

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL



DOCTORADO EN INGENIERÍA

Modelado numérico de flujo y transporte en dispositivos microfluídicos micro y na- noestructurados utilizando técnicas multi- escalas

Joselynnne Carolina Salazar Bove

FICH

FACULTAD DE INGENIERÍA Y CIENCIAS HÍDRICAS

INTEC

INSTITUTO DE DESARROLLO TECNOLÓGICO PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA

CIMEC

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MÉTODOS COMPUTACIONALES

$\text{sinc}(i)$

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN SEÑALES, SISTEMAS E INTELIGENCIA COMPU-
TACIONAL

Tesis de Doctorado **2026**



Doctorado en Ingeniería **mención Mecánica computacional**

Título de la obra:

Modelado numérico de flujo y transporte en dispositivos microfluídicos micro y nanoestructurados utilizando técnicas multiescalas

Autora: Joselynn Carolina Salazar Bove

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

microfluídica en papel, simulaciones numéricas, medios porosos, técnicas multiescala, elemento de volumen representativo, transporte escalar, flujo electroosmótico, Método de Elementos Finitos, mecánica computacional



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación en Métodos Computacionales

Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

**MODELADO NUMÉRICO DE FLUJO Y
TRANSPORTE EN DISPOSITIVOS
MICROFLUÍDICOS MICRO Y
NANOESTRUCTURADOS UTILIZANDO
TÉCNICAS MULTIESCALAS**

Joselynnne Carolina Salazar Bove

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado

como parte de los requisitos para la obtención

del grado de

DOCTOR EN INGENIERÍA

Mención Mecánica Computacional

de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2026

Secretaría de Posgrado, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Ciudad Universitaria,

Paraje "El Pozo", S3000, Santa Fe, Argentina



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Centro de Investigación en Métodos Computacionales

**MODELADO NUMÉRICO DE FLUJO Y
TRANSPORTE EN DISPOSITIVOS
MICROFLUÍDICOS MICRO Y
NANOESTRUCTURADOS UTILIZANDO
TÉCNICAS MULTIESCALAS**

Joselynnne Carolina Salazar Bove

Lugar de Trabajo:

CIMEC (UNL-CONICET)

Centro de Investigación en Métodos Computacionales

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Universidad Nacional del Litoral

Director:

Dr. Pablo Alejandro Kler

CIMEC (UNL-CONICET)

Co-director:

Dr. Sebastian Toro

CIMEC (UNL-CONICET)

Jurado Evaluador:

Dr. Pablo Gamazo

Universidad de la República - Departamento del Agua

Dr. Pablo Alfredo Caron

UTN - Facultad Regional Haedo

Dr. Martín Zalazar

Universidad Nacional de Entre Ríos - Fac. de Ingeniería

Certificación

2026 – Año del Centenario
de la adopción del Sello Mayor
como emblema de la UNL



ACTA DE DEFENSA DE TESIS DE DOCTORADO

En la sede de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas de la Universidad Nacional del Litoral, a los dieciocho días del mes de agosto del año dos mil veintiséis, se reúnen en forma online sincrónica los miembros del Jurado designado para la evaluación de la Tesis de Doctorado en Ingeniería, Mención Mecánica Computacional, titulada *“Modelado numérico de flujo y transporte en dispositivos microfluidicos micro y nanoestructurados utilizando técnicas multiescalas.”*, desarrollada por la **Ing. Joselynn Carolina SALAZAR BOVE, DNI: 95.993.087**, bajo la dirección del Dr. Pablo Kler y la codirección del Dr. Sebastián Toro. Ellos son: Dr. Pablo Gamazo, el Dr. Pablo Caron, y Dr. Martín Ángel Zalazar.-----

La Presentación oral y defensa de la Tesis se efectúa bajo la modalidad online sincrónica según lo establecido por Resolución CS N° 382/21.-----

Luego de escuchar la Defensa Pública y de evaluar la Tesis, el Jurado considera:

Que el objetivo de la tesis es relevante ya que contribuye al desarrollo de los muPADs, dispositivos de suma relevancia para la accesibilidad a pruebas rápidas y portátiles, y al avance del modelado multiescala de fenómenos de flujo y transporte en medios porosos.

La herramienta presenta una metodología para modelar el funcionamiento de estos dispositivos de forma eficiente frente a alternativas existentes y poder lograr iteraciones rápidas de diseño.

Tanto el desarrollo del manuscrito como la presentación oral mostraron una estructura clara y ordenada facilitando la transmisión de los conceptos abordados.

La tesista mostró solidez y conocimientos del tema al responder las preguntas del Jurado. Por ello, el Jurado aprueba la Tesis Doctoral con calificación (Diez) Sobresaliente.

Sin más, se da por finalizado el Acto Académico con la firma de los miembros del Jurado al pie de la presente. -----

Dr. Pablo Gamazo

Dr. Pablo Caron

Dr. Martín Ángel Zalazar



Dr. José Luis Macor
Director de Posgrado
FICH - UNL

Universidad Nacional del Litoral
Facultad de Ingeniería y
Ciencias Hídricas

Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria
C.C. 217
Ruta Nacional N° 168 – Km. 472,4
(3000) Santa Fe
Tel: (54) (0342) 4575 229
Fax: (54) (0342) 4575 224
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar

Declaración legal del autor

Esta Tesis ha sido remitida como parte de los requisitos para la obtención del grado de Doctor ante la Universidad Nacional del Litoral y ha sido depositada en la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas para que esté disponible a sus lectores bajo las condiciones estipuladas por el Reglamento de la mencionada Biblioteca.

Citaciones breves de esta disertación son permitidas sin la necesidad de un permiso especial, en la suposición de que la fuente sea correctamente citada. Solicitudes de permiso para una citación extendida o para la reproducción de este manuscrito en un todo o en parte serán exigidas por el portador legal del derecho de propiedad intelectual de la misma.

Joselynnne Carolina Salazar Bove

*“Nada en la vida es para ser temido,
es sólo para ser comprendido.”*

— Marie Curie

IN MEMORIAM

A mi adorada madre y a mi dulce madrina.

Mientras mi corazón siga latiendo,

y mi mente siga recordando,

estarán presentes en cada uno de mis pasos.

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a Dios Todopoderoso y a María Auxiliadora por su misericordia e innumerables bendiciones.

A mis madres, que hoy me cuidan desde el cielo. A mi nonna, María Libertà, núcleo de nuestra familia y ejemplo infinito de valentía y lucha; A mi madre, Ana “Tesoro”, quien me enseñó la fortaleza, el altruismo, la generosidad y el amor infinito. Siempre dulce, siempre buena y compasiva; A mi tía, Doménica, quien me enseñó a ser una mujer fuerte, a confiar en mis capacidades y a mantener siempre la integridad sin importar las circunstancias; A mi madrina y mejor amiga, María Teresa, por cuidarme y apoyarme, por celebrar mis logros y alentarme en todo momento, por acompañarme en mi duelo y llenarme de risas las tardes. Honrar sus memorias con gratitud es recordar que el amor trasciende la ausencia física. Su legado, amor y enseñanzas viven en mi corazón. Gracias por guiar mi paso con su luz y decorar el cielo para mí.

A mi papá, Hugo, y a mi hermana, Johanna, quienes también me educaron, socorrieron y motivaron a crecer. La buena educación comienza en el hogar, y ustedes son la base de aquello que me hace resaltar como persona. Su ejemplo siempre me acompaña y es una eterna invitación a la superación.

A mi alma mater, la Universidad Central de Venezuela, la casa que vence la sombra con su lumbré de fiel claridad. En tus aulas comencé a edificar el conocimiento que hoy me trae hasta aquí, transformando el árido suelo de la ignorancia en un espacio donde aprender es el mayor de los placeres. Solo un ucevista entiende que llegar lejos no es estar sobre las nubes, sino debajo de ellas.

A la Universidad Nacional del Litoral, que luego me adoptó como estudiante y me brindó la oportunidad de estrenarme como docente. Al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), por ofrecerme el ámbito, las herramientas y, sobre todo, las personas que hicieron posible mi desarrollo profesional. Allí encontré un espacio donde la vocación por la ciencia se transforma en trabajo comprometido y colectivo.

A mis directores, el Dr. Pablo A. Kler y el Dr. Sebastian Toro, por su guía, paciencia

y compromiso a lo largo de este camino. Gracias por la confianza depositada en mí, por sus valiosas enseñanzas y por acompañarme con rigurosidad y generosidad intelectual en cada etapa de este trabajo. Su orientación fue fundamental no solo para el desarrollo de esta tesis, sino también para mi crecimiento como investigadora.

A David, y mis amigos, gracias por ser refugio, sostén y alegría en cada etapa de este camino. Por escuchar, celebrar cada pequeño logro y recordarme, cuando fue necesario, que siempre podía un poco más. Su cariño y su presencia hicieron que este recorrido fuera más liviano y profundamente significativo.

Y por último, a la Argentina, por recibirme como un segundo hogar. Por abrirme sus puertas, brindarme oportunidades y permitirme crecer en lo académico y en lo personal. En tu tierra encontré nuevos afectos, nuevos desafíos y la posibilidad de seguir construyendo mis sueños.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Objetivos	4
1.2.1. Objetivo general	4
1.2.2. Objetivos específicos	4
1.3. Antecedentes	4
1.3.1. Propiedad Efectiva	5
1.3.2. Fundamentos de homogeneización y estrategias multiescala	6
1.3.3. Fundamentos de las técnicas multiescala bajo el enfoque del Elemento de Volumen Representativo	8
1.3.4. Flujo y transporte en medios porosos saturados	11
1.3.5. Flujo electroosmótico y conductividad iónica en medios porosos saturados	11
1.4. Organización de la tesis	13
2. Fundamentos	15
2.1. Introducción	15
2.2. Separación de escalas y nociones de un Elemento de Volumen Representativo	16
2.2.1. Tamaño y existencia de un RVE	17
2.3. Taxonomía de los modelos	18
2.4. Generalización de los fundamentos multiescala	19
2.4.1. Descripción de variables en la microescala	19
2.4.2. Ecuaciones de compatibilidad de variables macroescala y microescala (Admisibilidad Cinemática)	20
2.4.3. Principio de la Potencia Virtual Multiescala	20
2.4.4. Consecuencias	21
2.5. Submodelos del Modelo Multiescala Clásico	23

2.5.1.	Submodelo de Taylor	23
2.5.2.	Submodelo Lineal	24
2.5.3.	Submodelo Periódico	24
2.5.4.	Submodelo de Mínima Restricción Cinemática	25
2.6.	Marco metodológico y estrategias de simulación	26
3.	Modelado de Flujo Saturado	31
3.1.	Introducción	31
3.1.1.	Porosidad	32
3.1.2.	Régimen de Stokes	33
3.1.3.	Ley de Darcy	34
3.1.4.	Permeabilidad	34
3.1.5.	Tortuosidad	35
3.1.6.	Constricción	36
3.2.	Formulación multiescala	38
3.2.1.	Permeabilidad efectiva	39
3.3.	Resultados	40
3.3.1.	Validación del modelo numérico multiescala	40
3.3.2.	Validación con Simulaciones Numéricas Directas	42
3.3.3.	Geometría y determinación de escala de magnitud	44
3.3.4.	Dependencia con la escala	47
3.3.5.	Validación de existencia del Elemento de Volumen Representativo	49
3.4.	Síntesis	51
4.	Modelado de Flujo Electroosmótico	53
4.1.	Introducción	53
4.1.1.	Doble capa eléctrica (EDL)	54
4.1.2.	El mecanismo de movimiento	55
4.1.3.	Ley de Helmholtz-Smoluchowski	55
4.2.	Formulación multiescala	57
4.2.1.	Conservación de cargas	59
4.2.2.	Permeabilidad electroosmótica	60
4.3.	Resultados	61
4.3.1.	Validación de existencia del Elemento de Volumen Representativo	61
4.3.2.	Validación del modelo numérico multiescala	62

4.3.3. Validación con Simulaciones Numéricas Directas	64
4.3.4. Problema de flujo mixto	67
4.3.5. Problema eléctrico con término fuente	69
4.4. Síntesis	71
5. Modelado de Transporte escalar	73
5.1. Introducción	73
5.1.1. Flujo difusivo	74
5.1.2. Flujo advectivo	74
5.1.3. Número de Péclet	75
5.1.4. Flujo dispersivo	76
5.2. Formulación multiescala	78
5.2.1. Tensor de difusividad efectiva	81
5.3. Resultados	81
5.3.1. Problema de flujo difusivo	81
5.3.2. Validación de existencia del Elemento de Volumen Representativo	83
5.3.3. Estudio de la influencia de la Condición de borde de Media	86
5.3.4. Dependencia con el mallado de la inclusión sólida	89
5.3.5. Dependencia con la escala	90
5.3.6. Validación con Simulaciones Numéricas Directas	92
5.3.7. Dependencia con la velocidad de entrada	98
5.3.8. Problema de flujo dispersivo y constante de dispersividad	101
5.4. Síntesis	113
6. Conclusiones	115
6.1. Propuesta geométrica de microcelda	116
6.2. Aportes aplicado al problema de flujo saturado	116
6.3. Conclusiones	118
6.4. Aportes a problemas de transporte de concentración	120
6.5. Trabajos científicos derivados	124
6.6. Líneas de investigación a futuro	125
Bibliografía	129

Índice de figuras

1.1. Convergencia de la propiedad efectiva P^* con respecto a diferentes condiciones de borde prescritas.	8
2.1. Macrocontinuo con una microestructura localmente adjunta.	17
2.2. Ejemplo de microcelda por el submodelo periódico clásico.	25
2.3. Esquema general de la estrategia de simulación multiescala y multifísica acoplada desarrollada en esta tesis.	28
3.1. Microestructura compuesta por una matriz sólida y poros saturados de fluido	32
3.2. Trayectoria de flujo recta y tortuosa en medios porosos (Imagen basada en el libro de Civan [2011].)	36
3.3. Esquema simplificado del modelo de tubos constrictos propuesto por Franck et al. [2022].	37
3.4. Permeabilidad efectiva k_{11} para diferentes relaciones $\frac{R}{L}$	41
3.5. Geometrías consideradas a las escalas micro y macro del enfoque multiescala y DNS.	43
3.6. Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) para el problema de Stokes	43
3.7. Representación geométrica del RVE propuesto para la microestructura del papel.	46
3.8. Solución del problema de flujo en la microescala para el papel Munktell 00A	46
3.9. Solución del problema de flujo en la microescala para el papel Whatman #1	47
3.10. Análisis de sensibilidad del tensor de permeabilidad efectivo con las dimensiones de la microcelda para las geometrías de Munktell 00A y Whatman #1.	48
3.11. Convergencia de la permeabilidad efectiva en la dirección del flujo	50

4.1. Representación esquemática del desplazamiento de la doble capa eléctrica bajo la acción de un campo eléctrico externo en un capilar.	55
4.2. Gráficas de convergencia del tensor de permeabilidad electroosmótica efectivo en dirección tangencial	62
4.3. Solución del problema de flujo electroosmótico en la microescala para geometría Munktell 00A mediante el modelo multiescala propuesto	63
4.4. Solución del problema de flujo electroosmótico en la microescala para geometría Whatman #1 mediante el modelo multiescala propuesto	64
4.5. Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Flujo Electroosmótico para papel Munktell 00A	66
4.6. Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Flujo Electroosmótico para papel Whatman #1	66
4.7. Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Flujo Mixto	69
4.8. Solución DNS vs Multiescala de problema de flujo electroosmótico con fuente micro homogénea	71
5.1. Resultados del modelo multiescala para el problema de transporte puramente difusivo para la geometría de papel Munktell 00A	82
5.2. Resultados del modelo multiescala para el problema de transporte puramente difusivo para la geometría de papel Whatmann #1	83
5.3. Gráficas de convergencia de las propiedades efectivas para la geometría de papel Munktell 00A (RVE_1).	84
5.4. Gráficas de convergencia de las propiedades efectivas para la geometría de papel Whatman #1 (RVE_2).	85
5.5. Comparación de distintas estrategias de imposición de la condición de media en las contribuciones difusiva y advectiva del tensor de difusividad efectiva.	88
5.6. Comparación del tiempo de convergencia en función del número de nodos para distintas condiciones de borde de media	88
5.7. Componente D_{Dxx} y D_{Axx} del tensor de difusión efectivo mallando y no la inclusión para el papel Munktell	90
5.8. Análisis de sensibilidad de D_{Axx} y D_{Ayy} del tensor de difusividad efectivo con las dimensiones de la microcelda.	91
5.9. Análisis de sensibilidad de D_{Dxx} y D_{Dyy} del tensor de difusividad efectivo con las dimensiones de la microcelda.	91

5.10. Análisis de sensibilidad del tensor de difusividad efectivo del problema puramente difusivo con las dimensiones de la microcelda.	92
5.11. Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Transporte Escalar para papel Munktell 00A	93
5.12. Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Transporte Escalar para papel Whatman #1	93
5.13. Resultados de la microescala del modelo multiescala para el problema de transporte advectivo-difusivo en geometría de papel Munktell 00A	94
5.14. Resultados de la microescala del modelo multiescala para el problema de transporte advectivo-difusivo en geometría de papel Munktell #1	94
5.15. Corte longitudinal del perfil de concentración obtenido mediante Solución Numérica Directa (DNS) vs Soluciones del Modelo Multiescala	95
5.16. Corte longitudinal del perfil de concentración obtenido mediante Solución Numérica Directa (DNS) vs Soluciones del Modelo Multiescala	96
5.17. Variación de la componentes xx e yy de las partes difusiva y advectiva para geometría de papel Munktell 00A	99
5.18. Variación de la componentes xx e yy de las partes difusiva y advectiva para geometría de papel Whatman #1	99
5.19. Variación de la componentes xy e yx de las partes difusiva y advectiva para geometría de papel Munktell 00A	100
5.20. Variación de la componentes xy e yx de las partes difusiva y advectiva para geometría de papel Whatman #1	100
5.21. Gráficas de coeficiente de dispersión mecánica vs Velocidad para el papel Whatman #1.	104
5.22. Gráficas de dispersividad vs Velocidad para el papel Whatman #1.	106
5.23. Gráficas de dispersividad vs Velocidad para el papel Munktell 00A.	107
5.24. Variación del error medio de la media móvil de la dispersividad longitudinal y transversal con respecto a la velocidad del flujo para el papel Whatman #1.	110
5.25. Variación del error medio de la media móvil de la dispersividad longitudinal y transversal con respecto a la velocidad del flujo para el papel Munktell 00A.	112

Índice de tablas

3.1. Valores numéricos de permeabilidad efectiva obtenidos mediante el modelo multiescala propuesto y DNS.	44
3.2. Parámetros geométricos para dos geometrías de celdas de papel.	45
3.3. Permeabilidad de Darcy y factor de constricción obtenidos mediante el modelo multiescala	47
4.1. Valores numéricos de velocidad tangencial obtenidos mediante el modelo multiescala y DNS.	65
4.2. Valores de velocidad tangencial del problema de flujo mixto obtenidos mediante Modelo multiescala y DNS.	68

Resumen

Los dispositivos analíticos microfluídicos basados en papel (**μPADs**) poseen muchas cualidades atractivas, como su bajo costo, portabilidad y capacidad de funcionar sin equipos de apoyo ni fuentes de energía. Sin embargo, una de las principales limitaciones de dichos dispositivos es la falta de repetibilidad asociada a la naturaleza intrincada y aleatoria de los sustratos porosos. En consecuencia, los procesos de investigación y diseño suelen basarse en la construcción de prototipos físicos, lo que evidencia la necesidad de desarrollar herramientas alternativas que permitan una comprensión más profunda de su comportamiento bajo distintas condiciones operativas, reduciendo tanto tiempos como costos experimentales.

Esta tesis tiene como principal contribución la implementación y validación de una herramienta computacional para simular el flujo y transporte en medios porosos basados en papel a costos accesibles, específicamente en los papeles Whatmann #1 y Munktell 00A, los cuales son ampliamente utilizados en **μPADs**. La metodología propuesta se fundamenta en un enfoque multiescala que permite obtener propiedades efectivas mediante un procedimiento de homogeneización, evitando la necesidad de resolver explícitamente la microestructura completa del material en cada simulación. A diferencia de las simulaciones numéricas directas (DNS), cuyo costo computacional escala de manera significativa con el tamaño del dominio, el enfoque multiescala constituye una alternativa computacionalmente eficiente y con alta fidelidad física. Las propiedades efectivas obtenidas pueden compararse con resultados experimentales, mejorando la robustez y confiabilidad de los modelos numéricos.

De este modo, la herramienta desarrollada no solo permite reducir tiempos y recursos en el diseño y análisis de **μPADs**, sino que también proporciona una comprensión más profunda del comportamiento de estos dispositivos en distintas situaciones operativas.

Abstract

Paper-based microfluidic analytical devices (**μPADs**) exhibit many attractive qualities, such as their low cost, portability, and the ability to operate without supporting equipment or power sources. However, one of the main limitations of such devices is the lack of repeatability due to the intricate and random nature of the porous substrates. Consequently, research and design processes are often based on the construction of physical prototypes, highlighting the need to develop alternative tools that allow for a deeper understanding of their behavior under different operating conditions, which would not only save time but also resources.

The proposed methodology is based on a multiscale approach that allows effective properties to be obtained through a homogenization procedure, avoiding the need to explicitly solve the complete microstructure of the material in each simulation. In contrast to direct numerical simulations (DNS), whose computational cost scales significantly with the size of the domain, the multiscale approach is a computationally efficient alternative with high physical fidelity. The effective properties obtained can be compared with experimental results, improving the robustness and reliability of numerical models.

Thus, the developed tool not only reduces time and resources in the design and analysis of **μPADs**, but also provides a deeper understanding of the behavior of these devices in different operating situations.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Cuando hablamos de microfluídica nos referimos al flujo de volúmenes pequeños de fluido mono o multifásico a través de un medio, cuya geometría puede ser simple o compleja y con una escala muy pequeña (entre 100 nanómetros y 1 milímetro). El comportamiento de los fluidos a estas escalas difiere sustancialmente de lo observado en escalas mayores. Se trabaja, por lo tanto, con números de Reynolds extremadamente bajos, típicamente menores que uno. Por consiguiente, el flujo es laminar y no se desarrollan fenómenos de turbulencia. La minimización de todo el sistema puede ser beneficiosa, pero no es un requisito de un sistema microfluídico (Panigrahi [2016]). Los dispositivos microfluídicos, como lo son los Lab-on-Chip, los micro sistemas de análisis total, o los dispositivos analíticos microfluídicos basados en papel (**μPADs**), han sido centro de atención desde su introducción en las últimas décadas (Hou et al. [2022], Sachdeva et al. [2021]), y se han desarrollado ampliamente para pruebas de diagnóstico o laboratorio en puntos de asistencia (*Point-Of-Care Testing*, (**POCT**)) (Strong et al. [2019], Das et al. [2022].)

Además de su bajo costo, portabilidad y autonomía, otra de las cualidades más atractivas de los **μPADs** es su compatibilidad con sistemas biológicos, permitiendo el análisis de muestras bioquímicas complejas que contengan macromoléculas, proteínas, toxinas, patógenos o células, convirtiendo a estos dispositivos en idóneos para el diagnóstico de enfermedades y detección de patógenos (Kim et al. [2020]), y siendo centro de interés de disciplinas como la química, medicina, biología celular, entre otras. Asimismo, los **μPADs** cumplen con los criterios *REASSURED* propuestos por la *Organización Mundial de la Salud* (**OMS**), que establece que toda POCT debe ser amigable con el usuario, asequible,

sensible, específica, de fácil uso, rápido y robusto, no requerir equipos y estar a disposición de los usuarios, con conectividad en tiempo real y de fácil recolección de muestras (Mabey et al. [2004], Land et al. [2019]). Esto con el fin de desarrollar tecnologías de diagnóstico que faciliten el control y tratamiento de enfermedades infecciosas, con especial atención en las poblaciones sectores de bajos recursos, que constituyen la población más afectada (Yager et al. [2006]). Algunos ejemplos de estos dispositivos son las pruebas de embarazo, las pruebas de glucosa en sangre, pruebas de COVID-19, entre otras (Wang et al. [2021], Li et al. [2023], Tseng et al. [2021]).

Sin embargo, una de las principales limitaciones de los μ PADs para alcanzar los criterios *REASSURED* es la falta de repetibilidad por la naturaleza intrincada y aleatoria de los sustratos porosos (Strong et al. [2019], Tahmasebi and Kamrava [2018]). Históricamente los procesos de I+D para μ PADs se sustentan empíricamente, lo cual limita al corto plazo y a aplicaciones específicas dichos procesos. Surge entonces la necesidad de modelos matemáticos fiables y útiles para predecir el comportamiento de los μ PADs en diferentes situaciones operativas y optimizar los procesos de I+D dándoles mejores perspectivas y alcance.

Un medio poroso se puede definir como una matriz sólida que contiene espacios vacíos. Estos espacios vacíos son denominados *poros* y pueden estar desconectados o interconectados, permitiendo que haya movimiento de fluidos a través de ellos. La capacidad de un medio poroso para permitir el flujo de fluidos es una característica clave, y está relacionada con la porosidad (la proporción de espacio vacío), la interconexión de los poros y la geometría de estos. Los medios porosos en general, y en particular los sustratos de papel, se han estudiado sistemáticamente para fenómenos como el transporte de fluidos viscosos a bajas velocidades. En este contexto, se han desarrollado modelos numéricos para describir distintos mecanismos físicos relevantes, incluyendo el transporte y la reacción de especies químicas, la imbibición capilar, el flujo impulsado por gradientes de presión, el flujo electroosmótico y la conducción eléctrica Kumar et al. [2024], Gerlero et al. [2023].

Estos modelos computacionales son actualmente objeto de estudio y se basan en modelos macroscópicos homogéneos o ecuaciones constitutivas fenomenológicas resueltos generalmente por los métodos de elementos finitos o volúmenes finitos. En estos casos, la hipótesis principal es que el material se comporta de manera homogénea ante un determinado estímulo físico. El ejemplo más común es la velocidad de Darcy, que representa la velocidad media de descarga del material promediada en toda su sección. Al aplicar una determinada diferencia de presión, el material producirá un caudal proporcional a

dicha diferencia, esa constante de proporcionalidad se conoce como permeabilidad. Sin embargo, la permeabilidad de un medio poroso irregular, como el papel, se obtiene de manera empírica realizando ensayos de tipo presión-caudal y no mediante un estudio o modelo de su microestructura. Ocurre lo mismo con otros fenómenos como la conductividad eléctrica, el transporte escalar o el flujo insaturado, que dan lugar a constantes de proporcionalidad empíricas como la tortuosidad, el factor de constricción, la dispersividad, o la difusividad de la saturación, respectivamente, que son las utilizadas por los modelos antes mencionados (Franck et al. [2022], Gerlero et al. [2021]).

De manera similar, en el caso del flujo electroosmótico, la respuesta macroscópica del sistema suele describirse mediante movilidades electroosmóticas o conductividades efectivas determinadas experimentalmente, sin considerar explícitamente la distribución espacial de carga y la interacción fluido-sólido a nivel microscópico. Esto pone de manifiesto la necesidad de enfoques multiescala capaces de vincular la microestructura y los mecanismos electrohidrodinámicos locales con las propiedades efectivas observadas a escala macroscópica (Salazar Bove et al. [2025b]).

Un factor que es altamente conveniente para el estudio de μ PADs es la diferencia de escala entre la microestructura compleja del sustrato de papel ($\sim\mu\text{m}$) y el dispositivo ($\sim\text{cm}$ o mm), lo que permite emplear técnicas multiescalas para sacar provecho de dicho salto. Estas técnicas tienen la ventaja de poder resolver en problemas separados las escalas características evitando describir explícitamente todas las heterogeneidades del material a nivel microestructural, lo que supone un ahorro de coste y tiempo de cómputo (Yvonnet [2019]), y la reducción de incertezas derivadas de la determinación empírica de las propiedades macroscópicas.

En ese sentido, las formulaciones multiescala son una poderosa herramienta donde el conjunto de ecuaciones constitutivas que describen la respuesta del material son definidas únicamente en las escalas de longitud más pequeña o microescala y para cada uno de los constituyentes. En las escalas de mayores longitudes o macroescala, la respuesta constitutiva (propiedad efectiva equivalente) se deriva mediante el proceso de homogeneización, a partir de las definiciones dadas en la microescala. Otra de sus principales ventajas es que, dada una definición digital de la microestructura, ya sea mediante imágenes experimentales (Tahmasebi and Kamrava [2018], Cnudde and Boone [2013]), o a partir de una idealización de la geometría se pueden evaluar las propiedades efectivas y modificar el modelo microestructural numérico para optimizar su capacidad de representación del material y su comportamiento ante el fenómeno estudiado.

Esta tesis doctoral se desarrolla dentro del campo de la microfluídica aplicada, con un fuerte sustento en la mecánica computacional. Los objetivos propuestos buscan una convergencia entre dichos campos, con el propósito de ofrecer un soporte metodológico que contribuya al avance de aplicaciones ingenieriles.

1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivo general

La presente tesis plantea como objetivo general el desarrollo de estrategias numéricas para el modelado computacional de dispositivos microfluídicos porosos basados en papel, micro y nano estructurados (*Microfluidic Paper-based Analytical Devices*, μ *PADs*) mediante la aplicación de técnicas multiescalas.

1.2.2. Objetivos específicos

En particular, esta tesis contempló los siguientes objetivos específicos:

1. Desarrollar y validar herramientas numéricas multiescala para problemas de flujo saturado en sustratos porosos de papel.
2. Desarrollar y validar un modelo multiescala para el análisis del transporte escalar advectivo-difusivo en medios porosos de papel.
3. Proponer y validar modelos multiescala para el estudio del flujo electroosmótico y conductividad iónica en dispositivos microfluídicos en papel.
4. Estimar y validar propiedades físicas características asociadas a modelos macroscópicos mediante el proceso de homogeneización del modelo numérico desarrollado.

1.3. Antecedentes

Los materiales no homogéneos son ampliamente utilizados en la industria e ingeniería. Estos materiales, también conocidos como microestructurados, heterogéneos o complejos, se definen como aquellos materiales cuya estructura consta de múltiples constituyentes o fases, distinguibles a ciertas escalas de longitud específicas. Cada constituyente muestra diferentes propiedades materiales y/u orientaciones materiales y puede, a su vez, ser inhomogéneo a escalas inferiores, dando lugar a una microestructura jerárquica.

El comportamiento macroscópico de los materiales heterogéneos está gobernado tanto por las propiedades intrínsecas de sus fases constituyentes como por su morfología, fracciones volumétricas y topológica. En consecuencia, la precisión de cualquier modelo teórico o numérico depende directamente de una caracterización detallada de esta microestructura. El análisis de dicho comportamiento puede estudiarse a varias escalas de longitud, abarcando desde el nivel subatómico, regido por la mecánica cuántica, hasta la escala macroscópica, donde se aplican modelos de continuo, como detalla Steinhauser [2022].

Esta tesis se centra en el modelado numérico del comportamiento de dispositivos microfluidicos mediante un enfoque multiescala basadas en el concepto de Elemento de Volumen Representativo, para conectar las distintas escalas físicas del sistema. El objetivo es capturar los fenómenos clave que rigen su funcionamiento: el flujo de fluidos, el transporte de especies y efectos causados por campo eléctricos.

1.3.1. Propiedad Efectiva

Los sistemas porosos presentan una complejidad considerable debido a su naturaleza multicomponente y/o multifásica, lo que ha llevado a la aceptación generalizada del concepto de propiedades efectivas (Gusev [2007], Wang and Pan [2008]). El comportamiento global de estos materiales resulta de la contribución conjunta de todas sus fases y componentes presentes, por lo que sus propiedades macroscópicas no pueden identificarse con las de ningún constituyente de manera individual. En este marco, una propiedad efectiva se interpreta como la propiedad equivalente de un material idealizado y homogéneo, de composición y fase únicas, capaz de reproducir la misma respuesta que el sistema complejo bajo idénticas condiciones de excitación. (Wang and Pan [2008], Lugo et al. [1998], Marinopoulos et al. [1998])

Las denominadas propiedades de transporte efectivas se definen en este trabajo a partir de tres consideraciones fundamentales. En primer lugar, se trata de propiedades macroscópicas evaluadas en régimen estacionario, correspondiente a un estado de equilibrio y en ausencia de partes móviles. Si bien en ciertos sistemas, como los nanocompuestos, las inclusiones a nanoescala pueden tener una influencia relevante, dicha contribución se incorpora exclusivamente a través de las propiedades efectivas asociadas a estas inclusiones. De este modo, el comportamiento global del sistema puede describirse adecuadamente dentro del marco de las teorías del continuo. En segundo lugar, el análisis se centra en propiedades físicas intrínsecas de transporte. En el marco de los alcances de esta tesis, no se consideran explícitamente procesos reactivos acoplados; sin embargo, su incorporación resulta de

interés y constituye una posible extensión futura del modelo desarrollado. Finalmente, se asume que los sistemas multifásicos considerados permanecen en un estado estable y de equilibrio, sin cambios de fase, admitiéndose deformaciones o fenómenos convectivos de magnitud reducida cuando resulte pertinente (Vafai [2015]).

1.3.2. Fundamentos de homogeneización y estrategias multiescala

La variabilidad en la complejidad estructural a distintas escalas de longitud, así como la diversidad de métodos aplicables en cada una de ellas, impide la existencia de procedimientos estándar válidos de manera general para todo tipo de problemas. Por este motivo, la modelización multiescala se basa en la formulación de soluciones específicas, adaptadas a las particularidades de cada caso de estudio.

Se debe entonces estudiar el puente entre las escalas de longitud, lo cual implica que el comportamiento a una escala de longitud mayor (macroescala) debe ser estimado o acotarse utilizando información de una escala de longitud menor (microescala), es decir, deben resolverse problemas de homogeneización.

La homogeneización puede interpretarse como la descripción del comportamiento de un material no homogéneo a una escala de longitud inferior en términos de un material de referencia homogéneo energéticamente equivalente. Su objetivo principal es deducir el comportamiento efectivo global (por ejemplo, la rigidez macroscópica, la conducción del calor y propiedades de transporte relacionadas, las propiedades eléctricas y magnéticas, etc.) a partir del comportamiento material correspondiente de los constituyentes y la disposición geométrica de las fases.

En esencia, este proceso, también conocido como “escalado ascendente” (upscaling), establece una relación fundamental entre la microestructura del material y sus propiedades macroscópicas. De forma complementaria, el proceso inverso, denominado “localización” o “escalado descendente” (downscaling), permite estimar las respuestas locales a nivel microscópico a partir de las condiciones de carga aplicadas sobre el material a escala macroscópica.

Uno de los objetivos importantes de la reducción de las escalas de longitud de los materiales homogéneos consiste en deducir su comportamiento global efectivo (por ejemplo, la rigidez macroscópica, las propiedades de dilatación térmica y resistencia, la conducción del calor y las propiedades de transporte relacionadas, las propiedades eléctricas y magnéticas, las propiedades electromecánicas, etc.) a partir del comportamiento material

correspondiente de los constituyentes (así como el de las interfaces entre ellos) y de la disposición geométrica de las fases.

Existen diversas estrategias multiescala para el análisis del comportamiento mecánico constitutivo de materiales heterogéneos, estudiadas durante décadas a partir de modelos matemáticos. Cada una de estas técnicas ha sido desarrollada a partir de distintos enfoques teóricos. En concordancia con el trabajo de Böhm [2013], se distinguen tres estrategias principales generales:

- (I). *Enfoques basados en Aproximaciones de Campo Medio*: Es un método que permite simplificar el estudio de sistemas complejos compuestos por un gran número de partículas o fases que interactúan entre sí. En este enfoque se adopta la hipótesis de que los microcampos son uniformes dentro de cada una de las fases presentes en el material, reemplazando las interacciones individuales y complejas por una interacción promedio o “campo medio” efectivo. Esto reduce un problema de muchos microconstituyentes a un problema más manejable de un solo cuerpo bajo la influencia de este campo promediado.
- (II). *Los métodos de Acotación Variacional*: Se basan en principios variacionales fundamentales para determinar cotas rigurosas, superiores e inferiores, en las propiedades del compuesto, considerando la interacción entre todos los componentes. Esto con el fin de reformular problemas físicos y matemáticos como problemas de minimización o extremización de un funcional.
- (III). *Los métodos basados en el concepto de Elemento de Volumen Representativo*: Este enfoque de homogeneización utiliza un elemento de volumen que intenta capturar la microestructura del material a estudiar. Dicha muestra es sometida a diversas condiciones de carga, y su respuesta global se promedia para construir un modelo de comportamiento macroscópico equivalente. La definición, implementación y limitaciones de este método se examinarán en detalle en la subsección siguiente.

En general, las dos primeras aproximaciones (**I** y **II**) son aplicables a materiales heterogéneos con microestructuras de topología simple o bien definida, lo que ha permitido el desarrollo de numerosas soluciones analíticas. En contraste, el tercer enfoque (**III**) está diseñado para modelar microestructuras de gran complejidad, por lo que su implementación depende casi exclusivamente de métodos numéricos y de la homogeneización computacional.

Estas técnicas han sido ampliamente implementadas en diversos métodos numéricos para estudiar el flujo y transporte en medios porosos para fluidos monofásicos (Wagner et al. [2021]) y multifásicos (de Vries et al. [2017]), así como también para problemas de imbibición capilar (Piovesan et al. [2022]), saturación (Chen and Hou [2003]), entre otros.

1.3.3. Fundamentos de las técnicas multiescala bajo el enfoque del Elemento de Volumen Representativo

El *Elemento de Volumen Representativo* (o **RVE** según su siglas en inglés), es un concepto fundamental en la homogeneización computacional. Este define un volumen que describe la microestructura en donde tanto la geometría de las fases como las propiedades locales del material se consideran conocidas. Para ser válido, el RVE debe contener suficiente información para que las propiedades efectivas del material puedan calcularse a partir de este único volumen. Es crucial entender que dichas propiedades efectivas dependen no solo del tamaño del RVE, sino también de las condiciones de contorno impuestas en su frontera para representar la carga macroscópica, tal como se puede visualizar en la Figura 1.1. Por lo tanto, el tamaño del RVE se define como el tamaño mínimo a partir del cual las propiedades efectivas convergen, volviéndose independientes de un aumento posterior de dicho tamaño.

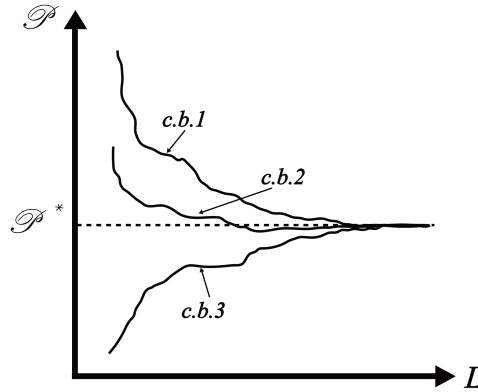


Figura 1.1: Convergencia de la propiedad efectiva $\mathcal{P}^*$ con respecto a diferentes condiciones de borde prescritas.

Un aspecto fundamental en el diseño de un RVE es la reconstrucción de la microestructura del material heterogéneo, lo que implica definir la distribución de fases y topología de la microestructura. Para ello, se emplean procedimientos matemáticos complejos que,

según Böhm [2013], abordan dos enfoques principales: **(I)** la reconstrucción estadísticamente equivalente de los componentes o fases, o **(II)** el diseño de la microgeometría de la forma más precisa posible, utilizando microfotografías y su posterior tratamiento de imágenes.

La principal característica de un medio poroso es la coexistencia de una matriz sólida y un espacio poroso, ambos distribuidos de forma continua en todo su volumen. Esto implica que las muestras de un volumen suficientemente grande, tomadas en diferentes lugares dentro del dominio, siempre contendrán una fase sólida y una red de poros que permite el flujo de fluidos. La microestructura del papel ejemplifica este concepto: consiste en una matriz sólida que contiene una compleja red de tubos o canales entrelazados. Cabe destacar que estos canales se entrecruzan, bifurcan y fusionan continuamente, con una distribución que puede o no ser uniforme, lo que genera que la sección transversal de cada uno pueda ser variable. Por tanto, según la definición de RVE, el tamaño de este para que sea representativo de un medio poroso debe siempre contener tanto parte de la matriz sólida como parte de los espacios vacíos (Bear and Cheng [2010]).

La adopción del enfoque REV tiene implicancias directas en la modelización del problema. Como consecuencia del promediado volumétrico, variables físicas tales como velocidad, presión o temperatura dejan de definirse en puntos específicos del espacio poroso y pasan a interpretarse como magnitudes promedio sobre volúmenes que contienen fases sólida y fluida simultáneamente. En consecuencia, las leyes físicas que fundamentan el modelo matemático deben formularse en términos de estas cantidades promediadas.

Como se detalla en el trabajo de Das et al. [2018], este procedimiento introduce una dificultad adicional: al realizar el promediado de las ecuaciones locales de conservación, surgen términos adicionales asociados a la microestructura, cuya expresión exacta depende de la geometría del espacio poroso. Por ello, las ecuaciones macroscópicas resultantes no pueden cerrarse sin la introducción de parámetros efectivos o factores constitutivos que representen dichos efectos microscópicos.

En principio, estos términos podrían deducirse rigurosamente a partir de una integración exacta de las ecuaciones locales sobre el REV, siempre que la geometría del medio poroso estuviera completamente caracterizada. Sin embargo, en la mayoría de las aplicaciones prácticas, la complejidad y la irregularidad del espacio poroso impiden una derivación analítica explícita. En tales casos, la determinación experimental de los parámetros efectivos constituye el enfoque tradicional, siendo las mediciones de laboratorio un elemento fundamental en el establecimiento de las ecuaciones macroscópicas de transporte en medios

porosos.

La ventaja más significativa de este enfoque es de índole geométrica, pues resulta innecesario especificar la compleja microestructura del medio poroso. En cambio, la caracterización del medio se reduce a la porosidad (ϵ), es decir, a la relación entre el volumen del espacio poroso (vacío) y el volumen total. Asimismo, las variables intensivas del fluido a nivel microscópico, como la velocidad, la temperatura o la presión, son sustituidas por valores efectivos o promediados equivalentes, aplicables a la escala macroscópica del REV.

1.3.3.1. Tamaño y Existencia de un Elemento de Volumen Representativo

La modelización del flujo y transporte dentro de cada poro de un material poroso presenta mucha complejidad y un costo computacional muy elevado, lo que se vuelve computacionalmente inviable para problemas de dimensiones reales. En consecuencia, se emplean metodologías de promedio espacial que permiten describir el comportamiento del flujo en escalas mayores que las asociadas a los poros individuales. Esto permite analizar el problema de una manera mucho más sencilla y práctica (Das et al. [2018]).

Investigaciones previas, como las de Shriram y colaboradores (Shriram et al. [2006], Shriram and Somnath [2006]) y González and LLorca [2007], presentan un enfoque basado en métodos numéricos como el *Método de Elementos Finitos* (**FEM** según su siglas en inglés), en donde se utilizan cálculos en una celda unitaria y permite determinar el tamaño del RVE mediante análisis estadísticos que se basan en cálculos numéricos. La determinación del tamaño de la RVE puede realizarse analizando la convergencia de los parámetros efectivos del material con respecto al tamaño de la celda unitaria. En otras palabras, el valor medio medido debe ser independiente de pequeñas perturbaciones en el tamaño del RVE. Esto significa que el valor medio debe permanecer más o menos inalterable en un intervalo de volúmenes de RVE. Para microestructuras que exhiben un comportamiento constitutivo homogeneizado estable, la existencia de un RVE de dimensiones físicamente admisibles es un principio bien establecido. Esta hipótesis ha sido objeto de una extensa investigación (véase Pindera et al. [2009] y Nemat-Nasser et al. [2013]), consolidándose como un aspecto fundamental y bien estudiado en la problemática del diseño del RVE.

Ejemplos de este enfoque en propiedades térmicas y elásticas pueden encontrarse en trabajos como los presentados por Gusev [1997], Ostoja-Starzewski [2006] y El Houdaigui et al. [2007] entre otros. Salmi et al. [2012] propusieron nuevos criterios para determinar el tamaño de RVE con matriz elástica aleatoria. Soize [2008] introdujo una teoría de

homogeneización estocástica para materiales compuestos elásticos anisótropos aleatorios que no pueden describirse en términos de sus constituyentes y para los que no pueden aplicarse los métodos estándar.

Para el estudio de medios porosos, se establece que el RVE debe ser considerablemente más pequeño que la extensión global del sistema.

1.3.4. Flujo y transporte en medios porosos saturados

El modelado numérico del flujo y transporte en medios porosos ha sido ampliamente aplicado en diversos campos de la ingeniería: civil (Carmeliet et al. [2004]), química (Ehlers and Bluhm [2010]), geofísica (Pruess and Tsang [1990], Berre et al. [2019]), petrolera (Rhodes et al. [2008], Al-Dhahli et al. [2012], Paillat et al. [2000]), entre otros. Dentro de un medio poroso pueden darse una gran variedad de patrones de flujo y transporte, los cuales dependen estrechamente de la estructura del espacio poroso y de la matriz sólida. De hecho, en la mayoría de las aplicaciones, la falta de uniformidad de la geometría de los poros desempeña un papel determinante en la solución del flujo y el transporte (Das et al. [2018]).

Tal como es explicado en el libro de Ichikawa and Selvadurai [2012], las ecuaciones de Navier-Stokes pueden utilizarse para describir estos problemas de flujo de fluidos. Dado que estas ecuaciones son independientes de la escala, el flujo en la microescala de un medio poroso también puede describirse mediante estas. Si se supone que la velocidad en una superficie sólida es nula, el campo de velocidad de un problema de medio poroso con un tamaño de poro pequeño disminuye rápidamente. Describimos este campo de flujo omitiendo el término convectivo $\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}$, que da lugar a la ecuación clásica de Stokes. Recordemos que la ecuación de Darcy suele aplicarse para describir la infiltración en un medio poroso en el que la escala de la matriz sólida no entra en la formulación como parámetro explícito. El efecto de escala de la fase sólida se incluye implícitamente en el coeficiente de permeabilidad, que se determina mediante experimentos.

1.3.5. Flujo electroosmótico y conductividad iónica en medios porosos saturados

Los fenómenos electrocinéticos describen el acoplamiento entre el flujo de fluidos y los campos eléctricos en la interfaz entre una fase sólida y una solución líquida (un electrolito). El origen de estos fenómenos reside en la formación de una *doble capa eléctrica* (**EDL** por

su nombre en inglés) en la superficie del sólido. Esta estructura, compuesta por una capa difusa de iones móviles en el fluido y una capa de iones fijos en la superficie, es la que responde a estímulos eléctricos o mecánicos. Los fenómenos electrocinéticos se clasifican generalmente en cuatro categorías: electroforesis, electroósmosis, potencial de corriente y potencial de sedimentación. Sin embargo, estos cuatro tipos de fenómenos pueden coexistir y tener fuertes relaciones entre sí.

El *flujo electroosmótico* (**EOF**, por sus siglas en inglés) es un aspecto clave de los fenómenos electrocinéticos. Cuando a un material poroso saturado se le aplica un campo eléctrico tangencial a la EDL, la fuerza de Coulomb actúa sobre la carga neta de la capa difusa, lo que produce un movimiento de iones. A través de la transferencia de momento por fuerzas viscosas, estos iones arrastran consigo el fluido neutro adyacente, lo que resulta en un flujo macroscópico a través de los poros. Como explica Klaseboer and Chan [2020], la velocidad de este flujo es directamente proporcional tanto a la intensidad del campo eléctrico aplicado como al potencial de pared (ζ), y está descrita por la ecuación de Helmholtz-Smoluchowski.

Múltiples trabajos se han realizado en la investigación del flujo electroosmótico, abarcando una amplia gama de campos de investigación. Rice and Whitehead [1965] se basaron en la teoría de la doble capa y la ecuación de Boltzmann para proponer un modelo de capilar cilíndrico estrecho y recto, obteniendo el caudal y la velocidad del flujo electroosmótico y analizaron la relación entre los fenómenos electroosmóticos y el radio de flujo. Kobayashi et al. [1979] diseñaron un montaje experimental electroosmótico vertical, considerando factores como la gravedad, la presión y las fuerzas del campo eléctrico. Obtuvieron la distribución de potencial, la velocidad de flujo electroosmótico y la tasa de flujo electroosmótico en canales capilares. En la industria petrolera, Yang et al. [2023] concluyeron que el caudal de petróleo puede aumentarse aplicando un campo eléctrico externo, lo que mejora la tasa de recuperación de petróleo en consecuencia. En el campo de los dispositivos microfluídicos, la tecnología de laboratorio en chip permite la miniaturización de la preparación de muestras, las reacciones, las separaciones y las técnicas de detección mediante el uso de fenómenos electrocinéticos, como es estudiado en el trabajo de Jiang et al. [2021]. Dutta [2013] llevó a cabo una simulación numérica en un modelo de canal de dos placas paralelas para investigar la separación de cargas en nanofluidos. Derivaron una ecuación normalizada de velocidad de flujo electroosmótico.

En el marco de esta tesis, al trabajar con una solución acuosa de electrolitos, la longitud de Debye (κ^{-1}) es alrededor de los 10 nanómetros, acorde a lo reportado en el libro

Lyklema [1991]. Considerando que la longitud característica del papel es del orden de los micrómetros, conlleva a que la relación $\kappa L_z \gg 100$ se cumpla, con lo que es correcto utilizar la relación de Helmholtz-Smoluchowski para aproximar la velocidad electroosmótica (Moshfegh and Jabbarzadeh [2016]).

