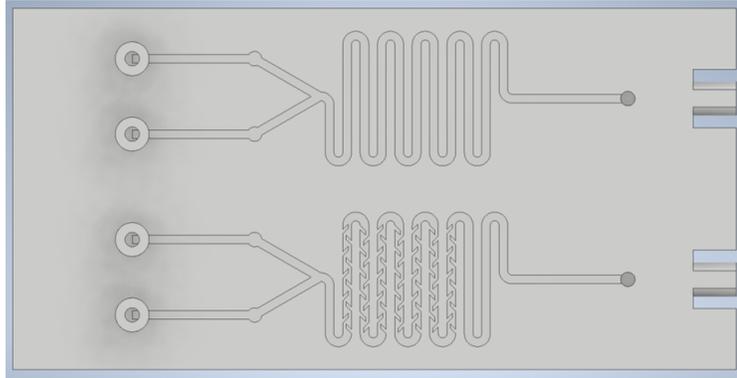


Figura 3.1: Estructura del micromezclador.

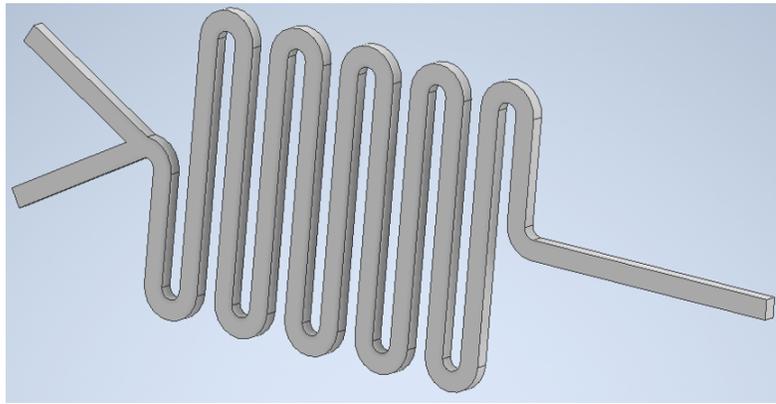


Figura 3.2: Sección del micromezclador simple en milímetros.

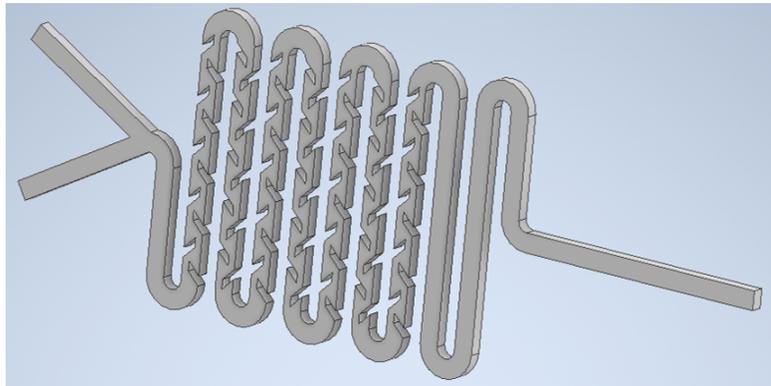


Figura 3.3: Sección del micromezclador caótico en milímetros.

3.1.2. SimpleFOAM

SimpleFOAM es uno de los scripts principales (solucionador) de OpenFOAM en estado estable, para simulación de flujos turbulentos y laminares de líquidos incompresibles. Este utiliza el algoritmo SIMPLE (método semi-implícito para ecuaciones vinculadas a presión). Utilizando las ecuaciones de momento y presión, es posible obtener una solución al problema de Navier Stokes. En este trabajo se utiliza la versión OpenFOAMv2012

Para hallar la solución, se generan iterativamente campos de velocidad y presión, los cuales satisfacen consecutivamente las ecuaciones de momento y continuidad. En cada iteración converge más a la solución final. Esta solución se denota mediante el enfoque segregado (Figura 3.4). Los pasos secuenciales que sigue el algoritmo SIMPLE segregado son:

- Se inicia con supuestos de presión y velocidad: $p^*, U^*(u^*, v^*)$
- Se resuelve la ecuación de momentum, obteniendo una nueva velocidad u^*, v^* .
- Se resuelve la ecuación de presión, obteniendo una corrección en la presión p' .
- Se actualizan los campos de presión y velocidad para obtener campos que satisfagan la continuidad u, v, p, ϕ^* .
- Se resuelven todas las demás ecuaciones de transporte discretas ϕ .
- Se verifica la convergencia; si no converge, se retorna al inicio con las últimas variables actualizadas $p^* = p, u^* = u, v^* = v, \phi^* = \phi$.

3.1.3. Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera delimitan el modelo y la física que lo rige. En esta sección, se detallan cada una de las condiciones utilizadas para llevar a cabo la simulación. Las condiciones fueron tomadas en base al trabajo *CFD Based Analysis of Simple T-Junction and Y-Junction Micro Mixers with Different Obstacles* [14].

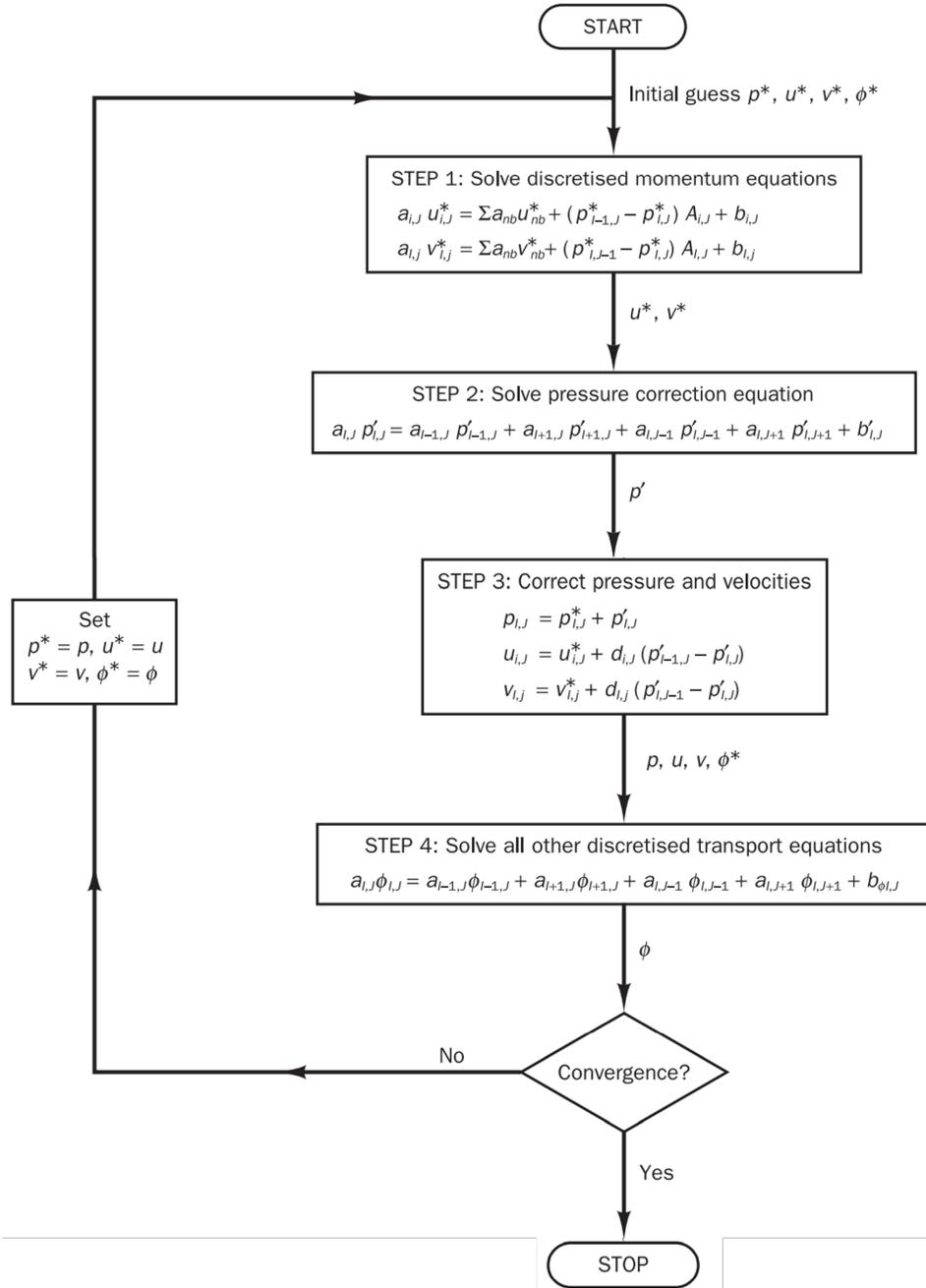


Figura 3.4: Desarrollo gráfico del método SIMPLE. [31]

Por lo que se toman las asunciones de:

- Flujo laminar estacionario
- Velocidad de entrada constante.
- Fluidos incompresibles, newtonianos y viscosos.
- Las paredes no se mueven.
- Los efectos de la gravedad son negados.

En la sección previa, se detalló el diseño del micromezclador. Llevar todo ese diseño a una simulación dificultaría su análisis y requeriría un mayor procesamiento. Para solucionarlo, se utiliza la parte específica que se requiere simular. Se toman los elementos necesarios y mínimos para la simulación. De esta manera, se extrae la entrada, salida y el recorrido del micromezclador, como se muestran en las Figuras 3.2 y 3.3.

Se inicia, considerando dos fluidos incompresibles y a la misma temperatura. Seguido, se continúa el análisis en la entrada del micromezclador.

Los micromezcladores, deben manejar la presión interna por lo que se utiliza un diferencial de presión para poder trasladar el fluido en el diseño.

Código 3.1: Script del Código indicando las condiciones de Presión

```
1      {
2          input1
3          {
4              type          zeroGradient;
5          }
6
7          input2
8          {
9              type          zeroGradient;
10         }
11     }
```

Los fluidos, experimentalmente, ingresan con una velocidad ya predefinida por los equipos de control. En la simulación se recrean el módulo y la dirección de la velocidad con un valor fijo en m/s.

Código 3.2: Script del Código indicando las condiciones Iniciales de Velocidad

```
1   {
2       input1
3       {
4           type          fixedValue;
5           value         uniform (0.01173 0.00611 0);
6       }
7       input2
8       {
9           type          fixedValue;
10          value         uniform (0.01173 -0.00611 0);
11      }
12  }
```

Un aspecto interesante de analizar es, cómo debería comportarse la velocidad y la presión en el interior del micromezclador, específicamente en las paredes. Al ser un cuerpo idealmente rígido, se espera que la interacción entre el fluido en movimiento y la pared no genere una diferencia de presión.

Código 3.3: Script del Código indicando las condiciones intermedias de Presión

```
1   {
2       wall
3       {
4           type          zeroGradient;
5       }
6   }
```

Un segundo aspecto, es que el fluido en movimiento no altera la estructura del micromezclador y por ello en la frontera entre la pared y el fluido se coloca un valor fijo en todas las direcciones.

Código 3.4: Script del Código indicando las condiciones intermedias de Velocidad

```
1   {
2       wall
3       {
4           type          fixedValue;
5           value         uniform (0 0 0);
6       }
7   }
```

Finalmente, en la salida tenemos la presión a nivel atmosférica, con ello se recrea la diferencia de presión que necesita el micromezclador.

Código 3.5: Script del Código indicando las condiciones de salida de Presión

```
1   {
2       wall
3       {
4           type          fixedValue;
5           value         uniform 101325;
6       }
7   }
```

No se conoce la velocidad en la salida, mas inicialmente tenemos una velocidad con valor fijo igual a cero, ya que el fluido aún no se encuentra en esa posición.

Código 3.6: Script del Código indicando las condiciones de salida de Velocidad

```
1   {
2       output
3       {
4           type          fixedValue;
5           value         uniform 0;
6       }
7   }
```

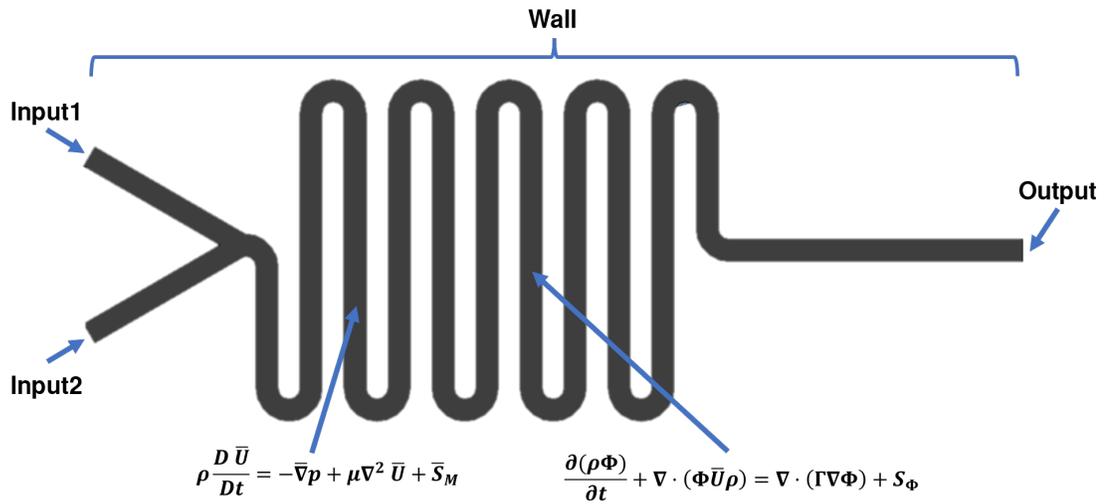


Figura 3.5: Condiciones de frontera del micromezclador.

3.1.4. Parámetros

Al igual que las condiciones de frontera, los parámetros o constantes del modelo son de igual importancia, ya que de estos depende la proximidad a la realidad y la comparación con la misma.

En este trabajo, se hace uso de un solo fluido, el agua, pero al tener dos entradas utilizaremos agua con dos tipos de colorantes diferentes, los cuáles no reaccionan químicamente entre sí. Para llevarlo a cabo en una simulación se deben introducir los valores de su viscosidad, coeficiente de difusión y densidad. OpenFOAMv2012 interpretará estos valores como constantes en todas las iteraciones.

Código 3.7: Script del Código indicando los valores del fluido

```

1    {
2      type                scalarTransport;
3      resetOnStartUp      false;
4      schemesField         Fluid1;
5      rho                  998;
6      nu                   0.0009;
7      D                    1.2E-9;
8    }

```

Un valor interesante es la gravedad, habitualmente utilizamos el valor de $9,81m/s^2$ pero en sistemas de microfluídica esta puede despreciarse. Debido a que el número de Bond es menor a 0.139 el valor de la gravedad en nuestra simulación es casi nula.

Código 3.8: Script del Código indicando el valor de la gravedad

```
1 {  
2 value          (0 0 0);  
3 }
```

3.1.5. Mallado

OpenFOAMv2012 contiene tipos de mallados como *blockMesh* enfocado en mallados rectangulares o *snappyMesh* que es mucho más adaptativo. Debido al costo computacional y tiempo se optó por usar el mallado *FluentMesh*.

En este trabajo, se realizó un mallado de base hexaédrica, por poseer estructura compleja, y 3 principales tamaños de celda volumétrica para el canal microfluídico. Se puede observar que en cada mallado el tamaño de la celda varía. Siendo Coarse (Figura 3.6) el de mayor tamaño, seguido por Fine (Figura 3.7) y finalmente Super Fine (Figura 3.8). Más adelante se pondrá a prueba la influencia del mallado en los resultados.

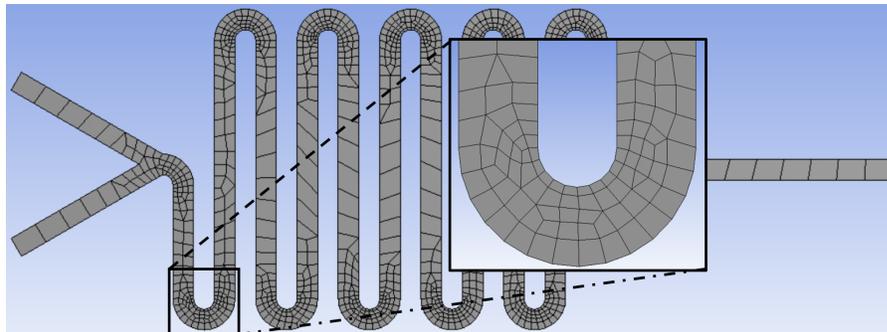


Figura 3.6: *Coarse Meshing*, tamaño de celda $1e^{-2}$.

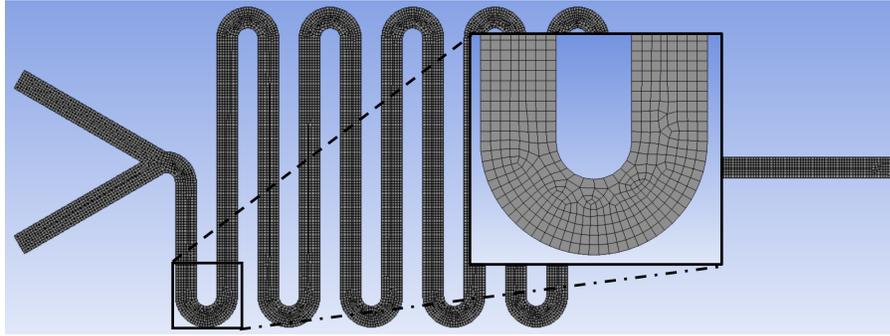


Figura 3.7: *Fine Meshing*, tamaño de celda $1e^{-3}$.

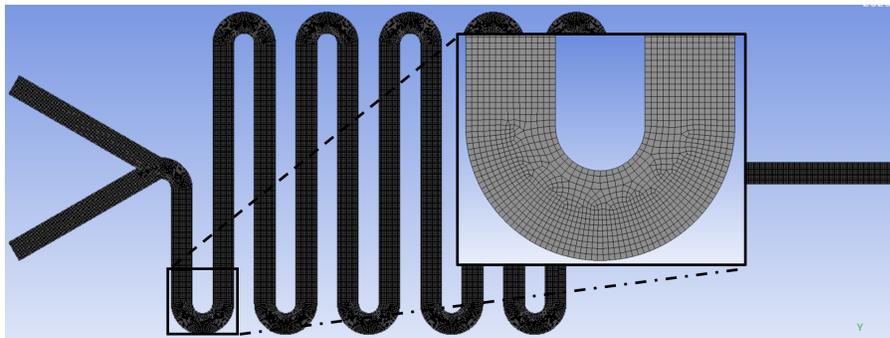


Figura 3.8: *Super Fine Meshing*, tamaño de celda $5e^{-4}$.

3.1.6. ParaView

Para el análisis de datos científicos, así también la visualización de conjuntos de datos de gran tamaño, el procesamiento en paralelo, la opción de utilizar Python 3.6 se usó el software *Open Source* ParaView 5.8.

3.2. Resultados obtenidos de la simulación

Los estudios realizados están en base a las simulaciones, las cuales fueron: Influencia de la velocidad en la mezcla, analizar la longitud de mezcla y como varía con velocidades diferentes; influencia del mallado, estudiar cómo se comporta la simulación con diferentes tamaños de celda.

