

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA

INGENIERÍA QUÍMICA - PROCESOS

DINÁMICA PULSADA DE FLUIDOS VISCOSOS: MICROFLUÍDICA Y FLUJO EN REDES ARTERIALES

TESIS QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: DOCTOR EN INGENIERÍA

> PRESENTA: JOAQUÍN FLORES GERÓNIMO

> > TUTOR PRINCIPAL

DRA. EUGENIA CORVERA POIRÉ FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM

COMITÉ TUTOR DR. JESÚS ANTONIO DEL RÍO PORTILLA INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES, UNAM

> DR. EDUARDO VIVALDO LIMA FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM

MÉXICO, CIUDAD DE MÉXICO, SEPTIEMBRE 2017.



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO

Presidente:	Dr. Eduardo Vivaldo Lima Dr. Juan Pablo Aguayo Vallejo Dr. José Roberto Zenit Camacho				
Secretario:					
Vocal:					
1 ^{er.} Suplente:	Dr. Sergio Cuevas García				
2 ^{do.} Suplente:	Dr. Luis Fernando Olguín Contreras				

Esta tesis fue desarrollada en:

Departamento de Física y Química Teórica Cubículo F-210 Facultad de Química Ciudad Universitaria Universidad Nacional Autónoma de México

TUTOR DE TESIS:

Dra. Eugenia Corvera Poiré

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar quiero agradecer a mi tutora la Dra. Eugenia Corvera Poiré por darme la oportunidad de formar parte de su grupo de trabajo. Quiero agradecerle todos los años de dedicación, esfuerzo y tiempo destinados a mi formación académica. Eugenia, muchas gracias por creer en mí. Gracias por enseñarme a esforzarme cada día para hacer las cosas lo mejor posible, eres una de las personas más dedicadas que conozco, tu ejemplo de perseverancia y constancia han ayudado a formar mi carácter. Gracias por ayudarme a alcanzar mis metas, por preocuparte por mí y por animarme cuando estaba decaído. Gracias por todo lo que hiciste por mí durante todos estos años de convivencia. Finalmente quiero agradecerte por tu amistad y cariño, por tus consejos y por compartir tus opiniones e ideas, ello abrió mis horizontes y me ayudó a ser una mejor persona.

Agradezco a la Dra. Aurora Hernández-Machado, colaboradora de este trabajo, por recibirme varias veces desde el comienzo de mi formación académica en su grupo de trabajo en la Universidad de Barcelona. La experiencia fue muy enriquecedora y formativa. Gracias también por el apoyo económico que me brindó durante esas estancias. Gracias por compartir su conocimiento y experiencia en modelos de campo, por su interés en mi desarrollo profesional y por su invaluable ayuda para el desarrollo de este proyecto.

Agradezco al Dr. Jordi Alastruey Arimon, colaborador de este trabajo, por todo lo que me enseñó sobre modelos de flujo sanguíneo, ya que ello abrió los horizontes de nuestra investigación. Gracias por la ayuda proporcionada para el desarrollo de este trabajo y por el tiempo dedicado a mi formación académica. Gracias por ser no sólo un excelente investigador, sino también una excelente persona.

Agradezco al Dr. Rui Travasso, colaborador de este trabajo, por recibirme en su grupo de trabajo en la Universidad de Coimbra. Gracias por el apoyo que me brindó durante mi estancia de investigación, por compartir sus conocimientos sobre flujo en redes y paquetes computacionales, por ayudar a mi formación académica y personal, y por los excelentes ratos que pudimos compartir en la ciudad de Coimbra.

Agradezco a los miembros del jurado por el tiempo dedicado a la revisión de la tesis, por sus sugerencias y correcciones.

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca de doctorado número 240094.

Agradezco al CONACyT por la beca de ayudante de Investigador Nacional Nivel III otorgada a través de la Dra. Eugenia Corvera Poiré con No. de expediente 20470.

Agradezco a los proyectos CONACyT 83149 y 219584 por los apoyos proporcionados para asistir a las reuniones:

- 27th International Conference on Science and Technology of Complex Fluids celebrada en San Luis Potosí, San Luis Potosí del 20 al 26 de junio del 2015.
- 28th International Conference on Science and Technology of Complex Fluids celebrada en San Luis Potosí, San Luis Potosí del 20 al 24 de junio del 2016.

Agradezco a la Facultad de Química de la UNAM por el apoyo proporcionado para asistir a la reunión:

• *XLVI Winter Meeting on Statistical Physics* celebrada en Taxco, Guerrero del 8 al 11 de Enero del 2017.

Agradezco a la Red de Materia Condensada Blanda del CONACyT por los apoyos proporcionados para asistir a:

- Segunda Reunión Anual de la Red de la Materia Condensada Blanda celebrada en Guanajuato, Guanajuato del 27 al 31 de enero del 2013.
- Tercera Reunión Anual de la Red de la Materia Condensada Blanda celebrada en San Luis Potosí, San Luis Potosí del 27 al 30 de noviembre del 2014.
- Cuarta Reunión Anual de la Red de la Materia Condensada Blanda celebrada en Zacatecas, Zacatecas del 12 al 15 de Noviembre del 2015.
- Quinta Reunión Anual de la Red de la Materia Condensada Blanda celebrada en León, Guanajuato del 3 al 5 de Agosto de 2017.

Eugenia Corvera Poiré declares that the research leading to these results has received funding from the European Union Seventh Framework Programme (FP7-PEOPLE-2011-IIF) under Grant Agreement No. 301214.

A mi familia Gracias por todo su cariño y por ser un ejemplo de amor, vida y fe.

A mis papás Fidel y Silvia.

Papá muchas gracias por toda tu ayuda, gracias por enseñarme y ayudarme a ser feliz. Gracias por todos tus consejos y por animarme en los momentos difíciles, eres una fortaleza en mi vida. También te agradezco por enseñarme, a través de tu ejemplo, a ser compasivo y compartido. Gracias por ayudarme a alcanzar mis sueños y por tu amor incondicional. Eres un ejemplo para mí y me siento muy orgulloso de ti.

Mamá siempre vivirás en mis pensamientos y en mi corazón. Estoy muy agradecido por la influencia que ejerciste en mí, eras una mujer ejemplar, siempre te esforzabas por hacer las cosas lo mejor posible sin dejar a un lado el cariño y amor que tenías tanto por tu familia como por los que te rodeaban. Te recuerdo con cariño.

A mis hermanos, Fid y Mau, los quiero mucho. Gracias por cuidarme y ayudarme. Gracias por el cariño que me tienen. Estoy muy orgulloso de ser su hermano, son personas ejemplares. Gracias por proporcionarme una fuente inagotable de inspiración: las niñas Aby, Dany y Vale, es un privilegio verlas crecer.

A Adri, gracias por todo tu cariño, por creer en mí, por apoyarme durante todos estos años y animarme en los momentos difíciles. Gracias por compartir tus logros y fomentar los míos. Eres una persona muy especial en mi vida.

A mis amigos del grupo de investigación: Aimee, Alejandra, Diana, Dario, Julien, Pablo, Pamela y Ulises, gracias por toda su ayuda, por compartir su entusiasmo y curiosidad en los temas de investigación. Gracias por el tiempo de convivencia, es muy agradable pasar tiempo con ustedes dentro y fuera de la universidad. Aimee muchas gracias por tu amistad, consejos y cariño, gracias por toda la ayuda que me has proporcionado a lo largo de todos estos años, eres una mujer ejemplar.

A mis amigos del cubo: Boris, Bruno, Carlos, José de Jesús, Mar, Oscar, al Dr. Jesús Hernández Trujillo y al Dr. Rafael Moreno Esparza, gracias por su amistad.

A mis amigos de toda la vida, Anita, Cássio, Dany, Lucia, Lupita, Marquito, Mily, Nohemi, Sarai, Tanis, Josh y Xiao, gracias por formar parte de mi vida.

DECLARACIÓN DE ORIGINALIDAD

Los resultados originales de este trabajo son:

- Modelo matemático para calcular señales de flujo y presión para un fluido Newtoniano o viscoelástico de Maxwell, en un tubo elástico, que supone válida localmente una ley de Darcy generalizada, utiliza la ecuación de continuidad, así como una relación, tipo ley de Hooke, entre la presión y la deformación radial del tubo.
- Modelo matemático 1-D para calcular señales de flujo y presión en una red de tubos elásticos, con soluciones analíticas en el dominio de la frecuencia. Aplicación del modelo al sistema arterial. Validación del mismo con resultados 1-D y 3-D de la literatura.
- Análisis de resultados del modelo aplicado a la aorta en una geometría simple, que permite estudiar de qué parámetros dependen algunas características específicas de las ondas de presión en humanos.
- Reducción del modelo 1-D aplicado a la aorta en una geometría simple, a un modelo 0-D para calcular señales de flujo y presión en un tubo elástico, que permite comparar con modelos en medicina (llamados modelos de Windkessel).
- Modelo de campo que reproduce el comportamiento dinámico de un fluido Newtoniano en regímenes en donde la inercia es importante.
- Solución numérica de la ecuación del modelo de campo propuesto, para estudiar la dinámica interfacial entre dos fluidos inmiscibles ante un forzamiento periódico, tanto para interacciones neutras, como para interacciones hidrofílicas entre uno de los fluidos y la pared.
- Expresión para calcular la frecuencia de modulación que surge de manera espontánea en la dinámica de la interfase, al imponer un forzamiento pulsado e interacciones hidrofílicas entre uno de los fluidos y la pared.

ÍNDICE GENERAL

1.	Res	umen		9				
2.	Intr	oducci	ón	11				
3.	Fluj	o en re	edes arteriales	16				
	3.1.	Antecedentes						
		3.1.1.	Descripción del sistema cardiovascular	16				
		3.1.2.	Modelos de flujo sanguíneo	18				
	3.2.	Formu	lación del nuevo modelo	21				
		3.2.1.	Derivación de las ecuaciones para un vaso	21				
		3.2.2.	Solución espacial de las ecuaciones para un vaso en función de las					
			presiones en sus extremos	24				
		3.2.3.	Presión, flujo y perfiles de velocidad para vasos con diferentes tipos					
			de condiciones de frontera \ldots	25				
		3.2.4.	Derivación de las ecuaciones para una red de vasos $\ldots \ldots \ldots$	27				
		3.2.5.	Acoplamiento de las condiciones de frontera en el dominio del tiem-					
			po con la formulación analítica en el dominio de la frecuencia $\ . \ .$	31				
	3.3.	Solucio	ones analíticas para casos particulares	31				
	Modelo para un vaso aislado	31						
		3.3.2.	Modelo para una bifurcación simple	32				
		3.3.3.	Modelo para la aorta y sus principales ramificaciones	34				
	3.4.	ados numéricos para casos particulares	34					
		3.4.1.	Arteria carótida común	35				
		3.4.2.	Aorta torácica superior	38				
		3.4.3.	Bifurcación de la aorta	39				
		3.4.4.	Aorta y sus principales ramificaciones	42				
	3.5.	Separa	ción de los términos de la ecuación del modelo para un vaso aislado	44				
	3.6.	6. Reducción de nuestro modelo 1D a un modelo 0D \ldots						
	3.7.	ión	51					
		3.7.1.	Características del modelo	52				
		3.7.2.	Limitaciones del modelo	52				
		3.7.3.	Ventajas analíticas del modelo	53				

		3.7.4.	Resultados para los vasos aislados estudiados
		3.7.5.	Resultados para las redes estudiadas
	3.8.	Conclu	isiones y perspectivas
4.	Dina	ámica	interfacial en microcanales
	4.1.	Antece	edentes \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 56
		4.1.1.	Sistema de estudio
		4.1.2.	Ecuaciones de la descripción macroscópica
		4.1.3.	Mojado y tubo capilar
		4.1.4.	Modelos mesoscópicos
		4.1.5.	Identificación de parámetros macroscópicos y mesoscópicos 67
	4.2.	Ecuaci	ión de movimiento del nuevo modelo de campo
	4.3.	Desarr	ollo asintótico de la ecuación del modelo
	4.4.	Condie	ciones de frontera del sistema
	4.5.	Mojad	o neutro, $A_s = 0$
		4.5.1.	Permeabilidad dinámica del modelo de campo
		4.5.2.	Identificación de los parámetros α y M
		4.5.3.	Comparación entre la permeabilidad dinámica del modelo de campo
			con la permeabilidad dinámica de un fluido Newtoniano 76
		4.5.4.	Resultados de la integración numérica de la ecuación del modelo de
			campo
	4.6.	Parede	es hidrofílicas, $A_s > 0$
	4.7.	Ángulo	o de contacto y curvatura
	4.8.	Expon	ente del avance global
	4.9.	Tensió	n superficial
	4.10	. Dinám	ica para valores altos del parámetro de mojado 90
	4.11	. Dinám	ica para valores intermedios del parámetro de mojado $\ldots \ldots \ldots 91$
	4.12	. Efecto	de la intensidad del forzamiento
	4.13	. Conclu	isiones y perspectivas
Δ	Lev	de Da	rcy generalizada para un tubo rígido 101
11.	Цеу А.1.	Solucio	
в.	Para	ámetro	os de las condiciones de frontera de Windkessel \ldots \ldots 105
C.	Moo	lelo de	e la aorta completa
D.	Cálo	culo de	e errores
Е.	Ley	de Da	rcy generalizada para un canal rígido
	E.1.	$v_x(t)$ p	para un gradiente de presión de serie de Fourier

F. Desarrollo asintótico del modelo de campo										
F.1. Ecuaciones en la región externa										
F.2. Ecuaciones en la región interna $\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$ 122										
F.3. Solución para μ_0 y \mathcal{M}_0										
F.4. Ecuaciones macroscópicas										
F.4.1. Condición de equilibrio local										
F.4.2. Condición de continuidad para la velocidad normal										
F.4.3. Ecuación para el bulto $\dots \dots \dots$										
F.5. Identificación de parámetros $\dots \dots \dots$										
F.6. Laplaciano en la región externa										
F.7. Laplaciano en la región interna										

RESUMEN

1

Los flujos pulsados son relevantes en una gran variedad de sistemas biológicos e industriales y tienen múltiples aplicaciones tecnológicas. La dinámica de un solo fluido Newtoniano o viscoelástico se entiende tan bien, que ésta se puede estudiar en geometrías complejas, como redes de flujo. Por otro lado, cuando se tienen dos o más fluidos es necesario hacer investigación básica en geometrías simples. En este trabajo desarrollamos dos modelos para estudiar la dinámica pulsada de flujo en dos sistemas, el primero corresponde a una red de vasos sanguíneos (con un solo fluido) y el segundo a un canal rectangular en el que se tienen dos fluidos inmiscibles entre sí.

En la primera parte de la tesis, presentamos y validamos un modelo lineal 1-D para calcular señales de flujo y presión sanguíneas en una red de vasos elásticos. Derivamos nuestro modelo suponiendo válida localmente una ley de Darcy generalizada, que se obtiene de la ecuación lineal de balance de momento para fluidos Newtonianos o viscoelásticos de Maxwell en tubos rígidos; utilizando la ecuación de continuidad, la cual toma en cuenta la velocidad axial y radial del fluido; e incluyendo la elasticidad del vaso a través de una relación, tipo ley de Hooke, entre la presión y la deformación elástica del tubo. El desarrollo de nuestro modelo permite obtener soluciones analíticas en el dominio de la frecuencia. Probamos la exactitud de nuestra formulación en diferentes casos de referencia en los que el grado de complejidad aumenta, para tales casos se cuenta con resultados numéricos 1-D y 3-D de la literatura. Los resultados obtenidos con nuestro modelo muestran la capacidad del mismo para reproducir las principales características de las ondas de flujo y presión, tanto en un solo vaso arterial, como en redes de vasos con curvatura, torsión y estrechamiento del radio. Nuestros resultados sugieren que el modelo desarrollado tiene una precisión razonable para explorar el rol que juegan diferentes parámetros físicos del sistema cardiovascular en la forma de las señales de flujo y presión.

En la segunda parte de la tesis desarrollamos un modelo de campo que toma en cuenta la inercia de los fluidos, con la finalidad de estudiar la dinámica del flujo pulsado de dos fluidos inmiscibles en un microcanal rectangular hidrófilo. Este efecto es muy importante cuando se tienen flujos pulsados. Hemos comprobado que cuando se tienen paredes neutras, esto es, ni hidrófilas ni hidrófobas, la interfase entre los fluidos es plana y nuestro modelo es capaz de reproducir el comportamiento dinámico de un fluido Newtoniano. Además, hemos encontrado que para interacciones hidrófilas de uno de los fluidos con la pared, la dinámica de la interfase está determinada por una competencia entre el forzamiento pulsado y el grado de hidrofilia de la interacción. Encontramos un régimen en el que surge espontáneamente una frecuencia de modulación del movimiento, la cual analizamos como función de los parámetros del sistema. Una de las ventajas del modelo desarrollado es que su solución numérica es fácil de implementar y que se puede utilizar en sistemas de estudio con diferentes geometrías, como canales con rugosidad, por lo que esperamos que este nuevo modelo sea una herramienta teórico-computacional para el diseño y estudio de nuevos dispositivos de microfluídica.

INTRODUCCIÓN

Los flujos pulsados son relevantes en diversos sistemas: biológicos, microfluídicos, industriales y de aplicación tecnológica. Un ejemplo claro de un sistema biológico en el que se tiene un flujo pulsado, es el de la circulación sanguínea, en la cual el corazón actúa como una bomba que envía sangre a todo el cuerpo a través de la red de vasos sanguíneos. Otro sitio en el que se tienen flujos pulsados es en el cerebro, la onda de pulso generada por el corazón se transmite a los vasos sanguíneos del cerebro, dicha onda se refleja en el cráneo y se transfiere al tejido cerebral y a los fluidos contenidos en el mismo, como el fluido cerebro-espinal, el cual se mueve de forma pulsada dentro de la cavidad craneal [1]. Las funciones de dicho fluido son importantes para el correcto desempeño de las actividades del cerebro [2]. Por otro lado, en muchos sistemas de microfluídica, cuyos diseños van desde simples canales hasta sistemas "organs on chips" (dispositivos utilizados para cultivar células en cámaras micrométricas con la finalidad de modelar funciones fisiológicas de tejidos y órganos), se busca tener flujos y forzamientos mecánicos pulsados [3]. Dada la diversidad de este tipo de sistemas es importante desarrollar herramientas para modelar la dinámica de los fluidos que contienen.

En este trabajo desarrollamos dos modelos para estudiar la dinámica pulsada en dos sistemas:

- El primer sistema es una red arterial en la que la sangre se mueve de forma pulsada. Con la finalidad de validar nuestro modelo, estudiamos diferentes casos de referencia que van desde vasos aislados, como la arteria carótida común, hasta una red con múltiples bifurcaciones que representa a la aorta y sus principales ramificaciones. En cada caso de estudio, la condición impuesta en la entrada del sistema es una señal periódica de flujo, la cual se obtuvo previamente de medidas experimentales *in-vivo*.
- El segundo sistema de estudio es un microcanal rectangular formado por dos placas paralelas entre sí, las cuales confinan dos fluidos viscosos e inmiscibles, con lo cual se forma una interfase. Para tener un flujo pulsado, se impone un forzamiento pulsado en la entrada del microcanal. El modelo desarrollado para estudiar dicho sistema permite introducir fácilmente interacciones fluido-pared, con ello se puede estudiar el efecto del mojado en la dinámica del sistema. La geometría de flujo de este sistema

2

es sencilla, sin embargo, tener un flujo bifásico, imponer un forzamiento pulsado e introducir interacciones fluido-pared, hacen que dicho sistema sea interesante y tenga posibles aplicaciones a la microfluídica.

Las longitudes características de ambos sistemas de estudio se encuentran en la microescala, cuya física se puede estudiar desde el punto vista macroscópico o mesoscópico, es decir, las escalas de longitud, son tales que, el efecto del comportamiento de los átomos individuales se puede despreciar. La relevancia de este tipo de sistemas consiste en que, a dicha escala, los efectos del confinamiento son importantes. Por ejemplo, en microfluídica, las fuerzas de superficie (como la capilar) se utilizan para mover fluidos dentro de los microcanales sin la necesidad de utilizar algún tipo de bomba [4,5]. En el caso del sistema cardiovascular, las propiedades elásticas de los vasos juegan un papel determinante tanto en la forma de las señales de flujo y de presión, como en el modo en que la onda de presión se transmite [6].

En el sistema cardiovascular, el flujo pulsado es generado por la contracción del ventrículo izquierdo. La onda de pulso generada por el corazón se propaga a través del árbol arterial provocando tanto la distensión y contracción de los vasos sanguíneos, como cambios temporales y espaciales, de la presión arterial y del flujo sanguíneo. Dichos cambios son determinados por las propiedades físicas del sistema cardiovascular, algunas de las cuales se ven alteradas en estado de enfermedad; por ejemplo, los problemas básicos en la hipertensión son el incremento en la resistencia periférica y el decremento de la distensibilidad arterial [6]. Por lo tanto, la forma de las señales de flujo y presión, medidas en algún punto del sistema arterial, portan información valiosa sobre la funcionalidad del sistema cardiovascular. Sin embargo, aún no es claro cuál es el papel que juega cada una de las propiedades físicas del corazón, de los vasos grandes y de la microcirculación, en la forma de las ondas de pulso, en condiciones normales o en enfermedades, como la hipertensión.

Existen diferentes aproximaciones para estudiar el flujo sanguíneo. Una de las clasificaciones de dichas aproximaciones se basa en la dimension espacial utilizada, es decir, existen desde modelos cero dimensionales (0-D) hasta modelos tridimensionales (3-D). Los modelos cero dimensionales (0-D) agrupan las propiedades del árbol vascular, para ello, se hace una analogía con un sistema eléctrico, en la cual, las distintas resistencias de los vasos de una red se agrupan en una sola resistencia, y las propiedades elásticas de los vasos, relacionadas a distintas capacitancias, también se agrupan en una sola capacitancia [7]. Este tipo de modelos se pueden describir mediante ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo, por ello, son una herramienta computacional no costosa y constituyen, matemáticamente, un marco de referencia [8–12]. Sin embargo, son inadecuados para estudiar el fenómeno de propagación de ondas, ya que el árbol arterial no se toma en cuenta de forma explícita. Los modelos unidimensionales (1-D), en los que se utilizan sistemas de ecuaciones diferenciales parciales unidimensionales, describen de forma aproximada el fenómeno de propagación de ondas y son de bajo costo computacional [13–22]. Cabe destacar que, comúnmente la solución de las ecuaciones diferenciales de este tipo de modelos se resuelve numéricamente. Los modelos tridimensionales (3-D) se utilizan para estudiar las características del flujo en geometrías complejas como las observadas en aneurismas y estenosis [23–25]. Su desventaja es que computacionalmente son muy costosos.

Los modelos 0-D relacionan la forma de las señales de presión y flujo con propiedades globales del sistema cardiovascular como la distensibilidad arterial, la resistencia periférica y la presión de entrada al sistema venoso. Dichos modelos proveen relaciones, entre las propiedades globales del sistema cardiovascular y la presión sanguínea, las cuales son útiles desde el punto de vista clínico en condiciones de enfermedad como la hipertensión [11].

Algunas soluciones analíticas 1-D para el fenómeno de propagación de ondas se han empleado para estudiar el flujo sanguíneo en un vaso [26,27] y se han utilizado como condiciones de frontera para representar la red periférica de vasos en formulaciones 1-D numéricas [16] y 3-D [28]. Sin embargo, las soluciones analíticas para estudiar el flujo sanguíneo en redes de vasos como la aorta y sus ramas sistémicas principales son muy poco comunes. Una solución analítica para redes como la aorta y sus principales ramificaciones, podría ayudarnos a investigar de manera sencilla el papel que juegan las diferentes propiedades físicas del sistema cardiovascular en la forma de las ondas de pulso.

Uno de los objetivos de este trabajo es introducir y validar un nuevo modelo lineal del flujo sanguíneo en redes de vasos elásticos para el cual se pueden obtener soluciones analíticas en el dominio de la frecuencia. El desarrollo de tal modelo se basa en la ley de Darcy generalizada 0-D para el flujo en vasos rígidos [29–31], la cual previamente se extendió para estudiar el flujo en redes tipo árbol de vasos rígidos [32]. Dicho modelo extendido, se ha utilizado para estudiar, numérica y analíticamente, el efecto que tiene el lugar geométrico en el que ocurren diferentes variaciones anatómicas (anastomosis, obstrucciones y supresión de vasos) en el flujo global de una red [33, 34].

Comprobamos la exactitud de la nueva formulación en una serie de casos de referencia que van desde la carótida, hasta una red de vasos que representa a la aorta y sus principales ramificaciones; para tales casos se cuenta con resultados numéricos 1-D y 3-D [13]. La comparación de estos resultados muestra que la nueva formulación tiene la capacidad de reproducir las principales características de las ondas de pulso y los perfiles de velocidad. En nuestro segundo sistema de estudio, se tienen dos fluidos separados por una interfase cuya posición cambia en el tiempo. En las aproximaciones convencionales para estudiar la dinámica de una interfase, la región que separa a los dominios de composición es tratada matemáticamente como una frontera bien definida que evoluciona en el tiempo. En esta formulación, se presenta el problema de fronteras libres, en el cual, para obtener la posición de la interfase, se requiere conocer la forma de la misma (ya que esta forma parte de las condiciones de frontera), pero conocer la forma de la interfase constituye la solución al problema. En esta formulación, para estudiar la dinámica del sistema bulto-interfase es necesario rastrear de forma explícita la posición de la interfase.

