

## RESEARCH ARTICLE

Mathematics, Engineering Analysis

# Método de Soluciones Particulares Aproximadas Para la Solución de Fluidos Electro-Cinéticos en Micro y Nanocanales

Method of Approximate Particular Solutions for the Solution of Electro-Kinetic Fluids in Micro and Nanochannels

D. A. Castro <sup>1\*</sup> | W. F. Flórez <sup>2\*</sup> | N. Caruso <sup>3\*</sup> | M. Portapila<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Investigación en Gestión de la Ciencias, Tecnología, Ingeniería y Matemáticas, Universidad Tecnológica del Chocó, Cra. 22 No 18B-10 B, Quibdó, Colombia

<sup>2</sup>Grupo de Energía y termodinámica, Grupo Optimo, Universidad Pontificia Bolivariana Circ. 1 No. 74-34, Medellín, Colombia

<sup>3</sup>Centro Franco Argentino de Ciencias de la Información y de Sistemas. CONICET - Universidad Nacional de Rosario, Bv. 27 de Febrero 210 bis, Rosario, Argentina

## Correspondence

D. A. Castro, Universidad Tecnológica del Chocó, Cra. 22 No 18B-10 B, Quibdó, Colombia

Email: [dcastro@utch.edu.co](mailto:dcastro@utch.edu.co)

Copyright : Licencia de Creative Commons Reconocimiento-NoComercial 4.0 Interna.



Editors: Robert Paul Salazar

## How to cite

D. A. Castro et al., Método de Soluciones Particulares Aproximadas Para la Solución de Fluidos Electro-Cinéticos en Micro y Nanocanales, TECCIENCIA, Vol. 14, No. 27, 85-101, 2019

DOI:<http://dx.doi.org/10.18180/tecciencia.2019.27.9>

**ABSTRACT.** This paper presents an application of the method of approximate particular solutions with radial basis functions (MAPS) in two dimensions, for the solution of electrokinetic flows in micro and nanochannels. This development is performed for a mixed electroosmotic flow and driven by a pressure gradient. The implementation of the method is carried out for a rectangular micro channel, in two dimensions and for a cylindrical nanochannel. The results obtained show the MAPS implementations, their directness and simplicity when applied to the models presented here, allowing to obtain good approximations using few nodes.

**keywords:** Particular solutions, electrokinetic flows, microchannels.

**RESUMEN.** En este trabajo se presenta una aplicación del método de soluciones particulares aproximadas con funciones de base radial (MAPS) en dos dimensiones, para la solución de flujos electrocinéticos en micro y nano canales. Este desarrollo se realiza para un flujo mixto electroosmótico e impulsado por un gradiente de presión. La implementación del método se realiza para un micro canal rectangular, en dos dimensiones y para un nano canal cilíndrico. Los resultados obtenidos muestran las implementaciones de MAPS su directa y simplicidad al aplicarlos a los modelos que se presentan aquí, permitiendo obtener buenas aproximaciones utilizando pocos nodos.

**Palabras clave:** Soluciones particulares, Flujo electro cinético, Microcanales.

\* Equally contributing authors.

## 1 | INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas ha crecido la aplicación de los métodos de colocación de funciones de base radial (RBF por sus siglas en inglés) implementados para la solución de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs), como es el caso del método de soluciones particulares aproximadas (MAPS por sus siglas en inglés) el cual fue desarrollado inicialmente por Chen y coautores (ver [1] y [2]) para la solución de EDPs y problemas lineales en dos dimensiones, su procedimiento consiste en encontrar los coeficientes de las funciones aproximadas dadas utilizando esquemas para aproximar una solución particular

Este método tiene una gran ventaja a diferencia de los tradicionales, tales como: el Método de Diferencias Finitas (FDM), el Método de Elementos Finitos (FEM) y el Método de Volúmenes Finito (FVM) entre otros, estos métodos cuentan con la limitación de la necesidad de una malla para su implementación a diferencia del MAPS que implementa un sistema de colocación con RBF para la solución de ecuaciones diferenciales parciales, permitiendo que sea más atractivo. Además, a diferencia de otros métodos basados en RBF el MAPS permite altas tasas de convergencia y flexibilidad con respecto a la aplicación de condiciones de frontera arbitrarias, (ver Bustamante en [3]).

El MAPS ha sido utilizado para solución de diferentes EDPs, por ejemplo en Chen et al. [2] se resuelve una ecuación escalar elíptica de tipo Poisson, al igual que en [4] donde se encuentra la solución particular para luego usarla en el método de reciprocidad dual en un dominio irregular en una y dos dimensiones. Ramachandran et al. [5] resuelven una ecuación de Poisson no lineal y además resuelven la ecuación de Helmholtz cuyo procedimiento consiste en encontrar la solución particular para usarla en el método de elementos en la frontera. Por otro lado, Chen et al. en [6] presentan el MAPS para solucionar una ecuación diferencial elíptica con coeficientes variables y Reutskiy en [7] se emplea el MAPS para resolver una EDP de segundo orden y otra de cuarto orden con coeficientes variables, empleando una solución particular modificada.

Durante los últimos años, el MAPS ha sido empleado ampliamente en diversas investigaciones para resolver problemas elípticos como en Zhu [8], problemas de convección-difusión como en Jiang et al. [9] (ver también [10] y [11]), así mismo Tian et al. [12] utilizan funciones de bases radial trigonométricas para la solución de EDPs y problemas a nivel local Yao et al. [13] y [14] y Nath et al. en [15]. Es importante tener en cuenta que el esquema desarrollado por Chen et al. en [1] se basa en soluciones particulares de Poisson para aproximar las EDPs. Mientras que, Bustamante et al. [16] desarrollan un esquema del MAPS para resolver una ecuación vectorial de un flujo de Stokes, el cual más adelante se implementó para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes en [17], ver también Granados et al. [18] y [19].

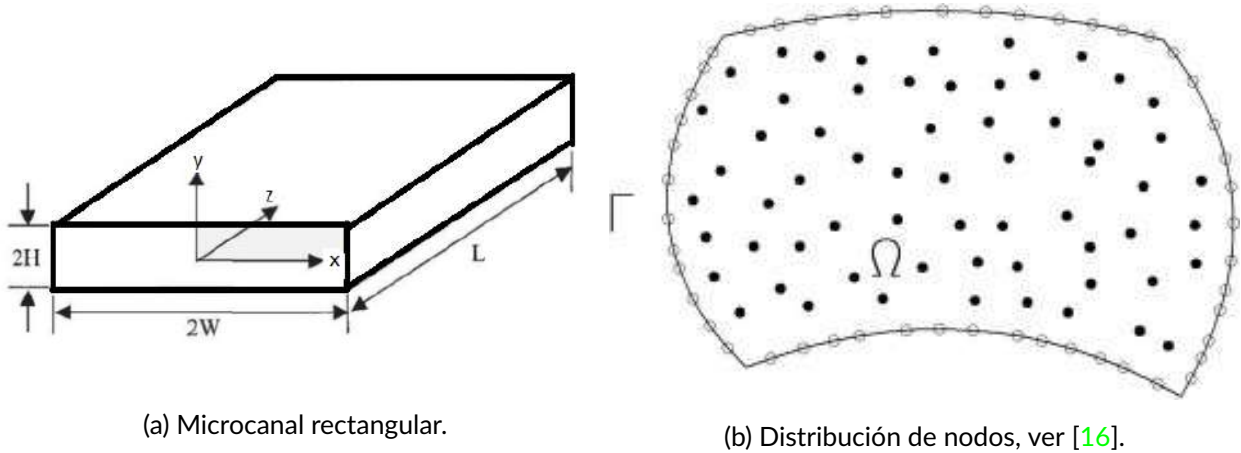
El método de soluciones particulares aproximadas se pretende utilizar para la solución de fluidos electrocinéticos en micro y nano canales, los cuales son de vital importancia en diversos temas de análisis químicos y biomédicos. De allí, que han estado en investigación para el desarrollo de la ingeniería mecánica y en celdas de combustible PEM. Guiados por la teoría desarrollada por Li en [20] y Shclick en [21] con respecto a los flujos electrocinéticos (ver también Hunter [22] y Ramos [23]), se han estudiado en dos subtemas principales: el primero, son los fluidos impulsados por presión [24], [25], [26] y [27], que ocurre cuando un líquido es forzado a través de un canal bajo una presión hidrostática aplicada, lo que resulta en una corriente eléctrica en la dirección del flujo. El segundo son los flujos electroosmóticos Zhao et al. [28], ver también [29] y [30], que consisten en aquellos fluidos que se mueven bajo la influencia de una fuerza eléctrica aplicada, es decir, la electroósmosis que permite el bombeo de fluidos y el control de flujo mediante campos eléctricos. Además, los perfiles de velocidad para este tipo de flujo son en su mayoría uniformes, este fluido se estudió inicialmente en micro canales (ver por ejemplo Ren et al. [31] y Words [32]), pero en los últimos años han aumentado considerablemente las investigaciones en nano canales (ver Mei et al. [33] y Choi et al. [34]).