3.2.1. Influencia del mallado en la simulación

Habitualmente el mallado es el segundo paso de una simulación, para esta sección se tiene en cuenta la utilidad de *Ansys Fluent* por su facilidad de uso. Así mismo la velocidad constante de $0,025 \frac{mm}{s}$.

La Figura 3.9 muestra resultados de la simulación en el dispositivo microfluídico simple para tres tamaños de elementos de celda. Iniciando la comparativa con las fases de los líquidos, en la parte **a** vemos que las fases son más marcadas pero no como se esperaba, en la parte **b** y **c** las fases están mejor diferenciadas, con una mayor resolución en la parte **c**.

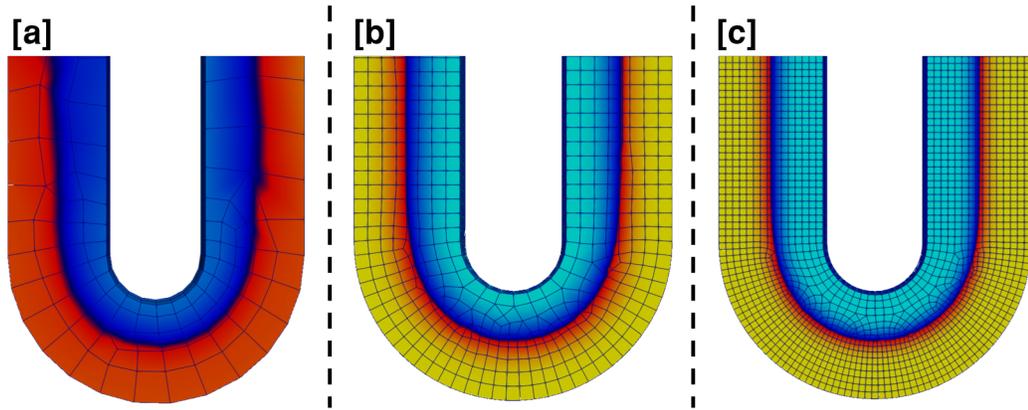


Figura 3.9: Muestra de las simulaciones y su dependencia del mallado en el dispositivo microfluídico simple. a) Elemento de mallado $1e^{-2}$. b) Elemento de mallado $1e^{-3}$. c) Elemento de mallado $5e^{-4}$.

Por otra parte, los residuales para el mallado en el dispositivo microfluídico simple se muestran en las Figuras 3.10, 3.11 y 3.12, donde el mayor costo computacional fue con el mallado de elemento $5e^{-4}$ y así mismo obtuvo los mejores resultados. La convergencia en los tres casos es clara y se puede observar en las imágenes.

En el caso de las simulaciones en el dispositivo microfluídico caótico, que se pueden apreciar en la Figura 3.13, se tuvo en cuenta dos segmentos consecutivos del canal para la muestra. En la parte **a** se tiene el mallado más grueso y con menor rendimiento, por tener una geometría más compleja la parte **b** no fue suficiente para tener buenos resultados (a comparación del dispositivo microfluídico simple), si no que se tuvo un resultado muy efectivo en la parte **c** con elemento de $5e^{-4}$.

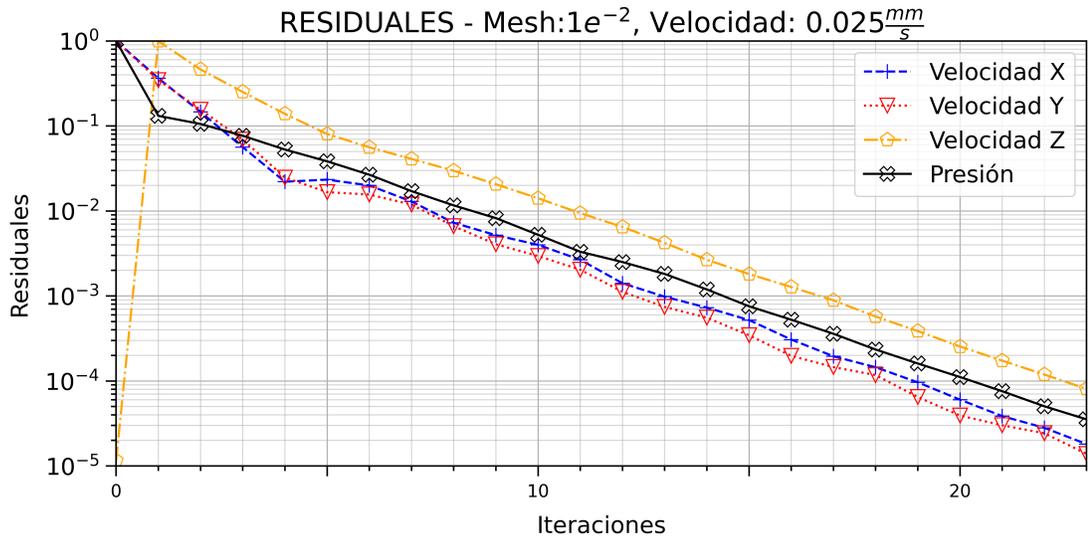


Figura 3.10: Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico simple, elemento de mallado con tamaño $1e^{-2}$ y velocidad 0.025 mm/s

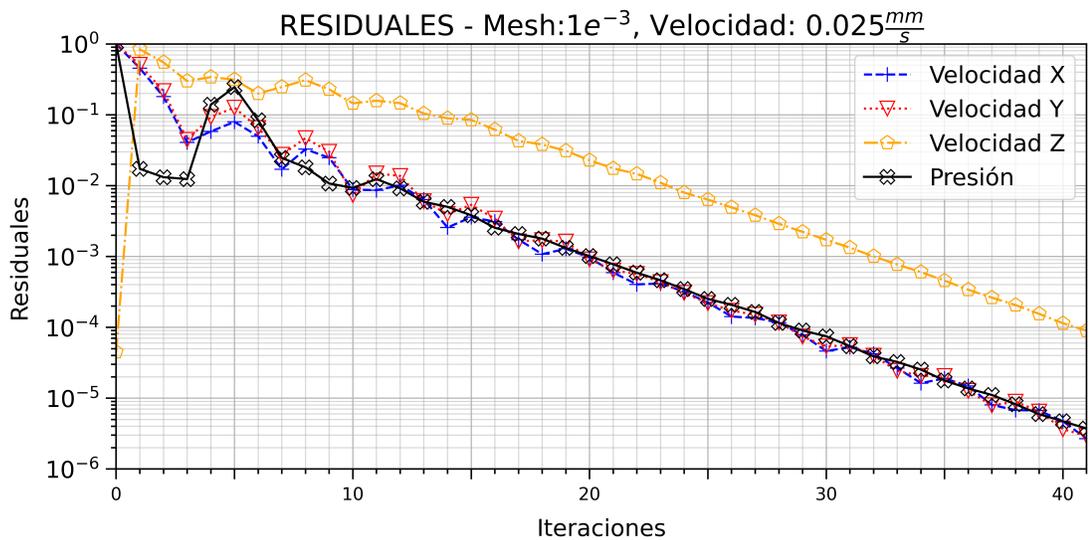


Figura 3.11: Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico simple, elemento de mallado con tamaño $1e^{-3}$ y velocidad 0.025 mm/s

Por otro lado, los residuales mostrados en las Figuras 3.14, 3.15 y 3.16 tienen una convergencia absoluta, siendo el de mayor mallado con el mayor tiempo de procesamiento pero menor a comparación con el dispositivo microfluídico simple.

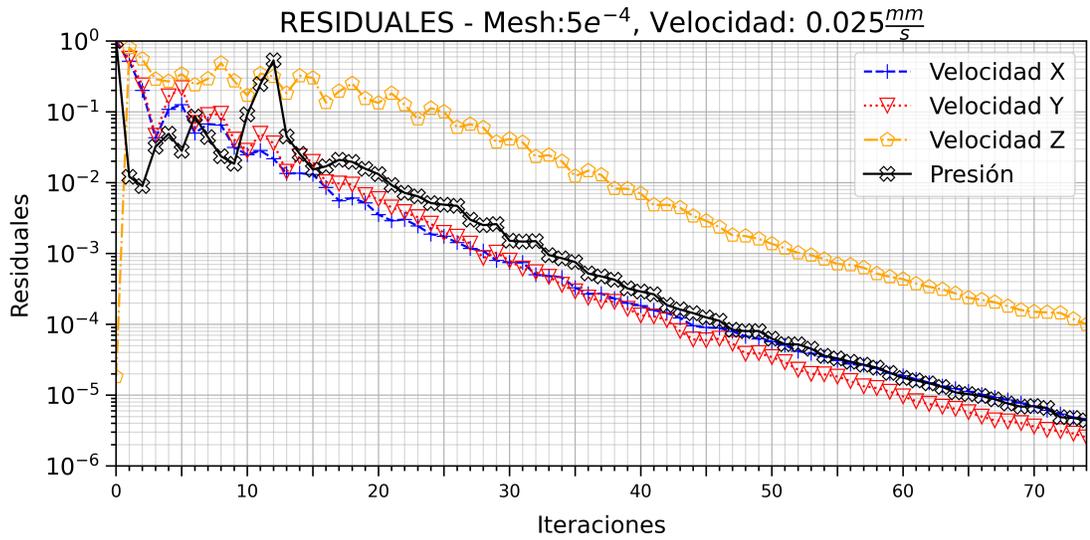


Figura 3.12: Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico simple, elemento de mallado con tamaño $5e^{-4}$ y velocidad 0.025 mm/s

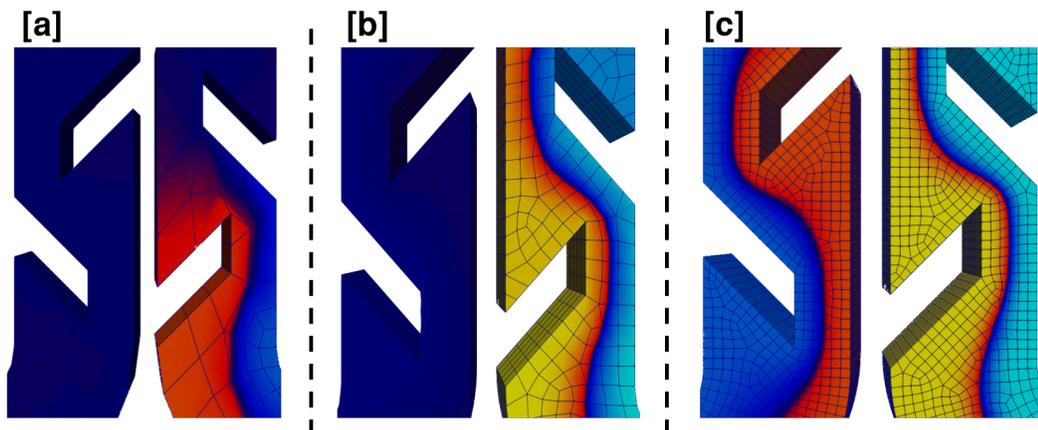


Figura 3.13: Muestra de las simulaciones y su dependencia del mallado en el dispositivo microfluídico caótico. a) Elemento de mallado $1e^{-2}$. b) Elemento de mallado $1e^{-3}$. c) Elemento de mallado $5e^{-4}$.

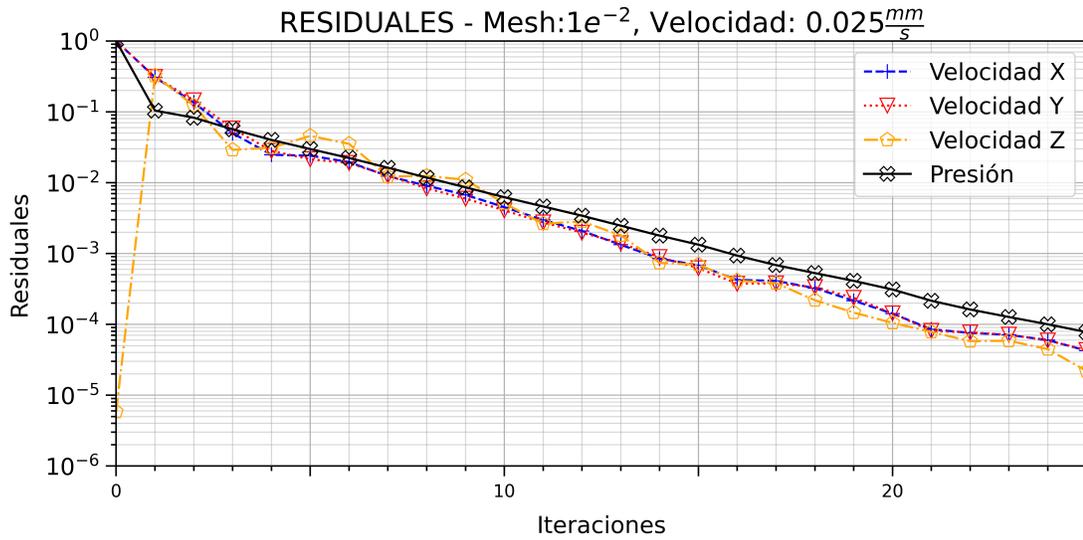


Figura 3.14: Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico caótico, elemento de mallado con tamaño $1e^{-2}$ y velocidad 0.025 mm/s

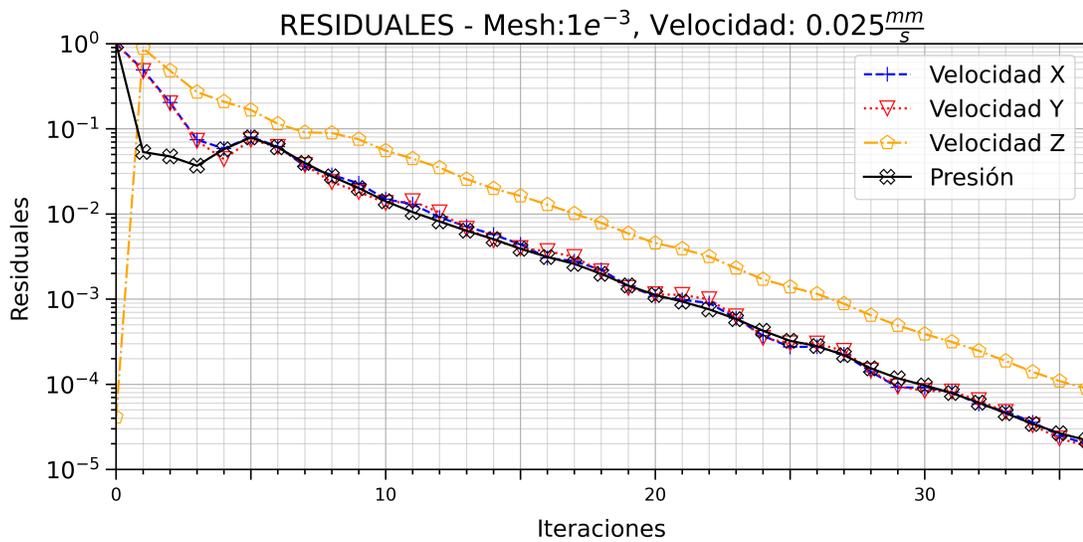


Figura 3.15: Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico caótico, elemento de mallado con tamaño $1e^{-3}$ y velocidad 0.025 mm/s

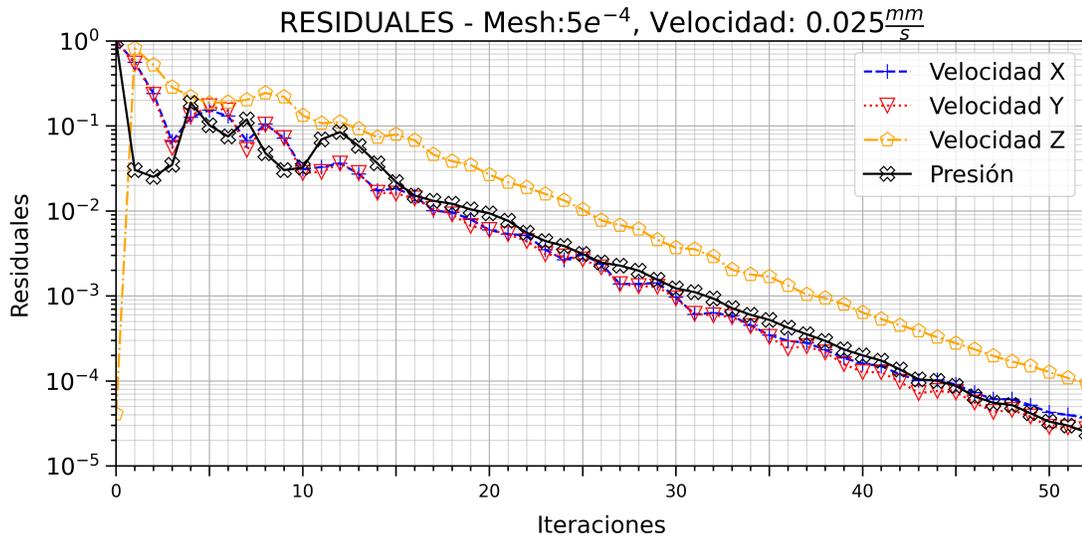


Figura 3.16: Residuos de la simulación del dispositivo microfluídico caótico, elemento de mallado con tamaño $5e^{-4}$ y velocidad 0.025 mm/s

3.2.2. Influencia de la velocidad en la simulación

Como se comentó anteriormente, la mezcla se ve influenciada por diversos factores, en esta parte del trabajo se comentará cómo la velocidad influye en la misma.

Se buscó simular la mezcla de dos fluidos en dos dispositivos microfluídicos, uno simple y otro caótico. En una primera instancia se muestran los resultados en el dispositivo microfluídico simple, como se pueden apreciar en las Figuras 3.17, 3.18 y 3.19. En estos se puede ver que se mantiene una interfaz fina al inicio y que a través del camino, se ensancha minúsculamente. Esto se debe a que no se presentan obstáculos o formas geométricas que mantienen puntas; al no existir estas, no se generan vórtices y la mezcla por advección no sucede. Por otra parte, existe una interfaz debido a la difusión entre los fluidos.

