

Control de la dispersión de un soluto por medio de la geometría del canal

Solute Dispersion Control Through Channel Geometry

Carlos Teodoro^{a,b}, Adolfo Correa^a, Shamir Bahena-Jimenez^b, Oscar Bautista^a

^a ESIME Azcapotzalco, Instituto Politécnico Nacional,
Avenida de las Granjas 682, Colonia Santa Catarina, Alcaldía Azcapotzalco, 02250, Ciudad de México, CDMX, Mexico

^b Tecnológico Nacional de México, Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec
Av. Tecnológico S/N Colonia Valle de Ana'huac, Sec. Fuentes, 55210, Ecatepec, Estado de México, Mexico

*Carlos Teodoro. Dirección correo electrónico: carlos_teo@tese.edu.mx

Resumen

La dispersión de solutos es un fenómeno ampliamente estudiado debido a sus múltiples aplicaciones en áreas como la ingeniería química, biomédica y ambiental. Sin embargo, algunos aspectos continúan siendo objeto de investigación, particularmente el efecto de la geometría del canal el cual influye directamente en la posición y la varianza de la distribución del soluto. Comprender la influencia de este parámetro resulta fundamental para diversas aplicaciones. En este trabajo se analiza la dispersión de un soluto en un fluido newtoniano que fluye a través de un canal axisimétrico de geometría arbitraria y se propone una expresión para determinar la posición media de la distribución en función del tiempo. Los resultados muestran que la geometría ejerce una influencia significativa en este comportamiento.

Abstract

Solute dispersion has been extensively studied because of its wide range of applications in chemical, biomedical, and environmental engineering. Nevertheless, some aspects remain under investigation, particularly the effects of channel geometry which directly influence the mean position and variance of the solute distribution. Understanding the role of that parameter is essential for numerous applications. In this work, the dispersion of a solute in a Newtonian fluid flowing through an axisymmetric channel with arbitrary geometry is investigated, and an expression for the time evolution of the mean position of the solute distribution is derived. The results indicate that channel geometry has a significant effect on the mean position.

Palabras clave:

Evaluación de Biodigestor, Valorización energética, Biogás doméstico, Compresión manual

Keywords:

Biodigester evaluation, Energy recovery, Domestic biogas, Manual compression

Introducción

El transporte y la dispersión de especies disueltas en flujos de canal son de fundamental importancia en numerosas aplicaciones, incluyendo el transporte fisiológico, el procesamiento químico y los sistemas microfluídicos. En muchas de estas situaciones, comprender la evolución espacial y temporal de las distribuciones de solutos es esencial para controlar los procesos de mezcla, separación y reacción. En consecuencia, el análisis de los fenómenos de dispersión ha recibido considerable atención durante las últimas décadas.

Los fundamentos teóricos de la dispersión de solutos fueron establecidos por Taylor [1], quien investigó el transporte de un soluto pasivo en un flujo impulsado por presión a través de un tubo cilíndrico. Demostró que, tras un tiempo suficientemente prolongado, la difusión molecular radial homogeneiza las variaciones de concentración a lo largo de la sección transversal, lo que permite una descripción unidimensional efectiva del proceso de transporte. Posteriormente, Aris [2] generalizó el análisis

de Taylor e introdujo el método de los momentos, proporcionando un marco riguroso para describir la evolución de la concentración media y su varianza. En conjunto, estos estudios constituyen la teoría clásica de dispersión de Taylor-Aris.

Desde entonces, numerosas investigaciones han extendido la teoría original a condiciones de flujo y geometrías de canal más complejas. En particular, la influencia de los límites no uniformes ha suscitado un interés considerable, ya que las variaciones geométricas pueden modificar significativamente las características de transporte del soluto. Brenner, en 1980 [6] desarrolló un marco teórico para canales espacialmente periódicos, mientras que estudios posteriores examinaron la dispersión en geometrías sinusoidales y no periódicas [7-9]. Más recientemente, Chang y Santiago en 2023 [10] analizaron la dispersión de Taylor-Aris en canales axisimétricos con radios que varían lentamente y derivó una ecuación efectiva que incorpora la influencia de la geometría en el

transporte del soluto. Recientemente, Teodoro et al. [11] estudiaron la dispersión de Taylor-Aris en un fluido viscoelástico descrito mediante el modelo Phan-Thien-Tanner y desarrollaron una formulación para la evolución de la posición media de la distribución del soluto. En el presente trabajo se retoma dicha idea en el límite newtoniano con el propósito de obtener una expresión simplificada y analizar de manera aislada el efecto de la geometría del canal.

Si bien la mayoría de los estudios se han centrado principalmente en el coeficiente de dispersión efectivo, la evolución del primer momento de la distribución de concentración también es de interés práctico. El conocimiento de la posición del centroide de concentración proporciona información útil sobre la propagación de especies disueltas y puede contribuir al diseño y la optimización de dispositivos microfluídicos y procesos de separación. Además, comprender cómo esta magnitud depende de la geometría del canal puede proporcionar información adicional sobre los mecanismos de transporte involucrados.