Una manera de evitar el problema de fronteras libres es a través del uso de modelos de campo. La principal característica de dichos modelos es que la región interfacial es difusa, para ello, se introduce un parámetro de orden que cambia de forma suave entre las fases del sistema; dicho parámetro se puede interpretar como una variable intensiva del sistema, como la densidad. Los modelos de campo han emergido como una poderosa herramienta computacional para predecir, a escalas mesoscópicas, la evolución y morfología de interfases [35–38]. En el área de dinámica de fluidos, algunos fenómenos como la formación de dedos viscosos, se han estudiado exitosamente a través de estos modelos [39–42]. Las predicciones de algunos de estos trabajos [42,43] han ayudado a conducir experimentos para reproducir sus resultados [44,45].

Los modelos de campo utilizados para reproducir la dinámica de bulto y de interfases fluido-fluido en el límite de una interfase bien definida, no contienen un término relacionado con la inercia del sistema, cuyo efecto es relevante cuando se desean estudiar flujos pulsados a altas frecuencias. En otras palabras, en la literatura no existe un modelo de campo cuya ecuación sea capaz de describir el comportamiento dinámico, del bulto y de una interfase viscosa, al imponer una presión pulsada con una frecuencia arbitraria. El objetivo de este trabajo es desarrollar un modelo de campo con tales características. A través de las condiciones de frontera se impone un forzamiento pulsado e interacciones hidrofílicas fluido-pared. Estudiamos los efectos que tienen, en la dinámica del bulto y de la interfase, la frecuencia impuesta en el forzamiento pulsado y el grado de hidrofilicidad. Demostramos que para un canal sin mojado, esto es, un canal sin interacciones fluido-pared (que corresponde a una interfase plana en la que no se tiene efecto de la tensión superficial), el modelo de campo reproduce el comportamiento dinámico típico de un fluido Newtoniano.

Al introducir paredes hidrofílicas observamos tres diferentes comportamientos para el movimiento de la interfase como función de la intensidad de la interacción hidrofílica. Para interacciones débiles, la dinámica del sistema es dominada por el forzamiento pulsado, mientras que para interacciones fuertes ésta es dominada por el mojado. En este último caso, el movimiento global de la interfase se puede describir mediante la ley de Washburn, la cual se utiliza para estudiar el movimiento de fluidos en medios porosos [46]. Además, encontramos un régimen intermedio en el que de manera espontánea surge una modulación del movimiento global de la interfase. Desarrollamos una expresión para calcular la frecuencia de dicha modulación, la cual combina tres efectos, el de la viscosidad, el del mojado y el de la tensión superficial.

Una de las ventajas del modelo desarrollado es que su solución numérica es fácil de implementar y que se puede utilizar en sistemas de estudio con diferentes geometrías, como canales con rugosidad, por lo que esperamos que este nuevo modelo sea una herramienta teórico-computacional para el diseño y estudio de nuevos dispositivos de microfluídica.

FLUJO EN REDES ARTERIALES

3.1. Antecedentes

El estudio del sistema cardiovascular es importante para entender su funcionamiento en condiciones normales y de enfermedad (como la hipertensión). Se estima que aproximadamente el 22% de la población mundial sufre de hipertensión (dato del Global Health Observatory, World Health Organization [47]). Investigar cuál es el papel que juegan las distintas propiedades del sistema cardiovascular en la forma de las ondas de presión y flujo, es importante para identificar los factores responsables de condiciones patológicas y para orientar las terapias adecuadas para su tratamiento.



3.1.1. Descripción del sistema cardiovascular

Figura 3.1: Esquema de la circulación sistémica y pulmonar. En gris claro se representa la sangre oxigenada y en gris obscuro la desoxigenada. Las flechas indican el sentido del flujo de la sangre. Tomada de [48].

La principal función del sistema cardiovascular es la de transportar gases, hormonas, nutrientes, desechos metabólicos y células a través del cuerpo [48]. Dicho sistema se puede dividir en dos circuitos: a) el pulmonar, que transporta sangre desoxigenada del corazón a los pulmones y regresa sangre oxigenada de los pulmones al corazón y b) el sistémico, que transporta sangre oxigenada del corazón al resto de los órganos y tejidos, y regresa sangre desoxigenada al corazón [48] (vea la Fig. 3.1).

El circuito sistémico se compone del corazón, el cual actúa como una bomba que inyecta sangre a la red de vasos sanguíneos, por la cual circula la sangre a los diferentes órganos y tejidos. La red de vasos es una red tipo árbol que comienza en el ventrículo izquierdo y se extiende, con sus ramas más pequeñas, hasta las partes periféricas del cuerpo [50]. Para nuestro estudio, utilizaremos geometrías de flujo que representan vasos, bifurcaciones y redes pertenecientes a este circuito.



Figura 3.2: Ondas de presión y flujo medidas en la aorta ascendente de un individuo joven. En la parte inferior se muestran como referencia líneas que marcan los periodos de sístole y diástole. En la onda de presión se muestran puntos característicos de la señal. Adaptada de [6], reproducción aprobada por la editorial.

La onda de pulso generada por el corazón provoca, tanto la distensión y contracción de los vasos sanguíneos, como cambios temporales y espaciales de la presión arterial y del flujo sanguíneo. En la Fig. 3.2 se muestran las ondas de presión y flujo medidas en la aorta ascendente de un individuo joven, durante un ciclo cardiaco. Como referencia, en la parte inferior se muestran los periodos de sístole, relacionado con la contracción del miocardio (tejido muscular del corazón) y el de diástole, relacionado con la relajación del miocardio. En la onda de presión se muestran puntos característicos de la señal, estos son: la presión diastólica, que es la mínima presión que se tiene en un ciclo cardiaco, la presión sistólica, que corresponde a la máxima presión en un ciclo cardiaco, y la muesca dicrótica, la cual se forma debido a un pequeño retroceso del flujo que ocurre cuando las válvulas cardiacas se cierran [48]. En la Fig. 3.2 también se muestra la presión de pulso, que es la diferencia entre la presión diastólica y la presión sistólica. Los puntos característicos mencionados y la presión de pulso, forman parte de los signos vitales y son medidas que sirven para conocer el estado de salud de una persona [49].

Los cambios temporales y espaciales de la presión arterial están determinados por las propiedades físicas del sistema cardiovascular [6]. La forma de las señales de flujo y presión medidas en algún punto del sistema arterial portan información valiosa sobre la funciona-



Figura 3.3: Ondas de presión en diferentes puntos del árbol arterial, desde la aorta ascendente hasta la arteria femoral, en tres humanos adultos con 24, 54 y 68 años de edad.En el individuo de mayor edad hay muy poca amplificación de la onda de presión durante la transmisión de la misma. Por otro lado, en el más joven, la amplitud de la onda incrementa aproximadamente un 60 % durante la transmisión. Tomada de [6], reproducción aprobada por la editorial.

lidad del mismo. En la Fig. 3.3 se muestran ejemplos de ondas de presión en diferentes posiciones a lo largo de la aorta y sus principales ramificaciones en individuos de distintas edades. En dicha figura se puede observar, que a diferencia del sujeto más joven, para el sujeto de mayor edad hay muy poca amplificación de la onda durante su transmisión y que la forma de la señal casi no cambia al transmitirse, esta última condición también se presenta en personas con hipertensión arterial [6]. Las observaciones anteriores están relacionadas con la disminución de la elasticidad de las arterias, es decir, al aumentar la edad, los vasos se vuelven más rígidos, lo que provoca cambios en la forma en la que la onda se transmite. A pesar de que se sabe el papel de muchas de las variables en la forma de las ondas de presión, no es totalmente claro el rol que juegan las propiedades físicas del corazón (como su tiempo de contracción y relajación), de las arterias grandes y de la microcirculación, en la forma de las ondas de pulso en condiciones normales o en estado de enfermedad.

3.1.2. Modelos de flujo sanguíneo

Al igual que cualquier otro sistema de flujo, el flujo sanguíneo se estudia a través de leyes de conservación de masa y momento. Existen diversos estudios sobre el flujo sanguíneo y diferentes formas de clasificarlos. Por ejemplo, se pueden clasificar en aquellos que se hacen en el dominio del tiempo o los que se analizan en el dominio de la frecuencia. En estos últimos, se utiliza la forma lineal de las ecuaciones de balance de momento [7]. Otra clasificación, se basa en la dimensión espacial utilizada, es decir, existen desde modelos cero dimensionales (0-D) hasta modelos tridimensionales (3-D). La selección de la dimensionalidad depende en gran medida de la resolución espacial que se desea tener y en el caso de los modelos

cuyas ecuaciones se resuelven numéricamente, del tiempo de cómputo.

Los modelos 0-D agrupan las propiedades del árbol vascular. En éstos, las características de los vasos del árbol (como su longitud y radio), no se toman en cuenta de forma explícita. Para ello se hace una analogía con un sistema eléctrico, en la cual, las propiedades resistivas de los vasos que conforman una red, se agrupan en una sola resistencia y las propiedades elásticas de los vasos, relacionadas a distintas capacitancias, se agrupan en una sola capacitancia [7]. Este tipo de modelos se pueden describir mediante ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo, por ello, son una herramienta computacional poco costosa v matemáticamente constituyen una referencia importante para poder conectar con variables medibles en medicina [8–12]. Sin embargo, los modelos 0-D son inadecuados para estudiar el fenómeno de propagación de ondas. Los modelos unidimensionales (1-D) describen las ondas de flujo y presión a lo largo de la dirección de flujo y simulan de forma aproximada, pero muchas veces suficiente, el fenómeno de propagación de ondas. Estos modelos son de bajo costo computacional [13–22]. Cabe destacar que comúnmente las soluciones de las ecuaciones diferenciales de este tipo de modelos se obtienen de forma numérica. Los modelos 3-D se utilizan para estudiar las características del flujo en geometrías complejas como las observadas en aneurismas y estenosis [23–25]. Su desventaja es que computacionalmente son muy costosos y que por su sofisticación, a veces es difícil dilucidar el papel que juegan las distintas variables del corazón, de la sangre y de los vasos, en la forma de las ondas de presión.

Los modelos 0-D relacionan la forma de las señales de presión y flujo en el tiempo con propiedades globales del sistema cardiovascular, tales como la distensibilidad arterial, la resistencia periférica y la presión de entrada al sistema venoso. Dichos modelos proveen relaciones entre las propiedades globales del sistema cardiovascular y la presión sanguínea, que son útiles desde el punto de vista clínico en ciertas condiciones como la hipertensión [11].

Algunas soluciones analíticas de modelos 1-D se han empleado para estudiar el flujo sanguíneo en un vaso [26,27] y se han utilizado como condiciones de frontera para representar la red periférica de vasos en formulaciones numéricas 1-D [16] y 3-D [28]. Sin embargo, las soluciones analíticas de modelos 1-D para estudiar el flujo sanguíneo en redes de vasos como la aorta y sus ramas sistémicas principales, son muy poco comunes.

En las formulaciones 1-D y 3-D de la red arterial, la geometría se descompone en segmentos arteriales conectados entre sí, mediante nodos. Mientras más grande es la cantidad de segmentos en una red, mayor es la cantidad de ecuaciones necesarias para obtener el flujo y la presión en cada segmento. Por tanto, es necesario truncar la red a cierto ni-

vel y escoger las condiciones de frontera apropiadas en los puntos de truncamiento. Estas condiciones deben contener la información de la red periférica [51]. Los modelos 0-D, han sido utilizados ampliamente como condiciones de frontera en tales puntos. Uno de los más empleados es el modelo de Windkessel [52], que en analogía con un sistema eléctrico, es un arreglo de una capacitancia (relacionada con la distensibilidad de los vasos) y resistencias. En la figura 3.4 se muestra el esquema del circuito eléctrico que corresponde a un modelo tipo Windkessel de tres elementos, en donde la primera resistencia, R_1 , es igual a la impedancia característica del sistema. Dicha configuración toma en cuenta de manera adecuada la reflexión de ondas en el sistema arterial [53]. La segunda resistencia, R_2 , de cada modelo de Windkessel, acoplado a un vaso terminal, se calcula a partir de la resistencia a la salida del vaso terminal, R_{VT} , dada por, $R_{VT} = R_1 + R_2$; esta última se obtiene a partir del flujo promedio incidente en la red, de la resistencia total de la red y de la distribución del flujo sanguíneo en cada vaso terminal. La capacitancia del modelo de Windkessel, C_{Wk} , se obtiene a partir de la distribución del flujo sanguíneo en cada vaso terminal y de la capacitancia total periférica. Esta última se obtiene de la capacitancia total del sistema, la cual se puede calcular de los datos de la señal de flujo incidente y de la resistencia total del sistema [13,55]. La metodología detallada para calcular el valor de los parámetros de la condición de frontera de Windkessel en cada vaso terminal, se puede consultar en el apéndice B.



Figura 3.4: Esquema del circuito eléctrico que corresponde a un modelo de Windkessel de tres elementos. La capacitancia contiene información de la distensibilidad de la red periférica. La primera resistencia es igual a la impedancia característica del sistema [53].

En los modelos de flujo sanguíneo, la distensibilidad del vaso se introduce a través de una ecuación constitutiva que relaciona los cambios de presión con la deformación del tubo. Con la finalidad de simular el flujo en arterias grandes cuyo grosor disminuye en la dirección del flujo [13,54], en algunos estudios se ha considerado que las propiedades elásticas (como el módulo de Young) y geométricas (como el radio y el espesor del vaso) dependen de la dirección de flujo. También se puede considerar que la respuesta de la pared a la presión, es elástica o viscoelástica [54].

Las ecuaciones para describir la dinámica de un fluido monofásico confinado en una cierta geometría rígida, se pueden obtener a partir de las ecuaciones de balance de momento y de una ecuación constitutiva que describa al tipo de fluido que se desea estudiar. En algunos sistemas, la solución de las ecuaciones mencionadas junto con las condiciones de frontera apropiadas, lleva a obtener una relación lineal entre el gradiente de presión y la velocidad del fluido en el dominio de Fourier. A esta relación se le conoce como ley de Darcy generalizada. En el apéndice A se puede consultar la derivación de dicha ley para la geometría de un tubo rígido. El desarrollo de nuestro modelo se basa en la misma.

3.2. Formulación del nuevo modelo

Uno de los objetivos de este trabajo es presentar y validar un nuevo modelo 1-D lineal del flujo sanguíneo en redes de vasos elásticos, para el cual se pueden obtener soluciones analíticas de la presión y el flujo en el dominio de la frecuencia en cada punto de la red.

Proponemos que la ley de Darcy generalizada 0-D (obtenida para el flujo en vasos rígidos) es válida localmente cuando los vasos son elásticos. Con la finalidad de tener un modelo en el que se puede tomar en cuenta la viscoelasticidad de la sangre, presentamos las ecuaciones generales que dejan abierta tal posibilidad, sin embargo, en este trabajo se considerará a la sangre como un fluido Newtoniano, ya que los tamaños de los vasos que componen las redes de estudio utilizadas, son tales que, el efecto de la viscoleasticidad es insignificante. Las ecuaciones descritas posteriormente se pueden simplificar fácilmente al caso de un fluido Newtoniano.

Consideramos que una red arterial se conforma por segmentos elásticos, los cuales se conectan entre sí en nodos. Cada segmento -que representa un vaso sanguíneo- se modela como un tubo cilíndrico deformable, como se aprecia en la Fig. 3.5. Presentamos en primer lugar la teoría para un vaso aislado y después para una red genérica.



Figura 3.5: Geometría utilizada para el desarrollo de las ecuaciones.

3.2.1. Derivación de las ecuaciones para un vaso

Modelamos cada vaso de la red como un segmento cilíndrico con paredes impermeables y la sangre como un fluido viscoelástico de Maxwell; estas ecuaciones se pueden simplificar fácilmente al caso Newtoniano fijando el tiempo de relajación igual a cero, *i.e.*, $t_r = 0$. Además, imponemos condiciones de frontera de no resbalamiento en las paredes para la velocidad axial en la posición promedio de la pared, R_0 . Estas consideraciones permiten obtener, a partir de las ecuaciones de conservación de momento en el dominio de frecuencia, una expresión para la velocidad axial del fluido en un tubo rígido, $\hat{u}(\omega)$, en el dominio de Fourier. La velocidad axial del fluido, \hat{u} , es proporcional al gradiente de presión en la dirección axial:

$$\hat{u}(x,r,\omega) = -\frac{K_L(r,\omega)}{\eta} \frac{\partial \hat{p}}{\partial x},$$
(3.1)

en donde, x es la coordenada axial, r es la coordenada radial y η es la viscosidad del fluido. $K_L(r, \omega)$ es la permeabilidad dinámica local, la cual está dada por:

$$K_L(r,\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{J_0(kr)}{J_0(kR_0)} \right].$$
(3.2)

En esta expresión, $k^2 = \frac{\rho}{\eta} (t_r \omega^2 + i\omega)$, ρ es la densidad del fluido, ω es la frecuencia angular, $i = \sqrt{-1}$ y J_0 es la función de Bessel de orden cero, primera clase. Al promediar la ecuación 3.1 en el área promedio de la sección transversal, A_0 , obtenemos una expresión para el flujo en un tubo rígido, \hat{Q} , que pasa a través de dicha área, en el dominio de Fourier,

$$\hat{Q} = -\frac{A_0 K(\omega)}{\eta} \frac{\partial \hat{p}}{\partial x}.$$
(3.3)

La ecuación 3.3 es conocida como la ley de Darcy generalizada. En ella, $K(\omega)$, es la permeabilidad dinámica, dada por:

$$K(\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{2J_1(kR_0)}{kR_0 J_0(kR_0)} \right], \qquad (3.4)$$

en donde J_1 , es la función de Bessel de primer orden. La derivación de las ecuaciones 3.1,3.2, 3.3 y 3.4, se puede consultar en el apéndice A.

Estas ecuaciones fueron derivadas para un gradiente de presión dinámico que es constante en la dirección de flujo [26,29]. Sin embargo, en este trabajo consideramos que dichas ecuaciones son válidas localmente, esto es, que en cualquier posición a lo largo de la dirección axial x, el gradiente de presión local determina tanto la velocidad como el flujo. $K_L(r,\omega)$ al igual que $K(\omega)$, pueden ser consideradas como una medida de la resistencia a fluir. Una permeabilidad dinámica grande en magnitud, implica baja resistencia a fluir.

Introducimos la elasticidad del vaso a través de una relación tipo ley de Hooke entre la presión y la deformación elástica del tubo, ΔR , [56,57].

$$p - p_{\text{ext}} = \frac{Eh}{1 - \nu^2} \frac{\Delta R}{R_0^2},$$
(3.5)

en donde, $p - p_{\text{ext}}$, es la diferencia de presión adentro y afuera del vaso; E es el módulo elástico de Young, h es el espesor del vaso y ν es la relación de Poisson, la cual tomamos como, $\nu = 1/2$, ya que suponemos que la pared arterial se compone de un material incompresible. Alrededor del radio de diástole, $R_{\rm d}$, la ecuación 3.5 se puede aproximar como:

$$p - p_{\rm d} = \frac{4}{3} E h \frac{R - R_{\rm d}}{R_{\rm d}^2}.$$
(3.6)

en donde p_d es la presión en diástole. Este tipo de ecuación se ha utilizado ampliamente en la literatura [13, 15–17, 53, 58–63].

La ecuación 3.6 se acopla a la ecuación de continuidad promediada en el área de la sección transversal, con lo cual se obtiene una ecuación diferencial unidimensional que relaciona la presión y el flujo en el vaso.

La velocidad del fluido $\mathbf{v} = u(x, r, t)\hat{\mathbf{i}} + v(x, r, t)\hat{r}$ cumple con la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \tag{3.7}$$

Para un fluido incompresible en coordenadas cilíndricas, dicha ecuación está dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rv)}{\partial r} = 0.$$
(3.8)

Promediando la ecuación 3.8 en el área de la sección transversal obtenemos,

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{2\pi}{A_0} R_0 v_{r=R_0} = 0, \qquad (3.9)$$

en donde U(x,t) es la velocidad axial promediada en el área de la sección transversal. Consideramos que la velocidad del fluido y la velocidad de la pared son iguales en el radio promedio, *i.e.*, $v_{r=R_0} = \frac{\partial R}{\partial t}\Big|_{R_0}$, lo que lleva a

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{2\pi}{A_0} R_0 \frac{\partial R}{\partial t}\Big|_{R_0} = 0.$$
(3.10)

En términos del flujo, $Q(x,t) \equiv A_0 U(x,t)$, la ecuación 3.10 se puede escribir como:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + 2\pi R_0 \frac{\partial R}{\partial t}\Big|_{R_0} = 0.$$
(3.11)

Para describir el cambio temporal del radio local del vaso en términos del cambio temporal de la presión local sanguínea, utilizamos la ecuación 3.6 que nos da una relación entre la deformación elástica y la presión. Derivamos dicha ecuación respecto al tiempo y evaluamos el resultado en el radio promedio, R_0 , con lo que obtenemos,

$$\frac{\partial R}{\partial t}\Big|_{R_0} = \frac{3R_d^2}{4Eh} \frac{\partial p}{\partial t}\Big|_{R_0} = \frac{3R_d^2}{4Eh} \frac{\partial p}{\partial t}.$$
(3.12)

Combinando las ecuaciones 3.11 y 3.12, llegamos a

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + C \frac{\partial p}{\partial t} = 0, \qquad (3.13)$$

en donde, definimos

$$C \equiv \frac{3\pi R_0 R_d^2}{2Eh},\tag{3.14}$$

la cual es una constante conocida como la distensibilidad del vaso (compliance en inglés).

La ecuación 3.13 se puede escribir en el dominio de Fourier como:

$$-i\omega C\hat{p} + \frac{\partial\hat{Q}}{\partial x} = 0. \tag{3.15}$$

Esta ecuación relaciona la presión, $\hat{p}(x,\omega)$, y el flujo, $\hat{Q}(x,\omega)$, en el dominio de la frecuencia.

3.2.2. Solución espacial de las ecuaciones para un vaso en función de las presiones en sus extremos

Derivamos la ecuación 3.3 respecto a x y sustituimos el resultado en la ecuación 3.15, con ello llegamos a una ecuación diferencial similar a la de un oscilador armónico para la presión en el dominio de Fourier, esto es,

$$\left(\frac{\partial^2 \hat{p}}{\partial x^2}\right) = -k_c^2 \hat{p},\tag{3.16}$$

en donde, $k_c^2 = \frac{i\omega C\eta}{A_0 K(\omega)}$ es una constante compleja. Resolvemos esta ecuación para conocer la presión en cualquier punto, x, del vaso, dadas las presiones $\hat{p}_{\rm in}$ y \hat{p}_o a la entrada y a la salida del mismo,

$$\hat{p}(x) = \hat{p}_{\rm in} \cos(k_c x) + \frac{\hat{p}_{\rm o} - \hat{p}_{\rm in} \cos(k_c l)}{\sin(k_c l)} \sin(k_c x).$$
(3.17)

La derivada de la ecuación 3.17 respecto a x nos permite obtener el gradiente de presión como función de la posición, x,

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial x} = -k_c \ \hat{p}_{\rm in} \sin\left(k_c x\right) + k_c \frac{\hat{p}_{\rm o} - \hat{p}_{\rm in} \cos\left(k_c l\right)}{\sin\left(k_c l\right)} \cos\left(k_c x\right). \tag{3.18}$$

Cabe destacar que la elasticidad del vaso determina la variación del gradiente de presión a lo largo del mismo. Cuando no hay elasticidad, C = 0, lo que implica, $k_c = 0$ y el gradiente de presión se reduce a un gradiente de presión constante, *i.e.*,

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial x} = \frac{\hat{p}_{\rm o} - \hat{p}_{\rm in}}{l}$$

Al sustituir la ecuación 3.18 en la ecuación 3.3, válida localmente para cualquier gradiente de presión, se obtiene una expresión para el flujo como función de la posición en la dirección axial, esto es,

$$\hat{Q}(x) = M \left[\hat{p}_{\rm in} \sin(k_c x) - \frac{\hat{p}_o - \hat{p}_{\rm in} \cos(k_c l)}{\sin(k_c l)} \cos(k_c x) \right],$$
(3.19)

en donde

$$M^2 = \frac{i\omega CA_0 K(\omega)}{\eta}.$$
(3.20)

De forma similar, al sustituir la ecuación 3.18 en la velocidad axial del fluido (ecuación 3.1) se obtiene una expresión que permite calcular los perfiles de velocidad a lo largo de la dirección de flujo:

$$\hat{u}(r,x) = M_L(r) \left[\hat{p}_{\rm in} \sin(k_c x) - \frac{\hat{p}_o - \hat{p}_{\rm in} \cos(k_c l)}{\sin(k_c l)} \cos(k_c x) \right],$$
(3.21)

en donde

$$M_L(r) = \frac{M}{A_0 K(\omega)} K_L(r, \omega).$$
(3.22)

Las ecuaciones $3.17, 3.19 ext{ y } 3.21$, permiten calcular la presión, flujo y los perfiles de velocidad en cualquier punto, x, a lo largo del vaso, como función de la presión en los extremos del mismo.

3.2.3. Presión, flujo y perfiles de velocidad para vasos con diferentes tipos de condiciones de frontera

Una red arterial genérica puede tener múltiples entradas y múltiples salidas. En este trabajo, imponemos como condiciones de frontera en la red, flujos volumétricos en las entradas y acoplamos un modelo de Windkessel en las salidas. De acuerdo con las condiciones de frontera en un vaso, clasificamos a éstos en tres tipos:



Figura 3.6: Tipos de vasos en una red. La clasificación se basa en las condiciones de frontera en los extremos de los mismos.