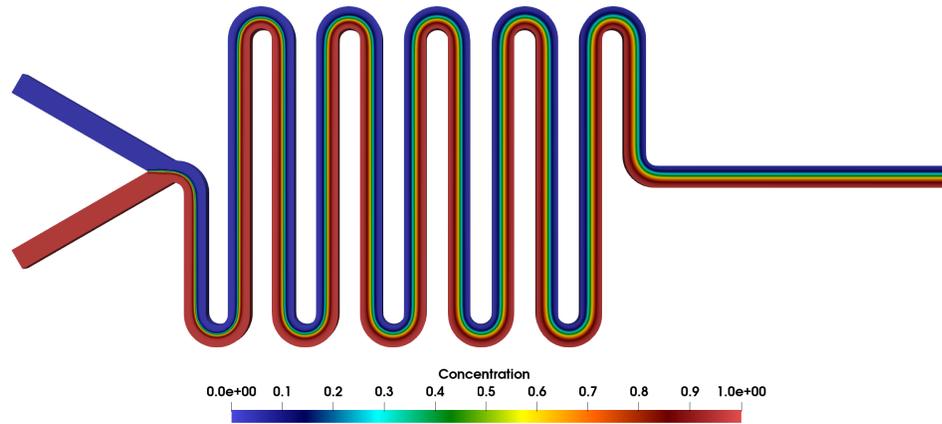


Figura 3.17: Resultados en dispositivo microfluídico simple con velocidad 0.025 mm/s

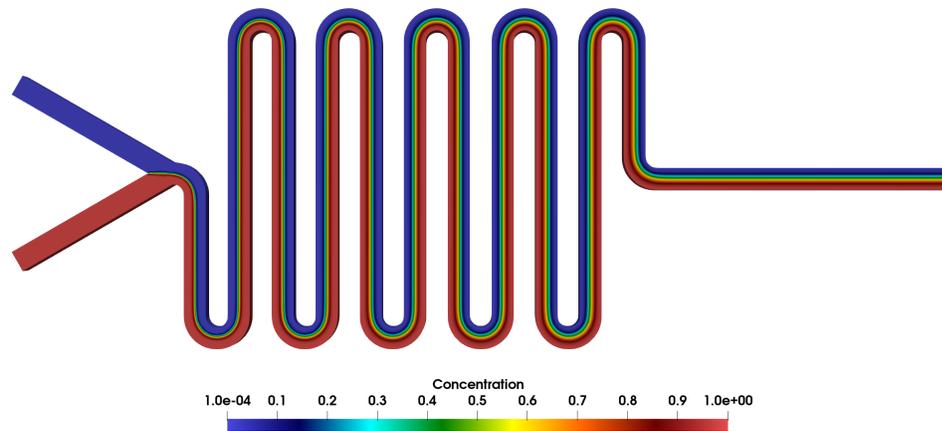


Figura 3.18: Resultados en dispositivo microfluídico simple con velocidad 0.05 mm/s

Respecto al dispositivo microfluídico caótico, en este se puede apreciar cambios notables que produce la velocidad durante la mezcla.

En primer lugar, lo que se quiere demostrar es que el micromezclador caótico efectivamente produce una mezcla mucho antes de llegar al final de su camino. En la Figura 3.20 una nivel de mezcla aceptable se produce cerca al cuarto pico, similarmente en la Figura 3.22. A continuación, en la Figura 3.21 en el tercer pico ya existe una mezcla aceptable. Estos casos resultan de la interacción entre la advección y difusión entre los fluidos. Con respecto a la advección, está ligada a la velocidad

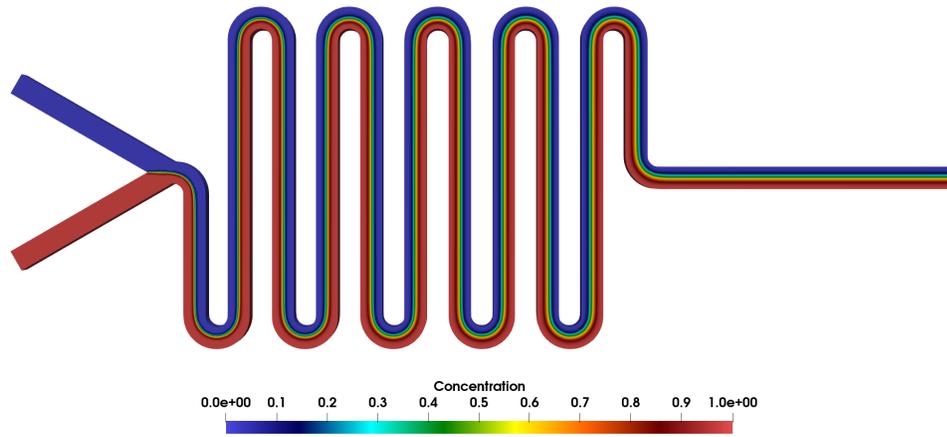


Figura 3.19: Resultados en dispositivo microfluídico simple con velocidad 0.075 mm/s

de entrada de los fluidos y la difusión a las propiedades intrínsecas de los mismos. Es decir, a velocidades altas, como en la Figura 3.22, la difusión no tiene el tiempo necesario para poder accionar. Por consiguiente, a velocidades pequeñas la advección no es muy fuerte, por lo que puede deslizarse a través de los obstáculos (o puntas) sin lograr un movimiento caótico y como se ve en el dispositivo microfluídico simple, la difusión por sí sola no es suficiente para lograr una buena mezcla. Esto involucra que debe existir una velocidad óptima para lograr una mezcla eficaz. Esto se puede observar en la Figura 3.21.

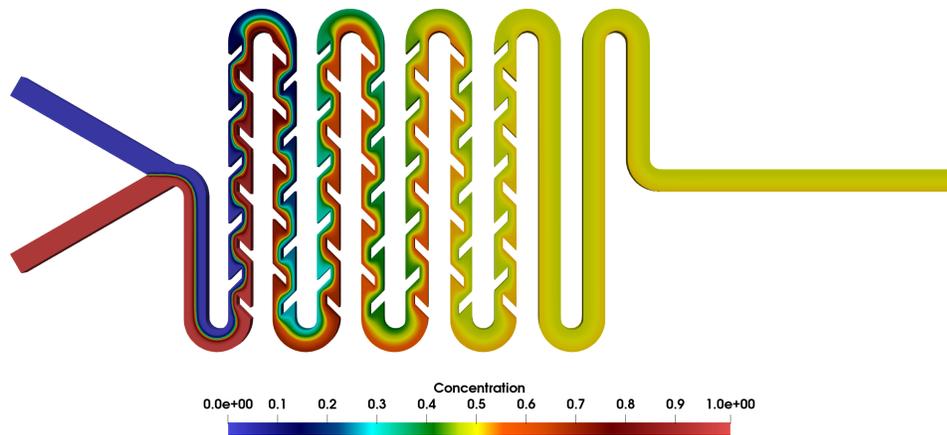


Figura 3.20: Resultados en dispositivo microfluídico caótico con velocidad 0.025 mm/s

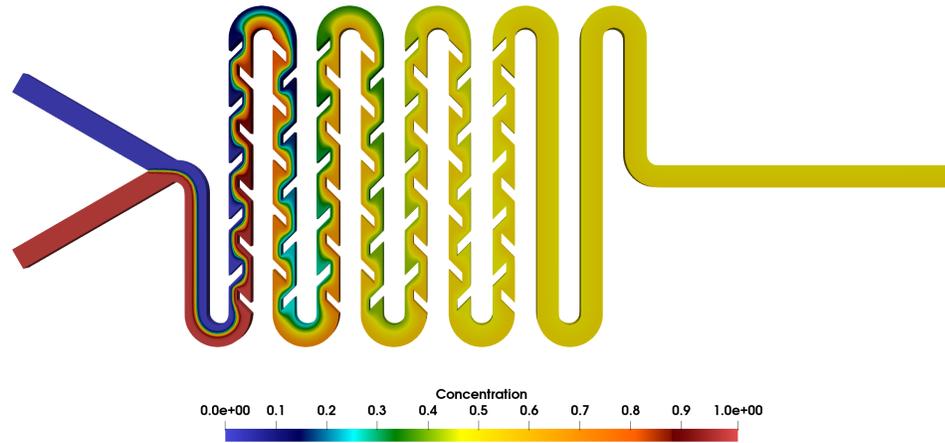


Figura 3.21: Resultados en dispositivo microfluídico caótico con velocidad 0.05 mm/s

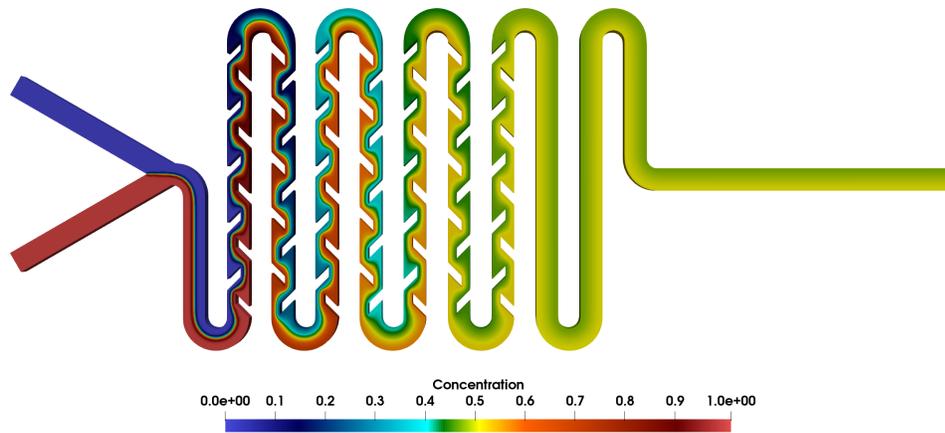


Figura 3.22: Resultados en dispositivo microfluídico caótico con velocidad 0.075 mm/s

Posteriormente, en la sección de resultados experimentales, se corroborará lo propuesto en las simulaciones.

3.3. Método para la cuantificación de la mezcla en los LOCs simulados y experimentales

De acuerdo con Yang et al. [33], el nivel de mezcla se puede calcular utilizando tratamiento digital de imágenes y analizando las capas de color RGB. Estas tienen

una relación directa con la desviación estándar. Para ello se tomaron 10 puntos entre picos y valles, uno al inicio y finalmente uno más cerca al final.

En el procesamiento realizado, se pudo observar que la capa roja tiene mayor contribución en el análisis que las otras capas. Esto se puede apreciar en la Figura 3.23, donde la capa azul no favorece la medida de datos y la capa verde es tenue en mostrar resultados experimental. Los resultados simulados descompuesto es más homogéneo. Por tanto, en las Figuras 3.24 y 3.25 se cuantifica el nivel de mezcla haciendo uso de su desviación estándar, la influencia de la velocidad y todo esto en base a la capa roja de la imagen.

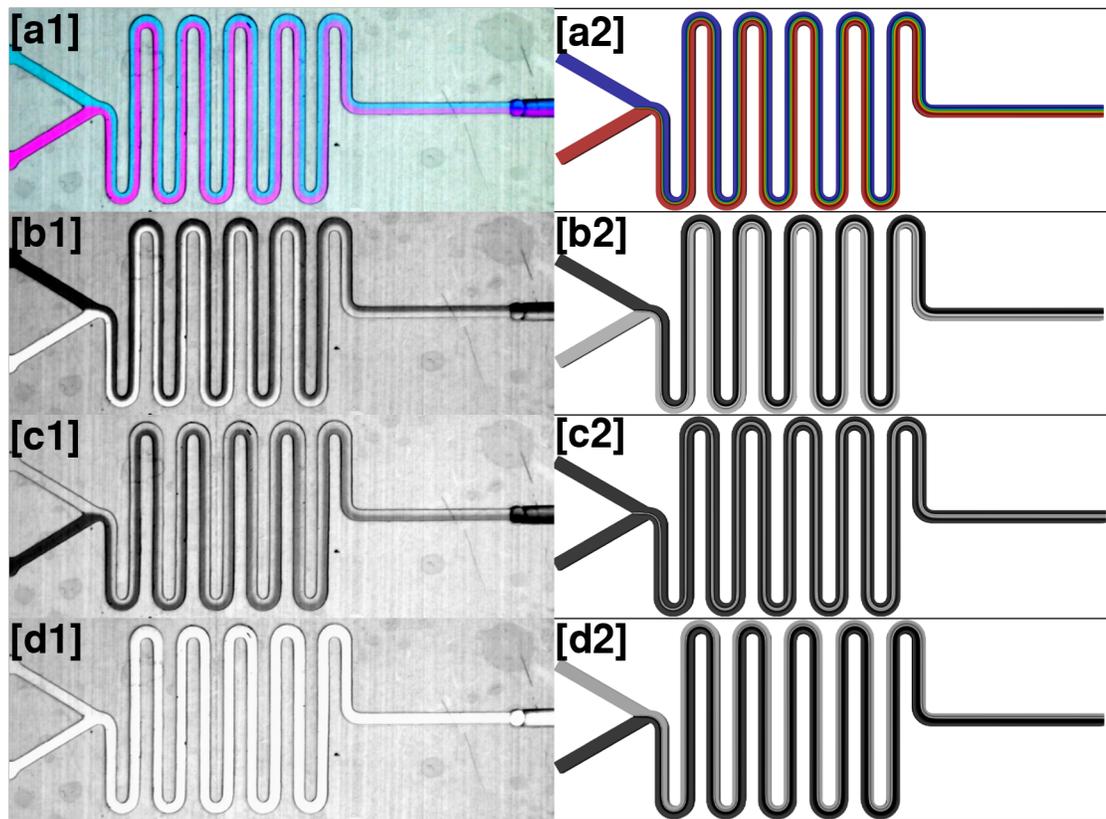


Figura 3.23: Descomposición en colores primarios en el dispositivo microfluídico simple. Resultado experimental. a1) Imagen original, b1) Imagen en Rojo, c1) Imagen en Verde, d1) Imagen en azul. Resultado simulado. a2) Imagen original, b2) Imagen en Rojo, c2) Imagen en Verde, d2) Imagen en azul.

El análisis en el dispositivo microfluídico simple (Figura 3.24), se tiene una recta casi horizontal para las tres velocidades. Se esperaba este comportamiento, ya que no está ocurriendo una mezcla y esa ligera pendiente se debe a la variedad de colores presentes representando la difusión entre fluidos.

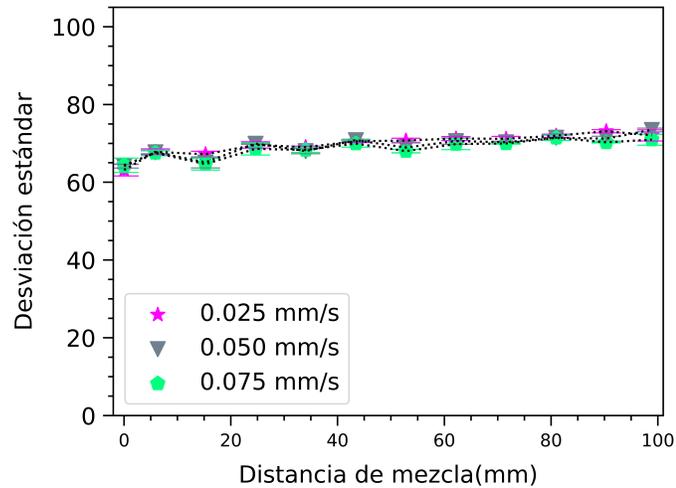


Figura 3.24: Evolución del nivel de mezcla simulado en el dispositivo microfluídico simple.

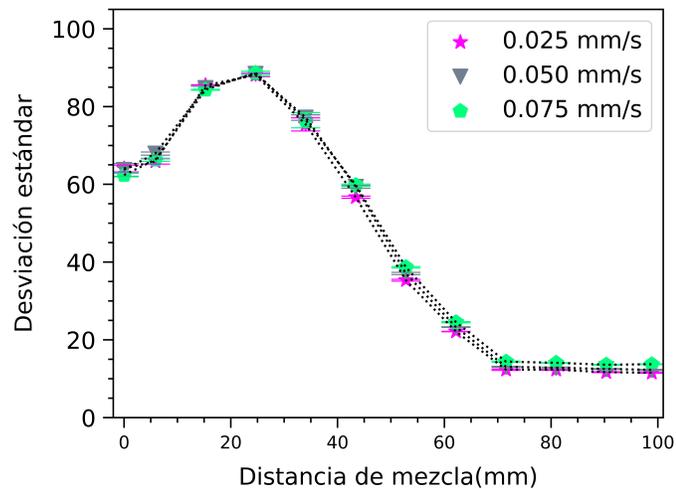


Figura 3.25: Evolución del nivel de mezcla simulado en el dispositivo microfluídico caótico.

Mientras que, en el dispositivo microfluídico caótico (Figura 3.25) hay una caída fuerte en el valor de la desviación estándar, debido a la homogeneidad de los colores que indican un nivel de mezcla elevado. La pequeña subida entre 10 y 30 mm, se debe a cantidad de colores presentes correspondiente a la difusión. Este comportamiento se puede observar en las tres velocidades.

3.4. Conclusiones

En este capítulo se ha dado a conocer en profundidad los procedimientos computacionales que se siguieron para simular. Iniciando con el diseño del micromezclador, replicado y adaptado a los recursos con los que se cuentan. Llevando a cabo un solo microdispositivo con dos canales para su posterior comparación.

De la misma manera, se explicaron partes de los códigos de OpenFOAM, como:

- El código fuente de SimpleFOAM. Donde se comentó el proceso de corrección en la presión para Volúmenes Finitos.
- Las condiciones de frontera. Donde se detallaron de manera textual y matemática las condiciones utilizadas y la relevancia en aproximarlas a la realidad.
- Parámetros. Aquí se estudiaron los valores que permanecerán constantes en toda la simulación y la interpretación de los mismos.
- Post-procesamiento. Se vió una ligera introducción a ParaView, un software *Open Source* para el procesamiento y visualización de datos científicos.

Se llevaron a cabo dos estudios en la simulación, siendo uno de ellos como el mallado influye en la simulación. Para esto se realizaron tres mallados, uno de celda gruesa (coarse), uno fino y otro super fino. Dando el mejor resultado pero con un costo más alto de procesamiento, el mallado de celda super fina.

A demás, el estudio sobre como la velocidad influye en la mezcla del dispositivo microfluídico, verificando que en el dispositivo microfluídico simple la mezcla se mantiene estable en todo su recorrido. En cambio, en el dispositivo microfluídico caótico, tiene una longitud de mezcla menor a comparación que el dispositivo

microfluídico simple en las tres velocidades estudiadas.

Adicionalmente, la cuantificación de estos resultados a través de procesamiento de imágenes en base a sus colores primarios RGB, tomando la capa roja como la de mayor influencia en el análisis de la desviación estándar. Obteniendo de esto, que la mezcla en el dispositivo microfluídico simple se mantiene cuasi-homogénea; mientras que en el dispositivo microfluídico caótico se aprecia una caída abrupta en el cálculo de la desviación estándar, dando a denotar un nivel de mezcla más elevado en el recorrido del mismo. Todos estos procesos tienen una relación directa con la advección y difusión entre los fluidos.

Capítulo 4

Sistema Experimental

Se adaptó el sistema experimental, partiendo de la tesis del Dr. G. Comina et al. [10] a las condiciones con las que se cuentan, con el fin de poder realizar y capturar la mezcla en imágenes y videos.

4.1. Descripción del sistema experimental

El sistema consta principalmente de dos bombas de jeringas, una cámara fotográfica, un controlador para las bombas, un juego de jeringas, una impresora 3D para resina y un dispositivo microfluídico. A continuación, se presenta el sistema experimental en la Figura 4.1.

Se comienza encendiendo el controlador de las bombas, ajustamos con la aplicación móvil la velocidad de las mismas. Estas empujan los émbolos de las jeringas haciendo fluir líquido a través de las mangueras de silicona. Usando las conexiones de los dispositivos microfluídicos, el líquido llega hacia el microcanal. Donde finalmente con la cámara tomamos capturas en imágenes y videos.

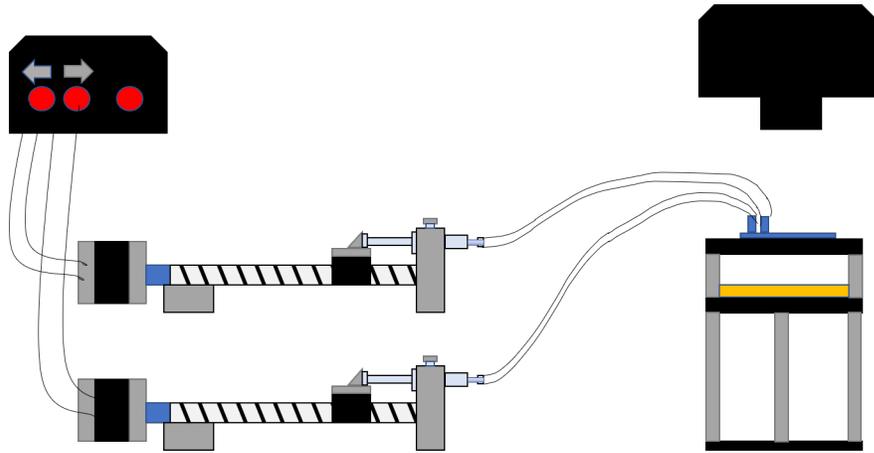


Figura 4.1: Esquema del sistema experimental.