En este trabajo, retomamos la dispersión de Taylor-Aris en canales axisimétricos con secciones transversales que varían lentamente bajo condiciones de flujo newtoniano. Partiendo de la ecuación de convección-difusión y empleando la metodología clásica introducida por Taylor y Aris, se considera un modelo matemático reducido que rige la evolución de la concentración media. Se presta especial atención a una expresión simplificada que predice la evolución temporal de la posición media de la distribución del soluto. Se investiga el efecto de diferentes geometrías de canal sobre esta magnitud y se evalúan las predicciones del modelo simplificado mediante simulaciones numéricas.

Planteamiento del problema

La Fig. 1 ilustra la configuración física del problema analizado. Se considera un canal axisimétrico de longitud σ , cuya sección transversal varía gradualmente en la dirección axial de acuerdo con el radio $a(z)$. El sistema se expresa en coordenadas cilíndricas (r, z) , tomando como origen el centro de la entrada del canal. A través de esta geometría circula un fluido newtoniano. La velocidad axial promedio del flujo está dada por:

$$U(z) = \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a u_z 2\pi r dr, \quad (1)$$

donde u_z representa la velocidad axial del fluido. Además, se considera un flujo volumétrico constante. Para una posición de $z=0$, la velocidad y el radio del canal corresponde a U_0 y a_0 respectivamente. La variación axial del radio es suave y está dada por $\beta(z) = \partial a / \partial z$ y una segunda derivada $\gamma(z) = d^2 a / dz^2$. La relación geométrica de esbeltez del canal es representada como $\epsilon = a_0 / \sigma \ll 1$, el cual permite simplificar el modelo matemático considerando la teoría de la lubricación. Se considera un fluido estacionario originado por un gradiente

de presión, de tal forma que el caudal de flujo es constante. Al utilizar dichas suposiciones y sustituir en las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento y de masa, con condiciones de no deslizamiento para las paredes, se determina que la ec. (1) está dada como:

$$Uz = \frac{a^2}{8\eta} \left(-\frac{dp}{dz} \right), \quad (2)$$

donde η es la viscosidad del fluido y dp/dz representa el gradiente de presión axial.

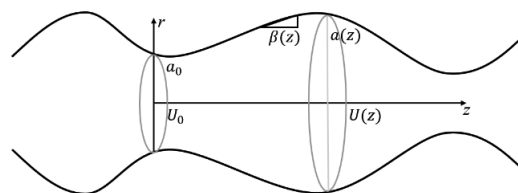


Figura 1 - Un diagrama esquemático representa un canal axisimétrico de forma arbitraria con un radio $a(z)$ que varía lentamente, a través del cual fluye un fluido no newtoniano.

Las velocidades tanto axiales como radiales u_r expresadas en función de la velocidad promedio dada en la ec. (2) fueron calculadas como:

$$u_z = 2U \left(1 - \frac{r^2}{a^2} \right), \quad (3)$$

$$u_r = 2\beta U \left(\frac{r}{a} - \frac{r^3}{a^3} \right), \quad (4)$$

Las ecs. (3) y (4) están escritas en función de $U(z)$, para evitar la necesidad de que queden expresadas en función del gradiente de presión, el cual varía a lo largo del canal, ya que las variaciones geométricas producen que dicho gradiente varíe axialmente. Una vez descrita la hidrodinámica del problema se precede a realizar el análisis de Taylor.

La Tabla 1 muestra la nomenclatura utilizada a lo largo del presente trabajo.

Tabla 1 – Nomenclatura utilizada en el trabajo

Símbolo	Descripción
a	Radio del canal
a_0	Radio de referencial del canal
c	Concentración de soluto
$\langle c \rangle$	Concentración media en la sección transversal
c'	Concentración fluctuante
D	Coefficiente de difusión molecular
D_{eff}	Coefficiente de dispersión efectivo
Pe	Número de Péclet
r	Coordenada radial
t	Tiempo
$U(z)$	Velocidad promedio del fluido

U_0	Velocidad de referencia del fluido
U_r, U_z	Componentes de la velocidad (radial y axial)
z	Coordenada axial
$\beta(z)$	Primera derivada del radio
$\gamma(z)$	Segunda derivada del radio
ϵ	Relación de esbeltez (a_0/σ)
η	Viscosidad dinámica del fluido
σ	Longitud del canal
ζ, τ	Coordenadas axial y temporal transformadas

Análisis de Taylor

Utilizando la ecuación de convección-difusión para determinar el campo de concentración $c(r, z, t)$ de un soluto neutro transportado por un fluido newtoniano que fluye a través del canal mostrado en la figura 1 se tiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_r \frac{\partial c}{\partial r} + u_z \frac{\partial c}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right], \quad (5)$$