1.4. Organización de la tesis

La presente tesis fue redactada siguiendo las pautas establecidas por la Resolución CD 216/18 DI del Consejo Directivo de la Universidad Nacional del Litoral - Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas.

El documento se organiza en seis (6) capítulos, cuyos contenidos se describen a continuación:

- En el Capítulo 1 se introdujo la temática general del trabajo con antecedentes que lo respaldan, se presenta la motivación que sustenta la investigación y se establecen los objetivos principales de la tesis.
- En el Capítulo 2 se desarrollan los fundamentos teóricos y conceptuales del enfoque multiescala empleado, los cuales constituyen la base metodológica para la resolución de los problemas abordados en los capítulos posteriores.
- En el Capítulo 3 se estudia el problema de flujo saturado en medios porosos mediante técnicas multiescala, presentándose tanto la formulación matemática como los principales resultados obtenidos.
- En el Capítulo 4 se aborda el problema de flujo electroosmótico en medios porosos de papel, empleando el marco multiescala desarrollado, y se presentan los resultados correspondientes.
- En el Capítulo 5 se analiza el problema de transporte escalar en medios porosos de papel a partir del modelo multiescala propuesto, incluyendo la discusión detallada de los resultados numéricos.
- Finalmente, en el Capítulo 6 se exponen las conclusiones generales del trabajo y se discuten posibles líneas de investigación futura derivadas de los resultados obtenidos.

Capítulo 2

Fundamentos de las técnicas multiescala y estrategias de simulación

2.1. Introducción

Las formulaciones multiescala surgen como una respuesta a las limitaciones de los modelos constitutivos fenomenológicos convencionales (monoescala). Si bien estos modelos clásicos han sido exitosos en muchas aplicaciones, su capacidad predictiva disminuye drásticamente ante deformaciones complejas o cuando la respuesta estructural está dominada por una fuerte heterogeneidad material (como en compuestos, tejidos biológicos o procesos de falla), tal como ha detallado Souza Neto and Feijóo [2010].

En general, los modelos constitutivos clásicos monoescala intentan describir el comportamiento del material mediante funciones matemáticas cerradas (como la plasticidad de von Mises o leyes de daño).

En este contexto, la modelación multiescala no se basa en leyes constitutivas cerradas a nivel macroscópico, sino que deriva la respuesta del material (tensiones, flujo térmico, flujo de concentración, etc.) a partir de la resolución de un problema de equilibrio en una escala inferior (microescala), donde se modelan explícitamente las heterogeneidades.

En este capítulo se establecen las bases teóricas que dan soporte a la formulación multiescala considerada en esta tesis.

2.2. Separación de escalas y nociones de un Elemento de Volumen Representativo

Estas metodologías se fundamentan en el acoplamiento de dos escalas de longitud como se muestra en la Figura 2.1:

- **La Macroescala (Escala Estructural):** donde el material se idealiza como un medio continuo y homogéneo.
- **La Microescala (Escala del Material):** donde se definen las fases, defectos, poros o inclusiones que constituyen al material.

En la formulación multiescala, se abandona la idea de usar una fórmula matemática fija para calcular la respuesta del material. En su lugar, se introduce el concepto de que el modelo multiescala actúa como una “caja constitutiva” numérica, la cual actúa como un operador que vincula variables macroscópicas de entrada con respuestas efectivas homogeneizadas, a través de la resolución numérica de un problema microscópico que captura explícitamente los mecanismos físicos subyacentes. Para ello, en cada punto de integración de la estructura macroscópica (por ejemplo, en un elemento finito), en lugar de llamar a una sub-rutina de un material estándar (como acero u hormigón), el modelo “llama” a la resolución de una microestructura o *Elemento de Volumen Representativo* (RVE) (Toro [2014]).

Conceptualmente, puede entenderse como un sistema cerrado en el cual existe:

- **Entrada:** se prescribe la historia de deformaciones o gradientes macroscópicos experimentada por el material a nivel global.
- **Proceso interno:** en lugar de emplear una ley constitutiva explícita predefinida, se resuelve un problema físico completo en la microescala dentro del RVE, considerando la geometría y las ecuaciones gobernantes locales.
- **Salida:** se obtiene la respuesta promedio y homogeneizada (por ejemplo, el tensor de tensiones efectivo), que actúa como ley constitutiva macroscópica del material.

De acuerdo a lo establecido, el RVE representa el vínculo entre ambas escalas. Se asume el principio de separación de escalas, el cual postula que la longitud característica del RVE (l_μ) es mucho menor que la longitud característica del macro-continuo (l), permitiendo que cada punto de integración macroscópico esté asociado a una microestructura local.

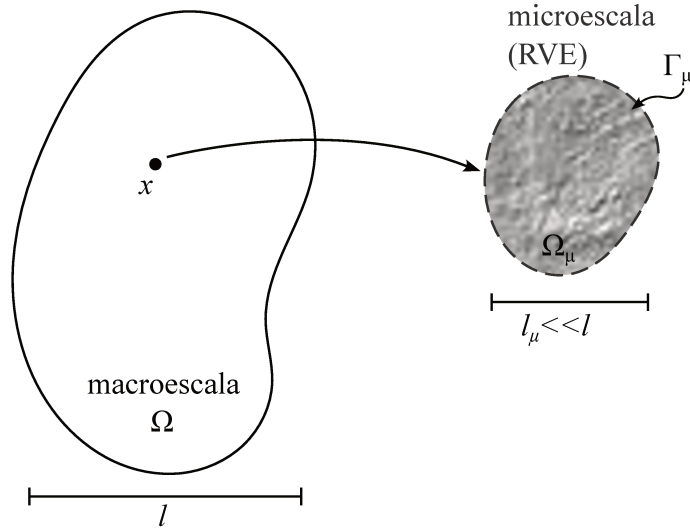


Figura 2.1: Macrocontinuo con una microestructura localmente adjunta.

2.2.1. Tamaño y existencia de un RVE

Basado en los textos de Bear and Cheng [2010], Yvonnet [2019], Souza Neto and Feijóo [2010] y Toro [2014], la existencia de un Elemento de Volumen Representativo (RVE) no es automática; debe ser confirmada mediante el cumplimiento de condiciones estadísticas, geométricas y de comportamiento mecánico.

A continuación se detallan los factores determinantes para confirmar su existencia:

- (I). **Estabilidad Estadística de la Propiedad:** Uno de los factores para confirmar un RVE es la invarianza de las propiedades medias frente a variaciones del volumen de muestreo. Según Bear and Cheng [2010], si se mide una propiedad en un volumen V creciente centrado en un punto, la propiedad fluctuará inicialmente debido a la heterogeneidad microscópica. Para que exista un RVE, estas fluctuaciones deben amortiguarse hasta alcanzar un valor estable.

Por tanto, debe existir un rango de volúmenes $V_{min} \leq V_o \leq V_{max}$ dentro del cual la propiedad media se mantenga constante (dentro de una tolerancia aceptable). Si las fluctuaciones persisten o si aparece una tendencia macroscópica sin estabilizarse, no se puede definir un RVE.

- (II). **Separación de Escalas:** Para que el enfoque de medio continuo sea válido, debe cumplirse rigurosamente la separación de escalas de longitud.

El tamaño característico del RVE (δ) debe satisfacer la condición $d \ll \delta \ll L$, donde d es la longitud característica de la heterogeneidad (tamaño de poro o grano) y L es la longitud característica del dominio macroscópico o del fenómeno físico.

- (III). **Independencia de las Condiciones de Borde:** Desde la perspectiva de la mecánica computacional, la confirmación del tamaño del RVE se vincula a la convergencia de las propiedades efectivas bajo distintas condiciones de contorno (Yvonnet [2019] y Souza Neto and Feijóo [2010]). La manera clásica de obtener una respuesta energéticamente consistente, es tener condiciones de borde periódicas. Esto se describe en detalle más adelante, en la Sección 2.5.
- (IV). **Representatividad Estadística y Homogeneidad:** En particular, para que pueda definirse un RVE único y bien caracterizado, el dominio debe ser estadísticamente homogéneo. En este contexto, se debe cumplir la propiedad de ergodicidad, según la cual el promedio espacial de una magnitud física calculado sobre un RVE es equivalente al promedio obtenido sobre un conjunto de realizaciones posibles del material.

Asimismo, la microestructura debe exhibir una distribución de heterogeneidades estadísticamente estacionaria. Esto implica que las funciones de densidad de probabilidad asociadas a la distribución de fases (por ejemplo, sólido y fluido) no dependan de la posición dentro del dominio. Bajo esta condición, la localización del RVE dentro del material no altera las propiedades efectivas obtenidas, garantizando así la representatividad y unicidad del volumen considerado.

2.3. Taxonomía de los modelos

Siguiendo la clasificación presentada en Toro [2014], las estrategias multiescala basadas en RVE se pueden agrupar en tres categorías según el nivel de acoplamiento:

- (I). **Modelos Jerárquicos:** El RVE se utiliza “offline” para precalcular la respuesta del material y construir una base de datos o ajustar parámetros de un modelo macroscópico. Son eficientes pero limitados por la parametrización de los datos de entrada.
- (II). **Modelos Semiconcurrentes (FE^2):** El RVE se resuelve “online” durante el análisis macroscópico. Para cada punto de integración macro, se resuelve un problema de valor de contorno en la microescala. La deformación macro impone las condiciones de borde del RVE, y la tensión macro es el promedio volumétrico de la tensión micro. Esta estrategia se adopta en los trabajos de Souza Neto and Feijóo [2010] y

Toro [2014] por su capacidad para modelar microestructuras complejas y caminos de carga arbitrarios.

- (III). **Modelos Concurrentes:** El RVE se embebe geoméricamente dentro del dominio macroscópico, imponiendo compatibilidad cinemática fuerte en la interfaz. Se utiliza cuando no existe una clara separación de escalas.

2.4. Generalización de los fundamentos multiescala

Siguiendo la aproximación axiomática propuesta por Blanco et al. [2016] denominada “*Método de la Potencia Virtual Multiescala (MMVP)*”, la formulación multiescala generalizada basada en la noción de Elemento de Volumen Representativo (RVE) se estructura en cuatro pasos generales, de la siguiente manera:

2.4.1. Descripción de variables en la microescala

Se parte de la idea de que cualquier punto de un cuerpo en la macroescala que ocupa un dominio Ω está asociado a un RVE con un dominio Ω_μ de longitud característica mucho menor que la longitud característica de la macroescala. Los dominios Ω y Ω_μ se denominan macroescala y microescala, respectivamente. Los puntos o coordenadas de la macroescala se denotan $\vec{x} \in \Omega$, mientras que los puntos o coordenadas de la microescala se denotan $\vec{y} \in \Omega_\mu$.

Una vez definida la geometría del RVE, se procede a caracterizar su “estado físico” mediante las siguientes variables:

2.4.1.1. Variables de Estado y Espacios Funcionales

Se define un espacio funcional $\mathcal{W}_\mu$ que contiene los campos de estado microscópicos ψ_μ . Este campo se descompone aditivamente de la forma:

$$\psi_\mu = \psi + \nabla_{\vec{x}}\psi \cdot \vec{y} + \tilde{\psi}_\mu \quad (2.1)$$

donde ψ es la variable en la macroescala, $\nabla_{\vec{x}}$ es el gradiente acorde a las coordenadas de la macroescala y $\tilde{\psi}_\mu \in \mathcal{W}_\mu$ representa el campo de fluctuación local, el cual captura las heterogeneidades de la microescala.

Asimismo, se define el espacio de campos de gradiente generalizados ($\mathcal{E}_\mu$). Existe un operador lineal $\mathcal{L}_\mu(\bullet)$ tal que el gradiente microscópico se obtiene como: $\gamma_\mu = \mathcal{L}_\mu(\psi_\mu) \in \mathcal{E}_\mu$.

2.4.1.2. Variables duales

A través de argumentos de dualidad, se identifican las variables de flujo generalizadas (o tensiones generalizadas) $\tau_\mu \in \mathcal{E}'_\mu$ y las fuerzas externas generalizadas $b_\mu \in \mathcal{U}'_\mu$. Estas variables son conjugadas a las variaciones del campo de estado y sus gradientes en términos de densidad de potencia (o energía) del sistema.

2.4.2. Ecuaciones de compatibilidad de variables macroescala y microescala (Admisibilidad Cinemática)

Para garantizar la coherencia física, se introducen operadores de transferencia que vinculan las variables macroscópicas evaluadas en $\vec{x}$ (el estado macro $\Psi_M|_{\vec{x}}$ y su gradiente $\Lambda_M|_{\vec{x}}$) con el campo microscópico.

2.4.2.1. Operadores de Inserción (Macro $\rightarrow$ Micro)

Definen cómo la cinemática macro se “inserta” en la microescala. Se postulan dos operadores lineales: $\mathcal{J}_\mu^\Psi$ y $\mathcal{J}_\mu^\Lambda$. Con estos operadores, la cinemática microscópica ligada al punto macro $\vec{x}$ queda definida como:

$$\psi_\mu = \mathcal{J}_\mu^\Psi(\Psi_M|_{\vec{x}}) + \mathcal{J}_\mu^\Lambda(\Lambda_M|_{\vec{x}}) + \tilde{\psi}_\mu \quad (2.2)$$

2.4.2.2. Operadores de Homogeneización (Micro $\rightarrow$ Macro)

Se definen operadores de promediado ($\mathcal{H}_\mu^\Psi$ y $\mathcal{H}_\mu^\Lambda$) que garantizan la conservación de la magnitud de las variables al transferirse entre escalas.

2.4.2.3. Admisibilidad de las fluctuaciones

Para que la transición de escalas sea físicamente admisible, el campo de fluctuaciones microscópicas ($\tilde{\psi}_\mu$) debe pertenecer a un espacio $\mathcal{V}_\mu$ tal que las fluctuaciones tengan un promedio nulo tras aplicar los operadores de homogeneización:

$$\mathcal{V}_\mu = \left\{ \tilde{\psi}_\mu \in \mathcal{U}_\mu \mid \mathcal{H}_\mu^\Psi(\tilde{\psi}_\mu) = 0 \quad \text{y} \quad \mathcal{H}_\mu^\Lambda(\mathcal{L}_\mu(\tilde{\psi}_\mu)) = 0 \right\} \quad (2.3)$$

2.4.3. Principio de la Potencia Virtual Multiescala

Una vez establecida la cinemática, el cierre del modelo requiere definir la transferencia de las variables duales (esfuerzos, flujos o fuerzas) desde la microescala hacia la

macroescala. Esto se logra mediante una suposición de consistencia energética, conocida genéricamente como *Principio Variacional de Hill-Mandel*, el cual establece la equivalencia entre la potencia virtual de ambas escalas.

La compatibilidad cinemática (entre las escalas involucradas) y el balance de fuerzas se verifican solo aproximadamente, en el sentido de medidas promediadas. Desde el trabajo presentado por Feyel and Chaboche [2000], su aplicación numérica en el contexto del método de elementos finitos se la conoce como técnica FE².

En otras palabras, el principio postula que la potencia virtual total en un punto x de la macroescala debe ser exactamente igual a la potencia virtual total en su RVE asociado, para todas las acciones virtuales cinemáticamente admisibles.

Expresado matemáticamente mediante productos de dualidad entre los espacios funcionales y sus duales, el principio se define de la siguiente manera:

$$\mathcal{T}_M|_{\vec{x}} \cdot \delta \Lambda_M|_{\vec{x}} - \mathcal{B}_M|_{\vec{x}} \cdot \delta \Psi_M|_{\vec{x}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} (\tau_\mu \cdot \mathcal{L}_\mu(\delta \psi_\mu) - b_\mu \cdot \delta \psi_\mu) d\Omega_\mu \quad (2.4)$$

donde el término de la izquierda representa la potencia virtual macroscópica en el punto $\vec{x}$, definida por el producto entre el flujo macroscópico ($\mathcal{T}_M$) y la variación del gradiente ($\delta \Lambda_M$), menos el trabajo de las fuerzas de volumen macro ($\mathcal{B}_M \cdot \delta \Psi_M$). El término de la derecha representa el promedio de la potencia virtual microscópica sobre el dominio del RVE, considerando las variaciones virtuales del campo de estado microscópico $\delta \psi_\mu$.

Sustituyendo la descomposición de la variable de estado virtual $\delta \psi_\mu$ en función de los operadores de inserción y la fluctuación ($\delta \tilde{\psi}_\mu$), la igualdad debe cumplirse para todo ($\delta \Psi_M|_{\vec{x}}, \delta \Lambda_M|_{\vec{x}}, \delta \tilde{\psi}_\mu$), lo que permite identificar por separado las ecuaciones de equilibrio local en la microescala, las definiciones de homogeneización para los flujos macroscópicos y las condiciones de contorno aplicables al RVE.

2.4.4. Consecuencias

A partir de la Ecuación variacional (2.4), se deducen todas las ecuaciones gobernantes del modelo multiescala evaluando diferentes configuraciones de las variables virtuales:

- (I). **Ecuación de equilibrio en la microescala:** Haciendo nulas las variaciones virtuales macroscópicas ($\delta \Psi_M|_{\vec{x}} = 0$ y $\delta \Lambda_M|_{\vec{x}} = 0$), se obtiene el problema que gobierna la fluctuación microscópica:

$$\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} (\tau_\mu \cdot \mathcal{L}_\mu(\delta \tilde{\psi}_\mu) - b_\mu \cdot \delta \tilde{\psi}_\mu) d\Omega_\mu = 0 \quad \forall \delta \tilde{\psi}_\mu \in \mathcal{V}_\mu \quad (2.5)$$

Esto indica que el RVE se encuentra en equilibrio bajo las restricciones cinemáticas impuestas.

- (II). **Fórmula de homogeneización para los flujos macroscópicos:** Al anular la variación virtual del campo macro ($\delta\Psi_M|_{\vec{x}} = 0$) y la fluctuación virtual micro ($\delta\tilde{\psi}_\mu = 0$), se obtiene la relación que define el flujo o tensión macroscópica ($\mathcal{T}_M|_{\vec{x}}$):

$$\mathcal{T}_M|_{\vec{x}} \cdot \delta\Lambda_M|_{\vec{x}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} (\tau_\mu \cdot \mathcal{L}_\mu(\mathcal{J}_\mu^\Lambda(\delta\Lambda_M|_{\vec{x}})) - b_\mu \cdot \mathcal{J}_\mu^\Lambda(\delta\Lambda_M|_{\vec{x}})) d\Omega_\mu \quad (2.6)$$

Es importante destacar que, en esta formulación generalizada, se observa que las fuentes o fuerzas externas microscópicas (b_μ) pueden contribuir directamente a los flujos macroscópicos, dependiendo de la naturaleza del operador de inserción $\mathcal{J}_\mu^\Lambda$.

- (III). **Fórmula de homogeneización para las fuerzas externas macroscópicas:**

Finalmente, imponiendo $\delta\Lambda_M|_{\vec{x}} = 0$ y $\delta\tilde{\psi}_\mu = 0$, se deriva la fórmula para transferir las fuentes del nivel micro al macro:

$$\mathcal{B}_M|_{\vec{x}} \cdot \delta\Psi_M|_{\vec{x}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} (b_\mu \cdot \mathcal{J}_\mu^\Psi(\delta\Psi_M|_{\vec{x}})) d\Omega_\mu \quad (2.7)$$

Esta condición asegura que la energía disipada o almacenada en el pequeño volumen del RVE es exactamente la misma que la energía que se representaría en el punto macroscópico equivalente, garantizando que el modelo homogeneizado es energéticamente consistente con el comportamiento real del material a nivel de su microestructura. Sin esta condición, los modelos macroscópicos podrían predecir una disipación o almacenamiento de energía que no se corresponde con la realidad física, llevando a resultados erróneos.

Es fundamental notar que el Principio de Hill-Mandel impone una restricción sobre las condiciones de contorno que pueden aplicarse al RVE. De acuerdo con la formulación variacional presentada por Souza Neto and Feijóo [2010], el principio se satisface si y solo si el trabajo virtual de las fuerzas externas en la frontera del RVE es nulo para cualquier fluctuación de desplazamiento admisible. Esto implica que las condiciones de borde no pueden ser arbitrarias; deben elegirse de manera que sean “reactivas” a las restricciones cinemáticas, como ocurre en los modelos de Taylor (deformación uniforme), condiciones lineales, o condiciones periódicas.

2.5. Submodelos del Modelo Multiescala Clásico:

Condiciones de borde

El concepto de Admisibilidad Cinemática impone restricciones sobre el campo primal $d\tilde{\psi}_\mu$, las cuales pueden expresarse como condiciones de borde sobre la frontera Γ_μ del RVE. La solución del problema micromecánico de equilibrio depende de manera esencial de estas restricciones cinemáticas.

En este sentido, la definición de los espacios $\mathcal{U}_\mu, \mathcal{V}_\mu$ configura la alternativa denominada *Minimamente Restringida*, ya que incorpora únicamente las condiciones necesarias para garantizar la admisibilidad cinemática.

No obstante, pueden seleccionarse subespacios de $\mathcal{U}_\mu, \mathcal{V}_\mu$ que impongan restricciones adicionales sobre el comportamiento del campo fluctuante en la frontera del RVE, dando lugar a diferentes submodelos multiescala. Se adopta aquí la terminología *submodelo* para referirse a las distintas elecciones de condiciones de borde aplicadas al problema microscópico.

A continuación, se describen algunos de los submodelos más conocidos y utilizados en la literatura (Toro [2014]), todos ellos derivados del planteamiento general anteriormente desarrollado. A partir de las siguientes discusiones, es posible plantear la inclusión de subespacios cinemáticos que serán desarrollados de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_\mu^{Tay}(\Omega_\mu) &\subseteq \mathcal{U}_\mu^{Lin}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{U}_\mu^{Per}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{U}_\mu^{Min}(\Omega_\mu) \equiv \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\ \mathcal{V}_\mu^{Tay}(\Omega_\mu) &\subseteq \mathcal{V}_\mu^{Lin}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{V}_\mu^{Per}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{V}_\mu^{Min}(\Omega_\mu) \equiv \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)\end{aligned}\tag{2.8}$$

2.5.1. Submodelo de Taylor

Este submodelo impone que el incremento del desplazamiento fluctuante sea nulo en todo punto del RVE, es decir:

$$d\tilde{\psi}_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu\tag{2.9}$$

Desde el punto de vista mecánico, constituye la alternativa más restrictiva posible, ya que elimina completamente las fluctuaciones microscópicas. Como consecuencia, proporciona la respuesta efectiva más rígida entre los submodelos clásicos. En la literatura, este enfoque también se denomina *submodelo de teoría de mezclas* o *submodelo de Voigt*.

En este caso particular, los subespacios vectoriales asociados se definen como:

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_\mu^{Tay}(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\psi}_\mu \mid d\tilde{\psi}_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \right\} \subseteq \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\
\mathcal{V}_\mu^{Tay}(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\psi}_\mu \mid \hat{\psi}_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \right\} \subseteq \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)
\end{aligned} \tag{2.10}$$

2.5.2. Submodelo Lineal

Este submodelo impone que el incremento del desplazamiento fluctuante sea nulo en todos los puntos de la frontera Γ_μ del RVE, es decir:

$$d\tilde{\psi}_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu \tag{2.11}$$

En este caso las fluctuaciones están permitidas en el interior del dominio Ω_μ , pero se restringen completamente sobre su contorno. Esta condición corresponde a la imposición del campo macroscópicos uniformes en la frontera del RVE, motivo por el cual este enfoque se conoce comúnmente como *submodelo lineal* o *condición de Dirichlet uniforme*.

Los subespacios vectoriales asociados se definen entonces como:

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_\mu^{Lin} &= \left\{ d\tilde{\psi}_\mu \mid d\tilde{\psi}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge d\tilde{\psi}_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu \right\} \subseteq \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\
\mathcal{V}_\mu^{Lin} &= \left\{ \hat{\psi}_\mu \mid \hat{\psi}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \hat{\psi}_\mu(\mathbf{y}) = 0 \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu \right\} \subseteq \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)
\end{aligned} \tag{2.12}$$

2.5.3. Submodelo Periódico

Este submodelo impone que el incremento del campo fluctuante micro, $d\tilde{\psi}_\mu$, sea idéntico en puntos opuestos y topológicamente equivalentes de la frontera del RVE.

Para describir matemáticamente esta restricción se adopta la notación propuesta por Miehe et al. [1999]. La frontera Γ_μ de la microcelda se descompone en dos subconjuntos disjuntos Γ_μ^+ y Γ_μ^- tales que:

$$\Gamma_\mu = \Gamma_\mu^+ \cup \Gamma_\mu^-, \quad \Gamma_\mu^+ \cap \Gamma_\mu^- = \emptyset \tag{2.13}$$

con normales geométricas exteriores $\mathbf{n}_\mu^+$ y $\mathbf{n}_\mu^-$ respectivamente.

Los puntos pertenecientes a Γ_μ^+ y Γ_μ^- se denotan por $\mathbf{y}^+$ y $\mathbf{y}^-$ respectivamente. Se asume la existencia de una correspondencia uno a uno entre dichos puntos, formando pares $\{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\}$ tales que:

$$\mathbf{n}_\mu^+(\mathbf{y}^+) = -\mathbf{n}_\mu^-(\mathbf{y}^-) \tag{2.14}$$

La condición de borde periódica clásica se expresa entonces como:

$$d\tilde{\psi}_\mu(\mathbf{y}^+) = d\tilde{\psi}_\mu(\mathbf{y}^-), \quad \forall \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \quad (2.15)$$

En la Fig. 2.2 basada en Toro [2014], se ilustra un ejemplo típico de microcelda que satisface esta condición.

De acuerdo con estas definiciones, los subespacios funcionales asociados $\mathcal{U}_\mu^{Per}$ y $\mathcal{V}_\mu^{Per}$ quedan definidos como:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_\mu^{Per} &= \left\{ d\tilde{\psi}_\mu \mid d\tilde{\psi}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge d\tilde{\psi}_\mu(\mathbf{y}^+) = d\tilde{\psi}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{ par } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \right\} \subseteq \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\ \mathcal{V}_\mu^{Per} &= \left\{ \hat{\psi}_\mu \mid \hat{\psi}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \hat{\psi}_\mu(\mathbf{y}^+) = \hat{\psi}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{ par } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \right\} \subseteq \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (2.16)$$

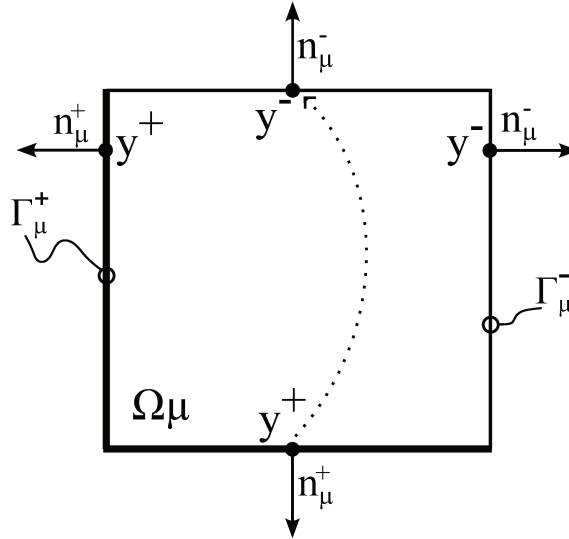


Figura 2.2: Ejemplo de microcelda por el submodelo periódico clásico.

2.5.4. Submodelo de Mínima Restricción Cinemática

Este submodelo impone únicamente las restricciones cinemáticas mínimas necesarias para garantizar la Admisibilidad Cinemática establecida en la Sección 2.4.2. En este enfoque no se introducen condiciones adicionales sobre el campo fluctuante en la frontera del RVE, más allá de las requeridas por la coherencia macro-micro. Como consecuencia, esta formulación proporciona la respuesta efectiva más flexible del material homogeneizado, constituyendo el límite inferior en términos de rigidez entre los submodelos clásicos.

Los espacios vectoriales $\mathcal{U}_\mu^{Min}(\Omega_\mu)$ y $\mathcal{V}_\mu^{Min}(\Omega_\mu)$ se muestran a continuación:

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_\mu^{Min}(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\psi}_\mu \mid d\tilde{\psi}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\psi}_\mu \otimes^s \mathbf{n}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \equiv \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\
\mathcal{V}_\mu^{Min}(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\psi}_\mu \mid \hat{\psi}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\psi}_\mu \otimes^s \mathbf{n}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \equiv \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)
\end{aligned} \tag{2.17}$$

2.6. Marco metodológico y estrategias de simulación

En la presente tesis se adopta una representación bidimensional de la microestructura del papel, considerando como dominio de análisis el plano principal de transporte. Esta elección responde a criterios geométricos, físicos y computacionales, y permite representar los mecanismos dominantes del flujo y del transporte sin incurrir en el elevado costo asociado a una modelación tridimensional completa.

Los sustratos de papel analizados presentan una estructura esencialmente laminar, cuyas dimensiones en el plano son considerablemente mayores que su espesor, y en la cual el transporte ocurre predominantemente en dicha dirección. Bajo el régimen de flujo considerado, caracterizado por bajos números de Reynolds, las variaciones en la dirección del espesor ejercen una influencia secundaria sobre las propiedades efectivas asociadas al transporte en el plano.

Desde el punto de vista de la homogeneización, el objetivo principal consiste en representar adecuadamente la conectividad y la distribución espacial de la fase porosa en la dirección dominante de transporte. En el marco de las hipótesis adoptadas, se emplea una microestructura bidimensional equivalente, representativa de la estructura porosa del papel, considerando que los efectos asociados a las variaciones a través del espesor se encuentran incorporados de manera promediada en las propiedades efectivas. Esta aproximación permite reproducir los principales mecanismos físicos que gobiernan el transporte en el plano del material, aunque no describe explícitamente la disposición tridimensional de las fibras ni los fenómenos asociados al transporte transversal.

La metodología desarrollada se basa en una estrategia multiescala y multifísica en la que los problemas eléctrico, fluidodinámico y de transporte escalar se encuentran vinculados mediante la transferencia de campos y propiedades efectivas entre fenómenos y escalas. En este esquema, las soluciones obtenidas para un determinado problema físico proporcionan información de entrada para los problemas subsiguientes. De esta manera, el acoplamiento no se limita a resolver cada fenómeno de forma aislada, sino que permite

representar cómo el campo eléctrico induce movimiento electroosmótico, cómo este movimiento se combina con el flujo impulsado por presión y cómo el campo de velocidad resultante modifica el transporte de especies.

Con el objetivo de sintetizar esta metodología, en la Figura 2.3 se presenta el esquema general de la estrategia multiescala acoplada implementada. El procedimiento se organiza en tres bloques principales: problema eléctrico, problema fluidodinámico y problema de transporte escalar. Cada bloque comprende la resolución de un problema microscópico, la determinación de las propiedades efectivas correspondientes y la posterior formulación del problema macroscópico. Al mismo tiempo, los campos calculados en cada etapa se transfieren a los bloques siguientes, estableciendo un acoplamiento secuencial entre los distintos fenómenos físicos.

En primer lugar, se aborda el problema eléctrico. En la microescala se resuelve la ecuación de conservación de cargas imponiendo gradientes canónicos de potencial eléctrico. A partir de estas soluciones se determinan el tensor efectivo de conductividad eléctrica y, cuando corresponde, el término fuente efectivo. Estas propiedades permiten formular y resolver el problema eléctrico en la macroescala, del cual se obtiene la distribución macroscópica del potencial y su gradiente. Este gradiente se utiliza posteriormente para reconstruir el campo eléctrico microscópico y determinar la acción electroosmótica sobre el fluido. Por consiguiente, la solución del problema eléctrico constituye la primera entrada del acoplamiento multifísico.

En una segunda etapa, se resuelve el problema fluidodinámico. En la microescala se aborda el sistema de Stokes sujeto a la condición de incompresibilidad, considerando tanto la contribución asociada a los gradientes de presión como la inducida por el campo eléctrico previamente calculado. Mediante la imposición de gradientes de presión canónicos, y en ausencia de campo eléctrico, se determina el tensor de permeabilidad efectivo homogeneizado del problema fluidodinámico. Por otra parte, al considerar un gradiente de presión nulo y la acción del campo eléctrico, se obtiene el tensor de permeabilidad electroosmótica. Debido a la linealidad del régimen analizado, ambas contribuciones pueden combinarse para representar el flujo resultante de la acción simultánea de los gradientes de presión y de potencial eléctrico.

Las propiedades fluidodinámicas homogeneizadas permiten formular el problema de flujo en la macroescala y obtener el campo de velocidad promedio. A su vez, los gradientes macroscópicos de presión y potencial posibilitan reconstruir el campo de velocidad en la microescala. De este modo, el problema fluidodinámico recibe información del problema

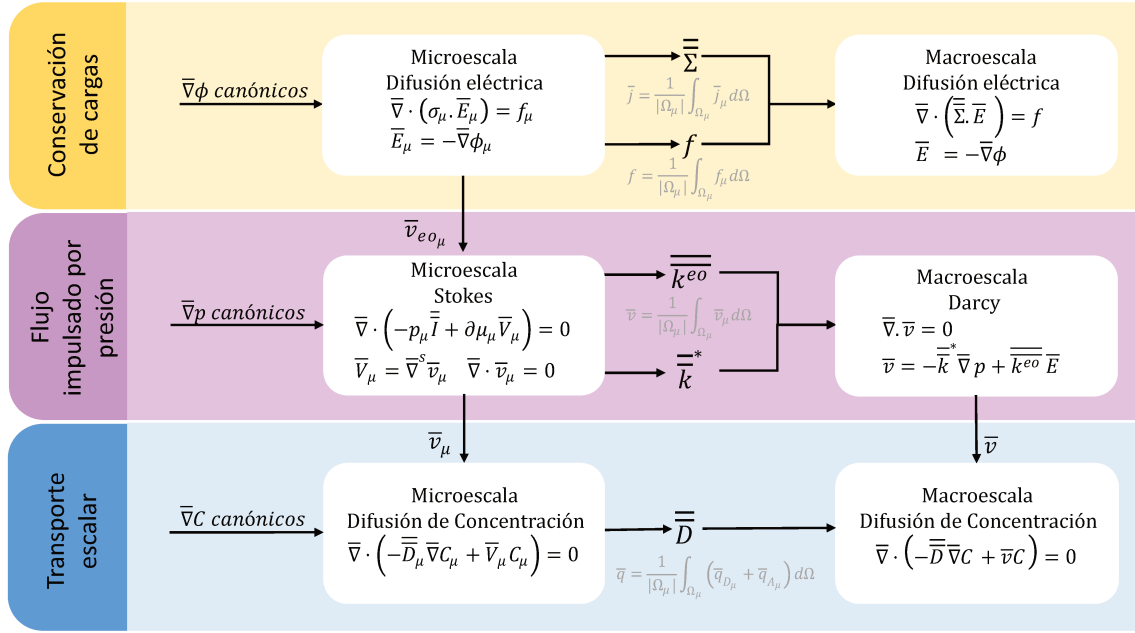


Figura 2.3: Esquema general de la estrategia de simulación multiescala y multifísica acoplada desarrollada en esta tesis.

eléctrico y proporciona, como salida, los campos de velocidad macroscópico y microscópico requeridos para el análisis del transporte de especies.

Finalmente, se aborda el problema de transporte escalar. El campo de velocidad microscópico, proveniente del problema anterior, interviene en el término advectivo de la ecuación de transporte. En la microescala se resuelve la ecuación advectivo-difusiva de concentración mediante la imposición de gradientes canónicos de concentración. Como resultado del procedimiento de homogeneización se obtiene el tensor efectivo de difusividad, el cual incorpora tanto los efectos de la microestructura sobre la difusión como la contribución asociada al campo de velocidad.

El tensor efectivo de difusividad y el campo de velocidad promedio previamente calculado se transfieren posteriormente al problema de transporte en la macroescala. De esta manera, la distribución macroscópica de concentración puede reflejar de forma conjunta los efectos del flujo impulsado por presión, el movimiento electroosmótico, la difusión y la advección. Se completa así la cadena de acoplamiento entre los tres bloques físicos que integran la metodología.

Si bien los problemas eléctrico, fluidodinámico y de transporte escalar poseen formulaciones propias y pueden estudiarse de manera independiente, su integración permite representar fenómenos que no podrían describirse adecuadamente mediante un tratamiento desacoplado. Este aspecto resulta particularmente relevante en dispositivos **μPADs**,

donde la respuesta global del sistema depende de la interacción entre el campo eléctrico, el flujo en el medio poroso y el transporte de las especies de interés.

La estrategia propuesta permite, por lo tanto, transferir de manera consistente campos y propiedades efectivas entre los distintos problemas físicos y niveles de descripción. Se establece así un marco unificado en el cual la microestructura determina las propiedades efectivas, estas propiedades gobiernan la respuesta macroscópica y los campos macroscópicos proporcionan, a su vez, las condiciones necesarias para reconstruir y resolver los fenómenos en la microescala.

Cada uno de los problemas físicos que integran la estrategia presentada será abordado en detalle en los capítulos siguientes, donde se desarrollarán sus formulaciones específicas, los procedimientos de homogeneización empleados, las validaciones numéricas realizadas y los principales resultados obtenidos.

Capítulo 3

Modelado Multiescala aplicado al problema de Flujo Saturado en Medios Porosos

3.1. Introducción

Cuando la estructura porosa de un medio sólido está interconectada, permite el flujo de un fluido a través de sus canales y poros (Fig.3.1(b)). Este fenómeno, conocido como flujo saturado en un medio poroso, tiene múltiples aplicaciones en ingeniería y ciencias aplicadas, tales como la filtración de fluidos, la gestión de recursos hídricos subterráneos, el diseño de materiales para aplicaciones biomédicas y los procesos de consolidación de suelos, entre otros. En este contexto, el problema consiste en determinar las propiedades de transporte, o la permeabilidad efectiva del medio, dada la morfología de la red de porosidad, lo cual puede abordarse mediante el método de elementos finitos (FEM) aplicado a problemas de homogeneización. Cabe mencionar que existe también un caso distinto, asociado a microestructuras con cavidades porosas desconectadas (Fig.3.1(a)), en el que no hay flujo pero el fluido induce una presión sobre la matriz sólida que afecta su respuesta mecánica. El comportamiento general se denomina entonces “poroelástico”. Sin embargo, dicho caso queda fuera del alcance de esta tesis.

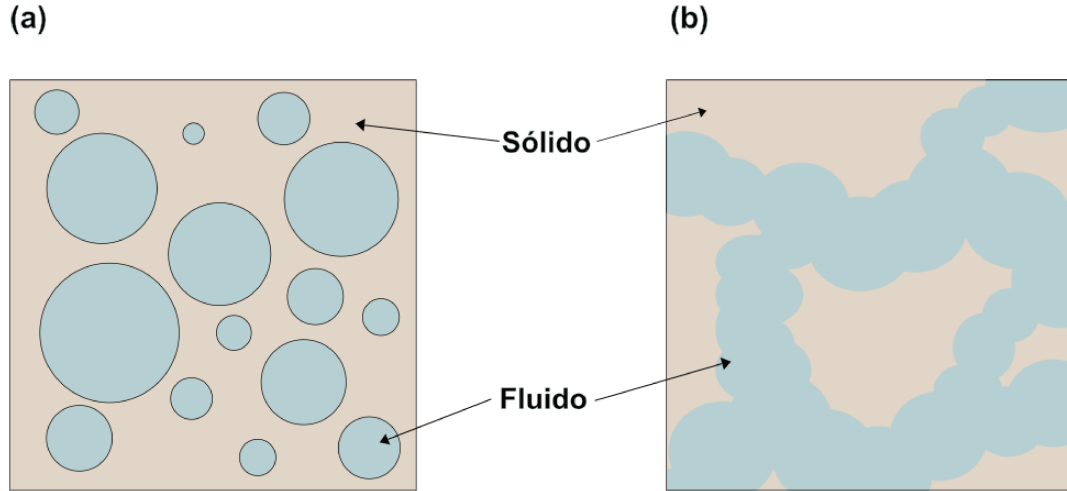


Figura 3.1: Microestructura compuesta por una matriz sólida y poros saturados de fluido; (a) Poros desconectados o aislados. (b) Poros conectados.

3.1.1. Porosidad

La porosidad, denotada por ϕ , en un punto del dominio de un medio poroso se define como la relación entre el volumen de espacio vacío y el volumen total del medio poroso en dicho punto. Siguiendo la definición introducida en Civan [2011], se trata de una magnitud de carácter macroscópico, cuyo valor está determinado por la textura y la estructura del medio poroso, de la siguiente forma:

$$\phi(x, t) = \frac{V_{ov}(x, t)}{V_o(x)} \quad (3.1)$$

donde V_o representa el volumen total del dominio considerado, centrado en el punto $\mathbf{x}$, y V_{ov} corresponde al volumen de vacíos contenido en dicho dominio.

El espacio vacío de un medio poroso puede encontrarse aislado u ocluido, el cual se encuentra ocupado por un fluido esencialmente inmóvil. O bien puede tratarse de un espacio vacío interconectado, a través del cual es posible el flujo de un fluido. Dado que el interés de esta tesis se centra en los procesos de transporte y flujo de especies dentro de fases fluidas a través del espacio vacío, el término “porosidad” se empleará para referirse exclusivamente a la porosidad interconectada, es decir, a la fracción del espacio vacío disponible para el flujo.

3.1.2. Régimen de Stokes

El comportamiento de un fluido newtoniano incompresible en régimen de bajo número de Reynolds se describe mediante la ecuación de Stokes, que constituyen una simplificación de las ecuaciones de Navier–Stokes cuando los efectos inerciales resultan despreciables frente a las fuerzas viscosas. Partiendo de la forma general de las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento para un fluido continuo:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right) = \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} + \mathbf{f} \quad (3.2)$$

donde $\vec{v}$ es el campo de velocidad, ρ es la densidad del fluido, $\bar{\bar{\sigma}}$ es el tensor de tensiones y $\mathbf{f}$ las fuerzas volumétricas. El régimen de Stokes se obtiene al asumir: (i) Flujo estacionario, (ii) Número de Reynolds $Re \ll 1$, (iii) Predominio de efectos viscosos sobre los inerciales.

Bajo estas hipótesis, el término inercial puede despreciarse, y la ecuación de cantidad de movimiento se reduce a:

$$\nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} + \mathbf{f} = 0 \quad (3.3)$$

Para un fluido newtoniano, el tensor de tensiones se expresa como:

$$\bar{\bar{\sigma}} = -p\bar{\bar{I}} + 2\mu\varepsilon(\vec{v}) \quad (3.4)$$

donde p es la presión, μ es la viscosidad y $\varepsilon(\vec{v}) = \frac{1}{2} (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)$ es el tensor de tasas de deformación.

Dado que el fluido es incompresible, debe satisfacerse además la ecuación de conservación de masa:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (3.5)$$

Sustituyendo las expresiones anteriores en la ecuación de equilibrio, se obtiene la forma clásica de las ecuaciones de Stokes:

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \mathbf{f} = 0 \quad (3.6)$$

Esta formulación cobra particular relevancia a escala microscópica en medios porosos. A este nivel, la ecuación de Stokes describe adecuadamente el flujo en los poros bajo regímenes de bajo número de Reynolds. La posterior aplicación de técnicas de homogeneización permite vincular esta descripción microscópica con modelos macroscópicos efectivos, como la ley de Darcy.

3.1.3. Ley de Darcy

La ley de Darcy establece una relación entre la velocidad macroscópica del fluido, entendida como una magnitud promediada, o su descarga específica, y las fuerzas que producen el movimiento del fluido, principalmente el gradiente de presión y la gravedad. Esta ley describe el flujo de un fluido que ocupa total (flujo monofásico) o parcialmente el espacio vacío (flujo multifásico gas-líquido).

En ausencia de fuerzas gravitacionales, la Ley de Darcy se expresa mediante una simple relación de proporcionalidad entre el caudal volumétrico (q) y la caída de presión (Δp) a través de un medio poroso. La constante de proporcionalidad está relacionada con la permeabilidad intrínseca (k) del medio, la viscosidad dinámica del fluido (μ), la distancia dada sobre la que se calcula la caída de presión (L) y el área de la sección transversal (A), en la forma:

$$q = \frac{kA}{\mu L} \Delta p \quad (3.7)$$

Considerando flujo unidimensional, régimen estacionario, dicha formulación puede re-interpretarse como se muestra en la Ec. (3.8). Para ello, se introduce la velocidad de Darcy como el caudal volumétrico por unidad de área transversal y se asume una variación espacial suave del campo de presión, de modo que el gradiente de presión puede aproximarse por el cociente entre la diferencia de presión y la longitud característica del dominio.

$$\vec{v} = -\frac{\bar{k}}{\mu} \nabla p \quad (3.8)$$

En esta ecuación, $\vec{v}$ representa la velocidad del fluido, p es la presión del fluido a escala de poro y μ es la viscosidad dinámica del fluido. Se considera que el medio poroso está saturado. El flujo a través de medios porosos es termodinámicamente irreversible, y la potencia necesaria para mantener el flujo es proporcional al producto de la velocidad y el gradiente de presión. La potencia suministrada se disipa internamente en forma de energía térmica por la acción de la viscosidad (Das et al. [2018]).

3.1.4. Permeabilidad

El tensor de permeabilidad intrínseca ($\bar{k}$) caracteriza la capacidad de un medio poroso para permitir el paso de un fluido y está determinada por la configuración del espacio vacío, es decir, por la estructura, conectividad, tamaño, porosidad, tortuosidad y constricción

de los poros. En este sentido, es una propiedad geométrica y macroscópica del medio, independiente de las propiedades físicas del fluido.

Como es demostrado en el libro de Das et al. [2018], en medios homogéneos, el tensor de permeabilidad es simétrico y los nueve componentes se reducen a seis.

En un medio ortotrópico, los componentes fuera de la diagonal de la permeabilidad son cero, mientras que los componentes principales de la permeabilidad son no nulos y distintos entre sí, como se muestra a continuación:

$$k_{ij} = \begin{bmatrix} k_{11} & 0 & 0 \\ 0 & k_{22} & 0 \\ 0 & 0 & k_{33} \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

En medios isotrópicos y homogéneos, los componentes del tensor de permeabilidad se reducen a uno, lo que convierte a la permeabilidad en una magnitud escalar ($k_{11} = k_{22} = k_{33} = k$, Ecuación (3.7)).

Para medios anisotrópicos, se pueden identificar las direcciones principales con respecto a las cuales las componentes fuera de la diagonal son cero. El sistema de coordenadas cartesianas se puede alinear entonces con las direcciones principales del medio poroso que se está estudiando, lo que conduce a reducciones dimensionales con la consecuente simplificación en las ecuaciones.

3.1.5. Tortuosidad

Tal como explica Civan [2011], la tortuosidad de las trayectorias reales, τ , se define por la relación entre la longitud de las trayectorias hidráulicas preferenciales reales (L_f), promediada sobre el RVE, y la longitud del medio poroso (L), es decir:

$$\tau = \frac{L_f}{L} \quad (3.10)$$

Una representación gráfica de esto se puede observar en la Figura 3.2.

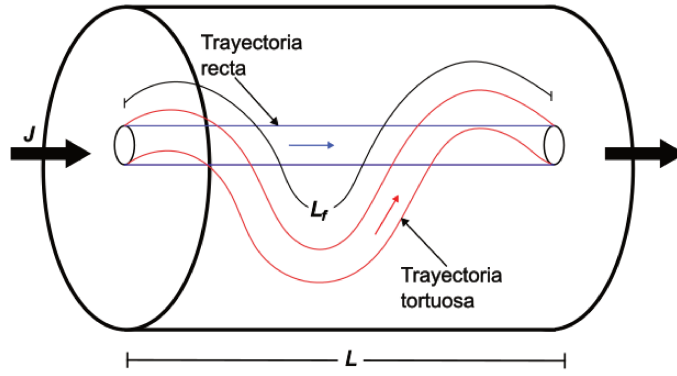


Figura 3.2: Trayectoria de flujo recta y tortuosa en medios porosos (Imagen basada en el libro de Civan [2011].)

3.1.6. Constricción

La constricción es una característica morfológica clave que describe el efecto limitante de los estrechamientos de la estructura porosa, también denominados cuellos de botella, sobre los procesos de transporte, tales como el flujo, la difusión, la advección y la conducción. Su efecto macroscópico puede cuantificarse mediante el factor de constricción (β).

Mientras que la tortuosidad cuantifica la elongación efectiva de las trayectorias de transporte, es decir, el grado de desviación respecto de un camino recto, la constricción caracteriza la variación del área de la sección transversal disponible a lo largo de dichas trayectorias. En consecuencia, caminos que presentan estrechamientos locales ofrecen una mayor resistencia al transporte que aquellos de sección uniforme, aun cuando ambas trayectorias tengan la misma longitud.

Desde una perspectiva macroscópica, los efectos combinados de la tortuosidad y la constricción de la estructura porosa se manifiestan en una reducción de la capacidad efectiva de transporte respecto de un medio homogéneo. En procesos netamente difusivos, esta influencia se incorpora habitualmente mediante una difusividad másica efectiva (D_{eff}), menor que la difusividad molecular (D_μ), la cual puede expresarse en términos de parámetros morfológicos del medio poroso. Como explica Holzer et al. [2023], dicha reducción se representa mediante relaciones del tipo:

$$D_{eff} = D_\mu \frac{\phi}{\tau \beta} \quad (3.11)$$

donde ϕ es la porosidad, τ la tortuosidad y β el factor de constricción.