El propósito principal de este trabajo es implementar el método de soluciones particulares aproximadas MAPS para la solución de fluidos electrocinéticos en micro y nano canales y compararlos con las soluciones analíticas correspondientes. En la sección 2, se introducen las ecuaciones para fluidos electrocinéticos en micro canales rectangulares con sus condiciones de frontera correspondiente. En la sección 3, se presenta el método de solución MAPS basado en funciones de base radial. Luego en la sección 4, se muestran los resultados y precisión del método para solucionar este tipo de problemas. Finalmente, en la sección 5 hacemos

una breve conclusión y futuros trabajos.

## 2 | FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

Se considera un flujo Newtoniano completamente desarrollado electroosmótico e impulsado por un gradiente de presión en un micro canal. El fluido está en estado estacionario. De acuerdo con [35], la pared del canal está sujeta a un potencial zeta constante, el fluido contiene una solución ideal de una sal completamente disociada. Además, la doble capa eléctrica (EDL por sus siglas en inglés) que se forman en la pared del canal no se superponen, ver Fig. 1-a.



(a) Microcanal rectangular.

(b) Distribución de nodos, ver [16].

**FIG. 1** Sistema y dominio.

### 2.1 | Distribución del Potencial Eléctrico

Supóngase un micro canal rectangular como se muestra en la Fig. 1-a, el potencial eléctrico  $\phi$  en cualquier punto del líquido es descrito por la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \phi = \frac{\rho_e}{\epsilon} \quad (1)$$

donde  $\epsilon$  es la permitividad en el medio y  $\rho_e$  es densidad de carga neta. Si se asume que la distribución de Boltzmann es aplicable, entonces la densidad de carga es de la siguiente forma

$$\rho_e = -2n_o e Z \sinh\left(\frac{eZ\phi}{k_B T}\right) \quad (2)$$

aquí  $Z$  es la valencia,  $e$  es la carga del protón,  $k$  es la constante de Boltzmann,  $n_o$  es la densidad de iones en condiciones neutras y  $T$  la temperatura absoluta. Ahora sustituyendo la Ec. (2) en Ec. (1) e introduciendo las variables adimensionales:

$$\Psi^* = \frac{e\phi}{k_B T}, \quad x^* = \frac{x}{H}, \quad y^* = \frac{y}{H}$$

Se obtiene la ecuación de Poisson-Boltzmann (PB) en la dirección- $z$  dada por

$$\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial y^{*2}} = K^2 \sinh \Psi^* \quad (3)$$

Donde  $K = H/\lambda_D$  es el parámetro de Debye-Huckel adimensional, con la  $\lambda_D = \frac{2n_0 e^2 Z^2}{\epsilon k_B T}$  la longitud de Debye. La ecuación PB está sujeta a las condiciones de fronteras adimensionales para el potencial eléctrico

$$\left. \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \right|_{x^*=0} = 0, \quad \Psi^*|_{x^*=\alpha} = \zeta^*, \quad \left. \frac{\partial \Psi^*}{\partial y^*} \right|_{y^*=0} = 0, \quad \Psi^*|_{y^*=1} = \zeta^* \quad (4)$$

Aquí se tiene que  $\zeta^* = eZ\zeta/(k_B T)$  es el potencial adimensional y que  $\alpha = W/H$  es la relación de aspecto del canal. De acuerdo con [36], después de un proceso de linealización haciendo  $\psi^* \leq 1$ , se tiene que la solución analítica para el potencial viene dada por

$$\psi^* = \zeta^* \frac{\cosh(Ky^*)}{\cosh K} + 2\zeta^* K^2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\cosh(\beta_n x^*) \cosh(\gamma_n y^*)}{\beta_n \gamma_n \cosh(\beta_n)} \quad (5)$$

donde  $\beta_n^2 = K^2 + \gamma_n^2$  y  $\gamma_n = (2n+1)\pi/2$ .

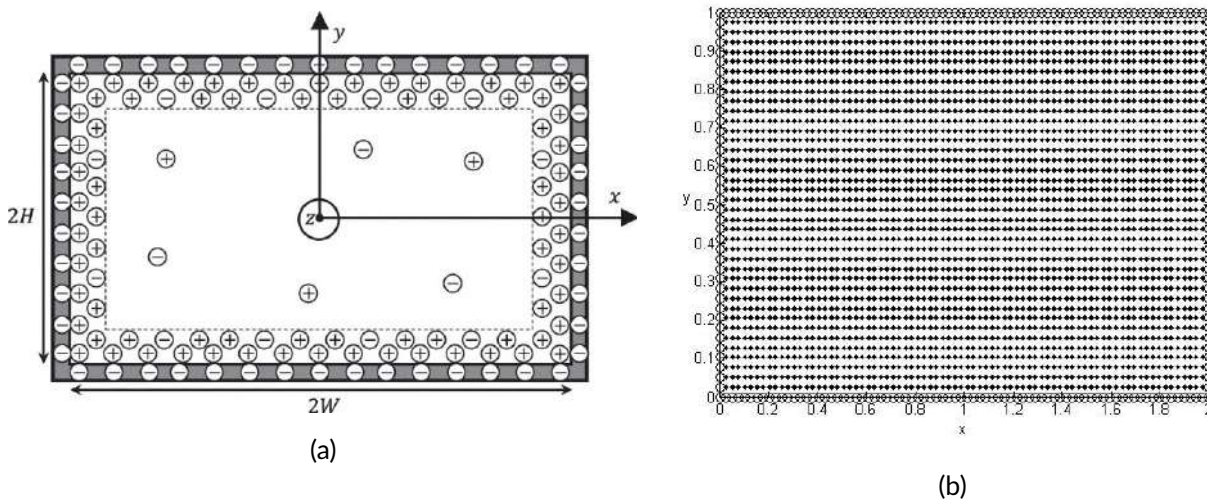


FIG. 2 (a) forma del micro canal rectangular, (b) Discretización.