• Vaso tipo I, vea la Fig. 3.6a. Este tipo de vaso tiene como condiciones de frontera un flujo de entrada, \hat{Q}_{in} , y una presión de salida, \hat{p}_{o} . Dicha presión se determina como parte de la solución del sistema de ecuaciones. Una vez que se conoce \hat{p}_{o} , la presión, el flujo y los perfiles de velocidad como función de la posición axial, están dados por las ecuaciones 3.23 a 3.25.

$$\hat{p}(x) = \frac{\hat{Q}_{\rm in}\sin(k_c l) + M\hat{p}_{\rm o}}{M\cos(k_c l)}\cos(k_c x) - \frac{\hat{Q}_{\rm in}}{M}\sin(k_c x), \qquad (3.23)$$

$$\hat{Q}(x) = \frac{\hat{Q}_{\rm in}\sin(k_c l) + M\hat{p}_{\rm o}}{\cos(k_c l)}\sin(k_c x) + \hat{Q}_{\rm in}\cos(k_c x), \qquad (3.24)$$

$$\hat{u}(r,x) = \frac{M_L(r)}{M} \left[\frac{\hat{Q}_{\text{in}} \sin(k_c l) + M\hat{p}_{\text{o}}}{\cos(k_c l)} \sin(k_c x) + \hat{Q}_{\text{in}} \cos(k_c x) \right].$$
(3.25)

- Vaso tipo II, vea la Fig. 3.6b. Este tipo de vaso tiene como condiciones de frontera presiones de entrada, \hat{p}_{in} , y de salida \hat{p}_{o} . Estas presiones se determinan como parte de la solución del sistema de ecuaciones. Una vez conocidas ambas presiones, se pueden calcular la presión, el flujo y los perfiles de velocidad como función de la posición axial, a través de las ecuaciones 3.17, 3.19 y 3.21.
- Vaso tipo III, vea la Fig. 3.6c. Este tipo de vaso tiene como condiciones de frontera una presión de entrada, \hat{p}_{in} y un modelo de Windkessel de tres elementos a la salida, como se indica en la Fig 3.7. Tanto \hat{p}_{in} como \hat{p}_{o} se determinan como parte de la solución del sistema de ecuaciones. Una vez conocidas ambas presiones, se pueden calcular la presión, el flujo y los perfiles de velocidad como función de la posición axial, a través de las ecuaciones 3.17, 3.19 y 3.21.



Figura 3.7: Esquema del circuito eléctrico que corresponde a un modelo de Windkessel de tres elementos. La capacitancia, C_{Wk} , contiene información de la distensibilidad de la red periférica. Por conservación de flujo $Q_{Wk} = Q_2 + Q_3$. La presión de entrada al sistema venoso, p_{out} , se considera constante.

El modelo de Windkessel relaciona la presión y el flujo en la salida de un vaso terminal. En la figura 2.4 se muestra el esquema del circuito eléctrico que corresponde a un modelo tipo Windkessel de tres elementos. Este modelo concentra la información de la resistencia de la red de vasos periféricos y el carácter distensible de los mismos. Consiste en una resistencia R_1 conectada en serie con un depósito distensible de presión, $C_{\rm Wk}$, conectado en paralelo con una segunda resistencia R_2 .

La ecuación del modelo se obtiene de la conservación de flujo en el circuito, esto es, $Q_{Wk} = Q_2 + Q_3$, en donde,

$$Q_{\rm Wk} = -\frac{p_b - p_0}{R_1}, \quad Q_2 = -\frac{p_{out} - p_b}{R_2} \quad y \quad Q_3 = -C_{\rm Wk} \frac{d}{dt} \left(p_{out} - p_b \right). \tag{3.26}$$

 p_{out} es una constante que representa la presión de entrada al sistema venoso. De la conservación de flujo, la ecuación del modelo se puede escribir como,

$$Q_{\rm Wk}\left(1+\frac{R_1}{R_2}\right) + C_{\rm Wk}R_1\frac{\partial Q_{\rm Wk}}{\partial t} = \frac{p_0 - p_{\rm out}}{R_2} + C_{\rm Wk}\frac{\partial p_0}{\partial t},\tag{3.27}$$

que en el dominio de la frecuencia está dada por:

$$\hat{Q}_{\rm Wk} = \frac{\hat{p}_0}{\hat{Z}},\tag{3.28}$$

en donde, en analogía con un circuito eléctrico, se llama impedancia a la constante de proporcionalidad, \hat{Z} ,

$$\hat{Z} = \frac{R_1 + R_2 - i\omega R_1 R_2 C_{Wk}}{1 - i\omega R_2 C_{Wk}}.$$
(3.29)

3.2.4. Derivación de las ecuaciones para una red de vasos

A continuación mostramos cómo escribir un sistema de ecuaciones para calcular las presiones en los nodos de una red, en función tanto de las propiedades del vaso y de la sangre como de las condiciones de frontera. Definimos un nodo como el punto matemático en donde se conectan dos o tres vasos. De acuerdo con los tipos de vasos conectados a un nodo, clasificamos a éstos en cuatro tipos,¹ vea la Fig.3.8:



Figura 3.8: Tipos de nodos, la clasificación se basa en el tipo de vasos conectados a los mismos.

Nodo tipo I, vea el nodo N en la Fig. 3.8. Este tipo de nodo tiene una presión desconocida p^[N] y conecta un vaso tipo I (el vaso h) con dos vasos tipo II (los vasos h + 1 y h + 2). En dicho nodo la conservación de flujo se expresa como:

$$\hat{Q}_{\rm o}^h = \hat{Q}_{\rm in}^{h+1} + \hat{Q}_{\rm in}^{h+2}, \qquad (3.30)$$

en donde el flujo de salida, \hat{Q}_{o}^{h} , se obtiene de la ecuación 3.24 evaluada en x = l y los flujos de entrada, \hat{Q}_{in}^{h+1} y \hat{Q}_{in}^{h+2} , están dados por la ecuación 3.19 evaluada en x = 0. Con ello podemos escribir la ecuación 3.30 de la forma:

$$\frac{\hat{Q}_{in}^{h} + M^{h} \hat{p}^{[N]} \sin(k_{c}^{h} l^{h})}{\cos(k_{c}^{h} l^{h})} = -M^{h+1} \left(\frac{\hat{p}^{[N+1]} - \hat{p}^{[N]} \cos(k_{c}^{h+1} l^{h+1})}{\sin(k_{c}^{h+1} l^{h+1})}\right) - M^{h+2} \left(\frac{\hat{p}^{[N+2]} - \hat{p}^{[N]} \cos(k_{c}^{h+2} l^{h+2})}{\sin(k_{c}^{h+2} l^{h+2})}\right).$$
(3.31)

• Nodo tipo II, vea el nodo S en la Fig. 3.8. Este tipo de nodo tiene una presión desconocida $p^{[S]}$ y conecta tres vasos tipo II: los vasos j, j + 1 y j + 2. En dicho nodo la conservación de flujo se expresa como:

$$\hat{Q}_{\rm o}^j = \hat{Q}_{\rm in}^{j+1} + \hat{Q}_{\rm in}^{j+2}.$$
(3.32)

Para obtener el flujo de salida del vaso, \hat{Q}_{o}^{j} , evaluamos la ecuación 3.19 en x = l; para los flujos \hat{Q}_{in}^{j+1} y \hat{Q}_{in}^{j+2} evaluamos la ecuación 3.19 en x = 0. Con ello podemos

¹De aquí en adelante utilizaremos superíndices para indicar el número de vaso y superíndices entre corchetes para denotar el número de nodo.

escribir la ecuación 3.32 de la forma:

$$M^{j}\left(\frac{\hat{p}^{[S-1]} - \hat{p}^{[S]}\cos(k_{c}^{j}l^{j})}{\sin(k_{c}^{j}l^{j})}\right) = -M^{j+1}\left(\frac{\hat{p}^{[S+1]} - \hat{p}^{[S]}\cos(k_{c}^{j+1}l^{j+1})}{\sin(k_{c}^{j+1}l^{j+1})}\right) - M^{j+2}\left(\frac{\hat{p}^{[S+2]} - \hat{p}^{[S]}\cos(k_{c}^{j+2}l^{j+2})}{\sin(k_{c}^{j+2}l^{j+2})}\right).$$
 (3.33)

• Nodo tipo III, vea el nodo T - 1 en la Fig. 3.8. Este tipo de nodo tiene una presión desconocida $p^{[T-1]}$ y conecta dos vasos tipo II: los vasos m - 1 y m. En este nodo la conservación de flujo se expresa como:

$$\hat{Q}_{\rm o}^{m-1} = \hat{Q}_{\rm in}^m.$$
 (3.34)

Para el flujo de salida, \hat{Q}_{o}^{m-1} , evaluamos la ecuación 3.19 en x = l y para el flujo de entrada, \hat{Q}_{in}^{m} , evaluamos la ecuación 3.19 en x = 0. Con ello podemos escribir la ecuación 3.34 de la forma:

$$M^{m-1}\left(\frac{\hat{p}^{[T-2]} - \hat{p}^{[T-1]}\cos(k_c^{m-1}l^{m-1})}{\sin(k_c^{m-1}l^{m-1})}\right) = -M^m\left(\frac{\hat{p}^{[T]} - \hat{p}^{[T-1]}\cos(k_c^m l^m)}{\sin(k_c^m l^m)}\right).$$
 (3.35)

• Nodo tipo IV, vea el nodo T en la Fig. 3.8. Este tipo de nodo tiene una presión desconocida $p^{[T]}$ y conecta un vaso terminal Tipo III con un modelo de Windkessel de tres elementos. En el nodo T la conservación de flujo se puede expresar como:

$$\hat{Q}^m_{\rm o} = \hat{Q}^m_{\rm Wk}.\tag{3.36}$$

Para obtener \hat{Q}_{o}^{m} , evaluamos la ecuación 3.19 en x = l. Para obtener el flujo del modelo de Windkessel conectado al vaso m, \hat{Q}_{Wk}^{m} , utilizamos la ecuación 3.28. Con ello podemos escribir la ecuación 3.36 de la forma:

$$M^m \left(\frac{\hat{p}^{[T-1]} - \hat{p}^{[T]} \cos(k_c^m l^m)}{\sin(k_c^m l^m)} \right) = \frac{\hat{p}^{[T]}}{\hat{Z}^m}.$$
(3.37)

Nuestra formulación permite obtener un sistema de ecuaciones para las presiones en los nodos, el cual escribimos en forma matricial. Con el fin de reducir la notación para la construcción de la matriz definimos tres cantidades, κ_1 , κ_2 y κ_3 , las cuales dependen de las características de los vasos aislados, las propiedades del fluido y la frecuencia:

$$\kappa_1^i \equiv M^i \frac{\cos(k_c^i l^i)}{\sin(k_c^i l^i)}, \qquad \kappa_2^i \equiv M^i \frac{1}{\sin(k_c^i l^i)}, \qquad \mathbf{y} \qquad \kappa_3^i \equiv M^i \frac{\sin(k_c^i l^i)}{\cos(k_c^i l^i)}; \tag{3.38}$$

en donde el superíndice *i* denota el número de vaso y M^i está dada por la ecuación 3.20 para el i-ésimo vaso. En términos de estas cantidades, las ecuaciones 3.31, 3.33, 3.35 y 3.37 para los nodos tipo I, II, III y IV, se pueden escribir como:

$$\left(\kappa_3^h - \kappa_1^{h+1} - \kappa_1^{h+2}\right)\hat{p}^{[N]} + \kappa_2^{h+1}\hat{p}^{[N+1]} + \kappa_2^{h+2}\hat{p}^{[N+2]} = -\frac{Q_{\rm in}^h}{\cos(k_c^h l^h)} \quad (3.39)$$

$$\kappa_2^j \,\hat{p}^{[S-1]} - \left(\kappa_1^j + \kappa_1^{j+1} + \kappa_1^{j+2}\right)\hat{p}^{[S]} + \kappa_2^{j+1}\hat{p}^{[S+1]} + \kappa_2^{j+2}\hat{p}^{[S+2]} = 0 \quad , \tag{3.40}$$

$$\kappa_2^{m-1}\hat{p}^{[T-2]} - \left(\kappa_1^{m-1} + \kappa_1^m\right)\hat{p}^{[T-1]} + \kappa_2^m \,\hat{p}^{[T]} = 0 \quad , \tag{3.41}$$

$$\kappa_2^m \hat{p}^{[T-1]} - \left(\kappa_1^m + \frac{1}{\hat{Z}^m}\right) \hat{p}^{[T]} = 0$$
(3.42)

El sistema de ecuaciones en forma matricial está dado por $\mathbf{K}\vec{\mathbf{p}} = \vec{\mathbf{Q}}$, en donde la matriz **K** contiene explícitamente los términos para cada uno de los cuatro tipos de nodos. Esto es:

$\mathbf{K} =$												
$\left(\kappa_{3}^{h}-\kappa_{1}^{h+1}-\kappa_{1}^{h+2}\right)$	κ_2^{h+1}	κ_2^{h+2}	··· 0	0	0	0		0	0	0)	
÷	÷	÷	: :	÷	:	÷	÷	÷	:	÷	÷	
0	0	0	$\cdots \kappa_2^j$	$\scriptstyle -\kappa_1^j-\kappa_1^{j+1}-\kappa_1^{j+2}$	κ_2^{j+1}	κ_2^{j+2}		0	0	0		
:	÷	÷	: :	÷	:	÷	÷	÷		÷	÷	,
0	0	0	··· 0	0	0	0		κ_2^{m-1}	$-\kappa_1^{m-1}-\kappa_1^m$	κ_2^m		
0	0	0	··· 0	0	0	0	• • •	0	κ_2^m	$-\kappa_1^m - \frac{1}{\hat{Z}^m}$		
	÷	:	: :	:	:	÷	÷	÷		÷	·.)	1

$$\vec{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \hat{p}^{[N]} \\ \hat{p}^{[N+1]} \\ \hat{p}^{[N+2]} \\ \vdots \\ \hat{p}^{[S-1]} \\ \hat{p}^{[S-1]} \\ \hat{p}^{[S+1]} \\ \hat{p}^{[S+2]} \\ \vdots \\ \hat{p}^{[T-2]} \\ \hat{p}^{[T-1]} \\ \hat{p}^{[T]} \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{y} \quad \vec{\mathbf{Q}} = \begin{pmatrix} -\frac{\hat{Q}_{in}^{h}}{\cos(k_{c}^{h}l^{h})} \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

La matriz **K** tiene dimensiones $N \times N$, en donde, N es el número de nodos de la red. La solución para las presiones en los nodos, $\vec{\mathbf{p}}$, está dada por el producto de la matriz inversa, \mathbf{K}^{-1} , con el vector de condiciones de frontera de flujos, $\vec{\mathbf{Q}}$; *i.e.*, $\vec{\mathbf{p}} = \mathbf{K}^{-1}\vec{\mathbf{Q}}$. La

matriz \mathbf{K} y su inversa \mathbf{K}^{-1} contienen información sobre las características de los vasos, las propiedades del fluido y las condiciones de frontera del modelo de Windkessel. Dichas matrices pueden ser consideradas como funciones respuesta para un sistema con múltiples entradas y múltiples salidas. \mathbf{K}^{-1} se puede obtener de invertir simbólicamente la matriz \mathbf{K} . Una vez conocidas las presiones en los nodos, se pueden usar las ecuaciones 3.17, 3.19, y 3.21 para obtener de forma analítica la presión, el flujo y los perfiles de velocidad en el dominio de Fourier a lo largo de cualquier vaso de la red que no contenga como condición de frontera un flujo incidente; en este caso se pueden utilizar las ecuaciones 3.23, 3.24 y 3.25.

3.2.5. Acoplamiento de las condiciones de frontera en el dominio del tiempo con la formulación analítica en el dominio de la frecuencia

Las mediciones *in vivo* se obtienen en el dominio del tiempo. Nuestra formulación se encuentra en el dominio de Fourier; por ello, es necesario transformar al dominio de Fourier las mediciones *in vivo* del flujo que se utilizan como condiciones de frontera en las entradas. Por otro lado, una vez obtenida la solución de nuestro problema en el dominio de Fourier, es necesario anti-transformar los perfiles de velocidad, presión y flujo al dominio del tiempo. Lo anterior es con el fin de relacionar los resultados obtenidos con señales que puedan ser interpretadas físicamente y ser comparadas con señales medidas. Las transformaciones del dominio del tiempo al dominio de frecuencia, y la transformación inversa del dominio de frecuencia al dominio del tiempo, se hacen numéricamente.

3.3. Soluciones analíticas para casos particulares

3.3.1. Modelo para un vaso aislado



Figura 3.9: Representación esquemática de un vaso aislado. Éste tiene como condiciones de frontera un flujo de entrada y un modelo de Windkessel de tres elementos a la salida.

El modelo de un vaso aislado es una combinación de un vaso tipo I y un vaso tipo III, ya que tiene como condiciones de frontera un flujo de entrada y un modelo de Windkessel a

la salida, como se aprecia en la Fig. 3.9. A la salida del vaso, la conservación de flujo está dada por:

$$\hat{Q}_{\rm o} = \hat{Q}_{\rm Wk},\tag{3.43}$$

en donde el flujo de salida del vaso, \hat{Q}_{o} , está dado por la ecuación 3.24 evaluada en x = ly el flujo en el modelo de Windkessel, \hat{Q}_{Wk} , está dado por la ecuación 3.28. Esto permite escribir la ecuación 3.43 como:

$$\frac{Q_{\rm in} + M\hat{p}_{\rm o}\sin(k_c l)}{\cos(k_c l)} = \frac{\hat{p}_{\rm o}}{\hat{Z}},\tag{3.44}$$

en donde \hat{Z} está dada por la ecuación 3.29. Dado que este modelo es el más simple, tenemos una matriz **K** de un solo elemento, esto es, $\mathbf{K} = \kappa_3^1 - \frac{1}{\hat{Z}^1}$. De forma similar, tenemos vectores con un solo elemento para la presión en el nodo $\vec{\mathbf{p}} = \hat{p}^{[1]} = \hat{p}_0$ y el flujo de entrada $\vec{\mathbf{Q}} = -\frac{\hat{Q}_{in}^1}{\cos(k_c^1 l^1)}$. Resolvemos para la presión \hat{p}_0 , y tenemos,

$$\hat{p}_{\rm o} = \frac{\hat{Z}\hat{Q}_{\rm in}}{\cos(k_c l) - \hat{Z}M\sin(k_c l)}.$$
(3.45)

Para obtener la presión, el flujo y los perfiles de velocidad como función de la posición axial, x, introducimos la expresión para \hat{p}_{o} en las ecuaciones 3.23, 3.24 y 3.25, esto es,

$$\hat{p}(x) = \left[\frac{\sin(k_c l)\cos(k_c x)}{\cos(k_c l)} - \sin(k_c x)\right] \frac{\hat{Q}_{\rm in}}{M} + \frac{\cos(k_c x)\,\hat{Q}_{\rm in}\hat{Z}}{\cos(k_c l)\left(\cos(k_c l) - \hat{Z}M\sin(k_c l)\right)},\tag{3.46}$$

$$\hat{Q}(x) = \left[\frac{\sin(k_c l)\sin(k_c x)}{\cos(k_c l)} + \cos(k_c x)\right]\hat{Q}_{\rm in} + \frac{\sin(k_c x)\hat{Q}_{\rm in}M\hat{Z}}{\cos(k_c l)\left(\cos(k_c l) - \hat{Z}M\sin(k_c l)\right)},\tag{3.47}$$

$$\hat{u}(r,x) = \left[\frac{\sin(k_c l)\sin(k_c x)}{\cos(k_c l)} + \cos(k_c x)\right] \frac{M_L(r)\hat{Q}_{\rm in}}{M} + \frac{\sin(k_c x)\hat{Q}_{\rm in}M_L(r)\hat{Z}}{\cos(k_c l)\left(\cos(k_c l) - \hat{Z}M\sin(k_c l)\right)}.$$
 (3.48)

3.3.2. Modelo para una bifurcación simple

Consideramos un modelo para una bifurcación simple, que contiene un segmento padre que se bifurca en dos segmentos hijos. Con el fin de obtener un sistema de ecuaciones para las presiones en los nodos utilizamos la notación de la Fig. 3.10. El primer nodo es de tipo I mientras que el segundo y el tercero son de tipo IV. En consecuencia, utilizando las ecuaciones 3.39 y 3.42, el sistema de ecuaciones para las presiones, en forma matricial, está dado por:



Figura 3.10: Representación esquemática del modelo de una bifurcación simple.

$$\begin{pmatrix} \kappa_3^1 - \kappa_1^2 - \kappa_1^3 & \kappa_2^2 & \kappa_2^3 \\ \kappa_2^2 & -\kappa_1^2 - \frac{1}{\hat{Z}^2} & 0 \\ \kappa_2^3 & 0 & -\kappa_1^3 - \frac{1}{\hat{Z}^3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}^{[1]} \\ \hat{p}^{[2]} \\ \hat{p}^{[3]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{Q_{\mathrm{in}}^1}{\cos(k_c^{1/1})} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

La solución del sistema de ecuaciones, obtenida al invertir simbólicamente la matriz respuesta del sistema, permite obtener expresiones para las presiones en los nodos:

$$\hat{p}^{[1]} = -\frac{\hat{Q}_{\rm in}^1 \left(1 + \kappa_1^2 \hat{Z}^2 + \kappa_1^3 \hat{Z}^3 + \kappa_1^2 \kappa_1^3 \hat{Z}^2 \hat{Z}^3\right)}{\cos(k_c^1 l^1) \mathcal{F}_1},\tag{3.49}$$

$$\hat{p}^{[2]} = -\frac{\hat{Q}_{\rm in}^1 \left(\kappa_2^2 \hat{Z}^2 + \kappa_2^2 \kappa_1^3 \hat{Z}^2 \hat{Z}^3\right)}{\cos(k_c^1 l^1) \mathcal{F}_1},\tag{3.50}$$

$$\hat{p}^{[3]} = -\frac{\hat{Q}_{\rm in}^1 \left(\kappa_2^3 \hat{Z}^3 + \kappa_1^2 \kappa_2^3 \hat{Z}^2 \hat{Z}^3\right)}{\cos(k_c^1 l^1) \mathcal{F}_1},\tag{3.51}$$

en donde,

$$\mathbf{F}_{1} = \hat{Z}^{3}(1 + \hat{Z}^{2}\kappa_{1}^{2})(\kappa_{2}^{3})^{2} - (1 + \hat{Z}^{3}\kappa_{1}^{3})\left(\kappa_{1}^{2} + \kappa_{1}^{3} - \kappa_{1}^{1} + \hat{Z}^{2}\left[(\kappa_{1}^{2})^{2} + \kappa_{1}^{2}\kappa_{1}^{3} - \kappa_{1}^{2}\kappa_{3}^{1} - (\kappa_{2}^{2})^{2}\right]\right). \quad (3.52)$$

Con el fin de obtener expresiones para la presión, el flujo y los perfiles de velocidad a lo largo del vaso padre, la ecuación 3.49 se puede utilizar como la presión de salida en las ecuaciones 3.23, 3.24 y 3.25. Las ecuaciones 3.49, 3.50 y 3.51 se pueden emplear como las presiones de entrada y salida en las ecuaciones 3.17, 3.19 y 3.21 para obtener la presión, el flujo y los perfiles de velocidad a lo largo de los dos vasos hijos. En el caso particular en que los vasos hijos sean idénticos, $\kappa_1^2 = \kappa_1^3$, $\kappa_2^2 = \kappa_2^3$, y las impedancias características sean iguales, $\hat{Z}^2 = \hat{Z}^3$, tenemos $\hat{p}_2(x) = \hat{p}_3(x)$ y $\hat{Q}_2(x) = \hat{Q}_3(x)$; las ecuaciones para la presión, el flujo y los perfiles de velocidad para el vaso padre están dadas por:

$$\hat{p}_1(x) = -\frac{\hat{Q}_{\rm in}^1 \left(1 + \hat{Z}^2 \kappa_1^2\right) \cos(k_c^1 x)}{\cos^2(k_c^1 l^1) F_2} + \frac{\hat{Q}_{\rm in}^1 \sin(k_c^1 l^1)}{M^1 \cos(k_c^1 l^1)} \cos(k_c^1 x) - \frac{\hat{Q}_{\rm in}^1}{M^1} \sin(k_c^1 x), \qquad (3.53)$$

$$\hat{Q}_1(x) = -\frac{M^1 \hat{Q}_{\rm in}^1 \left(1 + \hat{Z}^2 \kappa_1^2\right) \sin(k_c^1 x)}{\cos^2(k_c^1 l^1) \mathcal{F}_2} + \frac{\hat{Q}_{\rm in}^1 \sin(k_c^1 l^1)}{\cos(k_c^1 l^1)} \sin(k_c^1 x) + \hat{Q}_{\rm in}^1 \cos(k_c^1 x), \quad (3.54)$$

$$\hat{u}_{1}(r,x) = -\frac{M_{L}(r)^{1}\hat{Q}_{\mathrm{in}}^{1}\left(1+\hat{Z}^{2}\kappa_{1}^{2}\right)\sin(k_{c}^{1}x)}{\cos^{2}(k_{c}^{1}l^{1})\mathrm{F}_{2}} + \frac{M_{L}^{1}(r)\hat{Q}_{\mathrm{in}}^{1}}{M^{1}}\left[\frac{\sin(k_{c}^{1}l^{1})}{\cos(k_{c}^{1}l^{1})}\sin(k_{c}^{1}x) + \cos(k_{c}^{1}x)\right],$$
(3.55)

en donde,

$$\mathbf{F}_{2} = \left[\kappa_{3}^{1} - 2\kappa_{1}^{2} + \hat{Z}^{2} \left(\kappa_{1}^{2}\kappa_{3}^{1} - 2(\kappa_{1}^{2})^{2} + 2(\kappa_{2}^{2})^{2}\right)\right].$$
(3.56)

Para los vasos hijos dichas ecuaciones están dadas por:

$$\hat{p}_2(x) = -\frac{\hat{Q}_{\rm in}^1 \left(1 + \hat{Z}^2 \kappa_1^2\right) \left[\sin(k_c^2 l^2) \cos(k_c^2 x) - \cos(k_c^2 l^2) \sin(k_c^2 x)\right] + \hat{Q}_{\rm in}^1 \hat{Z}^2 \kappa_2^2 \sin(k_c^2 x)}{\sin(k_c^2 l^2) \cos(k_c^1 l^1) F_2}, \quad (3.57)$$

$$\hat{Q}_{2}(x) = -M^{2} \frac{\hat{Q}_{\rm in}^{1} \left(1 + \hat{Z}^{2} \kappa_{1}^{2}\right) \left[F_{3}\right] - \hat{Q}_{\rm in}^{1} \hat{Z}^{2} \kappa_{2}^{2} \cos(k_{c}^{2} x)}{\sin(k_{c}^{2} l^{2}) \cos(k_{c}^{1} l^{1}) F_{2}},$$
(3.58)

$$\hat{u}_{2}(r,x) = M_{L}^{2}(r) \left[\frac{-\hat{Q}_{\rm in}^{1} \left(1 + \hat{Z}^{2} \kappa_{1}^{2} \right) \left[\mathbf{F}_{3} \right] + \hat{Q}_{\rm in}^{1} \hat{Z}^{2} \kappa_{2}^{2} \cos(k_{c}^{2} x)}{\sin(k_{c}^{2} l^{2}) \cos(k_{c}^{1} l^{1}) \mathbf{F}_{2}} \right],$$
(3.59)

en donde,

$$F_3 = \sin(k_c^2 l^2) \sin(k_c^2 x) + \cos(k_c^2 l^2) \cos(k_c^2 x).$$
(3.60)

3.3.3. Modelo para la aorta y sus principales ramificaciones

Consideramos un modelo con 20 arterias, el cual representa a la aorta y sus ramificaciones principales, vea la Fig. 3.11. La solución analítica para el primer nodo de la red se muestra en el Apéndice C.