En el marco de la modelización multiescala, esta expresión permite interpretar la difu-

sividad efectiva como una modificación de la difusividad molecular debida exclusivamente a efectos geométricos del medio poroso. En particular, cuando la porosidad y la tortuosidad se consideran constantes, la influencia de los estrechamientos locales de los caminos de transporte puede aislarse mediante un factor de constricción adimensional, definido como la relación entre la difusividad efectiva y la difusividad molecular, reflejando así la reducción del transporte difusivo atribuible a la constricción de la microestructura.

El concepto de constricción fue introducido originalmente en el contexto de geometrías idealizadas, con el objetivo de describir el efecto de variaciones en la sección transversal sobre el flujo en conductos simples. En particular, Petersen [1958] definió el factor de constricción para tubos rectos de sección variable a partir de la relación entre el área de la sección transversal máxima (A_{max}) y mínima (A_{min}), asociando la resistencia adicional al transporte con la presencia de estrechamientos locales.

Si bien esta definición resulta adecuada para sistemas simples y bien definidos, su aplicación directa a medios porosos reales presenta limitaciones, debido a la complejidad geométrica y al carácter desordenado de sus microestructuras. En este contexto, Holzer et al. [2013] propusieron una definición más general del factor de constricción basada en el análisis tridimensional de imágenes, orientada a caracterizar microestructuras porosas complejas. Este enfoque se fundamenta en el uso de dos distribuciones de tamaño de poro, que permiten identificar y cuantificar de manera diferenciada los ensanchamientos y los cuellos de botella presentes en la red de poros.

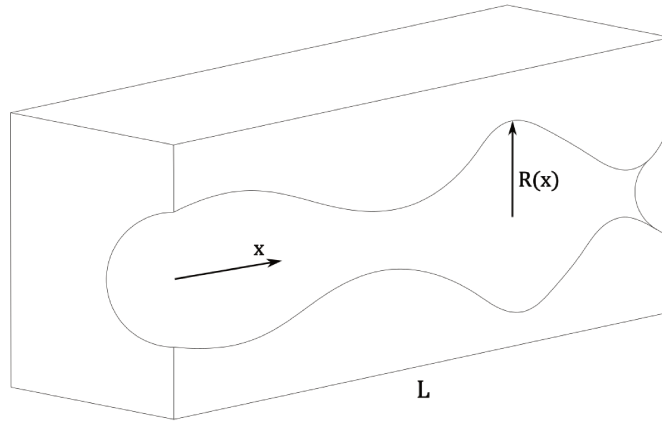


Figura 3.3: Esquema simplificado del modelo de tubos constrictos propuesto por Franck et al. [2022].

Esta formulación moderna permite capturar de forma más realista el efecto de la constricción en medios porosos heterogéneos, y resulta particularmente adecuada para su incorporación en modelos multiescala basados en geometrías representativas.

Franck et al. [2022] presentaron un esquema simplificado para la configuración de sustratos porosos, como una disposición de tubos estrechos paralelos. En este caso, la función $R(x)$ representa la función de estrechamiento, es decir, el radio del tubo en la dirección principal del flujo (véase la Figura 3.3).

3.2. Formulación multiescala

Para plantear la formulación multiescala partimos de la definición cinemática, donde las variables en la microescala, tales como la velocidad y la presión, son descompuestas de la siguiente forma:

$$\vec{v}_\mu = \vec{v} + \overline{\overline{V}} \cdot \vec{y} + \tilde{v}_\mu \quad (3.12)$$

$$p_\mu = p + \nabla p \cdot \vec{y} + \tilde{p}_\mu \quad (3.13)$$

donde $\vec{v}_\mu$ y p_μ representan la velocidad y presión en la microescala respectivamente, y se definen como su contribución en la macroescala, sumado a una tasa de deformación por la coordenada de la microescala y un término fluctuante. Al aplicar el gradiente a las ecuaciones (3.12) y (3.13), obtenemos entonces que la tasa de las variables en la microescala es igual a la tasa de las variables en la macroescala, sumado a una tasa fluctuante, como se muestra a continuación:

$$\overline{\overline{V}}_\mu = \overline{\overline{V}} + \tilde{\overline{\overline{V}}}_\mu \quad (3.14)$$

$$\nabla p_\mu = \nabla p + \nabla \tilde{p}_\mu \quad (3.15)$$

La ley de Darcy expresada como en la ecuación (3.8) solo es válida para modelar flujo en un medio completamente saturado. Al reducir al problema de Darcy en la macroescala conseguimos una tensión y velocidad, de la que se puede calcular de manera lineal el tensor de permeabilidad intrínseca efectiva homogeneizado a partir de la siguiente ecuación:

$$\vec{v} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{|\Omega_\mu|} \vec{v}_\mu d\Omega \quad (3.16)$$

$$\overline{\overline{k}}^* = \frac{\partial \vec{v}}{\partial \nabla p} \quad (3.17)$$

Para la resolución numérica, al imponer la condición de incompresibilidad, es necesario incorporar un elemento mixto. Para esto, es necesario utilizar elementos triangulares estables estándar P2-P1 Brezzi and Fortin [1991].

De manera resumida, para resolver el problema de flujo en un medio poroso mediante técnicas multiescala basada en el modelo de RVE, se considera el problema de Stokes

en la microescala y el problema de Darcy en la macroescala. A nivel de la microescala, se introduce un gradiente de presión uniforme en todo el dominio, y una vez resuelto el problema de Stokes, se obtuvo el campo de velocidades homegeneizado. Posteriormente, con el campo de velocidades de la microescala, y de manera lineal con la forma despejada de la ecuación de Darcy (Ec. (3.17)), se calcula el tensor de permeabilidad del medio poroso.

3.2.1. Permeabilidad efectiva

Se analiza el caso de una microestructura con poros interconectados (Fig. 3.1), lo que posibilita la circulación del fluido a través del medio poroso. Debido las dimensiones características reducidas del sistema y de las propiedades reológicas del fluido considerado, el régimen de flujo puede asumirse laminar.

En este caso, el flujo a través de los poros puede modelarse a escala macroscópica mediante un enfoque volumétrico y la denominada ley de Darcy (Secc. 3.1.3) como se muestra en la ecuación (3.18).

$$\vec{v} = -\bar{\bar{k}}^* \nabla p = -\frac{\bar{\bar{k}}}{\mu} \nabla p \quad (3.18)$$

donde $\vec{v}$ es la velocidad dentro del dominio fluido, ∇p es el gradiente de presión global, $\bar{\bar{k}}^*$ es el tensor de permeabilidad de segundo orden, μ representa la viscosidad del fluido y $\bar{\bar{k}}$ es el tensor de permeabilidad hidráulica intrínseco de segundo orden, el cual depende de la geometría de los poros y no de la fase fluida saturada.

Es importante destacar que la hipótesis del fluido newtoniano es crucial para mantener bajo el costo computacional de esta formulación numérica. En primer lugar, en el caso de los fluidos no newtonianos, los tensores de permeabilidad efectiva homogeneizados resultantes no serán constantes, sino que dependerán de la velocidad local en la microcelda, lo que dará lugar a un problema no lineal en ambas escalas.

Otra hipótesis importante es considerar una porosidad constante a la macroescala. En este caso, no es posible considerar porosidades diferentes para la misma microcelda; por consiguiente, para aquellos **pPADs** basados en papel con porosidad heterogénea, los diferentes valores discretos deben tenerse en cuenta para resolver diferentes problemas de Darcy (acoplados), lo cual es un desafío desde el punto de vista numérico (Aly and Asai [2015]).

3.3. Resultados

3.3.1. Validación del modelo numérico multiescala

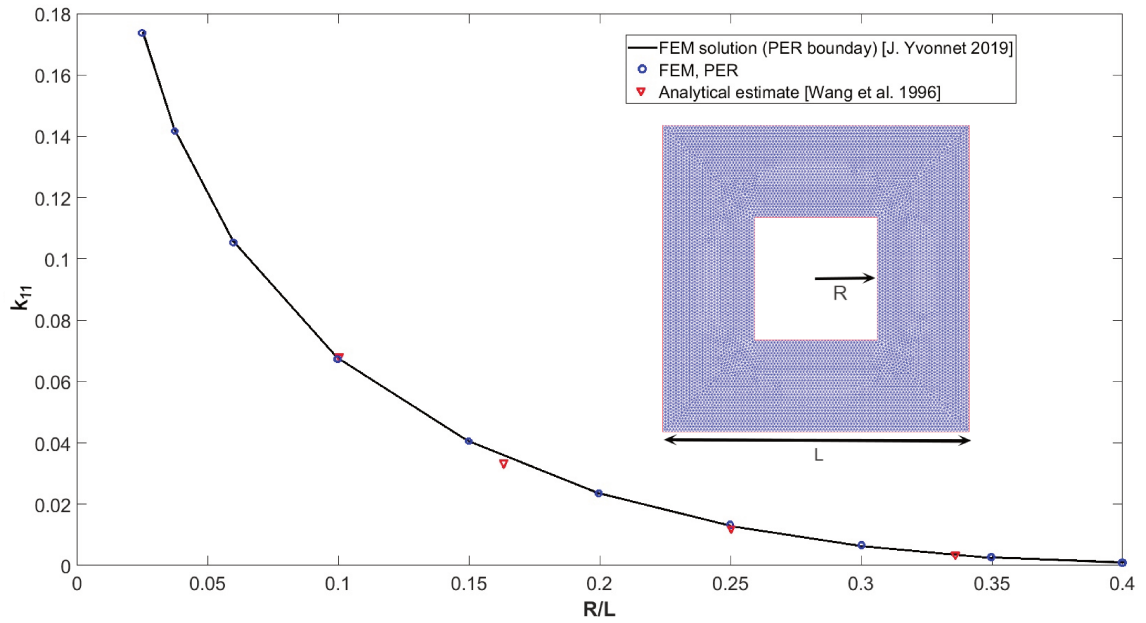
A continuación, se valida el modelo numérico desarrollado mediante la comparación de los resultados obtenidos con soluciones de referencia disponibles en la literatura. En particular, se considera la solución numérica propuesta por Yvonnet [2019], junto con las soluciones analíticas presentadas por Wang [1997], Wang [2001] y Sangani and Acrivos [1982].

Para realizar esta validación, se analizan dos geometrías basadas en las configuraciones propuestas por Yvonnet [2019]. En el primer caso, se considera una microcelda unitaria cuadrada que contiene un sólido interno de sección transversal también cuadrada. La longitud del lado del sólido se modifica para reproducir los valores de la relación $\frac{R}{L}$ reportados en la literatura, donde R representa la longitud del lado del obstáculo y L la longitud del lado de la microcelda unitaria.

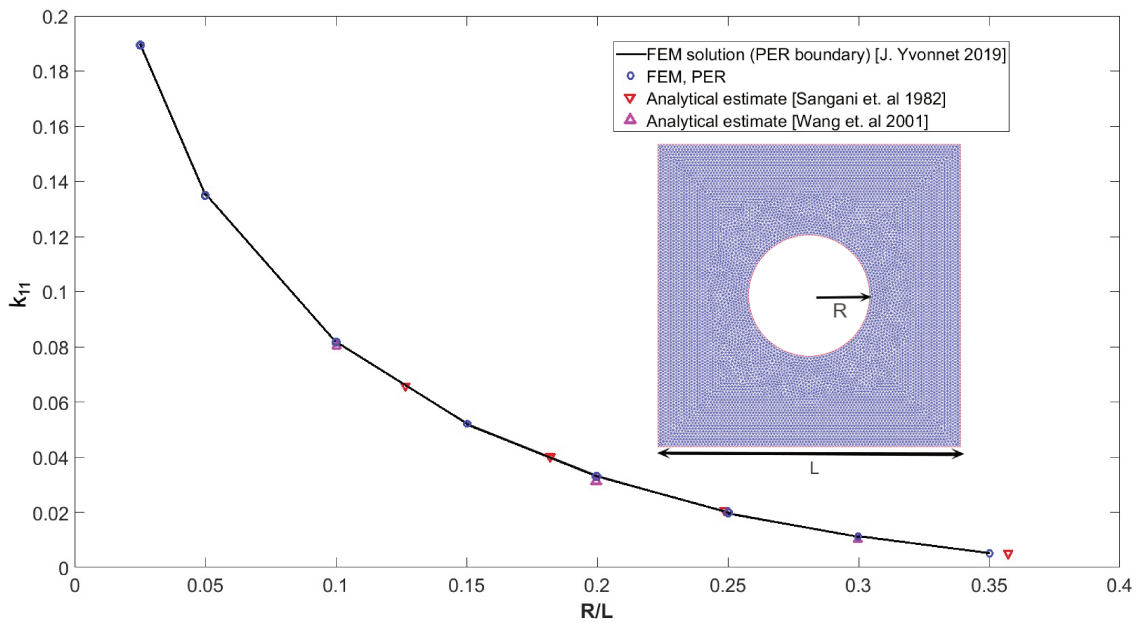
El sólido interno constituye un obstáculo para el movimiento del fluido, por lo que sobre su contorno se imponen condiciones de no penetración y no deslizamiento. Asimismo, se prescribe un gradiente de presión uniforme en el dominio de la microcelda y se considera nula la tasa de deformación macroscópica.

En el segundo caso se adopta una configuración análoga, pero se sustituye el sólido interno de sección cuadrada por uno de sección circular. En esta geometría, R representa el radio del obstáculo, cuyo valor se modifica para satisfacer las correspondientes relaciones $\frac{R}{L}$. Se mantienen las mismas condiciones de borde y las mismas consideraciones multiescala empleadas en el caso anterior.

La Figura 3.4 presenta los resultados obtenidos para ambas configuraciones. Tanto para el sólido interno de sección cuadrada, Figura 3.4(a), como para el de sección circular, Figura 3.4(b), los valores de la componente de permeabilidad efectiva k_{11} calculados mediante el modelo desarrollado muestran una excelente concordancia con las soluciones numéricas y analíticas de referencia. Esta concordancia permite verificar la capacidad de la formulación implementada para predecir adecuadamente la componente de permeabilidad efectiva en la dirección del flujo, a partir de su evaluación en dos microceldas con geometrías diferentes.



(a) Evolución de la componente de permeabilidad efectiva k_{11} en función de la relación $\frac{R}{L}$ para una microcelda con un sólido interno de sección transversal cuadrada.



(b) Evolución de la componente de permeabilidad efectiva k_{11} en función de la relación $\frac{R}{L}$ para una microcelda con un sólido interno de sección transversal circular.

Figura 3.4: Componente de permeabilidad efectiva k_{11} para diferentes valores de la relación $\frac{R}{L}$: comparación entre los resultados del modelo desarrollado (FEM, PER, representados mediante círculos) y las soluciones numéricas y analíticas disponibles en la literatura.

3.3.2. Validación con Simulaciones Numéricas Directas

Con el objetivo de evaluar la capacidad del modelo numérico desarrollado para describir de manera adecuada la dinámica del sistema, en esta sección se presenta su validación mediante la comparación con resultados obtenidos a partir de simulaciones numéricas directas (DNS). Dado que en el DNS se resuelven explícitamente las ecuaciones gobernantes del problema físico, constituyen una referencia de alta fidelidad para el análisis del comportamiento del modelo multiescala. En este contexto, la comparación permite analizar la consistencia y el grado de precisión del modelo propuesto, así como delimitar su rango de validez bajo las condiciones consideradas.

Para ello, se consideró una geometría rectangular cuyo semi-espesor y longitud se mantuvieron constantes, con valores de $1 \times 10^{-3}m$ y $18,5 \times 10^{-3}m$, respectivamente. En el interior del dominio se dispusieron doce círculos, cuya separación se ajustó en función del tamaño de microcelda considerado en cada simulación de DNS. Asimismo, el radio de los círculos internos se varió en el rango $0,1 - 0,9 \times 10^{-3}m$.

Como condiciones de borde, se impuso una velocidad uniforme de entrada de $1 \times 10^{-3}m/s$ y una presión de salida nula. En el perímetro de los círculos internos se consideraron condiciones de no penetración y no deslizamiento, mientras que en las paredes del dispositivo se impusieron condiciones de no penetración. El dominio analizado representa de manera idealizada una franja del material papel, capturando las características relevantes del flujo a través de su microestructura. El DNS fue implementado en Elmer FEM, un software de simulación multifísica de código abierto, diseñado para resolver problemas mediante el método de elementos finitos (Råback et al. [2013]).

En el enfoque de DNS se resuelve directamente el problema de Stokes en todo el dominio, obteniéndose los campos de velocidad y presión. A partir de estos campos, la permeabilidad efectiva se determina posteriormente mediante la ley de Darcy, relacionando de manera lineal el caudal promedio con el gradiente de presión impuesto.

La formulación multiescala del problema resulta conceptualmente más sencilla, ya que corresponde a un caso macroscópicamente uniforme en el cual se impone únicamente un gradiente de presión constante en todo el dominio. En este enfoque, el problema de Stokes es resuelto a nivel de la microescala para obtener la respuesta local del flujo, mientras que a nivel de la macroescala el comportamiento es descrito mediante la ecuación de Darcy. Dado el carácter periódico de la geometría considerada (véase Fig. 3.5), es posible implementar el método multiescala bajo el enfoque de RVE de manera directa.

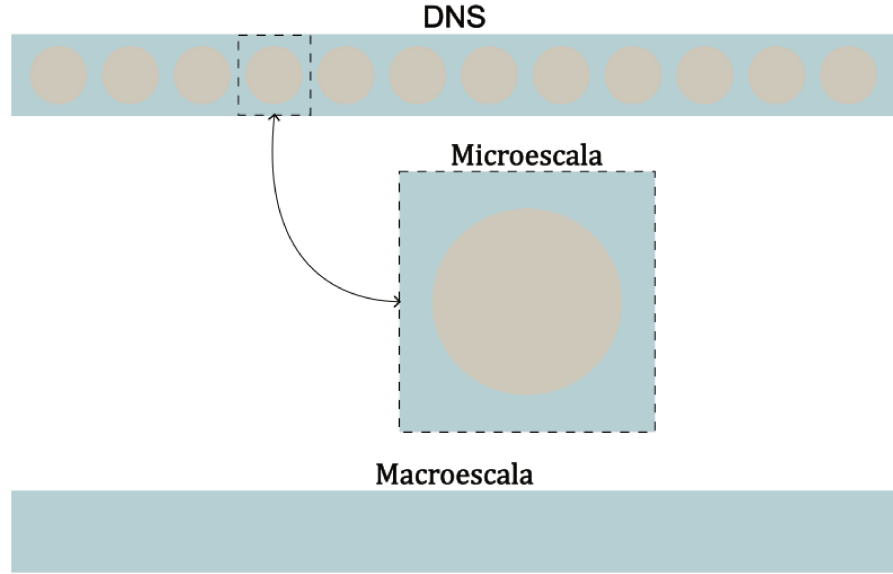


Figura 3.5: Geometrías consideradas a las escalas micro y macro del enfoque multiescala y DNS.

En la Figura 3.6 se muestra la distribución de la magnitud de la velocidad y el campo de presión obtenidos mediante la solución del DNS. Se observa que el flujo es periódico y se acelera en las zonas de menor sección transversal entre los cilindros, mientras que se generan regiones de baja velocidad en las proximidades de las superficies sólidas, acorde con las condiciones de no deslizamiento impuestas. Asimismo, el gradiente de presión resulta lineal, en concordancia con las condiciones de borde impuestas. En ambos casos, nuestra estrategia numérica dual (FE^2) coincide perfectamente con los resultados reportados en la literatura.

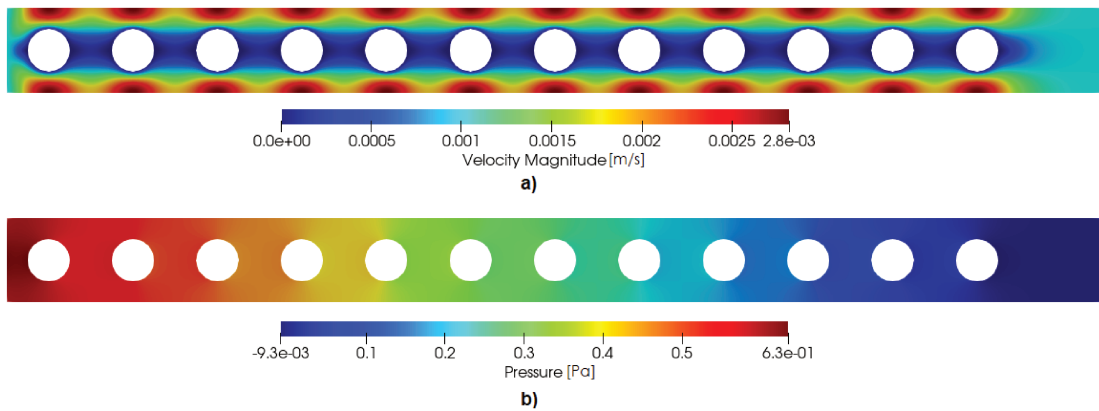


Figura 3.6: Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) para el problema de Stokes: (a) Magnitud de la velocidad; (b) Campo de presiones.

En la Tabla 3.1 se presentan los valores de permeabilidad efectiva (k_{11}) obtenidos para los diversos casos analizados, tanto mediante el modelo multiescala como a partir de la solución numérica directa (DNS), considerando diferentes radios de los círculos y tamaños de microcelda. Se observa que la permeabilidad efectiva exhibe una dependencia cuadrática con el tamaño característico de la microcelda, es decir, $k_{11} \propto L^2$. Este comportamiento ha sido previamente reportado en la bibliografía (Ichikawa and Selvadurai [2012]), lo que refuerza la coherencia física de los resultados obtenidos y respalda la robustez de la metodología empleada.

Radio	DNS k_{11} [m ²]	Multiescala k_{11} [m ²]
Lado de microcelda = 0.5		
0.1	$8,25 \times 10^{-3}$	$8,24 \times 10^{-3}$
0.15	$2,75 \times 10^{-3}$	$2,74 \times 10^{-3}$
0.2	$4,58 \times 10^{-4}$	$4,57 \times 10^{-4}$
Lado de microcelda = 1		
0.2	$3,30 \times 10^{-2}$	$3,29 \times 10^{-2}$
0.25	$2,00 \times 10^{-2}$	$1,99 \times 10^{-2}$
0.3	$1,10 \times 10^{-2}$	$1,10 \times 10^{-2}$
0.35	$5,19 \times 10^{-3}$	$5,18 \times 10^{-3}$
0.4	$1,83 \times 10^{-3}$	$1,83 \times 10^{-3}$
0.45	$3,19 \times 10^{-4}$	$3,17 \times 10^{-4}$
Lado de microcelda = 2		
0.7	$2,07 \times 10^{-2}$	$2,07 \times 10^{-2}$
0.8	$7,33 \times 10^{-3}$	$7,31 \times 10^{-3}$
0.9	$1,28 \times 10^{-3}$	$1,27 \times 10^{-3}$

Tabla 3.1: Valores numéricos de permeabilidad efectiva obtenidos mediante el modelo multiescala propuesto y DNS.

3.3.3. Geometría y determinación de escala de magnitud

En el marco de esta tesis, se propone una idealización geométrica de la microestructura de papel que permita representar, mediante propiedades equivalentes, las heterogeneidades

y la aleatoriedad inherentes a la microestructura del papel, conservando las propiedades físicas del medio. En este contexto, la definición del RVE se reduce a una microcelda cuadrada que contiene sólidos internos de sección transversal hexagonal. La disposición de estos obstáculos internos genera una red de canales constrictos a través de los cuales circula el fluido.

Esta representación se basa en el modelo estadístico propuesto por Franck et al. [2022], en el cual la compleja estructura fibrosa del papel se idealiza como un conjunto de tubos estrechos dispuestos en paralelo. El modelo permite caracterizar los efectos de la constricción y la conectividad del espacio poroso mediante parámetros geométricos equivalentes.

Para construir las geometrías empleadas en el análisis, se adoptaron los valores de porosidad correspondientes a dos sustratos de papel de uso frecuente en dispositivos μ PADs: el papel Munktell 00A, con una porosidad $\phi = 0,47$, y el papel Whatman #1, con $\phi = 0,69$. A partir de estos valores, se determinó el área total ocupada por la fase sólida dentro de la celda unitaria. Por razones de simetría, dicha área se distribuyó entre cuatro sólidos hexagonales idénticos.

Posteriormente, con el propósito de reproducir los valores de permeabilidad efectiva reportados por Franck et al. [2022], se modificó la relación entre el tamaño característico de la microcelda y las dimensiones de los hexágonos. Este ajuste permitió controlar los tamaños mínimo ($h^{\text{mín}}$) y máximo ($h^{\text{máx}}$) de los poros, indicados en la Figura 3.7. Mediante este procedimiento se obtuvieron las dos topologías microestructurales empleadas en el estudio, cuyos parámetros geométricos se resumen en la Tabla 3.2. Las soluciones del problema de flujo correspondientes a los papeles Munktell 00A y Whatman #1 se presentan posteriormente en las Figuras 3.8 y 3.9, respectivamente.

Parámetro	Munktell 00A	Whatman #1
Porosidad	0,47	0,69
Tamaño de la microcelda [m]	95×10^{-6}	40×10^{-6}
Tamaño máximo de poro [m]	$5,924 \times 10^{-5}$	$3,078 \times 10^{-5}$
Tamaño mínimo de poro [m]	$2,9 \times 10^{-6}$	$16,814 \times 10^{-7}$

Tabla 3.2: Parámetros geométricos para dos geometrías de celdas de papel.

Una vez definidas las geometrías representativas, se calculó su permeabilidad de Darcy y se evaluó el factor de constricción como una segunda magnitud de comparación. El procedimiento utilizado para determinar este último se describe en el Capítulo 5. La Tabla 3.3

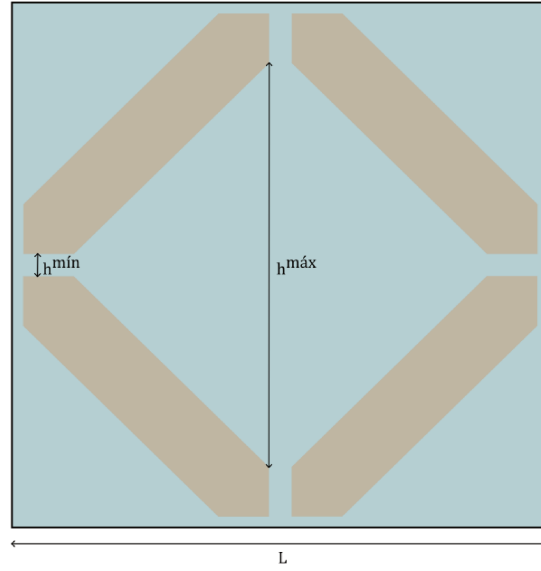


Figura 3.7: Representación geométrica del RVE propuesto para la microestructura del papel.

compara los resultados obtenidos mediante el modelo multiescala con los valores calculados y medidos por Franck et al. [2022].

Para ambos tipos de papel, la permeabilidad y el factor de constricción obtenidos presentan una buena concordancia con los valores de referencia y se encuentran dentro o próximos a los intervalos experimentales reportados. Estos resultados permiten verificar que las geometrías propuestas reproducen adecuadamente propiedades relevantes de la estructura porosa de ambos sustratos y que, por lo tanto, constituyen representaciones equivalentes apropiadas para los análisis multiescala posteriores.

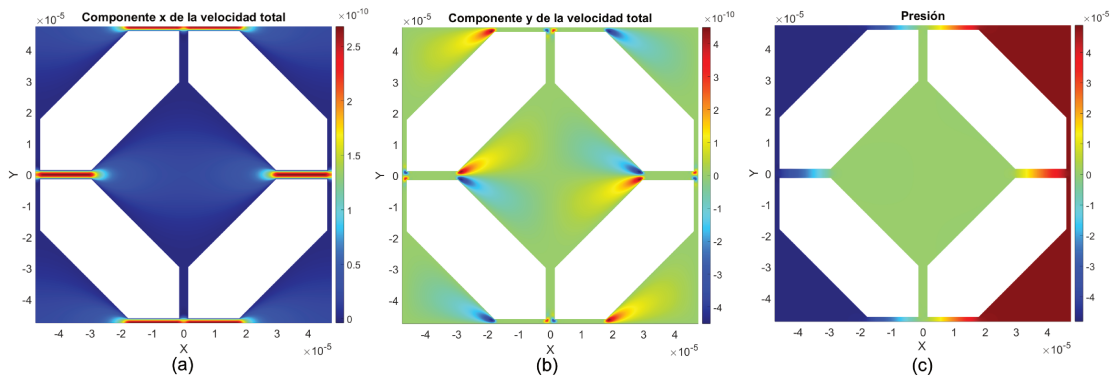


Figura 3.8: Solución del problema de flujo en la microescala para la geometría propuesta del papel Munktell 00A: (a) Componente de la velocidad en la dirección x ; (b) Componente de la velocidad en la dirección y ; y (c) Campo de presión.

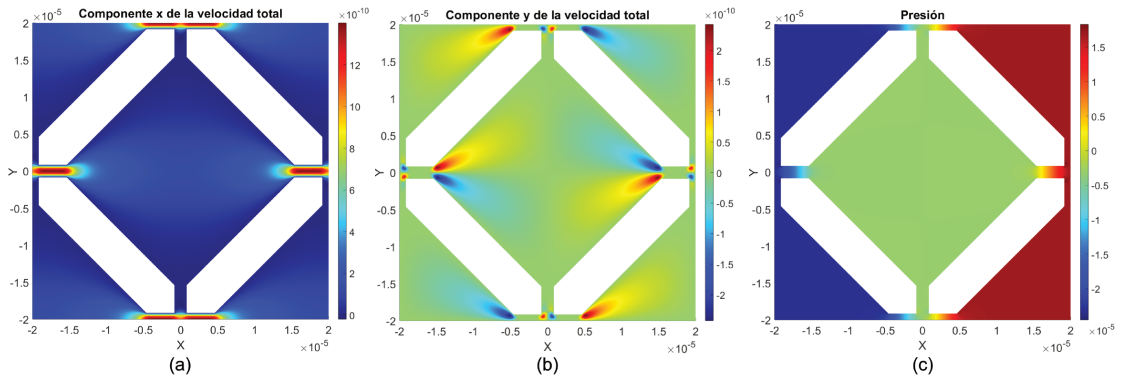


Figura 3.9: Solución del problema de flujo en la microescala para la geometría propuesta del papel Whatman #1: (a) Componente de la velocidad en la dirección x ; (b) Componente de la velocidad en la dirección y ; y (c) Campo de presión.

Munktell 00A			
Magnitud	Multiescala	Modelo Franck	Medición Franck
Permeabilidad	10,89	10,9	13 ± 1
Factor de constricción (β)	3,72	4	$3,3 \pm 0,3$
Whatman #1			
Magnitud	Multiescala	Modelo Franck	Medición Franck
Permeabilidad	7,84	7,8	$9,3 \pm 0,9$
Factor de constricción (β)	3,06	3,1	$2,6 \pm 0,3$

Tabla 3.3: Permeabilidad de Darcy ($\times 10^{-14}, \text{m}^2$) y factor de constricción obtenidos mediante el modelo multiescala, en comparación con los valores calculados y medidos reportados por Franck et al. [2022].

3.3.4. Dependencia con la escala

Como se menciona en la Sección 3.3.2, los resultados obtenidos permitieron observar que la permeabilidad efectiva en las direcciones principales presenta una dependencia cuadrática con la longitud característica de la microcelda, es decir, $k_{ij} \propto L^2$, $i = j$.

Con el objetivo de evaluar si esta ley de escala se mantiene para las nuevas geometrías propuestas en este trabajo, se construyó la curva k_{11} y k_{22} en función del tamaño característico de la microcelda, utilizando los valores de permeabilidad homogeneizados resultantes del problema multiescala. Para cada geometría, se consideraron distintos valores de l , manteniendo fija la morfología relativa de la microestructura, de modo que las variaciones observadas en la permeabilidad sean atribuibles exclusivamente al cambio de

escala y no a modificaciones en la forma de los poros.

Las gráfica obtenida (Figura 3.10) confirma que dicha relación se conserva también en las nuevas configuraciones, evidenciando una dependencia cuadrática consistente con el análisis dimensional del problema. Más precisamente, los datos obtenidos se ajustan a una ley de la forma $k_{ij} = a \cdot L^2$, donde el coeficiente a depende exclusivamente de la morfología adimensional de la microestructura (distribución y forma de los poros), y resulta invariante frente a cambios de escala absoluta, siempre que la geometría se escale uniformemente y el régimen físico se mantenga. En consecuencia, si bien la modificación geométrica afecta los valores absolutos de la permeabilidad, la ley de escala macroscópica permanece inalterable.

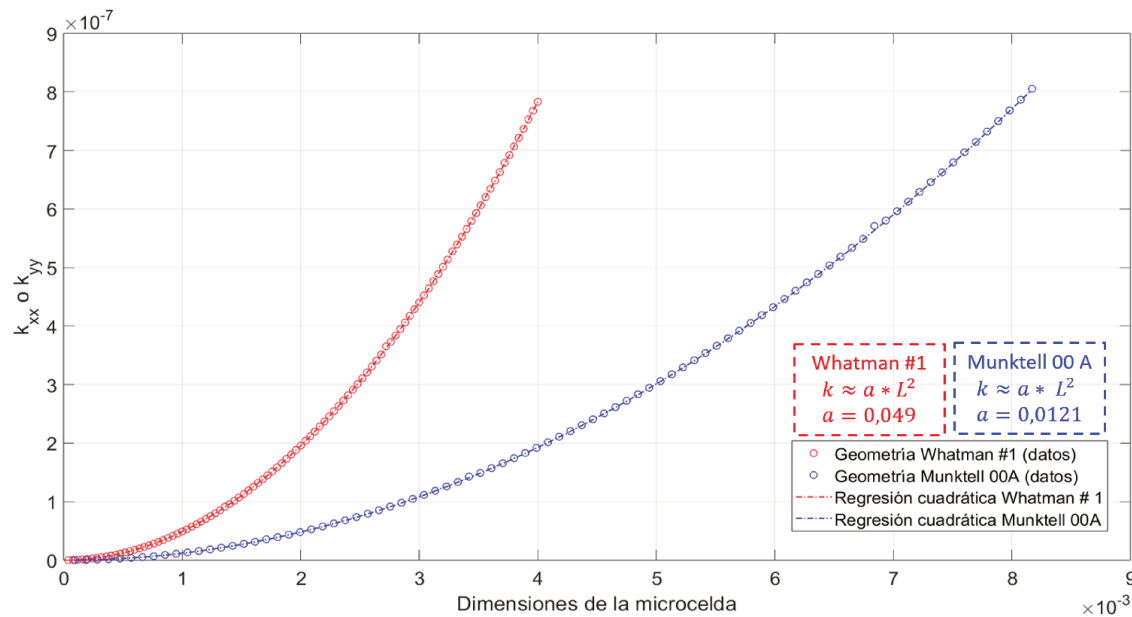


Figura 3.10: Análisis de sensibilidad del tensor de permeabilidad efectivo con las dimensiones de la microcelda para las geometrías de Munktell 00A y Whatman #1.

Asimismo, en concordancia con la relación de Kozeny-Carman, estos resultados a su vez verifican la proporcionalidad entre la permeabilidad y el cuadrado del radio hidráulico. Al mantener fija la morfología relativa de los poros y escalar uniformemente la geometría, todas las longitudes características del medio poroso (incluyendo el radio hidráulico) escalan linealmente con el tamaño de la microcelda, por lo que se obtiene una relación directa de la forma $k_{ij} \propto r_h^2$.

Este resultado refuerza la consistencia física del modelo y respalda la generalidad de la metodología de homogeneización empleada. En particular, permite separar de forma clara la contribución geométrica (capturada por el coeficiente adimensional a) de la contribución de escala (dada por L^2). Esta descomposición resulta de utilidad práctica para

extrapolar los resultados a otras escalas, siempre que se preserve la similitud geométrica de la microestructura y el régimen físico considerado, sin necesidad de resolver nuevamente el problema de celda unitaria.

3.3.5. Validación de existencia del Elemento de Volumen Representativo

Con el objetivo de evaluar si las microestructuras propuestas pueden considerarse representativas para el cálculo de la permeabilidad efectiva, se analizó la convergencia de la componente k_{xx} del tensor de permeabilidad a medida que aumenta el tamaño del dominio microscópico en la dirección del flujo. Este análisis se basa en que una propiedad efectiva debe volverse aproximadamente independiente del tamaño del dominio una vez que este contiene suficiente información microestructural para representar la respuesta macroscópica del medio.

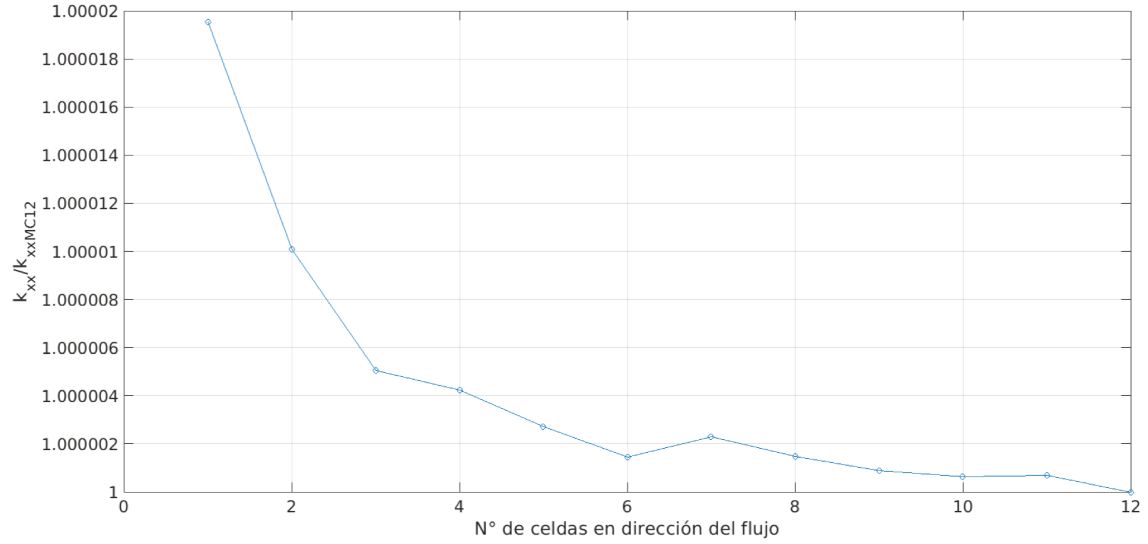
Para ello, se construyeron dominios de tamaño creciente mediante la repetición periódica de la microcelda base en la dirección x . En cada configuración se resolvió el problema fluidodinámico microscópico bajo las mismas condiciones de carga y se calculó la correspondiente componente de permeabilidad efectiva k_{xx} . De esta manera, fue posible determinar la influencia del número de microceldas sobre la propiedad homogeneizada e identificar el tamaño a partir del cual su variación resulta despreciable.

Para facilitar la comparación, los valores obtenidos se normalizaron respecto de la permeabilidad calculada para el dominio de referencia formado por doce microceldas, denotada como k_{xxMC12} . Por lo tanto, el cociente k_{xx}/k_{xxMC12} permite cuantificar directamente la diferencia entre la permeabilidad correspondiente a cada tamaño de dominio y el valor adoptado como referencia. A medida que este cociente se aproxima a la unidad y sus variaciones disminuyen, se reduce la dependencia de la propiedad efectiva respecto del número de microceldas considerado.

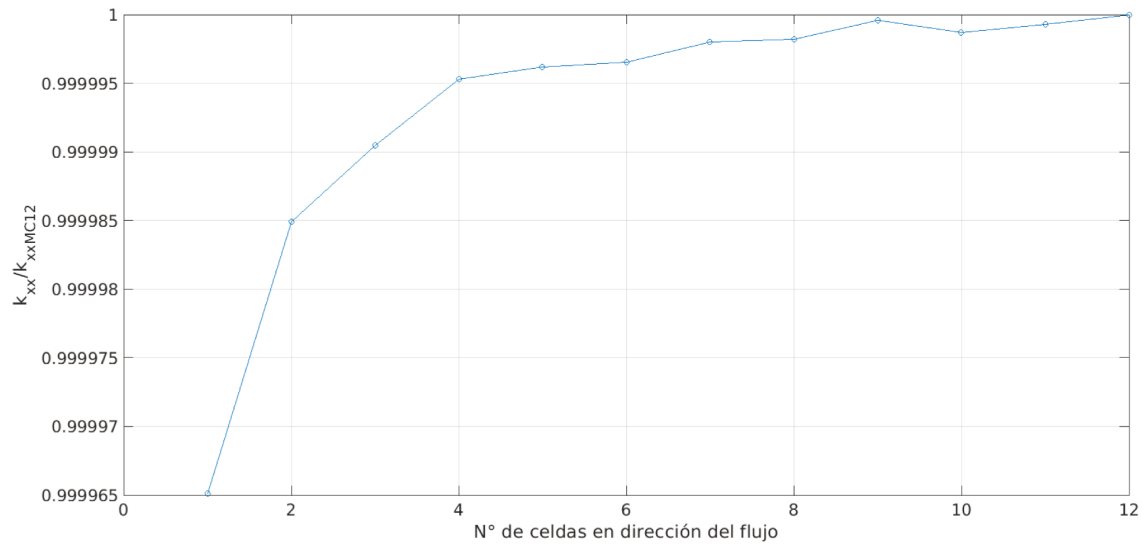
La Figura 3.11 presenta los resultados del análisis de convergencia para las microestructuras representativas de los papeles Munktell 00A, denominada RVE₁, y Whatman #1, denominada RVE₂. En ambos casos se observa que, al incrementar el número de microceldas, la permeabilidad normalizada tiende rápidamente hacia un valor estable. Las diferencias entre configuraciones sucesivas disminuyen progresivamente hasta alcanzar variaciones muy pequeñas (del orden de 10^{-6}) para ambos RVEs.

La aparición de esta región de estabilización indica que la componente k_{xx} deja de presentar una dependencia significativa respecto de la longitud del dominio microscópico.

En otras palabras, la incorporación de nuevas repeticiones de la microcelda no produce modificaciones relevantes en la respuesta hidráulica homogeneizada. Esto permite descartar que los valores calculados de permeabilidad sean consecuencia del tamaño particular del dominio empleado y muestra que la conectividad y las constricciones que controlan el flujo en la dirección x se encuentran adecuadamente representadas.



(a) Convergencia de k_{xx}/k_{xx}^{MC12} para la microestructura propuesta del papel Munktell 00A (RVE_1).



(b) Convergencia de k_{xx}/k_{xx}^{MC12} para la microestructura propuesta del papel Whatman #1 (RVE_2).

Figura 3.11: Convergencia de la componente de permeabilidad efectiva k_{xx} normalizada en función del número de microceldas empleadas en la dirección del flujo: (a) Papel Munktell 00A y (b) Papel Whatman #1.

Por consiguiente, los resultados respaldan la elección de las geometrías propuestas como RVE para la determinación de la componente de permeabilidad efectiva en la direc-

ción del flujo. Esta conclusión debe entenderse vinculada específicamente con la propiedad analizada. Por esta razón, la representatividad de las microestructuras frente a otras propiedades de transporte se evalúa posteriormente mediante los análisis de convergencia correspondientes.

3.4. Síntesis

En este capítulo se establecieron los fundamentos teóricos y computacionales del modelo multiescala empleado para caracterizar el flujo saturado en medios porosos. Se presentó la formulación basada en las ecuaciones de Stokes a escala de poro y la ley de Darcy a escala macroscópica, y se validó el modelo numérico tanto frente a soluciones analíticas y numéricas de referencia, así como también mediante comparación con simulaciones numéricas directas, obteniendo en todos los casos una excelente concordancia. A partir de esta base validada, se propusieron geometrías de RVE representativas de la microestructura del papel (Munktell 00A y Whatman #1), cuyos parámetros de permeabilidad y factor de constricción resultaron consistentes con los valores reportados en la literatura. Finalmente, se verificó que la ley de escala cuadrática $k_{ij} \propto L^2$ se conserva en las nuevas configuraciones geométricas, y se confirmó la existencia del RVE mediante el análisis de convergencia del tensor de permeabilidad. Los resultados obtenidos proporcionan una base sólida para el análisis desarrollado en los capítulos siguientes.

Capítulo 4

Modelado Multiescala aplicado al problema de Flujo

Electroosmótico y Conductividad Iónica en Dispositivos

Microfluídicos en Papel

4.1. Introducción

El flujo electroosmótico (EOF, por sus siglas en inglés) es un fenómeno electrocinético que describe el movimiento macroscópico de un fluido electrolítico en contacto con una superficie sólida cargada. Este movimiento es inducido por la aplicación de un campo eléctrico externo tangencial a dicha superficie, y surge como consecuencia de la interacción entre el campo eléctrico aplicado y la distribución de cargas iónicas presentes en las proximidades de la interfaz sólido-líquido.

La relevancia del flujo electroosmótico se incrementa significativamente al disminuir la escala característica del sistema. En microfluídica, mientras que el caudal en un flujo impulsado por presión decrece proporcionalmente a la cuarta potencia del radio del canal (r^4), la velocidad media del flujo electroosmótico permanece independiente de la longitud característica del canal, siempre que la doble capa eléctrica sea delgada en comparación con dicha dimensión (Kirby [2010] y Panigrahi [2016]). En consecuencia, el caudal electroosmótico es proporcional al área transversal del canal ($\sim r^2$), lo que convierte a los

campos eléctricos en un mecanismo particularmente eficiente para el bombeo y control de fluidos en dispositivos micro y nanoestructurados.

Una característica distintiva del EOF es su perfil de velocidad. A diferencia del flujo de Poiseuille, que presenta un perfil parabólico debido a la acción de gradientes de presión y esfuerzos viscosos distribuidos en todo el dominio, el EOF exhibe un perfil aproximadamente plano o tipo *plug flow*. La velocidad del fluido aumenta abruptamente desde cero en la pared hasta alcanzar un valor prácticamente uniforme en una distancia del orden del espesor de la capa de Debye (λ_D), que típicamente varía entre fracciones y algunos cientos de nanómetros (Kirby [2010]). Fuera de esta región nanométrica, el fluido se desplaza con velocidad casi constante.

4.1.1. Doble capa eléctrica (EDL)

El fenómeno electroosmótico comienza en la interfaz entre un líquido (usualmente una solución acuosa con electrolitos) y una superficie sólida. Debido a procesos químicos como la ionización o la adsorción, las superficies sólidas adquieren una carga eléctrica neta al entrar en contacto con el líquido.

Para mantener la neutralidad eléctrica global, los iones del líquido que tienen una carga opuesta a la de la pared (contraiones) son atraídos hacia ella, mientras que los iones con la misma carga (coiones) son repelidos. Esta redistribución de iones, combinada con la agitación térmica que impide que se compacten totalmente contra la pared, forma una nube difusa conocida como la Doble Capa Eléctrica (EDL). El espesor característico de esta región se conoce como longitud de Debye (λ_D) que típicamente mide entre unos pocos y cientos de nanómetros.

La hipótesis de una EDL delgada implica una separación de escalas, lo que permite analizar el flujo electroosmótico mediante expansiones asintóticas emparejadas, dividiendo el problema en dos soluciones: (1) la solución interna, correspondiente a la EDL, en la que se modela con precisión la interacción entre las fuerzas viscosas y de Coulomb. En esta región delgada, los gradientes de velocidad son altos, pero se asume que el campo eléctrico externo es constante. Esta solución es precisa dentro de la EDL, pero resulta incorrecta lejos de la pared si el campo externo varía. Y (2) la solución externa, la cual es válida en el seno del fluido. En esta, se considera al fluido como electroneutro e irrotacional, ignorando la física de la EDL. Su ventaja es que permite una variación espacial del campo eléctrico externo (Kirby [2010]).

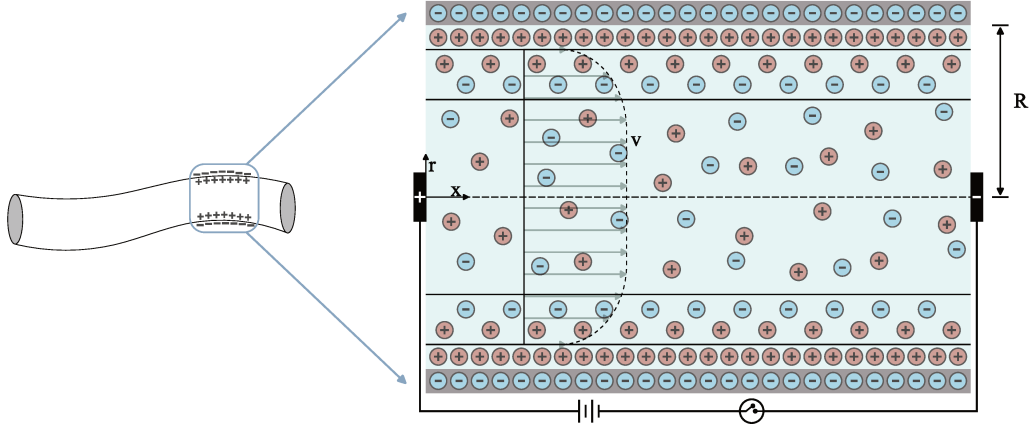


Figura 4.1: Representación esquemática del desplazamiento de la doble capa eléctrica bajo la acción de un campo eléctrico externo en un capilar. (Imagen inspirada en Gao et al. [2024])

4.1.2. El mecanismo de movimiento

Mientras que el volumen principal del fluido (lejos de la pared) es eléctricamente neutro, dentro de la EDL existe una densidad de carga eléctrica neta. Cuando se aplica un campo eléctrico externo ($\vec{E}$) tangencial a la pared, este ejerce una fuerza electromagnética (fuerza de Coulomb) sobre los iones móviles que se concentran en la EDL.