### 3 | DISTRIBUCIÓN DE LA VELOCIDAD

El flujo mixto electroosmótico e impulsado por presión está dado por las ecuaciones de momentum y continuidad

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + F \quad (6)$$

y

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (7)$$

donde  $\rho$  es la densidad,  $p$  es la presión,  $T$  es el tensor de estrés,  $\mathbf{u}$  es la velocidad y  $F = \rho_e E$  un vector de fuerza por unidad de volumen, además,  $E$  denotan el campo eléctrico. Como se considera un flujo en estado estacionario y completamente desarrollado, se tiene que el vector velocidad está dado por  $\mathbf{u} = [0, 0, u_z(x, y)]$ ,

asi la ecuación de momentum se convierte en

$$\mu \left( \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) = \frac{\partial p}{\partial z} - \rho_e E_z \quad (8)$$

aquí  $\mu$  es la viscosidad dinámica y  $E_z = -d\Phi/dz$  es el campo eléctrico externo aplicado. Ahora si se sustituye  $\rho_e$  y además, se introducen las variables adimensionales,  $x^* = x/H$ ,  $y^* = y/H$ ,  $u^* = u_z/u_{HS}$  con  $u_{HS} = -\epsilon\zeta E_z/\mu$  (llamada la velocidad de Helmholtz-Smoluchowski), que es la máxima velocidad electroosmótica posible y  $\Gamma = u_{PD}/u_{HS}$  es la relación de escala de velocidad con  $u_{PD} = -H^2(\partial p/\partial z)/2\mu$  que representa la escala de velocidad impulsada por la presión, para más detalles ver [36]. Luego la ecuación de momentum se convierte en

$$\frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} = -2\Gamma - \frac{K^2}{\zeta^*} \psi^* \quad (9)$$

complementado por las condiciones de frontera adimensionales dadas por

$$\left. \frac{\partial u^*}{\partial x^*} \right|_{x^*=0} = 0, \quad u^*|_{x^*=\alpha} = 0, \quad \left. \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right|_{y^*=0} = 0, \quad u^*|_{y^*=1} = 0. \quad (10)$$

La solución exacta de la ecuación de momentum, de acuerdo a [36] viene dada por la expresión:

$$u^* = 1 + \Gamma(1 - \gamma^{*2}) - \frac{\psi^*}{\zeta^*} - 4\Gamma \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\cosh(\gamma_n x^*) \cosh(\gamma_n y^*)}{\gamma_n^3 \cosh(\gamma_n)}. \quad (11)$$

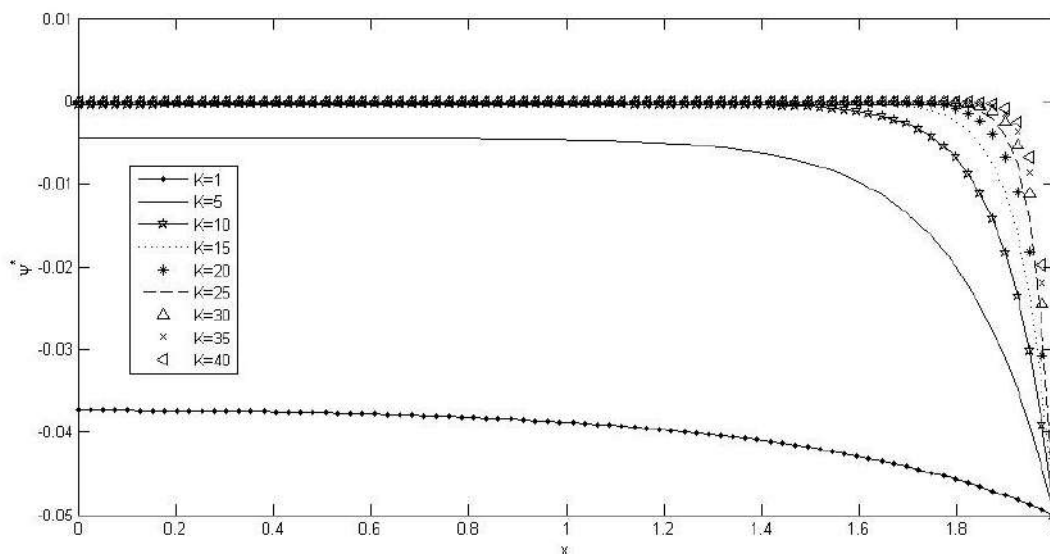


FIG. 3 Potencial eléctrico para diferentes  $K$  en  $y = 0.5$ .

#### 4 | MÉTODO DE SOLUCIÓN

Para la introducción del MAPS nos basamos en la formulación hecha por Chen et al. [6], donde utiliza el método para resolver ecuaciones escalares de tipo elíptica. Se considera la ecuación diferencial en dos dimensiones

de la forma:

$$\Delta u + b_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + b_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + c(x, y)u = f(x, y) \quad (x, y) \in \Omega \tag{12}$$

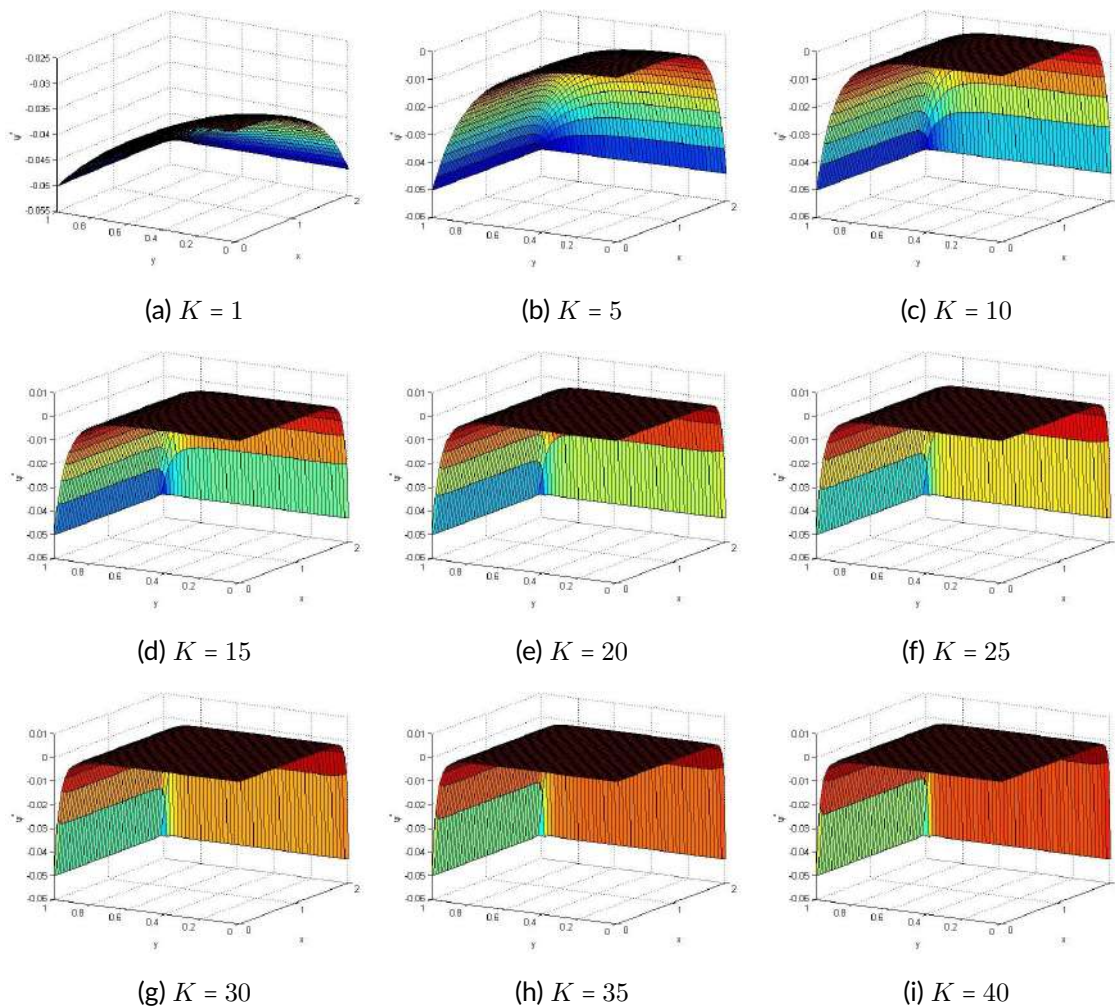
$$B(u) = g(x, y) \quad (x, y) \in \partial\Omega \tag{13}$$

La Ec. (12) es una ecuación tipo Poisson, la cual podemos reescribir como

$$\Delta u = h\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right) \tag{14}$$

donde

$$h\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right) = -b_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} - b_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} - c(x, y)u + f(x, y). \tag{15}$$