En la ec. (5) D el coeficiente de difusión molecular del soluto dentro del fluido. De acuerdo con el análisis de Aris-Taylor, se expresa una variable θ como la suma de dos componentes: una que se promedia sobre el área de la sección transversal, denotada como $\langle \theta \rangle = (2/a(z)^2) \int_0^{a(z)} \theta r dr$, y una componente fluctuante θ' . Por lo tanto, representamos $\theta(r, z, t)$ de la siguiente manera:

$$\theta(r, z, t) = (\theta)(z, t) + \theta'(r, z, t), \quad (6)$$

Considerando la aproximación dada en la ec. (6) para el campo de velocidad dado en las ecs. (2) y (3) se tiene:

$$(u_z) = U, \quad u'_z = U \left(1 - \frac{2r^2}{a^2} \right), \quad (7)$$

$$(u_r) = \frac{8\beta}{15} U, \quad u'_r = 2\beta U \left(\frac{r}{a} - \frac{r^3}{a^3} - \frac{4}{15} \right), \quad (8)$$

Sustituyendo la aproximación de la ec. (6) en la ec. (5), se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(c)}{\partial t} + \frac{\partial c'}{\partial t} + \langle u_r \rangle \frac{\partial c'}{\partial r} + u'_r \frac{\partial c'}{\partial r} + \langle u_z \rangle \frac{\partial(c)}{\partial z} + u'_z \frac{\partial(c)}{\partial z} + \\ \langle u_z \rangle \frac{\partial c'}{\partial z} + u'_z \frac{\partial c'}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c'}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

Siguiendo con el análisis de Taylor, la ec. (9) se promedia transversalmente, se simplifica matemáticamente utilizando la regla de Leibniz, integración por partes, regla de la cadena, obteniéndose:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \frac{2 \langle u_r \rangle}{a^2} \left(ac'(a) - \int_0^a c' dr \right) + \langle u_z \rangle \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial z} + \left\langle u'_r \frac{\partial c'}{\partial r} \right\rangle - \\ \frac{2 \langle u_z \rangle c'(a) \beta}{a} + \left\langle u'_z \frac{\partial c'}{\partial z} \right\rangle = D \left[\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \frac{2}{a} \frac{\partial c'}{\partial r} \right]_{r=a} - \frac{2 \gamma c'(a)}{a} - \\ \frac{4 \beta}{a^2} \frac{\partial (rc')}{\partial z} \Big|_{r=a} \end{aligned} \quad (10)$$

Posteriormente se le resta la ec. (10) a la ec. (9) para obtener una ecuación de la concentración fluctuante, resultando en:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c'}{\partial t} + \langle u_r \rangle \frac{\partial c'}{\partial r} - \frac{2 \langle u_r \rangle}{a^2} \left(ac'(a) - \int_0^a c' dr \right) + u'_r \frac{\partial c'}{\partial r} - \\ \left\langle u'_r \frac{\partial c'}{\partial r} \right\rangle + u'_z \frac{\partial(c)}{\partial z} + \langle u_z \rangle \frac{\partial c'}{\partial z} + \frac{2 \langle u_z \rangle c'(a) \beta}{a} - \left\langle u'_z \frac{\partial c'}{\partial z} \right\rangle + \\ u'_z \frac{\partial c'}{\partial z} = D \left[\frac{\partial^2 c'}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c'}{\partial r} \right) - \frac{2}{a} \frac{\partial c'}{\partial r} \right]_{r=a} + \frac{2 \gamma c'(a)}{a} + \\ \frac{4 \beta}{a^2} \frac{\partial (rc')}{\partial z} \Big|_{r=a} \end{aligned} \quad (11)$$

Análisis de órdenes de magnitud para tiempos largos $\sim \sigma/U_0$

El análisis de Taylor nos sugiere que, una vez obtenida una ecuación para la componente fluctuante de la concentración, dada en la ec. (11), se proceda a realizar un análisis de órdenes de magnitud. En cuestión del tiempo, es posible identificar distintas escalas de tiempo. Por ejemplo, una escala corta relacionada con la difusión radial dada por $t_r \sim a_0^2/D$, el tiempo de convección axial $t_c \sim \sigma/U_0$ y el tiempo de difusión axial $t_a \sim \sigma^2/D$, donde típicamente para un canal largo $t_r \ll t_c \ll t_a$. El problema clásico de Taylor se centra en tiempos largos respecto al tiempo característico de difusión radial. En consecuencia, el análisis se realiza utilizando la escala convectiva. Considerando esta escala, se tiene que $t_r \sim \epsilon P_e$ y $t_a \sim P_e/\epsilon$, donde $P_e = U_0 a_0/D$ es el número de Péclet que representa la competencia entre la difusión convectiva y la difusión molecular.