3.4. Resultados numéricos para casos particulares

Considerando que la sangre es un fluido Newtoniano, comparamos los resultados obtenidos con nuestra formulación analítica con aquellos obtenidos numéricamente de un modelo lineal 1-D [64] y un modelo no lineal 3-D de la literatura reciente [25], para una serie de modelos idealizados de la arteria carótida común, la aorta torácica y la aorta completa con


sus ramificaciones principales.

Tanto en el modelo 1-D como en el modelo 3-D utilizados para la comparación, se considera que la pared arterial es una membrana delgada, conformada por un material elástico lineal, homogéneo, incompresible e isotrópico. En el modelo 1-D se supone que la deformación de la pared es axisimétrica, mientras que en la formulación 3-D no se hacen suposiciones sobre la dirección de la deformación de la pared. En la formulación 3-D se obtienen perfiles de velocidad similares a los de Womersley [26], en tanto que en la formulación 1-D se impone una forma para el perfil.

3.4.1. Arteria carótida común

Modelamos la arteria carótida común como un vaso aislado con características uniformes para la pared y la sangre. Acoplamos un modelo de Windkessel de tres elementos a la salida de la misma, tal y como se describe en la sección 3.3.1.

En la figura 3.12 se muestran la condición de frontera de flujo en la entrada, $Q_{\rm in}(t)$, medida in vivo y las predicciones para la presión, el flujo y los perfiles de velocidad en

de

diferentes posiciones, dadas por nuestro modelo (ecuaciones 3.46, 3.47, y 3.48) y aquellas obtenidas de las formulaciones 1-D y 3-D de la literatura. Todos los modelos comparten propiedades mecánicas y geométricas, así como las mismas condiciones de frontera en la entrada y la salida [13]. En la Tabla 3.1 se muestran los parámetros utilizados en este modelo.

De la presión en un sitio dado, calculamos el cambio en el radio Δr , tomando como referencia el valor del mismo en diástole. Dicho cambio está dado por la ley de Hooke para un tubo (ecuación 3.6). Los resultados de los tres modelos presentan un excelente acuerdo: el error relativo promedio para nuestro modelo es menor al 1.0 % para la presión, el flujo y el cambio en el radio; mientras que para la diferencia de presiones entre la entrada y la salida, es menor al 5.0 %. La descripción de cómo se calculan los errores relativos se encuentra en el apéndice D.

Propiedad	Valor
Longitud, L	126 mm
Radio a la presión diastólica, $R_{\rm d}$	$3 \mathrm{mm}$
Radio promedio, R_0	$3 \mathrm{mm}$
Espesor de la pared, h	$0.3 \mathrm{mm}$
Densidad de la sangre, ρ	$1,060 {\rm ~Kg} {\rm ~m}^{-3}$
Viscosidad de la sangre, η	4 mPa s
Reynolds,	365
Modulo de Young, E	700.0 kPa
Presión diastólica, $P_{\rm d}$	10.933 kPa
Presión de salida, $P_{\rm out}$	0
Resistencia de Windkessel, R_1	$2.4875 \cdot 10^8 \text{ Pa s m}^{-3}$
Distensibilidad de Windkessel, $C_{\rm Wk}$	$1.7529 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3 \text{ Pa}^{-1}$
Resistencia de Windkessel, R_2	$1.8697 \cdot 10^9 \text{ Pa s m}^{-3}$

Tabla 3.1: Parámetros del modelo de la arteria carótida común.

Los parámetros se tomaron de la referencia [13], Xiao *et al.* El radio R_0 , se obtuvo promediando en el tiempo y en el espacio las señales resultantes del modelo 1-D de Xiao *et al.* [13].

Los perfiles de velocidad obtenidos con nuestro modelo son similares tanto a los perfiles supuestos en la formulación 1-D como a los obtenidos con la formulación 3-D de la literatura. Sin embargo, hay mayor diferencia entre ellos que la diferencia que existe entre las señales de flujo, por lo que uno podría preguntarse por qué existen diferencias en los perfiles de velocidad, mientras que el acuerdo entre las señales de flujo como función del tiempo es casi perfecto. El origen de estas diferencias es que en nuestro modelo definimos el flujo como el producto de un área promedio por una velocidad, mientras que en los otros dos modelos, el flujo se define como el producto de un área dependiente del tiempo por una velocidad. El



Figura 3.12: Arteria carótida común. a) De izquierda a derecha, esquema en el que se muestran las dimensiones del vaso, cambio en el radio como función del tiempo, desde el valor de diástole (en el punto medio) y diferencia de presión entre la entrada y la salida como función del tiempo. b) Presión y c) flujo como función del tiempo en la entrada, punto medio y salida. d) Perfiles de velocidad para los tres modelos en tres posiciones a tres diferentes tiempos. Los parámetros del modelo se muestran en la Tabla 3.1. Los resultados analíticos de nuestro modelo (Darcy) se muestran con líneas negras continuas, los resultados para las soluciones numéricas 1-D y 3-D se muestran con líneas rojas continuas y con líneas azules punteadas, respectivamente. Los errores relativos se calculan como se describe en el apéndice D, en primer lugar se utilizan como referencia los resultados del modelo 3-D (segunda columna en cada figura).

acuerdo entre los perfiles obtenidos con nuestro modelo y los obtenidos con la formulación 3-D es claramente mejor que entre los obtenidos con nuestro modelo y la formulación 1-D.

3.4.2. Aorta torácica superior

Modelamos la aorta torácica, desde la raíz aórtica hasta la aorta descendente, como un vaso aislado con características uniformes para la pared. Acoplamos un modelo de Windkessel de tres elementos a la salida, el cual modela al resto de la circulación sistémica [13].

Propiedad	Valor
Longitud, L	24.137 cm
Radio a la presión diastólica, $R_{\rm d}$	1.2 cm
Radio promedio, R_0	$1.27 \mathrm{~cm}$
Espesor de la pared, h	1.2 mm
Densidad de la sangre, ρ	$1,060 { m ~Kg} { m m}^{-3}$
Viscosidad de la sangre, η	4 mPa s
Reynolds,	1364
Modulo de Young, E	400.0 kPa
Presión diastólica, $P_{\rm d}$	9.46 kPa
Presión de salida, $P_{\rm out}$	0
Resistencia de Windkessel, R_1	$1.1752 \cdot 10^7 \text{ Pa s m}^{-3}$
Distensibilidad de Windkessel, $C_{\rm Wk}$	$1.0163 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ Pa}^{-1}$
Resistencia de Windkessel, R_2	$1.1167 \cdot 10^8 \text{ Pa s m}^{-3}$

Tabla 3.2: Parámetros del modelo de la aorta torácica común.

Los parámetros se tomaron de la referencia [13], Xiao *et al.* El radio R_0 , se obtuvo promediando, en el tiempo y en el espacio, las señales resultantes del modelo 1-D de Xiao *et al.* [13].

En la Fig. 3.13 se muestran la condición de frontera de flujo en la entrada, $Q_{in}(t)$, medida in vivo y las predicciones para la presión, el flujo y perfiles de velocidad en varios puntos de la aorta, dadas por nuestro modelo (ecuaciones 3.46, 3.47, y 3.48) y aquellas obtenidas de las formulaciones 1-D y 3-D. Todos los modelos comparten propiedades mecánicas y geométricas, así como las mismas condiciones de frontera en la entrada y en la salida [13]. Los parámetros utilizados en este modelo se muestran en la Tabla 3.2.

Nuestro modelo es capaz de reproducir señales de presión y flujo similares a las obtenidas con las formulaciones 1-D y 3-D. Los errores relativos promedio más pequeños ocurren en las presiones y los mayores ocurren en la diferencia de presiones. Los errores relativos promedio para la presión, el flujo y el cambio en el radio son menores al 1.5%; para la diferencia de presiones entre la entrada y la salida del vaso, son menores al 5.0%. Los perfiles de velocidad calculados con nuestro modelo son más parecidos a los obtenidos con

la formulación 3-D que a los supuestos en la formulación 1-D.

3.4.3. Bifurcación de la aorta

Consideramos un modelo, con una única bifurcación para la aorta abdominal que se divide en las dos arterías ilíacas [13]. Dado que en este modelo las ilíacas son vasos terminales, acoplamos un modelo de Windkessel de tres elementos a la salida de las mismas, el cual modela al resto de la circulación sistémica.

Propiedad	Aorta	Ilíaca
Longitud, L	8.6 cm	8.5 cm
Radio a la presión diastólica, $R_{\rm d}$	$0.86 \mathrm{~cm}$	$0.60 \mathrm{~cm}$
Radio promedio, R_0	$0.89~\mathrm{cm}$	$0.615~\mathrm{cm}$
Espesor de la pared, h	$1.032 \mathrm{~mm}$	$0.72 \mathrm{mm}$
Densidad de la sangre, ρ	$1,060 { m ~Kg} { m m}^{-3}$	
Viscosidad de la sangre, η	4 mPa s	
Reynolds,	151	109
Módulo de Young, E	500.0 kPa	700.0 kPa
Presión diastólica, $P_{\rm d}$	9.1 kPa	9.1 kPa
Presión de salida, $P_{\rm out}$	_	0
Resistencia de Windkessel, R_1	_	$6.8123 \cdot 10^7 \text{ Pa s m}^{-3}$
Distensibilidad de Windkessel, $C_{\rm Wk}$	_	$3.6664 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3 \text{ Pa}^{-1}$
Resistencia de Windkessel, R_2	_	$3.1013 \cdot 10^9$ Pa s m ⁻³

Tabla 3.3: Parámetros del modelo de la bifurcación de la aorta.

Los parámetros se tomaron de la referencia [13], Xiao *et al.* El radio R_0 , se obtuvo promediando, en el tiempo y en el espacio, las señales resultantes del modelo 1-D de Xiao *et al.* [13].

En la Fig. 3.14 se muestran la condición de frontera de flujo en la entrada, $Q_{in}(t)$, medida *in vivo* y los resultados, para la presión, el flujo, el cambio en el radio y perfiles de velocidad en varios sitios de la bifurcación, dados por nuestro modelo (ecuaciones 3.53, 3.54, 3.55, 3.57, 3.58 y 3.59) y aquellos obtenidos de las formulaciones 1-D y 3-D. Todos los modelos comparten propiedades mecánicas y geométricas, así como las mismas condiciones de frontera en la entrada y en la salida [13]. Los parámetros de este modelo se muestran en la Tabla 3.3.

Los resultados entre los tres modelos presentan un excelente acuerdo. Los errores relativos promedio son menores al 2.0%, para las presiones y los flujos; y menores al 8.6%para el cambio en el radio. Nuevamente, los perfiles de velocidad calculados con nuestro modelo son más parecidos a los obtenidos con la formulación 3-D que a los supuestos en la formulación 1-D.



Figura 3.13: Aorta torácica. a) De izquierda a derecha, esquema en el que se muestran las dimensiones del vaso, cambio en el radio como función del tiempo, desde el valor de diástole (en el punto medio) y diferencia de presión entre la entrada y la salida como función del tiempo. b) Presión y c) flujo como función del tiempo en la entrada, punto medio y salida. d)Perfiles de velocidad para los tres modelos en tres posiciones a tres diferentes tiempos. En los tiempos t = 0.33 y t = 0.70, los perfiles se multiplicaron por factores de 3 y 4, respectivamente, esto con el fin de visualizarlos de manera sencilla. Los parámetros del modelo se muestran en la Tabla 3.2. Los resultados analíticos de nuestro modelo (Darcy) se muestran con líneas negras continuas, los resultados para las soluciones numéricas 1-D y 3-D se muestran con líneas rojas continuas y con líneas azules punteadas, respectivamente. Los errores relativos se calculan como se describe en el apéndice D, en primer lugar se utilizan como referencia los resultados del modelo 1-D (primera columna en cada figura) y en segundo lugar se utilizan como referencia los resultados del modelo 3-D (segunda columna en cada figura).



Figura 3.14: Bifurcación de la aorta. a) En la 1^a , 2^a y 3^a columnas se muestran, el flujo, el cambio en el radio (desde el valor de diástole) y la presión como función del tiempo, para diferentes posiciones, de arriba hacia abajo desde la entrada del sistema a la salida del mismo. b) Perfiles de velocidad para los tres modelos en tres posiciones a tres diferentes tiempos. En los tiempos t = 0.45s y t = 0.54s, los perfiles se multiplicaron por factores de 6 y 8, respectivamente, esto con el fin de visualizarlos de manera sencilla. Los parámetros del modelo se muestran en la Tabla 3.3. Los resultados analíticos de nuestro modelo (Darcy) se muestran con líneas negras continuas, los resultados para las soluciones numéricas 1-D y 3-D se muestran con líneas rojas continuas y azules punteadas, respectivamente. Los errores relativos se calculan como se describe en el apéndice D, en primer lugar se utilizan como referencia los resultados del modelo 1-D (primera columna en cada figura) y en segundo lugar se utilizan como referencia los resultado del modelo 3-D (segunda columna en cada figura).

3.4.4. Aorta y sus principales ramificaciones

El último modelo idealizado que utilizamos para probar nuestra formulación analítica, es una red tipo árbol, la cual representa a la aorta y sus principales ramificaciones, dicha red contiene 20 segmentos arteriales [13]. La topología de la red se muestra en la Fig. 3.11. En los vasos terminales se acoplan modelos de Windkessel de tres elementos, los cuales modelan la red subyacente de vasos.

Tabla 3.4: Parámetros generales para el modelo de la aorta completa.

Propiedad	Valor
Densidad de la sangre, ρ Viscosidad de la sangre, η Presión diastólica, $P_{\rm d}$ Presión de salida, $P_{\rm out}$	$\begin{array}{c} 1,060 \ {\rm Kg \ m^{-3}} \\ 4.0 \ {\rm mPa \ s} \\ 9.5 \ {\rm kPa} \\ 0 \end{array}$

Los parámetros se tomaron de la referencia [13], Xiao et al.

Segmento	Longitud	$R_{\rm d}$	R_0	Е	R_1	R_2	С	Reynolds
arterial	(cm)	(mm)	(mm)	(kPa)	$\left(10^7 \ \frac{Pa\ s}{m^3}\right)$	$(10^8 \ \frac{Pa \ s}{m^3})$	$(10^{-10} \ \frac{m^3}{Pa})$	
1. Ao I	7.0357	14.55	14.59	372.2	-	-	-	1191
2. Ao II	0.8	13.8	13.8	384.2	-	-	-	1124
3. Ao III	0.9	13.60	13.65	387.6	-	-	-	1113
4. Ao IV	6.4737	12.9	12.9	400.0	-	-	-	1062
5. Ao V	15.2	11.1	11.1	437.8	-	-	-	1235
6. Ao VI	1.8	9.8	9.8	471.8	-	-	-	1164
7. Ao VII	0.7	9.66	9.66	475.9	-	-	-	895
8. Ao VIII	0.7	9.585	9.6	478.1	-	-	-	665
9. Ao IX	4.3	9.31	9.31	486.5	-	-	-	441
10. Ao X	4.3	8.88	8.88	502.0	-	-	-	422
11. Braquiocefálica	3.4	6.35	6.35	612.0	5.1918	10.6080	8.6974	285
12. Carótida Com. I.	3.4	3.6	3.6	860.4	19.1515	52.2129	1.7670	103
13. Subclavia I.	3.4	4.8	4.8	724.0	9.8820	13.0183	7.0871	299
14. Celiaca	3.2	4.45	4.45	757.6	11.7617	7.5726	12.1836	516
15. Mesentérica Sup.	6	3.75	3.75	839.6	17.4352	5.5097	16.7453	736
16. Renal D.	3.2	2.8	2.8	1000.4	34.1378	5.3949	17.1017	810
17. Renal I.	3.2	2.8	2.8	1000.4	34.1378	5.3949	17.1017	810
18. Mesentérica Inf.	5	2.0	2.0	1224.2	74.0167	46.2252	1.9959	186
19. Ilíaca Com. D.	8.5	6.0	6.0	633.3	5.9149	10.1737	9.0686	311
20. Ilíaca Com. I.	8.5	6.0	6.0	633.3	5.9149	10.1737	9.0686	311

Tabla 3.5: Parámetros para los segmentos arteriales del modelo de la aorta completa.

Los parámetros se tomaron de la referencia [13], Xiao *et al.* En dicha referencia se reportan para cada arteria, valores del radio en diástole a la entrada (R_d^{in}) y del radio en diástole a la salida (R_d^{out}) . En nuestros cálculos consideramos que cada arteria tiene un radio promedio en diástole, dado por, $R_d = (R_d^{\text{in}} + R_d^{\text{out}})/2$. De acuerdo con Nichols y O'Rourke [6], el espesor de la pared, h, se eligió como el 10% de R_d . De acuerdo con Xiao *et al.*, [13] el módulo elástico se calculó mediante la ecuación $E = (3\rho c^2 R_d)/(2h)$, en donde la velocidad de propagación de la onda c (en m/s) está dada por la relación empírica [65] $c = 13.3/(2R_d)^{0.3}$ con R_d medido en mm.



Figura 3.15: Representación esquemática de la aorta completa. Flujo (columna de la izquierda) y presión (columna de la derecha) como función del tiempo en diferentes sitios de la red. Los resultados analíticos de nuestro modelo (Darcy) se muestran con líneas negras continuas, los resultados para las soluciones numéricas 1-D y 3-D se muestran con líneas rojas continuas y con líneas azules punteadas, respectivamente. Los errores relativos se calculan como se describe en el apéndice D, en primer lugar se utilizan como referencia los resultados del modelo 1-D (primera columna en cada figura) y en segundo lugar se utilizan como referencia los resultados del modelo 3-D (segunda columna en cada figura). Los parámetros del modelo se muestran en las Tablas 3.4 y 3.5.

En el apéndice C se muestra el procedimiento para obtener la matriz, \mathbf{K} , que es la función respuesta de la red. Para ello se sigue la metodología descrita en la sección 3.2.4. La inversión simbólica de la matriz se realizó con *Wolfram Mathematica* 7. El apéndice C contiene una expresión analítica para la presión en el primer nodo de la red. Los parámetros generales para este modelo se muestran en la Tabla 3.4; los parámetros para cada segmento arterial se muestran en la Tabla 3.5.

En la Fig. 3.15 se muestran la condición de frontera de flujo en la entrada, $Q_{in}(t)$, medida *in vivo* y comparaciones entre las señales de presión y flujo en diferentes sitios de la red, obtenidas con nuestro modelo y de las soluciones numéricas 1-D y 3-D. Los resultados muestran una excelente concordancia entre los tres modelos: los errores relativos promedio son menores al 2.1 % para las presiones y menores al 2.3 % para los flujos.

3.5. Separación de los términos de la ecuación del modelo para un vaso aislado

Los modelos unidimensionales reportados en la literatura para estudiar el flujo sanguíneo en redes arteriales, se resuelven de forma numérica. En dicho tratamiento es difícil desacoplar el efecto de las diferentes propiedades del sistema cardiovascular, como la elasticidad de los vasos, en la forma de las ondas de flujo y presión sanguíneas. Una de las ventajas de contar con una solución analítica, es que se puede hacer una inspección visual de en qué términos de una ecuación se encuentran los diferentes parámetros físicos. En otras palabras, en una solución analítica se puede examinar explícitamente el rol que juegan cada una de las variables del sistema en la descripción cualitativa de algún fenómeno.

La presión como función de la posición en la dirección axial para un vaso aislado, ecuación 3.46, se puede escribir como,

$$\hat{p}(x) = \left[\frac{\sin(k_c l)\cos(k_c x)}{\cos(k_c l) - \hat{Z}M\sin(k_c l)} - \sin(k_c x)\right]\frac{\hat{Q}_{in}}{M} + \left[\frac{\cos(k_c l)\cos(k_c x)}{\cos(k_c l) - \hat{Z}M\sin(k_c l)}\right]\hat{Q}_{in}\hat{Z}.$$
 (3.61)

Exploramos la estructura de esta solución analítica y presentamos los resultados de separar los términos de la ecuación anterior para los datos de la aorta torácica. Denotamos cada término de la siguiente forma:

$$\hat{T}_1(x) = \left[\frac{\sin(k_c l)\cos(k_c x)}{\cos(k_c l) - \hat{Z}M\sin(k_c l)}\right]\frac{\hat{Q}_{in}}{M}$$
(3.62)

$$\hat{T}_2(x) = -\sin(k_c x) \frac{\hat{Q}_{in}}{M} \qquad y \tag{3.63}$$

$$\hat{T}_{3}(x) = \left[\frac{\cos(k_{c}l)\cos(k_{c}x)}{\cos(k_{c}l) - \hat{Z}M\sin(k_{c}l)}\right]\hat{Q}_{in}\hat{Z},$$
(3.64)

torácica.

de modo que en el dominio de Fourier, la presión para un vaso aislado está dada por $\hat{p}(x) = \hat{T}_1(x) + \hat{T}_2(x) + \hat{T}_3(x)$. En la figura 3.16 se muestra la señal de presión como función de la posición en la dirección axial y del tiempo, obtenida a partir de la ecuación 3.61 para la aorta torácica. En la figura 3.17 se muestra el mapa de colores correspondiente a los datos de la figura 3.16. Las líneas negras son curvas de nivel cuya distancia entre ellas es de 1 kPa. En dicha figura se puede observar que en la región de diástole, las curvas de nivel son líneas prácticamente verticales, lo cual indica que a un tiempo dado, el valor de la presión es prácticamente independiente de la posición axial.



Figura 3.17: Mapa de colores para la presión como función del tiempo y de la posición en la dirección axial. Las líneas corresponden a curvas de nivel cuya distancia entre ellas es de 1kPa. Se muestran con puntos blancos algunas posiciones de la presión diastólica y de la muesca dicrótica. Con triángulos verdes se muestran algunas posiciones del primer mínimo de la suma $T_1(x,t) + T_2(x,t)$ y con cuadrados algunas posiciones del segundo mínimo del término $T_2(x,t)$.

Figura 3.16: Presión como función

de la posición en la dirección axial

y el tiempo, p(x,t), en la aorta



Figura 3.18: En el lado izquierdo se muestran los términos a) T_1 , b) T_2 y c) T_3 como función del tiempo en el punto medio de la aorta. En el lado derecho se muestran los correspondientes mapas de colores como función del tiempo y de la posición en la dirección axial. Las líneas negras corresponden a curvas de nivel cuya distancia entre ellas es de a) 1 kPa, b) 0.5 kPa y c) 1 kPa, respectivamente. En el mapa de colores del término T_2 , se muestra con cuadrados blancos algunas posiciones de su segundo mínimo. En la gráfica del término T_3 , se muestra con una línea roja punteada la presión en la región de diástole en el punto medio de la aorta, es decir, se muestra el valor de la señal completa $T_1 + T_2 + T_3$.

En el lado izquierdo de la Fig. 3.18 se muestran los términos T_1 , T_2 y T_3 como función del tiempo, evaluados en el punto medio de la aorta torácica. Se encontró que el segundo mínimo del término T_2 determina a grosso modo la posición de la muesca dicrótica. Con la finalidad de observar claramente este comportamiento, en la Fig. 3.19 se muestran algunas posiciones de la muesca dicrótica y del segundo mínimo del término T_2 , se puede observar que ambas posiciones son cercanas. Este resultado también se puede observar en el mapa de colores de la presión en la Fig. 3.17, en la que con cuadrados verdes se muestran posiciones del segundo mínimo del término T_2 y con puntos blancos posiciones de la muesca dicrótica.



Figura 3.19: Los puntos rojos corresponden a la posición de la muesca dicrótica. Los cuadrados azules corresponden a la posición del segundo mínimo del término T_2 .