**FIG. 4** Perfiles del potencial adimensional para diferentes valores de K.

Usando las RBF, las cuales se pueden ver en la Tabla 1 siendo la multicuadrática la más usadas, tenemos que la solución particular aproximada de la solución es dada por

$$\hat{u}_p = \sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi(r_i) \quad (16)$$

Donde  $\Phi$  es obtenida por la solución analítica de expresión

$$\Delta \Phi = \phi. \quad (17)$$

**TABLA 1** Funciones de base radial.

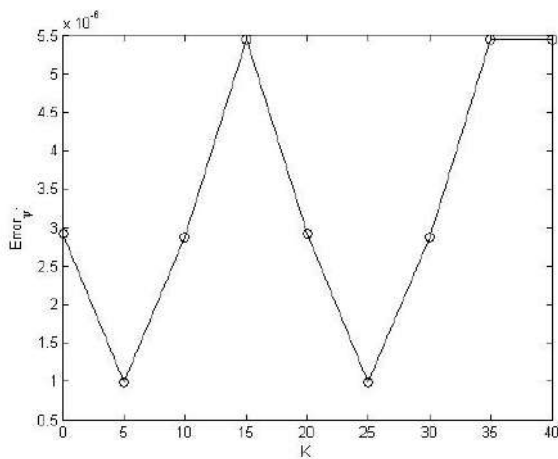
Nombre	RBF
Multicuadrática(MQ)	$\sqrt{r^2 + c^2}$
Inversa Multicuadrática (IMQ)	$1/\sqrt{r^2 + c^2}$
Gaussiana	$\exp(-c^2 r^2)$
Spline (TPS)	$r^2 \ln(r)$

Luego tenemos que

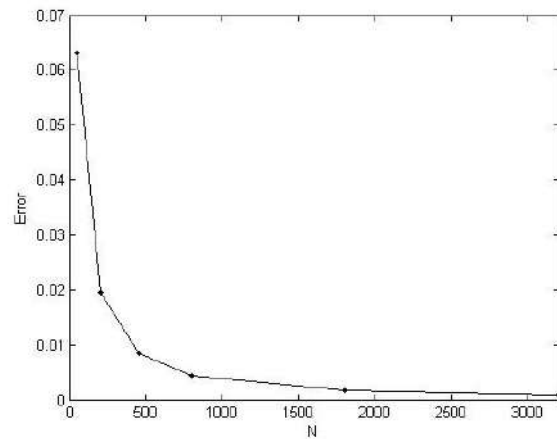
$$\psi(r) = \frac{1}{9}(4c^2 + r^2)\sqrt{c^2 + r^2} - \frac{c^3}{3} \ln(c + \sqrt{c^2 + r^2}). \quad (18)$$

donde  $\phi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$  es la RBF multicuadrática y  $r = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$ . Ahora la solución de Ec. (12) y Ec. (13) puede ser aproximada por

$$u(x, y) \cong \hat{u} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi(r_i). \quad (19)$$



(a) Error vs  $K$  para el potencial



(b) Error vs  $K$  para el potencial

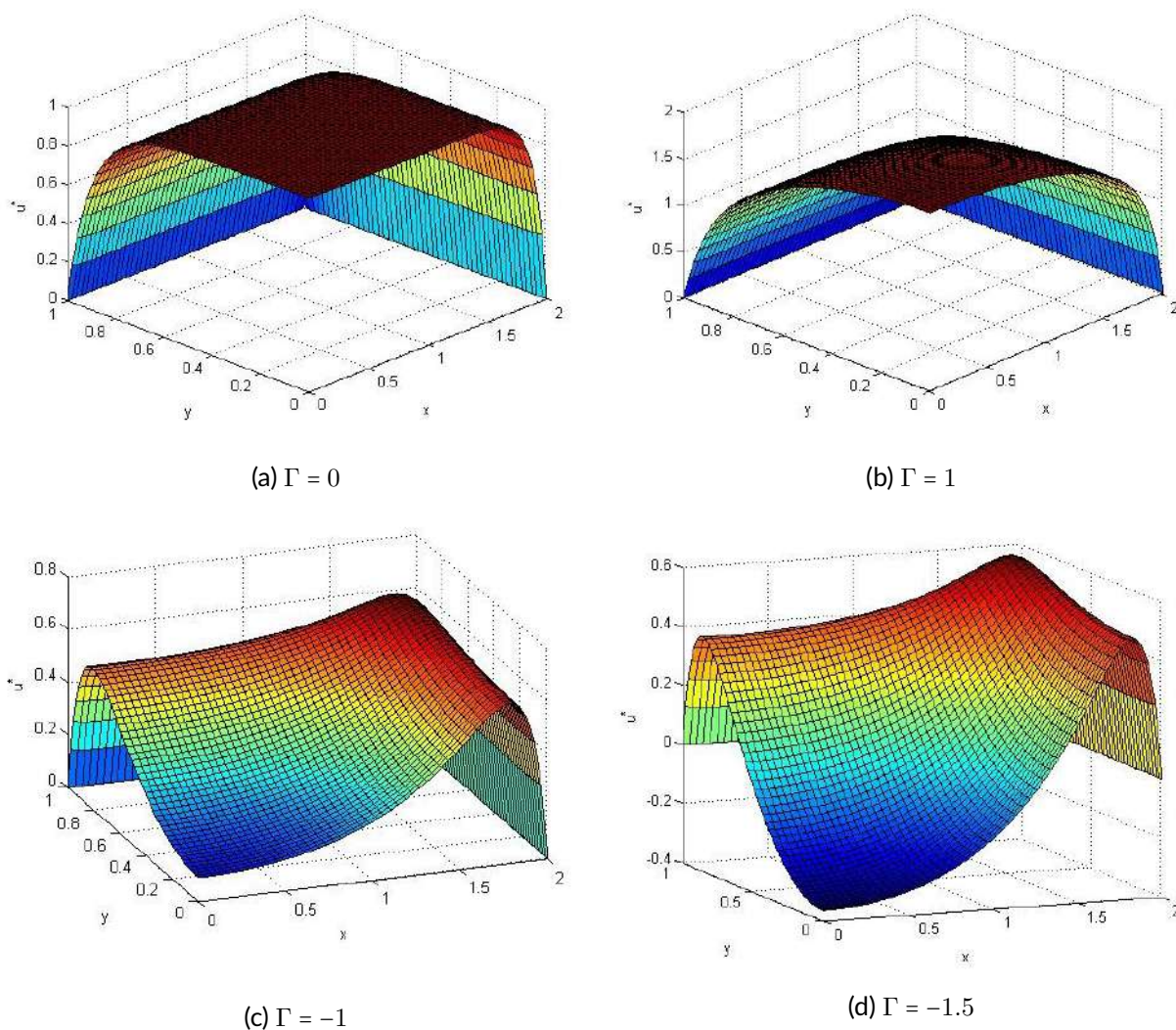
**FIG. 5** Error vs  $K$ .

Por lo tanto, de Eq. (17) tenemos que

$$\Delta u(x, y) \cong \Delta \hat{u} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \Delta \Phi(r_i) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi(r_i) \tag{20}$$

Así tenemos que la expresión en Eq. (14) queda

$$h\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi(r_i). \tag{21}$$



**FIG. 6** Distribución de la velocidad adimensional para el caso donde  $\alpha = 2, K = 10$  y valores de  $\Gamma = 0, 1, -1, -1.5$ .