Para ello, se procede a adimensionalizar las ecuaciones, es decir, expresar las variables en términos de variables sin dimensiones, cuyo valor se encuentra normalizado con las siguientes variables adimensionales señaladas con el superíndice superíndice *: $z = \sigma z^*$, $r = a_0 r^*$, $a(z) = a_0 a^*(z^*)$, $\beta(z) = \beta_0 \beta^*(z^*)$, $t = (\sigma/U_0) t^*$, $u_z = U_0 u_z^*$, $u_r = \epsilon U_0 u_r^*$, $\langle c \rangle = c_0 \langle c^* \rangle$ y $c' = c_0' c'^*$, donde c_0 y c_0' representan las concentraciones características del soluto para los componentes promediados y fluctuantes, respectivamente, donde $c_0' \ll c_0$ porque c_0' es una pequeña desviación en la concentración del promedio de la sección transversal. Los valores de referencia de estas escalas características son descritos en la Tabla 1. Al sustituir dichas escalas en la ec. (11), se identifican términos que no

son relevantes para el fenómeno al ser mucho menores que otros términos que dominan la física del problema. Despreciando términos de orden $c_0'/c_0 \sim \epsilon, \epsilon, \epsilon^2$ y regresando a su forma dimensional se tiene la ecuación para la concentración fluctuante como:

$$u'_z \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial z} = D \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c'}{\partial r} \right) - \frac{2}{a} \frac{\partial c'}{\partial r} \right]_{r=a} \quad (12)$$

Tabla 2– Valores de referencia de parámetros físicos involucrados en el trabajo [11,12].

Variable física	Valor	Unidades
Radio, a_0	10^{-5}	m
Longitud, σ	10^{-3}	m
Velocidad, U_0	10^{-3}	ms ⁻¹
Coefficiente de difusión molecular, D	10^{-9}	m ² s ⁻¹

Determinación de la concentración fluctuante y modelo de concentración promedio

La concentración del soluto se encuentra sujeta a que lejos de la región de estudio la concentración es cero, $c(r, z \rightarrow \pm\infty, t) = 0$, de simetría en el centro del canal $\partial c / \partial r(0, z, t) = 0$ y la condición de impermeabilidad en la pared que puede escribirse como $\nabla c(a, z, t) \cdot \mathbf{n} = 0$, donde ∇c es el gradiente de concentración $\mathbf{n}$ es el vector normal a la superficie, el cual depende directamente de la geometría. El gradiente de concentración está dado por:

$$\nabla c = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rc), \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (13)$$

mientras que $\mathbf{n}$ está dado por el gradiente de la función escalar que define el radio del canal, es decir, $\mathbf{n} = \nabla(r-a(z)) = (1, -\beta)$, por lo que la condición de impermeabilidad se puede expresar como:

$$-\frac{\partial c}{\partial z} \bigg|_{r=a} \beta + \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial r} (cr) \bigg|_{r=a} = 0 \quad (14)$$

La ec. (14) escrita en términos de $\langle c \rangle$ y c' , despreciando términos de orden (ϵ^2) se tiene:

$$-\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial z} \bigg|_{r=a} \beta + \frac{\partial c'}{\partial z} \bigg|_{r=a} = 0 \quad (15)$$

Sustituyendo la ec. (15) en la ec. (12) se obtiene la siguiente ecuación que permite calcular la concentración fluctuante en función de la concentración promedio, resultando en:

$$D \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c'}{\partial r} \right) = u'_z \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial z} + \frac{2D\beta}{a} \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial z} \quad (16)$$

Integrando dos veces la ec. (16) y sustituyendo u'_z descrita

en la ec. (7) para encontrar c' y considerando la condición de simetría y que el promedio transversal de cualquier variable fluctuante es nulo, es decir, $\langle c' \rangle = 0$, es posible encontrar la siguiente expresión para c' :

$$c' = \frac{1}{D} \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial z} \left[U \left(\frac{r^2}{4} - \frac{r^4}{8a^2} - \frac{a^2}{12} \right) + \frac{\beta D}{a} \left(\frac{r^2}{2} - \frac{a^2}{4} \right) \right] \quad (17)$$

Una vez definida la concentración fluctuante dada en la ec. (17), es sustituida en la ec. (10) que representa la ecuación de convección-difusión promediada transversalmente y despreciando términos de orden (ϵ) y (ϵ^2) se obtiene el modelo matemático para determinar la concentración promedio en función de la posición axial y del tiempo, el cual está dado por:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial z} \left(U - \frac{2D\beta}{a} \right) = D \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial z^2} \left[1 + \frac{a^2}{48D^2} U^2 \right] \quad (18)$$

La ec. (18) es una ecuación de convección-difusión para la concentración promedio, la cual depende de su posición axial y del tiempo. Es común en este tipo de modelo, identificar el coeficiente de dispersión efectivo expresado como:

$$D_{eff} = D \left[1 + \frac{a^2}{48D^2} U^2 \right] \quad (19)$$

El modelo descrito en la ec. (18) difiere de la ecuación clásica de Taylor únicamente en el término que contiene β , es decir, para canales con radio constante, se recupera dicha solución.