4.2. Sistema de impresión 3D en resina

A continuación, se presentan los componentes que constituyen el sistema de impresión 3D en resina y el proceso en sí mismo.

4.2.1. Componentes del sistema de impresión

Los componentes del sistema de impresión se muestran en la tabla 4.1:

a.	Impresora 3D fotolitográfica Photon Anycubic.
b.	Resina Transparente Anycubic.
c.	Papel aluminio.
d.	Alcohol Etilico de 96.
e.	Alcohol Isopropílico.

Cuadro 4.1: Componentes del sistema de impresión.

En la Figura 4.3 se muestra la parte interna de la impresora Anycubic - Photon. Las especificaciones de cada componente se encuentran en la tabla 4.2.

El proceso de impresión es denominado *LCD Masking Shadow*, esto muestra una máscara (capa) cada vez que sube el eje Z. Cada capa se cura mediante el sistema UV-LED interno que pasa a través de la pantalla LCD. La impresora realiza este proceso por 45 minutos hasta terminar todas las capas.

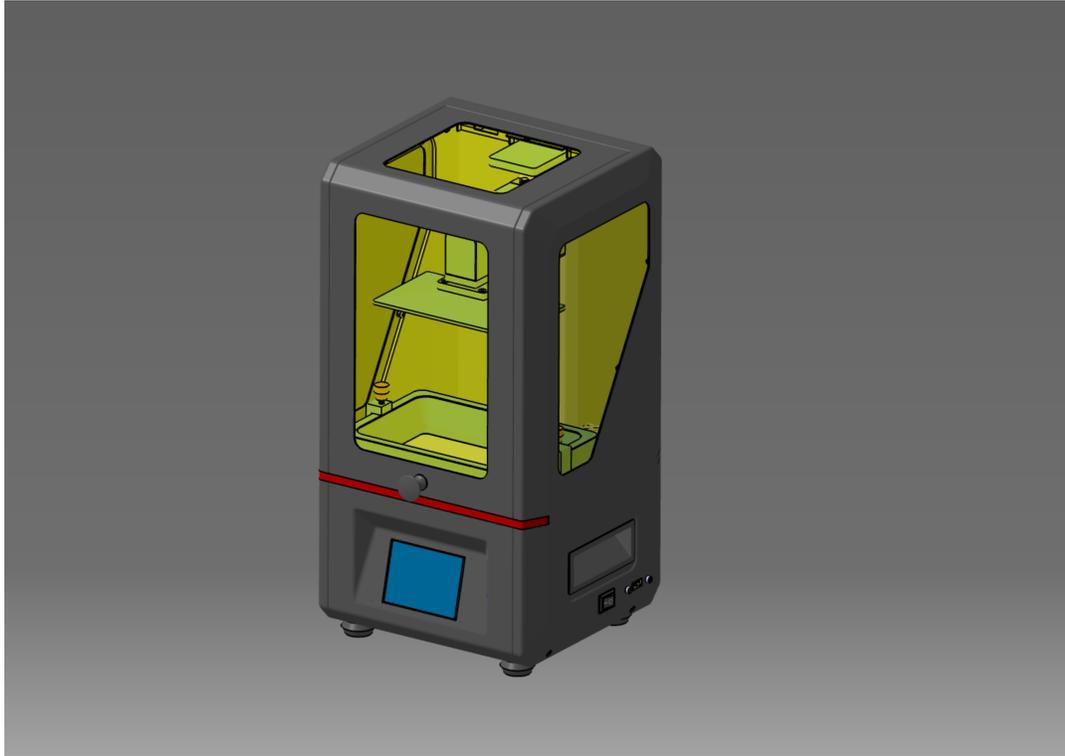


Figura 4.2: Impresora Photon para impresiones en resina, dibujada en Inventor.

a.	Plataforma base
b.	Eje Z
c.	Sistema de purificación
d.	2K LCD masking screen
e.	Sistema UV-LED
f.	Pantalla LCD touch

Cuadro 4.2: Componentes internos de la impresora Photon mostrado en la Figura 4.3.

4.2.2. Proceso de impresión, limpieza y curación

Una vez realizada la impresión, se procede a remover la pieza de la plataforma base utilizando una espátula. Esta pieza contiene residuos de resina no curada en toda su superficie, por lo que para removerlo finalmente se debe hacer uso de dos procesos, uno físico y otro químico. Se coloca la pieza en alcohol isopropílico; se utiliza este tipo de alcohol por ser un disolvente medianamente fuerte, de fácil acceso y menos

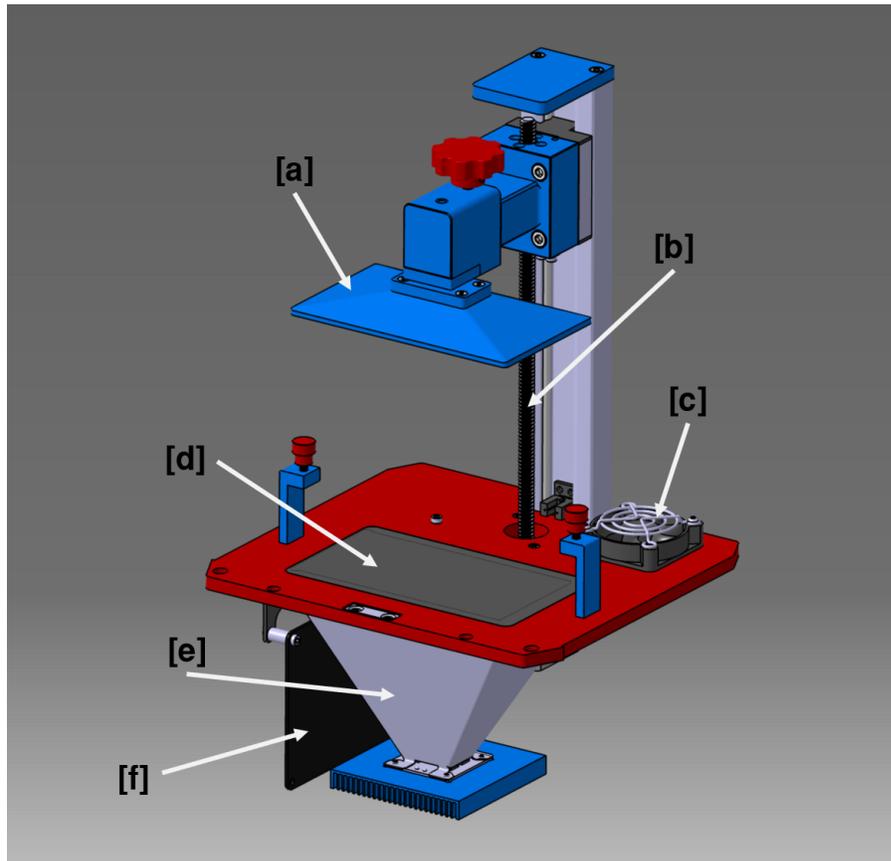


Figura 4.3: Partes internas de la impresora Photon, dibujada en Inventor.

tóxico. Adicionalmente se coloca la pieza dentro del sonicador (Ultrasonic bath - DHWUCD06H), con el cual emitimos ondas para acelerar el proceso de remoción, este proceso indica que la longitud de onda del ultrasonido debe ser de la misma magnitud o menor al diámetro de las partículas de resina.

Una vez realizado el proceso de remoción, se debe realizar la curación (endurecimiento) de la pieza impresa. Para esto hay diversos tipos de máquinas capaces de emitir luz UV, en este caso se utilizó la luz natural.

El proceso cuenta con un paso adicional. Para tener la certeza de una buena impresión se coloca la pieza debajo del microscopio y observamos el camino que realiza el canal.

4.3. Sistema de bombas de jeringas

El sistema de bombas de jeringas tiene dos subsistemas relevantes, uno mecánico y el otro que conlleva los líquidos.

4.3.1. Subsistema Mecánico

Los componentes del sistema mecánico se pueden ver en la Figura 4.4.

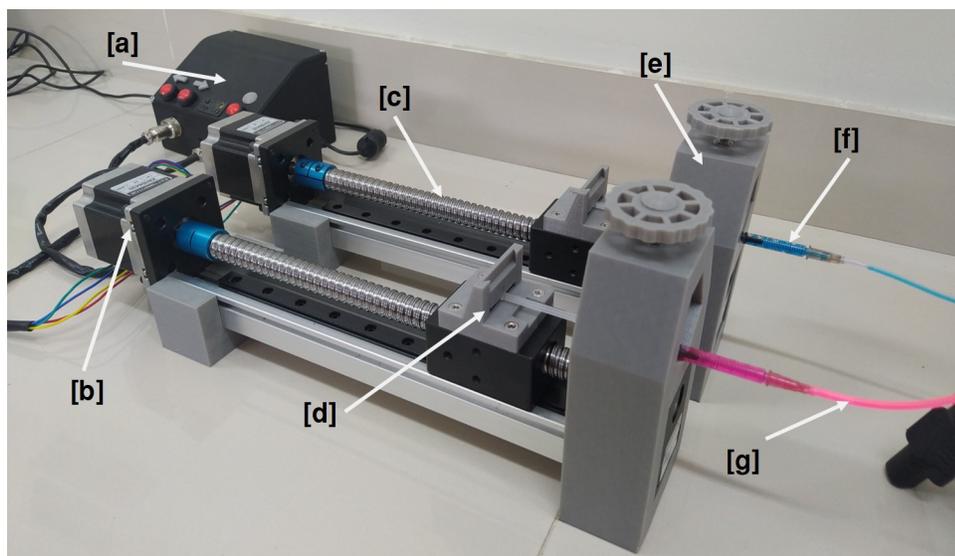


Figura 4.4: Componentes del sistema de bombas de jeringas.

a.	Controlador para bombas
b.	Motor paso a paso
c.	Tornillo sin fin
d.	Soportes para empuje
e.	Soportes para jeringas
f.	Jeringas de 1.0 ml
g.	Mangueras de silicona ECTY 1x3mm

Cuadro 4.3: Componentes del sistema mecánico de las bombas de jeringas mostrado en la Figura 4.4.

Un aspecto importante de las bombas es su control. Se implementó un equipo electrónico que utiliza un circuito y programación en Arduino para controlar la

velocidad lineal del motor paso a paso. Este equipo se puede visualizar en la Figura 4.5.



Figura 4.5: Controlador para las bombas.

La programación está en base a un motor *NEMA*. Haciendo uso del driver TB6560 y la librería *Microstepping* se puede dar una mayor resolución a las vueltas. El motor paso a paso en 1 vuelta da 200 pasos ($1,8^\circ/\text{paso}$), con la librería aumentamos la resolución en $1/16$, dando ahora en 1 vuelta 3200 pasos. Por otro lado, en una vuelta avanza 5mm se manera lineal. Este razonamiento es útil ya que el código entiende los datos ingresados como $\frac{\text{pasos}}{\text{segundos}}$. Finalmente la velocidad que se ingresa a través del aplicativo móvil (v en mm/s) es convertida a $\frac{3200}{5} \cdot v$ (mm/s) e interpretado mediante el código.

4.3.2. Subsistema Fluídico

En esta segunda parte se describen las jeringas y los líquidos utilizados. Las jeringas utilizadas tienen un diámetro de 4.78mm y una capacidad de 1.0 ml. Como se indica, son útiles para flujos pequeños. Así también, mangueras de silicona con diámetro interno 1.5mm y externo 3mm.

Los fluidos utilizados son soluciones de colorante en agua. Como líquidos de prueba se usaron soluciones de Azul 1 E-127 1M [1] y rodaminaB 1M [3].

4.4. Sistema de adquisición de datos

Los componentes del sistema de adquisición de datos se pueden ver en la Figura 4.6 y con mayor detalle en la tabla 4.4.

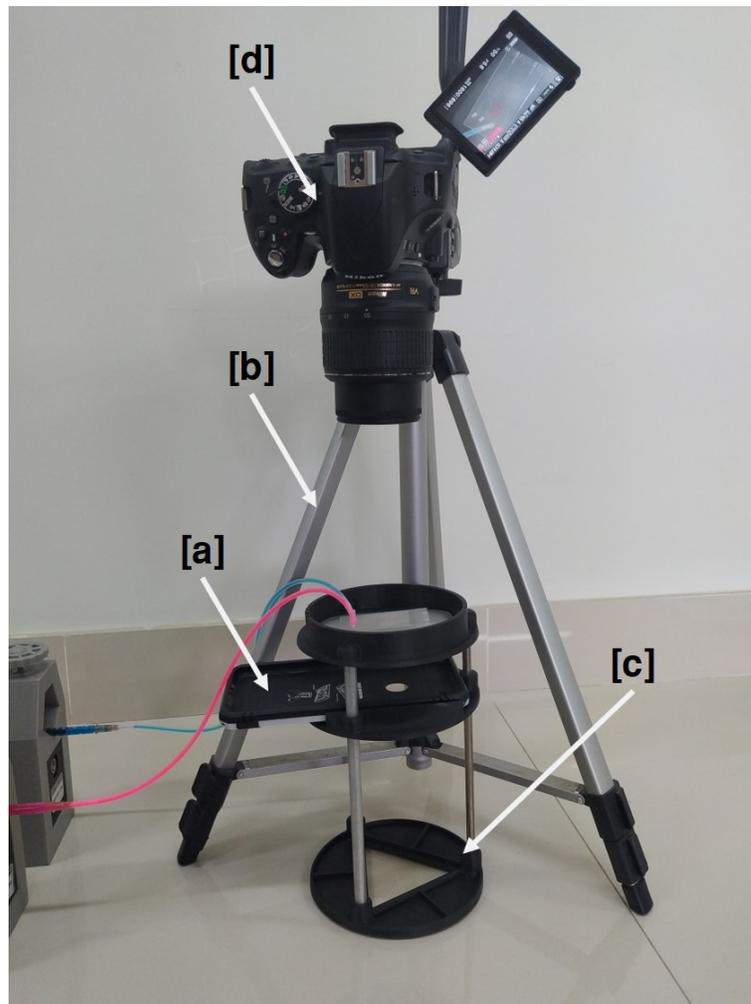


Figura 4.6: Componentes del sistema de adquisición de datos.

Este sistema consta de una plataforma impresa en 3D con dos niveles, una para la fuente luminosa, y la más superficial, para colocar el dispositivo microfluídico.

También se utilizó una cámara Nikon D5600, la cual toma fotos en 1980pp y videos en la misma calidad con 30fps. Así mismo un celular Xiaomi RedmiNote8 como fuente luminosa.

a.	Celular Xiaomi RedmiNote8
b.	Trípode
c.	Soporte para colocar la muestra
d.	Cámara Nikon D5600

Cuadro 4.4: Componentes del sistema de adquisición de datos en la Figura 4.6.

4.5. Conclusiones

Tras múltiples intentos, se pudo encontrar una configuración adecuada para la impresión en resina de los dispositivos. Se modificó la velocidad de impresión con el fin que cada capa se adhiriera correctamente a la capa previa. También se adaptó el tamaño del dispositivo para encajar en la plataforma de la impresora y la resolución de la misma. Así mismo, un proceso correcto para la limpieza y curación de los dispositivos impresos, mediante alcohol isopropílico y la luz natural. Obteniendo una pieza funcional, tanto en el canal caótico como simple.

Para poner en marcha los ensayos experimentales, se logró desarrollar un sistema de control en microfluídica. Haciendo uso de los motores NEMA, se pudo empujar los fluidos fluorescentes a través de las jeringas y con el uso de una aplicación móvil se logró controlar la velocidad de entrada en los dispositivos.

Finalmente, para la toma de datos, se diseñó e imprimió una plataforma en base a la altura del trípode y que pueda difuminar la luz. Con esto, se hizo uso de una cámara Nikon y así realizar capturas en fotos y videos del experimento.

Capítulo 5

Resultados experimentales y Conclusiones Finales

5.1. Descripción del experimento

Con el fin de estudiar la mezcla de fluidos en dispositivos microfluídicos se usaron dos tintes de uso habitual en microfluídica por su fluorescencia, la rodaminaB y el tinte de grado alimentario azul 1 E-127. Adicionalmente, se usó un sistema de jeringas controlado por una aplicación móvil y un sistema de toma de datos empleando una cámara Nikon D5600. El propósito de este estudio es comparar la mezcla de dos fluidos a través de un dispositivo microfluídico simple y otro caótico. Las mediciones ejecutadas para lograr este propósito fueron: Se tomaron capturas en fotos y videos, a los cuales se les aplicó algoritmos en MATLAB R2021a y Python 3.8 para procesarlas. Con esto se estudió la mezcla de fluidos en micromezcladores. En base a estos datos se pudo realizar la comparación entre dispositivos microfluídicos. Y su paralelismo con la simulación en OpenFOAMv2012.

5.2. Estudio de la mezcla de fluidos en micromezcladores

En este trabajo se capturaron los datos mostrados en las Figuras 5.1 y 5.2. Referente a cada uno de los dispositivos microfluídicos estudiados.

En relación al dispositivo microfluídico simple (Figura 5.1), se evaluó el cambio en la mezcla respecto a la velocidad de entrada. Los resultados obtenidos fueron que en el dispositivo microfluídico con menor velocidad (Figura 5.1a) obtuvo una mejor mezcla en proporción a los demás, esto debido a la difusión. La interfaz en los tres casos se mantiene estable.