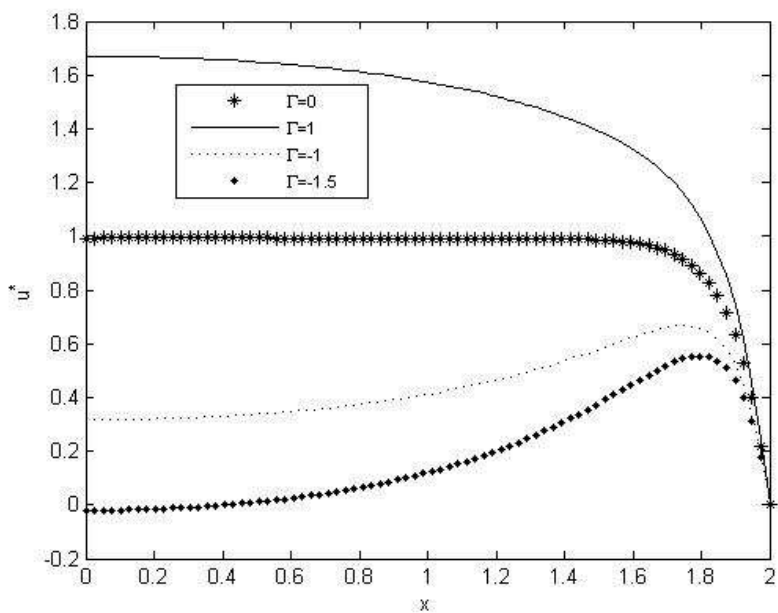
Ahora, las derivadas de la solución también se pueden aproximar a través de la solución particular  $\hat{u}$ , luego

$$\frac{\partial u}{\partial x} \cong \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{\partial \Phi}{\partial x}(r_i) \quad , \tag{22}$$

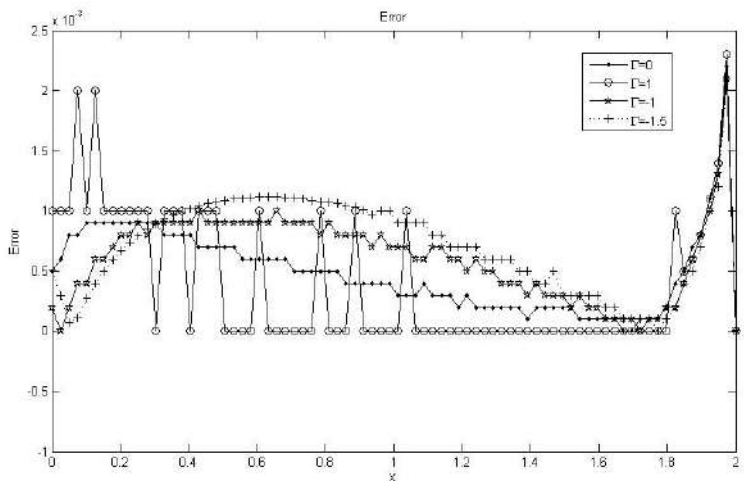
$$\frac{\partial u}{\partial y} \cong \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{\partial \Phi}{\partial y}(r_i). \tag{23}$$

Por lo tanto, se tiene la siguiente formulación

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i \left( \phi(r_i) + \delta(x, y) \frac{\partial \Phi}{\partial x}(r_i) + \beta(x, y) \frac{\partial \Phi}{\partial y}(r_i) + \gamma(x, y) \Phi(r_i) \right) = f(x, y). \tag{24}$$



(a) Perfiles de velocidad adimensional para diferentes  $\Gamma$  en  $y^* = 0.5$



(b) Error RMSE para la velocidad adimensional

**FIG. 7** Perfiles de velocidad y error.

La expresión anterior es complementada con las condiciones de frontera y obtenemos el sistema

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i \Psi(r_{ij}) = f(x_j, y_j) \quad (25)$$

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i B(r_{ij}) = g(x_j, y_j) \quad (26)$$

donde

$$\Phi(r_{ij}) = \phi(r_{ij}) + \delta(x_i, y_j) \frac{\partial \Phi}{\partial x}(r_{ij}) + \beta(x_i, y_j) \frac{\partial \Phi}{\partial y}(r_{ij}) + \gamma(x_i, y_j) \Phi(r_{ij}). \quad (27)$$

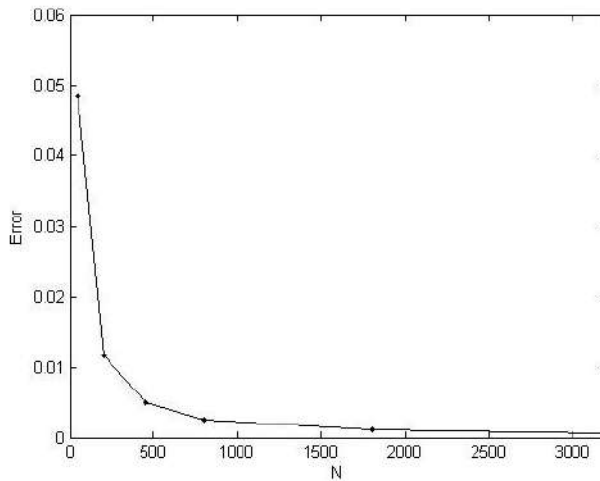


FIG. 8 Error vs N para la velocidad.

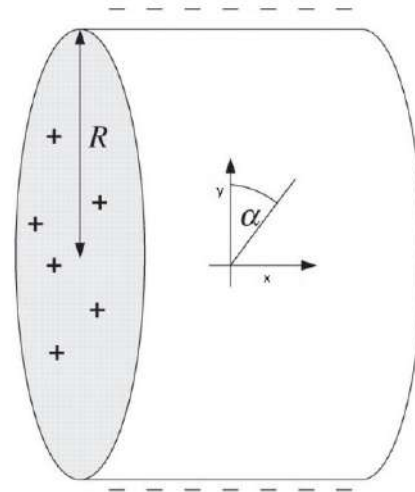


FIG. 9 Nano canal cilíndrico.

Así la implementación del MAPS reduce todo a un sistema de ecuaciones algebraico

$$\begin{bmatrix} B(r_{11}) & \cdots & B(r_{1N}) \\ \vdots & & \vdots \\ B(r_{N_B 1}) & \cdots & B(r_{N_B N}) \\ \Psi(r_{N_B+1 1}) & \cdots & \Psi(r_{N_B+1 N}) \\ \vdots & & \vdots \\ \Psi(r_{N 1}) & \cdots & \Psi(r_{N N}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_{N_B} \\ \theta_{N_B+1} \\ \vdots \\ \theta_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(x_1) \\ \vdots \\ g(x_{N_B}) \\ f(x_{N_B+1}) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{bmatrix}. \quad (28)$$

Donde  $N_B$  son puntos frontera ( $\circ$ ) y  $N_i$  son puntos internos ( $\bullet$ ) con  $N = N_B + N_i$  es el número total de puntos, ver Fig. 2. Al resolver el sistema algebraico resultante para los coeficientes  $\theta$  se obtiene la solución.

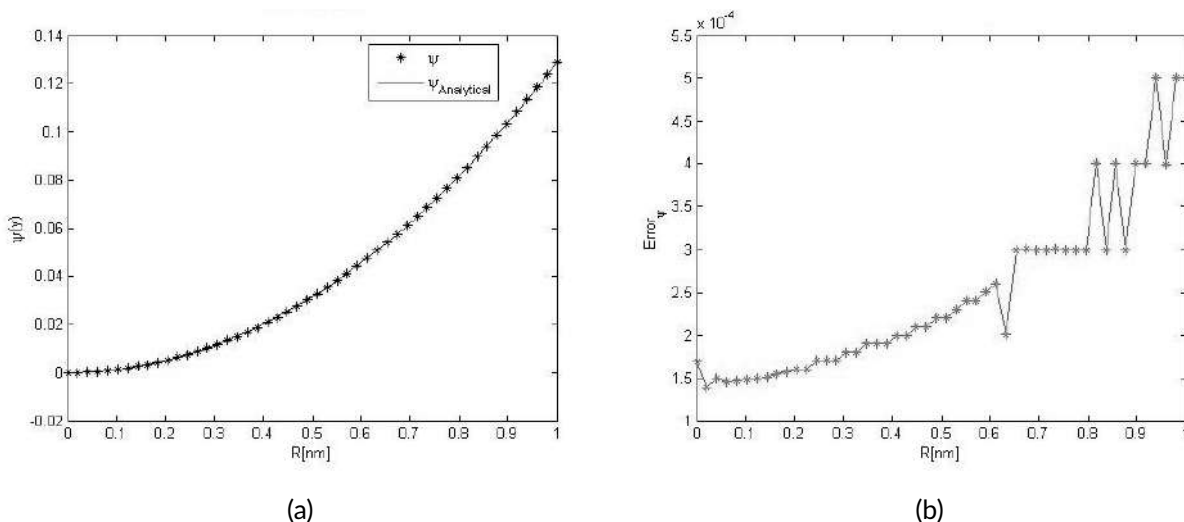
## 5 | RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En esta sección, se aplica el MAPS para solucionar un flujo combinado electrosmótico que además está impulsado por presión. Se presentan dos casos a resolver: el primero es un flujo electrocinético combinado en un micro canal rectangular con una discretización de  $N = 3200$  nodos y en el segundo caso, se presenta un flujo electrocinético combinado, pero en un nano canal cilíndrico y con una discretización para  $N = 2500$

nodos. La precisión de los resultados numéricos se evalúa mediante el error RMSE  $\epsilon_\phi$  dada por

$$\epsilon_\phi = \frac{1}{\max|\phi_r|} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\phi_r(x_i) - \phi(x_i)|^2} \tag{29}$$