Propuesta para determinar la evolución de la posición promedio

La ec. (18) es idéntica a la obtenida por Chang y Santiago [7] en su trabajo. En dicho trabajo, se explora que para casos en donde la radio varía axialmente, el coeficiente de dispersión efectivo es insuficiente para poder predecir como se lleva a cabo el proceso de convección-difusión del soluto y lo demuestran por medio de una variación del método de momentos para encontrar un modelo que describe la evolución de la posición del centro de masa de la distribución del soluto y su varianza.

A continuación, se presenta una propuesta para simplificar la ec. (18) y pueda ser resuelta numéricamente y además, se pueda obtener una expresión sencilla que permite determinar la evolución de la posición promedio. Una solución clásica del modelo de Taylor para canales con radio constante consiste en proponer una nueva variable definida como $\xi = z - Ut$, la cual permite simplificar el modelo matemático en una ecuación de difusión simple con solo dos términos la cual puede ser resuelta de manera analítica por diversos métodos. Dicha variable permite que el término convectivo sea absorbido en el término difusivo. Bajo este hecho, se plantea

la posibilidad de que exista una variable que además de que permita absorber el término convectivo se pueda absorber el efecto de la geometría. Bajo esta premisa se proponen dos variables, $\tau(t)$ y $\zeta(z, t)$. Utilizando la regla de la cadena para sustituir estas variables en la ec. (18) se tiene:

$$\frac{d\tau}{dt} \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial \tau} + \frac{\partial \zeta}{\partial t} \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial \zeta} + \frac{\partial \zeta}{\partial z} \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial \zeta} \left(U - \frac{2D\beta}{a} \right) = D \left(\frac{\partial \zeta}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial \zeta^2} \left[1 + \frac{a^2}{48D^2} U^2 \right] \quad (20)$$

La ec. (20) puede ser simplificada significativamente si el segundo y tercer término del primer miembro de la ecuación resultan nulos, es decir, si se satisface que:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial \zeta}{\partial z} \left(U - \frac{2D\beta}{a} \right) = 0 \quad (21)$$

Asumiendo que el flujo másico es constante, es decir, que $Ua^2 = U_0 a_0^2$, una solución para la ec. (21) está dada como:

$$\zeta = \int \frac{U_0 a^2}{U_0 a_0^2 - 2D\beta a} dz - U_0 t \quad (22)$$

Despreciando el término $2D\beta a$ del denominador de la integral de la ec. (22) al ser de orden (ϵ) , permite obtener una variable sencilla escrita como $\zeta = \int (a^2/a_0^2) dz - U_0 t$. Esta propuesta permite recuperar la solución clásica para canales con radio constante mencionada anteriormente y es consistente con la presentada por Teodoro et al. [11] la cual fue desarrollada para un fluido viscoelástico. Finalmente, por simplicidad se puede suponer que $\tau = t$. De esta manera se puede escribir la ec. (18) como:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} = D'_{eff}(\zeta, \tau) \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial \zeta^2} \quad (23)$$

con:

$$D'_{eff}(\zeta, \tau) = \frac{Da^4}{a_0^4} \left[1 + \frac{a^2}{48D^2} U^2 \right] \quad (24)$$

La ec. (23) es una ecuación de difusión, pero con un coeficiente variable, ya que D'_{eff} depende de la coordenada z , la cual a su vez se encuentra relacionada directamente con la coordenada ζ e indirectamente con τ , ya que ζ depende de t . Al ser un canal de forma arbitraria, es decir, al ser a y U funciones que no se encuentran definidas, resulta imposible establecer una solución analítica para la ec. (23), sin embargo, es posible su resolución de manera numérica considerando una condición inicial para la concentración media $\langle c \rangle(z, 0) = \delta(z)$, donde $\delta(z)$ es la función de Dirac. En el **Apéndice A** se describe un pseudocódigo para desarrollar en Python y resolver numéricamente la ec. (23) y así obtener la distribución de concentración en el espacio y en el

tiempo, pero dicho desarrollo y análisis se encuentra fuera del objetivo de este trabajo.

Finalmente, para diversas aplicaciones resulta de mayor relevancia el poder predecir la posición temporal $\bar{z}$ de la concentración media, que coincide con el máximo de concentración bajo la hipótesis de distribuciones aproximadamente simétricas, en comparación con la distribución completa del soluto que puede ser encontrada al resolver la ec. (23). Bajo las suposiciones de este estudio, se tiene que, a pesar de existir variaciones del canal, estas son pequeñas, por lo que otra suposición es que la distribución de los canales es simétrica, por lo que la concentración máxima ocurre en $\delta(z, t) = 0$. Por lo tanto, en para encontrar $\bar{z}$, basta con encontrar las raíces de $\bar{z}$ de la siguiente expresión:

$$\zeta(\bar{z}, t) = \int \frac{a^2(\bar{z})}{a_0^2} d\bar{z} - U_0 t = 0 \quad (25)$$

La ec. (25) para casos sencillos puede ser resuelta de manera analítica, pero en muchos casos resultará necesario resolverse de manera numérica. En el **Apéndice B** se presenta una propuesta de un algoritmo y código que puede implementarse en Python.