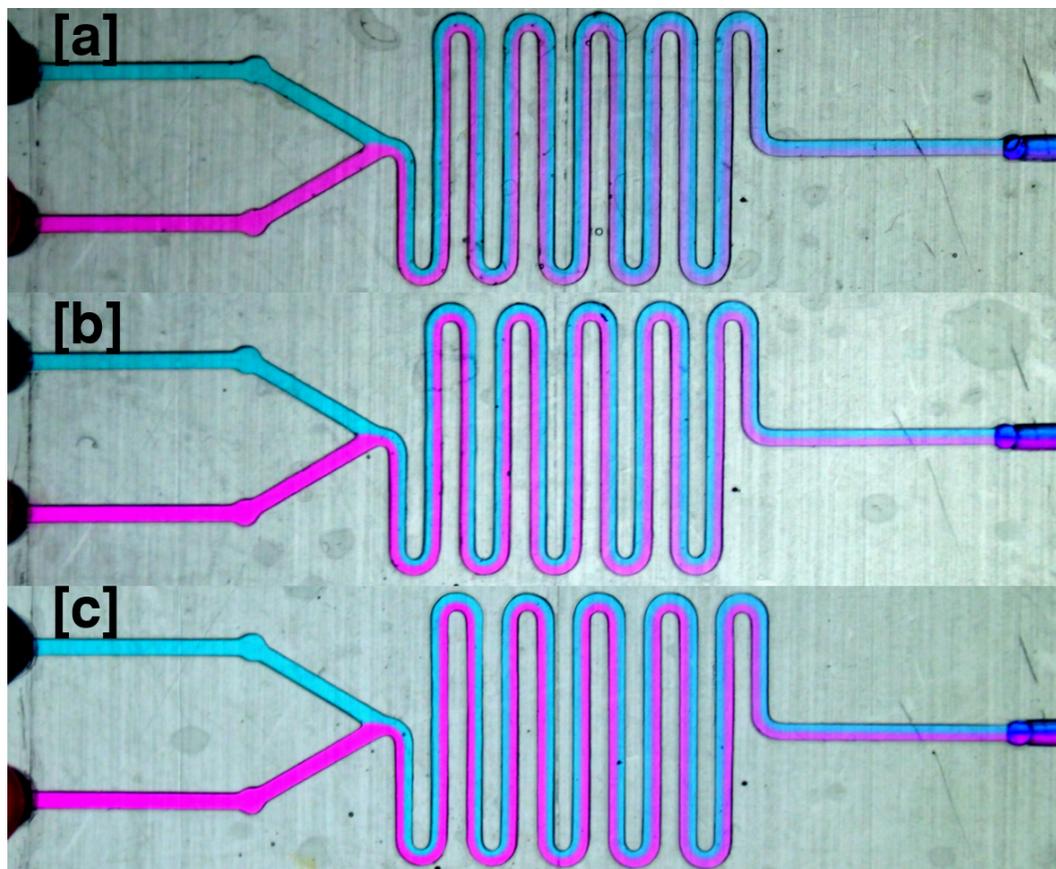


Figura 5.1: Resultados experimentales en el dispositivo microfluídico simple. a) velocidad 0.025 mm/s, b) velocidad 0.050 mm/s, c) velocidad 0.075 mm/s

En el caso del dispositivo microfluídico caótico (Figura 5.2), al igual que en el dispositivo microfluídico simple, se evaluó su eficiencia variando la velocidad de entrada. En estos se pueden apreciar que la longitud de mezcla es menor al tamaño total. Además, que los dispositivos microfluídicos de las Figuras 5.2a y 5.2c cuentan con mayor longitud de mezcla a comparación con la Figura 5.2b. Esto debido a la velocidad óptima de funcionamiento.

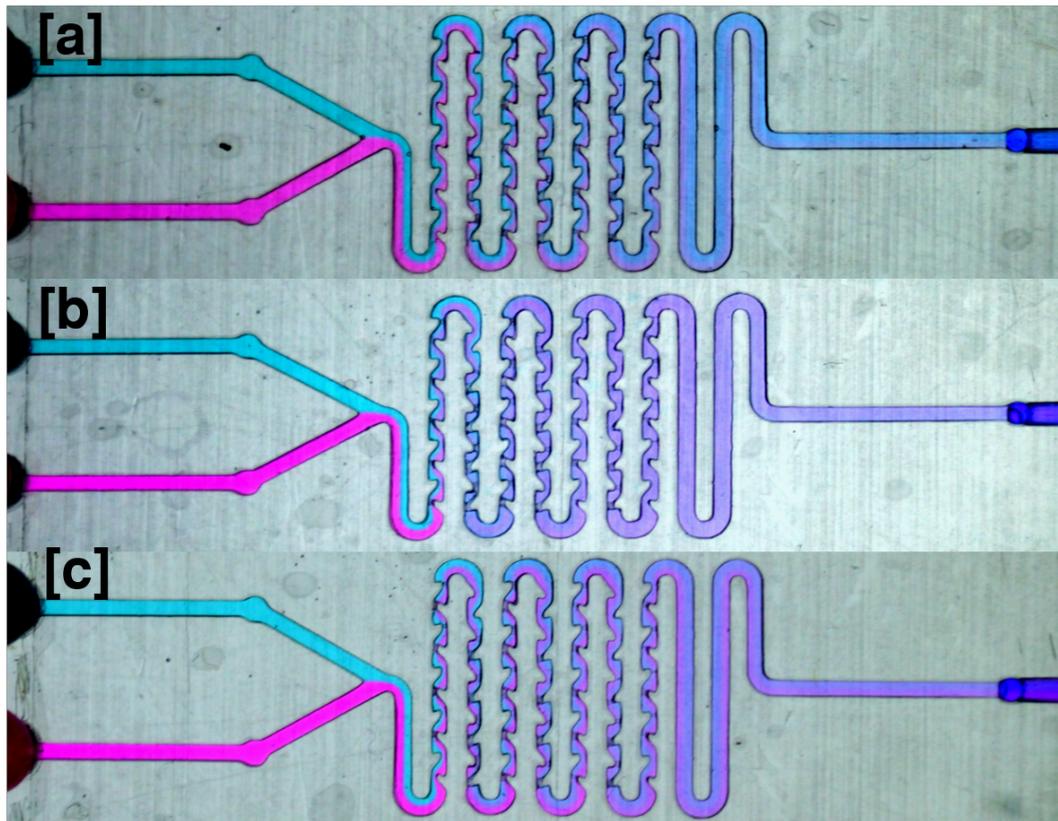


Figura 5.2: Resultados experimentales en el dispositivo microfluídico caótico. a) velocidad 0.025 mm/s, b) velocidad 0.050 mm/s, c) velocidad 0.075 mm/s

5.2.1. Cuantificación de la mezcla mediante procesamiento de imágenes

Como se mencionó previamente en el capítulo de simulaciones, se analizarán las imágenes acorde a la capa roja y se calculará la evolución del nivel de mezcla,

utilizando la desviación estándar en 12 puntos de ambos dispositivos microfluídicos.

En el dispositivo microfluídico simple, como se puede apreciar en la Figura 5.3, el nivel de mezcla no es muy alto. A través este, la caída en la desviación estándar es casi lineal. En el caso que cuenta con velocidad de 0.025 mm/s, se observa que la cuasi-recta está más abajo a comparación de las otras, esto se debe a que existe una reacción alta por parte de la difusión, al ir mucho más lento.

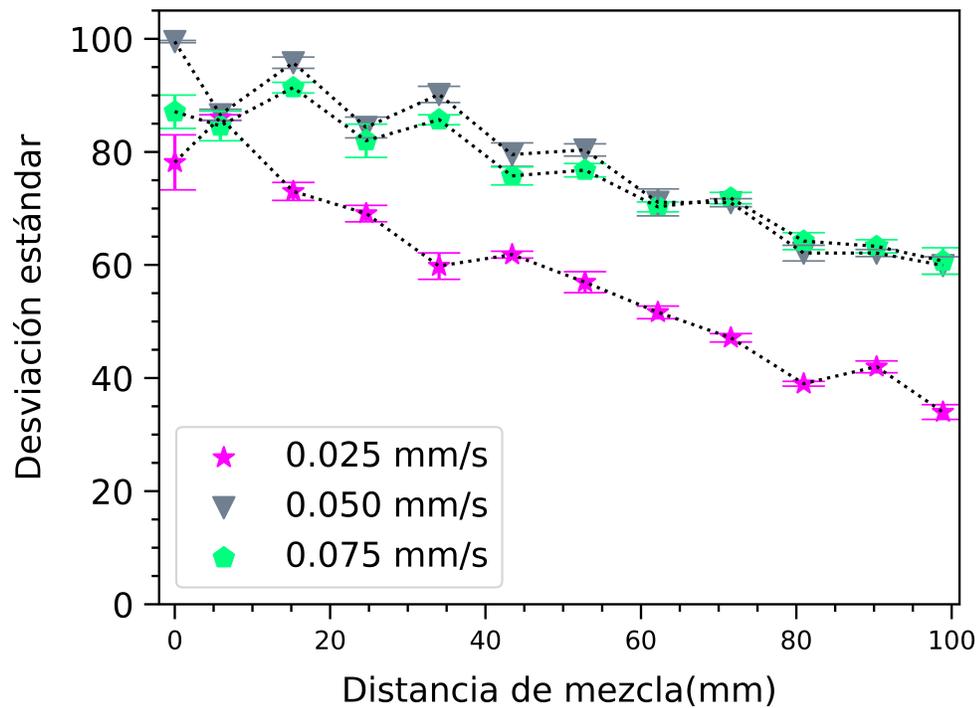


Figura 5.3: Evolución del nivel de mezcla en el dispositivo microfluídico simple experimental.

Por otro lado, en el dispositivo microfluídico caótico (Figura 5.4). Se aprecia un cambio fuerte en la desviación estándar, casi polinomial, indicado que existe un nivel alto de mezcla. En el caso de la velocidad 0.050 mm/s, se encuentra una caída con mayor notoriedad, esto se debe a que, como se comentó en la simulación para el dispositivo microfluídico caótico, esta es la velocidad óptima de funcionamiento.

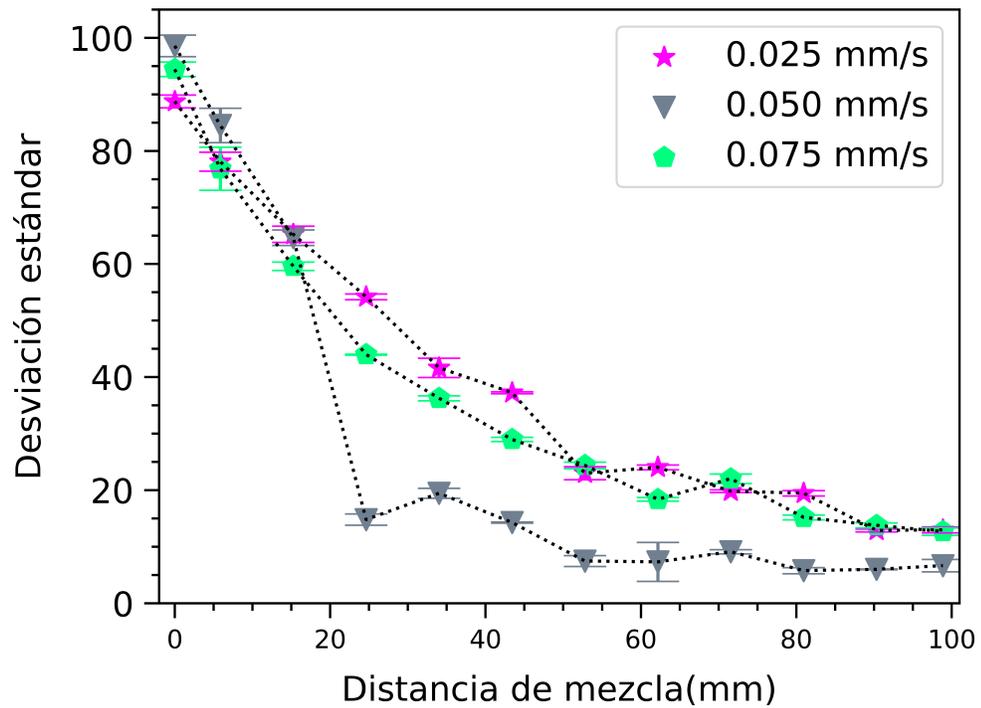


Figura 5.4: Evolución del nivel de mezcla en el dispositivo microfluídico caótico experimental.

5.2.2. Comparación entre los resultados de la simulación y experimentales

Finalmente se muestran los resultados comparativos entre la parte experimental y la simulación. En esta última etapa, se verifican las proximidades entre los resultados y se reafirma al dispositivo microfluídico caótico con el mayor nivel de mezcla y menor longitud de la misma, respecto al dispositivo microfluídico simple.

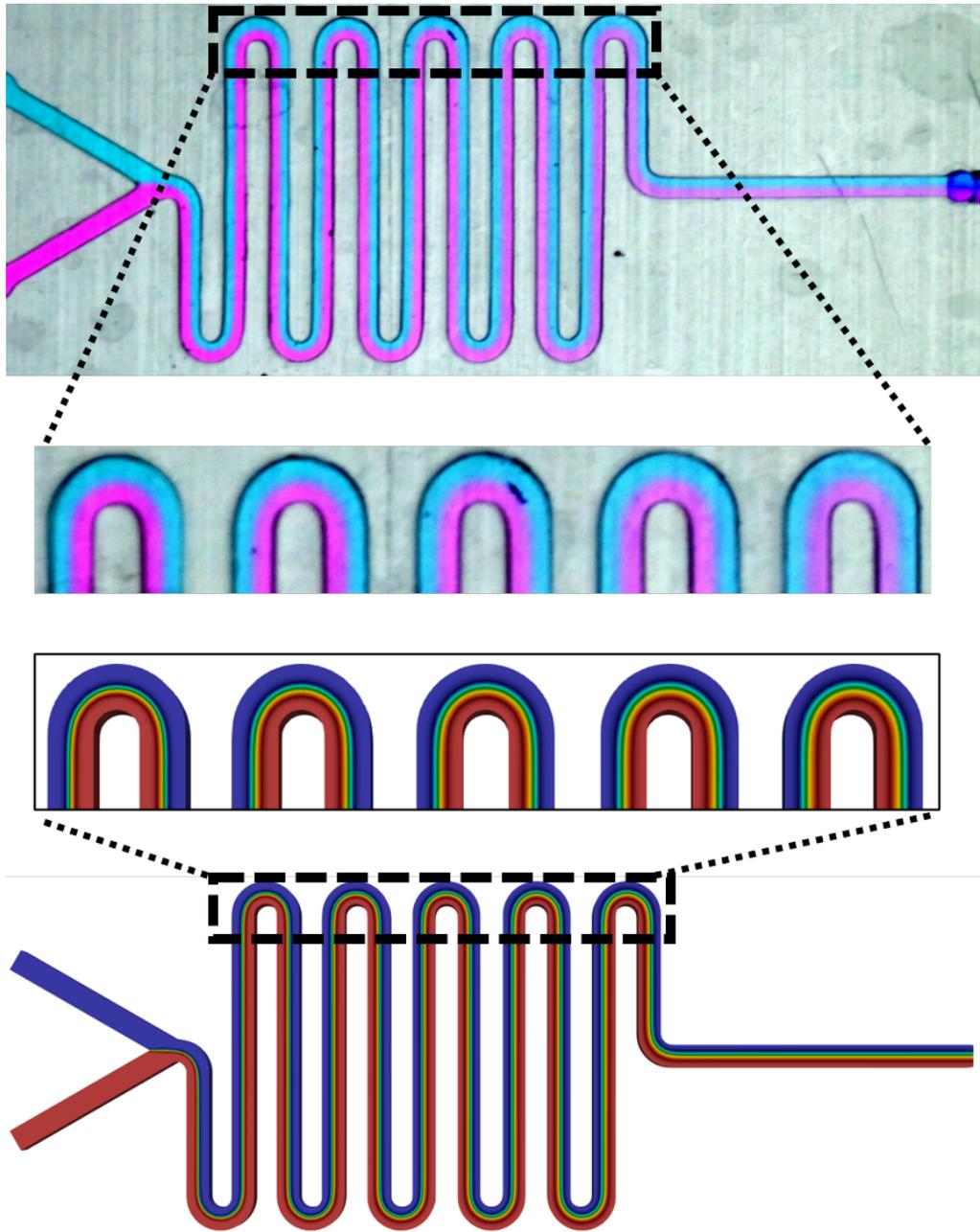


Figura 5.5: Comparación en el dispositivo microfluídico simple.

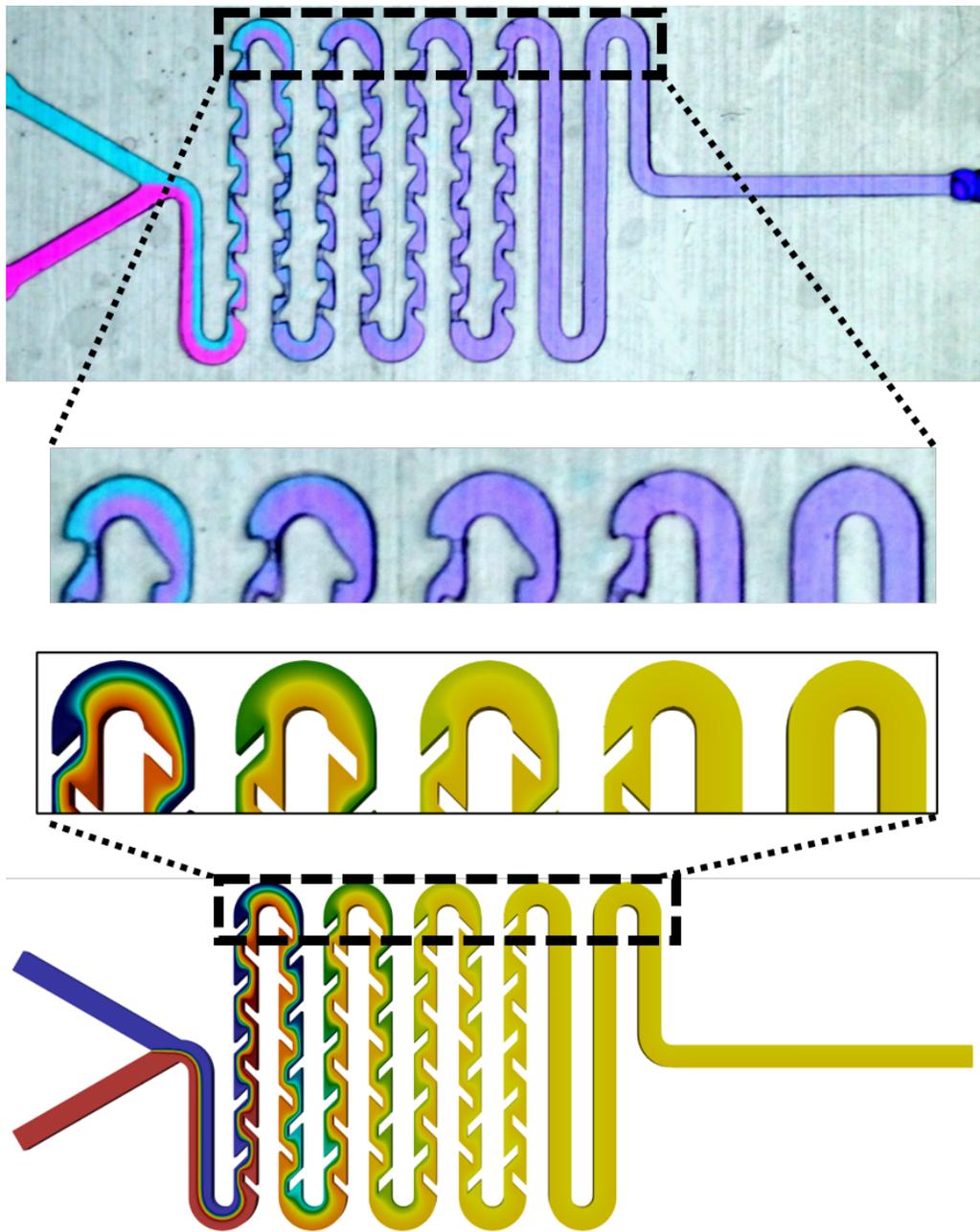


Figura 5.6: Comparación en el dispositivo microflúidico caótico.