Por otro lado, se encontró que el término T_3 determina la caída de presión en diástole. En la gráfica de la Fig. 3.18c izquierda, se muestra con una línea roja la presión en la región de diástole como función del tiempo calculada en el punto medio de la aorta torácica. Se puede observar que el término T_3 se traslapa con la presión en esta región. En el mapa de colores de dicho término, Fig. 3.18c derecha, se observa que al igual que en el de la presión (Fig. 3.17), las curvas de nivel son líneas verticales, lo cual significa que en diástole el valor del término T_3 es prácticamente independiente de la posición en la dirección axial.

Por último, encontramos que la posición del pie de la onda, que corresponde a la posición de la presión diastólica, está dada por el primer mínimo de la suma de los términos $T_1 + T_2$. En la figura 3.20 izquierda, se muestra dicha suma como función del tiempo, calculada en el punto medio de la aorta torácica y en la derecha el correspondiente mapa de colores como función de la posición en la dirección axial y del tiempo. Como referencia se muestran con triángulos blancos posiciones del primer mínimo de la suma. En el mapa de colores de la presión, vea la figura 3.17, se comparan la posición del primer mínimo de la suma $T_1 + T_2$ (triángulos verdes) con la posición de la presión diastólica (puntos blancos). Se puede observar que ambas posiciones coinciden.



Figura 3.20: Suma de los términos $T_1 + T_2$. En el lado izquierdo se muestra las suma como función del tiempo en el punto medio de la aorta torácica. En el lado derecho se muestra el mapa de colores de la suma como función de la posición en la dirección axial y del tiempo. Las líneas negras corresponden a curvas de nivel cuya distancia es de 1 kPa.

Estos resultados indican que el avance de la muesca dicrótica depende de las propiedades del vaso y del flujo sanguíneo proveniente del corazón, pero no de la condición de frontera a la salida del vaso, ya que el término T_2 no contiene a las propiedades de la condición de frontera, mientras que la caída de presión en diástole depende fuertemente de la condición de frontera a la salida del vaso, ya que las propiedades de dicha condición están contenidas en el término T_3 , el cual determina la caída de presión en diástole.

El análisis de los términos T_1 , T_2 y T_3 , permitió identificar cuáles de éstos determinan algunas de las características de la onda de presión, como la caída de presión en diástole y el avance tanto de la muesca dicrótica como el de la presión en diástole.

Nuestro modelo se podría aplicar a diferentes redes. El análisis de la solución analítica para cada caso, podría ayudar a identificar cuáles de las propiedades del sistema en estudio determinan las características de la onda de presión sanguínea en condiciones normales y patológicas.

3.6. Reducción de nuestro modelo 1D a un modelo 0D

Nuestro modelo 1-D para un vaso aislado se puede reducir a un modelo 0-D tipo Windkessel. Los modelos 0-D relacionan la forma de las señales de presión y flujo con propiedades globales del sistema cardiovascular. Dichos modelos proveen relaciones entre las propiedades globales del sistema cardiovascular y la presión sanguínea en condiciones como hipertensión, que son útiles desde el punto de vista clínico. Para reducir nuestro modelo 1-D a un modelo 0-D, promediamos en la dirección axial la expresión para la presión en el dominio de Fourier de un vaso aislado, ecuación 3.46, esto es,

$$\langle \hat{p}(\omega) \rangle = \frac{\hat{Q}_{\rm in}}{lM} \frac{\sin(k_c l)}{\cos(k_c l)} \int_{x=0}^{x=l} \cos(k_c x) \, dx - \frac{\hat{Q}_{\rm in}}{lM} \int_{x=0}^{x=l} \sin(k_c x) \, dx + \tag{3.65}$$

$$\frac{\hat{Q}_{\rm in}\hat{Z}}{l\cos(k_cl)\left[\cos(k_cl) - \hat{Z}M\sin(k_cl)\right]} \int_{x=0}^{x=l} \cos(k_cx) \, dx = \frac{\hat{Q}_{\rm in}}{lMk_c} \left[\frac{1 - \cos(k_cl) + \hat{Z}M\sin(k_cl)}{\cos(k_cl) - \hat{Z}M\sin(k_cl)}\right].$$

Desarrollamos una aproximación a primer orden en ω para la ecuación 3.65, con lo cual se obtiene un modelo tipo Windkessel en el dominio de la frecuencia,

$$[1 - i\omega\chi_{_{RC}}]\,\hat{p}_{_{fb}} = R_s\hat{Q}_{in},\tag{3.66}$$

en donde, denotamos a la presión obtenida de la aproximación a frecuencias bajas como $\hat{p}_{\scriptscriptstyle fb},$

$$R_s = \left[R_1 + R_2 + \frac{\eta l}{2A_0 K(\omega = 0)} \right],$$
(3.67)

es una resistencia en términos de las propiedades del vaso, del fluido y de la condición de frontera de Windkessel; y

$$\chi_{RC} = \frac{\frac{5}{24} \left[\frac{\eta l}{A_0 K(\omega=0)} \right]^2 Cl + \frac{5\eta l}{6A_0 K(\omega=0)} Cl(R_1 + R_2) + (R_1 + R_2)^2 Cl + R_2^2 C_{\rm Wk}}{\frac{\eta l}{2A_0 K(\omega=0)} + R_1 + R_2}, \qquad (3.68)$$

es una variable que tiene dimensiones de resistencia por distensibilidad, RC, en términos de las propiedades del vaso, del fluido y de la condición de frontera de Windkessel.

Con la transformada inversa de Fourier de la ecuación 3.66, se obtiene una ecuación que relaciona el flujo y la presión en el dominio del tiempo,

$$p_{fb}(t) + \chi_{RC} \frac{dp_{fb}(t)}{dt} = R_s Q_{in}(t).$$
(3.69)

La solución de la ecuación anterior sujeta a la condición de frontera $p_{fb}(t=0) = p_d$, en donde p_d es la presión diastólica, está dada por:

$$p_{fb}(t) = p_d e^{\frac{-t}{\chi_{RC}}} + \frac{R_s}{\chi_{RC}} e^{\frac{-t}{\chi_{RC}}} \int_0^t Q_{in}(t) e^{\frac{t}{\chi_{RC}}} dt.$$
(3.70)

Wang et. al. [9] sugirieron que la presión en la aorta, p_{Ao} , se puede representar como la



Figura 3.21: Presión obtenida de la aproximación a frecuencias bajas y comparación con la presión de entrada en la aorta torácica.

suma de un reservorio de presión dependiente del tiempo e independiente de la posición, es decir, una presión dada por un modelo tipo Windkessel, más una presión de exceso, $p_{ex}(x,t)$, la cual depende de la posición en la dirección de flujo, esto es,

$$p_{\rm Ao}(x,t) = p_{\rm wk}(t) + p_{\rm ex}(x,t),$$
 (3.71)

de donde, se tiene que la presión en exceso está dada por:

$$p_{\rm ex}(x,t) = p_{\rm Ao}(x,t) - p_{\rm wk}(t).$$
 (3.72)



Figura 3.22: Presión de exceso, calculada de acuerdo con la formulación presentada en [9]. Comparación con la señal de flujo en la entrada de la aorta torácica. Las escalas se ajustaron para poder comparar ambas señales.

Wang *et. al.* [9] demostraron con señales de flujo y presión medidas en vivo, que la presión de exceso es proporcional a la señal de flujo medida en la entrada de la aorta. Dicho trabajo se realizó con la finalidad de encontrar una explicación alternativa de porqué la forma de

las señales de flujo y presión en la aorta son diferentes.

Siguiendo el trabajo realizado por Wang *et. al.* [9] calculamos la presión de exceso para los datos de la aorta torácica. Para ello utilizamos la presión a frecuencias bajas, p_{fb} , como la presión de un modelo tipo Windkessel, esto es, $p_{Wk} = p_{fb}$. En la figura 3.22, se muestran la señal de flujo en la entrada de la aorta torácica y la presión de exceso obtenida a partir de la ecuación 3.72. Se ajustaron las escalas para poder comparar ambas señales. Se puede observar que la forma de la señal de la presión de exceso es semejante a la forma de la señal de flujo. Este resultado es similar al que obtuvieron Wang *et. al.* [9].

Nuestros resultados indican que la presión dada por un un modelo tipo Windkessel se puede interpretar como una aproximación de la presión total a frecuencias bajas. La reducción de nuestro modelo 1-D a un modelo 0-D nos permitió comparar algunos de nuestros resultados con los obtenidos en trabajos previos [9].

3.7. Discusión

Derivamos un nuevo modelo para estudiar el flujo sanguíneo en redes de vasos. A este modelo lo nombramos modelo elástico de Darcy generalizado (MEDG), el cual se puede resolver de forma analítica en el dominio de la frecuencia. El nombre proviene del campo de estudio de medios porosos, en el cual existe una relación entre el flujo y un gradiente de presión constante, llamada ley de Darcy. En el campo de estudio de flujos pulsados se ha derivado una relación, en el dominio de la frecuencia, entre el flujo y el gradiente de presión, llamada ley de Darcy generalizada o modelo generalizado de Darcy. Cuando se incluye elasticidad, como en este trabajo, el gradiente de presión dependiente de la frecuencia varía a lo largo de la posición axial. Se supone que la ley de Darcy generalizada se cumple localmente y en consecuencia, nombramos a nuestra formulación MEDG.

Determinamos la exactitud de nuestra formulación en distintos modelos idealizados que van desde vasos aislados hasta una red de vasos que representa a la aorta y sus ramificaciones principales, en condiciones fisiológicas normales. En todos los casos, los errores relativos promedio entre los resultados de nuestro modelo y las formulaciones 1-D y 3-D son menores al 2.3 % para el flujo y menores al 2.1 % para la presión. Los resultados demuestran la habilidad del MEDG de reproducir las principales características de la ondas de presión y flujo en redes de vasos sanguíneos en condiciones fisiológicas normales.

Nuestro análisis de los términos de la presión en la aorta torácica, nos permitió saber cuáles de ellos determinan algunas de las características de la onda de presión como la muesca dicrótica, la presión diastólica y la caída de presión en diástole. Además redujimos nuestro modelo 1-D a un modelo 0-D tipo Windkessel, lo cual nos permitió demostrar que la presión en un modelo tipo Windkessel es una aproximación a frecuencias bajas de la presión.

3.7.1. Características del modelo

Combinamos un modelo generalizado de Darcy 0-D, válido para tubos rígidos, el cual toma en cuenta la ecuación lineal de balance de momento para fluidos Newtonianos o viscoelásticos de Maxwell, con un modelo 1-D derivado de la ecuación de continuidad 2-D, la cual toma en cuenta las velocidades axial y radial del fluido, y una relación, tipo ley de Hooke, entre la presión y los desplazamientos en la dirección radial. Para ello, suponemos que la contribución más importante a la variación de la velocidad, en la dirección axial, proviene de la presión. Derivamos nuestro modelo considerando que la ley de Darcy generalizada se cumple localmente para cualquier gradiente de presión. La ecuación de continuidad acoplada a la ley de Hooke, combinada con la ley de Darcy generalizada, permite escribir una ecuación diferencial tipo oscilador armónico para la presión en el dominio de la frecuencia. Una vez que la ecuación diferencial se resuelve con condiciones de frontera conocidas en los extremos del vaso, se puede obtener una expresión para calcular el gradiente de presión en cualquier punto a lo largo de la dirección axial. En consecuencia, con dicho gradiente, la ley de Darcy generalizada nos permite calcular los perfiles de velocidad y flujo para vasos elásticos.

3.7.2. Limitaciones del modelo

Nuestro modelo tiene dos limitaciones importantes: uno es que considera únicamente términos lineales, ya que despreciamos los términos convectivos de la ecuación de balance de momento, lo anterior es con el fin de poder trabajar en el dominio de la frecuencia. La linealización de las ecuaciones es una aproximación válida para las redes estudiadas, ya que los números de Reynolds en los vasos que las conforman son tales que el flujo es laminar. La segunda limitación es que debido a que utilizamos una aproximación 1-D, el flujo es axisimétrico. El rango de aplicabilidad de nuestra metodología se validó para la aorta y sus principales ramificaciones. En este sentido, la concordancia con los resultados de la formulación 3-D con geometría realista (curvatura, torsión y estrechamiento del radio) indica que, al menos bajo condiciones fisiológicas normales -en ausencia de estenosis o aneurismasnuestra aproximación 1-D y la linealización de las ecuaciones, son razonables. Suponemos que alrededor de válvulas, obstrucciones y estenosis grandes, la formulación 1-D lineal será menos precisa. Sin embargo, esta suposición necesita ser corroborada. La solución analítica que hemos obtenido es válida para tubos sin estrechamiento en el radio, lo cual no constituye una seria limitación, ya que el estrechamiento se pude simular de manera discreta dividiendo un segmento en sub-segmentos, cada uno de ellos con un radio y propiedades elásticas distintas.

3.7.3. Ventajas analíticas del modelo

Una vez que se conocen las presiones en cada uno de los nodos de la red, las ecuaciones de nuestra formulación se pueden utilizar para obtener, de forma analítica, señales de flujo y presión, así como perfiles de velocidad en cualquier punto de la red. Una solución analítica permite hacer una inspección visual de en dónde se encuentran los diferentes parámetros físicos en los diferentes términos de una ecuación. Por ejemplo, en las ecuaciones 3.46, 3.47 y 3.48 para un vaso aislado, uno puede observar cómo el parámetro elástico C entra en dichas ecuaciones, examinando cómo este interviene en las variables k_c y M. Para una red, tener una solución analítica permite identificar la contribución de cada vaso a los elementos de la matriz \mathbf{K} . Vea, por ejemplo, la matriz para el modelo de la aorta completa en el apéndice C. Si uno quiere analizar en qué lugar las propiedades de la arteria celiaca (segmento arterial 14), por poner un ejemplo, entran en la matriz respuesta, uno puede identificar los dos términos en la diagonal y los dos términos fuera de la diagonal que contienen las propiedades de este vaso en particular.

Contar con una solución analítica permite hacer cálculos en menor tiempo. Para una red dada, la inversión analítica de la matriz K se tiene que hace una sola vez. Posteriormente, si se quieren probar diferentes valores de las propiedades de la sangre y de los vasos sanguíneos, la solución se puede evaluar de forma numérica sin tener que resolver el sistema de ecuaciones cada vez, tal y como se hace en las aproximaciones numéricas. La inversión simbólica para obtener la matriz \mathbf{K}^{-1} se puede llevar a cabo de forma sencilla para redes pequeñas. Por ejemplo, para el modelo de la aorta completa, la inversión simbólica de la matriz de tamaño 20x20 en Mathematica 7, tarda 0.93 segundos de tiempo de máquina, utilizando el método de descomposición LU (del inglés Lower-Upper) en una computadora personal con un procesador Intel CORE i5-3427U a 1.8GHz, con una memoria RAM de 4GB a 1600MHz, con un sistema operativo Ubuntu 14.04 LTS. Además de ello, nuestra aproximación analítica permite obtener resultados en poco tiempo cuando se quieren probar diferentes flujos incidentes, una vez más sin tener que volver a calcular \mathbf{K}^{-1} para cada flujo incidente. Esta ventaja es relevante en estudios en los que se requieren cientos de miles de simulaciones, por ejemplo, para crear poblaciones virtuales [67] y en análisis de incertidumbre y sensibilidad de las señales de flujo y presión [68,69].

3.7.4. Resultados para los vasos aislados estudiados

Comenzamos por probar nuestra formulación en dos modelos de referencia que representan a la arteria carótida común (Fig. 3.12) y a la aorta torácica superior (Fig. 3.13) en condiciones fisiológicas normales. Estos modelos idealizados no toman en cuenta la curvatura, la torsión, el estrechamiento del radio, ni las bifurcaciones, todas ellas propiedades que se pueden encontrar en aortas y carótidas. Bajo estas suposiciones nuestro modelo es capaz tanto de capturar las principales características de las ondas de flujo y presión, contenidas en las soluciones de modelos numéricos 1-D y 3-D, como de reproducir perfiles de velocidad similares a los obtenidos en la formulación 3-D [13]. Los errores relativos son consistentemente mas pequeños para el modelo de la carótida que para el modelo de la aorta. Esto se debe a que las fuerzas inerciales son más importantes en el modelo de la aorta; en donde el número de Reynolds es aproximadamente un orden de magnitud más grande que en la carótida y los términos no lineales tienen mayor relevancia [13].

3.7.5. Resultados para las redes estudiadas

Los dos modelos de referencia que utilizamos para evaluar nuestra formulación contienen bifurcaciones arteriales, una característica anatómica importante en el estudio del flujo sanguíneo en redes de vasos. Estos modelos son el de una bifurcación simple y el de la aorta completa con múltiples bifurcaciones. El MEDG de la aorta completa contiene, de forma aproximada, el estrechamiento del radio, esto es, la aorta se modela en varios segmentos, cada uno de ellos con diferente radio. En los dos modelos de referencia para redes, el MEDG es capaz de reproducir las principales características de las señales de flujo y presión con un error promedio menor al 2.1% para la presión y menor al 2.3% para el flujo (Figs. 3.14y 3.15). Tanto en la formulación 1-D como en la 3-D se considera estrechamiento del radio. Adicionalmente, en la aproximación 3-D se simula la curvatura y torsión del arco aórtico. Las diferencias entre los resultados de nuestra formulación analítica y los obtenidos de la formulación 1-D surgen de las distintas consideraciones de los modelos. Por ejemplo, en la formulación 1-D se impone una forma para el perfil de velocidad mientras que el MEDG predice perfiles de velocidad similares a los de Womersley [26]. Las diferencias entre los resultados del MEDG y los resultados numéricos de la formulación 3-D surgen de las consideraciones y simplificaciones del MEDG. Sin embargo, es relevante hacer notar que las diferencias entre nuestra solución analítica y las soluciones numéricas utilizadas, podrían ser irrelevantes en aplicaciones clínicas, ya que las diferencias observadas en los modelos serían insignificantes con respecto a las incertidumbres provocadas por diferentes fuentes físicas y fisiológicas. Vea por ejemplo el trabajo de Chen et. al. [66] en el cual se estudió el efecto de la variación de algunos de los parámetros de un modelo 1-D, como el módulo elástico, en la forma de las ondas de presión con la finalidad de cuantificar la incertidumbre de las mismas.

Se requieren pruebas adicionales para evaluar la exactitud del MEDG para reproducir perfiles de velocidad y ondas de flujo y presión en geometrías arteriales anatómicamente realistas e incluir la comparación con mediciones hemodinámicas *in vivo*. Además, se debería validar nuestra formulación con un modelo 3-D en el que la deformación de la pared sea más realista que el de una pared compuesta por un material elástico lineal, empleado en Xiao *et. al.* [13]. Asimismo, los resultados del MEDG se podrían comparar con los de una formulación 1-D no lineal que no impusiese una forma para el perfil de velocidad (vea por ejemplo Bessems *et. al.* [14]).

3.8. Conclusiones y perspectivas

Demostramos que las señales de flujo y presión en arterias grandes se pueden reproducir con un modelo elástico de la ley de Darcy generalizada, para el cual se tiene una solución analítica en el dominio de frecuencia. Se probó la exactitud de nuestra formulación en diferentes casos de referencia en los que el grado de complejidad aumenta. Para tales modelos se cuenta con resultados numéricos 1-D y 3-D para perfiles de velocidad, y señales de flujo y presión. Los resultados muestran la capacidad de nuestro modelo para reproducir las principales características de las ondas de flujo y presión, tanto en un solo vaso arterial, como en redes de vasos con curvatura, torsión y estrechamiento del radio. Este estudio proporciona apoyo adicional al uso de modelos 1-D para simular de forma aproximada las señales de flujo y presión con un bajo costo computacional.

Nuestros resultados sugieren que el MEDG tiene una precisión razonable para explorar el rol que juegan diferentes parámetros físicos del sistema cardiovascular en la forma de las señales de flujo y presión. Para el caso más sencillo de un vaso aislado, encontramos que la posición de la muesca dicrótica no depende de la condición de frontera de Windkessel, mientras que la caída de presión en diástole es determinada por dicha condición. Nuestro modelo se puede utilizar en diferentes redes. Un análisis detallado de la solución analítica para cada caso, podría permitir identificar las propiedades del sistema que determinan las características de las ondas de presión que cambian con enfermedades, tales como la hipertensión, y con ello poder orientar las terapias adecuadas para su tratamiento. Demostramos que la presión obtenida de un modelo tipo Windkessel es una aproximación a frecuencias bajas de la señal de presión medida en la aorta.

El carácter analítico de nuestro modelo tiene la ventaja de bajar el costo computacional, lo cual es importante para estudios en los que se requieren cientos de miles de simulaciones [67–69]. DINÁMICA INTERFACIAL EN MICROCANALES

4

4.1. Antecedentes

Los fenómenos interfaciales son muy comunes en la naturaleza y juegan un papel muy relevante en muchos sistemas biológicos y procesos industriales. Ejemplos de este tipo de fenómenos se pueden observar en algunas plantas, ya que algunas de ellas tienen superficies con características superhidrofóbicas, como las hojas de loto, en la que su nano y micro estructura minimizan la adhesión del agua; otras tienen superficies superhidrofílicas como los musgos, los cuales carecen de raíces, de modo que han desarrollado superhidrofilicidad como un mecanismo para obtener agua y nutrientes del ambiente [70]. Otro sistema en donde los fenómenos interfaciales son importantes es en las bombas pasivas utilizadas para mover fluidos en sistemas microfluídicos. Éstas utilizan la presión capilar, la cual está relacionada con la tensión superficial y la curvatura de una interfase, para generar gradientes de presión dentro de microcanales [4,5]. Este tipo de bombas permiten mayor portabilidad, ya que evitan el uso de equipo externo para mover fluidos.

En los últimos años, el uso de sistemas de microfluídica se ha incrementado considerablemente. Una de las primeras aplicaciones tecnológicas de este tipo de sistemas fue en el análisis químico, para el que los sistemas microfluídicos presentan ventajas importantes como ahorro de muestras y reactivos, fabricación de bajo costo, tiempos de análisis cortos y buena portabilidad [71]. Un uso más reciente de estos sistemas es la fabricación de órganos en circuitos integrados (organs on chips, en inglés), en los cuales se cultivan células en diferentes cámaras micrométricas, con la finalidad de simular las funciones fisiológicas de órganos y tejidos. En algunos de ellos se busca tener flujos y forzamientos pulsados [3]. Por otro lado, se ha demostrado que la imposición de presiones pulsadas es una estrategia sencilla para controlar el flujo en los microcanales [72]. A pesar de todas sus aplicaciones tecnológicas, la comprensión de los principios físicos que regulan estos sistemas es sólo parcial.

En el área de microfluídica existen diversos estudios experimentales de flujos bifásicos líquido-gas y líquido-líquido. El uso de este tipo de flujos en microsistemas tiene diversas

aplicaciones en sensores biomédicos, reactores químicos y sistemas de fabricación de espumas y emulsiones [73–75]. Debido a la presencia de interfases, las ecuaciones hidrodinámicas para estudiar algún sistema de flujo se vuelven complicadas y por tanto, a diferencia de los muchos trabajos experimentales que existen, hay pocos trabajos teóricos o estudios numéricos, que utilizando dichas ecuaciones exploren este tipo de sistemas. Por lo tanto, es necesario desarrollar modelos para entender la dinámica de fluidos bifásicos pulsados a microescalas.

4.1.1. Sistema de estudio

Nuestro sistema de estudio, consiste en un microcanal rectangular rígido, formado por un par de placas paralelas rectangulares de dimensiones $L \times w$ (vea la Fig. 4.1). Dichas placas están separadas por una altura, b, la cual es mucho menor que las otras dimensiones del sistema. Esta configuración se ha utilizado para estudiar el movimiento de interfases en microcanales con rugosidad [76]. Dentro del microcanal se tienen dos fluidos viscosos que son inmiscibles entre sí, lo cual da lugar a la formación de una interfase. Se desea analizar la dinámica del sistema bulto-interfase al imponer una presión oscilatoria en la entrada del microcanal.



Figura 4.1: Microcanal rectangular con dos fluidos inmiscibles entre sí.

La geometría de nuestro sistema de estudio es sencilla, sin embargo, la existencia de la interfase y la condición de frontera oscilatoria hacen que la solución de las ecuaciones de la formulación macroscópica sea complicada. En dicha formulación, la dinámica interfacial se puede estudiar a través de las ecuaciones de Navier-Stokes para el bulto de cada uno de los fluidos más un par de condiciones de frontera en la interfase fluido-fluido. Desde el punto de vista macroscópico la región que separa los dominios de composición (es decir, la interfase) es tratada como una línea matemática bien definida. A continuación se presentan las ecuaciones de la formulación macroscópico para nuestro sistema de estudio.

4.1.2. Ecuaciones de la descripción macroscópica

Las ecuaciones de Navier-Stokes están dadas por:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \, \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v}, \tag{4.1}$$

en donde **v** es el campo de velocidades, p es la presión, ρ es la densidad del fluido y η su viscosidad. En la ecuación 4.1 no se toma en cuenta el efecto de la gravedad ya que la altura de los microcanales es pequeña. La ecuación 4.1, junto con la ecuación de continuidad para un fluido incompresible,

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{4.2}$$

son necesarias para describir la dinámica de bulto de un fluido viscoso.