Resultados

La posición de la concentración media constituye un parámetro de interés en numerosas aplicaciones relacionadas con el transporte y la separación de especies. La propuesta final obtenida en la ec. (25) resulta una expresión sencilla sobre la evolución de la concentración media que para algunas geometrías admite soluciones analíticas y permite recuperar el modelo empleado para el caso de canales con radio constante.

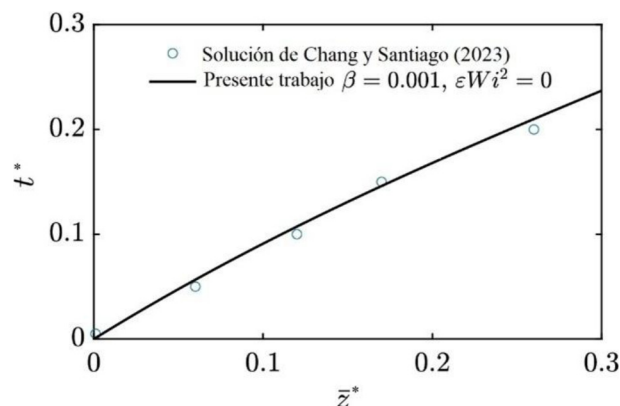


Figura 2 - Validación de las soluciones obtenidas en este trabajo por medio de una comparación entre la evolución de la concentración media en un canal convergente, utilizando la ecuación (25) y los resultados reportados por [10].

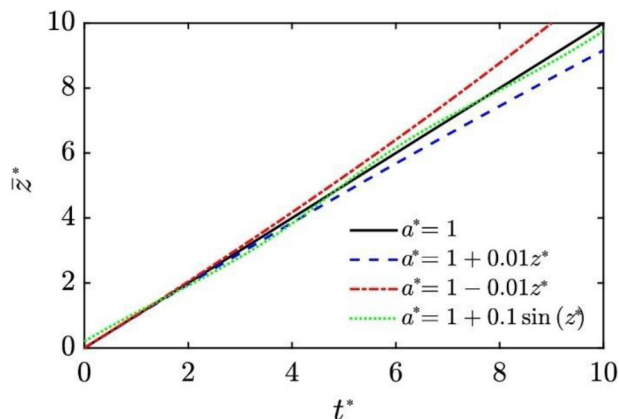


Figura 3 - Resultados de la evolución propuesta de la posición de concentración media ($\bar{z}$) para diferentes geometrías utilizando la ec. (25).

Los resultados en esta sección son determinados a partir del uso de variables adimensionales y el cálculo de parámetros calculados a partir de los valores de referencia reportados en la Tabla 2, los cuales son representativos de sistemas microfluidicos típicos. En estos sistemas, el transporte de solutos está dominado por la convección, mientras que la difusión molecular juega un papel secundario pero crucial en la homogenización transversal. La relevancia de estos parámetros radica en que permiten escalar los resultados a una amplia gama de aplicaciones prácticas, desde la dosificación precisa de reactivos en laboratorios en un chip hasta el diseño de sistemas de liberación controlada de fármacos, donde el control de la posición y el tiempo de llegada de un soluto es fundamental.

Para validar nuestra propuesta, se procedió a evaluar la relación de $\bar{z}$ con respecto a t para un canal convergente y compararla con coordenadas tomadas de los resultados numéricos reportados por Chang y Santiago [10]. Esta comparación se puede observar en la figura 2 y tiene en cuenta los ajustes necesarios a las variables adimensionales utilizadas en ambos estudios, con parámetros establecidos como $Pe=10$, $a=1-\beta z$ y $\beta=10^{-3}$. Se analizaron hasta $t^*<0.3$, debido a que ese es el rango de valores que muestran los autores y con los que se puede realizar la validación utilizando nuestras escalas características. La concordancia observada entre la solución propuesta y los datos obtenidos de [10] permite establecer la validez del modelo en el dominio analizado. Esta concordancia inicial es crucial, ya que, valida nuestra propuesta en el régimen de tiempos cortos, donde los efectos de la geometría comienzan a manifestarse. Es importante señalar que la ligera desviación observada en la Figura 2 podría atribuirse a las aproximaciones de orden ϵ realizadas en la derivación del modelo. Para tiempos más largos, que es donde el efecto de la geometría se hace más pronunciado (como se verá en la Figura 3), el modelo propuesto captura de manera efectiva la tendencia general del transporte del soluto, proporcionando una herramienta analítica sencilla para predecir su evolución.