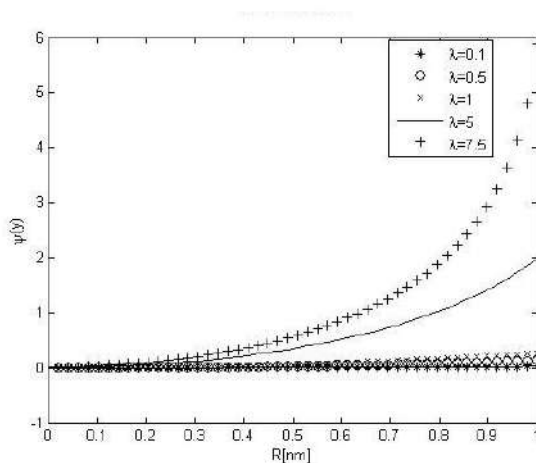
donde  $\phi_r$  son los valores de la solución analítica.



**FIG. 10** (a) Comparación de la solución analítica y la solución numérica del potencial eléctrico, (b) El error para  $N = 2500$ .

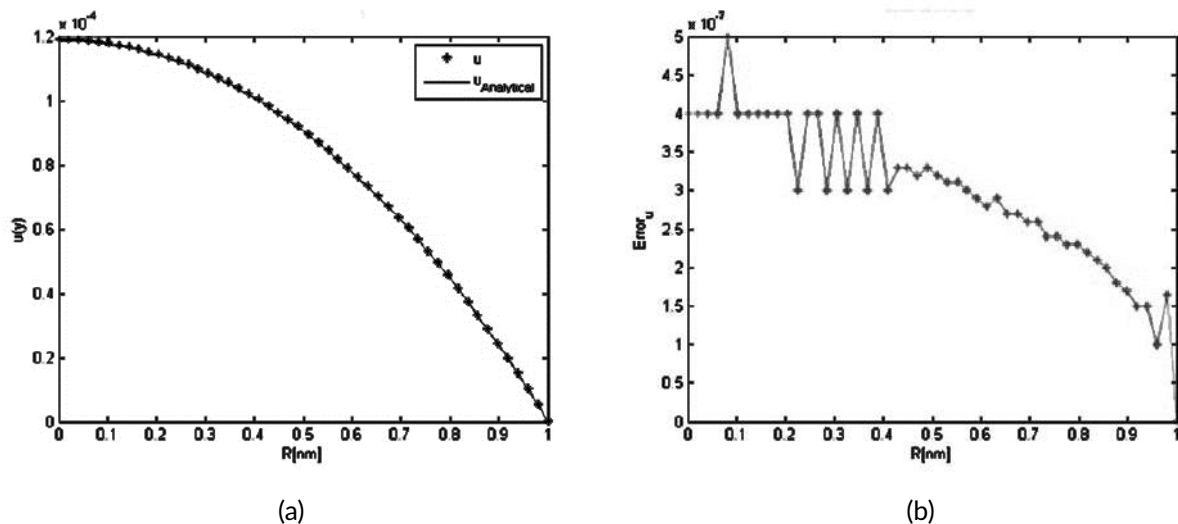
### 5.1 | Flujo electrocinético en micro canal rectangular

En este caso, el micro canal está dado por la forma de la Fig. 1, con un dominio computacional como el de la Fig. 2, con el valor del parámetro  $\alpha = 2(\alpha = W/H)$  y con diferentes valores de  $K$ . En la Fig. 4 se muestran los perfiles para el potencial variando la constante  $K$ , en la cual se pueden ver los fuertes efectos en las esquinas debido a las cargas en la superficie sólida, esto se puede ver como un flujo activo cerca de la pared del canal y un flujo pasivo en la parte central del mismo, ver Dongqing et al. [20].



**FIG. 11** Potencial eléctrico para diferentes valores de  $\lambda$  y  $N = 2500$ .

De acuerdo a lo anterior, según Yang [37] en los flujos de microcanales se espera que el potencial EDL en las esquinas provoque una fuerte resistencia al flujo. En la Fig. 3 se muestran los perfiles del potencial en  $y = 0.5$ , donde se evidencia los efectos en las esquinas, y en la Fig. 5 a), se muestran los errores obtenidos con la variación del parámetro  $K$ , mientras que en la Fig. 5 b), se muestra un análisis de error de acuerdo a la discretización utilizada. Es importante resaltar que la variación del parámetro  $K$ , para este tipo de problemas es equivalente a variar la densidad de iones en condiciones neutras  $n_0$  o la permitividad  $\epsilon$  ya que los demás parámetros son constantes definidas.



**FIG. 12** (a) Comparación de la solución analítica y la solución numérica de la velocidad, (b) error para  $N = 2500$ .

Por otro lado, en la Fig. 6 se muestra la distribución de la velocidad adimensional para diferentes valores de  $\Gamma$ , aquí cuando  $\Gamma = 0$  se tiene un fluido netamente electroosmótico el cual es movido por la aplicación de un campo eléctrico externo, cuando  $\Gamma = 1$  el perfil es una superposición de las velocidades electroosmóticas y la impulsada por un gradiente de presión y cuando  $\Gamma = -1$  un perfil donde la presión se opone al flujo. En la Fig. 7 se muestran los perfiles de la velocidad adimensional en  $y^* = 0.5$ , y en la Fig. 8 se muestra el error RMSE obtenido al comparar con solución analítica.

## 5.2 | Flujo electrocinético en micro canal cilíndrico

En este caso, se soluciona un modelo para flujo electrocinético en un nano canal cilíndrico, similar a Berg et al. [38][39]. Para este problema, se asume que el flujo se mueve en la dirección axial “ $x$ ” debido a la aplicación de un campo eléctrico externo y por un gradiente de presión. La concentración de protones  $c$  y el potencial eléctrico  $\psi$  varían en la dirección radial “ $y$ ”, la velocidad del fluido es denotada por  $u = u(x, y)$  y el campo eléctrico externo  $E$  aplicado es constante. La solución a este problema se realiza en dos dimensiones, es decir, que se tienen en cuenta tanto la componente radial “ $y$ ” como la dirección axial “ $x$ ” en aplicación del MAPS, ver Fig. 9.