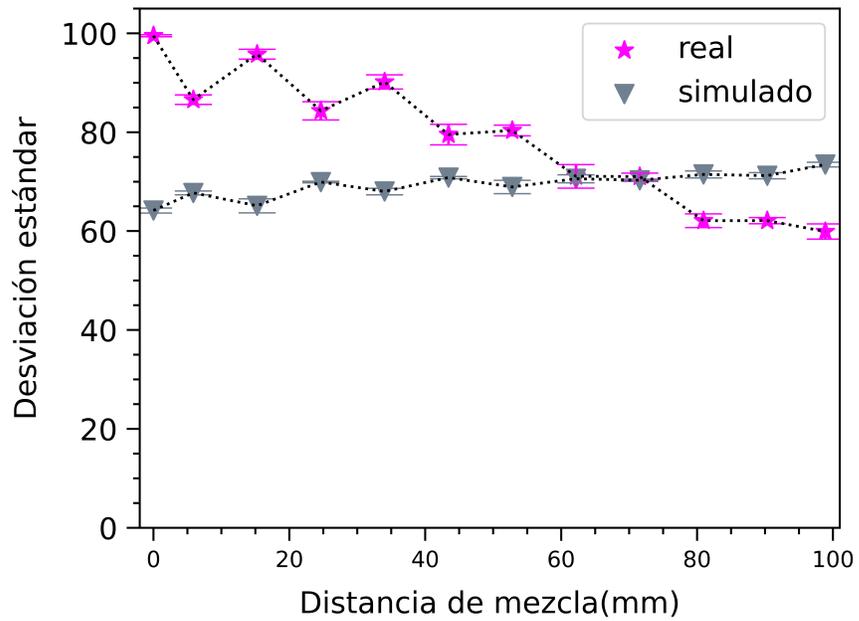


Figura 5.7: Comparación de la desviación estándar en el dispositivo microfluídico simple.

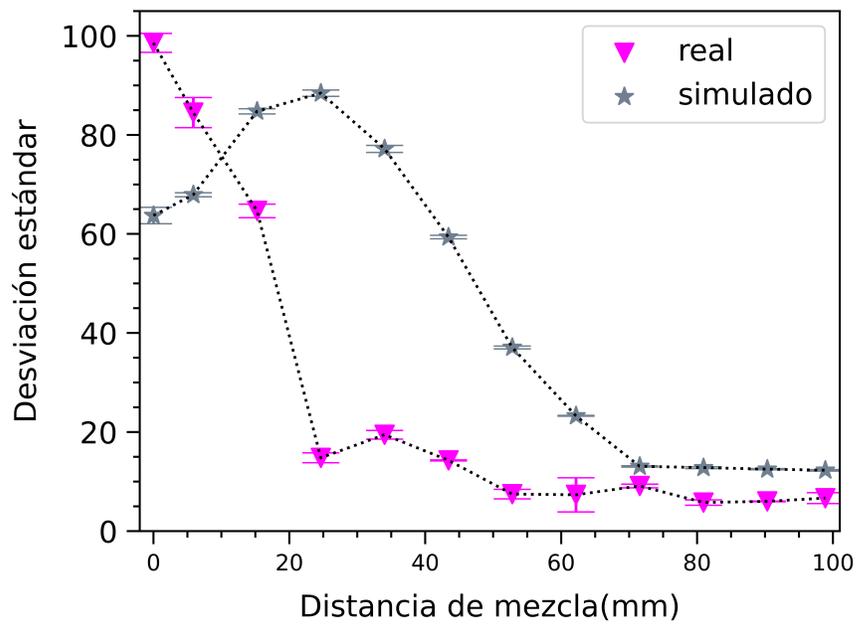


Figura 5.8: Comparación de la desviación estándar en el dispositivo microfluídico caótico.

Conclusiones

Mediante los estudios realizados, se pudo sustentar la comparación entre los dispositivos microfluídicos. Visualmente se observa que, en el dispositivo microfluídico simple no se logra un nivel mezcla elevado en todo su recorrido, únicamente mantiene una interfaz que se logra ensanchar levemente. Por otro lado, en el dispositivo microfluídico caótico, en el tercer pico ya se tiene un nivel de mezcla alto. Debido a que las protuberancias de la geometría logran generar vórtices y con ello lo que denominamos mezcla. Es decir, se logró corroborar experimentalmente que el dispositivo microfluídico caótico tiene una menor longitud de mezcla en comparación con el dispositivo microfluídico simple.

Esta verificación se llevó a cabo utilizando tres velocidades diferentes, la primera de 0.025 mm/s, la segunda de 0.050 mm/s y la tercera de 0.075 mm/s. En el dispositivo microfluídico simple, el uso de las tres velocidades mostró que, en toda la longitud del camino, predomina la difusión entre los fluidos. Mientras que, en el dispositivo microfluídico caótico, las interacciones debido a la advección y difusión entran en conflicto. Siendo que, a velocidades muy lentas, la difusión toma mayor relevancia, y a velocidades muy altas, la advección predomina. Por tanto, se encontró una velocidad óptima de funcionamiento donde ambas puedan interactuar mutuamente para lograr un buen nivel de mezcla; siendo esta velocidad la de 0.050 mm/s.

Haciendo uso de procesamiento de imágenes, se pudo cuantificar cómo evoluciona la mezcla a través de la longitud de los caminos. Empleando del concepto de colores primarios en cada píxel de imagen capturada, la desviación estándar del valor de cada píxel (específicamente de la capa roja) mantiene correlación con la longitud de mezcla. Gracias a esto, se obtuvo la evolución de la mezcla a través de la longitud del dispositivo microfluídico. Consiguiendo mantener coherencia con la simulación. Siendo así que, en el dispositivo microfluídico simple, los cambios en la desviación estándar y el nivel de mezcla son bajos. En tanto, en el dispositivo microfluídico caótico, hay cambios notorios en la desviación estándar, dando a entender que existe un nivel de mezcla alto. Finalizando nuevamente con la relevancia del dispositivo microfluídico caótico sobre el simple.

Por último, en las imágenes que muestran la comparación entre los resultados

experimentales y simulados. Tras el análisis expuesto, se concluye que haciendo uso de la simulación numérica en OpenFOAM, mediante la utilización del algoritmo SIMPLE y la ecuación de transporte, se logró recrear la realidad física de la mezcla de fluidos en dispositivos microfluídicos. La cuál, fue verificada experimentalmente en los dispositivos de microfluídica Lab-On-a-Chip, impresos en resina. Obteniendo finalmente que, los micromezcladores caóticos pasivos, tienen una menor longitud de mezcla a comparación de los micromezcladores con geometría de serpiente simple.

Bibliografía

- [1] Eritrosina. <https://www.aditivos-alimentarios.com/2016/01/E127.html>. Accessed: 2022-08-08.
- [2] Generic scalar transport equation. https://www.cfd-online.com/Wiki/Generic_scalar_transport_equation. Accessed: 2020-04-08.
- [3] Rhodamine b. <https://www.sigmaaldrich.com/PE/en/sds/sigma/83689>. Accessed: 2022-08-08.
- [4] What is the transport equation. [https://www.simscale.com/docs/simwiki/numerics-background/what-is-the-transport-equation/#:~:text=The%20transport%20equation%20describes%20how,temperature\)%20inside%20an%20incompressible%20flow](https://www.simscale.com/docs/simwiki/numerics-background/what-is-the-transport-equation/#:~:text=The%20transport%20equation%20describes%20how,temperature)%20inside%20an%20incompressible%20flow). Accessed: 2020-04-08.
- [5] Daniel Ahmed, Xiaole Mao, Jinjie Shi, Bala Krishna Juluri, y Tony Jun Huang. A millisecond micromixer via single-bubble-based acoustic streaming. *Lab on a Chip*, 9(18):2738–2741, 2009.
- [6] Ismail Emre Araci y Stephen R Quake. Microfluidic very large scale integration (mvlsi) with integrated micromechanical valves. *Lab on a Chip*, 12(16):2803–2806, 2012.
- [7] Nupura S Bhise, João Ribas, Vijayan Manoharan, Yu Shrike Zhang, Alessandro Polini, Solange Massa, Mehmet R Dokmeci, y Ali Khademhosseini. Organ-on-a-chip platforms for studying drug delivery systems. *Journal of Controlled Release*, 190:82–93, 2014.

- [8] Gregor Cerne, Stojan Petelin, y Iztok Tiselj. Coupling of the interface tracking and the two-fluid models for the simulation of incompressible two-phase flow. *Journal of computational physics*, 171(2):776–804, 2001.
- [9] Jay Huiyi Chua, Ru-Ern Chee, Ajay Agarwal, She Mein Wong, y Guo-Jun Zhang. Label-free electrical detection of cardiac biomarker with complementary metal-oxide semiconductor-compatible silicon nanowire sensor arrays. *Analytical chemistry*, 81(15):6266–6271, 2009.
- [10] Germán Comina, Anke Suska, y Daniel Filippini. Pdms lab-on-a-chip fabrication using 3d printed templates. *Lab on a Chip*, 14(2):424–430, 2014.
- [11] Germán Comina, Anke Suska, y Daniel Filippini. 3d printed unibody lab-on-a-chip: Features survey and check-valves integration. *Micromachines*, 6(4):437–451, 2015.
- [12] German Comina Bellido. *Autonomous Lab-on-a-chip: solutions and fast prototyping tools*. Tesis Doctoral, Linköping University Electronic Press, 2021.
- [13] Germán Yuri Comina Bellido. *Dispositivos Lab-on-a-chip y ópticos para mediciones distribuidas con aplicaciones en biomedicina*. Tesis Doctoral, Universidad Nacional de Ingeniería, 2014.
- [14] Ranjitsinha R Gidde, Prashant M Pawar, Babruvahan P Ronge, y Pradeep V Jadhav. Cfd based analysis of simple t-junction and y-junction micro mixers with different obstacles. En *Techno-Societal 2018*, págs. 357–365. Springer, 2020.
- [15] William H Grover, Robin HC Ivester, Erik C Jensen, y Richard A Mathies. Development and multiplexed control of latching pneumatic valves using microfluidic logical structures. *Lab on a Chip*, 6(5):623–631, 2006.
- [16] C. W Hall. *Laws and models: science, engineering, and technology*. pág. 48, 2018.
- [17] Volker Hessel, Holger Löwe, y Friedhelm Schönfeld. Micromixers—a review on passive and active mixing principles. *Chemical engineering science*, 60(8-9):2479–2501, 2005.

- [18] Peter Even Killingstad. A study of dead water resistance reynolds averaged navier stokes simulations of a barge moving in stratified waters. 2018.
- [19] James B Knight, Ashvin Vishwanath, James P Brody, y Robert H Austin. Hydrodynamic focusing on a silicon chip: mixing nanoliters in microseconds. *Physical review letters*, 80(17):3863, 1998.
- [20] Chao Liu, Ying Li, y Bi-Feng Liu. Micromixers and their applications in kinetic analysis of biochemical reactions. *Talanta*, 205:120136, 2019.
- [21] Andréas Manz, N Graber, y H áM Widmer. Miniaturized total chemical analysis systems: a novel concept for chemical sensing. *Sensors and actuators B: Chemical*, 1(1-6):244–248, 1990.
- [22] Andres W Martinez, Scott T Phillips, Manish J Butte, y George M Whitesides. Patterned paper as a platform for inexpensive, low-volume, portable bioassays. *Angewandte Chemie*, 119(8):1340–1342, 2007.
- [23] Andres W Martinez, Scott T Phillips, y George M Whitesides. Three-dimensional microfluidic devices fabricated in layered paper and tape. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 105(50):19606–19611, 2008.
- [24] Mangani L. Moukalled, F. y M. Darwish. The finite volume method in computational fluid dynamics. *Applied physics letters*, 113:10–1007, 2016.
- [25] Nguyen Nam-Trung y Wu Zhigang. Micromixers—a review. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 15(2):R1, 2005.
- [26] Pavel Neuzil, Stefan Giselbrecht, Kerstin Länge, Tony Jun Huang, y Andreas Manz. Revisiting lab-on-a-chip technology for drug discovery. *Nature reviews Drug discovery*, 11(8):620–632, 2012.
- [27] Pavel Sengupta, Kalap Khanra, Amit Roy Chowdhury, y Pallab Datta. Lab-on-a-chip sensing devices for biomedical applications. En *Bioelectronics and Medical Devices*, págs. 47–95. Elsevier, 2019.

- [28] Ahmed Salaheldin Ahmed Shama. Study of microfluidic mixing and droplet generation for 3d printing of nuclear fuels. Inf. téc., EPFL, 2017.
- [29] Helen Song, Michelle R Bringer, Joshua D Tice, Cory J Gerdtts, y Rustem F Ismagilov. Experimental test of scaling of mixing by chaotic advection in droplets moving through microfluidic channels. *Applied physics letters*, 83(22):4664–4666, 2003.
- [30] Adithya Sridhar, Ashish Kapoor, Ponnusamy Senthil Kumar, Muthamilselvi Ponnuchamy, Balasubramanian Sivasamy, y Dai-Viet Nguyen Vo. Lab-on-a-chip technologies for food safety, processing, and packaging applications: A review. *Environmental Chemistry Letters*, págs. 1–27, 2021.
- [31] H. K. Versteeg y Malalasekera. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. 2007.
- [32] George M Whitesides. The origins and the future of microfluidics. *nature*, 442(7101):368–373, 2006.
- [33] Jing-Tang Yang, Wei-Feng Fang, y Kai-Yang Tung. Fluids mixing in devices with connected-groove channels. *Chemical Engineering Science*, 63(7):1871–1881, 2008.
- [34] A. C. Yunus. Fluid mechanics: Fundamentals and applications (si units). 2010.

Apéndice A

Código Python 1D Convección

Código 1: Código Python 1D Convección

```
1 //k= 1000 , TA=100 , TB=500, A=10 x 10^-3
2 // d(kdT/dx)=0
3
4 import numpy as np
5 import matplotlib.pyplot as plt
6
7 //parameters
8 k = 1000
9 A = 10*0.001
10
11 //malla
12 L=0.5 //length
13 N=1000 //number
14 x_points = np.linspace(0,L,N) //control volume
15 dx = L/N
16
17 //empty matrix
18 x = np.arange(N+1)
19 T = np.arange(N+1)
20 aW = np.zeros(N+1)
21 aE = np.zeros(N+1)
22 aP = np.zeros(N+1)
```

```

23 Su = np.zeros(N+1)
24 Sp = np.zeros(N+1)
25
26 matrx = np.zeros((N, N))
27 source = np.zeros(N)
28
29 //BC
30 TA = 100 #nodo inicial
31 TB = 500 #nodo final
32
33 //nodo inicial
34 aW[0]=0
35 aE[0]=k*A/dx
36 Sp[0]=-2*k*A/dx
37 Su[0]=2*k*A*TA/dx
38 aP[0]=aE[0] + aW[0] - Sp[0]
39
40 //nodo final
41 aW[-1]=k*A/dx
42 aE[-1]=0
43 Sp[-1]=-2*k*A/dx
44 Su[-1]=2*k*A*TB/dx
45 aP[-1]=aE[-1] + aW[-1] - Sp[-1]
46
47 for i in range(1,N-1): //nodos intermedios
48     //nodos internos
49     aW[i]=k*A/dx
50     aE[i]=k*A/dx
51     aP[i]=aE[i] + aW[i]
52
53     //crea matriz con valores internos
54     for j in range(1, N):
55         matrx[i,i] = aP[i]
56         matrx[i,i+1] = -1*aE[i]
57         matrx[i,i-1] = -1*aW[i]

```

```

58
59 //valores de frontera para la matriz
60 matrx[0,0] = aP[0]
61 matrx[0,1] = -1*aE[0]
62 matrx[-1,-1] = aP[-1]
63 matrx[-1,-2] = -1*aW[-1]
64 source[0] = Su[0]
65 source[-1] = Su[-1]
66
67 //resuelve para T
68 T = np.linalg.solve(matrx,source)
69 Temp = np.zeros(N + 1)
70 for i in range(1, N):
71     Temp[i] = T[i]
72 Temp[0] = TA
73 Temp[-1] = TB
74
75 //plot
76 plt.plot(np.linspace(0,L,N+1),Temp, label='numeric')
77 plt.xlabel(r'Distancia x (m)')
78 plt.ylabel(r'Temperatura (C)')
79 plt.title('Temperatura vs Distancia')
80 plt.legend()
81 plt.show()

```

Código OpenFOAM Convección

Código 2: T

```

1 \*-----*/
2 FoamFile
3 {
4     version      2.0;
5     format       ascii;

```

```

6     class      volScalarField;
7     object     T;
8 }
9 // * * * * *
10 dimensions    [0 0 0 1 0 0 0];
11
12 internalField  uniform 0;
13
14 boundaryField
15 {
16     frontAndBack
17     {
18         type          empty;
19         // value      uniform 0;
20     }
21
22     top
23     {
24         type          empty;
25     }
26
27     bottom
28     {
29         type          empty;
30     }
31
32     left
33     {
34         type          fixedValue;
35         value         uniform 100;
36     }
37
38     right
39     {
40         type          fixedValue;

```

```
41     value          uniform 500;
42 }
43 }
```

Código 3: transportP

```
1  \*-----*/
2  FoamFile
3  {
4      version      2.0;
5      format        ascii;
6      class         dictionary;
7      location      "constant";
8      object        transportProperties;
9  }
10 // * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //
11
12 DT              4e-05;
```

Código 4: controlD

```
1  \*-----*/
2  FoamFile
3  {
4      version      2.0;
5      format        ascii;
6      class         dictionary;
7      location      "system";
8      object        controlDict;
9  }
10 // * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //
11
12 application      newLaplacianFoam;
13
14 startFrom        latestTime;
15
```

```

16  startTime          0;
17
18  stopAt             endTime;
19
20  endTime            10;
21
22  deltaT             0.005;
23
24  writeControl       runtime;
25
26  writeInterval      0.1;
27
28  purgeWrite         0;
29
30  writeFormat        ascii;
31
32  writePrecision     6;
33
34  writeCompression  off;
35
36  timeFormat         general;
37
38  timePrecision      6;
39
40  runtimeModifiable true;
41
42
43  // *****

```

Código 5: LaplacianFoam.c

```

1  \*-----*/
2
3  #include "fvCFD.H"
4  //#include "fvOptions.H"
5  #include "simpleControl.H"

```



```
41         );
42
43         //fvOptions.constrain(TEqn);
44         TEqn.solve();
45         //fvOptions.correct(T);
46     }
47
48     #include "write.H"
49
50     runTime.printExecutionTime(Info);
51 }
52
53 Info << "End\n" << endl;
54
55 return 0;
56 }
```

Apéndice B

En este apéndice, se realiza un segundo ejemplo para comparar la eficiencia de *OpenFOAM*. Para esta ocasión se realizó un fluido de *Poiseuille*, se detallan los cálculos analíticos y a la par los resultados con *OpenFOAM*.

Física de Poiseuille

Se inicia desde la suposición de un fluido newtoniano incompresible, bidimensional ($\frac{\partial}{\partial z} = 0$), negando los efectos de la gravedad ($\hat{k} = 0$) y desarrollando un fluido en estado estacionario ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$). Adicionalmente, se asume planos paralelos infinitos ($u \neq 0, v = w = 0$). Se tiene un movimiento debido a la diferencia de presión en el eje x ($\frac{\partial p}{\partial x}$).

Bajo estas condiciones, la ecuación de continuidad quedaría como:

$$u = u(y)$$

La ecuación de momentum sería:

$$\mu \frac{d^2 u}{dy^2} = \frac{\partial p}{\partial x}$$

La presión:

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial z} = 0 \text{ o } p = p(x)$$

Debido a las ecuaciones previas, la presión puede calcularse directamente como una diferencia de presiones a lo largo del camino ($\frac{P_2 - P_1}{l}$).