La comparación con los resultados numéricos reportados por Chang y Santiago [10] muestra una buena concordancia

para el intervalo analizado, lo que sugiere que la expresión propuesta en la ecuación (25) constituye una aproximación adecuada para describir la evolución del centroide de la distribución. Sin embargo, la equivalencia de los resultados numéricos de [10], coinciden hasta valores pequeños de nuestra variable adimensional, por lo que un buen trabajo futuro será comparar la validez de nuestra solución aproximada, comparándola con un régimen numérico más amplio.

La figura 3 ilustra de manera clara cómo la geometría del canal gobierna la evolución de la posición media del soluto. Se observa que la velocidad promedio del fluido aumenta en regiones de menor sección transversal (canal convergente) y disminuye en zonas de mayor sección (canal divergente), lo que se traduce directamente en una propagación más rápida o más lenta de la distribución de concentración, respectivamente. Para tiempos $t^*>0.4$, la diferencia en la posición media entre el canal convergente y el divergente es evidente, destacando la influencia acumulativa de la geometría en el transporte a larga escala.

Por su parte, el caso sinusoidal exhibe un comportamiento periódico en la velocidad de avance del soluto, con una alternancia entre fases de aceleración y desaceleración en comparación con el canal uniforme. Este fenómeno es notable en todo momento, pero alcanza sus valores extremos (máxima y mínima desviación respecto al caso uniforme) aproximadamente en $t^*=0.4$. Esto sugiere que el tiempo necesario para que el soluto recorra un periodo completo de la geometría sinusoidal modula su velocidad media. Este comportamiento evidencia que las variaciones geométricas pueden utilizarse como un mecanismo pasivo para modificar el transporte de especies sin necesidad de introducir perturbaciones externas, un principio de gran utilidad en el diseño de dispositivos microfluidicos para la manipulación de fluidos.

Este comportamiento evidencia que las variaciones geométricas pueden utilizarse como un mecanismo pasivo para modificar el transporte de especies sin necesidad de introducir perturbaciones externas. La conservación de la simetría observada en las distribuciones de concentración reportadas previamente en la literatura respalda la hipótesis utilizada para establecer que la concentración máxima coincide con la posición media. En consecuencia, la ecuación (25) proporciona una expresión sencilla y físicamente consistente para describir la evolución temporal del centroide de la distribución del soluto.

Conclusión

En este trabajo se estudió la dispersión de un soluto en un fluido newtoniano que fluye a través de un canal axisimétrico con geometría variable. A partir del análisis clásico de Taylor-Aris se obtuvo una ecuación de convección-difusión para la concentración media y se propuso una transformación de variables que permite expresar el problema como una ecuación de difusión con coeficiente variable. La expresión obtenida recupera el resultado clásico de Taylor para canales de radio constante.

La principal aportación de este trabajo reside en la obtención de una expresión simplificada, dada por la ecuación (25), que permite predecir de manera directa la evolución temporal de la posición media del soluto sin necesidad de resolver la ecuación de difusión completa. Esta herramienta analítica es de gran valor práctico, ya que proporciona una visión clara de cómo la forma del canal puede ser utilizada como un parámetro de diseño para controlar pasivamente el transporte de especies. La formulación propuesta conduce a una expresión sencilla para describir la evolución temporal de la posición media de la distribución del soluto. Para el caso de un canal de radio constante, la solución recupera el resultado clásico de Taylor, mientras que para geometrías variables permite incorporar explícitamente el efecto de la forma del canal sobre el transporte del soluto.

Los resultados muestran que la geometría puede emplearse como un mecanismo para modificar la propagación de especies disueltas. En particular, los canales convergentes favorecen una evolución más rápida de la posición media, mientras que los canales divergentes producen el efecto contrario. La comparación con resultados previamente reportados en la literatura mostró una buena concordancia, lo que respalda la validez del modelo propuesto y su posible aplicación en problemas de microfluídica y procesos de separación.

Como parte de nuestra línea de investigación, este estudio sienta las bases para extender el análisis a fluidos no newtonianos y geometrías más complejas, donde los efectos de acoplamiento entre la reología del fluido y la geometría del canal pueden dar lugar a fenómenos de transporte aún más ricos y controlables.

Agradecimientos

Carlos Teodoro agradece el apoyo del programa de la Secretaría de Ciencias Humanidades Tecnología e Innovación para una beca Postdoctoral en la Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica Azcapotzalco del Instituto Politécnico Nacional de México con número de solicitud 4923376 y CVU 895339 y también al proyecto 25810.26-PD del Tecnológico Nacional de México-Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec.

Apéndice A.

Pseudocódigo para la resolución de la ecuación de difusión con coeficiente variable

Algoritmo Crank-Nicolson modificado

1. Definir la geometría $a(z)$.
2. Calcular $U(z)=U_0 a^2/a^2$.
3. Evaluar $D'(z)$ mediante (24).
4. Construir la malla espacial ζ_i .
5. Aproximar la función delta mediante una gaussiana.