A medida que estos iones se mueven en la dirección del campo (o en dirección opuesta, según su carga), la fricción viscosa hace que “arrastran” a las moléculas de agua o solvente circundante con ellos. Dado que los iones se mueven de manera continua, terminan “tirando” de todo el volumen de líquido neutro que se encuentra en el centro del canal (Bruus [1997]).

Matemáticamente, la solución interna se modela añadiendo un término de fuerza de cuerpo eléctrico ($\rho_{el}\vec{E}$) a la ecuación de Stokes donde la densidad de carga eléctrica (ρ_{el}) solo es no nula a distancias de la pared menores a longitud de Debye (λ_D).

4.1.3. Ley de Helmholtz-Smoluchowski

En el límite donde la capa de Debye es muy delgada en comparación con el tamaño del canal (aproximación de capa fina), la velocidad del fluido en el centro del canal ($\vec{v}_{eo}$) es linealmente proporcional al campo eléctrico aplicado ($\vec{E}$). Esta relación se rige por la ecuación de Helmholtz-Smoluchowski:

$$\vec{v}_{eo} = -\frac{\epsilon\zeta}{\mu}\vec{E} \quad (4.1)$$

donde: ϵ es la permitividad eléctrica del fluido, ζ es el potencial de pared o potencial eléctrico en el plano de corte (la frontera móvil de la capa difusa), y μ es la viscosidad dinámica del fluido.

El término que agrupa las propiedades del fluido y la interfaz se conoce como movilidad electroosmótica ($\mu_{eo} = -\epsilon\zeta/\mu$), el cual define la “velocidad de deslizamiento efectiva” del fluido en las paredes.

La ecuación de Helmholtz-Smoluchowski es un modelo ampliamente utilizado, pero su aplicabilidad depende de una serie de hipótesis sobre el sistema físico (Hunter and White [1987], Smoluchowski [1903]), las cuales se detallan a continuación:

- **Doble capa eléctrica delgada:** Se asume que el grosor de la doble capa eléctrica es mucho menor que el radio de curvatura de la superficie o la dimensión característica del canal. Lo que implica que la acción del campo eléctrico se limite a una región minúscula cerca de la pared, permitiendo tratar el flujo como un “flujo tipo pistón”, donde la velocidad es prácticamente constante en toda la sección transversal del canal, excepto en la delgadísima región de la EDL. Si la doble capa fuera gruesa, el perfil de velocidad sería más parabólico y la ecuación no sería válida.
- **Flujo laminar y estacionario:** Las fuerzas eléctricas, de presión y viscosas están en equilibrio. La turbulencia introduciría fluctuaciones complejas de velocidad y presión que no están contempladas en el modelo. En microcanales, esta suposición casi siempre se cumple debido a las bajas velocidades y pequeñas dimensiones (número de Reynolds bajo).
- **Fluido Newtoniano e incompresible:** Esto simplifica enormemente las ecuaciones de Navier-Stokes que describen la dinámica del fluido, permitiendo una solución analítica.
- **Superficie plana o capilar ancho:** La derivación original se realiza para una superficie plana infinita. Se aplica a capilares cilíndricos o canales rectangulares bajo la suposición de que su radio o altura es lo suficientemente grande (respecto de λ_D) como para que la curvatura de la superficie sea despreciable. Esto está directamente relacionado con la hipótesis de la EDL delgada.
- **Superficie aislante y químicamente uniforme:** Se asume que la pared del canal no conduce electricidad y es químicamente homogénea, garantizando que el campo eléctrico aplicado actúa únicamente sobre los iones en el fluido y no se desvía a

través de la pared. Asimismo, asegura que el potencial de pared (ζ) es constante a lo largo de toda la superficie.

Como es discutido anteriormente, la ecuación de Helmholtz-Smoluchowski no tiene en cuenta la influencia de la conductividad superficial y la estructura de la EDL, lo que puede dar lugar a imprecisiones, especialmente en soluciones de baja fuerza iónica o con partículas de formas complejas (Klaseboer and Chan [2020]). En el caso de que dichas hipótesis no se cumplan, es necesario recurrir a enfoques computacionalmente más demandantes. Estos consisten en abandonar las condiciones de deslizamiento efectivo y resolver de manera acoplada y simultánea el sistema completo de ecuaciones de Navier-Stokes para la fluidodinámica, junto con las ecuaciones de Poisson-Nernst-Planck para la electrostática y el transporte iónico, como es detallado en la literatura (Kirby [2010], Bruus [1997] y Panigrahi [2016]).

Dado que el potencial de pared (ζ) define el potencial eléctrico en el plano de deslizamiento entre la capa fija y la capa difusa, éste gobierna directamente la magnitud del EOF. En consecuencia, el fenómeno no solo es un medio para transportar fluidos, sino que también establece una relación fundamental: midiendo la tasa de flujo volumétrico generado por un campo eléctrico conocido, es posible inferir el potencial ζ de las partículas que componen la matriz porosa, ofreciendo un método indirecto pero eficaz para la caracterización electrocinética de superficies.

4.2. Formulación multiescala

En el marco de la microescala, la velocidad del fluido $\vec{v}$ y la presión p se regirán por la ecuación de Stokes para fluidos Newtonianos incompresibles con un término de fuerza volumétrica asociado a fuerzas Coulombianas (Salazar Bove et al. [2025b]):

$$\nabla \cdot \left(p_\mu \bar{\bar{I}} - \mu (\nabla \vec{v}_\mu + \nabla \vec{v}_\mu^T) \right) = \rho_{el} \vec{E}_\mu \quad (4.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{v}_\mu = 0 \quad (4.3)$$

donde μ e $\bar{\bar{I}}$ corresponden a la viscosidad y tensor identidad respectivamente. El término $\rho_{el} \vec{E}_\mu$ corresponde a la contribución de las fuerzas eléctricas en el balance de momento, donde $\vec{E}_\mu$ es el campo eléctrico en la microescala y ρ_{el} es la densidad de cargas eléctricas de la solución electrolítica, la cual representa la suma de la carga neta de todos los iones presentes en la solución. El campo eléctrico se calcula resolviendo la ecuación de

conservación de carga, i.e.:

$$\nabla \cdot \vec{j}_\mu = \nabla \cdot (-\sigma_\mu \nabla \Phi_\mu) = 0 \quad (4.4)$$

$$\vec{E}_\mu = -\nabla \Phi_\mu \quad (4.5)$$

donde $\vec{j}_\mu$ es la densidad de corriente en la microescala, Φ_μ el potencial eléctrico microescala, y σ_μ la conductividad eléctrica del fluido en la microescala. Nuevamente, la conductividad eléctrica del medio poroso embebido en una solución electrolítica ha sido modelada de diversas formas empleando propiedades como la tortuosidad o la constricción. Se han realizado validaciones exitosas en este sentido [Franck et al., 2022].

Paralelamente, la distribución de la densidad de carga requiere una especial consideración para el potencial eléctrico diferenciándose entre el potencial aplicado externamente, y el potencial de pared (ζ), ya que implican diferentes escalas de longitud dependiendo de la parte del dominio que se analice. Por ende, el flujo electroosmótico considera una velocidad de deslizamiento inducida eléctricamente paralela a la dirección del campo eléctrico aplicado $\nabla \Phi$. Esta velocidad está determinada por la ecuación de Helmholtz-Smoluchowski:

$$\vec{v}_{eo} = \frac{\epsilon \zeta \nabla \Phi}{\mu} \quad (4.6)$$

Dicha aproximación implica que la densidad neta de carga eléctrica satisface $\rho_{el} \approx 0$ en el seno del fluido, fuera de la doble capa eléctrica, la cual se forma en la interfaz sólido-fluido como consecuencia de las cargas electrostáticas presentes en dicha interfaz. Por lo tanto, el último término del lado derecho de la Ecuación (4.2), asociado a la fuerza eléctrica volumétrica, puede despreciarse en el dominio fluido, mientras que el efecto de la doble capa sobre el movimiento del fluido se incorpora mediante una condición de contorno de deslizamiento electroosmótico.

El empleo de esta aproximación de doble capa delgada se justifica por la separación entre las escalas características involucradas. Para las soluciones buffer acuosas consideradas, la longitud de Debye es aproximadamente $\lambda_D \approx 10$, nm, mientras que el tamaño característico de los poros es del orden de $a \approx 10$, μm . En consecuencia, $\frac{\lambda_D}{a} = \frac{10 \text{ nm}}{10 \mu\text{m}} \approx 10^{-3}$, lo que indica que el espesor de la doble capa eléctrica es despreciable en comparación con la dimensión característica del poro. De este modo, no es necesario resolver explícitamente la distribución de cargas ni el campo de velocidades dentro de la doble capa, y su influencia puede representarse mediante una condición efectiva de deslizamiento sobre la interfaz sólido-fluido, reduciendo significativamente la demanda computacional.

4.2.1. Conservación de cargas

Según la formulación multiescala, que presenta las mismas ecuaciones que el problema térmico (Fachinotti et al. [2015], Fachinotti et al. [2023], Blanco and Giusti [2014]), el potencial eléctrico Φ_μ , se descompone de la siguiente manera:

$$\Phi_\mu = \Phi + \nabla_{\vec{x}}\Phi \cdot \vec{y} + \tilde{\Phi}_\mu \quad (4.7)$$

donde Φ es el potencial eléctrico en la macroescala, y $\nabla_{\vec{x}}$ representa el gradiente acorde a las coordenadas de la macroescala.

El gradiente del potencial eléctrico en la microescala se obtiene al aplicar el gradiente a la Ec. (4.7) y asumiendo que las coordenada $\vec{y}$ son baricéntricas, de la siguiente forma:

$$\nabla_{\vec{y}}\Phi_\mu = \nabla_{\vec{x}}\Phi + \nabla_{\vec{y}}\tilde{\Phi}_\mu \quad (4.8)$$

Análogamente, podemos definir las funciones test o de variables de concentración virtuales:

$$\delta\Phi_\mu = \delta\Phi + \delta\nabla_{\vec{x}}\Phi \cdot \vec{y} + \delta\tilde{\Phi}_\mu \quad (4.9)$$

$$\delta\nabla_{\vec{y}}\Phi_\mu = \delta\nabla_{\vec{x}}\Phi + \delta\nabla_{\vec{y}}\tilde{\Phi}_\mu \quad (4.10)$$

A continuación, se plantean las ecuaciones de compatibilidad de las variables macro y microescala. Para ello, se debe igualar la media volumétrica de la variable micro a la variable macro:

$$\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{|\Omega_\mu|} \Phi_\mu d\Omega = \Phi \quad (4.11)$$

Al considerar la Ec. (4.7) y asumiendo que las coordenada $\vec{y}$ son baricéntricas, la ecuación anterior puede ser reducida de la siguiente forma:

$$\int_{|\Omega_\mu|} \tilde{\Phi}_\mu d\Omega = 0 \quad (4.12)$$

Este mismo procedimiento se debe aplicar al gradiente del potencial eléctrico, quedando:

$$\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{|\Omega_\mu|} \nabla_{\vec{y}}\Phi_\mu d\Omega = \nabla_{\vec{x}}\Phi \quad (4.13)$$

Considerando la Ec. (4.8), se obtiene:

$$\int_{\Gamma_\mu} \tilde{\Phi}_\mu \mathbf{n}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \quad (4.14)$$

De la misma forma, las variaciones virtuales quedan definidas como:

$$\int_{\Omega_\mu} \delta\tilde{\Phi}_\mu d\Omega = 0 \quad \text{y} \quad \int_{\Gamma_\mu} \delta\tilde{\Phi}_\mu \mathbf{n}_\mu d\Gamma = 0 \quad (4.15)$$

Se pueden escribir el espacio solución y el espacio de las variaciones virtuales admisibles como:

$$\mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) = \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) = \left\{ \hat{\Phi} \mid \hat{\Phi} \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu), \int_{\Omega_\mu} \hat{\Phi} d\Omega = 0, \int_{\Gamma_\mu} \hat{\Phi} \mathbf{n}_\mu d\Gamma = 0 \right\} \quad (4.16)$$

La condición de compatibilidad variacional entre la macroescala y microescala (Principio de Hill–Mandel extendido), adopta la siguiente expresión:

$$\vec{j} \cdot \delta \nabla_{\vec{x}} \Phi = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \vec{j}_\mu \cdot \left(\delta \nabla_{\vec{x}} \Phi + \nabla_{\vec{y}} \delta \tilde{\Phi}_\mu \right) d\Omega \quad \forall \delta \nabla_{\vec{x}} \Phi \in \mathbb{R}^{ndim}, \forall \tilde{\Phi}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \quad (4.17)$$

De la Ecuación (4.17) se obtienen las siguientes consecuencias:

- Problema variacional en la microescala:

Hallar $\tilde{\Phi}_\mu \in \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \mid$

$$\int_{\Omega_\mu} \vec{j}_\mu \cdot \left(\delta \nabla_{\vec{x}} \Phi + \nabla_{\vec{y}} \delta \tilde{\Phi}_\mu \right) d\Omega \quad \forall \delta \tilde{\Phi}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\mu) \quad (4.18)$$

- Ecuación de homogeneización:

$$\vec{j} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{|\Omega_\mu|} \vec{j}_\mu d\Omega \quad (4.19)$$

donde $\vec{j}_\mu$ es la densidad de corriente en la microescala, la cual es determinada por la Ley de Ohm como $\vec{j}_\mu = \bar{\bar{\sigma}}_\mu \cdot \vec{E}_\mu$. El campo eléctrico en la microescala ($\vec{E}_\mu$) es calculado como $\vec{E}_\mu = -\nabla_{\vec{y}} \Phi_\mu$. Y $\bar{\bar{\sigma}}_\mu$ es el tensor de segundo orden de conductividad eléctrica para un material que compone la microescala.

El tensor de conductividad eléctrica efectivo se define entonces como:

$$\bar{\bar{\Sigma}} = \frac{\partial \vec{j}}{\partial \vec{E}} \quad (4.20)$$

donde $\vec{E} = -\nabla_{\vec{x}} \Phi$ es el campo eléctrico macro.

Teniendo en cuenta la linealidad del problema, el tensor $\bar{\bar{\Sigma}}$ se construye a partir de la determinación de $\vec{j}$ para cada dirección canónica de $\vec{E}$.

4.2.2. Permeabilidad electroosmótica

De manera análoga a la Sección 3.2.1, podemos calcular el tensor de permeabilidad electroosmótica efectivo resolviendo primero el problema de conservación de cargas, seguido del problema de Stokes, teniendo en cuenta la linealidad de ambos problemas.

Para ello, se resuelve el problema de difusión eléctrica para cada uno de los campos eléctricos canónicos ($\vec{E}$), y con esta solución se calcula la velocidad de deslizamiento

de Helmholtz-Smoluchowski que se aplica como condición de contorno en las inclusiones sólidas para el problema de Stokes. A continuación, el problema de Stokes es resuelto con $\nabla p = 0$, determinándose el campo de velocidades efectivo que permite calcular la permeabilidad electroosmótica de la siguiente manera:

$$\overline{\overline{k^{eo}}} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial \vec{E}} \quad (4.21)$$

4.3. Resultados

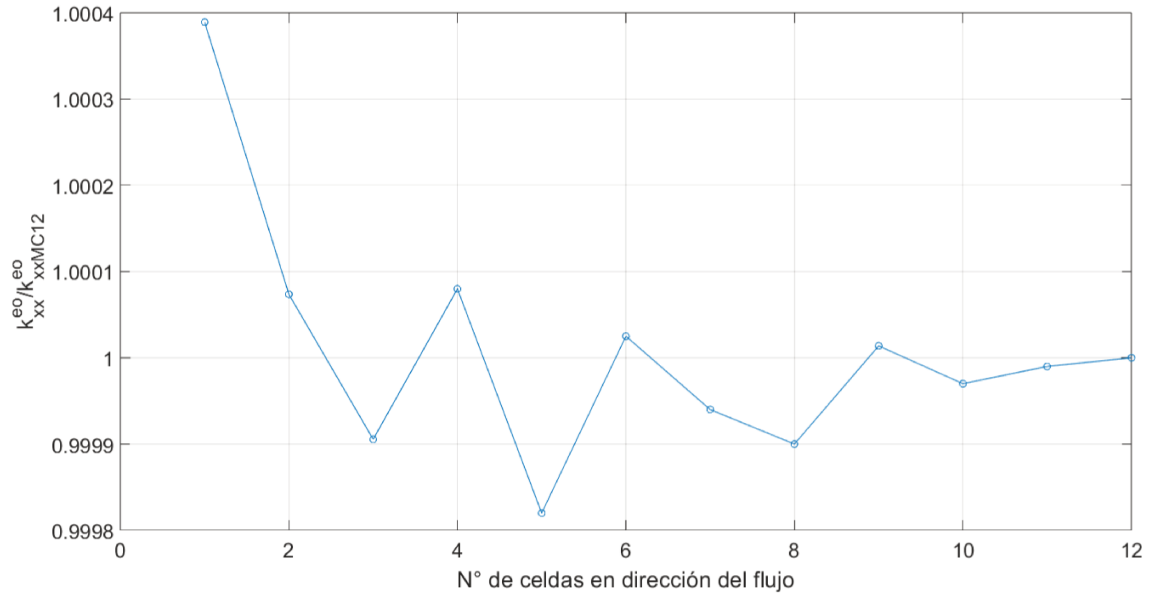
4.3.1. Validación de existencia del Elemento de Volumen Representativo

Al igual que en el Capítulo 3, debemos analizar la convergencia de la propiedad efectiva al incrementar el dominio de análisis en la dirección del flujo. Este estudio resulta necesario para garantizar que las configuraciones microestructurales propuestas para Munktell 00A y Whatman #1 satisfacen la condición de representatividad estadística, validando así su carácter de RVE.

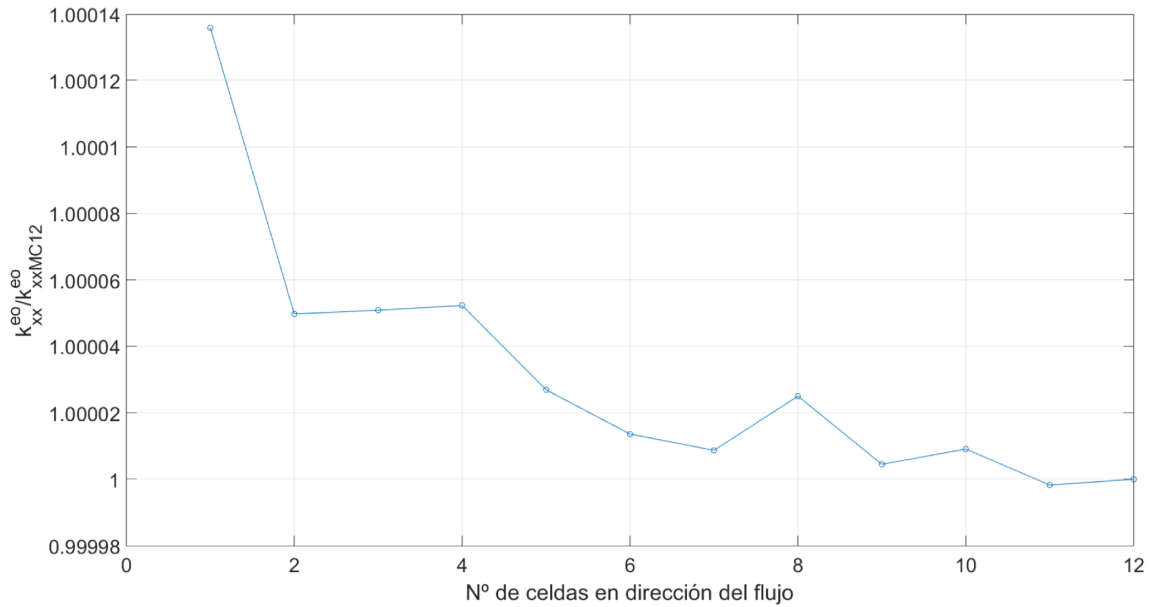
Para tal fin, se definió una secuencia de microceldas de tamaño creciente, construidas mediante la repetición periódica de la celda unitaria base. Sobre cada configuración de la secuencia se evaluó la permeabilidad electroosmótica efectiva correspondiente. Las curvas de convergencia obtenidas para las microestructuras asociadas a los casos RVE₁ y RVE₂ se muestran en las Figuras 4.2(a) y 4.2(b), respectivamente.

A partir de los resultados expuestos se observa que, al incrementar el número de celdas, la componente k_{xx}^{eo} del tensor efectivo tiende a estabilizarse hacia una solución asintótica, exhibiendo variaciones progresivamente menores. Si bien la convergencia no se manifiesta de forma monótona, los valores de $k_{xx}^{eo}/k_{xxMC12}^{eo}$ permanecen acotados en un intervalo muy estrecho alrededor de la unidad, con fluctuaciones del orden de 10^{-4} . Esto indica que las diferencias observadas responden principalmente a errores numéricos asociados a la discretización, más que a una dependencia física con el tamaño del dominio.

En consecuencia, la respuesta macroscópica resulta objetiva, perdiendo sensibilidad frente al número de celdas consideradas. Este comportamiento confirma la existencia de un RVE para el problema de flujo electroosmótico en las geometrías analizadas.



(a) Geometría propuesta para papel Munktell 00A.



(b) Geometría propuesta para papel Whatman #1.

Figura 4.2: Gráficas de convergencia del tensor de permeabilidad electroosmótica efectiva en dirección tangencial al flujo para distintas geometrías.

4.3.2. Validación del modelo numérico multiescala

En esta sección se aborda la simulación del transporte electroosmótico sobre los dominios microestructurales RVE_1 y RVE_2 . En este contexto, el potencial ζ en la interfaz entre la fibra de celulosa y el electrolito constituye un parámetro constitutivo microestructural de difícil caracterización directa. En la física del problema de EOF se incorpora mediante una condición de velocidad de deslizamiento (slip velocity) en la interfaz fluido-sólido, cuya

dirección resulta paralela al campo eléctrico aplicado. Dicha velocidad de deslizamiento se impuso en las paredes de las obstrucciones sólidas internas, tal como se detalla en la Sección 4.2.

Para realizar la comparación, se tomaron como referencia los valores experimentales de permeabilidad electroosmótica (k^{eo}) reportados por Franck et al. [2021] para los papeles Munktell 00A y Whatman #1, correspondientes a mediciones con una solución buffer de pH de 4,78. En particular, se consideraron $k_{11}^{eo} = 5,37 \times 10^{-10} m^2/Vs$ y $k_{11}^{eo} = 5,61 \times 10^{-10} m^2/Vs$, respectivamente. A partir de estos valores, se ajustó el modelo multiescala haciendo coincidir los valores de permeabilidad electroosmótica, lo que permitió determinar el potencial de pared (ζ) característico de cada papel.

En este caso, se resolvió el problema en la microcelda imponiendo un gradiente de potencial eléctrico unitario, condición de deslizamiento (slip velocity) en las superficies de los sólidos internos y condición de no penetración en las paredes del dispositivo.

Como resultado, para el caso de la microestructura RVE_1 , se obtuvo un potencial de $\zeta = -5,91mV$, mientras que para el RVE_2 el valor identificado fue de $\zeta = -3,48mV$. Los resultados obtenidos de este procedimiento para RVE_1 y RVE_2 se muestran en las Figuras 4.3 y 4.4, respectivamente. Es importante destacar que los valores obtenidos presentan una buena concordancia con el modelo y mediciones experimentales reportadas por Franck et al. [2022], lo que respalda la validez y robustez de la metodología empleada.

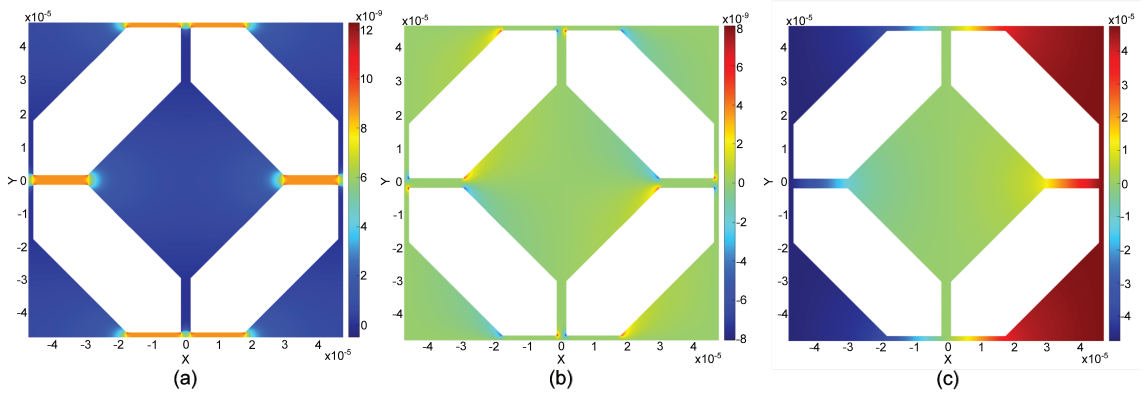


Figura 4.3: Solución del problema de flujo electroosmótico en la microescala para geometría Munktell 00A mediante el modelo multiescala propuesto: (a) Campo de velocidades en dirección tangencial al flujo; (b) Campo de velocidades en dirección perpendicular al flujo; (c) Campo potencial eléctrico.

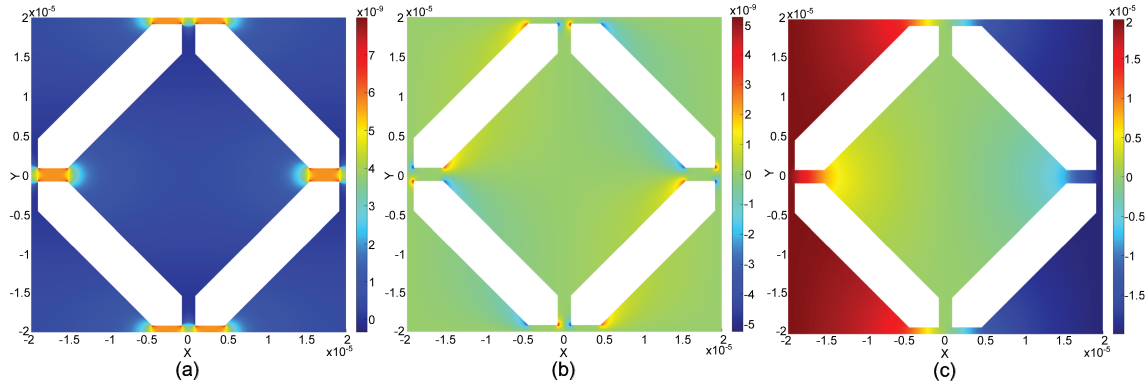


Figura 4.4: Solución del problema de flujo electroosmótico en la microescala para geometría Whatman #1 mediante el modelo multiescala propuesto: (a) Campo de velocidades en dirección tangencial al flujo; (b) Campo de velocidades en dirección perpendicular al flujo; (c) Campo potencial eléctrico.

Asimismo, el análisis de los campos microscópicos resultantes permite verificar la coherencia física de la solución: la distribución de velocidades en dirección tangencial al flujo reproduce el característico flujo pistón en los canales de sección constante, mientras que el campo de potencial eléctrico exhibe un comportamiento lineal, tal como se espera teóricamente para la física del fenómeno electroosmótico a microescala.

4.3.3. Validación con Simulaciones Numéricas Directas

Con el propósito de analizar el desempeño del modelo multiescala en el problema de flujo electroosmótico, en esta sección se realiza una comparación con soluciones obtenidas mediante simulaciones numéricas directas (DNS), utilizando el código de elementos finitos multifísico de código abierto Elmer FEM (Råback et al. [2013]).

Para este estudio se emplearon las geometrías correspondientes al papel Munktell 00A (RVE_1) y Whatman #1 (RVE_2), representativas de la microestructura de canales constrictos del material.

A diferencia del enfoque homogenizado, en el DNS se resuelve de manera explícita la ecuación de Stokes y el vínculo con el problema de EOF se incorpora mediante una condición de velocidad de deslizamiento, tal como se detalla en la Sección 4.2, lo que permite calcular de manera simplificada el campo eléctrico. Para esto, se han adoptado los potenciales de pared obtenidos en la Sección 4.3.2, $\zeta = -5,91mV$ para el RVE_1 y $\zeta = -3,48mV$ para el RVE_2 . Como condiciones de borde se impone un potencial eléctrico uniforme de entrada de $50 - 200V$ y $0V$ a la salida, condición de no penetración tanto

en las paredes del canal como en los sólidos internos, y condición de deslizamiento en las paredes de los sólidos internos.

La Tabla 4.1 presenta una comparación cuantitativa entre los valores de la velocidad tangencial media obtenidos mediante el modelo multiescala y las soluciones DNS para distintos potenciales eléctricos aplicados. En todo el intervalo analizado se observa una excelente concordancia entre ambos enfoques, con diferencias relativas inferiores al 1 %. En particular, para la geometría representativa del papel Munktell 00A, el error relativo máximo obtenido, en el rango de potencial eléctrico estudiado, es del 0,42 %, mientras que, para la geometría correspondiente al papel Whatman #1, alcanza un valor máximo del 0,86 %.

Estos resultados demuestran que el modelo homogeneizado reproduce con precisión la respuesta electroosmótica obtenida al resolver explícitamente la microestructura. La concordancia observada respalda, para las geometrías y condiciones estudiadas, la consistencia de la metodología multiescala propuesta y su capacidad para predecir el flujo electroosmótico a escala macroscópica con un costo computacional considerablemente menor que el requerido por las simulaciones DNS.

Geometría de papel Munktell 00A			
Pot. eléc. [V]	Modelo multiescala v_x [m/s]	DNS v_x [m/s]	Error rel.
50	$2,36 \times 10^{-5}$	$2,36 \times 10^{-5}$	0 %
100	$4,68 \times 10^{-5}$	$4,69 \times 10^{-5}$	0,21 %
150	$7,07 \times 10^{-5}$	$7,08 \times 10^{-5}$	0,14 %
200	$9,42 \times 10^{-5}$	$9,46 \times 10^{-5}$	0,42 %
Geometría de papel Whatman #1			
Pot. eléc. [V]	Modelo multiescala v_x [m/s]	DNS v_x [m/s]	Error rel.
50	$5,85 \times 10^{-5}$	$5,85 \times 10^{-5}$	0 %
100	$1,17 \times 10^{-4}$	$1,16 \times 10^{-4}$	0,86 %
150	$1,75 \times 10^{-4}$	$1,76 \times 10^{-4}$	0,57 %
200	$2,34 \times 10^{-4}$	$2,35 \times 10^{-4}$	0,42 %

Tabla 4.1: Valores numéricos de velocidad tangencial obtenidos mediante el modelo multiescala y DNS.

Las soluciones correspondientes a la velocidad, potencial eléctrico y campo eléctrico obtenidas mediante la solución DNS, se muestran en las Figuras 4.5 y 4.6.

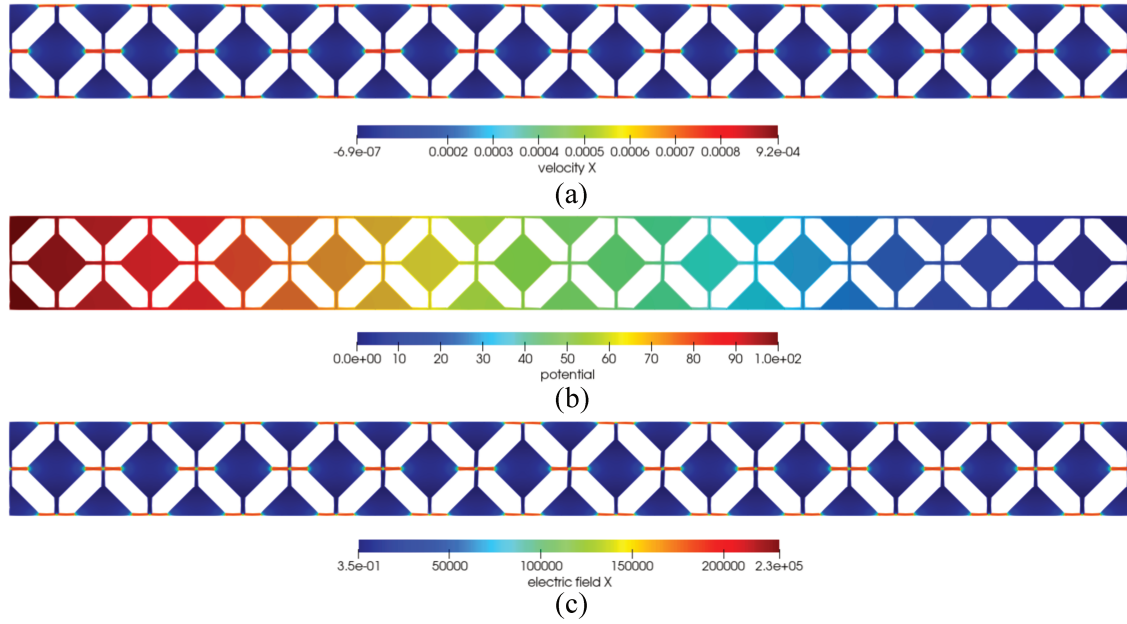


Figura 4.5: Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Flujo Electroosmótico para papel Munktell 00A: (a) Velocidad tangencial al flujo; (b) Campo potencial eléctrico; (c) Campo eléctrico en dirección tangencial al flujo.

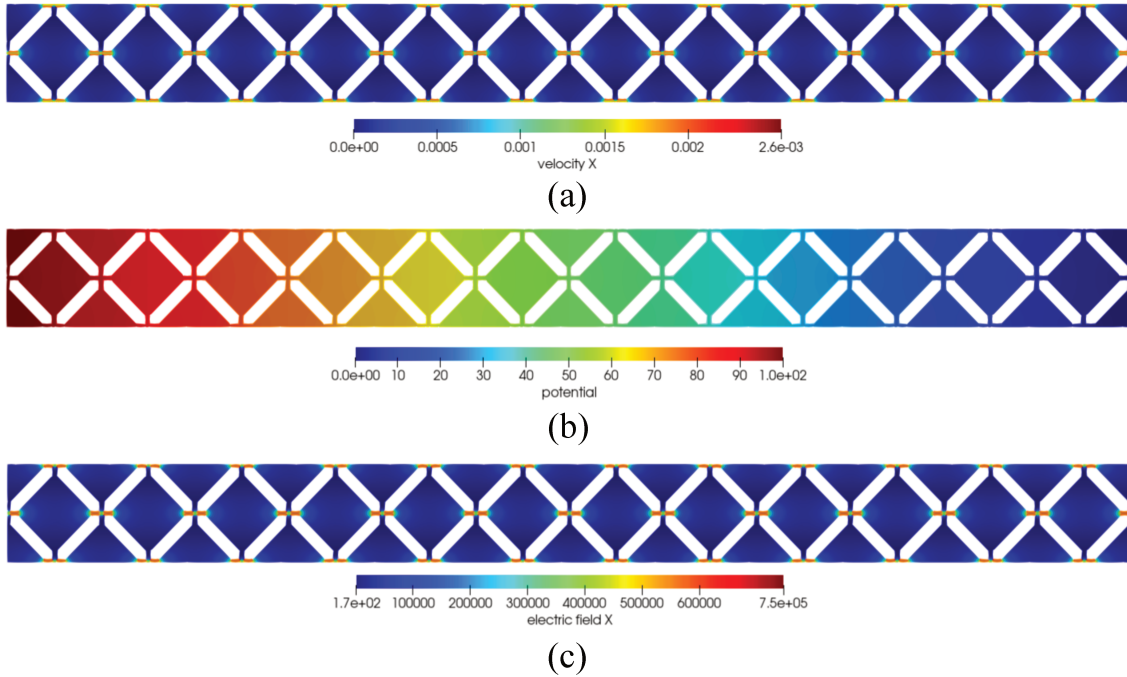


Figura 4.6: Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Flujo Electroosmótico para papel Whatman #1: (a) Velocidad tangencial al flujo; (b) Campo potencial eléctrico; (c) Campo eléctrico en dirección tangencial al flujo.

Como se puede ver, la componente tangencial de la velocidad exhibe un comportamiento periódico, tal como se muestra en las Figuras 4.5(a) y 4.6(a). Este patrón responde

a la homogeneidad del gradiente de potencial eléctrico aplicado sobre la microestructura periódica.

Asimismo, en las Figuras 4.5(b) y 4.6(b) se observa una variación lineal decreciente del potencial eléctrico a lo largo del dominio. La correlación entre ambos modelos confirma la capacidad de la formulación propuesta para capturar la física del transporte electrosmótico en medios heterogéneos.

4.3.4. Problema de flujo mixto

Adicionalmente, se evaluó la capacidad predictiva del modelo multiescala en un escenario de flujo mixto, caracterizado por la acción simultánea de un gradiente de presión y un campo eléctrico externo. La configuración del problema se basa en las condiciones de contorno definidas previamente para el estudio del flujo electrosmótico, descritas en la Sección 4.3.3, a las que se incorpora la contribución del gradiente de presión en la resolución del problema fluidodinámico.

Bajo las hipótesis consideradas en esta tesis (flujo estacionario, fluido newtoniano, propiedades del material constantes y régimen de Stokes), las ecuaciones que gobiernan el problema son lineales. En consecuencia, resulta aplicable el principio de superposición y la velocidad de Darcy a escala macroscópica puede expresarse como la suma de las contribuciones electrosmótica e hidráulica:

$$\vec{v} = \overline{\overline{k^{eo}}} \cdot \vec{E} - \frac{\overline{\overline{k}}}{\mu} \cdot \nabla p \quad (4.22)$$

donde $\overline{\overline{k^{eo}}}$ es el tensor de permeabilidad electrosmótica, $\overline{\overline{k}}$ es el tensor de permeabilidad de Darcy, $\vec{E}$ es el campo eléctrico macroscópico, ∇p es el gradiente de presión y μ es la viscosidad dinámica del fluido. Esta expresión permite identificar separadamente la contribución de cada mecanismo y, al mismo tiempo, determinar la respuesta resultante cuando ambos actúan de manera simultánea.

Con el propósito de validar la respuesta del modelo en este régimen acoplado, sus predicciones se compararon con simulaciones numéricas directas implementadas en Elmer FEM. Para ello, se resolvieron explícitamente los dominios correspondientes a las microestructuras de los papeles Munktell 00A y Whatman #1, asociadas a los casos RVE₁ y RVE₂, respectivamente. Las comparaciones se realizaron para diferentes combinaciones de presión y potencial eléctrico aplicadas de manera simultánea. A modo representativo, la Figura 4.7 presenta los campos obtenidos mediante la simulación directa para la geometría

del papel Munktell 00A, considerando una diferencia de presión de 250 Pa y una diferencia de potencial de 100 V.

A partir del procedimiento de homogeneización se determinaron las propiedades efectivas necesarias para formular y resolver el problema a escala macroscópica. En particular, las contribuciones asociadas a las permeabilidades de Darcy y electroosmótica se combinaron para calcular la velocidad resultante bajo cada condición de carga. Los valores obtenidos para la componente tangencial de la velocidad se presentan en la Tabla 4.2, junto con los resultados correspondientes de las simulaciones DNS.

La proximidad entre los valores calculados mediante ambos enfoques demuestra que el modelo multiescala reproduce adecuadamente la respuesta fluidodinámica producida por la acción simultánea de los mecanismos hidráulico y electroosmótico. Para la microestructura representativa del papel Munktell 00A, los errores relativos obtenidos para las distintas combinaciones de presión y potencial eléctrico se encuentran entre el 2,75 % y el 3,66 %. Por su parte, para la geometría correspondiente al papel Whatman #1, los errores relativos varían entre el 6,76 % y el 8,13 %.

Geometría de papel Munktell 00A				
Pot. eléc. [V]	Presión [Pa]	Multiescala v_x [m/s]	DNS v_x [m/s]	Error rel.
50	50	$2,83 \times 10^{-5}$	$2,73 \times 10^{-5}$	3,66 %
100	100	$5,67 \times 10^{-5}$	$5,47 \times 10^{-5}$	3,66 %
150	150	$8,50 \times 10^{-5}$	$8,20 \times 10^{-5}$	3,66 %
200	200	$1,13 \times 10^{-4}$	$1,09 \times 10^{-4}$	3,67 %
100	250	$7,10 \times 10^{-5}$	$6,91 \times 10^{-5}$	2,75 %
Geometría de papel Whatman #1				
Pot. eléc. [V]	Presión [Pa]	Multiescala v_x [m/s]	DNS v_x [m/s]	Error rel.
50	50	$6,66 \times 10^{-5}$	$6,17 \times 10^{-5}$	7,94 %
100	100	$1,33 \times 10^{-4}$	$1,23 \times 10^{-4}$	8,13 %
150	150	$2,00 \times 10^{-4}$	$1,85 \times 10^{-4}$	8,10 %
200	200	$2,66 \times 10^{-4}$	$2,47 \times 10^{-4}$	7,69 %
100	250	$1,58 \times 10^{-4}$	$1,48 \times 10^{-4}$	6,76 %

Tabla 4.2: Valores de velocidad tangencial del problema de flujo mixto obtenidos mediante Modelo multiescala y DNS.

Asimismo, se observa que las velocidades obtenidas son superiores a las reportadas

en la Tabla 4.1. Este comportamiento resulta consistente desde el punto de vista físico, dado que el gradiente de presión impuesto actúa en la misma dirección que el gradiente de potencial eléctrico. En consecuencia, ambos mecanismos contribuyen de manera aditiva al transporte del fluido, incrementando la velocidad neta de la corriente respecto del caso en que únicamente se considera el flujo electroosmótico.

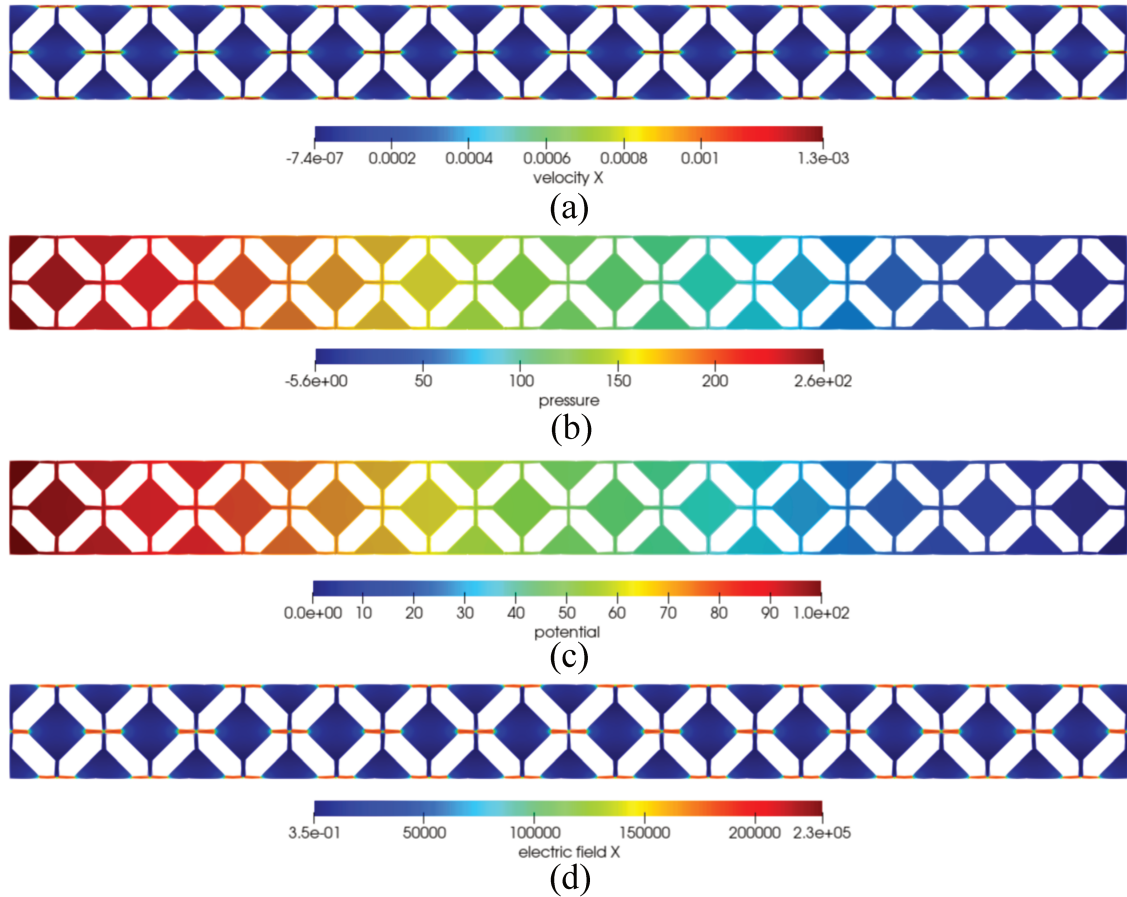


Figura 4.7: Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Flujo Mixto: (a) Velocidad tangencial al flujo; (b) Campo de presión; (c) Campo potencial eléctrico; (d) Campo eléctrico en dirección tangencial al flujo.

4.3.5. Problema eléctrico con término fuente

Con el objetivo de evaluar la capacidad predictiva del modelo multiescala en un escenario más exigente, se considera en esta Sección el problema de flujo electroosmótico acoplado a un campo eléctrico con término fuente uniforme en la microescala. A diferencia del caso clásico, donde el potencial eléctrico presenta una variación lineal impuesta por un gradiente macroscópico constante, la incorporación de una fuente volumétrica en el dominio fluido conduce a una distribución espacial no lineal del potencial eléctrico.

En este contexto, se impone como condición de borde un gradiente macroscópico de potencial eléctrico de 100 V, mientras que en la microescala se introduce una fuente uniforme de magnitud 100×10^{-6} V en la fase fluida. Esta configuración permite analizar no solo el campo de velocidades inducido por el flujo electroosmótico, sino también la respuesta del campo eléctrico y su correcta homogenización en presencia de términos volumétricos.

A continuación se presenta la solución exacta para la velocidad, presión y campo eléctrico del problema a nivel macroscópico, la cual se obtiene de manera analítica y se emplea como referencia para evaluar la consistencia y el alcance del modelo multiescala propuesto:

$$\begin{aligned}
 \vec{v} &= \frac{k_{11}^{eo} \cdot \vec{E} - k_{11}^* \cdot \nabla p}{L} \\
 p &= \frac{k_{11}^{eo} f x^2}{2 \Sigma k_{11}^*} - \frac{(k_{11}^{eo} f L^2 + 2 \Sigma k_{11}^* [p_{x=0} - p_{x=L}]) x}{2 \Sigma k_{11} L} + p_{x=0} \\
 \phi &= \phi_{x=0} - \frac{f x^2}{2 \Sigma} + \frac{(f L^2 - 2 \Sigma [\phi_{x=0} - \phi_{x=L}]) x}{2 \Sigma L}
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Los perfiles de potencial eléctrico, presión y velocidad obtenidos para el problema considerado, junto con su comparación frente a la solución numérica directa (DNS), se muestran en la Figura 4.8. La solución macroscópica se representa mediante línea punteada azul, mientras que la línea roja corresponde a un corte en dirección x realizado en el centro del dominio DNS. Los círculos indican el valor medio de la variable correspondiente en cada celda del DNS, permitiendo así una comparación punto a punto entre ambas aproximaciones.

Cabe destacar que, a nivel macroscópico, el problema resultante es homogéneo. Sin embargo, al introducir una fuente volumétrica uniforme en la microescala, el comportamiento del potencial eléctrico y de la presión difiere sustancialmente respecto de los casos analizados previamente. En particular, la presencia de la fuente genera una variación espacial no lineal del potencial, la cual se traduce en un campo de presión inducido que no es impuesto externamente.

A diferencia de los casos anteriores, donde los gradientes de potencial eléctrico eran constantes y, en consecuencia, la velocidad inducida permanecía uniforme a lo largo del dominio, en este escenario la solución macroscópica presenta una variación cuadrática. Esta dependencia parabólica se debe a la incorporación de la fuente uniforme en la ecuación eléctrica, lo que produce que el gradiente del potencial varíe espacialmente y, en consecuencia, que la velocidad electroosmótica impuesta en cada inclusión microscópica también cambie a lo largo del dominio.