De acuerdo a lo anterior, el sistema de ecuaciones del modelo a solucionar está dado por, ver [39]:

*Potencial eléctrico:* La ecuación de Poisson-Boltzmann

$$\Delta\psi + \frac{1}{y} \frac{d\phi}{dy} = -\frac{en_o}{\epsilon\epsilon_o} \exp\left(-\frac{e\psi}{k_B T}\right) \quad (30)$$

Al introducir las variables adimensionales  $\hat{\psi} = -e\psi/(k_B T)$ ,  $\hat{y} = y/R$  y  $\hat{x} = x/R$  se tiene que

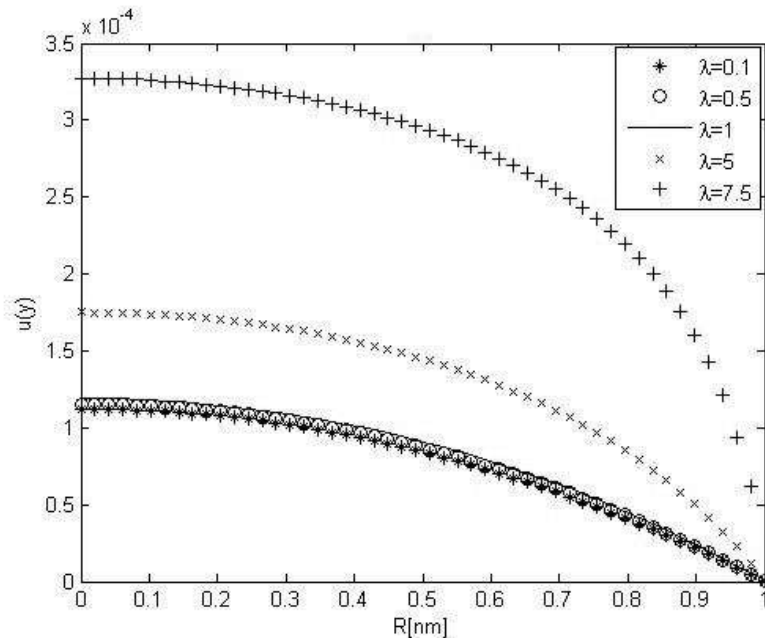
$$\Delta \hat{\psi} + \frac{1}{\hat{y}} \frac{d\hat{\psi}}{d\hat{y}} = \lambda \exp(-\hat{\psi}) \quad (31)$$

Junto con las condiciones de frontera dadas por:

$$\frac{d\hat{\psi}}{d\hat{y}} = 0 \quad \text{en} \quad \hat{y} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{d\hat{\psi}}{d\hat{y}} = \frac{\lambda}{2(1-\lambda/8)} = -\frac{\lambda\sigma_s}{eRc_0} \quad \text{en} \quad \hat{y} = R \quad (32)$$

$$\frac{d\hat{\psi}}{d\hat{x}} = 0 \quad \text{en} \quad \hat{x} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{d\hat{\psi}}{d\hat{x}} = 0 \quad \text{en} \quad \hat{x} = L \quad (33)$$

donde  $\lambda = R^2 e^2 c_0 / (\epsilon \epsilon_0 k_B T)$  es un parámetro adimensional. De acuerdo con Berg et al. [39]  $\lambda$  está restringido en el rango  $0 \leq \lambda \leq 8$  y con  $c_0 = 8\sigma_s / ((R^2 e^2 c_0) / (\epsilon \epsilon_0 k_B T) - 4eR)$ .



**FIG. 13** Perfiles de velocidad para diferentes valores de  $\lambda$  y  $N = 2500$ .

*Velocidad del fluido:* El campo de flujo está dado por la ecuación de Stokes de la forma:

$$\mu \Delta u + \frac{1}{y} \frac{d\psi}{dy} - \frac{dp}{dx} = -ec(y)E \quad (34)$$

Aquí el gradiente de presión  $\frac{dp}{dx}$  es constante, empleando las variables adimensionales  $\hat{y} = y/R$  y  $\hat{x} = x/R$ , se tiene que

$$\mu \Delta u + \frac{1}{\hat{y}} \frac{d\hat{\psi}}{d\hat{y}} = -ec(y) \frac{ER^2}{\mu} + \frac{PR^2}{\mu} \quad (35)$$

Complementado con las condiciones de frontera simétricas dadas por

$$\frac{du}{d\hat{y}} = 0 \quad \text{en} \quad \hat{y} = 0 \quad \text{y} \quad u = 0 \quad \text{en} \quad \hat{y} = R \quad (36)$$

$$\frac{du}{d\hat{u}} = 0 \quad \text{en} \quad \hat{x} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{du}{d\hat{u}} = 0 \quad \text{en} \quad \hat{x} = L \quad (37)$$

De acuerdo con [39] y [38] se tiene que la solución analítica para el potencial eléctrico es dada por

$$\hat{\psi} = -\ln \left[ \left( 1 - \frac{\lambda}{8} \hat{y}^2 \right)^2 \right] \quad (38)$$

la concentración de protones

$$c(\hat{y}) = \frac{c_o}{(1 - \lambda \hat{y}^2 / 8)^2} \quad (39)$$

y la solución analítica del fluido

$$u(y) = \frac{2ec_oER^2}{\lambda\mu} \ln \left( \frac{1 - \lambda \hat{y}^2 / 8}{1 - \lambda / 8} \right) - \frac{PR^2}{4\mu} (1 - y^2) \quad (40)$$

Al realizar la solución del modelo dado por las ecuaciones mediante la implementación del MAPS, se obtuvieron los resultados que se describen a continuación. En la Fig. 10 se muestra la comparación de la solución analítica con la solución numérica, para una discretización de 2500 puntos, para este caso se utilizó un valor de  $\lambda = 1$ . Además,  $T = 3535K$ ,  $\sigma_s = -0.16C/m^2$ ,  $R = 1 \times 10^{-9} m$ ,  $D = 7.510 \times 10^{-10} m^2/s$ ,  $\epsilon_0 = 8.8854 \times 10^{-12} C^2/(Nm^2)$ ,  $\mu = 3.35 \times 10^{-4} Pas$  y  $E = 2000V/m$ . En la Fig. 11 se muestra los resultados obtenidos para el potencial eléctrico para diferentes valores de  $\lambda$ .

**TABLA 2** Error RMSE para  $N = 900$  y  $N = 2500$ .

$\lambda$	Potencial		Velocidad	
	$N = 900$	$N = 2500$	$N = 900$	$N = 2500$
0.1	$2.30 \times 10^{-3}$	$1.60 \times 10^{-3}$	$5.97 \times 10^{-5}$	$2.74 \times 10^{-5}$
0.5	$4.31 \times 10^{-4}$	$1.60 \times 10^{-4}$	$6.20 \times 10^{-5}$	$2.74 \times 10^{-4}$
1.0	$1.50 \times 10^{-3}$	$5.18 \times 10^{-4}$	$6.31 \times 10^{-5}$	$2.88 \times 10^{-5}$
5.0	$1.13 \times 10^{-2}$	$5.10 \times 10^{-3}$	$8.41 \times 10^{-5}$	$3.76 \times 10^{-5}$
7.5	$7.20 \times 10^{-2}$	$3.30 \times 10^{-2}$	$2.73 \times 10^{-4}$	$1.15 \times 10^{-4}$

La velocidad electroosmótica, se calcula para un gradiente de presión  $P$  constante para un valor de 100 atmósferas lo cual es equivalente a  $10 \times 10^{10} Pa/m$ . En la Fig. 12 se muestra el perfil de velocidad comparado con la solución analítica (40) y el su error relativo.

En la Fig. 13 se muestran los perfiles de velocidad para diferentes valores de  $\lambda$ , lo cual muestra su dependencia en este parámetro adimensional. En la Tabla 2, mostramos los errores RMSE obtenidos para discretizaciones de  $N = 900$  y  $N = 2500$ , tomando diferentes valores de  $\lambda$  para el potencial eléctrico y la velocidad electroosmótica.

## 6 | CONCLUSIONES

En este trabajo se realizó, la implementación de MAPS para la solución de un fluido electrocinético combinado en micro y nano canales, es decir electroosmótico e impulsado por un gradiente de presión. Se pudo mostrar la eficiencia y simplicidad del MAPS para la resolución numérica de este tipo de problemas y los pocos nodos que se necesitan para obtener una buena aproximación. Además, se realizó la validación al comparar las soluciones numéricas con las soluciones analítica correspondientes dadas por [35] y [39]. En los análisis de convergencia realizados en la Tabla 2 y la Fig. 8 se muestra que el MAPS alcanza una estabilidad en el error. La solución del problema en el micro canal rectangular se desarrolló en dos dimensiones, mientras que para el nano canal cilíndrico se plantea en dos dimensiones, pero las condiciones de frontera lo reducen a una solución en una dimensión, lo cual queda para seguir investigado para trabajos posteriores.