Dado que tanto las velocidades como las longitudes características en los microcanales son pequeñas, los números de Reynolds son tales que se tiene un flujo laminar (los números de Reynolds típicos en los sistemas de microfluídica se encuentran por debajo de 1000 [77]), por lo que podemos despreciar los términos convectivos de las ecuaciones 4.1, con lo que éstas se reducen a:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v}. \tag{4.3}$$

Dada la geometría del microcanal y su rigidez, suponemos que el fluido sólo se mueve en la dirección x. En consecuencia, la presión sólo cambia en la misma dirección y no existe velocidad en la dirección z. Así las ecuaciones lineales de Navier-Stokes (ecuaciones 4.3) se reducen a:

$$\rho \frac{\partial v_x}{\partial t} = -\frac{dp}{dx} + \eta \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2}.$$
(4.4)

La ecuación anterior se puede resolver en el dominio de Fourier. Al imponer condiciones de frontera de no resbalamiento en las paredes del microcanal, $v_x (z = -b/2) = v_x (z = b/2) = 0$, se obtiene una expresión para la velocidad en la dirección axial en el dominio de Fourier, $\hat{v}_x (z, \omega)$, la cual se puede promediar en la dirección normal a las paredes para obtener una ley de Darcy generalizada, esto es,

$$\langle \hat{v}_x \rangle = -\frac{K\left(\omega\right)}{\eta} \frac{d\hat{p}}{dx},\tag{4.5}$$

en donde, $\langle \hat{v}_x \rangle$ es la velocidad axial promediada en la dirección normal a las paredes y

$$K(\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{\tan\left(\beta b\right)}{\beta b} \right], \qquad (4.6)$$

es la permeabilidad dinámica, con $\beta^2 = \frac{i\omega\rho}{4\eta}$. La solución detallada de la ecuación 4.4 para un solo fluido en una celda rectangular y un gradiente de presión dependiente del tiempo, se puede consultar en el apéndice E.



Figura 4.2: Esquema de las variables del sistema y de las condiciones a la frontera en la interfase fluido-fluido.

La ecuación que gobierna la dinámica de la presión en el bulto de cada uno de los fluidos, se obtiene de la combinación de las ecuaciones 4.2 y 4.3, esto es,

$$\nabla^2 p = 0. \tag{4.7}$$

Las condiciones en la interfase fluido-fluido relevantes para el sistema de estudio son dos. Una de ellas se obtiene al considerar un equilibrio termodinámico local. Esta condición es conocida como la ecuación de Young-Lapace:

$$\Delta p = \sigma \kappa, \tag{4.8}$$

en donde, $\Delta p = p_2 - p_1$ es la caída de presión a través de la interfase, κ es su curvatura y σ es la tensión superficial (vea la Fig. 4.2). La otra condición se obtiene de la impenetrabilidad de los fluidos y garantiza la continuidad de la velocidad normal de la interfase, v_n , con la velocidad del fluido en la interfase, la cual está dada por,

$$\frac{6}{5}\frac{\rho b^2}{12\eta}\frac{\partial v_n}{\partial t} + v_n = -\frac{b^2}{12\eta}\nabla p \cdot \hat{\mathbf{n}}$$
(4.9)

en donde, $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector normal a la interfase.

La ecuación 4.9 se obtiene de una aproximación a primer orden en la frecuencia de la ley de Darcy generalizada. Dicha ley, tiene una forma integral complicada en el dominio del tiempo. Con la finalidad de tener una expresión sencilla para la velocidad del fluido en el dominio del tiempo, aproximamos $\eta/K(\omega)$ a orden lineal en ω y encontramos una forma

aproximada de la ley de Darcy generalizada en el dominio de la frecuencia, esto es,

$$\left[\frac{12\eta}{b^2} - i\omega\frac{6}{5}\rho\right]\langle\hat{v}_x\rangle_z = -\frac{\partial\hat{p}}{\partial x}.$$
(4.10)

Con la transformada inversa de Fourier la ecuación anterior se puede escribir en el dominio del tiempo como,

$$\frac{6}{5}\frac{\rho b^2}{12\eta}\frac{\partial \langle v_x \rangle_z}{\partial t} + \langle v_x \rangle_z = -\frac{b^2}{12\eta}\frac{\partial p}{\partial x}.$$
(4.11)

Esta ecuación se obtuvo para la velocidad en el bulto de uno de los fluidos a lo largo de la dirección axial, sin embargo, cuando se introduce una interfase, la curvatura de la misma puede causar gradientes de presión en direcciones diferentes a la axial. En este caso, se puede asumir que la ecuación 4.11 es válida localmente, con lo que en cualquier punto del fluido se tiene que,

$$\frac{6}{5}\frac{\rho b^2}{12\eta}\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} = -\frac{b^2}{12\eta}\nabla p.$$
(4.12)

Las ecuaciones 4.7, 4.8 y 4.9, constituyen las ecuaciones de la formulación macroscópica.

4.1.3. Mojado y tubo capilar

La miniaturización de las geometrías de flujo en los sistemas de microfluídica hace que los fenómenos interfaciales como el mojado sean importantes.

La palabra mojado se refiere al estudio de cómo un líquido se extiende sobre una superficie sólida o líquida. El mojado es relevante en múltiples sistemas y procesos, como los siguientes [46]:

- En el ojo. La cornea por naturaleza tiene un carácter hidrofóbico, sin embargo, un ojo sano debe encontrarse humectado. Para ello, las lágrimas contienen proteínas (llamadas mucinas) que le infieren un carácter hidrofílico a la superficie del ojo, lo que permite la formación de una película acuosa.
- El ascenso de la savia en una planta.
- En la fabricación y diseño de pinturas, impermeabilizantes, tintas y recubrimientos.
- En la fabricación de saborizantes, colorantes y conservadores.

En equilibrio mecánico, las propiedades de mojado de un líquido sobre una superficie sólida surgen de la competencia de las tensiones superficiales de cada una de las interfases del sistema. En la Fig. 4.3 se muestran, para dos fluidos inmiscibles entre sí en contacto con una fase sólida, dos condiciones de mojado caracterizadas por el ángulo de contacto θ_e . Cuando $\theta_e < 90^\circ$ el sistema es hidrofílico y cuando $\theta_e > 90^\circ$ el sistema es hidrofóbico [78].



Figura 4.3: Izquierda, sistema hidrofílico. Derecha, sistema hidrofóbico.

Un ejemplo sencillo en el que se puede observar el efecto del mojado en la dinámica de una interfase es el avance de un líquido hidrofílico dentro de un tubo capilar hidrofílico de radio R (vea la Fig. 4.4). Para estudiar la dinámica de la interfase, se supone que el ángulo de contacto, θ , no cambia durante el ascenso del líquido y que su valor es aproximadamente el de equilibrio $\theta \approx \theta_e$. La interacción del fluido con las paredes del tubo capilar induce una curvatura en la interfase, la cual está dada por: $\kappa = 2\cos\theta_e/R$, en donde R es el radio del tubo capilar. Para el caso de un microcanal rectangular la curvatura está dada por: $\kappa = 2\cos\theta_e/b$, en donde b es la separación entre las placas. La curvatura de la interfase a su vez produce un cambio en la presión antes del menisco, p_A , la cual se pude calcular a través de la ecuación de Young-Laplace, esto es,

$$\Delta p_c = p_0 - p_A = \sigma \kappa = \frac{2\sigma \cos \theta_e}{R} \quad \text{con lo que} \quad p_A = p_0 - \frac{2\sigma \cos \theta_e}{R}, \tag{4.13}$$

en donde, Δp_c es la presión capilar, p_0 es la presión atmosférica y σ es la tensión superficial. Por tanto, la presión en el aire, p_0 , es mayor que la presión medida en el líquido antes del menisco, p_A . Si consideramos que la presión en el fondo del capilar, p_B , es la presión atmosférica, esto es, $p_B = p_0 = p_{atm}$, la diferencia de presiones a lo largo de la columna de líquido se puede escribir como $p_B - p_A = \frac{2\sigma \cos \theta_e}{R}$, la cual hace que el líquido se mueva dentro del tubo capilar. En equilibrio dicha diferencia debe ser igual a la presión de la columna del líquido, $\Delta p_g = \rho g H_{eq}$, por lo que igualando ambas diferencias obtenemos que la posición de equilibrio, H_{eq} , está dada por [78]:

$$H_{eq} = \frac{2\sigma\cos\theta_e}{\rho g R}.$$
(4.14)

La evolución temporal de la posición promedio del menisco se puede estudiar a través de



Figura 4.4: Representación esquemática del ascenso de un líquido hidrofílico en un tubo capilar. La curvatura inducida en el líquido está dada por $\kappa = \frac{2}{r} = \frac{2\cos\theta_e}{R}$, en donde R es el radio del tubo capilar. En el caso del microcanal rectangular, la curvatura esta dada por: $\kappa = \frac{2\cos\theta_e}{b}$, en donde b es la separación entre las placas.

un balance de las fuerzas que juegan un papel en el movimiento del fluido [78]. Una de las fuerzas que induce el movimiento del fluido dentro del tubo es la capilar, la cual es ocasionada por la presión capilar, esta es,

$$f_c = \pi R^2 \Delta p_c. \tag{4.15}$$

Por otro lado, las fuerzas que se oponen al movimiento del fluido son la generada por el peso de la columna de líquido, dada por,

$$f_g = \rho g \pi R^2 H(t) \tag{4.16}$$

y la de fricción, la cual es generada por la caída de presión viscosa, esta última se obtiene de la relación de Poiseulle, $Q = \pi R^2 V(t)$, que para un tubo se puede escribir como, $Q = \frac{\pi \Delta p_{\eta}}{8\eta H(t)} R^4$. Por tanto, la fuerza de fricción está dada por,

$$f_{\eta} = \pi R^2 \Delta p_{\eta} = 8\eta H(t) V(t). \tag{4.17}$$

La ecuación de balance de fuerzas se puede escribir como:

$$\frac{d(MV)}{dt} = f_c - f_\eta - f_g,$$
(4.18)

en donde, la masa depende del tiempo, esto es
, $M(t) = \pi R^2 \rho H(t)$ y $V(t) = \frac{dH}{dt}$. Sustituyendo las ecuaciones 4.15, 4.16 y 4.17 en la ecuación 4.18 obtenemos:

$$\rho \frac{d [H(t)V(t)]}{dt} = \frac{2\sigma \cos \theta_e}{R} - \rho g H(t) - \frac{8\eta}{R^2} H(t)V(t).$$
(4.19)

Tubo horizontal

Para el caso de un tubo capilar horizontal, el término $\rho g H(t)$ en la ecuación 4.19 se puede despreciar. En tal caso, la solución de dicha ecuación está dada por:

$$H(t)V(t) = \frac{\sigma R \cos \theta_e}{4\eta} \left(1 - e^{-t/\tau}\right), \qquad (4.20)$$

en donde $\tau = \frac{\rho R^2}{8\eta}$ es un tiempo característico del sistema, el cual separa dos regímenes:

• Régimen inicial, $t \ll \tau$. Desarrollando la exponencial de la ecuación 4.20 a orden lineal en el tiempo adimensional t/τ e integrando tenemos que la posición promedio del menisco se puede calcular como:

$$H(t) = \left(\frac{2\sigma\cos\theta_e}{\rho R}\right)^{1/2} t.$$
(4.21)

En este régimen la posición del menisco crece linealmente en el tiempo. La duración del mismo es muy pequeña en la mayoría de los sistemas capilares. Por ejemplo, para un tubo de 1mm de radio que contiene agua $\tau \approx 1s$ [78].

• Régimen viscoso, $t >> \tau$. A un tiempo mucho más grande que τ , la solución de la ecuación 4.20 es:

$$H(t) = \left[H_0^2 + \frac{\sigma R \cos \theta_e}{2\eta} t\right]^{1/2}, \qquad (4.22)$$

en donde H_0 es la posición inicial del menisco. En este régimen la inercia del líquido es superada por la fuerza viscosa. La ecuación 4.22 es conocida como la ley de Washburn y se utiliza también para estudiar el avance de líquidos en medios porosos. A tiempos suficientemente grandes dicha ecuación se reduce a $H(t) \sim t^{1/2}$.

Las ecuaciones anteriores describen la posición promedio del menisco en el tiempo. Por lo tanto, en ellas se desconoce la dependencia de la posición del menisco con la dirección normal a la pared.

4.1.4. Modelos mesoscópicos

En la formulación macroscópica se contempla una interfase bien definida con un ancho infinitamente pequeño. En consecuencia, tanto las variables que definen al sistema como su derivadas son discontinuas en la interfase. La condición de frontera dada por la ecuación de Young-Laplace (ecuación 4.8) contiene la curvatura de la interfase, por lo que, para determinar dicha condición se requiere conocer la forma de la interfase, que es la solución al problema. A este tipo de problema se le conoce como problema de fronteras libres. Dicho problema impide obtener soluciones analíticas a cualquier tiempo. Además de ello, al imponer un gradiente de presión dependiente del tiempo los métodos computacionales para estudiar dinámicas interfaciales se vuelven complicados ya que requieren rastrear la posición de la interfase a todo tiempo.



Figura 4.5: a) Perfil del parámetro de orden en equilibrio como función de la posición x. b) Potencial químico de doble pozo como función del parámetro de orden.

Una alternativa para evitar el problema de fronteras libres son los modelos de campo, cuya solución numérica es fácil de implementar. Uno de los primeros usos de este tipo de modelos fue para estudiar la evolución de la microestructura en aleaciones durante procesos de solidificación fuera de equilibrio [36]. Sin embargo, el uso de este tipo de modelos se ha diversificado. En el área de dinámica de fluidos, algunos fenómenos como el de la formación de dedos viscosos [41,42] y el de movimiento de interfases en microcanales con rugosidad [76], se han estudiado exitosamente a través de estos modelos.

La principal característica de los modelos mesoscópicos es que en ellos la región interfacial es difusa, su ancho es proporcional a un parámetro ϵ , el cual se encuentra en la mesoescala (vea la Fig. 4.5a). Por lo tanto, en dichos modelos no existen discontinuidades en las variables, no se tiene una condición de frontera que dependa de la forma de la interfase y en consecuencia no es necesario rastrear la posición de la misma. Para tener una interfase difusa se introduce una ecuación de movimiento para un parámetro de orden ϕ , el cual cambia de forma suave entre dos valores de bulto bien definidos, $\phi_e = \pm 1$, como se aprecia en la Fig. 4.5a, y permite determinar la ubicación de las fases que componen al sistema. El parámetro de orden se relaciona con una variable intensiva del sistema, como la densidad o la concentración de alguno de los fluidos. En el esquema de la Fig. 4.5a se ilustra con un mapa de colores. En los modelo de campo la dinámica del sistema se describe a través de una ecuación de movimiento, la cual se basa en una formulación similar a la de Ginzburg-Landau [79] en la que el funcional de energía libre del sistema, $\mathcal{F}[\phi]$, está dado por:

$$\mathcal{F}[\phi] = \int dr f(\phi) = \int dr \left(V(\phi) + \frac{\epsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right), \qquad (4.23)$$

en donde $f(\phi)$ representa la densidad de energía libre del sistema y $V(\phi) = V_0 - \frac{1}{2}\phi^2 + \frac{1}{4}\phi^4$ es un potencial de doble pozo (vea la Fig. 4.5b), el cual permite la coexistencia de dos fases. En la ecuación 4.23 el término que contiene al gradiente del parámetro de orden permite la existencia de la interfase.

Para escribir la ecuación de movimiento se requiere la derivada del funcional ¹ de la energía

$$\delta \mathcal{F}[\phi] = \int dx \frac{\delta \mathcal{F}[\phi]}{\delta \phi(x)} \delta \phi(x) \,,$$

en donde, $\mathcal{F}[\phi]$ es un funcional de la función $\phi(x)$. Para obtener la derivada funcional de la ecuación 4.23, usaremos como ejemplo el término $|\nabla \phi|^2$, esto es,

$$\mathcal{F}[\phi] = \int \left(\frac{d\phi}{dx}\right)^2 dx$$

Evaluamos $\delta \mathcal F$ para el término seleccionado,

$$\delta \mathcal{F} = \mathcal{F}[\phi + \delta \phi] - \mathcal{F}[\phi] = \int \left[\left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + 2 \frac{d\phi}{dx} \frac{d\delta\phi}{dx} + \left(\frac{d\delta\phi}{dx} \right)^2 - \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \right] dx.$$

Debido a que $\delta\phi$ es un cambio infinitesimal de la función $\phi,$ podemos despreciar el término cuadrático. Por tanto,

$$\delta \mathcal{F} = \int 2 \frac{d\phi}{dx} \frac{d\delta\phi}{dx} dx.$$

Esta integral se puede resolver por partes,

$$\delta \mathcal{F} = -2 \int \delta \phi \frac{d^2 \phi}{dx^2} dx$$

Finalmente, comparamos el resultado anterior con la definición de la derivada funcional, con lo que llegamos a

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} = -2\frac{d^2\phi}{dx^2}.$$

Los otros cuatro términos de la ecuación 4.24 se obtienen de forma similar.

¹La derivada funcional se puede definir como:

libre con respecto a ϕ , esto es,

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} \equiv \mu(\phi) = V'(\phi) - \epsilon^2 \nabla^2 \phi = -\phi + \phi^3 - \epsilon^2 \nabla^2 \phi, \qquad (4.24)$$

en donde, el potencial químico, $\mu(\phi)$, se define como el cambio del funcional de la energía libre del sistema con respecto a un cambio del parámetro de orden.

En términos del parámetro de orden, la ecuación de conservación de masa se puede escribir como,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\phi), \qquad (4.25)$$

en donde, el flujo se puede definir en términos del gradiente de potencial químico, esto es,

$$\mathbf{j}(\phi) = -M\nabla\mu(\phi),\tag{4.26}$$

M es un parámetro relacionado con la movilidad del sistema.

Por lo tanto, la ecuación de movimiento del parámetro de orden está dada por,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M \ \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} \right) = \nabla \cdot M \nabla \mu(\phi). \tag{4.27}$$

La ecuación anterior es conocida como la ecuación de Cahn-Hilliard o ecuación del modelo B, de acuerdo con la clasificación propuesta por Hohenberg y Halperin [79]. En el área de dinámica de fluidos, esta ecuación se ha utilizado para estudiar diferentes problemas como la formación de dedos viscosos de Saffman-Taylor [41] y la dinámica de interfases en microcanales rugosos [43]. Dicha ecuación también se ha utilizado para estudiar dinámicas interfaciales al imponer gradientes de presión oscilatorios [42]. Para ello se consideró que la respuesta del sistema a la condición de frontera era instantánea. Los resultados del trabajo mencionado ayudaron a plantear y analizar estudios experimentales en dedos de Saffman-Taylor al imponer forzamientos periódicos [45].

En equilibrio termodinámico, es decir cuando $\mu(\phi) = 0$, a partir de la ecuación 4.24 se puede demostrar que el parámetro de orden adopta el perfil:

$$\phi = \phi_e \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2\epsilon}}\right),\tag{4.28}$$

el cual se ilustra en la Fig. 4.5a.

4.1.5. Identificación de parámetros macroscópicos y mesoscópicos

Para que un modelo de campo se pueda utilizar en el estudio de algún sistema, se debe probar que en límite de una interfase bien definida, el modelo reproduce las ecuaciones de la descripción macroscópica. Para ello se hace un estudio de las ecuaciones cuando el ancho de la interfase tiende a cero, es decir, se hace un desarrollo asintótico de la ecuación de movimiento en el límite en el que $\epsilon \rightarrow 0$.

Para el modelo de campo cuya ecuación de movimiento está dada por la ecuación 4.27, el desarrollo asintótico se puede consultar en la tesis de licenciatura de Rodrigo Ledesma [80]. De dicho desarrollo se obtiene una expresión para la velocidad normal de la interfase, v_n , definida en un sistema coordenado curvilíneo, (u, s), en donde u mide la distancia normal a la interfase y s la longitud de arco sobre la misma, en términos de la derivada espacial del potencial químico, es decir,

$$v_n = -\frac{M}{2\phi_e} \frac{\partial \mu_1}{\partial u}.$$
(4.29)

 μ_1 en la ecuación 4.29 es el potencial químico a primer orden de un desarrollo en potencias de ϵ . La ecuación 4.29 es equivalente a la condición de frontera para la velocidad normal de dos fluidos inmiscibles en contacto, es decir, es equivalente a la ecuación 4.9 en estado estacionario, en donde, v_n está dada por la ley de Darcy de estado estacionario (vea la ecuación E.4 en el apéndice E).

Además de la ecuación 4.29, a través del desarrollo asintótico se obtienen dos ecuaciones adicionales, una para el bulto del fluido y otra para la diferencia de presiones en la interfase, es decir:

$$\nabla^2 \mu_1 = 0 \quad \mathbf{y} \quad \mu_1 = \frac{\sigma'}{2\phi_e} \kappa, \tag{4.30}$$

las cuales son equivalentes a la ecuaciones 4.7 y 4.8 de la descripción macroscópica. De aquí se puede obtener la siguiente identificación entre los parámetros mesoscópicos y macroscópicos,

$$p = \phi_e \mu_1, \quad K = -\frac{M}{2\phi_{eq}^2} \quad y \quad \sigma = \frac{\sigma'}{2\phi_e}, \tag{4.31}$$

en donde M es un parámetro relacionado a la permeabilidad del fluido y $\sigma' = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega}\right)^2 d\omega$ es un parámetro relacionado al ancho de la interfase. De esta identificación se tiene que el potencial químico juega el papel de la presión en la descripción macroscópica, la movilidad el de la permeabilidad y que la tensión interfacial está relacionada con el ancho de la interfase. La identificación entre el potencial químico y la presión se ha utilizado previamente para estudiar la dinámica de interfases al aplicar diferentes gradientes de presión [41–43,76]. Los modelos de campo utilizados para estudiar dinámicas interfaciales anteriores a este trabajo, no han tomado en cuenta la inercia del sistema, es decir, en ellos se consideró que la respuesta a una condición de frontera pulsada era instantánea. Dicha aproximación es válida para frecuencias bajas.

En este trabajo desarrollamos un modelo de campo cuya ecuación en el límite de una interfase bien definida reproduce un término asociado a la inercia del sistema. Por lo tanto, la respuesta del sistema a un forzamiento pulsado dependerá de la frecuencia impuesta en el mismo. Estudiamos este efecto y el de la interacción fluido-pared en la dinámica interfacial.

4.2. Ecuación de movimiento del nuevo modelo de campo

Dado que en el límite de una interfase bien definida los modelos de campo existentes para estudiar dinámicas interfaciales fluido-fluido no reproducen un término relacionado a la inercia del sistema, el cual es importante cuando se desean estudiar movimientos pulsados, desarrollamos un nuevo modelo de campo cuya ecuación de movimiento sí reproduce un término de este tipo. En dichos modelos existentes, se encontró que en el límite de una interfase bien definida, la derivada temporal del parámetro de orden reproduce un término relacionado a la velocidad de la interfase, ésto es, $\frac{\partial \phi}{\partial t} \xrightarrow{\epsilon \to 0} v_n$. Utilizando este hecho, agregamos un término de segunda derivada temporal del parámetro de orden y demostramos que en el límite de una interfase bien definida, este término reproduce una derivada temporal de la velocidad de la interfase, es decir, $\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \xrightarrow{\epsilon \to 0} \frac{\partial v_n}{\partial t}$. La ecuación de movimiento para este nuevo modelo de campo está dada por,

$$\alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot M \nabla \mu(\phi), \qquad (4.32)$$

en donde, α es un coeficiente que controla el efecto de la segunda derivada temporal del parámetro de orden, μ es el potencial químico, dado por la ecuación 4.24 y M es un parámetro relacionado a la permeabilidad de estado estacionario del sistema.

Debemos probar que el nuevo modelo de campo en el límite de una interfase bien definida, reproduce las ecuaciones 4.7, 4.8 y 4.9, que constituyen las ecuaciones de la formulación macroscópica de nuestro sistema. A continuación presentamos un resumen del desarrollo asintótico de la ecuación del modelo de campo con inercia (Ec. 4.32). El desarrollo completo se puede consultar en el apéndice F.



4.3. Desarrollo asintótico de la ecuación del modelo

Figura 4.6: Coordenadas curvilíneas (u,s), para la región externa y (U,S) para la región interna. Ambas están referidas a la curva de nivel en la que $\phi = 0$. Las líneas punteadas corresponden a puntos en los que u es constante. La velocidad de la curva en la dirección normal, está dada por, $v = -\frac{\partial U}{\partial t}$.

Para llevar a cabo el desarrollo asintótico, las variables del modelo de campo se escriben en potencias del ancho de la interfase, ϵ . Debido a que en la región interfacial existen cambios abruptos de las variables, el desarrollo se lleva a cabo en dos regiones: interna y externa. También es necesario definir un sistema coordenado y calcular sus factores de escala; para ello se utiliza la curva de nivel en la que el parámetro de orden es igual a cero, $\phi = 0$, y sus coordenadas intrínsecas: $s(\vec{r})$, la longitud de arco; y $u(\vec{r})$, la distancia normal a la curva de nivel (vea la Fig. 4.6). Utilizamos letras minúsculas para denotar coordenadas y variables en la región externa y letras mayúsculas para denotar coordenadas y variables en la región interna. Por lo tanto, las coordenadas intrínsecas de la curva de nivel, $\phi = 0$, en la región interna son $U(\vec{r}, t)$ y $S(\vec{r}, t)$. La región externa corresponde al bulto de los fluidos. En dicha región las escalas de las longitudes características involucradas son mucho más grandes que ϵ y el sistema coordenado empleado puede considerarse independiente del tiempo. La región interna corresponde a la región interfacial. En esta región se reescala la coordenada mormal a la interfase, esto es $\omega \equiv U/\epsilon$, de forma que en el límite $\epsilon \to 0$, la coordenada ω toma valores en el rango $-\infty < \omega < \infty$.