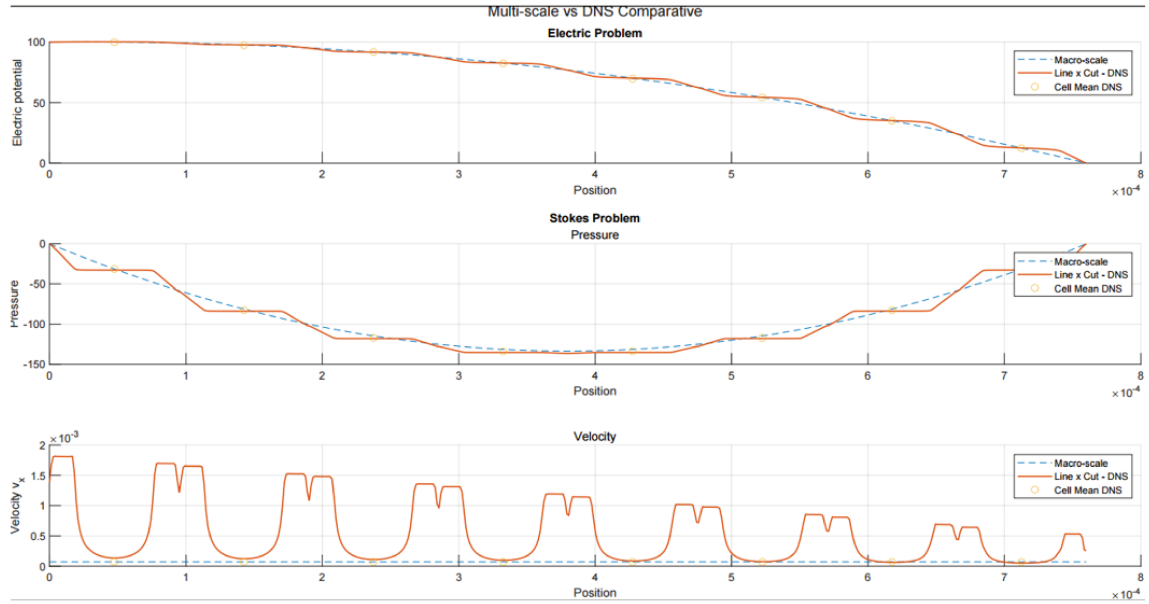


Figura 4.8: Solución DNS vs Multiescala de problema de flujo electroosmótico con fuente micro homogénea para la configuración de celda del papel Munktell 00A: (a) Campo potencial eléctrico; (b) Campo de presiones; (c) Velocidad tangencial al flujo.

Asimismo, se observa la aparición de un gradiente macroscópico de presión, el cual es resultado del problema acoplado y no una condición impuesta. Es decir, se mantiene la condición $p = 0$ en los bordes del dominio.

La comparación punto a punto que se muestra en la Figura 4.8 evidencia que el modelo multiescala reproduce adecuadamente tanto la variación cuadrática del potencial como el comportamiento inducido en la presión y en la velocidad, mostrando una excelente concordancia con los resultados obtenidos mediante DNS.

4.4. Síntesis

En este capítulo se desarrolló el modelado del flujo electroosmótico en medios microestructurados, abordando tanto sus fundamentos físicos como su formulación multiescala. Bajo la hipótesis de doble capa eléctrica delgada, el fenómeno se representó mediante la condición de deslizamiento de Helmholtz-Smoluchowski, lo que permitió incorporar el efecto electrocinético en el problema fluidodinámico de manera eficiente. A partir de esta base, se formuló un modelo multiescala que vincula la descripción microscópica (regida por las ecuaciones de Stokes y la conservación de carga) con una representación macroscópica en términos de propiedades efectivas, en particular la permeabilidad electroosmótica.

Los resultados obtenidos validaron la existencia de un volumen representativo ele-

mental (RVE) y demostraron la capacidad del modelo para reproducir la física del fenómeno mediante comparaciones con datos experimentales y simulaciones numéricas directas (DNS). Asimismo, se evidenció su robustez en escenarios más complejos, como el flujo mixto y problemas con término fuente en el campo eléctrico, donde se logró capturar adecuadamente comportamientos no lineales. En conjunto, la formulación propuesta constituye una herramienta precisa y computacionalmente eficiente para el análisis del transporte electroosmótico en medios porosos.

Capítulo 5

Modelado Multiescala aplicado a problemas de Transporte de un Escalar en Medios Porosos de Papel

5.1. Introducción

La modelización precisa del transporte de concentración en medios porosos es fundamental en diversas áreas de la ingeniería y las geociencias. Un ejemplo relevante se encuentra en los sistemas lab-on-a-chip, tal como se describe en Panigrahi [2016], donde la mezcla eficiente de reactantes, por ejemplo, la fragmentación de proteínas mediante enzimas para su posterior identificación por espectrometría de masas, constituye un proceso clave para el correcto funcionamiento de los dispositivos.

En este capítulo, el fenómeno de transporte al que se hace referencia es el de un soluto que viaja desde regiones de alta concentración hacia regiones de baja concentración, bajo una velocidad aplicada ([Bear and Cheng, 2010]). La concentración (C , también denominada concentración másica) se expresa en unidades de masa o concentración de soluto por unidad de volumen de solución (por ejemplo, mol/l o mg/l).

5.1.1. Flujo difusivo

En un medio homogéneo, el flujo difusivo de masa se encuentra directamente relacionado con el gradiente de concentración. En el caso de soluciones diluidas, esta relación puede considerarse lineal, siendo la difusividad másica la constante de proporcionalidad que caracteriza el transporte del soluto en el medio. Este enfoque es análogo a la relación entre el flujo de calor y el gradiente de temperatura establecida por la ley de Fourier para la conducción térmica. En el contexto del transporte de masa, dicha relación lineal se expresa mediante la ley de Fick, que puede escribirse como:

$$\vec{q}_{\text{dif}} = -\overline{\overline{D}} \cdot \nabla C \quad (5.1)$$

donde $\vec{q}_{\text{dif}}$ representa el vector de flujo difusivo de masa, C es la concentración de la especie considerada y $\overline{\overline{D}}$ es el tensor de difusividad másica. El signo negativo indica que el transporte difusivo ocurre en la dirección de concentraciones decrecientes, es decir, desde regiones de mayor concentración hacia regiones de menor concentración.

El tensor de difusividad incorpora la influencia de la microestructura del medio sobre el proceso de transporte y, en general, puede presentar componentes diferentes en cada dirección espacial, reflejando posibles anisotropías. En el caso particular de medios isotrópicos, el tensor se reduce a un escalar multiplicado por el tensor identidad, recuperándose la forma clásica de la ley de Fick con difusividad constante.

En el contexto de medios porosos, el flujo difusivo macroscópico se describe mediante una difusividad efectiva que integra los efectos geométricos de la microestructura sobre el transporte. En particular, dicha difusividad efectiva depende de la difusividad molecular y de parámetros morfológicos como la porosidad, la constricción y la tortuosidad, que introducen una resistencia adicional al transporte respecto del medio libre, tal como se expresa en la Ec. (3.11), desarrollada en el Capítulo 3.

5.1.2. Flujo advectivo

El flujo advectivo de masa está asociado al transporte de la especie disuelta debido al movimiento del fluido portador. A diferencia del transporte difusivo, que es impulsado por gradientes de concentración, la advección depende directamente del campo de velocidades del fluido y constituye el mecanismo dominante cuando el movimiento del fluido es significativo.

En un medio continuo, el flujo advectivo puede expresarse como el producto entre la

concentración de la especie y la velocidad del fluido, adoptando la forma:

$$\vec{q}_{\text{adv}} = \vec{v}C \quad (5.2)$$

donde $\vec{q}_{\text{adv}}$ representa el vector de flujo advectivo de masa y $\vec{v}$ es el vector velocidad del fluido. Esta expresión indica que la especie es transportada junto con el fluido, manteniendo localmente su concentración.

En el contexto de medios porosos, el campo de velocidades corresponde a una velocidad promedio o macroscópica, obtenida a partir del flujo a través del espacio vacío del medio. En consecuencia, el flujo advectivo de masa refleja el transporte global de la especie a lo largo de las trayectorias del fluido dentro de la microestructura porosa.

5.1.3. Número de Péclet

El número de Péclet es un parámetro adimensional que permite caracterizar el régimen dominante del transporte de masa, al cuantificar la relación entre los mecanismos advectivo y difusivo. En particular, este número expresa la importancia del transporte debido al movimiento del fluido frente al transporte asociado a gradientes de concentración.

Para el transporte de una especie disuelta, el número de Péclet se define como:

$$Pe = \frac{vL}{D} \quad (5.3)$$

donde v es una velocidad característica del fluido, L es una longitud característica del sistema y D es la difusividad másica de la especie considerada. La elección de estas magnitudes depende del problema físico analizado y de la escala de interés.

Valores pequeños del número de Péclet ($Pe \ll 1$) indican que el transporte difusivo predomina sobre el advectivo. Por el contrario, valores elevados ($Pe \gg 1$) corresponden a regímenes en los que la advección constituye el mecanismo principal de transporte. Para valores intermedios, ambos mecanismos presentan una importancia comparable y deben considerarse simultáneamente. Estos límites proporcionan una clasificación general del régimen de transporte, aunque no constituyen fronteras estrictas y su interpretación debe realizarse teniendo en cuenta las características particulares del sistema.

En medios porosos, la definición del número de Péclet presenta algunas particularidades debido a la complejidad geométrica y a la heterogeneidad del espacio vacío, las cuales modifican tanto el campo de velocidades como los caminos disponibles para la difusión (Bear and Cheng [2010]). En particular, deben especificarse la escala de análisis, la

longitud característica, la definición de velocidad y el coeficiente de difusión utilizados. En este contexto, la longitud característica suele asociarse a la escala de poro o a la dimensión de la microestructura representativa, mientras que la difusividad empleada corresponde generalmente a una difusividad efectiva que incorpora los efectos de la porosidad, la tortuosidad y la constricción de los caminos de transporte (Holzer et al. [2023]).

En el marco del modelo multiescala desarrollado en esta tesis, el número de Péclet no se emplea como un criterio único para determinar la validez de la formulación macroscópica. Su análisis permite caracterizar el régimen de transporte en cada escala e interpretar la importancia relativa de las contribuciones advectiva, difusiva y dispersiva. Sin embargo, la aplicabilidad del modelo también requiere verificar la existencia de una separación suficiente entre las escalas microscópica y macroscópica, la representatividad del RVE y la adecuada descripción de los gradientes y las capas límite de concentración.

Por consiguiente, los números de Péclet microscópico y macroscópico proporcionan información complementaria y no deben interpretarse como magnitudes equivalentes. Su evaluación conjunta permite analizar con mayor precisión los mecanismos que gobiernan el transporte y establecer el alcance de las hipótesis adoptadas en la formulación multiescala.

5.1.4. Flujo dispersivo

El flujo dispersivo es un término macroscópico que describe el esparcimiento de una especie disuelta con respecto al movimiento promedio del fluido en un medio poroso. Tal como se expone en Bear and Cheng [2010], este flujo surge naturalmente al promediar el comportamiento microscópico dentro de un RVE. En general, este tipo de flujo es originado en las fluctuaciones de la velocidad microscópica y de la concentración respecto de sus valores promedio.

Desde el punto de vista físico, el flujo dispersivo es consecuencia de dos mecanismos que actúan simultáneamente a escala de poro. En primer lugar, la dispersión mecánica, generada por las variaciones espaciales del campo de velocidades dentro del espacio poroso. A nivel microscópico, la velocidad del fluido es nula en las paredes sólidas y alcanza valores máximos en el centro de los poros; además, la presencia de poros de diferentes tamaños y geometrías provoca desviaciones de las líneas de corriente respecto de la dirección macroscópica del flujo. En segundo lugar, la difusión molecular contribuye a suavizar las diferencias de concentración generadas por la dispersión mecánica, facilitando el intercambio de masa entre líneas de corriente adyacentes.

5.1.4.1. Difusión molecular

La difusión molecular atenúa o suaviza las diferencias de concentración generadas por la dispersión mecánica al facilitar el intercambio de masa entre líneas de corriente adyacentes. Bajo este principio, el soluto se mueve en la dirección decreciente del gradiente de concentración, proceso que ocurre incluso si no hay movimiento de la solución.

Dependiendo de la orientación del gradiente, este fenómeno se puede manifestar de dos formas:

- **Difusión longitudinal:** Ocurre cuando el gradiente de concentración es paralelo a la dirección principal del flujo (a lo largo de un tubo o canal). El movimiento molecular actúa en el mismo eje del movimiento global, tendiendo a homogeneizar la concentración a lo largo de la corriente.
- **Difusión transversal:** Ocurre cuando existe un gradiente de concentración perpendicular a la dirección del flujo (a través de la sección transversal del tubo o canal). En este caso, las moléculas e iones se desplazan lateralmente, mezclando el soluto entre las zonas rápidas y lentas del perfil de velocidades.

Este proceso depende intrínsecamente del tiempo, solo cesa cuando desaparecen los gradientes de concentración y cobra mayor relevancia dentro de la dispersión hidrodinámica a bajas velocidades de flujo.

5.1.4.2. Dispersión mecánica

En general, la dispersión mecánica es generada por las variaciones espaciales del campo de velocidades dentro del espacio poroso. Dichas variaciones se producen principalmente por tres factores: el rozamiento de las partículas de fluido con las paredes sólidas del medio, las diferencias de tamaños entre los canales, y la tortuosidad y ramificación del medio poroso (lo que genera una interferencia o desviaciones de las líneas de corriente respecto de la dirección macroscópica del flujo).

Para el caso general de un medio poroso anisotrópico, varios investigadores (Josseline [1958], Bear and Bachmat [1991]) han llegado a la conclusión de que el flujo dispersivo de un componente (por unidad de área de fluido) puede ser expresado como una ley de tipo Fickiando de la siguiente forma:

$$\vec{q}_{disp} = -\overline{\overline{D}}_{disp} \cdot \nabla C \quad (5.4)$$

donde $\overline{\overline{D}}_{disp}$ es el coeficiente de dispersión mecánica o coeficiente de dispersión. Este coeficiente es un tensor de segundo orden que relaciona el vector de flujo $\vec{q}_{disp}$ con la fuerza

motriz $-\nabla C$. Es importante resaltar que el coeficiente de dispersión no solo depende de la geometría microestructural del medio poroso y las propiedades del fluido, sino también del campo de velocidades macroscópico.

La expresión para los componentes (escrita de manera tensorial) del coeficiente de dispersión D_{ij}^{disp} ha sido derivada por diversos autores (Scheidegger [1961]), definiéndose como:

$$D_{ij}^{disp} = a_{ijkl} \frac{\overline{v_k^f \overline{v_l^f}}}{\overline{v^f}} f(Pe, r) \quad (5.5)$$

donde $\overline{v^f}$ es la magnitud de la velocidad media, y a_{ijkl} es la componente $ijkl$ de la dispersividad del medio poroso.

La función $f(Pe, r)$ se puede definir como:

$$f(Pe, r) = \frac{Pe}{Pe + 1 + r} \quad (5.6)$$

donde $r (= l_\alpha^E / \Delta_\alpha)$ representa la relación de las longitudes características dentro de un poro, en dirección del flujo y normal a este. Así, para casos donde $r = O(1)$, $f(Pe, r)$ incrementa en función de Pe pero a un ritmo decreciente. Por tanto, para $Pe \ll 1$, $f(Pe, r) = O(Pe)$, y para $Pe \gg 1$, $f(Pe, r) \approx 1$.

A su vez, el número de Péclet, definido en la Sección 5.1.3, queda definido en función del radio hidráulico (r_h) y la difusión molecular de la siguiente forma:

$$Pe \equiv \frac{\overline{v^f} r_h}{D_\mu} \quad (5.7)$$

En términos generales, para microfluídica en papel, es habitual encontrar en la literatura la aproximación $f \approx 1$ (Urteaga et al. [2018], Schaumburg et al. [2018], Gerlero et al. [2024]). Asimismo, se considera que la dispersividad longitudinal es mayor que la transversal ($a_L > a_T$), debido a que las variaciones de velocidad a lo largo de la dirección principal del flujo generan un mayor esparcimiento del soluto que los mecanismos de mezcla transversal, los cuales se encuentran parcialmente limitados por la difusión molecular.

5.2. Formulación multiescala

Para plantear la formulación multiescala, partimos del problema de físico de conservación de masa de un soluto dentro de un fluido (solvente) que fluye a través de un medio poroso. La cantidad de este soluto se mide en concentración volumétrica sobre el solvente.

Se consideran los dos fenómenos de transporte de la concentración descritos anteriormente: difusión y advección. Inicialmente, los efectos de fuentes másicas o términos

transitorios no son considerados. En este caso, el flujo de concentración en la microescala (definido como $\vec{q}_\mu$), es calculado de la siguiente forma:

$$\vec{q}_\mu = -\overline{\overline{D}}_\mu \cdot \nabla_{\vec{y}} C_\mu + \vec{v}_\mu C_\mu \quad (5.8)$$

donde C_μ es la concentración del soluto en la microescala, $\overline{\overline{D}}_\mu$ es el tensor de difusión molecular y $\vec{v}_\mu$ es el vector de velocidad del solvente.

En medios porosos, la difusividad másica efectiva difiere de la difusividad molecular. Mientras que la difusividad másica efectiva considera efectos geométricos asociados a la porosidad, tortuosidad y constricción de los caminos de transporte, la difusividad molecular es una propiedad física del sistema soluto-solvente, y cuantifica la facilidad con la que el soluto se dispersa en el fluido.

La descripción de la variable en la microescala está dada por:

$$C_\mu = C + \nabla_{\vec{x}} C \cdot \vec{y} + \tilde{C}_\mu \quad (5.9)$$

Si aplicamos el gradiente a la Ecuación (5.9), y asumiendo que las coordenadas $\vec{y}$ son baricéntricas, resulta:

$$\nabla_{\vec{y}} C_\mu = \nabla_{\vec{x}} C + \nabla_{\vec{y}} \tilde{C}_\mu \quad (5.10)$$

De manera análoga, podemos definir las funciones test o de variables de concentración virtuales:

$$\begin{aligned} \delta C_\mu &= \delta C + \delta \nabla_{\vec{x}} C \cdot \vec{y} + \delta \tilde{C}_\mu \\ \delta \nabla_{\vec{y}} C_\mu &= \delta \nabla_{\vec{x}} C + \delta \nabla_{\vec{y}} \tilde{C}_\mu \end{aligned} \quad (5.11)$$

A continuación, se plantean las ecuaciones de compatibilidad de variables macroescala y microescala. Para ello, la media volumétrica de la variable micro se iguala a la variable macro, de la siguiente manera:

$$\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{|\Omega_\mu|} C_\mu d\Omega = C \quad (5.12)$$

Considerando la Ecuación (5.9) y asumiendo que las coordenadas $\vec{y}$ son baricéntricas, podemos reducir la ecuación anterior a la siguiente forma:

$$\int_{\Omega_\mu} \tilde{C}_\mu d\Omega = 0 \quad (5.13)$$

El mismo procedimiento se debe aplicar al gradiente de concentración:

$$\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{|\Omega_\mu|} \nabla_{\vec{y}} C_\mu d\Omega = \nabla_{\vec{x}} C \quad (5.14)$$

Considerando la Ecuación (5.10) se obtiene:

$$\int_{\Omega_\mu} \nabla_{\vec{y}} \tilde{C}_\mu d\Omega = 0 \quad (5.15)$$

Aplicando el Teorema de la divergencia, resulta equivalente a considerar:

$$\int_{\Gamma_\mu} \tilde{C}_\mu \mathbf{n}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \quad (5.16)$$

De la misma forma, las variaciones virtuales quedan definidas como:

$$\int_{\Omega_\mu} \delta \tilde{C}_\mu d\Omega = 0 \quad \text{y} \quad \int_{\Gamma_\mu} \delta \tilde{C}_\mu \mathbf{n}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \quad (5.17)$$

El espacio solución y el espacio de variaciones virtuales admisibles se pueden escribir como:

$$\mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) = \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) = \left\{ \hat{C} \mid \hat{C} \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu), \int_{\Omega_\mu} \hat{C} d\Omega = 0, \int_{\Gamma_\mu} \hat{C} \mathbf{n}_\mu d\Gamma = 0 \right\} \quad (5.18)$$

La condición de compatibilidad variacional entre la macroescala y microescala (Principio de Hill–Mandel extendido), adopta la siguiente expresión:

$$\vec{q} \cdot \delta \nabla_{\vec{x}} C = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \vec{q}_\mu \cdot \left(\delta \nabla_{\vec{x}} C + \nabla_{\vec{y}} \delta \tilde{C}_\mu \right) d\Omega \quad \forall \delta \nabla_{\vec{x}} C \in \mathbb{R}^{ndim}, \forall \tilde{C}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \quad (5.19)$$

De la Ecuación (5.19) se obtienen las siguientes consecuencias:

- Problema variacional en la microescala:

Hallar $\tilde{C}_\mu \in \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \mid$

$$\int_{\Omega_\mu} \vec{q}_\mu \cdot \left(\delta \nabla_{\vec{x}} C + \nabla_{\vec{y}} \delta \tilde{C}_\mu \right) d\Omega \quad \forall \delta \tilde{C}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \quad (5.20)$$

- Ecuación de homogeneización:

$$\vec{q} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{|\Omega_\mu|} \vec{q}_\mu d\Omega \quad (5.21)$$

La formulación multiescala requiere la imposición de una condición de borde de media (Ec. (5.21)) para la determinación del flujo de concentración en la macroescala. El cálculo directo de esta condición mediante condensación estática resulta en una matriz de rigidez completamente densa, lo cual incrementa significativamente el costo computacional asociado a la resolución del problema.

Para la solución de este problema, es necesario el acoplamiento del problema fluidodinámico mencionado en la Sección 3 con el problema de transporte de un escalar, específicamente, concentración de una especie.

5.2.1. Tensor de difusividad efectiva

Al calcular la derivada del flujo de concentración ($\vec{q}$) con respecto al gradiente de concentración ($\nabla_x C$), se determina el tensor de difusividad efectivo ($\overline{\overline{D}}$) conforme a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial (\nabla_x C)} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \left(\int_{\Omega_\mu} -\overline{\overline{D}}_\mu d\Omega + \int_{\Omega_\mu} -\overline{\overline{D}}_\mu \cdot \frac{\partial \nabla_{\vec{y}} \tilde{C}_\mu}{\partial (\nabla_x C)} d\Omega + \dots \right. \\ \left. \int_{\Omega_\mu} \vec{v}_\mu \otimes \vec{y} d\Omega + \int_{\Omega_\mu} \vec{v}_\mu \otimes \frac{\partial \tilde{C}_\mu}{\partial (\nabla_x C)} d\Omega \right) \quad (5.22)$$

El desarrollo de la Ecuación (5.22) muestra que el tensor resultante es la suma de dos componentes principales: la contribución dominante del transporte difusivo (representada en la primera mitad de la ecuación, D_{Dxx}) y la contribución del transporte advectivo (representada en la segunda mitad, D_{Axx}), las cuales contribuyen en el cálculo del tensor de difusividad.

5.3. Resultados

5.3.1. Problema de flujo difusivo

En esta Sección se analiza la respuesta difusiva homogeneizada de las microestructuras de papel descritas en el Capítulo 3 (RVE₁ y RVE₂). Para tal fin, se resolvió el problema de equilibrio estacionario imponiendo un gradiente macroscópico de concentración constante en todo el dominio. Bajo estas condiciones, el transporte en la microescala queda gobernado exclusivamente por la ley de Fick, desestimando aportes advectivos y efectos dispersivos.

La resolución numérica del problema multiescala permitió obtener el campo de concentraciones para las geometrías correspondientes a Munktell 00A y Whatman #1. Como se observa en las Figuras 5.1(a) y 5.2(a), los resultados evidencian una desviación local de los vectores de flujo en las zonas circundantes a la fase sólida y en las zonas de constricción. Estas variaciones ponen de manifiesto la influencia que posee la topología microestructural sobre la dinámica del transporte a nivel micro.

Mediante el procedimiento de homogeneización se determinó la componente efectiva D_{xx}^0 del tensor de difusividad másica del problema netamente difusivo. La notación con superíndice 0 se adopta con el fin de diferenciar este coeficiente del tensor efectivo obtenido para el problema advectivo-difusivo, D_{xx} . Los valores obtenidos resultaron en $1,83 \times 10^{-10}$ [m^2/s] para Munktell 00A y $3,26 \times 10^{-10}$ [m^2/s] para Whatman #1. La mayor difusividad

efectiva registrada en este último caso refleja una microestructura más favorable al transporte, asociada a una mejor conectividad y a menores efectos de constricción, tal como se aprecia en las Figuras 5.1 y 5.2.

A partir del valor calculado de D_{xx}^0 , junto con la difusividad molecular ($D_\mu = 1,446\,48 \times 10^{-9} [m^2/s]$) y la porosidad correspondiente a cada caso, se estimó el factor de constricción (β), definido en la Sección 3.1.6. En este análisis se adopta la hipótesis de tortuosidad unitaria ($\tau = 1$), considerando que los efectos asociados a la desviación de la trayectoria del flujo, y demás efectos geométricos, quedan incorporados implícitamente en las propiedades efectivas obtenidas por homogeneización. En consecuencia, no resulta necesario introducir un factor de tortuosidad adicional.

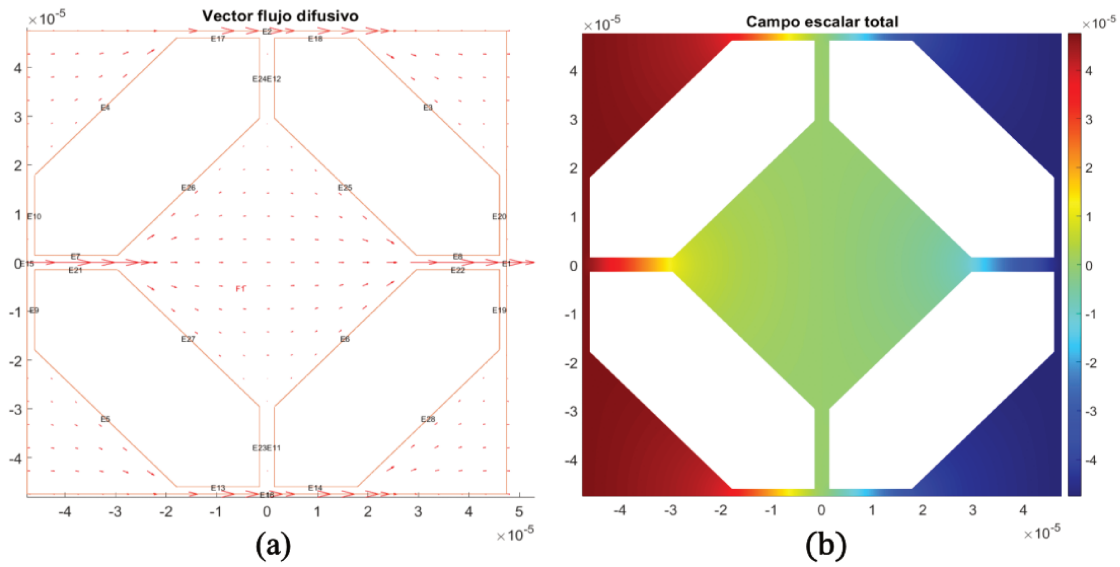


Figura 5.1: Resultados del modelo multiescala para el problema de transporte puramente difusivo para la geometría de papel Munktell 00A: (a) Vector de flujo difusivo; (b) Campo escalar de concentración.

Los valores de β obtenidos se reportan en la Tabla 3.3. Se observa que los mismos se encuentran dentro del rango reportado en la bibliografía para los papeles correspondientes, lo que respalda la consistencia física del modelo y la validez de la metodología adoptada.

Es importante destacar que los valores obtenidos para el tensor de difusividad efectiva resultan menores que la difusividad molecular, lo cual posee una interpretación física consistente en el contexto de un problema puramente difusivo. En efecto, aunque el transporte local ocurre con difusividad molecular D_μ , la microestructura del problema introduce restricciones que dificultan el movimiento efectivo de las especies a nivel de la macroescala. Propiedades como la tortuosidad de los caminos de difusión, la reducción del área disponi-

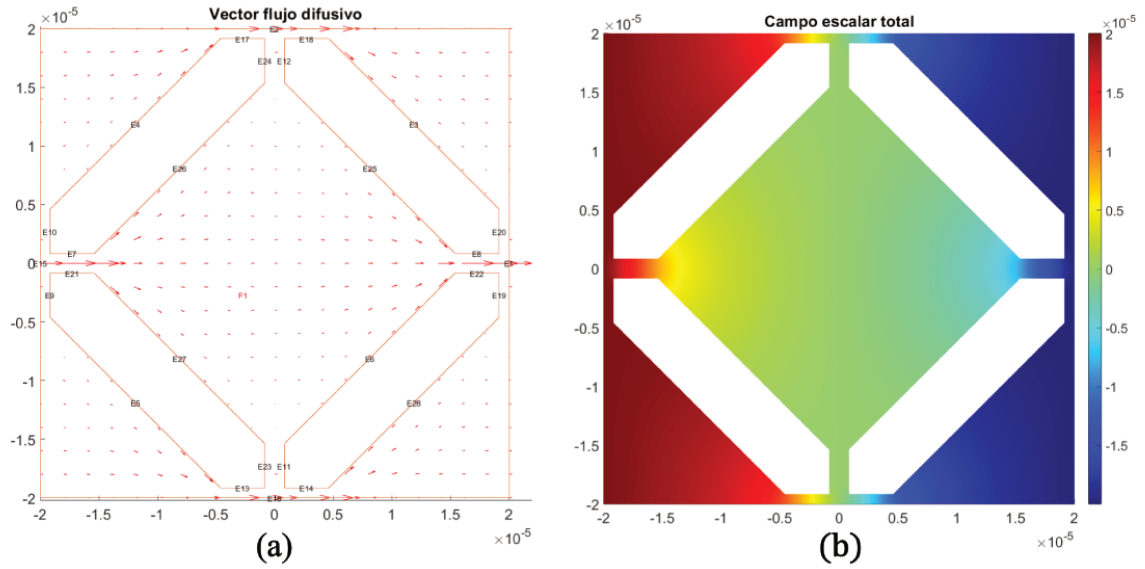
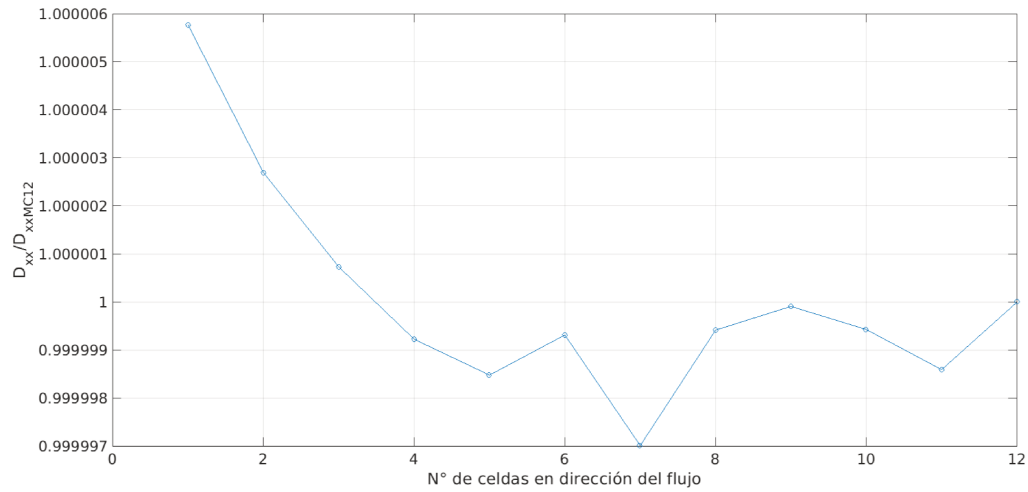


Figura 5.2: Resultados del modelo multiescala para el problema de transporte puramente difusivo para la geometría de papel Whatmann #1: (a) Vector de flujo difusivo; (b) Campo escalar de concentración.

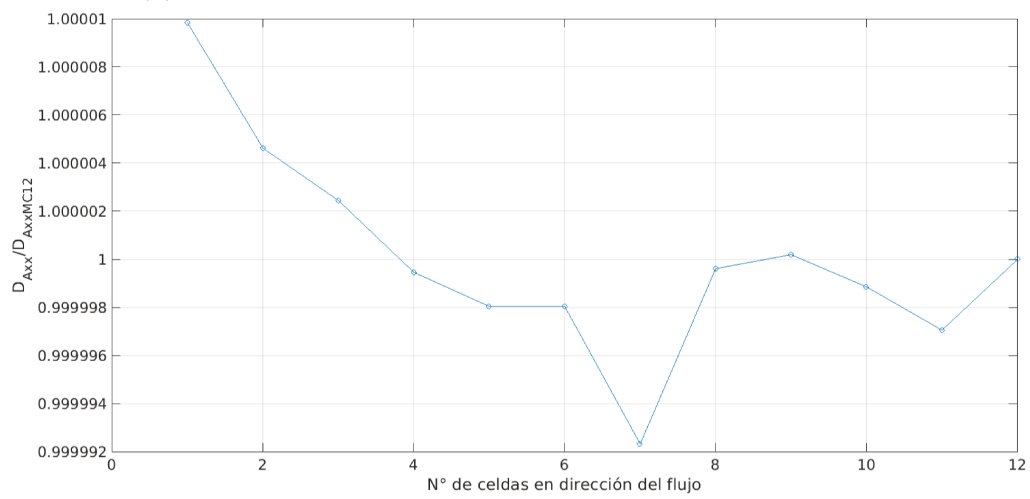
ble para transporte y la existencia de obstáculos sólidos obligan a las partículas a recorrer trayectorias más largas e irregulares que en un medio homogéneo libre. Como consecuencia, el flujo difusivo promedio inducido por un gradiente macroscópico disminuye, dando lugar a coeficientes efectivos inferiores a D_μ . Por tanto, la reducción observada en el tensor efectivo puede interpretarse como una manifestación macroscópica de la resistencia al transporte impuesta por la geometría interna del medio.

5.3.2. Validación de existencia del Elemento de Volumen Representativo

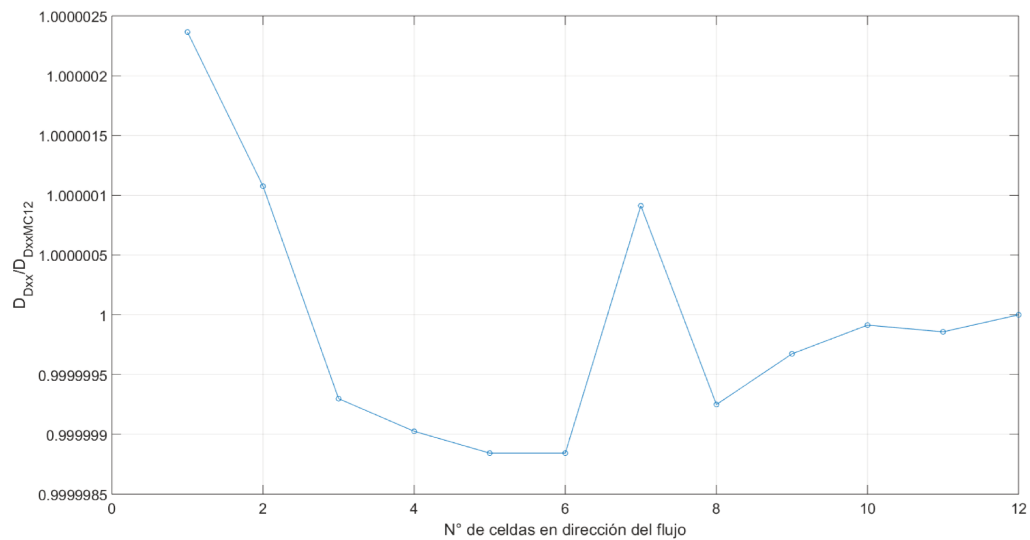
Con el propósito de evaluar la representatividad de las geometrías propuestas para el problema de transporte advectivo-difusivo, se analizó la convergencia del tensor efectivo de difusividad al incrementar el tamaño del dominio en la dirección principal del flujo. El estudio se centró en la componente longitudinal D_{xx} , considerando por separado sus contribuciones difusiva y advectiva, a fin de determinar la influencia del tamaño del dominio sobre cada uno de estos términos. Los dominios de tamaño creciente se construyeron mediante la repetición periódica de la microcelda base. Para cada configuración se resolvió el problema en la microescala de transporte y se calcularon las propiedades efectivas correspondientes.



(a) Tensor de difusividad efectivo en dirección tangencial al flujo.

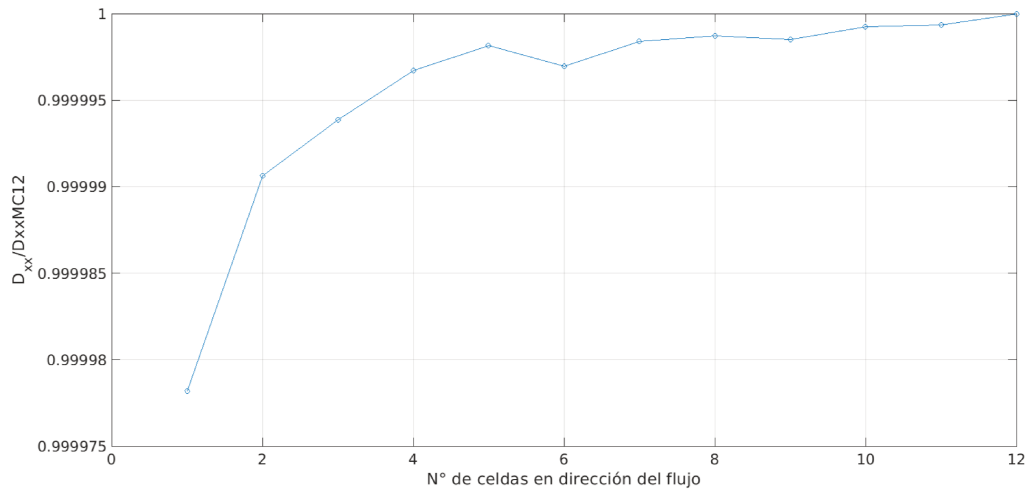


(b) Contribución advectiva al tensor de difusividad efectivo en dirección tangencial al flujo.

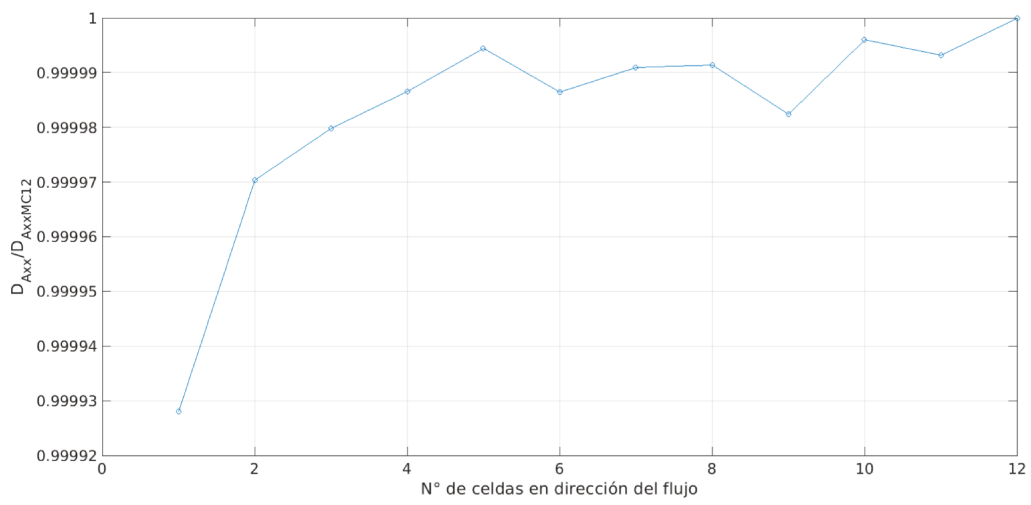


(c) Contribución difusiva al tensor de difusividad efectivo en dirección tangencial al flujo.

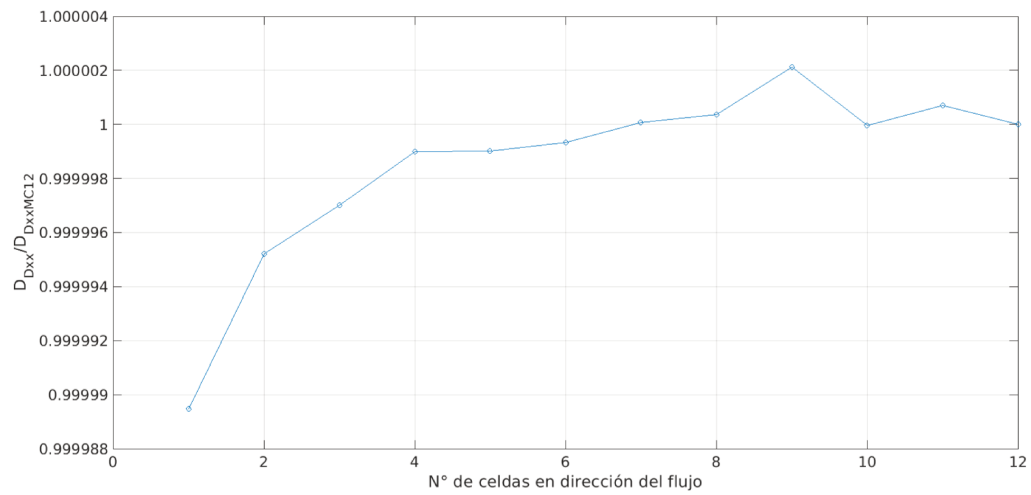
Figura 5.3: Gráficas de convergencia de las propiedades efectivas para la geometría de papel Munktell 00A (RVE_1).



(a) Tensor de difusividad efectivo en dirección tangencial al flujo.



(b) Contribución advectiva al tensor de difusividad efectivo en dirección tangencial al flujo.



(c) Contribución difusiva al tensor de difusividad efectivo en dirección tangencial al flujo.

Figura 5.4: Gráficas de convergencia de las propiedades efectivas para la geometría de papel Whatman #1 (RVE_2).

Las Figuras 5.3 y 5.4 presentan las curvas de convergencia obtenidas para las microestructuras asociadas a los casos RVE_1 y RVE_2 , respectivamente. La estabilización de las propiedades evaluadas al aumentar el tamaño del dominio permite establecer que las microestructuras propuestas contienen información geométrica suficiente para representar la respuesta efectiva del transporte advectivo-difusivo en la dirección principal del flujo, bajo las condiciones analizadas.

5.3.3. Estudio de la influencia de la Condición de borde de Media

La imposición de la condición de media constituye un aspecto esencial para garantizar la consistencia física y matemática de la formulación multiescala del problema de transporte escalar. Esta condición establece la conexión entre la variación macroscópica del campo escalar y su distribución local en la microestructura. En consecuencia, de no satisfacerse, el problema microscópico deja de representar adecuadamente el estado macroscópico impuesto.

Desde el punto de vista matemático, esta relación introduce una restricción sobre los campos escalares microscópicos admisibles: únicamente aquellos cuyo gradiente medio volumétrico coincida con el gradiente macroscópico prescrito pueden considerarse admisibles en el marco de la formulación multiescala (Souza Neto and Feijóo [2010]).

En este marco, se supone que el gradiente macroscópico del campo escalar en un punto, ∇C , coincide con el promedio volumétrico del gradiente del campo microscópico, ∇C_μ , dentro del RVE. Como se indicó en la Sección 5.2, el campo escalar microscópico, C_μ , se descompone en una contribución macroscópica homogénea de primer orden y una parte fluctuante, $\tilde{C}_\mu$.

Para satisfacer la condición de media previamente establecida, es necesario imponiendo que el promedio volumétrico del gradiente asociado a la parte fluctuante sea nulo. Esta restricción garantiza que la fluctuación microscópica describa únicamente las perturbaciones locales producidas por la heterogeneidad de la microestructura, sin modificar el gradiente macroscópico impuesto.

Adicionalmente, la condición de media constituye un requisito necesario para el cumplimiento del Principio de Hill-Mandel. La equivalencia energética entre escalas solo se verifica cuando el campo de deformaciones microscópicas es cinemáticamente admisible, es decir, cuando satisface la condición de promedio. De no cumplirse esta restricción, se compromete el balance energético entre la macro y la microestructura.

Como se detalla cuando se introduce la Ecuación (5.21), el cálculo directo de esta condición por condensación estática resulta muy costoso desde el punto de vista computacional, puesto que genera una matriz completamente llena. Para evitar este inconveniente, se implementan dos metodologías alternativas para la aplicación de la condición de borde de media:

- (I). **Imposición mediante Multiplicadores de Lagrange:** Este enfoque incorpora la restricción de media directamente en la formulación variacional.
- (II). **Aproximación con corrección a posteriori:** Consiste en resolver el problema sin la imposición de la condición de borde de media, fijando la concentración en un punto específico del dominio. Posteriormente, y antes del proceso de homogeneización, se aplica una corrección para ajustar la media deseada.

Adicionalmente, se consideraron dos variantes con fines exclusivamente comparativos, orientadas a evaluar la influencia de la corrección de media en el segundo enfoque. En estos casos, el problema advectivo-difusivo se resolvió fijando la concentración en un único punto del dominio, pero sin aplicar la corrección posterior del valor medio. Estas configuraciones no constituyen metodologías propuestas, sino escenarios de contraste destinados a cuantificar el impacto de omitir la condición de media en el cálculo de las propiedades efectivas.

Los resultados obtenidos mediante las distintas estrategias se presentan en la Figura 5.5. En el caso de la contribución difusiva del tensor de difusividad efectiva, no se observan diferencias apreciables entre las dos metodologías propuestas: la imposición de la condición de media mediante multiplicadores de Lagrange y la fijación de la concentración en el centro del dominio con una corrección a posteriori. Esto indica que ambas estrategias permiten recuperar de manera equivalente la contribución difusiva de la propiedad homogeneizada.

Para la contribución advectiva, en cambio, la equivalencia entre ambas metodologías se obtiene únicamente cuando la fijación nodal se complementa con la corrección posterior del valor medio. En efecto, los resultados calculados mediante multiplicadores de Lagrange coinciden con aquellos obtenidos al fijar la concentración en el centro del dominio y aplicar posteriormente la corrección correspondiente.

Por el contrario, cuando se omite dicha corrección, se observan desviaciones significativas tanto para la fijación realizada en el centro como para aquella aplicada en un punto excéntrico del dominio. Este comportamiento se manifiesta principalmente en la

contribución advectiva, debido a que esta depende del valor del campo microscópico de concentración y no únicamente de su gradiente. En consecuencia, una modificación constante del campo, aunque no altere su gradiente ni la contribución difusiva, puede modificar el flujo advectivo promedio y, por lo tanto, la propiedad efectiva calculada.

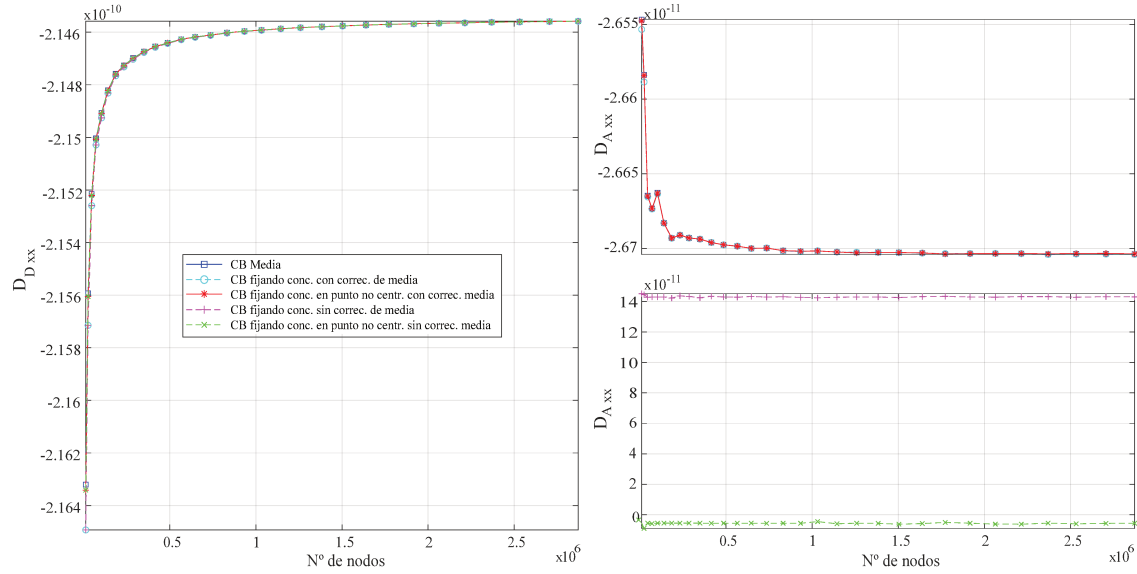


Figura 5.5: Comparación de distintas estrategias de imposición de la condición de media en las contribuciones difusiva y advectiva del tensor de difusividad efectiva.

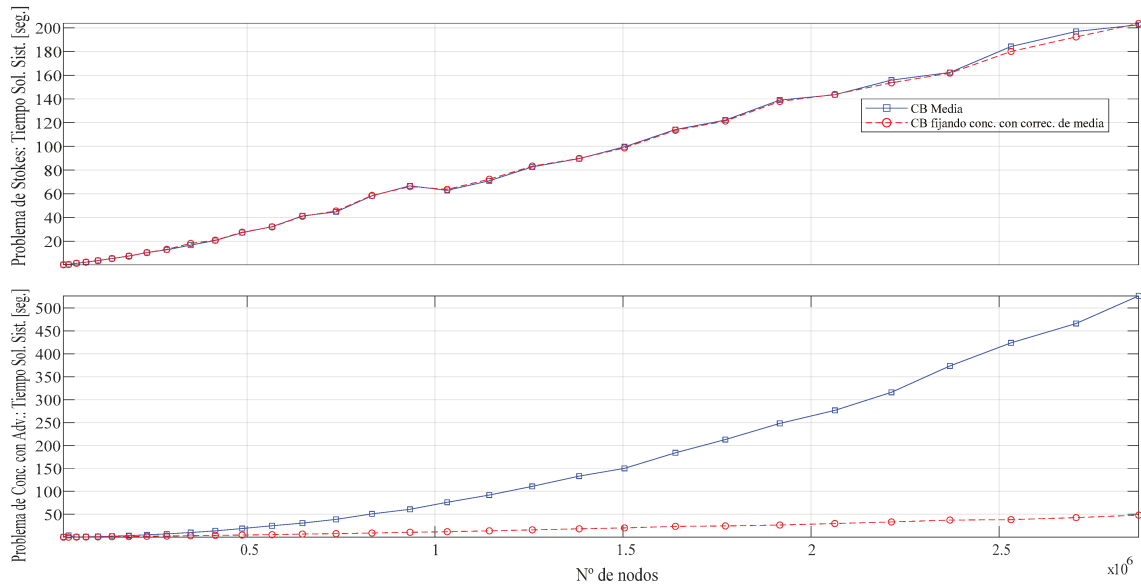


Figura 5.6: Comparación del tiempo de convergencia en función del número de nodos para distintas condiciones de borde de media mediante multiplicadores de Lagrange y de fijar una concentración, tanto para el problema de Stokes y de transporte advectivo difusivo de concentración.