6. Formar las matrices tridiagonales A y B del método Crank-Nicolson.
7. Resolver $A c^{n+1}=Bc^n$
8. Repetir hasta alcanzar el tiempo final.
9. Obtener la posición del máximo de concentración.

Este algoritmo puede escribirse en código Python de la siguiente manera:

```
# Parámetros
Nz = 500
Nt = 1000
dzeta = L/(Nz-1)
dt = tf/Nt

# Malla espacial
zeta = np.linspace(-L/2, L/2, Nz)

# Condición inicial (aproximación de delta de Dirac)
c = np.exp(-(zeta/sigma0)**2)
c = c/np.trapz(c,zeta)

for n in range(Nt):

# Calcular coeficiente de difusión efectivo
Deff =
D*(a(zeta)**4/a0**4)*(1+a(zeta)**2*U(zeta)**2/(48*D**2)) #

#Construir matriz tridiagonal de Crank-Nicolson
A, B = matrices_CN(Deff,dt,dzeta)

# Resolver sistema lineal
c = np.linalg.solve(A,B@c)

# Graficar distribución final
plt.plot(zeta,c)
```

Apéndice B.

Procedimiento numérico para determinar la posición media

La ecuación (25) permite calcular la evolución temporal de la posición media de la distribución del soluto. Para una geometría arbitraria del canal, dicha ecuación puede interpretarse como un problema de búsqueda de raíces y resolverse numéricamente mediante integración y métodos iterativos.

El procedimiento general es el siguiente:

1. Definir la geometría del canal mediante una función $a(z)$.
2. Establecer los parámetros del problema, incluyendo la velocidad promedio de referencia U_0 y el radio de referencia a_0 .
3. Seleccionar un intervalo de tiempos sobre el cual se desea determinar la evolución de la posición media.

4. Para cada instante de tiempo t , construir la función

$$f(\bar{z}) = \int \bar{z}(a^2(\xi)/a_0^2) d\xi - U_0 t.$$

5. Evaluar la integral numéricamente.

6. Encontrar la raíz de $f(\bar{z})=0$ utilizando un método iterativo de búsqueda de raíces.

7. Almacenar el valor obtenido de $\bar{z}$.

8. Repetir el procedimiento para todos los tiempos considerados.

9. Graficar la evolución temporal de la posición media del soluto.

A continuación, se muestra un ejemplo de implementación en Python utilizando las funciones `quad` y `root_scalar` de la biblioteca SciPy.

```
from scipy.integrate import quad
from scipy.optimize import root_scalar
import numpy as np

# Parámetros
U0 = 1.0 a0 = 1.0

# Geometría del canal
def a(z): beta = 1e-3
return 1 - beta*z # ejemplo convergente

# Función asociada a la ecuación (25)
def f(z, t):
    integral, _ = quad(
        lambda xi: a(xi)**2/a0**2,
        0,
        z
    )
    return integral - U0*t

# Vector de tiempos
t_vec = np.linspace(0,100,100)

# Posición media
z_bar = []
for t in t_vec:
    sol = root_scalar(
        lambda z: f(z,t),
        bracket=[0,200],
        method='brentq'
    )
    z_bar.append(sol.root)
```

El procedimiento descrito permite determinar la evolución temporal de la posición media para cualquier geometría del canal definida por la función $a(z)$.

Referencias

- [1] A. Groisman, M. Enzelberger, S. R. Quake, *Nature*, 432 (2004) 738–740.
- [2] S. Waheed, J. M. Cabot, N. P. Macdonald, T. Lewis, R. M. Gijit, B. Paull, M. C. Breadmore, *Lab on a Chip*, 16 (2016) 1993–2013.
- [3] H. A. Stone, A. D. Stroock, A. Ajdari, *Annual Review of Fluid Mechanics*, 36 (2004) 381–411.
- [4] G. I. Taylor, *Proceedings of the Royal Society of London A* 219 (1953) 186–203.
- [5] R. Aris, *Proceedings of the Royal Society of London A* 235 (1956) 67–77.
- [6] H. Brenner, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 297 (1980) 81–133.
- [7] D. A. Hoagland, R. K. Prud'homme, *AIChE Journal* 31 (1985) 236–244.
- [8] D. Bolster, M. Dentz, T. Le Borgne, *Physics of Fluids* 21 (2009) 056601.
- [9] R. Smith, *Journal of Fluid Mechanics* 130 (1983) 299–314.
- [10] R. Chang, J. G. Santiago, *Journal of Fluid Mechanics* 976 (2023) A30.
- [11] C. Teodoro, O. Bautista, F. Méndez, *Journal of Fluid Mechanics* 1025 (2025) A9.
- [12] S. Mukherjee, J. Dhar, S. DasGupta, S. Chakraborty, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 475 (2019) 1–18.