Resolviendo las ecuaciones, se tiene:

$$u = \frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \frac{y^2}{2} + C_1 y + C_2$$

Utilizando las condiciones de frontera, $u(0) \rightarrow y = \frac{h}{2}$ o $y = -\frac{h}{2}$

Con lo que la solución analítica toma la forma:

$$u = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{\mu} \left(y^2 - \left(\frac{h}{2} \right)^2 \right), -\frac{h}{2} \leq y \leq \frac{h}{2}$$

La máxima velocidad ocurre cuando $y = 0$.

$$u_{max} = -\frac{h^2}{8\mu} \frac{\partial p}{\partial x}$$

En este ejemplo se tiene como valores, $h = 0,1 \text{ m}$, $\mu = 10 \text{ Pa} \cdot \text{s}$, $l = 2 \text{ m}$ y $P_2 - P_1 = -101325 \text{ Pa}$. Reemplazando esto valores la velocidad máxima es $u_{max} = 6,33281 \text{ m/s}$

Resultados OpenFOAM

Utilizando *OpenFOAMv2012* se verifican los cálculos previos. Primero se muestran los resultados a lo largo del eje x , donde se obtiene que la presión se mueve de manera homogénea (Figura 10) y la velocidad va aumentando, desde los planos paralelos hacia el centro (Figura 9).

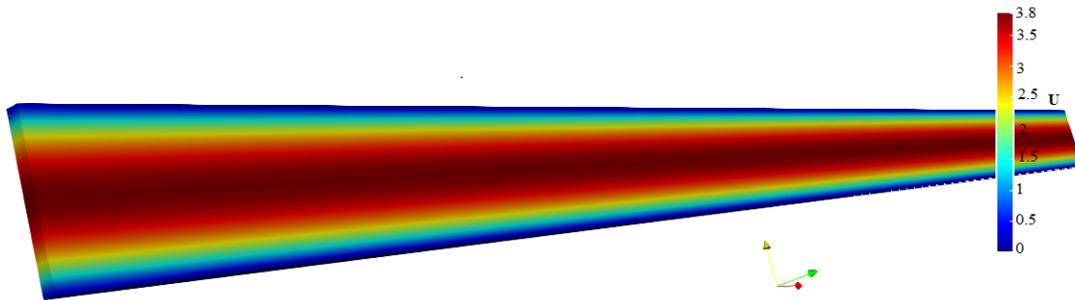


Figura 9: Resultado de la velocidad en un fluido de Poiseuille.

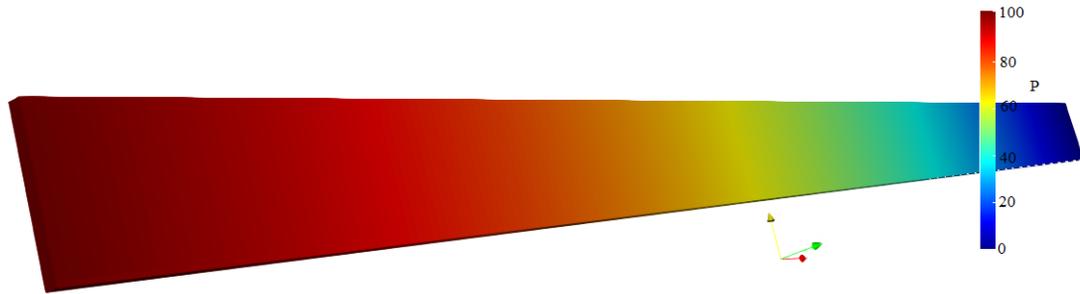


Figura 10: Resultado de la presión en un fluido de Poiseuille.

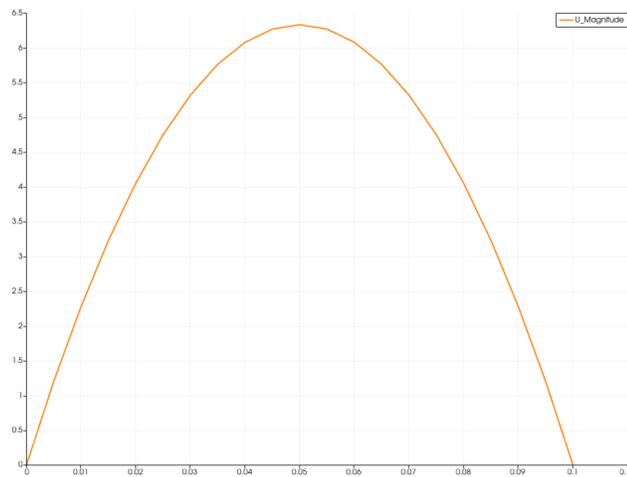


Figura 11: Desarrollo de la velocidad en una sección transversal.

En el paso previo se realizó el cálculo analítico, ahora se procede con el análisis ortogrado por *ParaView*. Donde se obtiene el perfil de velocidad en una sección transversal y se puede corroborar que mientras más se acerque al centro, aumenta su velocidad. Un dato adicional es que el pico de la Figura 11 es comparable con el valor numérico 6.33 m/s.

En la Figura 12, se ve que la disminución de la presión es de manera lineal, al igual que la representación analítica.

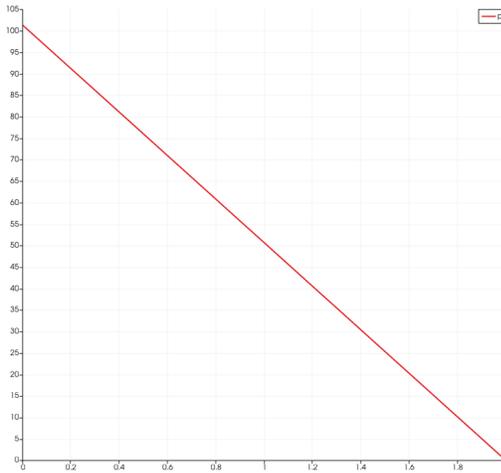


Figura 12: Desarrollo de la presión a lo largo del eje x .

Código Fluido de Poiseuille

A continuación se muestran los códigos utilizados.

Código 6: U

```

1   frontAndBack
2   {
3       type          empty;
4       //   value      uniform 0;
5   }
6
7   top
8   {
9       type          fixedValue;
10      value          uniform (0 0 0);
11  }
12
13  bottom
14  {
15      type          fixedValue;
16      value          uniform (0 0 0);
17  }

```

```
18
19   left //inlet
20   {
21       type          zeroGradient;
22   }
23
24   right //outlet
25   {
26       type          zeroGradient;
27   }
```

Código 7: p

```
1   frontAndBack
2   {
3       type          empty;
4   }
5
6   top
7   {
8       type          zeroGradient;
9   }
10
11  bottom
12  {
13      type          zeroGradient;
14  }
15
16  left //inlet
17  {
18      type          fixedValue;
19      value         uniform 101.325;
20  }
21
22  right //outlet
23  {
```

```
24     type          fixedValue;
25     value          uniform 0;
26 }
```

Código 8: transP

```
1 // * * * * * * * * * * //
2
3 nu          0.01;
4
5
6 // *****
```

Código 9: ControlDi

```
1 application  icoFoam;
2
3 startFrom    startTime;
4
5 startTime    0;
6
7 stopAt       endTime;
8
9 endTime      2.5;
10
11 deltaT       0.005;
12
13 writeControl timeStep;
14
15 writeInterval 20;
16
17 purgeWrite   0;
18
19 writeFormat  ascii;
20
21 writePrecision 6;
```

```
22
23 writeCompression off;
24
25 timeFormat      general;
26
27 timePrecision   6;
28
29 runTimeModifiable true;
```

Apéndice C

En este apéndice, se analizan las imágenes para calcular la velocidad del fluido a través de la posición y el tiempo.

Microcanal de prueba

Para esta corroboración particular, se hizo uso de un microcanal recto.

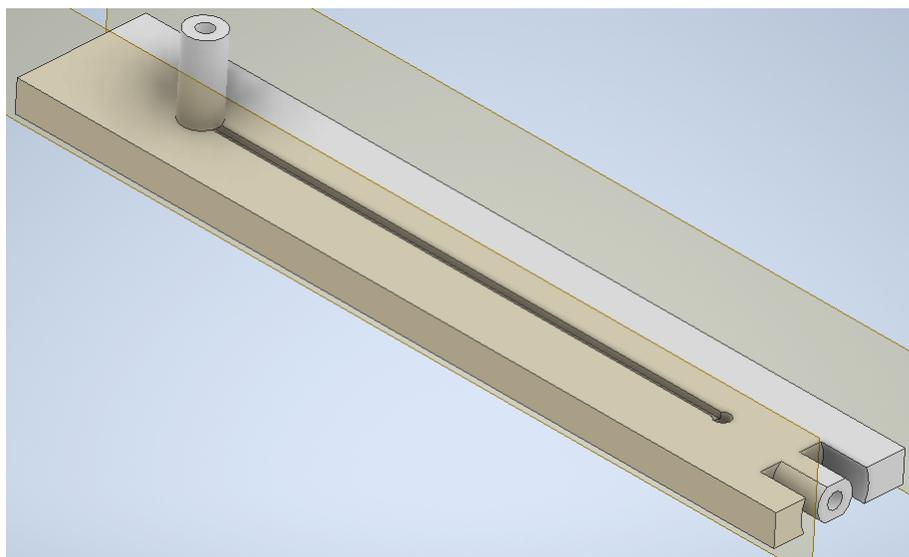


Figura 13: Microcanal recto.

Código MATLAB

A continuación se muestran el código para la toma de datos. Se inicia cargando el clip de video e inicializando los valores necesarios; como el número de frames, frame rate y la cantidad de valores aleatorios. Seguidamente, marcando manualmente cada frame aleatorio y finalmente se guarda en un archivo excel los valores de tiempo e imágenes.

Código 10: imagemark

```
1 clear
2 clc
3 pathx = '1_DSC_0019_filt'; %change mp4
4 format = '.mp4';
5 pathname = strcat(pathx,format);
6
7 %video
8 vidObj = VideoReader(pathname);
9 numf = vidObj.NumFrames;
10 frate = vidObj.FrameRate;
11 %rng(0)%seed
12 vecrand = sort(randperm(floor(numf*0.9),10));
13 n=length(vecrand);
14
15 %zeros vector for table
16 index = zeros(n,1);
17 CXX = zeros(n,1);
18 CYY = zeros(n,1);
19 VFRAME = zeros(n,1);
20 VCTIME = zeros(n,1);
21
22 for i = 1:n
23     framenumber = vecrand(i);
24     vidFrame = read(vidObj,framenumber);%readFrame(vidObj);
25     currenttime = framenumber/frate; %seconds
26     imshow(vidFrame)
```

```

27
28     %position mark
29     [cx,cy,c] = improfile();
30     RRR = insertMarker(vidFrame, [0 0]);
31     pos   = [cx cy];
32     color = {'magenta'}; % green magenta
33     RGB = insertMarker(RRR, 'pos',+, 'color',color, 'size',60);
34
35     %save image with frame number
36     s0 = pathx;
37     s1 = num2str(framenumber);
38     s2 = '_';
39     s3 = num2str(currenttime);
40     s4 = '.jpg';
41     s = strcat(s0,s2,s1,s2,s3,s4);
42     imwrite(RGB, s, 'Quality', 100);
43
44     %create vectors
45     index(i) = i;
46     CXX(i) = cx;
47     CYY(i) = cy;
48     VFRAME(i) = framenumber;
49     VCTIME(i) = currenttime;
50 end
51
52 %save table
53 T = table(CXX,CYY,VFRAME,VCTIME);%,transpose(vecrand))
54 ;%, 'RowNames',index);
55 format2 = '.xlsx';
56 writetable(T, strcat(pathx,format2), 'Sheet',1)

```

Análisis de datos de posición & tiempo

De acuerdo con la conservación de masa, la velocidad cambia desde la jeringa hasta entrar al microcanal dependiendo del área transversal. Calculado teóricamente como: $v_{salida} = v_{jeringa} \frac{A_{jeringa}}{A_{microcanal}}$. A continuación, se muestra la velocidad de la máquina y en las imágenes la velocidad del fluido en el microcanal.

Velocidad 0.025 mm/s

El cálculo para este caso sería $v_{salida} = 0,025 \frac{\pi \frac{4,78^2}{2^2}}{0,375} = 1,1963 \frac{mm}{s}$.

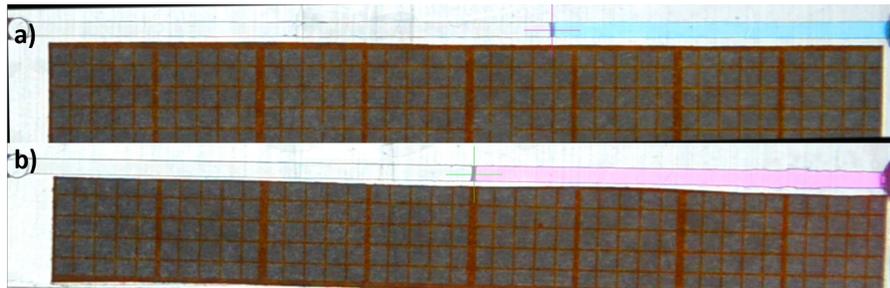


Figura 14: Capturas de las medidas con velocidad 1.1963 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa

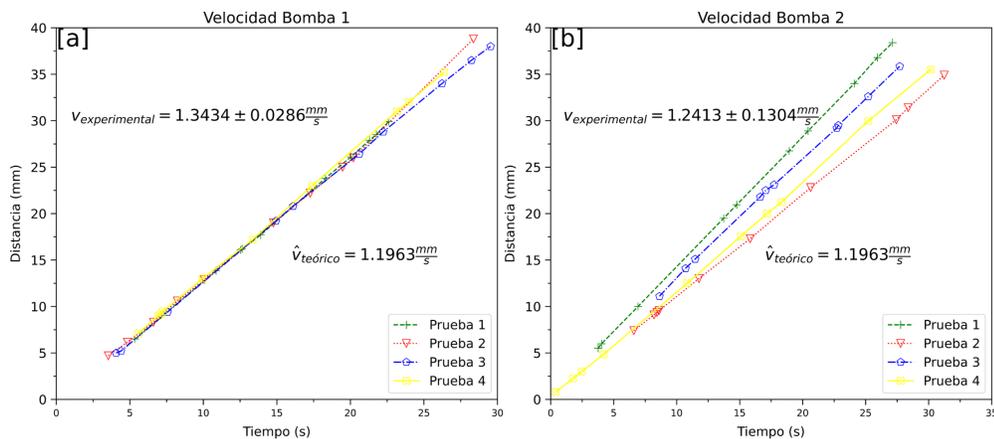


Figura 15: Resultado cálculo de velocidad a partir de imágenes 1.1963 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa

Velocidad 0.050 mm/s

El cálculo para este caso sería $v_{salida} = 0,050 \frac{\pi \frac{4,78^2}{2^2}}{0,375} = 2,3926 \frac{mm}{s}$.

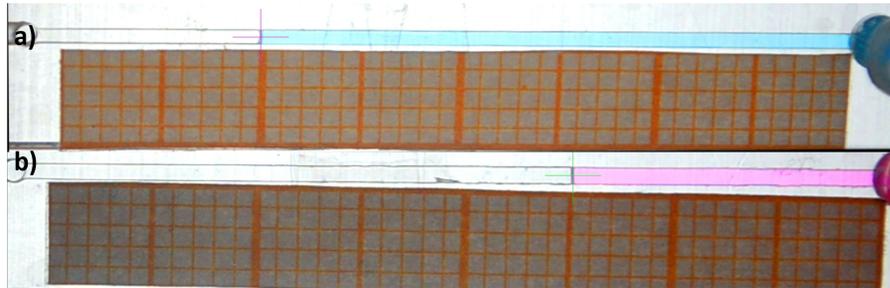


Figura 16: Capturas de las medidas con velocidad 2.3926 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa

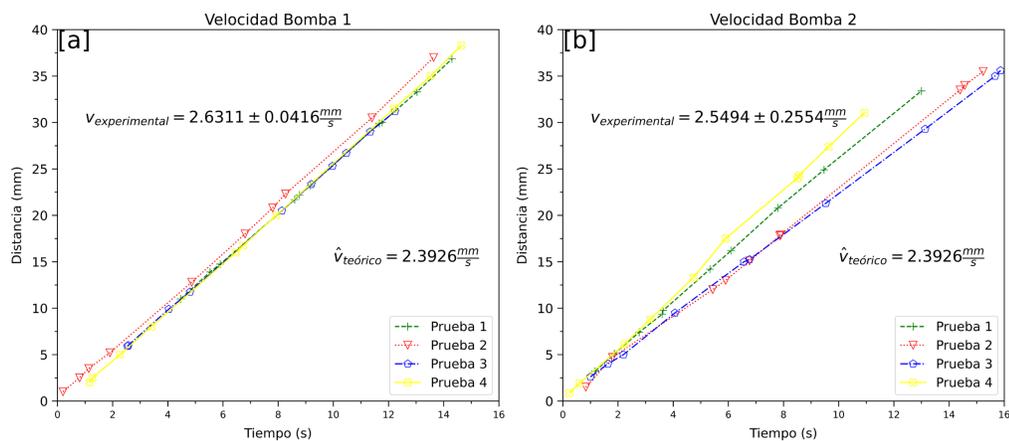


Figura 17: Resultado cálculo de velocidad a partir de imágenes 2.3926 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa

Velocidad 0.075 mm/s

El cálculo para este caso sería $v_{salida} = 0,075 \frac{\pi \frac{4,78^2}{2^2}}{0,375} = 3,589 \frac{mm}{s}$.

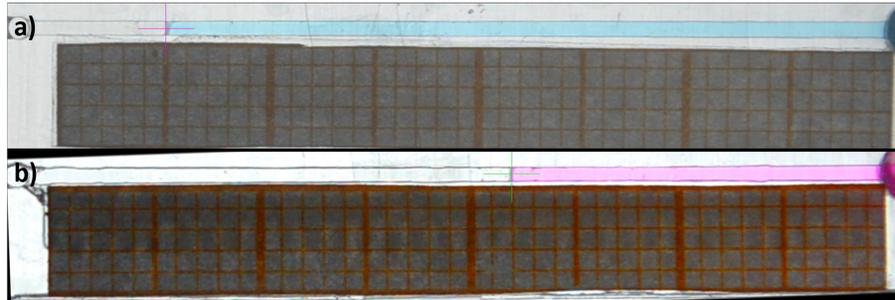


Figura 18: Capturas de las medidas con velocidad 3.589 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa

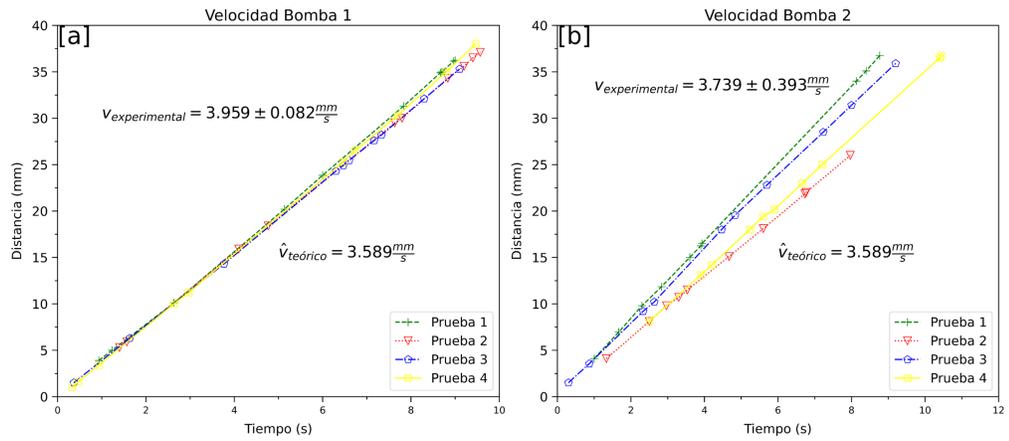


Figura 19: Resultado cálculo de velocidad a partir de imágenes 3.589 mm/s. a) Primera bomba de jeringa, b) Segunda bomba de jeringa

Apéndice D

En este apéndice, se analizan las imágenes para caracterizar las superficies internas y externas del dispositivo.