Estos resultados muestran que la fijación de la concentración en un punto permite eliminar la indeterminación del problema microscópico, pero no garantiza por sí sola el cumplimiento de la condición de media. Para conservar la consistencia entre las escalas microscópica y macroscópica, es necesario aplicar la corrección del valor medio antes de efectuar el procedimiento de homogeneización. Con las configuraciones analizadas, la fijación en el centro del dominio acompañada de esta corrección reproduce los resultados obtenidos mediante multiplicadores de Lagrange.

La Figura 5.6 presenta la comparación de los tiempos de resolución asociados a las metodologías (I) y (II).

Para el problema de flujo de Stokes, no se observan diferencias apreciables entre los tiempos de cómputo de ambas implementaciones. En cambio, para el problema de transporte advectivo-difusivo, la metodología basada en la fijación nodal con corrección a posteriori presenta un costo computacional considerablemente menor que la formulación con multiplicadores de Lagrange.

En conjunto, los resultados demuestran que la fijación nodal con corrección a posteriori constituye, para el problema analizado, una alternativa equivalente a la imposición mediante multiplicadores de Lagrange en términos de las propiedades efectivas obtenidas, pero más eficiente desde el punto de vista computacional. No obstante, la corrección del valor medio constituye una etapa indispensable, especialmente para calcular de manera consistente la contribución advectiva del tensor de difusividad efectiva.

5.3.4. Dependencia con el mallado de la inclusión sólida

Un interrogante que surge al analizar la imposición de la condición de media es la necesidad de mallar los sólidos internos o inclusiones presentes en la microestructura, y evaluar si esta decisión podría introducir errores en el cálculo de las propiedades efectivas.

En efecto, dado que la condición de media involucra un promedio volumétrico sobre el dominio considerado, la definición precisa de dicho dominio en la discretización es un aspecto relevante. Desde el punto de vista del cálculo de propiedades efectivas, un error en la definición del dominio de integración puede alterar el valor del promedio volumétrico y, en consecuencia, afectar la magnitud homogenizada obtenida. Por ello, resulta fundamental asegurar que la región sobre la cual se impone y evalúa la condición de media coincida estrictamente con el dominio físico en el que la ecuación microscópica es válida.

En la Figura 5.7 se muestran los resultados del estudio. En el rango de velocidad de estudio ($v_x = 1 \times 10^{-5}$), el aporte del término D_{Axx} es un orden de magnitud menor con

respecto al D_{Dxx} . Mientras que la contribución difusiva del tensor de difusividad efectiva permanece prácticamente inalterada ante el mallado de las inclusiones, la contribución advectiva presenta pequeñas variaciones. Este comportamiento sugiere una mayor sensibilidad de los términos asociados al transporte advectivo respecto de la discretización y del dominio considerado en la evaluación de la condición de media.

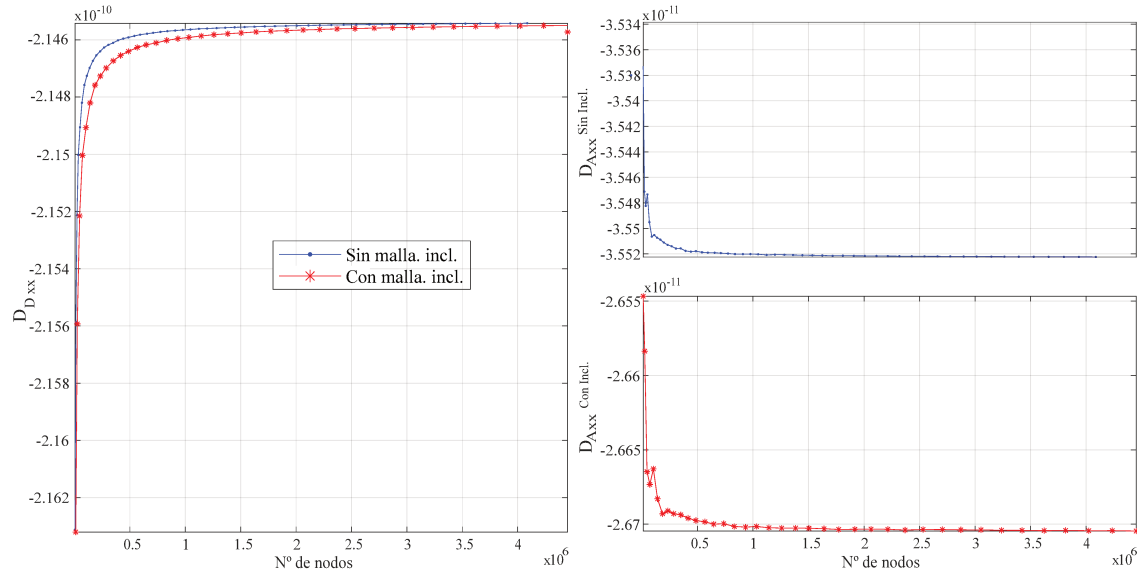


Figura 5.7: Componente D_{Dxx} y D_{Axx} del tensor de difusión efectivo mallando y no la inclusión para el papel Munktell con un $v_x = 1 \times 10^{-5}$. Se aplica condición de borde de media con multiplicadores de Lagrange.

5.3.5. Dependencia con la escala

En esta Sección, se lleva a cabo un análisis de sensibilidad de la propiedad efectiva obtenida mediante el modelo multiescala ($\bar{\bar{D}}$) respecto del factor de escala aplicado a la geometría Munktell 00A.

Las curvas presentadas en las Figuras 5.8 y 5.9 evidencian una clara dependencia de las propiedades efectivas con la escala geométrica de la microcelda, tanto para la contribución advectiva como difusiva del tensor de difusividad efectiva, respectivamente. En particular, todas las componentes tensoriales muestran variaciones al modificar el tamaño característico del RVE. La única excepción se observa cuando se elimina el término advectivo del problema de transporte de concentración, caso en el cual la propiedad efectiva resulta independiente de la escala, como es esperable en un problema puramente difusivo clásico bajo hipótesis de separación de escalas (Fig. 5.10).

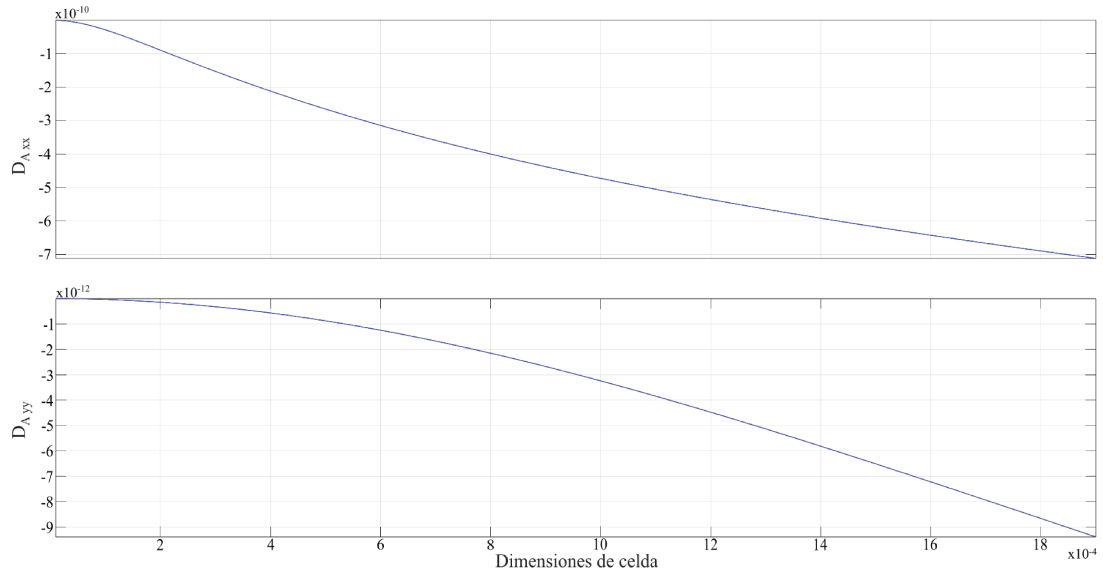


Figura 5.8: Análisis de sensibilidad de D_{Axx} y D_{Ayy} del tensor de difusividad efectivo con las dimensiones de la microcelda.

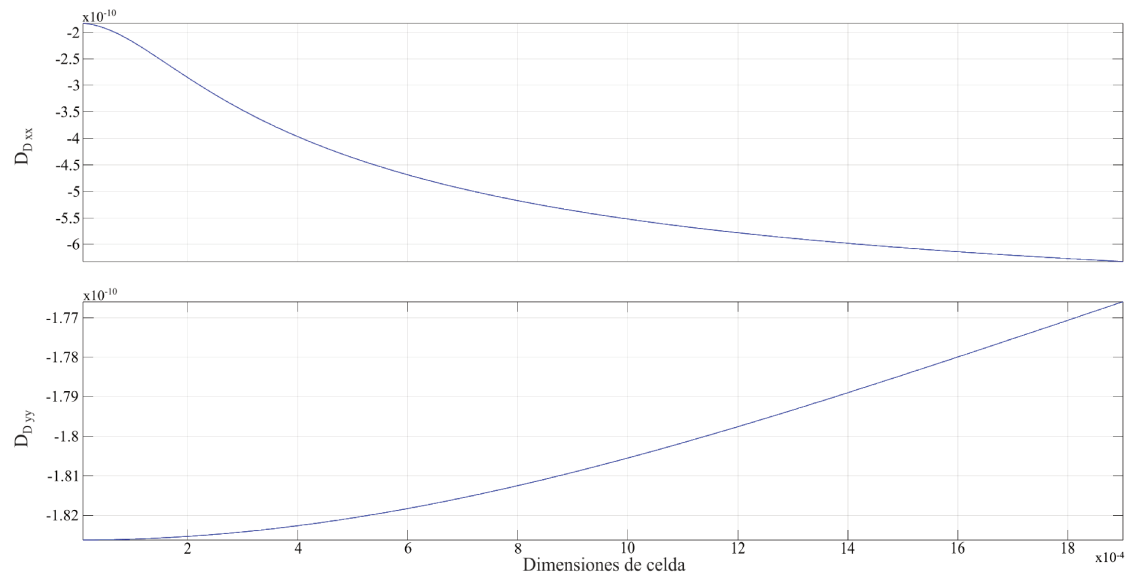


Figura 5.9: Análisis de sensibilidad de D_{Dxx} y D_{Dyy} del tensor de difusividad efectivo con las dimensiones de la microcelda.

Del mismo modo, se identifican diferencias cualitativas en la forma de dicha dependencia con respecto al comportamiento aproximadamente cuadrático que presenta la permeabilidad efectiva (Secc. 3.3.4). En este caso de estudio, las componentes asociadas al transporte de concentración exhiben una dependencia de carácter exponencial, posiblemente vinculada a la influencia de la velocidad local sobre el espesor de la capa límite de concentración y su impacto en los mecanismos advectivo-difusivos.

En particular, para la componente D_{Dxx} , se observa la aparición de una asíntota al aumentar el factor de escala. Este comportamiento podría estar relacionado con la saturación

del efecto de la capa límite local y su contribución a los valores efectivos homogenizados, indicando la existencia de un régimen en el cual el incremento adicional de escala no produce variaciones significativas en la propiedad efectiva.

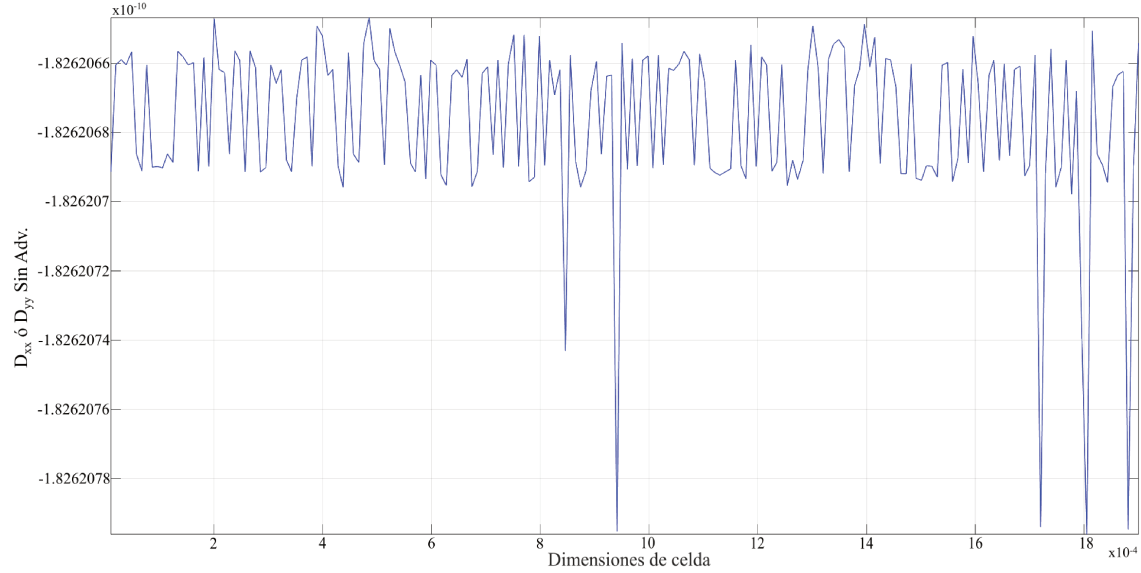


Figura 5.10: Análisis de sensibilidad del tensor de difusividad efectivo del problema puramente difusivo con las dimensiones de la microcelda.

5.3.6. Validación con Simulaciones Numéricas Directas

Con la finalidad de evaluar el desempeño de la formulación multiescala propuesta y la calidad de la solución para el problema, se realiza un estudio comparativo frente a la solución de un DNS. La configuración geométrica del problema sigue los mismos parámetros presentados anteriormente en la Sección 4.3.3.

A diferencia del enfoque homogeneizado, en el DNS se resuelven explícitamente las ecuaciones acopladas de Stokes y de transporte advectivo-difusivo en todo el dominio poroso. Esto permite capturar en detalle las variaciones locales del campo de velocidades y su interacción con el transporte de concentración. En este sentido, el DNS se adopta como una solución de referencia de alta fidelidad, a partir de la cual se evalúan la precisión, la consistencia y el alcance de la formulación multiescala desarrollada.

Para este estudio se emplearon las geometrías correspondientes al papel Munktell 00A (RVE_1) y Whatman #1 (RVE_2), representativa de la microestructura de canales constrictos del material. Se impuso una velocidad uniforme en la entrada, presión nula en la salida, condiciones de no penetración y no deslizamiento sobre las superficies de los obstáculos internos, y una condición de no penetración en las paredes laterales del canal.

Para el campo de concentración se prescribieron condiciones de Dirichlet en la entrada y la salida, dadas por $C_{\text{entrada}} = 1$ y $C_{\text{salida}} = 0$ respectivamente.

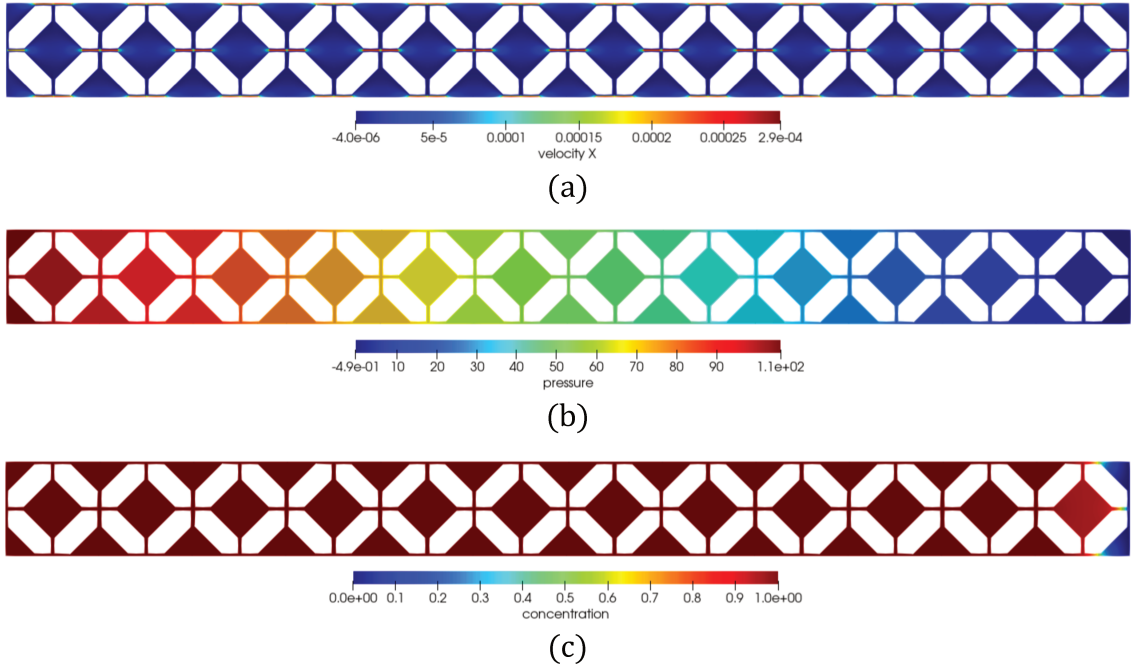


Figura 5.11: Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Transporte Escalar para papel Munktell 00A: (a) Velocidad tangencial al flujo; (b) Campo de presiones; (c) Campo de Concentración.

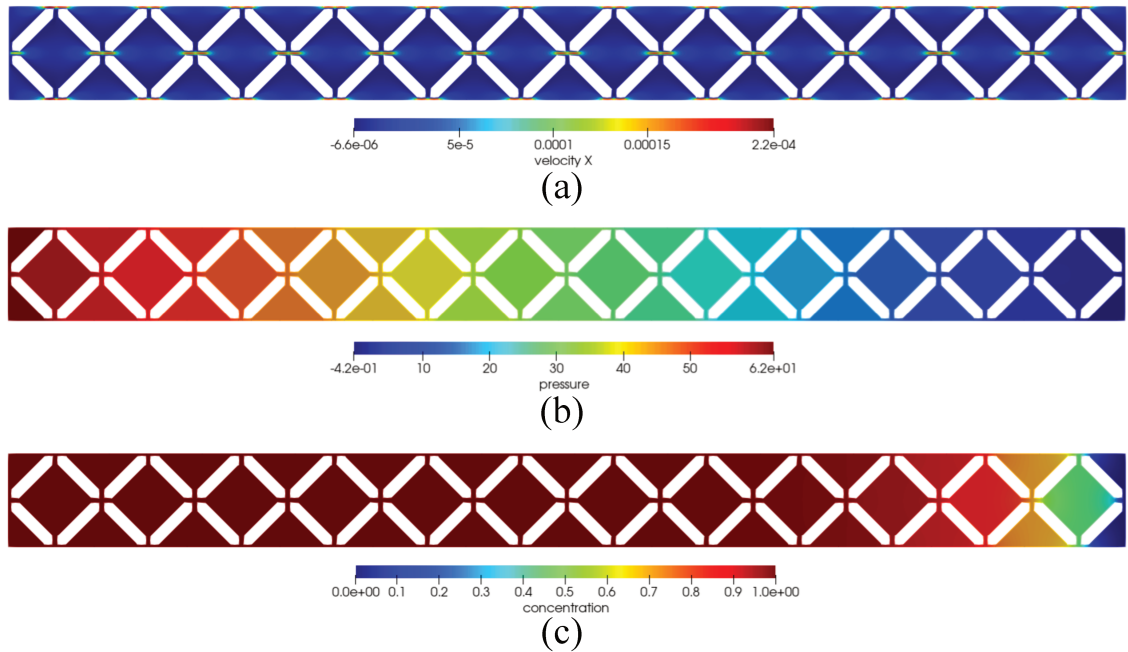


Figura 5.12: Soluciones obtenidas por simulación numérica directa (DNS) del problema de Transporte Escalar para papel Whatman #1: (a) Velocidad tangencial al flujo; (b) Campo de presiones; (c) Campo de Concentración.

En las Figuras 5.11 y 5.12 se presentan los campos obtenidos mediante el DNS, incluyendo la componente longitudinal de la velocidad, la presión y la distribución espacial de la concentración para las microestructuras correspondientes a ambos tipos de papel. Las soluciones microescala correspondientes se muestran en las Figuras 5.13 y 5.14

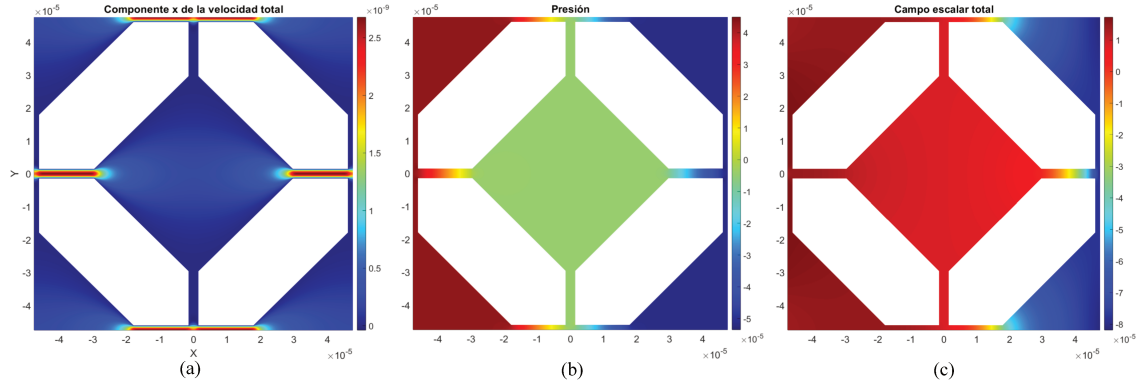


Figura 5.13: Resultados de la microescala para el problema de transporte advectivo-difusivo en geometría de papel Munktell 00A : (a) Componente x de la velocidad; (b) Campo de presiones; (c) Campo escalar de concentración.

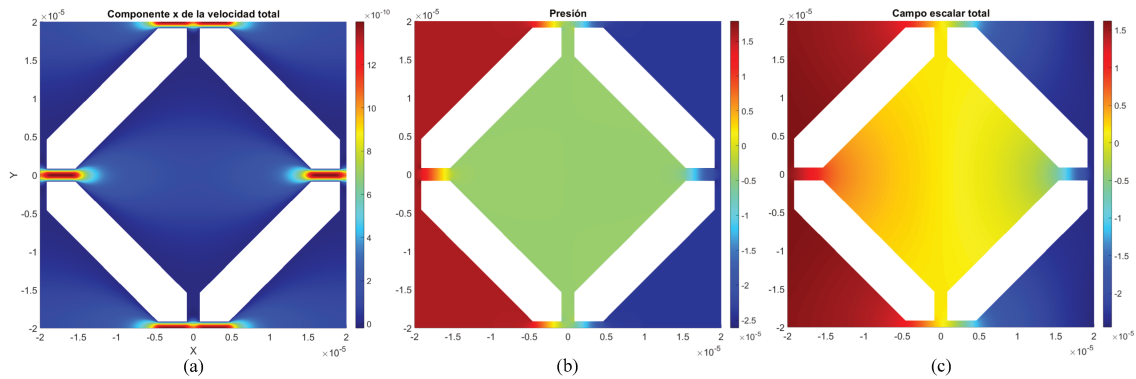
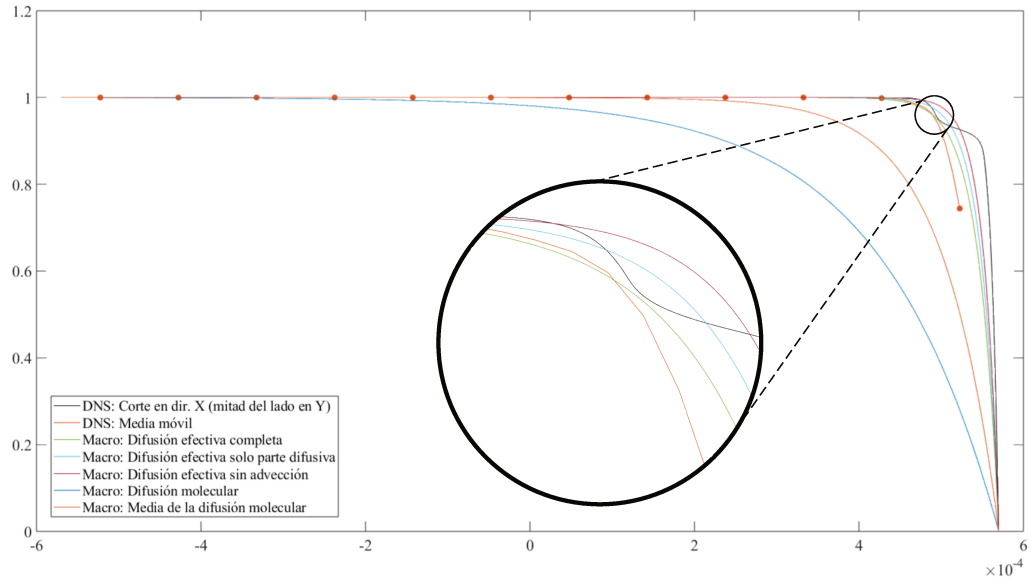


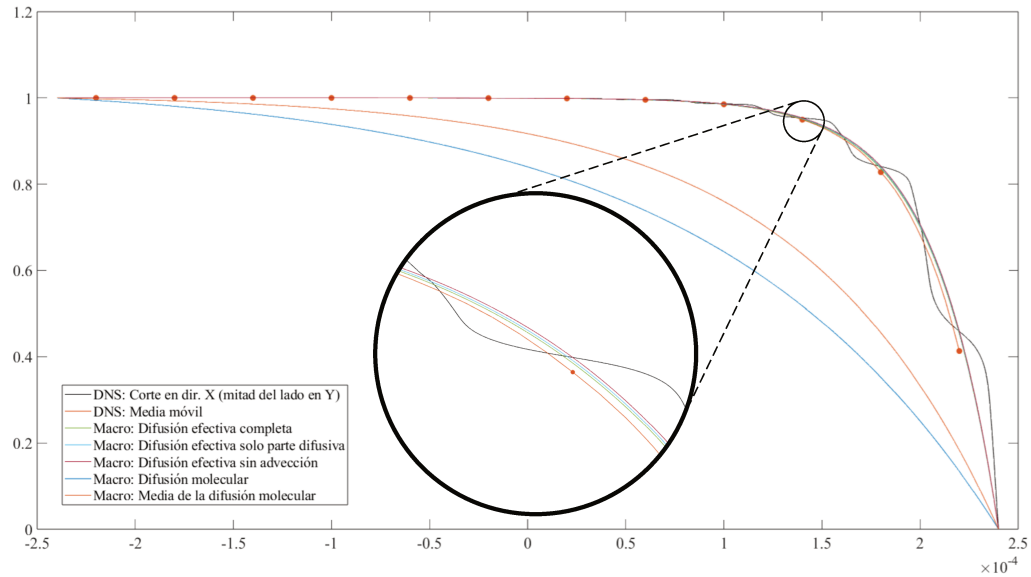
Figura 5.14: Resultados de la microescala para el problema de transporte advectivo-difusivo en geometría de papel Munktell #1: (a) Componente x de la velocidad; (b) Campo de presiones; (c) Campo escalar de concentración.

Dado que el DNS resuelve de manera explícita la geometría del espacio poroso, el campo microscópico de concentración exhibe fluctuaciones locales inducidas por los obstáculos sólidos, las constricciones y la distribución de los canales de transporte. En contraste, la solución multiescala describe un campo macroscópico homogeneizado, en el que los efectos de estas heterogeneidades se incorporan a través de las propiedades efectivas, sin representar explícitamente sus variaciones locales. En consecuencia, ambas soluciones corresponden a niveles de descripción diferentes, por lo que su comparación directa punto a punto no resulta estrictamente equivalente.

Para establecer una comparación consistente, se calculó una media móvil de la concentración obtenida mediante la solución DNS. Este procedimiento consiste en promediar espacialmente la solución microscópica dentro de una ventana definida alrededor de cada posición del dominio. De esta manera, se atenúan las fluctuaciones producidas por la geometría local y se obtiene un perfil suavizado que representa la evolución promedio de la concentración, comparable con el campo calculado mediante el modelo homogeneizado.



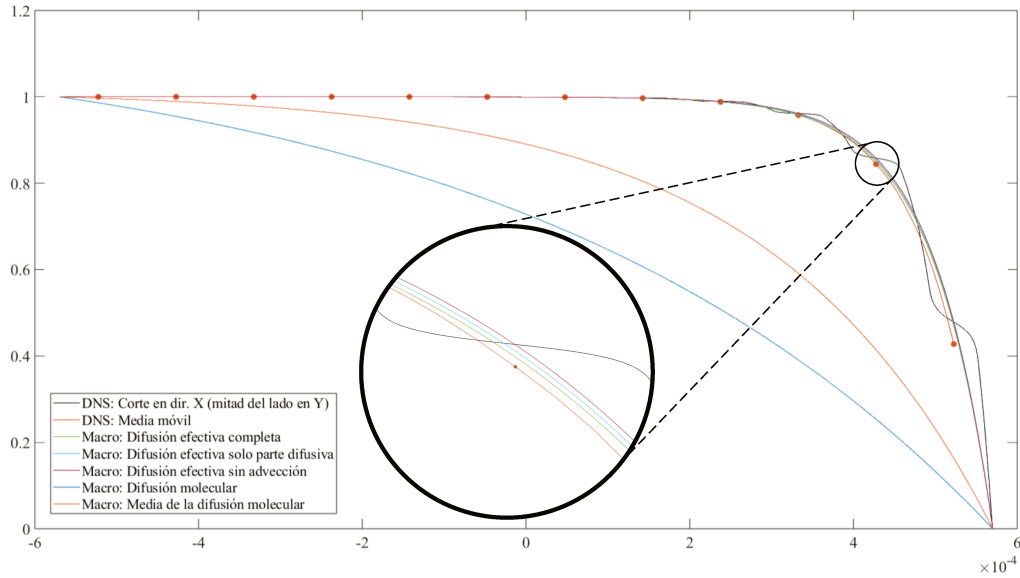
(a) Munktel 00A.



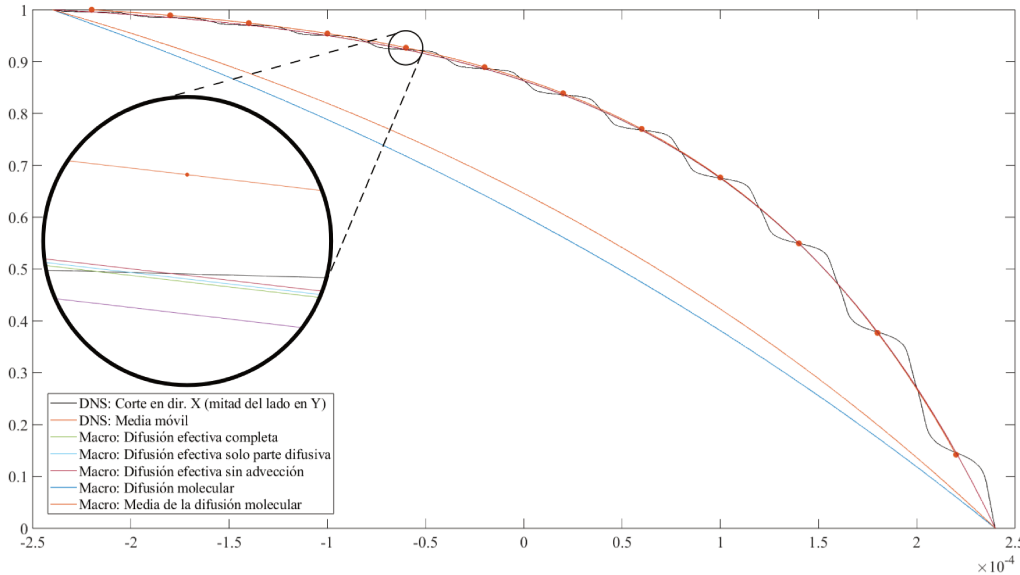
(b) Whatman #1.

Figura 5.15: Corte longitudinal del perfil de concentración obtenido mediante Solución Numérica Directa (DNS) vs Soluciones del Modelo Multiescala considerando distintas variables efectivas para una $v_x = 1 \times 10^{-5}$.

Las Figuras 5.15 y 5.16 comparan la media móvil de la solución DNS con los perfiles de concentración obtenidos mediante la formulación multiescala para velocidades de entrada $v_x = 1 \times 10^{-5}$, m/s y $v_x = 2,5 \times 10^{-6}$, m/s, respectivamente. La comparación tiene como objetivos evaluar la precisión del modelo homogeneizado y determinar la relevancia de incorporar explícitamente la contribución advectiva en el cálculo del tensor de difusividad efectiva.



(a) Munktel 00A.



(b) Whatman #1.

Figura 5.16: Corte longitudinal del perfil de concentración obtenido mediante Solución Numérica Directa (DNS) vs Soluciones del Modelo Multiescala considerando distintas variables efectivas para una $v_x = 2,5 \times 10^{-6}$.

Con este propósito, se consideran distintas aproximaciones. La primera emplea el ten-

sor efectivo completo, compuesto por las contribuciones difusiva y advectiva obtenidas mediante homogeneización. La segunda conserva únicamente la contribución difusiva del tensor efectivo. También se incluyen el caso puramente difusivo y el caso en el que la difusividad molecular se utiliza directamente como propiedad macroscópica, sin incorporar de manera completa los efectos geométricos de la microestructura.

Los resultados muestran que todas las formulaciones que incorporan propiedades obtenidas mediante homogeneización proporcionan una aproximación considerablemente mejor que aquella obtenida al utilizar directamente la difusividad molecular como propiedad efectiva. Este comportamiento evidencia que la representación de la microestructura resulta relevante incluso cuando la contribución advectiva al tensor efectivo es reducida. En particular, el promedio volumétrico de la difusividad molecular incorpora, al menos, el efecto de la fracción del dominio disponible para la difusión. Sin embargo, esta aproximación todavía no representa adecuadamente otros efectos geométricos, como la tortuosidad, la conectividad y la constricción de los caminos de transporte, los cuales sí quedan incluidos en la propiedad calculada mediante el enfoque multiescala.

En la dirección principal del flujo, las diferencias entre los perfiles se concentran principalmente en una capa límite de concentración de espesor reducido, mientras que en la mayor parte del dominio las soluciones resultan prácticamente coincidentes. Dentro de esta región localizada, el modelo que emplea el tensor efectivo completo presenta la mejor aproximación al perfil del DNS. Por lo tanto, la incorporación de la contribución advectiva mejora la solución longitudinal, aunque su influencia resulta apreciable principalmente en las proximidades de la capa límite.

Este comportamiento explica por qué la contribución advectiva global a la componente longitudinal del tensor efectivo resulta pequeña. Las variaciones de concentración asociadas con la advección se concentran en una fracción reducida del dominio, mientras que en el resto de la microestructura el campo presenta un comportamiento comparativamente uniforme. En consecuencia, al realizar el promedio volumétrico, la incidencia de esta región sobre el valor global de la propiedad efectiva se atenúa.

Asimismo, cuando el espesor de la capa límite es comparable con la longitud característica de la microestructura, la hipótesis de separación de escalas puede verse comprometida localmente. En esa región, el campo macroscópico experimenta variaciones significativas sobre distancias del mismo orden que la escala microscópica, por lo que la aproximación homogeneizada pierde parte de su precisión. Esta limitación se concentra principalmente en las proximidades del borde y no implica necesariamente una pérdida de validez de la

formulación en el interior del dominio, donde los campos varían de manera más suave.

Por último, aunque la contribución advectiva produce una mejora limitada y localizada en la dirección longitudinal, su influencia puede adquirir mayor relevancia en la dirección transversal al flujo principal. En esta dirección, la interacción entre las fluctuaciones locales de velocidad y la difusión molecular puede originar efectos dispersivos macroscópicos que no se manifiestan con igual claridad en el perfil longitudinal. Por este motivo, el análisis de las componentes transversales del tensor efectivo resulta necesario para valorar de manera integral la conveniencia de resolver el problema advectivo–difusivo en la microescala.

5.3.7. Dependencia con la velocidad de entrada

Con el objetivo de analizar la sensibilidad de la respuesta de transporte homogeneizada frente a las condiciones operativas impuestas, se estudió específicamente la dependencia del tensor de difusividad efectiva respecto a la velocidad de entrada impuesta en la macroescala. Para tal fin, se resolvió el problema advectivo–difusivo considerando valores de velocidad de entrada crecientes, manteniendo constante la dirección del flujo.

En el marco de la formulación multiescala adoptada, se asume que el campo de velocidades utilizado en la microescala se escala linealmente con el valor de la velocidad macroscópica impuesta. En consecuencia, al variar la magnitud del flujo a nivel macro, se modifica proporcionalmente la intensidad del campo advectivo que interviene en el problema micro.

A continuación se presentan, en escala logarítmica, las curvas de evolución de las componentes del tensor de difusividad efectiva $\overline{\overline{D}}$, junto con las respectivas contribuciones difusiva ($\overline{\overline{D}}_D$) y advectiva ($\overline{\overline{D}}_A$). Los resultados se reportan tanto para las componentes principales (Figuras 5.17 y 5.18) como para los términos fuera de la diagonal (Figuras 5.19 y 5.20), considerando las microestructuras correspondientes a los RVE₁ y RVE₂ respectivamente. Se separan las curvas según el signo de la velocidad y el signo de la componente efectiva.

A partir de los resultados obtenidos, se observa que el tensor de difusividad efectiva depende explícitamente de la velocidad macroscópica impuesta. En particular, las componentes principales D_{xx} y D_{yy} exhiben un crecimiento con el aumento de la velocidad. Sin embargo, este crecimiento no es uniforme: la componente longitudinal D_{xx} , aumenta de manera más pronunciada, mientras que la componente transversal D_{yy} presenta una evolución más moderada, requiriendo intensidades de flujo mayores para evidenciar variaciones significativas. Este comportamiento es consistente con la naturaleza direccional de

los mecanismos de dispersión hidrodinámica inducidos por el flujo.

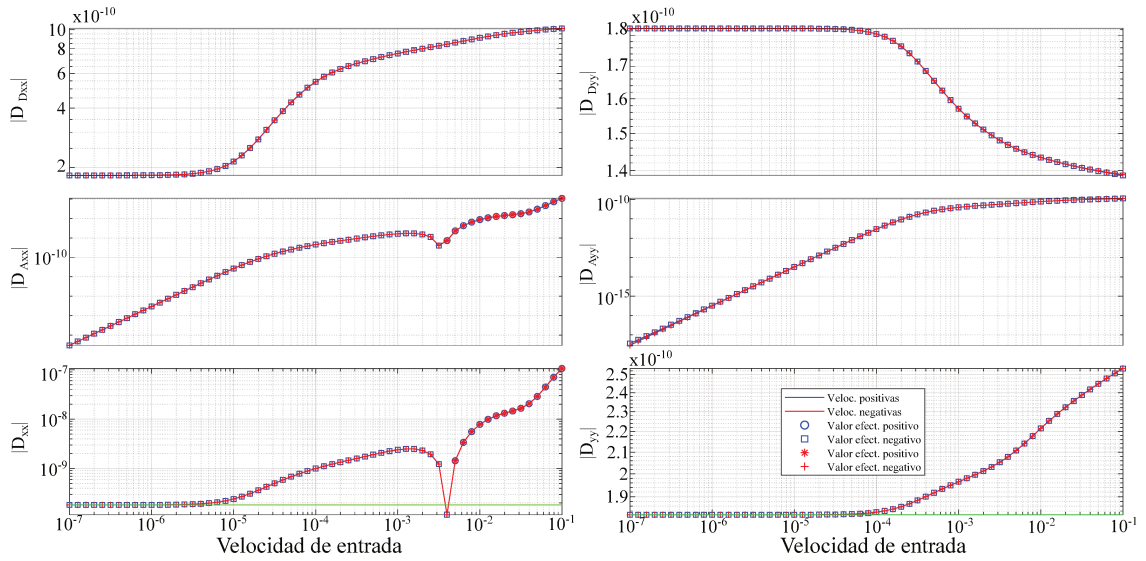


Figura 5.17: Variación de la componentes xx e yy de las partes difusiva y advectiva y el valor total según la velocidad de entrada del problema de la macroescala, en escala logarítmica, para geometría de papel Munktel 00A.

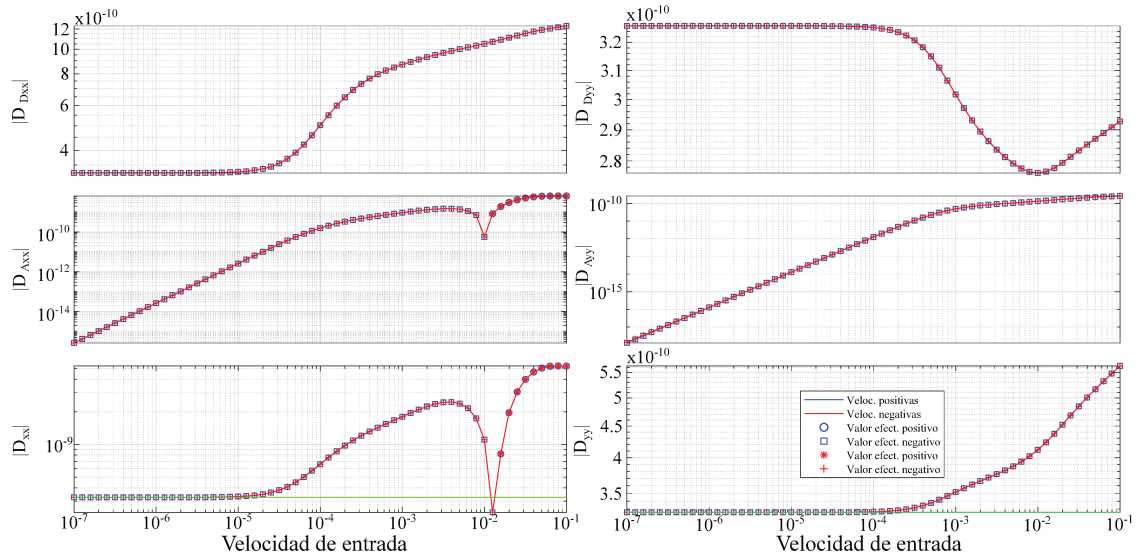


Figura 5.18: Variación de la componentes xx e yy de las partes difusiva y advectiva y el valor total según la velocidad de entrada del problema de la macroescala, en escala logarítmica, para geometría de papel Whatman #1.

Asimismo, las componente D_{xy} incrementa su magnitud con la velocidad, adquiriendo relevancia progresiva dentro del tensor efectivo. En contraste, las componentes cruzadas restantes resultan despreciables, situándose aproximadamente cinco órdenes de magnitud por debajo de las componentes principales en todo el rango de velocidades analizado.

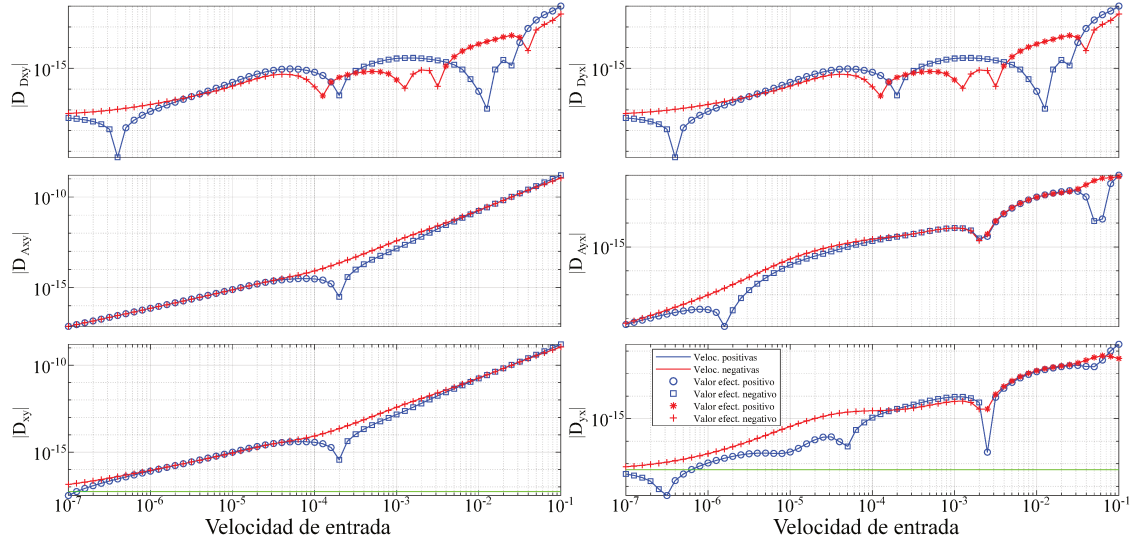


Figura 5.19: Variación de la componentes xy e yx de las partes difusiva y advectiva y el valor total según la velocidad de entrada del problema de la macroescala, en escala logarítmica, para geometría de papel Munktell 00A.

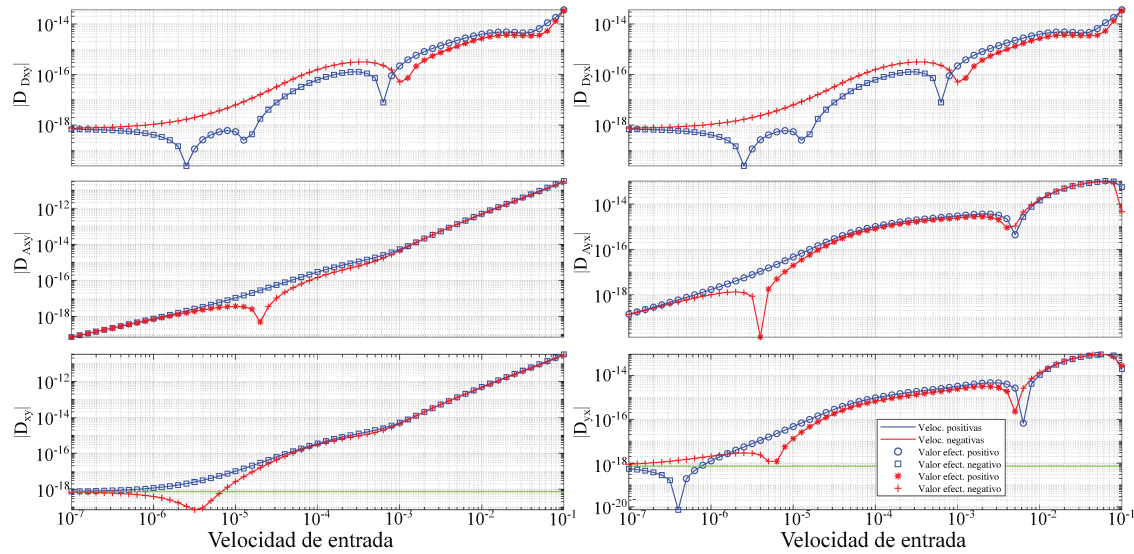


Figura 5.20: Variación de la componentes xy e yx de las partes difusiva y advectiva y el valor total según la velocidad de entrada del problema de la macroescala, en escala logarítmica, para geometría de papel Whatman #1.

Por otra parte, la comparación entre las microestructuras RVE_1 y RVE_2 , correspondientes al papel Munktell 00A y Whatman #1 permite evidenciar que, si bien ambas presentan una respuesta cualitativa similar, la sensibilidad cuantitativa del tensor de difusividad efectiva depende fuertemente de la geometría interna del medio. En particular, la microestructura del RVE_1 exhibe un crecimiento más pronunciado de las componentes

principales del tensor, especialmente D_{xx} , lo que indica una menor restricción geométrica al flujo y una mayor capacidad del medio para generar gradientes locales que favorezcan el flujo.

Finalmente, aunque las componentes cruzadas aumentan con la velocidad en ambos materiales, su magnitud permanece varios órdenes por debajo de los términos principales, confirmando que el transporte efectivo continúa dominado por las direcciones principales del flujo. En conjunto, estos resultados demuestran que el tensor de difusividad efectiva no constituye una propiedad intrínseca independiente de las condiciones operativas, sino que emerge del acoplamiento entre la morfología microestructural y el régimen de flujo impuesto en la macroescala.

5.3.8. Problema de flujo dispersivo y constante de dispersividad

A partir de las observaciones hechas en la Sección 5.3.6, resulta natural centrar el análisis en el transporte dispersivo generado por la interacción entre la advección microscópica y la difusión molecular.