## REFERENCIAS

- [1] C. Chen, A. Muleshkov, and M. Golberg, "The numerical evaluation of particular solutions for poisson's equation - a revisit," 1999.
- [2] C. Chen, C. Fan, and P. Wen, "The method of approximate particular solutions for solving certain partial differential equations," *Numer. Methods Partial Differ. Equ*, vol. 28, no. 2, p. 506–522, 2012.
- [3] C. Bustamante, H. Power, W. Florez, and C. Hang, "The global approximate particular solution meshless method for two- dimensional linear elasticity problems," 2013-03.
- [4] S. Reutskiy, "Method of particular solutions for nonlinear poisson-type equations in irregular domains," *Eng. Anal. Bound. Elem*, vol. 37, no. 2, pp. 401–408,, 2013.
- [5] P. Ramachandran and K. Balakrishnan, "Radial basis functions as approximate particular solutions: Review of recent progress," *Eng. Anal. Bound. Elem*, vol. 24, no. 7–8, pp. 575–582,, 2000.
- [6] C. CHEN, C. FAN, and P. WEN, "The method of approximate particular solutions for solving elliptic problems with variable coefficients," *Int. J. Comput. Methods*, vol. 08, no. 03, pp. 545–559,, 2011.
- [7] S. Reutskiy, "Method of particular solutions for solving pdes of the second and fourth orders with variable coefficients," *Eng. Anal. Bound. Elem*, vol. 37, no. 10, pp. 1305–1310,, 2013.
- [8] H. Zhu, "The method of approximate particular solutions for solving anisotropic elliptic problems," *Eng. Anal. Bound. Elem*, vol. 40, pp. 123–127,, 2014.
- [9] T. Jiang, M. Li, and C. Chen, "The method of particular solutions for solving inverse problems of a non-homogeneous convection-diffusion equation with variable coefficients," *Numer. Heat Transf. Part A Appl*, vol. 61, no. 5, pp. 338–352,, 2012.
- [10] L. Yan and F. Yang, "The method of approximate particular solutions for the time-fractional diffusion equation with a non-local boundary condition," *Comput. Math. with Appl*, vol. 70, no. 3, pp. 254–264,, 2015.
- [11] Z. Fu, W. Chen, and L. Ling, "Method of approximate particular solutions for constant- and variable-order fractional diffusion models," *Eng. Anal. Bound. Elem*, vol. 57, pp. 37–46,, 2015.
- [12] Z. Tian, X. Li, C. Fan, and C. Chen, "The method of particular solutions using trigonometric basis functions," *J. Comput. Appl. Math*, vol. 335, pp. 20–32,, 2018.
- [13] G. Yao, C. Chen, W. Li, and D. Young, "The localized method of approximated particular solutions for near-singular two- and three-dimensional problems," *Comput. Math. with Appl*, vol. 70, no. 12, pp. 2883–2894,, 2015.

- [14] G. Yao, "An improved localized method of approximate particular solutions for solving elliptic pdes," *Comput. Math. with Appl.*, vol. 71, no. 1, pp. 171–184,, 2016.
- [15] D. Nath, M. Kalra, and P. Munshi, "Numerical simulation of time-dependent navier-stokes and mhd equations using a meshless method based on fundamental and particular solutions," *Eng. Anal. Bound. Elem.*, vol. 67, pp. 81–95,, 2016.
- [16] C. Bustamante, H. Power, Y. Sua, and W. Florez, "A global meshless collocation particular solution method (integrated radial basis function) for two-dimensional stokes flow problems," *Appl. Math. Model.*, vol. 37, no. 6, pp. 4538–4547,, 2013.
- [17] C. Bustamante, H. Power, and W. Florez, "A global meshless collocation particular solution method for solving the two-dimensional navier-stokes system of equations," *Comput. Math. with Appl.*, vol. 65, no. 12, pp. 1939–1955,, 2013.
- [18] J. Granados, C. Bustamante, H. Power, and W. Florez, "A global stokes method of approximated particular solutions for unsteady two-dimensional navier–stokes system of equations," *Int. J. Comput. Math.*, vol. 7160, no. July, pp. 1–27,, 2016.
- [19] J. Granados, H. Power, C. Bustamante, W. Flórez, and A. Hill, "A global particular solution meshless approach for the four-sided lid-driven cavity flow problem in the presence of magnetic fields," *Computers and Fluids*, vol. 160, pp. 120–137,, 2018.
- [20] D. Li and E. Microfluidics, 2004.
- [21] T. Shcllick and S. Torquato *Microflows and Nanoflows Fundamentals and Simulation*, vol. 82, no. 4, 2013.
- [22] D. Hunter *Preface*, vol. 28, no. 1, 2014.
- [23] A. Ramos, "Electrokinetics and electrohydrodynamics in microsystems,"
- [24] C. Yang and D. Li, "Electrokinetic effects on pressure-driven liquid flows in rectangular microchannels," 1997.
- [25] C. Yang and D. Li, "Electrical double layer potential distribution in a rectangular microchannel," 1998.
- [26] D. Jing and B. Bhushan, "Journal of colloid and interface science effect of boundary slip and surface charge on the pressure-driven flow," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 392, pp. 15–26,, 2013.
- [27] J. Jamaati, H. Niazmand, and M. Renksizbulut, "Pressure-driven electrokinetic slip- flow in planar microchannels," *Int. J. Therm. Sci.*, vol. 49, no. 7, pp. 1165–1174,, 2010.
- [28] C. Zhao, E. Zholkovskij, J. Masliyah, and C. Yang, "Analysis of electroosmotic flow of power-law fluids in a slit microchannel," 2008.
- [29] J. Lee, C. Ren, and D. Li, "Effects of surface heterogeneity on flow circulation in electroosmotic flow in microchannels," 2005.
- [30] M. Wang and Q. Kang, "Modeling electrokinetic flows in microchannels using coupled lattice boltzmann methods," *J. Comput. Phys.*, vol. 229, no. 3, pp. 728–744,, 2010.
- [31] L. Ren, C. Escobedo-canseco, and D. Li, "A new method of evaluating the average electro-osmotic velocity in microchannels," 2002.
- [32] K. Words, "Electroosmotic flow through an annulus," 2000.

- [33] L. Mei, L. Yeh, and S. Qian, "Nano energy buffer anions can enormously enhance the electrokinetic energy conversion in nano fluidics with highly overlapped double layers," *Nano Energy*, vol. 32, pp. 374–381,, 2016-12.
- [34] Y. Choi and S. Kim, "Electrokinetic flow-induced currents in silica nanofluidic channels," *J. Colloid Interface Sci*, vol. 333, no. 2, pp. 672–678,, 2009.
- [35] A. Sadeghi, M. Azari, and S. Chakraborty, "H2 forced convection in rectangular microchannels under a mixed electroosmotic and pressure-driven flow," *Int. J. Therm. Sci*, vol. 122, pp. 162–171,, 2017.
- [36] A. Sadeghi, Y. Kazemi, and M. Saidi, "Nanoscale and microscale thermophysical engineering joule heating effects in electrokinetically driven flow through rectangular microchannels : An analytical approach," 2015-03.
- [37] D. Yang, "Analytical solution of mixed electroosmotic and pressure-driven flow in rectangular microchannels," *Key Eng. Mater*, vol. 483, pp. 679–683,, 2011.
- [38] P. Berg and K. Ladipo, "Exact solution of an electro-osmotic flow problem in a cylindrical channel of polymer electrolyte membranes," *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci*, vol. 465, no. 2109, pp. 2663–2679,, 2009.
- [39] B. P. and F. J, "Analytical solution of the poisson – nernst – planck – stokes equations," 2011.