Microcanal de prueba

Para esta corroboración particular, se hizo uso de un microcanal a la mitad. Con la finalidad de poder visualizar las partes internas, como el ancho del canal, la longitud del canal, medidas de las capas de impresión y la rugosidad de la superficie.

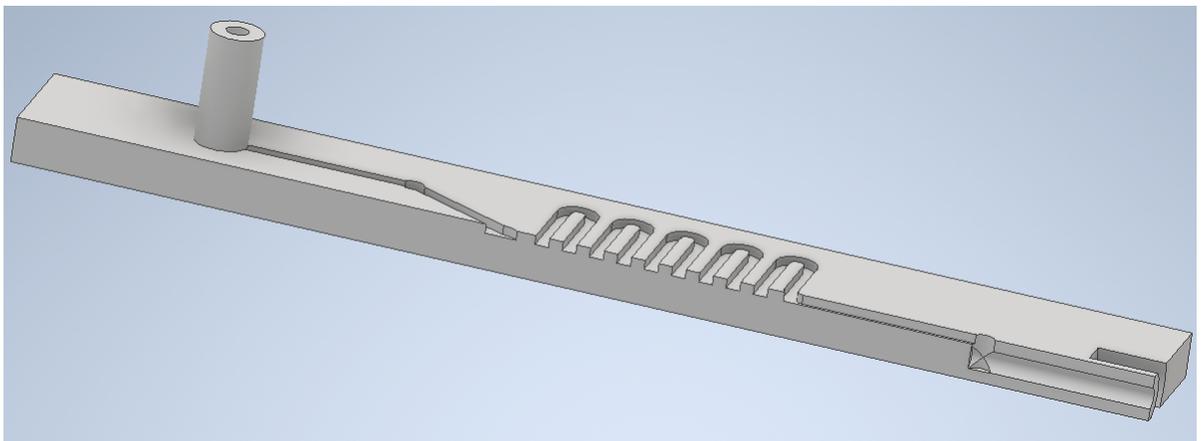


Figura 20: Dispositivo de prueba.

Interpretación de las imágenes

Haciendo uso de un microscopio electrónico de barrido (SEM) modelo EVO MA10 de la marca Zeiss, se obtuvieron imágenes de alta calidad. Con estas imágenes se realizaron medidas a través de *ImageJ* para diversos cálculos.

Se inició tomando las medidas en los canales indicados, como se muestra en la Figura 21. Esto tuvo como objetivo medir el ancho del canal. Se tomaron 10 medidas en cada canal y se obtuvo como resultado (tomando en consideración que pertenecen a un solo canal) el valor de $0,638 \pm 0,023$ mm.

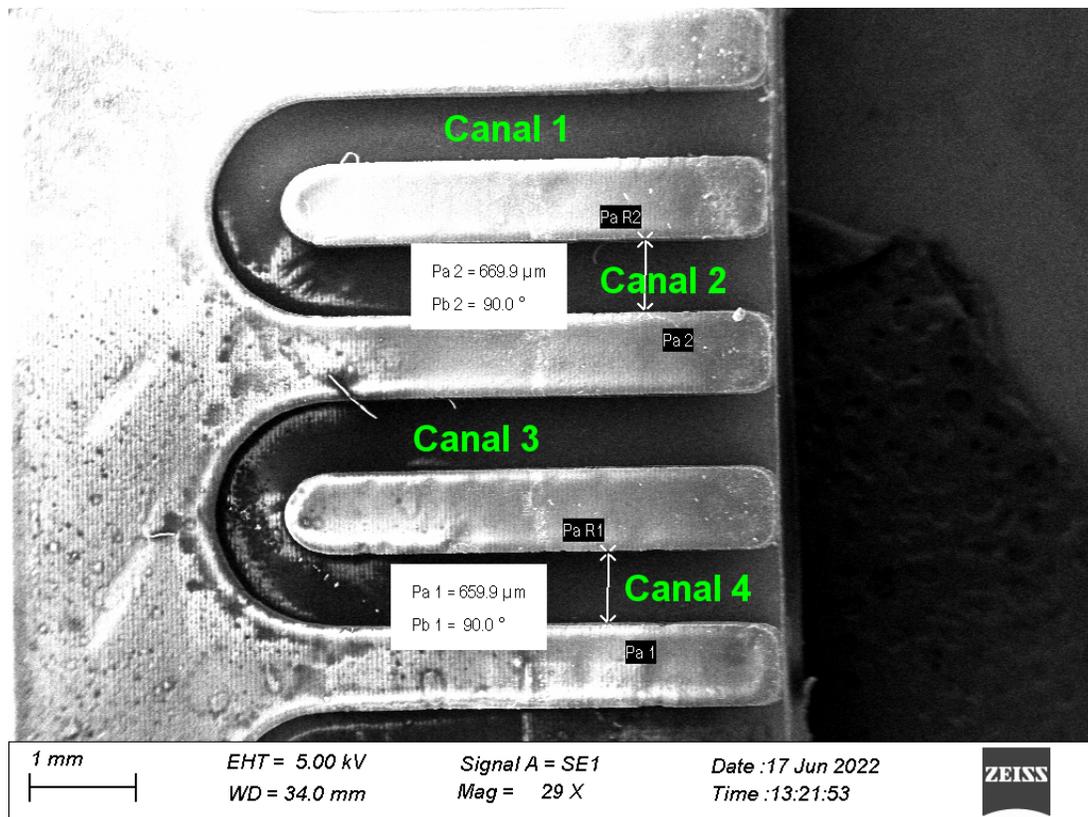


Figura 21: Vista superior del dispositivo de prueba.

En esta segunda parte, se buscó calcular la profundidad de los canales, como se muestra en la Figura 22. Para ello se tomaron 13 medidas desde la superficie hasta la profundidad. Obteniendo el valor de $0,428 \pm 0,009$ mm.

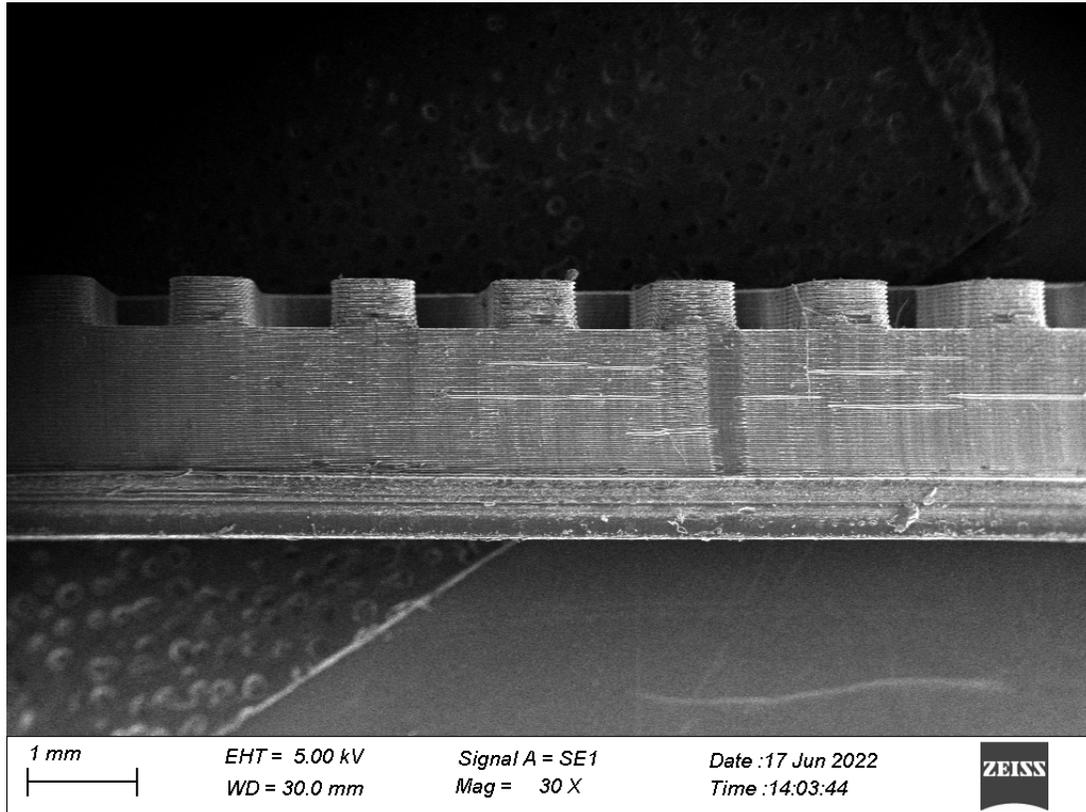


Figura 22: Vista lateral total del dispositivo de prueba.

Así mismo, se midió el espesor de la capa de impresión, como se muestra en la Figura 23. Tomando 10 medidas entre capa y capa. Obteniendo el valor de $40,627 \pm 1,629 \mu\text{m}$.

Se calculó también el espesor total del dispositivo, midiendo desde la superficie hasta la base, como se muestra en la Figura 23. Obteniendo el valor de $2,3 \pm 0,2 \text{ mm}$.

Adicionalmente, se midieron las rugosidades en la superficie plana superior, como se muestra en la Figura 24. Estas fueron generadas por la rugosidad misma de la pantalla LCD. Se tomaron 20 medidas y se obtuvo el valor de $39,099 \pm 8,299 \mu\text{m}$. En este caso se tiene una mayor desviación estándar debido a que las rugosidades son muy variadas en tamaño.

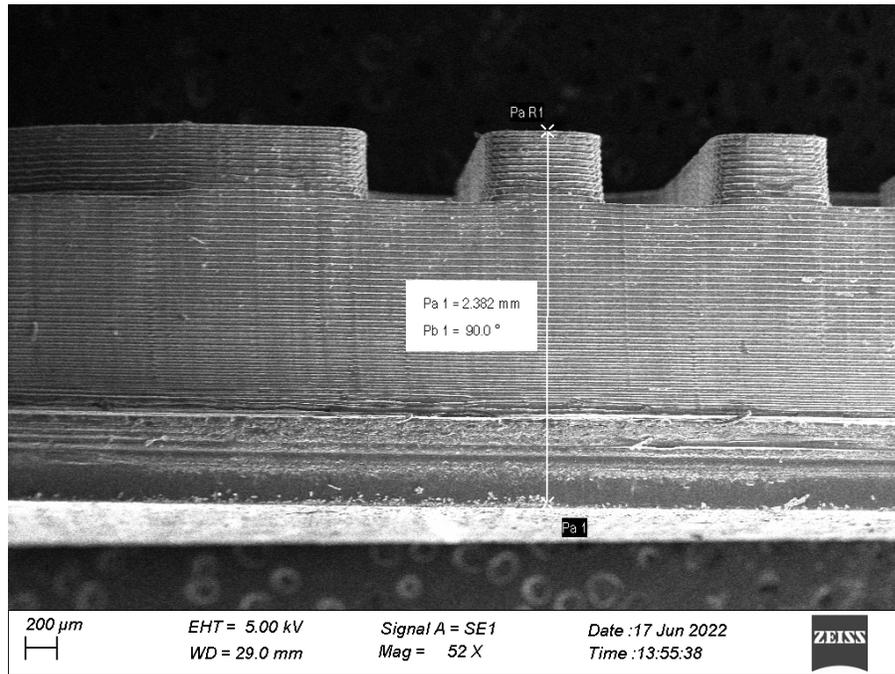


Figura 23: Vista lateral parcial del dispositivo.

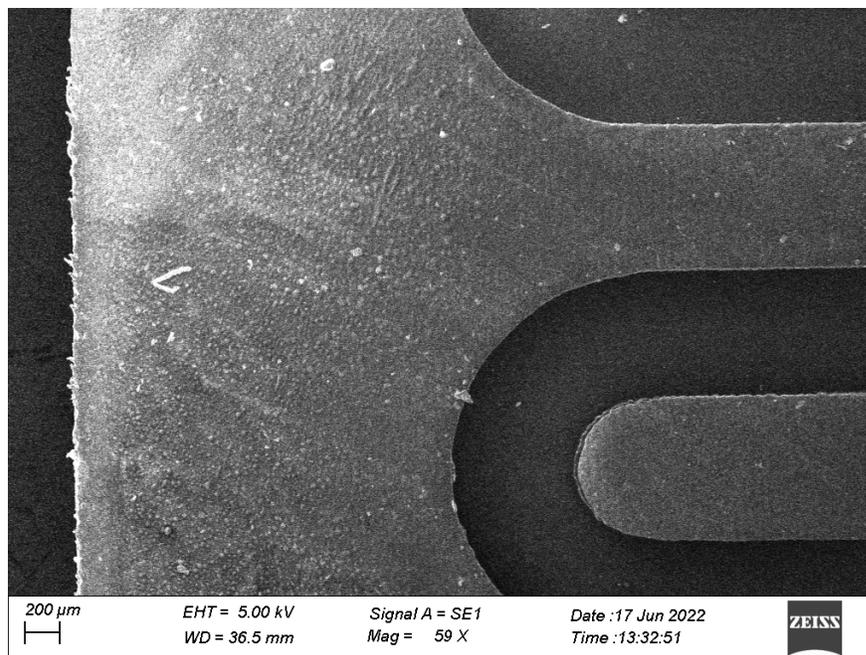


Figura 24: Vista superficial para observar la rugosidad.

Apéndice E

En este apéndice, se enlistan los códigos utilizados para la simulación de mezcla de fluidos.

Código de mezcla de fluidos en OpenFOAM

Código 11: U

```
1 dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];
2
3 boundaryField
4 {
5     input1
6     {
7         type      fixedValue;
8         value     uniform (0.001196339 -0.00207212 0);
9     }
10
11    input2
12    {
13        type      fixedValue;
14        value     uniform (0.001196339 0.00207212 0);
15    }
16
17    output
18    {
19        type      zeroGradient;
```

```

20     }
21
22     wall
23     {
24         type          fixedValue;
25         value         uniform (0 0 0);
26     }
27 }

```

Código 12: p

```

1  dimensions      [0 2 -2 0 0 0 0];
2  boundaryField
3  {
4      input1
5      {
6          type          zeroGradient;
7      }
8
9      input2
10     {
11         type          zeroGradient;
12     }
13
14     output
15     {
16         type          fixedValue;
17         value         uniform 0;
18     }
19
20     wall
21     {
22         type          zeroGradient;
23     }
24 }

```

Código 13: Fluid1

```
1
2 boundaryField
3 {
4     input1
5     {
6         type          fixedValue;
7         value         uniform 0;
8     }
9
10    input2
11    {
12        type          fixedValue;
13        value         uniform 1;
14    }
15
16    output
17    {
18        type          inletOutlet;
19        inletValue    uniform 0;
20        value         uniform 0;
21    }
22
23    wall
24    {
25        type          zeroGradient;
26    }
27 }
```

Código 14: Fluid2

```
1 boundaryField
2 {
3     input1
4     {
```

```

5         type          fixedValue;
6         value          uniform 1;
7     }
8
9     input2
10    {
11        type          fixedValue;
12        value          uniform 0;
13    }
14
15    output
16    {
17        type          inletOutlet;
18        inletValue    uniform 0;
19        value          uniform 0;
20    }
21
22    wall
23    {
24        type          zeroGradient;
25    }
26 }

```

Código 15: transportProperties

```

1 transportModel  Newtonian;
2 nu              [0 2 -1 0 0 0 0] 0.001;

```

Código 16: g

```

1 dimensions     [0 1 -2 0 0 0 0];
2 value          (0 0 0);

```

Código 17: turbulence

```

1 simulationType laminar;

```

Código 18: fvScheme

```
1 ddtSchemes
2 {
3     default     steadyState;
4 }
5
6 gradSchemes
7 {
8     default     Gauss linear;
9     limited     cellLimited Gauss linear 1;
10    grad(U)     $limited;
11 }
12
13 divSchemes
14 {
15     default     none;
16     div(phi,U) bounded Gauss linearUpwind limited;
17     div(phi,Fluid1) bounded Gauss linearUpwind limited;
18     div(phi,Fluid2) bounded Gauss linearUpwind limited;
19     div((nuEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
20 }
21
22 laplacianSchemes
23 {
24     default     Gauss linear corrected;
25 }
26
27 interpolationSchemes
28 {
29     default     linear;
30 }
31
32 snGradSchemes
33 {
34     default     corrected;
```

```

35 }
36
37 wallDist
38 {
39     method          meshWave;
40 }

```

Código 19: fvSolution

```

1 solvers
2 {
3     p
4     {
5         solver      GAMG;
6         smoother    GaussSeidel;
7         tolerance   1e-6;
8         relTol      0.1;
9     }
10
11     Phi
12     {
13         $p;
14     }
15
16     U
17     {
18         solver      smoothSolver;
19         smoother    symGaussSeidel;
20         tolerance   1e-6;
21         relTol      0.1;
22     }
23
24     "(Fluid1|Fluid2)"
25     {
26         solver      smoothSolver;
27         smoother    symGaussSeidel;

```

```

28         tolerance    1e-6;
29         relTol      0.1;
30     }
31 }
32
33 SIMPLE
34 {
35     residualControl
36     {
37         p                1e-4;
38         U                1e-4;
39     }
40
41     nNonOrthogonalCorrectors 0;
42     pRefCell                0;
43     pRefValue                0;
44 }
45
46 potentialFlow
47 {
48     nNonOrthogonalCorrectors 10;
49 }
50
51 relaxationFactors
52 {
53     fields
54     {
55         p                0.3;
56     }
57     equations
58     {
59         U                0.7;
60     }
61 }

```

Código 20: controlDict

```
1 application      simpleFoam;
2 startFrom        latestTime;
3 startTime        0;
4 stopAt           endTime;
5 endTime          500;
6 deltaT           1;
7 writeControl     adjustableRunTime;
8 writeInterval    20;
9 purgeWrite       6;
10 writeFormat     ascii;
11 writePrecision  6;
12 writeCompression off;
13 timeFormat      general;
14 timePrecision   6;
15 runTimeModifiable yes;
16 adjustTimeStep yes;
17
18
19 functions
20 {
21     Fluid1
22     {
23         type                scalarTransport;
24         resetOnStartUp      false;
25         libs
26         schemesField        Fluid1;
27         nu                   0.0009;
28         D                     1.2E-9;
29         field                 Fluid1;
30     }
31
32     Fluid2
33     {
34         type                scalarTransport;
```

```
35         resetOnStartUp         false;
36         libs
37         schemesField           Fluid2;
38         nu                       0.0009;
39         D                       1.2E-9;
40         field                   Fluid2;
41     }
42 }
```