En consecuencia, es necesario mencionar que la contribución dispersiva (o coeficiente de dispersión mecánica, $\overline{\overline{D}}_{disp}$) del tensor de difusividad efectivo es calculado como la resta entre del tensor de difusividad másica efectivo y el tensor de difusividad efectivo del problema de flujo puramente difusivo. Es decir:

$$\overline{\overline{D}}_{disp} = \overline{\overline{D}} - \overline{\overline{D}}^0 \quad (5.23)$$

Como se mencionó en la Sección 5.1.4.2, es frecuente encontrar en la literatura la hipótesis de dispersividad constante, la cual surge al asumir que $f(Pe, r) \approx 1$. Sin embargo, la validez de esta aproximación lineal se encuentra restringida a determinados rangos del número de Péclet. En particular, dicha hipótesis resulta consistente únicamente cuando $Pe \gg 1$, condición bajo la cual los efectos advectivos dominan claramente sobre la difusión molecular.

Si bien no es incorrecto considerar valores elevados de Péclet en medios porosos basados en papel, su magnitud depende fuertemente de parámetros característicos del sistema, como la velocidad del fluido, el tamaño de poro y la difusividad molecular. En este tipo de materiales, el número de Péclet suele encontrarse en un régimen intermedio, donde la difusión molecular continúa siendo relevante y ambos mecanismos pueden contribuir simultáneamente al transporte efectivo. Cabe destacar que, en la literatura clásica donde

se plantea esta asunción (Bear and Bachmat [1991], Bear and Cheng [2010]), el análisis se desarrolla principalmente en el contexto del modelado de aguas subterráneas, donde las escalas características del medio poroso y las velocidades típicas del flujo difieren en varios órdenes de magnitud respecto de las presentes en medios porosos basados en papel.

Adicionalmente, existen discrepancias en la literatura respecto al establecimiento de un rango de transición entre los regímenes difusivo y advectivo-dispersivo para este tipo de medios porosos, lo que dificulta determinar con exactitud la validez de la hipótesis de dispersividad constante en cada configuración particular (Carbonell [1979], Bear and Cheng [2010], van Milligen and Bons [2012]).

En las Figuras 5.21 y 5.22 se presenta la evolución de los coeficientes de dispersión mecánica longitudinal y transversal, así como de las dispersividades longitudinal y transversal isotrópicas, para el papel Whatman #1. En términos generales, los resultados muestran un comportamiento fuertemente no lineal y aproximadamente simétrico respecto de $v_x = 0$, lo que sugiere que la respuesta del modelo depende principalmente de la magnitud de la velocidad y no de su dirección. Esta simetría es consistente con formulaciones homogenizadas en las cuales la dispersión efectiva se encuentra asociada a fluctuaciones microscópicas del campo de velocidades y a interacciones geométricas complejas dentro de la microestructura del medio poroso.

En la Figura 5.21(a), se observa que el coeficiente de dispersión longitudinal presenta un comportamiento particular que permite identificar distintas regiones características. En primer lugar, para velocidades cercanas a cero se observa una variabilidad significativa de la solución, lo cual podría estar asociado a una elevada sensibilidad numérica del modelo cuando los efectos advectivos son comparables o inferiores a los mecanismos puramente difusivos. En este régimen, pequeñas perturbaciones numéricas o errores de redondeo pueden adquirir relevancia debido a la baja magnitud de las cantidades involucradas. A medida que aumenta la magnitud de la velocidad, el coeficiente disminuye rápidamente y adopta valores negativos. En esta región de transición, correspondiente a velocidades intermedias, la evolución del coeficiente presenta tramos que pueden aproximarse localmente mediante una relación casi lineal con el incremento de $|v_x|$. Sin embargo, dicha tendencia debe interpretarse únicamente como una aproximación local, válida en un intervalo acotado de velocidades, y no como una proporcionalidad lineal general entre el coeficiente de dispersión longitudinal y la velocidad media del flujo. Finalmente, para valores elevados de $|v_x|$, el coeficiente tiende hacia un valor aproximadamente constante y negativo.

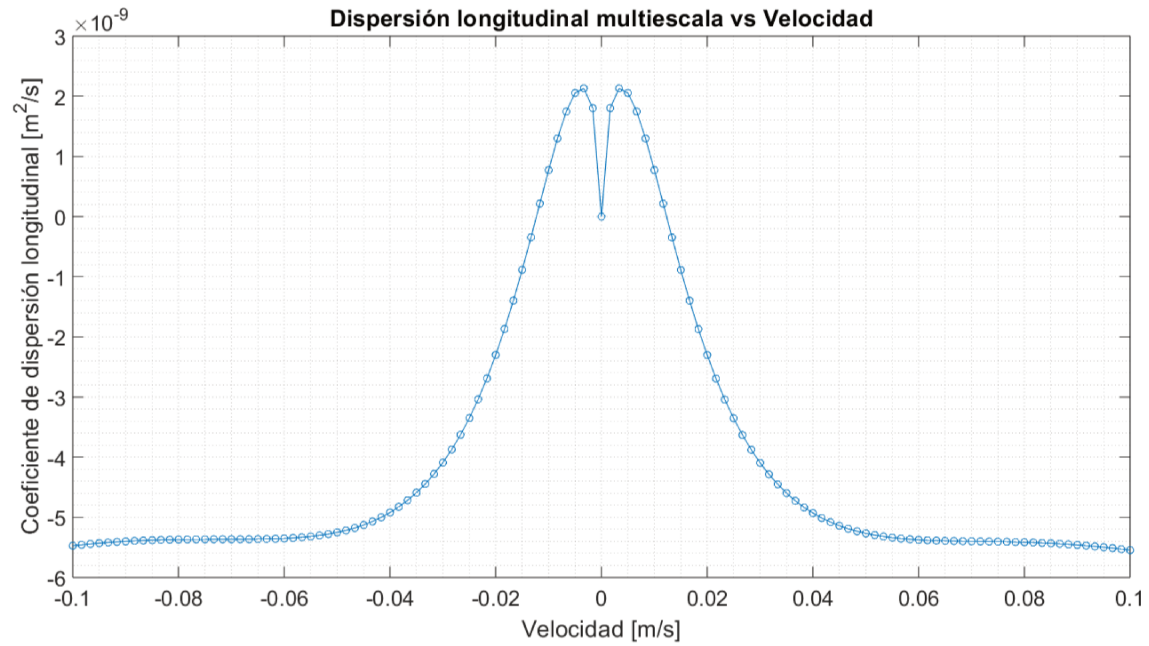
Este comportamiento difiere de la relación clásica reportada en la literatura para dis-

persión mecánica en medios porosos, donde típicamente se espera un crecimiento aproximadamente lineal del coeficiente de dispersión longitudinal con la velocidad media del flujo, asociado a una dispersividad longitudinal aproximadamente constante. En contraste, los resultados obtenidos muestran una evolución global marcadamente no lineal, caracterizada por una fuerte sensibilidad cerca de $v_x = 0$, una región intermedia de variación rápida, con tramos localmente lineales, y una tendencia asintótica para mayores magnitudes de velocidad.

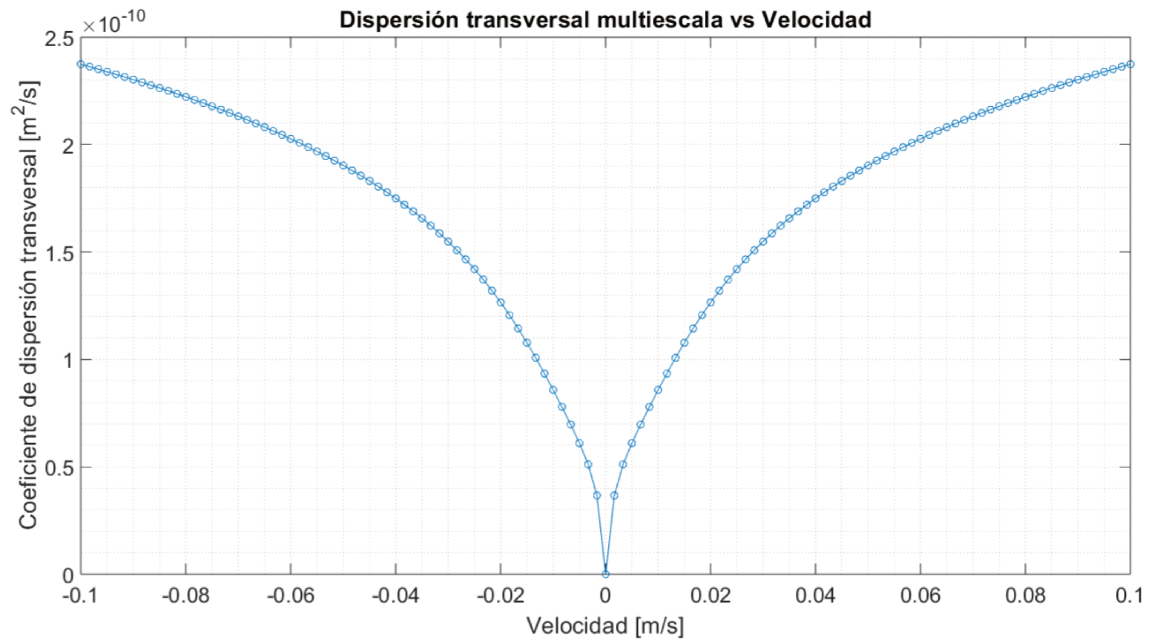
En consecuencia, los resultados sugieren que el modelo multiescala captura una dependencia más compleja con la velocidad que aquella considerada en la formulación clásica de dispersión mecánica. En la literatura, dicha formulación suele simplificarse al asumir que la función de corrección $f(Pe, r)$ es aproximadamente unitaria, es decir, $f(Pe, r) \approx 1$, lo que conduce a una dispersividad constante y a una relación aproximadamente lineal entre el coeficiente de dispersión longitudinal y la velocidad media del flujo. En cambio, al conservar explícitamente esta contribución en el modelo, pueden capturarse comportamientos no lineales asociados al régimen de Péclet, a la geometría del medio poroso y a la interacción entre mecanismos difusivos y advectivos. Desde esta perspectiva, la región intermedia de variación rápida y la posterior tendencia asintótica observadas en la Figura 5.21(a) podrían estar asociadas a que $f(Pe, r)$ no actúa como un factor constante en el rango de velocidades analizado. No obstante, desde el punto de vista físico, un coeficiente de dispersión efectivo negativo no posee una interpretación directa dentro del marco clásico de transporte advectivo-dispersivo, dado que la dispersión representa un mecanismo disipativo asociado al ensanchamiento espacial de la distribución de soluto. Por esta razón, la aparición de valores negativos sugiere que la magnitud representada no correspondería estrictamente al coeficiente de dispersión efectivo total, sino posiblemente a una contribución correctiva derivada del procedimiento de homogenización, a una componente particular del tensor efectivo o al efecto de conservar términos de corrección que usualmente son simplificados en la formulación clásica.

En contraste, la componente transversal permanece estrictamente positivo en todo el rango de velocidades analizado y exhibe una dependencia suave y aproximadamente monótona respecto de la magnitud de la velocidad (Fig. 5.21(b)). En particular, alcanza valores mínimos en las proximidades de $v_x = 0$ y aumenta progresivamente conforme se incrementa $|v_x|$, independientemente del sentido del flujo. Este comportamiento resulta consistente con la naturaleza física de la dispersión transversal en medios porosos, la cual se encuentra asociada principalmente a las desviaciones laterales inducidas por el flujo

dentro de la microestructura del medio.



(a) Coeficiente de dispersión longitudinal.



(b) Coeficiente de dispersión transversal.

Figura 5.21: Gráficas de coeficiente de dispersión mecánica vs Velocidad para el papel Whatman #1.

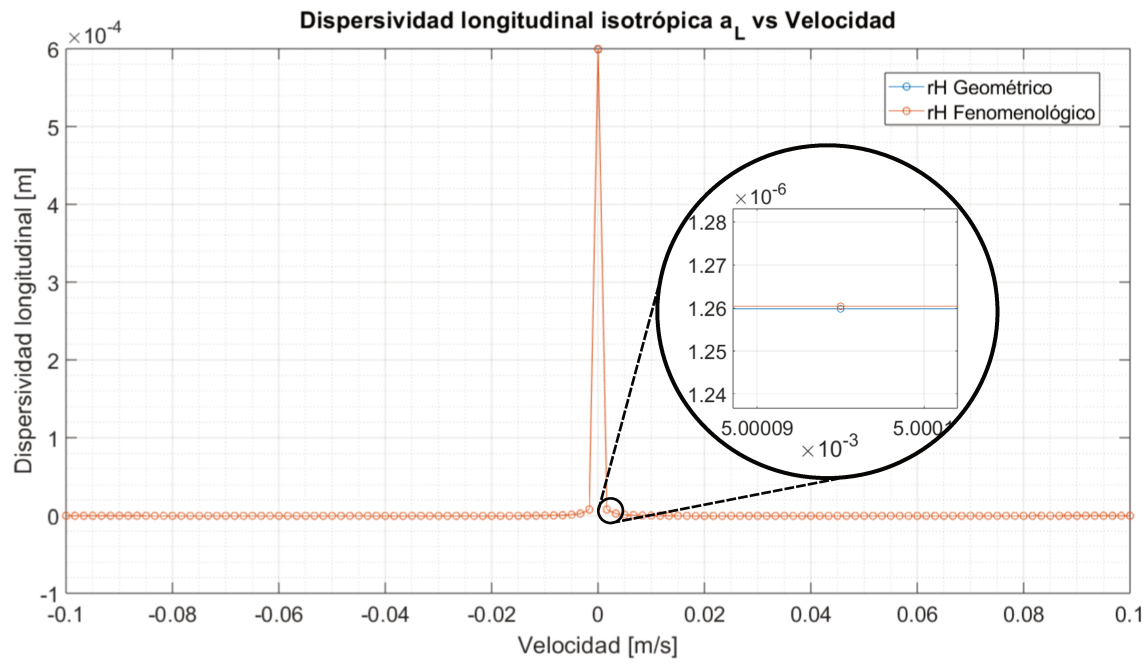
Cuando la velocidad media es muy pequeña, las trayectorias de las partículas se encuentran gobernadas principalmente por la difusión molecular y las fluctuaciones advectivas locales no poseen una intensidad suficiente para producir mecanismos significativos de mezcla lateral. En consecuencia, cuando $v_x \rightarrow 0$, el coeficiente de dispersión transversal tiende

a valores próximos a cero. A medida que aumenta la velocidad media, el flujo comienza a explorar de manera más intensa la heterogeneidad geométrica del medio poroso: aparecen diferencias locales de velocidad entre poros, las líneas de corriente adquieren trayectorias más tortuosas y las partículas experimentan desviaciones laterales progresivamente mayores. Como resultado, aumenta la intensidad de los mecanismos de mezcla transversal y, por lo tanto, el coeficiente de dispersión transversal efectiva incrementa gradualmente.

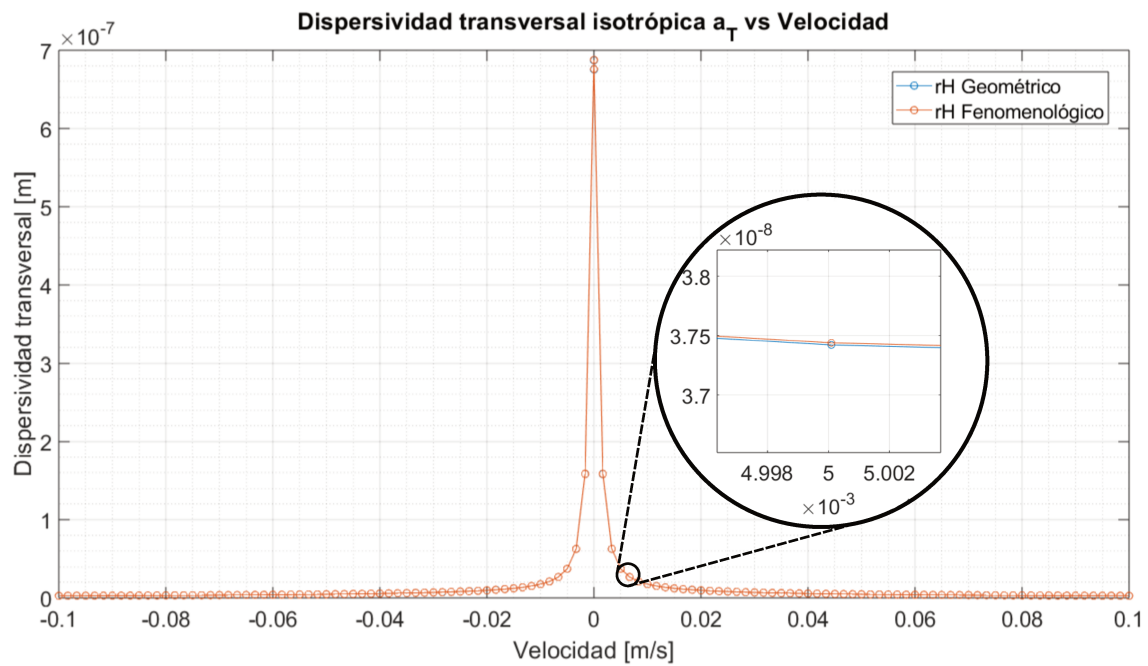
El crecimiento suave observado en la dispersión transversal sugiere que el modelo multiescala captura adecuadamente la transición entre un régimen dominado por difusión molecular, correspondiente a bajas velocidades, y un régimen de dispersión mecánica transversal progresivamente más desarrollado a mayores velocidades. Asimismo, se observa que los valores de dispersión transversal alcanzan hasta un orden de magnitud por debajo de los correspondientes a la componente longitudinal. Este resultado es consistente con la física del problema, dado que en medios porosos la mezcla longitudinal suele ser considerablemente más eficiente que la transversal debido a la dirección preferencial de las trayectorias con la dirección principal del flujo.

Por otra parte, las curvas de dispersividad longitudinal y transversal del papel Whatman #1 (Figs. 5.22(a) y 5.22(b)) muestran un comportamiento singular en la vecindad de $v_x = 0$. Ambas curvas se realizan considerando las definiciones de radio hidráulico geométrico y fenomenológico. En ambas componentes se observa un crecimiento abrupto alrededor del origen, siendo la magnitud de la dispersividad longitudinal varios órdenes de magnitud superior a la transversal ($a_L \gg a_T$). Este comportamiento puede explicarse a partir de la definición clásica de dispersividad (Ecuación (5.5)), en la cual esta magnitud se obtiene como el cociente entre el coeficiente de dispersión mecánica y la velocidad media del flujo. Por lo tanto, cuando la velocidad tiende a cero, el denominador se vuelve extremadamente pequeño y pequeñas variaciones del coeficiente de dispersión pueden amplificarse significativamente.

En consecuencia, los picos observados en las dispersividades cerca de $v_x = 0$ no deben interpretarse necesariamente como un incremento físico real de la capacidad dispersiva del medio, sino más bien como una consecuencia matemática de la propia definición de dispersividad en el régimen de bajas velocidades. Desde el punto de vista físico, esto indica que la dispersividad pierde capacidad descriptiva cuando el transporte se encuentra dominado por difusión molecular, ya que en este régimen no existe una velocidad advectiva suficientemente desarrollada como para definir de manera robusta una longitud característica asociada a la dispersión mecánica.



(a) Dispersividad longitudinal.

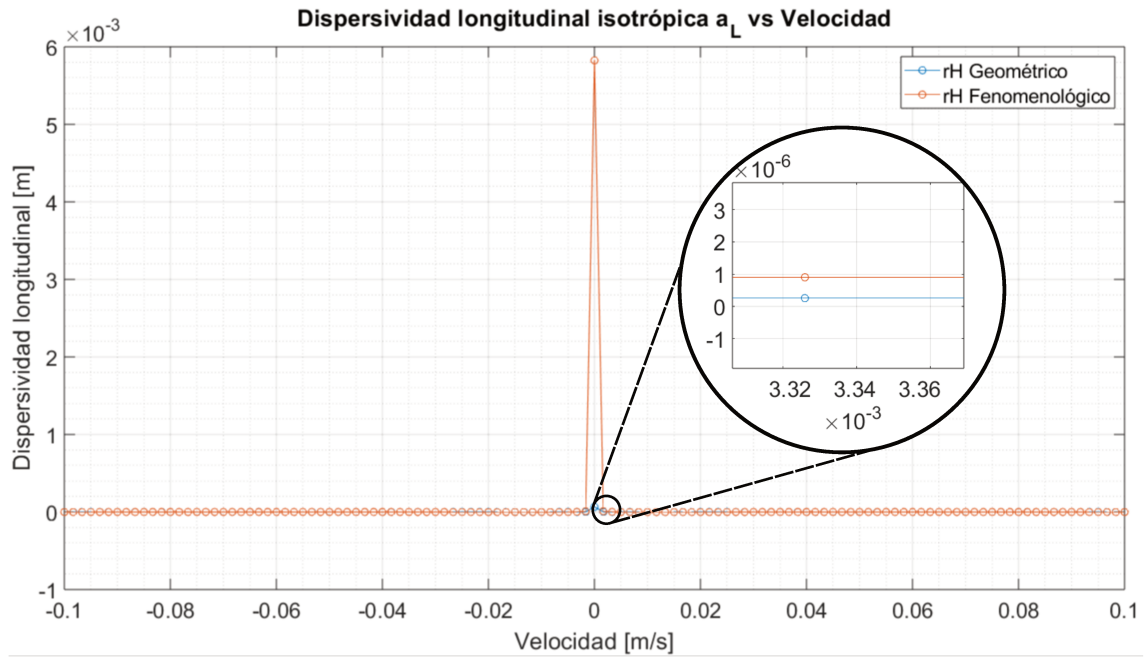


(b) Dispersividad transversal.

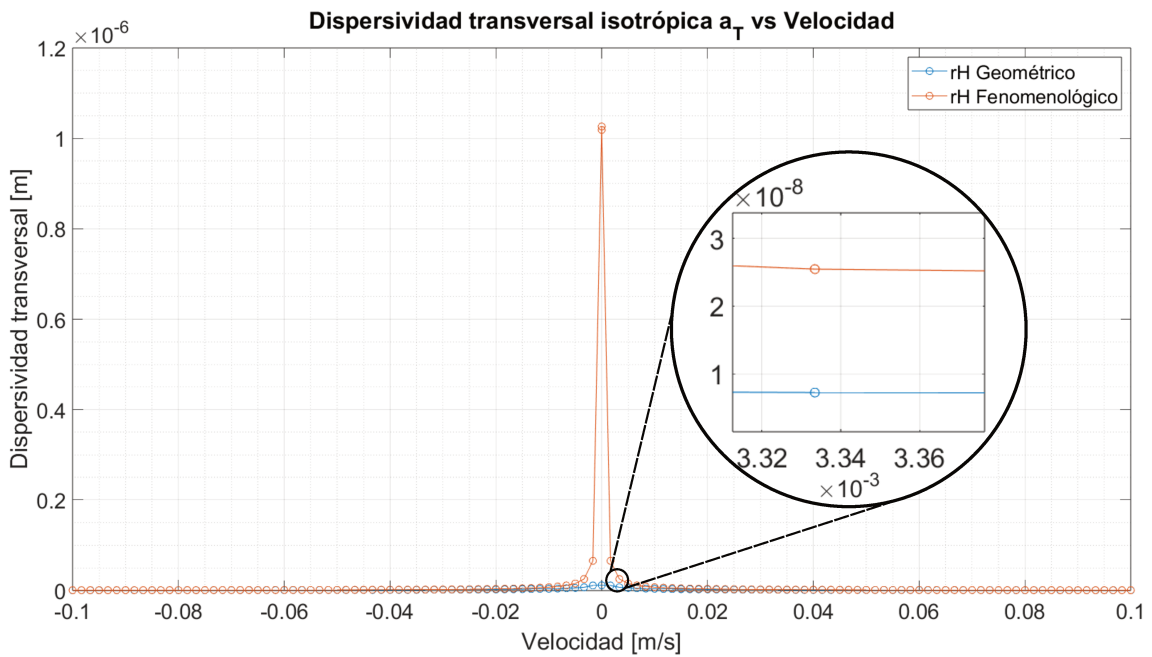
Figura 5.22: Gráficas de dispersividad vs Velocidad para el papel Whatman #1.

Fuera de la región cercana al origen, tanto la dispersividad longitudinal como la transversal decrecen rápidamente y tienden a valores muy pequeños. Este resultado sugiere que, para el rango de velocidades analizado, los coeficientes de dispersión mecánica obtenidos mediante el modelo multiescala no evolucionan de manera estrictamente proporcional a la velocidad media, como se asumiría bajo la hipótesis clásica de dispersividad constante (Bear and Bachmat [1991]). En particular, si se verificara una relación lineal entre disper-

sión mecánica y velocidad, la dispersividad debería tender a un valor aproximadamente constante para números de Péclet suficientemente elevados. Sin embargo, los resultados obtenidos indican que esta hipótesis no se satisface de manera directa en las configuraciones estudiadas, posiblemente debido a efectos no lineales asociados a la microestructura, a correcciones propias del proceso de homogenización o a la coexistencia de mecanismos difusivos y advectivos en el rango de velocidades considerado.



(a) Dispersividad longitudinal.



(b) Dispersividad tangencial.

Figura 5.23: Gráficas de dispersividad vs Velocidad para el papel Munktel 00A.

Finalmente, la comparación entre las componentes longitudinal y transversal permite destacar que, aunque ambas presentan una dependencia simétrica respecto de $v_x = 0$, sus magnitudes y comportamientos efectivos son marcadamente diferentes. La dispersión longitudinal muestra una mayor sensibilidad al régimen de velocidades y presenta incluso valores negativos en ciertas regiones, lo que requiere una interpretación cuidadosa dentro del marco del modelo multiescala. En cambio, la dispersión transversal exhibe un comportamiento positivo, suave y físicamente más consistente con el aumento progresivo de la mezcla lateral inducida por el flujo. En conjunto, estos resultados evidencian que la hipótesis de dispersividad constante debe emplearse con cautela en medios porosos basados en papel, especialmente en regímenes intermedios donde la difusión molecular y la dispersión mecánica pueden contribuir simultáneamente al transporte efectivo.

En la Figura 5.23 se presenta la evolución de las dispersividades longitudinal y transversal isotrópicas para el papel Munktell 00A, considerando las definiciones de radio hidráulico geométrico y fenomenológico. En ambas componentes se observa una fuerte concentración de la variabilidad en la vecindad de $v_x = 0$, lo cual es consistente con la naturaleza de la dispersividad como magnitud derivada a partir del cociente entre el coeficiente de dispersión mecánica y la velocidad media. En consecuencia, cuando la velocidad tiende a cero, pequeñas variaciones del coeficiente de dispersión pueden amplificarse significativamente, generando picos abruptos en las curvas de dispersividad.

En particular, la dispersividad transversal a_T (Fig. 5.23(b)) muestra valores prácticamente nulos para la mayor parte del rango de velocidades analizado, excepto en la región cercana al origen, donde la curva obtenida con el radio hidráulico fenomenológico presenta un pico pronunciado del orden de 10^{-6} m. La curva correspondiente al radio hidráulico geométrico, en cambio, presenta una respuesta mucho más atenuada y permanece varios órdenes de magnitud por debajo. Este comportamiento indica que, para Munktell 00A, la definición fenomenológica del radio hidráulico introduce una sensibilidad significativa en el cálculo de la dispersividad transversal en el régimen de bajas velocidades. Fuera de esta región, ambas curvas tienden rápidamente a valores cercanos a cero, lo que sugiere que la dispersividad transversal efectiva se estabiliza y que la hipótesis de un valor aproximadamente constante sólo podría ser considerada una vez superado el régimen singular cercano a $v_x = 0$.

Un comportamiento análogo se observa para la dispersividad longitudinal a_L (Fig. 5.23(a)), aunque con magnitudes considerablemente mayores. En este caso, la curva asociada al radio hidráulico fenomenológico exhibe un pico abrupto en torno a $v_x = 0$, al-

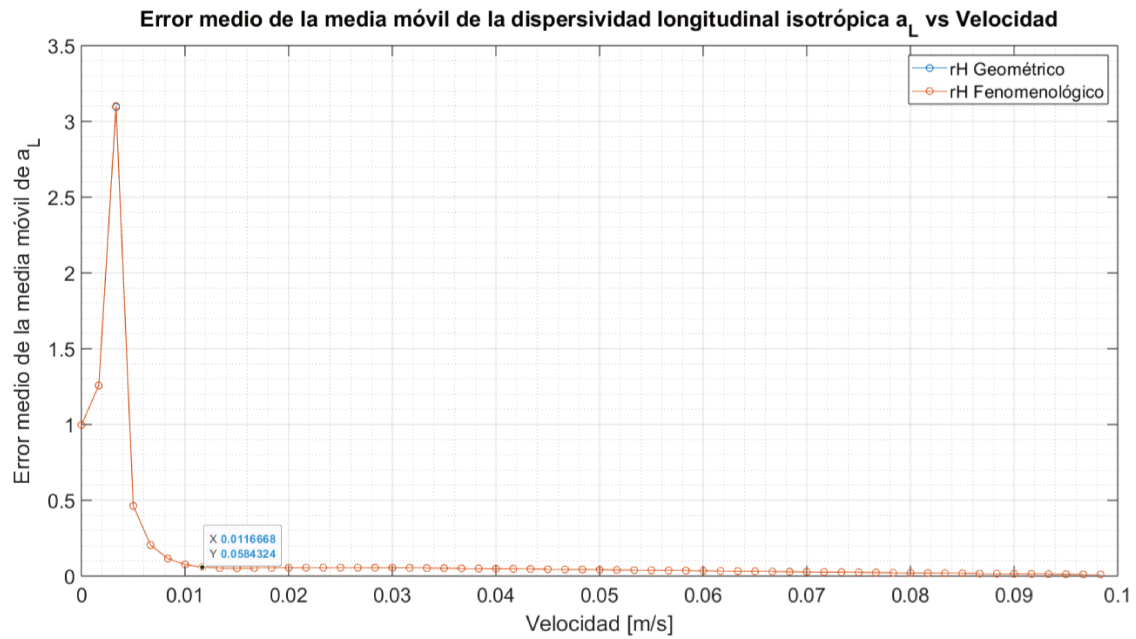
canzando valores del orden de 10^{-3} m, mientras que la estimación obtenida con el radio hidráulico geométrico presenta una variación mucho más moderada. Esta diferencia evidencia que la componente longitudinal resulta especialmente sensible a la elección del radio hidráulico en el régimen de velocidades muy bajas.

Al alejarse del origen, tanto a_L como a_T disminuyen rápidamente y tienden a valores pequeños, mostrando una evolución más regular. Esto indica que la influencia de la singularidad asociada a $v_x \rightarrow 0$ queda restringida a un intervalo acotado de velocidades. En consecuencia, para velocidades suficientemente alejadas del régimen difusivo, la dispersividad adquiere un comportamiento más estable y puede evaluarse con menor sensibilidad numérica.

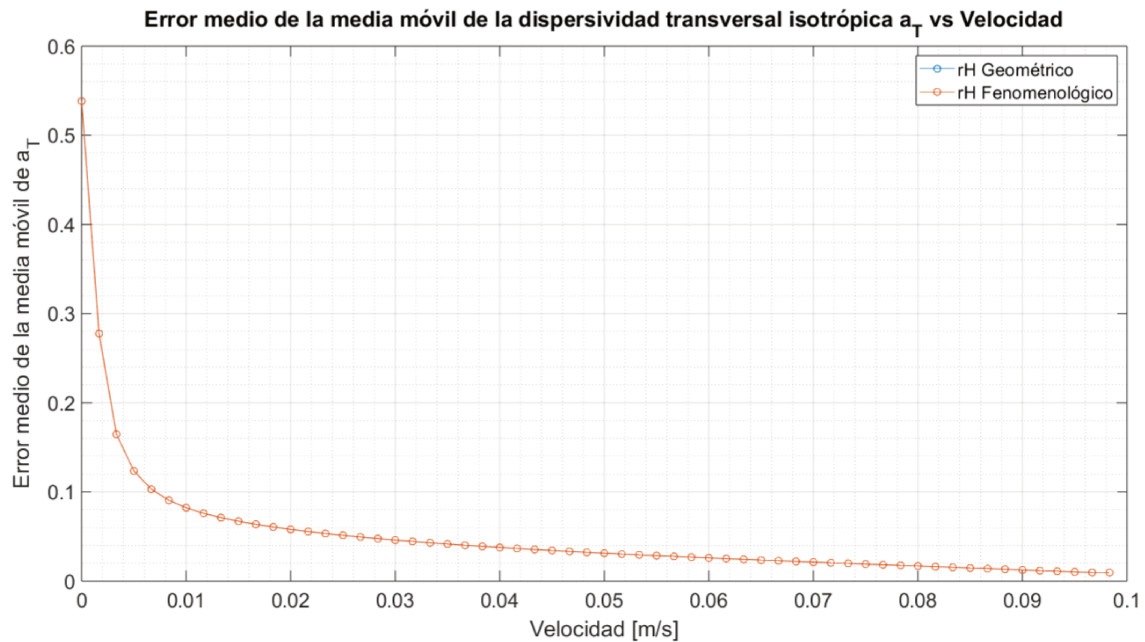
Con el objetivo de cuantificar la variabilidad local de las curvas de dispersividad, se calculó el error medio asociado a una media móvil de los valores de a_L y a_T para el papel Whatman #1 y Munktell 00A (Figs. 5.24 y 5.25 respectivamente). Para ello, a partir de la serie discreta $a(v_i)$ se obtuvo una tendencia suavizada mediante una media móvil local $\bar{a}_i$, calculada sobre una ventana de puntos vecinos. Posteriormente, el error se estimó como la diferencia relativa entre el valor original de la dispersividad y su correspondiente valor suavizado. De esta manera, el error medio de la media móvil permite identificar regiones donde la dispersividad presenta variaciones abruptas respecto de su tendencia local, las cuales pueden estar asociadas a cambios de régimen, singularidades inducidas por la definición de dispersividad o sensibilidad numérica del modelo.

En la Figura 5.24(a) se identifica un máximo pronunciado en el régimen de bajas velocidades, seguido de una caída rápida del error hasta valores significativamente menores. Este pico indica que la dispersividad longitudinal presenta una mayor sensibilidad local en las proximidades del origen, lo cual es consistente con la singularidad observada previamente en la curva de a_L y con la fuerte variabilidad del coeficiente de dispersión longitudinal en ese intervalo. Al igual que en el caso transversal, esta respuesta puede atribuirse a la amplificación de pequeñas variaciones numéricas o físicas al dividir por velocidades muy reducidas. Sin embargo, una vez superada esta región crítica, el error se mantiene bajo y decrece gradualmente con la velocidad, indicando que la dispersividad longitudinal presenta una evolución más regular para velocidades intermedias y altas. En particular, para una velocidad de aproximadamente $v_x = 1,16 \times 10^{-2}$ m/s, el error medio de la media móvil resulta cercano a 5,8 %. Por lo tanto, considerar el valor de a_L correspondiente a esta velocidad como una dispersividad longitudinal constante para velocidades mayores puede adoptarse como un enfoque válido dentro del rango analizado, dado que el error relativo

asociado a dicha aproximación es reducido.



(a) Error medio de la media móvil de la dispersividad longitudinal.



(b) Error medio de la media móvil de la dispersividad longitudinal.

Figura 5.24: Variación del error medio de la media móvil de la dispersividad longitudinal y transversal con respecto a la velocidad del flujo para el papel Whatman #1.

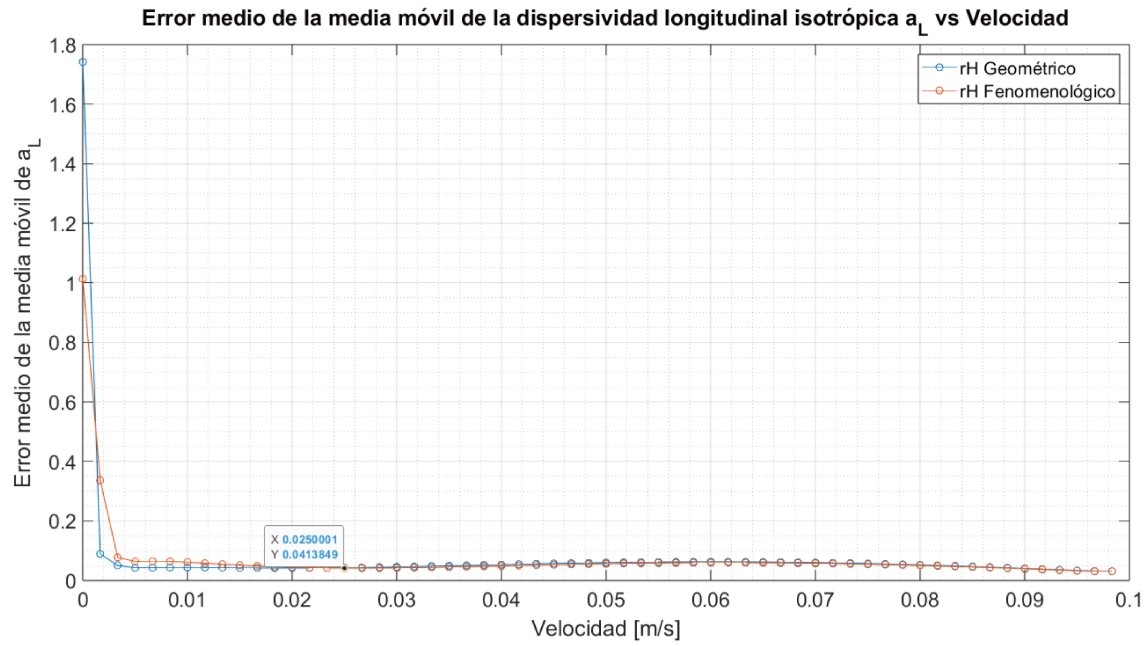
Por su parte, en la Figura 5.24(b) se observa que el error alcanza sus valores máximos para velocidades muy pequeñas y decrece rápidamente a medida que aumenta la velocidad. Este comportamiento indica que la mayor variabilidad relativa de a_T se concentra en el régimen de bajas velocidades, donde la dispersividad se calcula a partir de una división por

valores muy pequeños de v_x . En consecuencia, pequeñas fluctuaciones del coeficiente de dispersión transversal pueden amplificarse significativamente al evaluar la dispersividad, generando errores relativos elevados en la vecindad del origen. A medida que la velocidad aumenta, el error decrece de forma suave y monótona, lo que sugiere que la curva de a_T se estabiliza progresivamente y que la media móvil representa adecuadamente la tendencia local de la dispersividad transversal.

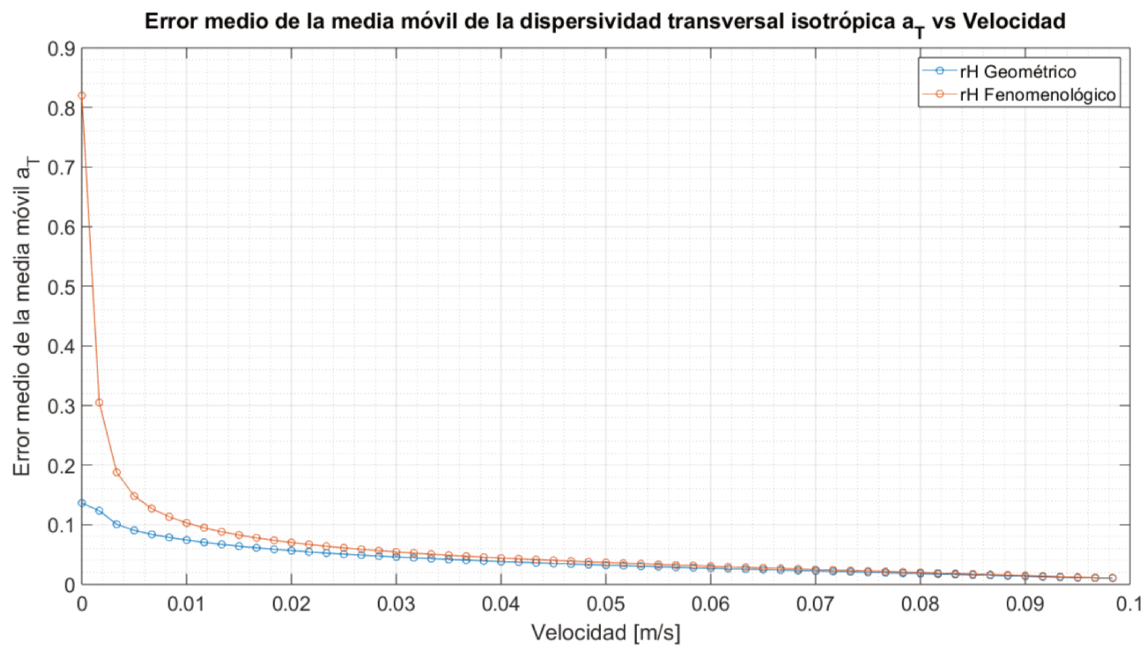
En conjunto, estos resultados refuerzan la necesidad de interpretar con cautela los valores de dispersividad en el régimen de bajas velocidades. En esta región, la definición misma de dispersividad puede inducir singularidades o amplificar perturbaciones locales, por lo que los valores elevados del error no necesariamente representan un fenómeno físico real, sino una limitación asociada al cálculo de una magnitud derivada en un régimen dominado por difusión molecular. Para velocidades mayores, la disminución del error indica que las curvas de dispersividad adquieren una tendencia más estable, permitiendo una interpretación más robusta de la respuesta del modelo multiescala.

En el caso de la dispersividad longitudinal a_L del papel Munktell 00A, nuevamente se observa que el error presenta valores elevados únicamente en la vecindad de $v_x = 0$, con una caída abrupta para velocidades ligeramente mayores (Fig. 5.25(a)). Una vez superada esta región inicial, el error se mantiene en valores bajos y relativamente estables. En particular, para una velocidad de aproximadamente $v_x = 2,5 \times 10^{-2}$ m/s, el error medio de la media móvil es cercano al 4,1 %, lo que indica que, a partir de este rango de velocidades, considerar un valor aproximadamente constante de a_L puede constituir una aproximación razonable dentro del rango analizado.

En la Figura 5.25(b), para la dispersividad transversal a_T , se observa también una disminución monótona del error con el aumento de la velocidad. No obstante, a diferencia de la componente longitudinal, la caída es más gradual y se extiende sobre un rango más amplio de velocidades. Esto sugiere que la dispersividad transversal presenta una estabilización progresiva, sin un cambio tan abrupto como el observado en a_L . Además, se aprecia una diferencia más marcada entre las curvas obtenidas con el radio hidráulico geométrico y el radio hidráulico fenomenológico en la región de bajas velocidades. En particular, el radio hidráulico fenomenológico produce errores iniciales considerablemente mayores que el radio hidráulico geométrico, lo que evidencia una mayor sensibilidad de esta definición en el régimen difusivo o de advección débil.



(a) Error medio de la media móvil de la dispersividad longitudinal.



(b) Error medio de la media móvil de la dispersividad longitudinal.

Figura 5.25: Variación del error medio de la media móvil de la dispersividad longitudinal y transversal con respecto a la velocidad del flujo para el papel Munktell 00A.

Esta diferencia observada entre el uso del radio hidráulico geométrico y el radio hidráulico fenomenológico evidencia comportamientos distintos en bajas velocidades. En este trabajo, el radio hidráulico geométrico fue estimado mediante la relación clásica entre área mojada y perímetro mojado, mientras que el radio hidráulico fenomenológico fue obtenido indirectamente a partir de la relación de Kozeny-Carman. Debido a ello, ambos parámetros

representan características físicas diferentes de la estructura porosa: el primero describe una medida hidráulica local asociada a la geometría efectiva de conducción, mientras que el segundo constituye una medida macroscópica vinculada a la capacidad global del medio para transmitir flujo.

Al comparar los resultados obtenidos para el papel Whatman #1 y Munktell 00A, se observa que ambos materiales presentan la misma tendencia cualitativa: los errores más altos se concentran en las velocidades cercanas a cero y disminuyen conforme aumenta la velocidad. Esto refuerza la idea de que la mayor incertidumbre en la estimación de las dispersividades no está asociada exclusivamente a una geometría particular, sino a la propia definición de dispersividad en el régimen de bajas velocidades.

En conjunto, la comparación entre ambos papeles indica que la hipótesis de dispersividad constante puede adoptarse únicamente a partir de un umbral de velocidad suficientemente alto, el cual no es universal, sino dependiente de la microestructura del medio poroso y de la definición de radio hidráulico utilizada. En ambos casos, el régimen de bajas velocidades debe interpretarse con cautela, dado que la división por velocidades pequeñas amplifica las variaciones locales de los coeficientes de dispersión y produce errores relativos elevados en las dispersividades calculadas.

5.4. Síntesis

En este capítulo se desarrolló y evaluó una formulación multiescala para el análisis del transporte de un escalar en medios porosos basados en papel, considerando tanto el régimen puramente difusivo como el problema advectivo-difusivo. A partir del procedimiento de homogeneización se obtuvieron propiedades efectivas para las microestructuras representativas de los papeles Munktell 00A y Whatman #1. Los resultados del caso puramente difusivo mostraron coeficientes efectivos menores que la difusividad molecular, lo cual resulta consistente con la resistencia geométrica impuesta por la microestructura porosa, asociada a la presencia de obstáculos sólidos, constricciones y trayectorias de transporte más complejas.

Asimismo, se verificó la existencia de un elemento de volumen representativo mediante el análisis de convergencia de las propiedades efectivas al incrementar el tamaño del dominio microscópico. También se estudió la imposición de la condición de borde de media, mostrando que tanto la estrategia con multiplicadores de Lagrange como la fijación nodal con corrección de media a posteriori reproducen resultados equivalentes, aunque esta úl-

tima presenta una mayor eficiencia computacional en el problema advectivo-difusivo. En contraste, omitir la corrección de media genera desviaciones significativas, confirmando que dicha condición es necesaria para preservar la consistencia entre escalas.

El análisis de sensibilidad permitió evidenciar que las propiedades efectivas del problema advectivo-difusivo dependen de la escala geométrica y de la velocidad impuesta, a diferencia del caso puramente difusivo, donde la respuesta permanece esencialmente invariante frente a cambios de escala. La comparación con simulaciones numéricas directas mostró que el modelo multiescala reproduce adecuadamente las tendencias globales del transporte de concentración, aunque también permitió identificar limitaciones asociadas a la separación de escalas y a la localización de los efectos advectivos en regiones reducidas del dominio microscópico.

Finalmente, se estudió la dispersión mecánica y la validez de la hipótesis de dispersividad constante. Los resultados mostraron comportamientos no lineales y sensibles al régimen de velocidades, especialmente en la vecindad de $v_x = 0$, donde la definición de dispersividad puede amplificar pequeñas variaciones del coeficiente de dispersión. Se observó que la dispersión transversal presenta una evolución positiva y más regular, mientras que la componente longitudinal requiere una interpretación más cuidadosa debido a su mayor sensibilidad y a la aparición de valores negativos en ciertos rangos. En conjunto, los resultados indican que la hipótesis clásica de dispersividad constante debe emplearse con cautela en medios porosos basados en papel, ya que su validez depende de la microestructura, del régimen de Péclet, de la definición de radio hidráulico y del rango de velocidades considerado.

Capítulo 6

Conclusiones

A lo largo del presente trabajo de investigación se desarrolló, implementó y validó una estrategia multiescala para el análisis de fenómenos de flujo y transporte en medios porosos, con especial énfasis en su aplicación a dispositivos analíticos microfluídicos basados en papel (**μPADs**). En particular, se estudiaron dos sustratos de uso frecuente en este tipo de dispositivos: los papeles Munktell 00A y Whatman #1.

La metodología propuesta se fundamenta en el concepto de Elemento de Volumen Representativo (RVE) y en la resolución de los problemas físicos mediante el Método de los Elementos Finitos (MEF). Este enfoque permitió vincular la respuesta local de la microestructura porosa con el comportamiento macroscópico del material mediante la determinación de propiedades efectivas. Asimismo, posibilitó reemplazar la resolución explícita de la compleja geometría microscópica en todo el dispositivo por representaciones geométricas equivalentes, conservando los mecanismos físicos relevantes y reduciendo considerablemente el costo computacional.

Sobre esta base, se formularon y analizaron distintos fenómenos involucrados en el funcionamiento de los **μPADs**, incluyendo el flujo impulsado por gradientes de presión, la conducción eléctrica, el flujo electroosmótico y el transporte advectivo-difusivo de especies. La integración de estos problemas permitió establecer una estrategia multiescala y multifísica capaz de transferir campos y propiedades efectivas entre las escalas microscópica y macroscópica.

A continuación, se sintetizan las principales contribuciones del trabajo, los resultados alcanzados y las conclusiones derivadas de las formulaciones, validaciones y análisis realizados.

6.1. Propuesta geométrica de microcelda

El desarrollo de las geometrías correspondientes a los papeles Munktell 00A y Whatman #1, basado en un modelo de canales constrictos interconectados, permitió construir microestructuras digitales equivalentes capaces de reproducir, de manera físicamente consistente, propiedades macroscópicas características de estos sustratos reportadas en la literatura.

Las geometrías propuestas se evaluaron mediante los tres problemas físicos considerados en esta tesis, lo que permitió analizar su respuesta frente a diferentes mecanismos de flujo y transporte relevantes para el funcionamiento de los dispositivos μ PADs. Las propiedades efectivas determinadas mediante homogeneización presentaron una adecuada concordancia con los valores de referencia disponibles. Asimismo, los análisis de convergencia respaldaron la adopción de las microestructuras como RVE para las propiedades estudiadas, mientras que los estudios de escala permitieron verificar que su comportamiento conserva las relaciones esperadas frente a variaciones de sus dimensiones características.