Podemos escribir las variables en la región externa e interna mediante un desarrollo en potencias de ϵ , respectivamente, como:

$$a(u, s, t) = a_0 + \epsilon a_1 + \epsilon^2 a_2 + \cdots,$$
 (4.33)

$$A(\omega, S, t) = A_0 + \epsilon A_1 + \epsilon^2 A_2 + \cdots .$$

$$(4.34)$$

Las condiciones de continuidad entre las variables en la región interna y externa están

dadas por,

$$\lim_{u \to \pm 0} a_i = \lim_{\omega \to \pm \infty} A_i, \qquad (4.35)$$
$$\lim_{u \to \pm 0} \frac{\partial a_i}{\partial u} = \lim_{\omega \to \pm \infty} \frac{\partial A_{i+1}}{\partial \omega}, \quad \text{para} \quad i \ge 0,$$
$$\lim_{\omega \to \pm \infty} \frac{\partial A_0}{\partial \omega} = 0, \qquad (4.36)$$

en donde, el índice *i* se refiere a un término de la serie de potencias de ϵ . Por el efecto de la transformación de coordenadas, $\omega = U/\epsilon$, el índice en la ecuación 4.36 se desfasa por 1.

Para el sistema de coordenadas seleccionado, los laplacianos de una función, f, en la región externa e interna, están dados, respectivamente por:

$$\nabla^2 f = -\kappa \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial^2 f}{\partial u^2} + \nabla^2 s \frac{\partial f}{\partial s} + |\nabla s|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial s^2} \quad \mathbf{y}$$
(4.37)

$$\nabla^2 f = -\frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial f}{\partial \omega} + \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \omega^2} + \nabla^2 S \frac{\partial f}{\partial S} + |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial S^2}, \tag{4.38}$$

en donde κ es la curvatura local de la interfase.

La ecuación de movimiento del modelo de campo, ecuación 4.32, se escribe para cada una de las regiones. Para ello se utilizan los desarrollos de las variables del modelo de campo en potencias de ϵ (ecuaciones 4.33 y 4.34), las condiciones de frontera (ecuaciones 4.35, 4.36 y 4.36) y las expresiones para el laplaciano (ecuaciones 4.37 y 4.38). Por otro lado, se desarrolla el potencial químico en la región interna y externa en series de Taylor alrededor del parámetro de orden cuando el ancho de la interfase es igual a cero, es decir, alrededor de Φ_0 y ϕ_0 , respectivamente. Combinando cada desarrollo con su correspondiente ecuación de movimiento y utilizando las condiciones de frontera, se obtienen las siguientes expresiones:

• Ecuación de bulto

Para la región externa se obtiene que el laplaciano del potencial químico a primer orden en el desarrollo en potencias de ϵ es igual a cero, es decir,

$$M\nabla^2 \mu_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla^2 \mu_1 = 0. \tag{4.39}$$

Esta ecuación es equivalente a la ecuación de bulto para un fluido incompresible en la descripción macroscópica, ecuación 4.7, la cual se obtiene de la combinación de las ecuaciones 4.2 y 4.3.
• Ecuaciones para la interfase

En la región interna se obtienen dos ecuaciones, una de ellas es equivalente a la condición de equilibrio termodinámico local, ecuación 4.8, y está dada por la ecuación 4.40.

$$\mu_1 = \left(\frac{\gamma'}{2\phi_{eq}}\right)\kappa, \quad \text{en donde} \quad \gamma' = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial\Phi_0}{\partial\omega}\right)^2 d\omega \tag{4.40}$$

La otra ecuación es equivalente a la condición de continuidad para la velocidad normal de la interfase, ecuación 4.9, y está dada por la ecuación 4.41.

$$\pm \left[\alpha \frac{\partial v_1}{\partial t} + v_1 \right] = -\frac{M}{\phi_{eq}} \frac{\partial \mu_1}{\partial u} \quad (u \to \pm 0), \tag{4.41}$$

en donde v_1 es la velocidad de la interfase.

De las ecuaciones anteriores se obtienen las identificaciones entre parámetros mesoscópicos y macroscópicos dadas por las ecuaciones 4.31, con $K_0 = \frac{M}{\phi_{eq}^2}$, por lo que el parámetro M está relacionado con la permeabilidad de estado estacionario del sistema, K_0 .

4.4. Condiciones de frontera del sistema

Para llevar a cabo la integración numérica de la ecuación de movimiento del modelo de campo, consideramos una celda rectangular con $L_x \times L_y \times L_z$, puntos de red, como se muestra en la Fig. 4.7. De la identificación de parámetros se tiene que el potencial químico



Figura 4.7: Celda rectangular en la que se muestran las condiciones de frontera utilizadas para la integración numérica de la ecuación del modelo de campo.

en el modelo de campo juega el papel de la presión en el modelo macroscópico. Debido a que queremos estudiar la dinámica de una interfase viscosa pulsada, imponemos como condición de frontera en la entrada de la celda, un potencial químico oscilatorio de la forma:

$$\mu(x=0) = \mu_E \cos(\omega_f t), \qquad (4.42)$$

lo cual es equivalente a imponer una presión pulsada en la entrada del microcanal.

En las paredes de la celda, colocadas en z = 0 y $z = L_z$, se imponen dos condiciones de frontera. La primera asegura que no haya flujo a través de las mismas, esto se tiene cuando el gradiente de presión en la dirección normal a ellas es igual a cero, esto es,

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \mu \mid_{z=0} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \mu \mid_{z=L_z} = 0.$$
(4.43)

La segunda condición que se impone introduce la interacción fluido-pared, es decir, el efecto del mojado. Para incluir dicha interacción, se agrega a la energía libre del sistema (ecuación 4.23) en la dirección normal a las paredes, z, un término relacionado con la energía de la superficie de la pared [78], esto es,

$$\mathcal{F}[\phi] = f_s(\phi_s) + \int_0^\infty \left[V(\phi) + \frac{\epsilon}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \right] dz, \qquad (4.44)$$

en donde $f_s(\phi_s) = A_s \phi_s$, con $\phi_s = \phi(z = 0) = \phi(z = L_z)$. El parámetro A_s describe la preferencia de la pared por el líquido $A_s > 0$ (paredes hidrofílicas) o por el aire $A_s < 0$ (paredes hidrofóbicas). El caso en el que A = 0, corresponde a mojado neutro para el cual la interfase es plana, vea la Fig. 4.8.



La condición de frontera que introduce el efecto del mojado, se conoce como la condición natural de frontera y se obtiene de la solución de equilibrio de la ecuación 4.44. Para obtener dicha solución se toma una pequeña perturbación alrededor del parámetro de orden de equilibrio, esto es, $\phi = \phi_0 + \lambda \phi_1$, con lo que, por medio del cálculo de variaciones ¹ se tiene que:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda}\Big|_{\lambda=0} = \int_0^\infty \left[\frac{\partial f_s}{\partial \phi} - \frac{d}{dz}\frac{\partial f_s}{\partial \phi_z}\right]\phi_1 \, dz + \int_0^\infty \left[\frac{\partial V(\phi)}{\partial \phi} - \frac{d}{dz}\frac{\partial V(\phi)}{\partial \phi_z}\right]\phi_1 \, dz \qquad (4.45)$$

$$+ \int_0^\infty \frac{\epsilon}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)^2 - \frac{d}{dz}\frac{\partial}{\partial \phi_z} \left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)^2\right]\phi_1 \, dz = 0.$$

Dado que tanto f_s como $V(\phi)$ no dependen de $\phi_z \equiv \partial \phi/\partial z$, en la ecuación 4.45 el segundo término de la primera y segunda integral es igual a cero y también lo es, el primero de la tercera integral, con lo que dicha ecuación se reduce a,

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda}\Big|_{\lambda=0} = \int_0^\infty \frac{\partial f_s}{\partial \phi} \phi_1 \, dz + \int_0^\infty \frac{\partial V(\phi)}{\partial \phi} \phi_1 \, dz - \int_0^\infty \frac{\epsilon}{2} \frac{d}{dz} \frac{\partial}{\partial \phi_z} \left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)^2 \phi_1 \, dz = 0.$$
(4.49)

La primera y tercera integral de la ecuación 4.49, se pueden resolver por partes, esto es,

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\partial f_s}{\partial \phi} \phi_1 \, dz = \phi_1 \frac{\partial f_s}{\partial \phi} \Big|_{z=0} - \int_{0}^{\infty} \frac{\partial f_s}{\partial \phi} \phi_1' dz, \tag{4.50}$$

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\epsilon}{2} \frac{d}{dz} \frac{\partial}{\partial \phi_{z}} \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^{2} \phi_{1} dz = \epsilon \left[\phi_{1} \left. \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|_{z=0} - \int_{0}^{\infty} \phi_{1} \frac{\partial^{2} \phi}{\partial z^{2}} dz \right].$$
(4.51)

El segundo término del lado derecho de la ecuación 4.50 es igual a cero. Sustituyendo el resultado de las integrales anteriores en la ecuación 4.49, esta se puede escribir como:

$$\frac{d\mathcal{F}}{d\lambda}\Big|_{\lambda=0} = \int_0^\infty \left[V'(\phi) + \epsilon \frac{d^2\phi}{dz^2} \right] \phi_1 dz + \left[\phi_1 \left(\frac{df_s}{d\phi} - \epsilon \frac{d\phi}{dz} \right) \right]_{z=0} = 0.$$
(4.52)

¹El cálculo de variaciones involucra problemas en los que la cantidad a minimizar o maximizar, se escribe como una integral estacionaria del tipo,

$$J = \int_{x_1}^{x_2} f(y, y_x, x) dx,$$
(4.46)

en donde, J representa una cantidad estacionaria y f es una función conocida que depende de las variables $y(x), y_x \equiv dy(x)/dx$ y x. La dependencia de y con x no es fija, esto es, y(x) no se conoce. Esto significa que a pesar de que la integral va desde x_1 a x_2 , se desconoce la trayectoria exacta de integración y por tanto se debe encontrar aquella que minimiza J. Para ello se utiliza una variación de $y, \delta y$, la cual relaciona la trayectoria desconocida que minimiza J, y(x, 0) y una trayectoria vecina, $y(x, \alpha)$, esto es,

$$\delta y = y(x,\alpha) - y(x,0) = \alpha \eta(x) \quad \rightarrow \quad y(x,\alpha) = \alpha \eta(x) + y(x,0) \tag{4.47}$$

en donde, α es un parámetro relacionado con la magnitud de la variación y $\eta(x)$ es una función arbitraria que define a una cierta trayectoria. Dado que cualquier trayectoria debe pasar por los puntos iniciales y finales, x_1 y x_2 , se tiene que $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$.

La condición para encontrar un valor extremo de J, se puede escribir como [82]:

$$\left[\frac{\partial J(\alpha)}{\partial \alpha}\right]_{\alpha=0} = \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx}\frac{\partial f}{\partial y_x}\right]\eta(x)dx = 0.$$
(4.48)

Con lo que las soluciones de equilibrio de la ecuación anterior están dadas por:

$$V'(\phi_0) = -\epsilon \nabla^2 \phi, \tag{4.53}$$

$$\left. \frac{df_s}{d\phi} \right|_s = \epsilon \left[\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \phi \right]_s. \tag{4.54}$$

La ecuación 4.54 se conoce como la condición natural de frontera del problema [81] y constituye la segunda condición de frontera. En este trabajo estudiaremos los casos de mojado neutro, $A_s = 0$ y aquel en el que se tiene un canal con paredes hidrofílicas, $A_s > 0$.

De la integración numérica de la ecuación 4.32 sujeta a las condiciones de frontera, ecuaciones 4.42 y 4.54, se obtiene el perfil del parámetro de orden como función del tiempo, $\phi(x, z, t)$. La posición de la interfase en cada punto z, $H_{int}(z, t)$, se calcula a través de dicho perfil, esto es, la posición de la interfase se fija con la curva de nivel en la que el parámetro de orden es igual a cero, $\phi(H_{int}, z, t) = 0$.

4.5. Mojado neutro, $A_s = 0$

El caso de mojado neutro corresponde a una interfase plana, esto es, a una interfase cuya curvatura es igual a cero. Con ello, la condición de frontera dada por la ecuación 4.8 se reduce a $p_2 - p_1 = 0$, lo que implica que las presiones son iguales en ambos lados de la interfase, y en la interfase misma. En este caso, las ecuaciones que son válidas para estudiar la dinámica de bulto de uno de los fluidos también son válidas para estudiar la dinámica de la interfase. La condición de frontera oscilatoria impuesta produce un movimiento periódico de la interfase, como se observa en la Fig. 4.11. Dado que la interfase es plana, el movimiento es unidimensional.

4.5.1. Permeabilidad dinámica del modelo de campo

La ecuación para la continuidad de la velocidad de la interfase (ecuación 4.41), se puede escribir como,

$$\alpha \frac{\partial v_{int}}{\partial t} + v_{int} = -M \frac{\partial \mu}{\partial x} \Big|_{int}.$$
(4.55)

La ecuación anterior se puede transformar al domino de Fourier,

$$-i\omega\alpha \ \hat{v}_{int} + \hat{v}_{int} = -M \frac{\partial \hat{\mu}}{\partial x}\Big|_{int}, \tag{4.56}$$

con lo cual se puede obtener una expresión para la velocidad de la interfase en el dominio de Fourier,

$$\hat{v}_{int} = -\left(\frac{M}{1-i\omega\alpha}\right)\frac{\partial\hat{\mu}}{\partial x}\Big|_{int}.$$
(4.57)

Esta ecuación tiene la forma de una ley de Darcy generalizada, esto es, se tiene una relación lineal entre la velocidad y el gradiente de presión en el dominio de Fourier. En dicha ley, la función que relaciona la velocidad con el gradiente de presión se conoce como la permeabilidad dinámica del sistema, la cual se puede considerar como una medida de la resistencia a fluir de algún fluido en un medio confinado.

Para el bulto de un fluido Newtoniano en una celda rectangular rígida, la ley de Darcy generalizada está dada por,

$$\langle \hat{v}_x \rangle = -\frac{K(\omega)}{\eta} \frac{d\hat{p}}{dx},\tag{4.58}$$

en donde, la permeabilidad dinámica, ecuación 4.6, se puede escribir como

$$K(\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{\tan\left(\sqrt{\frac{i\omega\rho}{\eta}}\frac{b}{2}\right)}{\sqrt{\frac{i\omega\rho}{\eta}}\frac{b}{2}} \right] = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{\tan\left[\left(\frac{i\omega\rho b^2}{4\eta}\right)^{1/2}\right]}{\left(\frac{i\omega\rho b^2}{4\eta}\right)^{1/2}} \right].$$
 (4.59)

La deducción de las ecuaciones 4.58 y 4.59 se puede consultar en el apéndice E.

Conservando la estructura de la ecuación 4.58 y utilizando la ecuación para la velocidad de la interfase en el dominio de Fourier (ecuación 4.57), se puede identificar una permeabilidad dinámica del modelo de campo, $K_{MC}(\omega)$, dividida entre la viscosidad, es decir:

$$\frac{K_{MC}(\omega)}{\eta} = \frac{M}{1 - i\omega\alpha}.$$
(4.60)

Las partes real e imaginaría de la permeabilidad dinámica divididas entre la viscosidad, están dadas por,

$$\frac{\operatorname{Re}[K_{MC}(\alpha\omega)]}{\eta} = \frac{M}{1 + (\alpha\omega)^2} \quad \text{y} \quad \frac{\operatorname{Im}[K_{MC}(\alpha\omega)]}{\eta} = \frac{M\alpha\omega}{1 + (\alpha\omega)^2}.$$
(4.61)

La magnitud de la permeabilidad dinámica dividida entre la viscosidad es,

$$\frac{|K_{MC}(\alpha\omega)|}{\eta} = \frac{1}{\eta} \left(\operatorname{Re}^2[K_{MC}] + \operatorname{Im}^2[K_{MC}] \right)^{1/2} = \frac{M}{\left[1 + (\alpha\omega)^2 \right]^{1/2}}.$$
(4.62)

4.5.2. Identificación de los parámetros α y M

Para encontrar la relación entre las variables macroscópicas del sistema con los parámetros α y M del modelo de campo, comparamos términos del mismo orden en ω obtenidos de desarrollos en series de Taylor de la expresión para la permeabilidad dinámica de un fluido Newtoniano y de la expresión para la permeabilidad dinámica del modelo de campo.

El desarrollo en series de Taylor para la permeabilidad dinámica de un fluido Newtoniano (ecuación 4.59) es:

$$K(\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \left(1 + \frac{1}{3} \frac{i\omega\rho b^2}{4\eta} - \frac{2}{15} \left(\frac{\omega^2 \rho^2 b^4}{16\eta^2} \right) + \dots \right) \right].$$
 (4.63)

Para poder comparar los desarrollos, dividimos la ecuación 4.63 entre la viscosidad,

$$\frac{K(\omega)}{\eta} = \frac{b^2}{12\eta} + i\omega\rho \frac{6}{5} \left(\frac{b^2}{12\eta}\right)^2 + \dots \qquad (4.64)$$

El desarrollo en series de Taylor para la permeabilidad dinámica del modelo de campo (ecuación 4.60) es:

$$\frac{K_{MC}(\omega)}{\eta} = M\left(1 + i\omega\alpha + \dots\right) = M + iM\omega\alpha + \dots \quad (4.65)$$

Comparando términos del mismo orden en ω de las ecuaciones 4.64 y 4.65, encontramos la siguiente identificación entre parámetros mesoscópicos y macroscópicos,

$$M = \frac{b^2}{12\eta} \qquad \mathbf{y} \qquad \alpha = \frac{6}{5} \left(\frac{\rho b^2}{12\eta}\right). \tag{4.66}$$

Debido al tratamiento a través del cual se obtuvo la identificación de parámetros, dicha identificación es válida a frecuencias bajas.

4.5.3. Comparación entre la permeabilidad dinámica del modelo de campo con la permeabilidad dinámica de un fluido Newtoniano

La expresión para la permeabilidad dinámica de un fluido Newtoniano en un microcanal rectangular (ecuación 4.59) dividida por la viscosidad, se puede escribir en términos de las variables del modelo de campo. Para ello utilizamos la identificación de parámetros (ecuaciones 4.66), de donde se obtienen las siguientes igualdades: $\frac{b^2}{4\eta} = 3M$ y $\rho = \frac{5}{6} \frac{\alpha}{M}$. Sustituyendo estas igualdades en la ecuación 4.59, obtenemos una expresión para la permeabilidad dinámica dividida entre la viscosidad para un fluido Newtoniano en un canal

rectangular rígido en términos de las variables del modelo de campo, esto es,

$$\frac{K(\alpha\omega)}{\eta} = -\frac{6}{5} \frac{M}{i\alpha\omega} \left[1 - \frac{\tan\left[(5i\alpha\omega/2)^{1/2} \right]}{(5i\alpha\omega/2)^{1/2}} \right].$$

$$(4.67)$$

$$\frac{1.0}{0.8} - \frac{Re[K_{MC}(\alpha\omega)]/\eta}{-Im[K_{MC}(\alpha\omega)]/\eta} - \frac{Re[K(\alpha\omega)]/\eta}{Im[K(\alpha\omega)]/\eta}$$

$$(4.67)$$

$$\frac{1.0}{0.8} - \frac{Re[K_{MC}(\alpha\omega)]/\eta}{Im[K_{MC}(\alpha\omega)]/\eta} - \frac{Re[K(\alpha\omega)]/\eta}{Im[K(\alpha\omega)]/\eta}$$

Figura 4.9: Partes real e imaginaria de la permeabilidad dinámica entre la viscosidad como función del producto $\alpha\omega$, las líneas continuas corresponden a las expresiones para la permeabilidad dinámica entre la viscosidad del modelo de campo (con M = 1). Las líneas punteadas corresponden a las partes real e imaginaria de la permeabilidad dinámica entre la viscosidad para un fluido Newtoniano, escrita en términos de las variables del modelo de campo.

Al igual que la permeabilidad dinámica para el modelo de campo (ecuación 4.57), la permeabilidad dinámica para un fluido Newtoniano dividida entre la viscosidad, en un canal rectangular escrita en términos de las variables del modelo de campo (ecuación 4.67), depende solamente del producto $\alpha\omega$ y no contiene términos en ω con otra dependencia. En la Fig. 4.9 se muestran con líneas continuas las partes real e imaginaria de la permeabilidad dinámica del modelo de campo dividida entre la viscosidad y con líneas punteadas las correspondientes funciones para un fluido Newtoniano, ambas como función del producto $\alpha\omega$. En dicha figura se puede observar que las tendencias son iguales, esto es, a frecuencia cero se recupera la permeabilidad de estado estacionario, la parte real decae monótonamente con el producto $\alpha\omega$ y la parte imaginaria crece, llega a un máximo y luego decrece conforme aumenta $\alpha\omega$. A pesar de que la identificación de parámetros se hizo con un desarrollo a bajas frecuencias, las curvas coinciden en un amplio rango de frecuencias. Este resultado muestra que nuestro modelo de campo es capaz de reproducir el comportamiento dinámico de un fluido Newtoniano.

Gradiente de presión de serie de Fourier

Con la finalidad de corroborar que los resultados de la integración numérica del modelo de campo satisfacen la ecuación 4.57, es decir, que la velocidad del fluido es proporcional al gradiente de presión en el dominio de Fourier y así obtener una expresión para calcular la magnitud de la permeabilidad dinámica, ecuación 4.62, en función de ellos, utilizaremos algunos de los resultados analíticos para el bulto de un fluido Newtoniano. La dinámica de bulto de dicho fluido se puede estudiar a través de la ley de Darcy generalizada (ecuación 4.58). Para ello, un gradiente de presión dependiente del tiempo se transforma al dominio de Fourier, el resultado se sustituye en la ley de Darcy generalizada y ésta se antitransforma para obtener una ecuación para la velocidad en el dominio del tiempo.

Para un gradiente de presión escrito como una serie de Fourier de la forma,

$$\nabla p_x = \frac{dp}{dx} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(n\omega t\right) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(n\omega t\right) = \sum_{n=1}^{\infty} |\nabla p_n| \cos\left(n\omega t - \alpha_n\right), \quad (4.68)$$

en donde $|\nabla p_n| = [a_n^2 + b_n^2]^{1/2}$, es la amplitud del n-ésimo modo del gradiente de presión, y $\alpha_n = \arctan(b_n/a_n)$ (la igualdad en la ecuación 4.68 se obtiene utilizando el cambio de variables, $a_n = |\nabla p_n| \cos \alpha_n$ y $b_n = |\nabla p_n| \sin \alpha_n$), se ha demostrado que la velocidad del bulto de un fluido Newtoniano en el dominio del tiempo, está dada por:

$$v(t) = -\frac{1}{\eta} \left[\sum_{n=1}^{\infty} a_n \operatorname{Re} K(n\omega) \cos(n\omega t) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \operatorname{Im} K(n\omega) \sin(n\omega t) \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{Re} K(n\omega) \sin(n\omega t) - \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{Im} K(n\omega) \cos(n\omega t) \right] = \\ \left. -\frac{1}{\eta} \left[\sum_{n=1}^{\infty} a_n |K(n\omega)| \cos(n\omega t - \varphi_n) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n |K(n\omega)| \sin(n\omega t - \varphi_n) \right] = \\ \left. -\frac{1}{\eta} \left[\sum_{n=1}^{\infty} |K(n\omega)| |\nabla p_n| \cos(n\omega t - \zeta_n) \right],$$

$$(4.69)$$

en donde, $|K(n\omega)| = \left[\operatorname{Re}^2 K(n\omega) + \operatorname{Im}^2 K(n\omega)\right]^{1/2}$, $\varphi_n = \arctan\left(\operatorname{Im} K(n\omega)/\operatorname{Re} K(n\omega)\right)$ y $\zeta_n = \varphi_n + \alpha_n$. La deducción de la ecuación 4.69 se puede consultar en la sección E.1 del apéndice E.

Para el caso de mojado neutro, en el que la interfase es plana, consideramos que la ecuación que describe la velocidad del bulto de un fluido Newtoniano (ecuación 4.69) es válida para la velocidad de la interfase. Esta se puede integrar para obtener la posición de la interfase como función del tiempo, esto es,

$$H_{int}(t) = -\frac{1}{\eta} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{|K(n\omega)| |\nabla p_n|_{int}}{n\omega} \operatorname{sen}(n\omega t - \zeta_n) \right] = -\sum_{n=1}^{\infty} B_{H_{int}}^n \operatorname{sen}(n\omega t - \zeta_n) \quad (4.70)$$

en donde,

$$B_{H_{int}}^{n} = \frac{|K(n\omega)|}{\eta} \frac{|\nabla p_{n}|_{int}}{n\omega}, \qquad (4.71)$$

denota la amplitud de la posición de la interfase para cada modo y $|\nabla p_n|_{int}$ es la magnitud del gradiente de presión correspondiente al n-ésimo modo. Sustituyendo la expresión para la magnitud de la permeabilidad dinámica entre la viscosidad del modelo de campo (ecuación 4.62) en la ecuación 4.71 con $|K(n\omega)| = |K_{MC}(\omega)|$ y $|\nabla p_n|_{int} = |\nabla \mu(\omega)|_{int}$, la amplitud de la posición de la interfase para cada frecuencia ω se puede escribir como,

$$B_{H_{int}}(\omega) = \frac{M}{\left[1 + (\alpha\omega)^2\right]^{1/2}} \frac{|\nabla\mu(\omega)|_{int}}{\omega}.$$
(4.72)

Tanto $B_{H_{int}}$ como $|\nabla \mu(\omega)|_{int}$ se pueden obtener de los resultados de la integración numérica de la ecuación del modelo de campo.