Estos resultados muestran que las geometrías implementadas constituyen representaciones numéricamente consistentes y físicamente adecuadas del comportamiento efectivo de los sustratos analizados. Si bien no reproducen explícitamente la complejidad tridimensional ni la distribución aleatoria de las fibras del papel, capturan propiedades geométricas y mecanismos de transporte relevantes, como la porosidad, la conectividad y la restricción del espacio poroso. Por consiguiente, proporcionan una base apropiada para el análisis multiescala y multifísico de los fenómenos considerados en dispositivos microfluídicos basados en papel.

6.2. Aportes aplicado al problema de flujo saturado

En el Capítulo 3 se establecieron los fundamentos teóricos, metodológicos y computacionales del modelo multiescala empleado para caracterizar el flujo saturado en medios porosos. La formulación desarrollada permitió vincular formalmente la descripción microscópica del flujo, gobernada por las ecuaciones de Stokes a escala de poro, con su representación macroscópica mediante la ley de Darcy. A través del procedimiento de homogeneización se determinó el tensor de permeabilidad efectiva, estableciendo una relación consistente entre la geometría de la microestructura, los campos microscópicos de

velocidad y presión y la respuesta hidráulica promedio del medio poroso.

La implementación numérica fue validada mediante diferentes estrategias complementarias. En primer lugar, los valores de permeabilidad efectiva obtenidos para microceldas con obstáculos internos de sección transversal cuadrada y circular se compararon con soluciones analíticas y numéricas de referencia disponibles en la literatura. La excelente concordancia alcanzada permitió verificar la correcta implementación computacional de la formulación y su consistencia con el comportamiento físico esperado.

Posteriormente, las predicciones del modelo multiescala se contrastaron con simulaciones numéricas directas (DNS), en las que la geometría de la microestructura fue resuelta explícitamente. La correspondencia observada entre ambos enfoques, tanto en la distribución de los campos de presión y velocidad como en los valores de permeabilidad obtenidos, confirmó la capacidad de la formulación para reproducir la respuesta fluidodinámica macroscópica a partir de la resolución de los problemas microscópicos. Esta comparación mostró, además, que el modelo homogeneizado permite representar con precisión la respuesta global del medio sin necesidad de resolver explícitamente la microestructura en todo el dominio macroscópico, con la consecuente reducción del costo computacional.

Una vez validada la formulación, se diseñaron y calibraron dos geometrías equivalentes representativas de los papeles Munktell 00A y Whatman #1. Estas geometrías se construyeron mediante una disposición simétrica de obstáculos hexagonales, capaz de generar una red de canales constrictos y de representar los principales efectos de la porosidad, la conectividad y la constricción del espacio poroso. Sus dimensiones características se ajustaron con el propósito de reproducir las propiedades hidráulicas reportadas para ambos materiales.

Para las dos microestructuras se determinó el tensor de permeabilidad efectiva ($\bar{k}$) y se calculó el correspondiente factor de constricción. Los valores obtenidos mostraron una buena concordancia con los resultados numéricos y experimentales disponibles en la literatura. Por lo tanto, las configuraciones propuestas no solo reproducen la porosidad de los sustratos estudiados, sino también propiedades relevantes de su respuesta hidráulica. Esto respalda su utilización como representaciones geométricas equivalentes de los papeles Munktell 00A y Whatman #1 en los análisis multiescala desarrollados posteriormente.

Asimismo, se estudió la influencia de la escala geométrica de la microcelda sobre las propiedades homogeneizadas. Los resultados confirmaron que las geometrías propuestas conservan la relación cuadrática entre las componentes de la permeabilidad y la longitud característica de la microestructura, $k_{ij} \propto L^2$, en concordancia con el escalamiento teó-

rico de las ecuaciones que gobiernan el flujo viscoso. Esta verificación demuestra que la formulación mantiene una respuesta físicamente consistente ante variaciones de la escala geométrica y permite relacionar la permeabilidad de configuraciones geométricamente semejantes con diferentes dimensiones características.

Finalmente, se evaluó la representatividad de las microestructuras propuestas mediante el análisis de convergencia de la componente de permeabilidad efectiva en la dirección principal del flujo. Para ello, se construyeron dominios de tamaño creciente mediante la repetición periódica de la microcelda base. La estabilización progresiva de la propiedad efectiva al aumentar el número de microceldas mostró que, a partir de un determinado tamaño del dominio, las variaciones de la permeabilidad resultan despreciables. En consecuencia, la respuesta homogeneizada deja de depender significativamente del número de repeticiones considerado, lo que respalda la adopción de las geometrías diseñadas como RVE para la determinación de la permeabilidad efectiva bajo las condiciones analizadas.

En resumen, el estudio del flujo saturado permitió consolidar cuatro aportes principales: el establecimiento del vínculo formal entre las escalas microscópica y macroscópica; la validación de la formulación mediante soluciones analíticas, resultados numéricos de referencia y simulaciones directas; el diseño y la calibración de geometrías representativas para los papeles Munktell 00A y Whatman #1; y la verificación de la consistencia de las propiedades homogeneizadas frente a variaciones de la escala geométrica y del tamaño del dominio microscópico.

En conjunto, estos resultados consolidaron la validez del modelo multiescala para predecir la permeabilidad efectiva y caracterizar la respuesta hidráulica de los medios porosos de papel estudiados. Asimismo, proporcionaron una base metodológica y computacional sólida para extender la estrategia a los restantes fenómenos físicos considerados en esta tesis y avanzar hacia su integración en el esquema multiescala y multifísico propuesto para el análisis de dispositivos μ PADs.

6.3. Aportes al problema de flujo electroosmótico

A lo largo del Capítulo 4 se desarrolló e implementó una estrategia multiescala para el estudio del flujo electroosmótico en medios porosos, fenómeno de especial relevancia para el transporte de fluidos en dispositivos microfluídicos basados en papel. La formulación permitió representar tanto el flujo inducido por un campo eléctrico como su interacción con el flujo impulsado por gradientes de presión.

El fenómeno electrocinético se modeló bajo la hipótesis de doble capa eléctrica delgada, justificada por la marcada separación entre la longitud de Debye de las soluciones consideradas y el tamaño característico de los poros. En este marco, la fuerza eléctrica volumétrica se desprecia en el seno electroneutro del fluido y el efecto de la doble capa se incorpora mediante la condición de deslizamiento de Helmholtz–Smoluchowski sobre la interfaz sólido–fluido. Esta aproximación permitió conservar los mecanismos físicos responsables del movimiento electroosmótico sin necesidad de resolver explícitamente las escalas nanométricas asociadas a la distribución de cargas dentro de la doble capa, reduciendo significativamente la demanda computacional.

La estrategia propuesta vinculó el problema de conservación de cargas con la respuesta fluidodinámica en ambas escalas. En la microescala, la resolución del problema eléctrico permitió determinar la distribución local del potencial y del campo eléctrico, a partir de la cual se estableció la velocidad de deslizamiento electroosmótico sobre las superficies sólidas. Este campo actuó como entrada para el problema de Stokes y permitió calcular el movimiento del fluido en el interior de la microestructura. Posteriormente, mediante el procedimiento de homogeneización, se determinó la permeabilidad electroosmótica efectivas necesarias para formular los correspondientes problemas macroscópicos. De esta manera, se estableció un vínculo consistente entre la electrocinética a escala de poro y la respuesta promedio del medio poroso.

La metodología fue evaluada mediante comparaciones con resultados experimentales y numéricos reportados en la literatura, así como con simulaciones numéricas directas (DNS), en las que la geometría de la microestructura se resolvió explícitamente. La concordancia obtenida permitió verificar la correcta implementación de la formulación y su capacidad para reproducir la respuesta electroosmótica de los sistemas analizados. Asimismo, los estudios de convergencia mostraron la estabilización de las propiedades efectivas al incrementar el tamaño del dominio microscópico, respaldando la adopción de las geometrías propuestas como RVE para la caracterización electroosmótica bajo las condiciones estudiadas.

El análisis del régimen de flujo mixto, caracterizado por la acción simultánea de gradientes de presión y de potencial eléctrico, permitió examinar el acoplamiento entre los mecanismos hidráulico y electroosmótico. Debido al carácter lineal del régimen de Stokes considerado, la velocidad resultante pudo expresarse mediante la superposición de ambas contribuciones. Las comparaciones con las simulaciones directas mostraron que el modelo multiescala reproduce adecuadamente esta respuesta combinada, tanto cuando las fuerzas

impulsoras actúan en el mismo sentido como cuando sus contribuciones deben evaluarse de manera independiente. En los casos en que el gradiente de presión y el campo eléctrico favorecen el movimiento en una misma dirección, ambas contribuciones se adicionan y producen velocidades superiores a las correspondientes al flujo exclusivamente electroosmótico.

Además, la incorporación de una fuente volumétrica en la ecuación de conservación de cargas permitió evaluar la formulación en una configuración más compleja, caracterizada por una distribución cuadrática del potencial eléctrico y, en consecuencia, por una variación espacial del campo eléctrico. El acoplamiento de esta solución con el problema fluidodinámico dio lugar a gradientes de presión inducidos y a perfiles macroscópicos diferentes de aquellos asociados con una caída lineal de potencial. La adecuada reproducción de estas respuestas mostró que el esquema no se limita a configuraciones electrocinéticas uniformes, sino que también puede representar problemas con fuentes internas y campos eléctricos espacialmente variables.

Los resultados del capítulo consolidan cuatro aportes principales: la incorporación eficiente de la aproximación de doble capa delgada mediante la condición de Helmholtz–Smoluchowski; la formulación del acoplamiento multiescala entre la conservación de cargas y el flujo de Stokes; la determinación y validación de las propiedades electrocinéticas efectivas; y la evaluación del modelo en escenarios de mayor complejidad, como el flujo mixto y los problemas eléctricos con fuentes volumétricas.

La formulación desarrollada constituye, por lo tanto, una herramienta físicamente consistente y computacionalmente eficiente para analizar el transporte electrocinético en los medios porosos estudiados. Su capacidad para representar la respuesta macroscópica sin resolver explícitamente la doble capa eléctrica ni la totalidad de la geometría microscópica favorece su aplicación al análisis y diseño de dispositivos μ PADs, dentro del régimen y de las hipótesis considerados.

6.4. Aportes a problemas de transporte de concentración

En el Capítulo 5 se desarrolló y evaluó una formulación multiescala para el estudio del transporte de solutos en medios porosos basados en papel, abarcando desde el régimen puramente difusivo hasta el problema advectivo–difusivo. Mediante la resolución del problema microscópico y el posterior procedimiento de homogeneización, se determinó el

tensor de difusividad efectiva ($\overline{\overline{D}}$) para las microestructuras representativas de los papeles Munktell 00A y Whatman #1. Esta formulación permitió vincular las variaciones locales de concentración y velocidad en el espacio poroso con la respuesta macroscópica del transporte.

En el régimen puramente difusivo, los valores de difusividad efectiva obtenidos fueron inferiores a la difusividad molecular de la especie en el fluido. Este resultado refleja el efecto restrictivo de la microestructura porosa, ya que la presencia de obstáculos sólidos reduce el volumen disponible para el transporte y genera constricciones y trayectorias más complejas que las existentes en un medio libre. La comparación entre ambos materiales mostró una mayor capacidad efectiva de transporte difusivo para el papel Whatman #1, asociada con su mayor porosidad y con una configuración geométrica más favorable para la conectividad de los caminos disponibles.

Desde el punto de vista metodológico, se analizaron distintas estrategias para imponer la condición de media requerida por la formulación multiescala. Esta restricción garantiza la consistencia entre el gradiente macroscópico prescrito y el promedio del gradiente microscópico, así como el cumplimiento del principio de Hill–Mandel extendido al problema de transporte escalar. Se comparó su imposición directa mediante multiplicadores de Lagrange con una estrategia basada en la fijación nodal y la posterior corrección del valor medio.

Los resultados mostraron que la fijación nodal con corrección a posteriori reproduce las propiedades efectivas obtenidas mediante multiplicadores de Lagrange y presenta un costo computacional considerablemente menor para el problema advectivo–difusivo. Por el contrario, cuando se omitió la corrección, se observaron desviaciones significativas, principalmente en la contribución advectiva del tensor efectivo. Esto demuestra que la fijación de la concentración en un punto permite eliminar la indeterminación del problema microscópico, pero no garantiza por sí sola la consistencia con el campo macroscópico impuesto. Por consiguiente, la corrección del valor medio constituye una etapa necesaria antes de efectuar la homogeneización.

La representatividad de las geometrías propuestas también se evaluó mediante el análisis de convergencia de las propiedades efectivas al aumentar el tamaño del dominio microscópico. Para ello, se consideraron dominios contruidos mediante la repetición periódica de la microcelda base. La estabilización de las componentes analizadas a partir de un determinado número de repeticiones respaldó la adopción de las geometrías como RVE para el transporte de concentración bajo las condiciones estudiadas. Esta verificación debe en-

tenderse como específica de la propiedad y del régimen de transporte considerados, dado que el tamaño necesario para alcanzar una respuesta representativa puede variar entre los casos puramente difusivo y advectivo–difusivo.

El análisis de sensibilidad permitió identificar una diferencia fundamental entre ambos regímenes. En el caso puramente difusivo, las propiedades efectivas permanecieron invariantes frente a cambios proporcionales en la escala geométrica, en concordancia con el carácter lineal del problema y con el escalamiento esperado para la difusión. En cambio, en el régimen advectivo–difusivo, las componentes del tensor efectivo mostraron una dependencia significativa tanto de la escala de la microestructura como de la velocidad impuesta. Esta dependencia surge porque una modificación de la longitud característica o de la velocidad altera el número de Péclet microscópico y, por lo tanto, la relación entre los mecanismos advectivo y difusivo.

También se observó que el incremento de la velocidad modifica de manera no lineal las componentes del tensor y acentúa su carácter anisótropo. La componente longitudinal y la transversal responden de forma diferente debido a la orientación del flujo principal y a las fluctuaciones locales de velocidad generadas por los obstáculos y las constricciones. En consecuencia, en presencia de advección, la difusividad efectiva no puede interpretarse exclusivamente como una propiedad geométrica intrínseca del material, sino como una magnitud emergente de la interacción entre la microestructura, la difusión molecular, el campo local de velocidades, la escala geométrica y el régimen de flujo impuesto.

La formulación multiescala se validó mediante comparaciones con simulaciones numéricas directas (DNS), en las que la geometría del espacio poroso fue resuelta explícitamente. Debido a que el DNS produce campos microscópicos con fluctuaciones asociadas a cada obstáculo y canal, sus resultados se procesaron mediante un promedio espacial para obtener perfiles comparables con la solución macroscópica homogeneizada. La concordancia alcanzada mostró que el modelo multiescala reproduce adecuadamente el comportamiento global de la concentración con un costo computacional menor que el requerido por la resolución explícita de toda la microestructura.

Las comparaciones también mostraron que las formulaciones basadas en propiedades homogeneizadas proporcionan una representación más adecuada que aquella obtenida al utilizar directamente la difusividad molecular como propiedad macroscópica. Esto evidencia la importancia de incorporar los efectos de la porosidad, la conectividad, la tortuosidad y la constricción en la determinación del tensor efectivo. Por su parte, la inclusión de la contribución advectiva produjo una mejora adicional en la dirección longitudinal, aunque

esta se concentró principalmente en una región reducida asociada con la capa límite de concentración.

La localización de variaciones intensas dentro de una capa límite cuyo espesor puede resultar comparable con la longitud característica microscópica permitió, además, identificar una limitación de la aproximación homogeneizada. En las proximidades de esta región, la separación entre las escalas microscópica y macroscópica puede verse comprometida localmente, debido a que el campo de concentración experimenta variaciones significativas sobre distancias del orden de la microestructura. Esta situación explica parte de las discrepancias observadas con la solución DNS y debe considerarse al interpretar la solución cerca de los bordes. No obstante, en el interior del dominio, donde los campos presentan variaciones más suaves, el modelo conserva una buena capacidad para describir la respuesta macroscópica.

Finalmente, se estudió la dispersión mecánica y se evaluó la aplicabilidad de la hipótesis clásica de dispersividad constante. El tensor de dispersión mecánica se calculó a partir de la diferencia entre el tensor efectivo correspondiente al régimen advectivo-difusivo y el obtenido para el caso puramente difusivo. Posteriormente, se determinaron las dispersividades longitudinal y transversal y se analizó su evolución con la velocidad.

Los resultados evidenciaron que la relación entre la dispersión mecánica y la velocidad no es lineal en todo el intervalo estudiado. En las proximidades de $v_x = 0$, el cálculo de la dispersividad resulta particularmente sensible, ya que implica dividir por valores pequeños de velocidad y puede amplificar las variaciones numéricas presentes en los coeficientes de dispersión. La componente transversal presentó un comportamiento positivo y comparativamente más regular, coherente con el desarrollo de mecanismos de mezcla lateral inducidos por las fluctuaciones del flujo. La componente longitudinal, en cambio, mostró una mayor sensibilidad y alcanzó valores negativos en determinados intervalos.

Estos valores negativos no implican necesariamente una difusividad efectiva total negativa, sino que indican que, bajo esas condiciones, el tensor advectivo-difusivo calculado presenta una componente longitudinal menor que la correspondiente al caso adoptado como referencia puramente difusiva. Este resultado requiere una interpretación cuidadosa, ya que puede reflejar la sensibilidad de la resta entre magnitudes próximas, las limitaciones de la descomposición utilizada o efectos particulares del acoplamiento entre el campo de velocidades y la concentración. Por esta razón, no resulta apropiado interpretar aisladamente la contribución dispersiva sin examinar simultáneamente el tensor efectivo total y su consistencia física.

El análisis realizado muestra que la hipótesis de dispersividad constante debe utilizarse con cautela en medios porosos basados en papel. Aunque puede constituir una aproximación adecuada dentro de intervalos de velocidad en los que se alcanza una relación aproximadamente lineal entre dispersión y velocidad, no describe de manera general todos los regímenes estudiados. En particular, las configuraciones analizadas presentan números de Péclet intermedios, para los cuales la difusión molecular y la advección contribuyen simultáneamente a la respuesta efectiva.

Al conservar explícitamente la función de corrección $f(\text{Pe}, r)$, la formulación multiescala permite representar desviaciones respecto de la relación lineal clásica y considerar la dependencia de la dispersión con el régimen de transporte. En consecuencia, la respuesta dispersiva de estos materiales no puede caracterizarse mediante una única dispersividad constante de validez universal, sino que debe analizarse en función de la microestructura, la escala geométrica, la velocidad, el número de Péclet, la definición del radio hidráulico y el intervalo de operación considerado.

Los aportes de este capítulo pueden sintetizarse en cinco aspectos principales: el desarrollo de una formulación multiescala aplicable desde el régimen puramente difusivo hasta el advectivo-difusivo; la evaluación de la representatividad del RVE y de estrategias eficientes para imponer la condición de media; la identificación de la dependencia de las propiedades efectivas respecto de la escala y la velocidad; la validación del comportamiento macroscópico frente a simulaciones numéricas directas, junto con la caracterización de las discrepancias locales asociadas a las capas límite; y el análisis de la dispersión mecánica y de los límites de la hipótesis de dispersividad constante.

Estos avances consolidan una herramienta metodológica capaz de predecir el transporte de solutos en las microestructuras de papel estudiadas e identificar los mecanismos físicos y las condiciones que controlan su respuesta efectiva. La formulación proporciona así una base para analizar y diseñar dispositivos **μPADs** en los que la interacción entre difusión, advección, dispersión y geometría porosa determina el transporte de los analitos.

6.5. Trabajos científicos derivados

A continuación se presenta una selección de trabajos presentados en congresos que puede considerarse representativa de los estudios y desarrollos abordados durante esta tesis doctoral:

- *Smooth and Stable Solutions in Darcy Flow Problems via a Simple Element-Free*

Galerkin-Based Approach, **J.C. Salazar Bove, J.C. Álvarez Hostos, P. Kler**, MECOM 2021 (Salazar Bove et al. [2021]).

- *Application of Multi-Scale Techniques to Problems of Flow Through Porous Media for Paper-Based Microfluidics*, **J.C. Salazar Bove, S. Toro, P. Kler**, MECOM 2022 (Salazar Bove et al. [2022]).
- *Multi-Scale Techniques to Problems of Scalar Transport Through Porous Media for Paper-Based Microfluidics*, **J.C. Salazar Bove, S. Toro, P. Kler**, MECOM 2023 (Salazar Bove et al. [2023]).
- *Assessing Electroosmotic Flow in Porous Media with Multi-scale Techniques for Paper-based Microfluidics*, **J.C. Salazar Bove, S. Toro, P. Kler**, MECOM 2024 (Salazar Bove et al. [2024]).
- *A Multiscale Approach to Coupled Scalar Transport in Electroosmotic Flow for Paper-Based Microfluidics*, **J.C. Salazar Bove, S. Toro, P. Kler**, MECOM 2025 (Salazar Bove et al. [2025a]).

Asimismo, se considera un trabajo publicado en revista internacional:

- *Multiscale Formulation for Assessment of Electroosmotic Flow in Paper-Based Microfluidics*, **J.C. Salazar Bove, S. Toro, P. Kler**, Electrophoresis 2025 (Salazar Bove et al. [2025b]).

Esta difusión constante permitió someter los resultados a la revisión crítica de la comunidad científica a lo largo de todo el desarrollo doctoral.

6.6. Líneas de investigación a futuro

A partir de los desarrollos y resultados alcanzados en esta tesis, se identifican diversas líneas de investigación orientadas a ampliar el alcance de la formulación multiescala y profundizar el estudio de los fenómenos de flujo y transporte en medios porosos basados en papel.

Una primera línea consiste en extender la metodología al estudio del flujo insaturado en medios porosos de papel. En las condiciones reales de operación de los dispositivos **pPADs**, el líquido puede ocupar solo una parte del espacio poroso y avanzar a través del sustrato impulsado por fuerzas capilares. La descripción de este proceso requiere incorporar la

evolución espacial y temporal de la saturación, la dependencia de la permeabilidad relativa respecto del contenido de líquido y los efectos capilares asociados con la interfaz entre las fases presentes. El desarrollo y la validación de herramientas multiescala que integren estos fenómenos permitirían representar condiciones de funcionamiento más próximas a las observadas durante el llenado y la operación de los dispositivos.

Una segunda línea de investigación corresponde al estudio específico de las capas límite desarrolladas en el problema de transporte escalar. Los resultados obtenidos mostraron que las principales diferencias entre las soluciones multiescala y las simulaciones numéricas directas se concentran en regiones de espesor reducido, caracterizadas por gradientes intensos de concentración. Por lo tanto, resulta de interés analizar la formación y evolución de estas capas límite en función de las condiciones de transporte, incluyendo la velocidad del fluido y la relación entre los mecanismos advectivo y difusivo.

Este análisis permitiría establecer cómo varía el espesor de la capa límite y determinar en qué condiciones su longitud característica llega a ser comparable con la escala de la microestructura. En tales circunstancias, la separación entre la micro y macroescala puede verse comprometida localmente, afectando la precisión de la solución homogeneizada. El estudio de este fenómeno contribuiría a delimitar con mayor claridad el rango de validez de la formulación multiescala y a identificar las configuraciones en las que resulta necesario incorporar un tratamiento específico de los efectos de borde.

También se propone profundizar el estudio de la dispersión mecánica en medios porosos basados en papel. Una etapa fundamental consistiría en realizar validaciones experimentales que permitan contrastar los coeficientes de dispersión y las dispersividades longitudinales y transversales obtenidos numéricamente. Estas comparaciones permitirían evaluar la capacidad predictiva del modelo y determinar si los comportamientos identificados mediante las microestructuras idealizadas se reproducen en sustratos reales.

Asimismo, sería de interés considerar microestructuras más complejas y materiales anisotrópicos. La incorporación de orientaciones preferenciales, variaciones geométricas y diferentes grados de conectividad permitiría analizar con mayor detalle la influencia de la geometría porosa sobre las fluctuaciones del campo de velocidades y los mecanismos de mezcla longitudinal y transversal. Estos estudios contribuirían a determinar el rango de condiciones en el que puede adoptarse una dispersividad aproximadamente constante y a identificar aquellos regímenes en los que su dependencia respecto de la velocidad, la dirección del transporte y las características de la microestructura debe conservarse explícitamente.

Otra línea de desarrollo corresponde a la extensión de la formulación a modelos tridimensionales. La incorporación de la tercera dimensión espacial permitiría representar estructuras porosas más complejas y describir variaciones de los campos a través del espesor del papel, las cuales se encuentran promediadas en la idealización bidimensional utilizada en esta tesis. Esta extensión requeriría formular y calcular las propiedades efectivas como tensores tridimensionales, lo que permitiría caracterizar tanto el transporte en el plano principal del sustrato como su posible acoplamiento con la dirección transversal.

La formulación tridimensional también permitiría analizar de manera más completa microestructuras anisótropas, en las que las propiedades efectivas dependen de la dirección considerada. De este modo, sería posible estudiar la influencia de la orientación espacial de las fibras y de la conectividad tridimensional del espacio poroso sobre los fenómenos de flujo, conducción eléctrica y transporte de especies; así como extrapolar este enfoque de estudios a otros medios porosos donde la simplificación de un análisis bidimensional no sea posible.

Finalmente, el enfoque desarrollado proporciona una base para integrar el modelado multiescala con la ingeniería de materiales en el diseño de nuevos dispositivos **pPADs**. Esta integración favorecería una transición desde estrategias de diseño descendentes (*top-down*), basadas en la adaptación de sustratos existentes, hacia metodologías ascendentes (*bottom-up*), en las que la microestructura se diseñe deliberadamente a partir de la respuesta macroscópica deseada.

Bajo este enfoque, la porosidad, la conectividad, la constricción, la orientación y la topología de los canales podrían considerarse variables de diseño vinculadas directamente con las propiedades efectivas y con el desempeño global del dispositivo. La metodología multiescala permitiría evaluar cómo las modificaciones introducidas en la arquitectura microscópica afectan el flujo y el transporte a escala macroscópica. De esta manera, la funcionalidad del dispositivo y la configuración del material podrían diseñarse de forma integrada, favoreciendo el desarrollo racional de nuevas microestructuras adaptadas a requerimientos específicos de operación.

Bibliografía

- A. Al-Dhahli, S. Geiger, and M. Van Dijke. Accurate modelling of pore-scale film and layer flow for three-phase eor in carbonate rocks with arbitrary wettability. In *SPE Improved Oil Recovery Symposium*, pages 1–16, apr 2012. doi: 10.2118/154019-MS. 18th SPE Improved Oil Recovery Symposium 2012 ; Conference date: 14-04-2012 Through 18-04-2012.
- A. M. Aly and M. Asai. Modelling of non-darcy flows through porous media using extended incompressible smoothed particle hydrodynamics. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 67(3):255–279, 2015. doi: 10.1080/10407790.2014.955772.
- J. Bear and Y. Bachmat. *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*, volume 1. Springer Dordrecht, 1991. doi: 10.1007/978-94-009-1926-6.
- J. Bear and A. H.-D. Cheng. *Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport*, volume 23. Springer Science & Business Media, Dordrecht, Netherlands, 2010. doi: 10.1007/978-1-4020-6682-5.
- I. Berre, F. Doster, and E. Keilegavlen. Flow in fractured porous media: A review of conceptual models and discretization approaches. *Transport in Porous Media*, 130(215–236), 2019. ISSN 1573-1634. doi: 10.1007/s11242-018-1171-6.
- P. J. Blanco and S. M. Giusti. Thermomechanical multiscale constitutive modeling: Accounting for microstructural thermal effects. *Journal of Elasticity*, 115(1):27–46, 2014. ISSN 1573-2681. doi: 10.1007/s10659-013-9445-2.
- P. J. Blanco, P. J. Sánchez, E. A. de Souza Neto, and R. A. Feijóo. Variational foundations and generalized unified theory of rve-based multiscale models. *Archives of Computational Methods in Engineering*, pages 191–253, 2016. doi: 10.1007/s11831-014-9137-5.
- H. Böhm. Short introduction to basic aspects of continuum micromechanics. Technical

- Report ILSB Report 206, Institute of Lightweight Design and Structural Biomechanics (ILSB) Vienna University of Technology, 2013.
- F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, volume 15 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer, New York, 1991. ISBN 978-1-4612-3172-1. doi: 10.1007/978-1-4612-3172-1.
- H. Bruus. *Theoretical Microfluidics*. Oxford University Press, 01 1997. ISBN 9780199235087. doi: 10.1093/oso/9780199235087.001.0001.
- R. Carbonell. Effect of pore distribution and flow segregation on dispersion in porous media ag. *Chemical Engineering Science*, 34(8):1031–1039, 1979. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/0009-2509(79)80003-2.
- J. Carmeliet, J.-F. Delerue, K. Vandersteen, and S. Roels. Three-dimensional liquid transport in concrete cracks. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 28(7-8):671–687, 2004. doi: 10.1002/nag.373.
- Z. Chen and T. Y. Hou. A mixed multiscale finite element method for elliptic problems with oscillating coefficients. *Mathematics of Computation*, 72(242):541–576, 2003. ISSN 00255718, 10886842.
- F. Civan. *Porous Media Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, Inc., 2011. ISBN 9780470649954. doi: 10.1002/9781118086810.
- V. Cnudde and M. Boone. High-resolution x-ray computed tomography in geosciences: A review of the current technology and applications. *Earth-Science Reviews*, 123:1–17, 2013. ISSN 0012-8252. doi: 10.1016/j.earscirev.2013.04.003.
- M. K. Das, P. P. Mukherjee, and K. Muralidhar. *Modeling Transport Phenomena in Porous Media with Applications*. Mechanical Engineering Series. Springer Cham, 2018. ISBN 978-3-319-69866-3.
- S. Das, Gagandeep, and R. Bhatia. Paper-based microfluidic devices: Fabrication, detection, and significant applications in various fields. *Reviews in Analytical Chemistry*, 41(1):112–136, 2022. doi: 10.1515/revac-2022-0037.
- E. T. de Vries, A. Raoof, and M. T. van Genuchten. Multiscale modelling of dual-porosity porous media; a computational pore-scale study for flow and solute transport. *Advances*

- in Water Resources*, 105:82–95, 2017. ISSN 0309-1708. doi: 10.1016/j.advwatres.2017.04.013.
- D. Dutta. A numerical analysis of nanofluidic charge based separations using a combination of electrokinetic and hydrodynamic flows. *Chemical Engineering Science*, 93:124–130, 2013. ISSN 0009-2509. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.01.062>.
- W. Ehlers and J. Bluhm. *Porous Media: Theory, Experiments and Numerical Applications*. Springer Berlin, Heidelberg, 1 edition, 2010. doi: 10.1007/978-3-662-04999-0.
- F. El Houdaigui, S. Forest, A. F. Gourgues, and D. Jeulin. *On the Size of the Representative Volume Element for Isotropic Elastic Polycrystalline Copper*. Springer Netherlands, 2007. ISBN 978-1-4020-5624-6.
- V. D. Fachinotti, S. Toro, P. J. Sánchez, and A. E. Huespe. Sensitivity of the thermomechanical response of elastic structures to microstructural changes. *International Journal of Solids and Structures*, 69-70:45–59, 2015. ISSN 0020-7683. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2015.06.009.
- V. D. Fachinotti, I. Peralta, S. Toro, B. A. Storti, and A. Caggiano. Automatic generation of high-fidelity representative volume elements and computational homogenization for the determination of thermal conductivity in foamed concretes. *Materials and Structures*, 56(10):179, 2023. ISSN 1871-6873. doi: 10.1617/s11527-023-02253-2.
- F. Feyel and J.-L. Chaboche. Fe2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre sic/ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183(3):309–330, 2000. ISSN 0045-7825. doi: 10.1016/S0045-7825(99)00224-8.
- N. Franck, F. Schaumburg, P. A. Kler, and R. Urteaga. Precise electroosmotic flow measurements on paper substrates. *Electrophoresis*, 42(7-8):975–982, 2021.
- N. Franck, C. L. Berli, and P. A. Kler. Multiphysics approach for fluid and charge transport in paper-based microfluidics. *Microfluidics and Nanofluidics*, 26(87), 2022. doi: 10.1007/s10404-022-02590-8.
- Y. Gao, C. Wang, Z. Gong, and Z. Li. A mini review on electroosmotic phenomena in porous media. *Energy Storage and Conversion*, 2(3):480, Jul. 2024. doi: 10.59400/esc.v2i3.480.

- G. S. Gerlero, S. Márquez Damián, F. Schaumburg, N. Franck, and P. A. Kler. Numerical simulations of paper-based electrophoretic separations with open-source tools. *ELECTROPHORESIS*, 42(16):1543–1551, 2021. doi: 10.1002/elps.202000315.
- G. S. Gerlero, C. L. Berli, and P. A. Kler. Open-source high-performance software packages for direct and inverse solving of horizontal capillary flow. *Capillarity*, 6(2), 2023. ISSN 2709-2119. doi: 10.46690/capi.2023.02.02.
- G. S. Gerlero, Z. I. Guerenstein, N. Franck, C. L. Berli, and P. A. Kler. Comprehensive numerical prototyping of paper-based microfluidic devices using open-source tools. *Talanta Open*, 10, 2024. ISSN 2666-8319. doi: <https://doi.org/10.1016/j.talo.2024.100350>.
- C. González and J. LLorca. Mechanical behavior of unidirectional fiber-reinforced polymers under transverse compression: Microscopic mechanisms and modeling. *Composites Science and Technology*, 67(13):2795–2806, 2007. ISSN 0266-3538. doi: 10.1016/j.compscitech.2007.02.001.
- A. A. Gusev. Representative volume element size for elastic composites: A numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45(9):1449–1459, 1997. ISSN 0022-5096. doi: 10.1016/S0022-5096(97)00016-1.
- A. A. Gusev. Asymptotic back strain approach for estimation of effective properties of multiphase materials. *Advanced Engineering Materials*, 9(1-2):117–120, 2007. doi: 10.1002/adem.200600117.
- L. Holzer, D. Wiedenmann, B. Münch, L. Keller, M. Prestat, P. Gasser, I. Robertson, and B. Grobéty. The influence of constrictivity on the effective transport properties of porous layers in electrolysis and fuel cells. *Journal of Materials Science*, 48:2934–2952, 2013. doi: 10.1007/s10853-012-6968-z.
- L. Holzer, P. Marmet, M. Fingerle, A. Wiegmann, M. Neumann, and S. V. *Tortuosity and Microstructure Effects in Porous Media*. Number 1. Springer Cham, 2023. doi: 10.1007/978-3-031-30477-4.
- Y. Hou, C.-C. Lv, Y.-L. Guo, X.-H. Ma, W. Liu, Y. Jin, B.-X. Li, M. Yang, and Shi-Yin. Recent advances and applications in paper-based devices for point-of-care testing. *Journal of Analysis and Testing*, 6:247–273, 2022. doi: 10.1007/s41664-021-00204-w.
- R. Hunter and L. White. *Foundations of Colloid Science*. Number v.1 in Foundations of Colloid Science. Clarendon Press, 1987. ISBN 9780198551881.

- Y. Ichikawa and A. P. S. Selvadurai. *Transport Phenomena in Porous Media: Aspects of Micro- Macro Behaviour*. Springer Berlin, Heidelberg, 2012. doi: 10.1007/978-3-642-25333-1.
- S. Jiang, H. Zhang, L. Chen, Y. Li, S. Sang, and X. Liu. Numerical simulation and experimental study of the electroosmotic flow in open microfluidic chip based on super-wettability surface. *Colloid and Interface Science Communications*, 45:100516, 2021. ISSN 2215-0382. doi: 10.1016/j.colcom.2021.100516.
- G. D. J. D. Josseline. Discussion of “longitudinal and transverse diffusion in granular deposits”. *Eos, Transactions American Geophysical Union*, 39(6):1160–1162, 1958. doi: <https://doi.org/10.1029/TR039i006p01160>.
- T. H. Kim, Y. K. Hahn, and M. S. Kim. Recent advances of fluid manipulation technologies in microfluidic paper-based analytical devices (μ PADs) toward multi-step assays. *Micromachines*, 11(3):269, 2020. doi: 10.3390/mi11030269.
- B. J. Kirby. *Micro- and Nanoscale Fluid Mechanics: Transport in Microfluidic Devices*. Cambridge University Press, 2010. doi: 10.1017/CBO9780511760723.
- E. Klaseboer and D. Y. Chan. On the derivation of the smoluchowski result of electrophoretic mobility. *Journal of Colloid and Interface Science*, 568:176–184, 2020. ISSN 0021-9797. doi: 10.1016/j.jcis.2020.02.032.
- K. Kobayashi, M. Iwata, Y. Hosoda, and H. Yukawa. Fundamental study of electroosmotic flow through perforated membrane. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 12(6):466–471, 1979. doi: 10.1252/jcej.12.466.
- A. Kumar, J. Hatayama, A. Soucy, E. Carpio, N. Rahmani, C. Anagnostopoulos, and M. Faghri. Fluid flow dynamics in partially saturated paper. *Micromachines*, 15(2), 2024. ISSN 2072-666X. doi: 10.3390/mi15020212.
- K. J. Land, D. I. Boeras, X.-S. Chen, A. R. Ramsay, and R. W. Peeling. Reassured diagnostics to inform disease control strategies, strengthen health systems and improve patient outcomes. *Nature microbiology*, 4(1):46–54, 2019.
- W. Li, X. Ma, Y.-C. Yong, G. Liu, and Z. Yang. Review of paper-based microfluidic analytical devices for in-field testing of pathogens. *Analytica Chimica Acta*, 1278:341614, 2023. ISSN 0003-2670. doi: 10.1016/j.aca.2023.341614.

- J. Lugo, J. del Río, and J. Tagüeña-Martínez. Surface contributions to the effective optical properties of porous silicon. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 52(3):239–249, 1998. ISSN 0927-0248. doi: 10.1016/S0927-0248(97)00244-4.
- J. Lyklema. *Fundamentals of interface and colloid science. Volume I: Fundamentals*. Academic Press, United States, 1991. ISBN 9780124605251.
- D. Mabey, R. W. Peeling, A. Ustianowski, and M. D. Perkins. Diagnostics for the developing world. *Nature Reviews Microbiology*, 2(3):231–240, 2004.
- A. G. Marinopoulos, V. Vitek, and J. L. Bassani. Local and effective elastic properties of grain boundaries in silicon. *physica status solidi (a)*, 166(1):453–473, 1998. doi: 10.1002/(SICI)1521-396X(199803)166:1<453::AID-PSSA453>3.0.CO;2-R.
- C. Miehe, J. Schotte, and J. Schröder. Computational micro–macro transitions and overall moduli in the analysis of polycrystals at large strains. *Computational Materials Science*, 16(1):372–382, 1999. ISSN 0927-0256. doi: 10.1016/S0927-0256(99)00080-4.
- A. Moshfegh and A. Jabbarzadeh. Fully explicit dissipative particle dynamics simulation of electroosmotic flow in nanochannels. *Microfluid Nanofluid*, 20(67):1–17, 2016. doi: 10.1007/s10404-016-1733-2.
- S. Nemat-Nasser, M. Hori, and J. Achenbach. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*. North-Holland Series in Applied Mathematics and Mechanics. North Holland, 2013. ISBN 9781483291512.
- M. Ostoja-Starzewski. Material spatial randomness: From statistical to representative volume element. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 21(2):112–132, 2006. ISSN 0266-8920. doi: 10.1016/j.probengmech.2005.07.007.
- T. Paillat, E. Moreau, P. Grimaud, and G. Touchard. Electrokinetic phenomena in porous media applied to soil decontamination. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 7(5):693–704, 2000. doi: 10.1109/94.879363.
- P. K. Panigrahi. *Transport phenomena in microfluidic systems*. John Wiley & Sons, 2016.
- E. E. Petersen. Diffusion in a pore of varying cross section. *AIChE Journal*, 4(3):343–345, 1958. doi: 10.1002/aic.690040322.

- M.-J. Pindera, H. Khatam, A. S. Drago, and Y. Bansal. Micromechanics of spatially uniform heterogeneous media: A critical review and emerging approaches. *Composites Part B: Engineering*, 40(5):349–378, 2009. ISSN 1359-8368. doi: 10.1016/j.compositesb.2009.03.007.
- A. Piovesan, R. Nicasy, T. Arens, B. Dequeker, J. Soete, C. Achille, R. Dochy, C. Parra Cabrera, R. Ameloot, P. Verboven, and B. Nicolai. Multiscale modelling of capillary imbibition in 3d-printed porous microfluidic channels. *Microfluidics and Nanofluidics*, 26(21), 2022. doi: 10.1007/s10404-022-02528-0.
- K. Pruess and Y. W. Tsang. On two-phase relative permeability and capillary pressure of rough-walled rock fractures. *Water Resources Research*, 26(9):1915–1926, 1990. doi: 10.1029/WR026i009p01915.
- P. Råback, M. Malinen, J. Ruokolainen, A. Pursula, and T. Zwinger. *Elmer Models Manual*. CSC – IT Center for Science, Helsinki, Finland, 2013. URL <https://www.csc.fi/web/elmer/>.
- M. E. Rhodes, B. Bijeljic, and M. J. Blunt. Pore-to-field simulation of single-phase transport using continuous time random walks. *Advances in Water Resources*, 31(12):1527–1539, 2008. ISSN 0309-1708. doi: 10.1016/j.advwatres.2008.04.006.
- C. L. Rice and R. Whitehead. Electrokinetic flow in a narrow cylindrical capillary. *The Journal of Physical Chemistry*, 69(11):4017–4024, 1965. ISSN 0022-3654. doi: 10.1021/j100895a062.
- S. Sachdeva, R. W. Davis, and A. K. Saha. Microfluidic point-of-care testing: Commercial landscape and future directions. *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 8, 2021. doi: 10.3389/fbioe.2020.602659.
- J. C. Salazar Bove, J. C. Álvarez Hostos, and P. A. Kler. Smooth and stable solutions in darcy flow problems via a simple element-free galerkin-based approach. In *Flujo Multifásico y Transporte en Medios Porosos y Microescala*, 2021.
- J. C. Salazar Bove, S. Toro, and P. A. Kler. Application of multi-scale techniques to problems of flow through porous media for paper-based microfluidic. In *Flujo Multifásico y Transporte en Medios Porosos y Microescala*, 2022.

- J. C. Salazar Bove, S. Toro, and P. A. Kler. Multi-scale techniques to problems of scalar transport through porous media for paper-based microfluidics. In *Flujo Multifásico y Transporte en Medios Porosos y Microescala*, 2023.
- J. C. Salazar Bove, S. Toro, and P. A. Kler. Assessing electroosmotic flow in porous media with multi-scale techniques for paper-based microfluidics. In *Flujo Multifásico y Transporte en Medios Porosos y Microescala*, volume 1, 2024. doi: 10.70567/rmc.v1i9.
- J. C. Salazar Bove, S. Toro, and P. A. Kler. A multiscale approach to coupled scalar transport in electroosmotic flow for paper-based microfluidics. In *Modelado Multiescala de la Mecánica y la Física de Materiales Complejos*, volume 2, 2025a. doi: 10.70567/rmc.v2.i9.
- J. C. Salazar Bove, S. Toro, and P. A. Kler. Multiscale formulation for assessment of electroosmotic flow in paper-based microfluidics. *ELECTROPHORESIS*, 46(13-14): 921–932, 2025b. doi: 10.1002/elps.202400228.
- M. Salmi, F. Auslender, M. Bornert, and M. Fogli. Various estimates of representative volume element sizes based on a statistical analysis of the apparent behavior of random linear composites. *Comptes Rendus Mécanique*, 340(4):230–246, 2012. ISSN 1631-0721. doi: 10.1016/j.crme.2012.02.007.
- A. Sangani and A. Acrivos. Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer. *International Journal of Multiphase Flow*, 8(3):193–206, 1982. ISSN 0301-9322. doi: 10.1016/0301-9322(82)90029-5.
- F. Schaumburg, R. Urteaga, P. A. Kler, and C. L. A. Berli. Design keys for paper-based concentration gradient generators. *Journal of Chromatography A*, 1561:83–91, 2018. doi: 10.1016/j.chroma.2018.05.040.
- A. E. Scheidegger. General theory of dispersion in porous media. *Journal of Geophysical Research (1896-1977)*, 66(10):3273–3278, 1961. doi: <https://doi.org/10.1029/JZ066i010p03273>.
- S. Shriram and G. Somnath. Statistically equivalent representative volume elements for unidirectional composite microstructures: Part ii - with interfacial debonding. *Journal of Composite Materials*, 40(7):605–621, 2006. doi: 10.1177/0021998305055274.

- S. Shriram, G. Somnath, and N. J. Pagano. Statistically equivalent representative volume elements for unidirectional composite microstructures: Part i - without damage. *Journal of Composite Materials*, 40(7):583–604, 2006. doi: 10.1177/0021998305055273.
- M. Smoluchowski. Contribution to the theory of electroosmosis and related phenomena. *The Bulletin International de l'Academie des Sciences de Cracovie*, 3:184–199, 1903.
- C. Soize. Tensor-valued random fields for meso-scale stochastic model of anisotropic elastic microstructure and probabilistic analysis of representative volume element size. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 23(2):307–323, 2008. ISSN 0266-8920. doi: 10.1016/j.pro bengmech.2007.12.019.
- E. A. Souza Neto and R. A. Feijóo. *Variational Foundations of Large Strain Multiscale Solid Constitutive Models: Kinematical Formulation*, chapter 9, pages 341–378. John Wiley & Sons, Ltd, 2010. ISBN 9783527632312. doi: 10.1002/9783527632312.ch9.
- M. O. Steinhauser. *Computational Multiscale Modeling of Fluids and Solids: Theory and Applications*. Springer Cham, 3 edition, 2022. doi: 10.1007/978-3-030-98954-5.
- E. B. Strong, S. A. Schultz, A. W. Martinez, and N. W. Martinez. Fabrication of miniaturized paper-based microfluidic devices (micropads). *Scientific reports*, 9(1):7, 2019. doi: 10.1038/s41598-018-37029-0.
- P. Tahmasebi and S. Kamrava. Rapid multiscale modeling of flow in porous media. *Phys. Rev. E*, 98:052901, Nov 2018. doi: 10.1103/PhysRevE.98.052901.
- S. Toro. *Modelado de falla de materiales mediante formulaciones multiescala*. PhD thesis, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas. Universidad Nacional del Litoral, 2014.
- C.-C. Tseng, C.-T. Kung, R.-F. Chen, M.-H. Tsai, H.-R. Chao, Y.-N. Wang, and L.-M. Fu. Recent advances in microfluidic paper-based assay devices for diagnosis of human diseases using saliva, tears and sweat samples. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 342:130078, 2021. ISSN 0925-4005. doi: 10.1016/j.snb.2021.130078.
- R. Urteaga, E. Elizalde, and C. L. A. Berli. Transverse solute dispersion in microfluidic paper-based analytical devices (μPADs). *Analyst*, 2018. doi: 10.1039/C8AN00149A.
- K. Vafai, editor. *Handbook of Porous Media*. Taylor & Francis Group, 3 edition, 2015. ISBN 978-1-4398-8557-4.

- B. P. van Milligen and P. D. Bons. Analytical model for tracer dispersion in porous media. *Phys. Rev. E*, 85:011306, Jan 2012. doi: 10.1103/PhysRevE.85.011306.
- A. Wagner, E. Eggenweiler, F. Weinhardt, Z. Trivedi, D. Krach, C. Lohrmann, K. Jain, N. Karadimitriou, C. Bringedal, P. Volland, C. Holm, H. Class, H. Steeb, and I. Rybak. Permeability estimation of regular porous structures: A benchmark for comparison of methods. *Transport in Porous Media*, 138:1–23, 2021. doi: 10.1007/s11242-021-01586-2.
- C. Wang. Stokes flow through an array of staggered strips. *Applied Scientific Research*, 59:27–41, 1997. doi: 10.1023/A:1000854414909.
- C. Wang, M. Liu, Z. Wang, S. Li, Y. Deng, and N. He. Point-of-care diagnostics for infectious diseases: From methods to devices. *Nano Today*, 37:101092, 2021. ISSN 1748-0132. doi: 10.1016/j.nantod.2021.101092.
- C. Y. Wang. Stokes flow through a rectangular array of circular cylinders. *Fluid Dynamics Research*, 29(2):65, aug 2001. doi: 10.1016/S0169-5983(01)00013-2.
- M. Wang and N. Pan. Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 63(1):1–30, 2008. ISSN 0927-796X. doi: 10.1016/j.mser.2008.07.001.
- P. Yager, T. Edwards, E. Fu, K. Helton, K. Nelson, M. R. Tam, and B. H. Weigl. Microfluidic diagnostic technologies for global public health. *Nature*, 442(7101):412–418, 2006. doi: 10.1038/nature05064.
- S. Yang, H. Zhang, Y. Hu, H. Jin, J. Hu, H. Li, and M. Lu. Experimental study on remediation of petroleum-contaminated soil by combination of freeze-thaw and electro-osmosis. *Environmental Pollution*, 333:121989, 2023. ISSN 0269-7491. doi: 10.1016/j.envpol.2023.121989.
- J. Yvonnet. *Computational Homogenization of Heterogeneous Materials with Finite Elements*. Springer International Publishing, Switzerland AG, 2019. doi: 10.1007/978-3-030-18383-7_1.



Doctorado en Ingeniería **mención Mecánica computacional**

Título de la obra:

Modelado numérico de flujo y transporte en dispositivos microfluídicos micro y nanoestructurados utilizando técnicas multiescalas

Autora: Joselynn Carolina Salazar Bove

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

microfluídica en papel, simulaciones numéricas, medios porosos, técnicas multiescala, elemento de volumen representativo, transporte escalar, flujo electroosmótico, Método de Elementos Finitos, mecánica computacional