4.5.4. Resultados de la integración numérica de la ecuación del modelo de campo

Dado que en nuestro sistema de estudio la condición de frontera impuesta a través del potencial químico corresponde a una presión oscilatoria de la forma $\mu(x=0) = \mu_E \cos(\omega_f t)$, el gradiente de potencial químico medido en la interfase, equivalente a un gradiente de presión, es una función periódica. En la Fig. 4.10 se muestran dos ejemplos de gradientes de potencial químico en la dirección axial, medidos en la interfase, como función del tiempo, para dos condiciones de frontera con distintas frecuencias.

El gradiente de presión en la interfase obtenido de los resultados de la integración numérica de la ecuación del modelo de campo, se puede expresar como una serie de Fourier. Al imponer un sólo modo en la condición de frontera, los términos relevantes de la serie corresponden a los de la frecuencia de forzamiento, a la que llamamos ω_f ,

$$\nabla \mu_x^{int}(t) = \frac{d\mu}{dx}\Big|_{int} = a\cos(\omega_f t) + b\sin(\omega_f t) = |\nabla \mu|_{int}\cos(\omega_f t - \psi).$$
(4.73)

En la ecuación 4.73, $|\nabla \mu|_{int} = [a^2 + b^2]^{1/2}$ es la amplitud de la oscilación del gradiente de presión en la interfase y $\psi = \arctan b/a$.



Figura 4.10: Gradiente del potencial químico en la dirección axial medido en la interfase como función del tiempo, para dos condiciones de frontera con igual amplitud, μ_E , pero diferente frecuencia, $\omega_1 = 0.003125$ y $\omega_2 = 2\omega_1$. Como referencia se muestran las amplitudes de las oscilaciones de los gradientes, $|\nabla \mu|_{int}^{\omega_1}$ y $|\nabla \mu|_{int}^{\omega_2}$.



Figura 4.11: Posición de la interfase como función del tiempo para dos condiciones de frontera con igual amplitud, μ_E , pero diferente frecuencia, $\omega_1 = 0.003125$ y $\omega_2 = 2\omega_1$. Como referencia se muestran las amplitudes de las oscilaciones de las posiciones de la interfase, $B_{H_{int}}^{\omega_1}$ y $B_{H_{int}}^{\omega_2}$.

La condición de frontera oscilatoria produce un movimiento periódico de la interfase. En la Fig. 4.11 se muestran, para las mismas condiciones de frontera utilizadas para la Fig. 4.10, las posiciones de la interfase como función del tiempo. Al igual que el gradiente de presión,

la posición de la interfase se puede expresar como una serie de Fourier y al imponer un sólo modo en la condición de frontera, los coeficientes relevantes de la serie son los que corresponden a los de la frecuencia del modo impuesto, esto es,

$$H_{int} = A\cos(\omega_f t) + B\sin(\omega_f t) = B_{H_{int}}\cos(\omega_f t - \zeta), \qquad (4.74)$$

en donde $B_{H_{int}} = [A^2 + B^2]^{1/2}$ y $\zeta = \arctan B/A$. Por lo tanto, de los resultados de la integración numérica del modelo de campo se obtienen los valores de $|\nabla \mu|_{int}$ y $B_{H_{int}}$, con

$$B_{H_{int}} = \frac{|K_{MC}(\omega_f)|}{\eta} \frac{|\nabla \mu|_{int}}{\omega_f}.$$
(4.75)

De la ecuación 4.75, se tiene que el cociente entre la amplitud de la posición de la interfase y la amplitud del gradiente de presión medido en la interfase está dado por:

$$\frac{B_{H_{int}}}{|\nabla\mu|_{int}} = \frac{M}{\omega_f \left[1 + (\alpha\omega_f)^2\right]^{1/2}}.$$
(4.76)

En la Fig. 4.12 se muestra con una línea punteada la relación dada por la ecuación 4.76. Los puntos corresponden a los resultados de la integración numérica del modelo de campo.



Figura 4.12: Cociente entre la amplitud de la oscilación de la posición de la interfase y la amplitud del gradiente de presión medido en la interfase, $B_{H_{int}}/|\nabla \mu|_{int}$. Los puntos corresponden a los resultados de la integración numérica de la ecuación de movimiento del modelo de campo (con $\alpha = 400$ y M = 1) para diversas condiciones de frontera con la misma amplitud, μ_E , y distintas frecuencias. La línea punteada corresponde a la ecuación 4.76.

La ecuación 4.76 tiene dos límites como función del producto $\alpha\omega$,

cuando
$$\alpha \omega_f \ll 1$$
 $\frac{B_{H_{int}}}{|\nabla \mu|_{int}} \sim \frac{M}{\omega_f}$ (4.77)

y cuando
$$\alpha \omega_f >> 1$$
 $\frac{B_{H_{int}}}{|\nabla \mu|_{int}} \sim \frac{M}{\alpha \omega_f^2}.$ (4.78)

En la Fig. 4.13 se muestra el logaritmo de la relación dada por la ecuación 4.76 como función del logaritmo de la frecuencia. Los puntos corresponden a los resultados de la integración numérica de la ecuación 4.32. Como referencia se muestran dos líneas con pendientes -1 y -2. En la Fig. 4.13 se puede observar que los resultados numéricos satisfacen las tendencias esperadas como función de la frecuencia, es decir, cuando el producto $\alpha\omega_f < 1$ la relación dada por la ecuación 4.76 es aproximadamente M/ω_f y cuando el producto $\alpha\omega_f > 1$ la relación dada por la ecuación 4.76 es aproximadamente $M/(\alpha\omega_f^2)$. Los parámetros utilizados son $\alpha = 400$ y M = 1. Por lo tanto, alrededor del valor $\omega = 0.0025$, cuyo logaritmo es -2.6, se tiene el cambio de comportamiento como función de la frecuencia.



Figura 4.13: Logaritmo de la relación $B_{H_{int}}/|\nabla \mu|_{int}$ como función del logaritmo de la frecuencia. Las líneas roja y verde punteadas son de referencia, las pendientes de las mismas son -1 y -2, respectivamente. Los puntos corresponden a los resultados de la integración numérica de la ecuación del modelo de campo, los parámetros utilizados son: $\alpha = 400$ y M = 1. Para estos parámetros, el valor $\alpha \omega_f = 1$, que para $\alpha = 400$ corresponde a $\omega = 0.0025$ (cuyo logaritmo es -2.6) separa los dos regímenes (vea las ecuaciones 4.77 y 4.78).

De la ecuación 4.75 se puede obtener una expresión para calcular la magnitud de la permeabilidad dinámica entre la viscosidad como función de la amplitud de la posición de la interfase y de la amplitud del gradiente de presión, esto es,

$$\frac{|K_{MC}(\omega)|}{\eta} = \frac{\omega B_{H_{int}}(\omega)}{|\nabla \mu(\omega)|_{int}}.$$
(4.79)

En la Fig. 4.14 se muestran con puntos la magnitud de la permeabilidad dinámica dividida entre la viscosidad como función del producto $\alpha\omega$ obtenida de los resultados de la integración numérica de la ecuación de movimiento del modelo de campo sustituidos en el lado derecho de la ecuación 4.79. La línea punteada corresponde a la ecuación 4.62. Dado a que en nuestro modelo de campo el parámetro α y la frecuencia impuesta en la condición de frontera se fijan de manera independiente, el resultado para la permeabilidad se puede obtener de dos formas: una de ellas es fijar un valor para el parámetro α y cambiar la frecuencia en la condición de frontera, este caso corresponde a los círculos azules en la gráfica; la otra, es fijar una frecuencia en la condición de frontera y cambiar el valor del parámetro α , este caso corresponde a los cuadrados rojos. En ambos casos, los resultados numéricos siguen la tendencia, como función del producto $\alpha\omega$, dada por la ecuación 4.62.



Figura 4.14: Magnitud de la permeabilidad entre la viscosidad como función del producto $\alpha\omega$, los puntos corresponden a los resultados de la integración numérica de la ecuación de movimiento del modelo de campo sustituidos en el lado derecho de la ecuación 4.79. Para los círculos se imponen condiciones de frontera de diferente frecuencia con un valor de $\alpha = 400$. Para los cuadrados se impone una condición de frontera con $\omega = 0.0025$ con diferentes valores del parámetro α . La línea punteada corresponde a la expresión analítica dada por la ecuación 4.62.

Una de las posibles causas de porqué los resultados numéricos no coinciden de manera exacta con los descritos por las expresiones analíticas para la magnitud de la permeabilidad (Fig. 4.14), es que la respuesta al forzamiento impuesto en la entrada del microcanal se mide en la interfase. Dicha respuesta es una función periódica que predominantemente se compone del modo impuesto en el forzamiento, sin embargo, la señal completa se compone de otros modos de menor amplitud, que no se tomaron en cuenta en el análisis de los resultados. Otra posible causa es que las expresiones analíticas se obtienen en el límite en que $\epsilon \to 0$, mientras que en la integración numérica se considera que el ancho de la interfase es igual a uno ($\epsilon = 1$), éste valor es igual a la distancia entre dos puntos de la malla ($\Delta x = 1$). Sin embargo, nuestros resultados son suficientemente buenos para saber que estamos en el límite en el que se puede estudiar el comportamiento dinámico de una interfase bien definida.

4.6. Paredes hidrofílicas, $A_s > 0$

Las longitudes características en los sistemas de microfluídica, del orden de 1-100 micras, hacen que las interacciones del fluido con la pared sean relevantes. En el modelo de campo la interacción del fluido con la pared se impone a través de las condiciones de frontera (vea la sección 4.4). Estudiamos el caso en el que las paredes del microcanal son hidrofílicas, esto es, el ángulo de contacto que se genera entre la superficie sólida y el fluido 1 es menor a 90°, como se aprecia en el esquema de la izquierda de la Fig. 4.3. La intensidad de la interacción del fluido con la pared es proporcional al valor del parámetro de mojado A_s , mientras más grande es el valor del parámetro A_s mayor es la intensidad de la interacción fluido-pared.



Figura 4.15: Posición de la interfase a distintos tiempos, los cuales cubren un periodo de la frecuencia impuesta en la condición de frontera, el color más obscuro indica un tiempo mayor. El valor del parámetro de mojado es 0.1. Para la gráfica de la izquierda el intervalo de tiempo es [62769-63789] y para la gráfica de la derecha es [63789-65319] de modo que ambas figuras cubren un ciclo completo de oscilación.

La condición de mojado provoca que la interfase se curve y por tanto su posición depende tanto de la dirección normal a las paredes como del tiempo, es decir, $H_{int} = H_{int}(z,t)$, como se observa en la Fig. 4.15. Con la finalidad de simplificar el análisis de los resultados obtenidos, promediamos la posición de la interfase en la dirección normal a las paredes y denotamos a este promedio como $\langle H_{int}(t) \rangle_z$.

Para un microcanal con paredes hidrofílicas encontramos que al imponer una presión oscilatoria en la entrada del microcanal, la posición promedio de la interfase, $\langle H_{int}(t) \rangle_z$, presenta tres comportamientos distintos como función del tiempo, dependiendo de la intensidad de la hidrofilicidad:

• Para valores pequeños del parámetro de mojado, la interfase oscila alrededor de una posición promedio constante. Por ejemplo, observe $\langle H_{int}(t) \rangle_z$, para $A_s = 0.006$ en la Fig. 4.16. Con la finalidad de mostrar claramente la oscilación de la posición de la interfase, para este valor del parámetro de mojado se muestra en la parte superior de la gráfica, $\langle H_{int}(t) \rangle_z$ en un intervalo de tiempo más pequeño que el de la gráfica completa.



Figura 4.16: Posición de la interfase, promediada en la dirección normal a las paredes, como función del tiempo para diferentes valores del parámetro de mojado. Para cada valor del parámetro de mojado se indica el valor correspondiente del promedio temporal del ángulo de contacto dinámico $\langle \theta_d(t) \rangle_t$ en grados.

• Para valores intermedios del parámetro de mojado, el fluido 1 avanza llenando el microcanal, la interfase oscila con la frecuencia impuesta en la condición de frontera y de manera espontánea surge además una frecuencia de modulación. Vea como ejemplos las curvas de $\langle H_{int}(t) \rangle_z$ para $A_s > 0.006$ en la Fig. 4.16.

• Para valores grandes del parámetro de mojado, el primer fluido avanza llenando el microcanal, la interfase oscila con la frecuencia impuesta en la condición de frontera y la modulación desaparece, como se observa en las curvas de $\langle H_{int}(t) \rangle_z$, para diferentes valores de A_s en la Fig. 4.17. Con la finalidad de mostrar claramente la oscilación de la posición de la interfase, para $A_s = 0.1$ se muestra en la parte inferior izquierda de la gráfica, $\langle H_{int}(t) \rangle_z$ en un intervalo de tiempo más pequeño que el de la gráfica completa.



Figura 4.17: Posición de la interfase, promediada en la dirección normal a las paredes, como función del tiempo para diferentes valores del parámetro de mojado. Para cada valor del parámetro de mojado se indica el valor correspondiente del promedio temporal del ángulo de contacto dinámico $\langle \theta_d(t) \rangle_t$ en grados.

Nuestros resultados indican que la dinámica de la interfase está determinada por una competencia entre el forzamiento pulsado y la intensidad de la interacción fluido-pared. Para valores pequeños del parámetro de mojado, el forzamiento pulsado domina la dinámica de la interfase y ésta oscila alrededor de un valor promedio constante, mientras que para valores grandes del parámetro de mojado la interacción hidrofílica del primer fluido domina la dinámica la dinámica de la interfase provocando que éste avance llenando el microcanal.

4.7. Ángulo de contacto y curvatura

Con la finalidad de analizar la dinámica de la interfase, calculamos algunas de las características asociadas a la interacción del fluido con la pared, como el ángulo de contacto y la curvatura.

El forzamiento pulsado produce un ángulo de contacto dinámico, $\theta_d(t)$, cuyo promedio

temporal depende de la intensidad de la interacción del fluido con la pared, como se observa en la Fig. 4.18a. En ésta se muestra como referencia el valor del ángulo de contacto estático, θ_e , con una línea punteada [78]. En la Fig. 4.18b se muestra el promedio temporal del coseno del ángulo de contacto dinámico, $\langle \cos[\theta_d(t)] \rangle_t$, como función del parámetro de mojado, la línea punteada corresponde al coseno del ángulo de contacto estático, esto es, $\cos [\theta_e]$. En ésta, se puede observar que al aumentar el valor del parámetro de mojado, se incrementa el valor del promedio temporal del coseno del ángulo de contacto dinámico y por lo tanto, aumenta la fuerza capilar. Para cada valor del parámetro de mojado el ángulo de contacto estático es menor al ángulo de contacto dinámico, lo que siguiere que el forzamiento dinámico cambia de manera efectiva el grado de hidrofílicidad de la pared, haciendo la interacción menos hidrofílica que en el caso estático



Figura 4.18: a) Promedio temporal del ángulo de contacto dinámico como función del parámetro de mojado. b) Promedio temporal del coseno del ángulo de contacto dinámico como función del parámetro de mojado.

La curvatura de la interfase se puede calcular mediante la siguiente expresión [46],

$$\kappa\left(z,t\right) = -\frac{\frac{d^{2}H_{int}\left(z,t\right)}{dz^{2}}}{\left[1 + \left(\frac{dH_{int}\left(z,t\right)}{dz}\right)^{2}\right]^{3/2}}.$$
(4.80)

Encontramos una relación entre la curvatura promediada en la dirección normal a las paredes, $\langle \kappa(t) \rangle_z$, y el coseno del ángulo de contacto dinámico, cos $[\theta_d(t)]$, la cual nos permitió identificar que la separación entre las placas, b, es el número de puntos de red en la dirección normal a las paredes. Dicha relación está dada por:

$$\langle \kappa \rangle_z = \frac{1}{b} \int_0^b \kappa\left(z\right) dz = -\frac{1}{b} \int_0^b \frac{d}{dz} \left(\frac{dH_{int}}{dz}\right) dz = -\frac{1}{b} \left[\left(\frac{dH_{int}}{dz}\right) \bigg|_b - \left(\frac{dH_{int}}{dz}\right) \bigg|_0 \right],$$

que con las identificaciones $\left. \frac{dH_{int}}{dz} \right|_b = \cos[\theta_d] \operatorname{y} \left. \frac{dH_{int}}{dz} \right|_0 = -\cos[\theta_d]$, se puede escribir como:

$$\langle \kappa \rangle_z = -\frac{2\cos\left[\theta_d\right]}{b}.\tag{4.81}$$

Calculamos de manera independiente el ángulo de contacto dinámico y la curvatura promedio de la interfase. En la Fig. 4.19 se muestra, para diferentes valores del parámetro de mojado, el valor del promedio temporal del coseno del ángulo de contacto dinámico multiplicado por 2/b, como función del negativo del promedio espacial y temporal de la curvatura. Para que la pendiente de esta gráfica fuera igual a uno, necesitamos un valor b = 19. Este corresponde al número de puntos de red en la dirección normal a las paredes que se usó en la integración numérica.

El coseno del ángulo de contacto dinámico y, por lo tanto, la curvatura promedio de la interfase dependen del parámetro de mojado. Mientas más grande es el valor del parámetro de mojado, mayores son el coseno del ángulo de contacto dinámico y la curvatura de la interfase. Ambas variables están relacionadas con la intensidad de la interacción del fluido con la pared.



Figura 4.19: Promedio temporal del coseno del ángulo de contacto dinámico multiplicado por 2/b como función del correspondiente valor del promedio espacial y temporal de la curvatura. Para estos resultados b = 19. Este valor corresponde al número de puntos de red en la dirección z.

4.8. Exponente del avance global

Calculamos el exponente del avance global del cuadrado de la posición de la interfase, ν , esto es, realizamos un ajuste en escala logarítmica de $\langle H_{int}(t) \rangle_z^2 - H_0^2 \sim t^{\nu}$, en donde, H_0 es la posición inicial de la interfase. Para valores del parámetro de mojado pequeños $(A_s \leq 0.006)$ en los que globalmente la interfase no avanza, el exponente del avance global es igual a cero y la dinámica de la interfase está dominada por el forzamiento pulsado. Para valores del parámetro de mojado grandes $(A_s > 0.02)$ el valor de ν es cercano a 1, es decir, $H(t)^2 \sim t$ lo que corresponde a una interfase cuyo exponente de avance global es el de la ley de Washburn, en tales casos la dinámica de la interfase está dominada por la interacción hidrofílica del fluido 1 con la pared. Para valores de mojado intermedios existe un comportamiento transitorio de los exponentes que tiende al exponente de Washburn conforme $t \to \infty$.

4.9. Tensión superficial

Para valores grandes del parámetro de mojado, encontramos que el exponente del avance global de la interfase es el de la ley de Washburn (ecuación 4.22), que para la geometría del microcanal se puede escribir como [83]:

$$H(t) = \left[H_0^2 + \frac{\sigma b \cos[\theta_a]}{3\eta} t\right]^{1/2},$$
(4.82)

en donde, θ_a es el ángulo de imbibición.

De la identificación de parámetros dada por las ecuaciones 4.66, la ley de Washburn se puede escribir en términos de las variables del modelo de campo, como:

$$H(t) = \left[H_0^2 + \frac{4\sigma M \cos[\theta_a]}{b}t\right]^{1/2}.$$
(4.83)

Con la finalidad de obtener el valor de la tensión superficial, σ , de los resultados de la integración numérica del modelo de campo, consideramos que en los casos en los que la intensidad de la interacción fluido-pared es grande, la ecuación 4.83 es válida para describir la dinámica global de la interfase, si se remplaza $\cos[\theta_a]$ por $\langle \cos[\theta_d(t)] \rangle_t$, en donde θ_d es el ángulo de contacto dinámico obtenido de la integración numérica; y H(t) se remplaza por $\langle H_{int}(t) \rangle_z$, esto es:

$$\langle H_{int}(t) \rangle_z = \left[H_0^2 + \frac{4\sigma M \langle \cos[\theta_d(t)] \rangle_t}{b} t \right]^{1/2}.$$
(4.84)

Ésta se puede escribir como:

$$\log[\langle H_{int}(t)\rangle_z^2 - H_0^2] = \log[t] + \log\left[\frac{4\sigma M \langle \cos[\theta_d(t)]\rangle_t}{b}\right]$$

De un ajuste lineal de $\log[\langle H_{int}(t) \rangle_z^2 - H_0^2] = \nu \log[t] + \log[c]$, se tiene que $c = \frac{4\sigma M \langle \cos[\theta_d(t)] \rangle_t}{b}$. Tanto el valor de c como el de ν se calculan del ajuste lineal. Este último valor corresponde al exponente del avance global de la interfase. En la gráfica de la Fig. 4.20a se muestra como ejemplo dicho ajuste, para $A_s = 0.5$, del cual se obtuvo que $\nu = 0.996$ y $\log[c] = -1.255$.



Figura 4.20: a) La línea negra corresponde al $\log[\langle H_{int}(t) \rangle_z^2 - H_0^2]$ como función del $\log[t]$ para $A_s = 0.5$, la línea roja corresponde a la recta que resulta de un ajuste lineal, la pendiente de la misma es 0.996 y su ordenada al origen es -1.255. A partir de este último dato se puede calcular el valor de la tensión superficial. b) Tensión superficial como función del valor del parámetro de mojado. Con una línea azul se muestra el valor promedio de la tensión superficial en el intervalo $A_s[0.2-0.5]$. Adoptamos este promedio como el valor de la tensión superficial del sistema, esto es, $\sigma \approx 0.23$.

Realizamos el ajuste mencionado para diferentes posiciones promedio de la interfase correspondientes a diferentes valores de A_s , con lo cual calculamos para cada valor del parámetro de mojado un valor de σ , esto es, $\sigma = \frac{b c}{4M\langle\cos[\theta_d(t)]\rangle_t}$. Los valores de σ obtenidos como función del parámetro de mojado se muestran en la Fig. 4.20b para valores de A_s mayores a 0.2, para estos resultados se tiene que M = 1 y b = 19. Como puede observarse, el valor de σ es prácticamente constante. En el rango de valores $A_s[0.2 - 0.5]$ calculamos el valor promedio de la tensión superficial y obtenemos $\sigma \approx 0.23$. Este valor se indica en la Fig. 4.20b con una linea punteada azul, el cual tomamos como el valor de la tensión superficial del sistema.

4.10. Dinámica para valores altos del parámetro de mojado

Para valores del parámetro de mojado grandes se tiene que la interfase avanza con el exponente de Washburn. Esto indica que la dinámica de la interfase está dominada por la hidrofilicidad del microcanal.

En la Fig. 4.21 se muestran, con líneas punteadas, las posiciones de la interfase como función del tiempo dadas por la ecuación 4.84 con $\sigma = 0.23$, para los diferentes valores del parámetro de mojado utilizados en la Fig. 4.17. Con líneas continuas se muestran los resultados obtenidos para la posición de la interfase, de la integración numérica del modelo de campo. Ambas posiciones son muy similares, lo cual implica que la ecuación 4.84 es una buena aproximación. En la gráfica de la derecha se muestran los resultados anteriores en

escala logarítmica. En ésta se muestra como referencia una línea con pendiente 1/2. En este régimen la dinámica global de la interfase puede ser descrita a través de una ley tipo Washburn para el valor promedio (en z) de la posición de la interfase.



Figura 4.21: Las líneas punteadas corresponden a posiciones de la interfase como función del tiempo, dadas por la ecuación 4.84 con $\sigma = 0.23$. Las lineas continuas corresponden a las posiciones promedio de la interfase como función del tiempo obtenidas de la integración numérica del modelo de campo. Para cada valor del parámetro de mojado se indica el valor correspondiente del promedio temporal del ángulo de contacto dinámico $\langle \theta_d(t) \rangle_t$ en grados.

4.11. Dinámica para valores intermedios del parámetro de mojado

Para mojados intermedios el fluido 1 avanza llenando el microcanal, la interfase oscila con la frecuencia impuesta en la condición de frontera y de manera espontánea surge además una frecuencia de modulación. En la Fig. 4.16 se puede observar que, para $A_s > 0.006$, el periodo de la modulación disminuye al aumentar el valor del parámetro de mojado. Denotamos a la frecuencia asociada a dicho periodo como ω_m y la llamamos frecuencia de modulación.

Con la finalidad de calcular el valor de la frecuencia de modulación, sustraemos el comportamiento global a la posición promedio de la interfase, es decir, calculamos $\langle H(t)_{int} \rangle_z - at^{\nu'}$, en donde, $a \neq \nu'$ son constantes que se obtienen de un ajuste lineal de $\langle H(t)_{int} \rangle_z$ como función del tiempo en escala log-log. En la gráfica de la Fig. 4.22 se puede observar con una línea azul continua este resultado para $A_s = 0.01$. Posteriormente quitamos el efecto asociado a la frecuencia impuesta en la condición de frontera. Para ello, sustituimos cada punto en el tiempo de la función $\langle H(t)_{int} \rangle_z - at^{\nu'}$ por su promedio en un intervalo de tiempo igual al periodo de la frecuencia de forzamiento, $T_f = 2\pi/\omega_f$, es decir, calculamos $\frac{1}{T_f} \int_t^{t+T_f} \left(\langle H(t)_{int} \rangle_z - at^{\nu'} \right) dt$. El resultado se puede observar en la gráfica de la Fig. 4.22 con una línea negra punteada. Finalmente obtenemos la serie de Fourier de este último resultado, en la cual los coeficientes relevantes corresponden a los de la frecuencia de modulación.



Figura 4.22: Posición promedio de la interfase sin el comportamiento global para $A_s = 0.01$. Con una línea negra punteada se muestra el resultado de promediar, para cada punto en el tiempo, los datos de la línea azul en un intervalo de tiempo igual al periodo de la frecuencia de forzamiento.

Calculamos la frecuencia de modulación como función del parámetro de mojado para distintas frecuencias de forzamiento. El resultado se muestra en la Fig. 4.23. La modulación del movimiento desaparece al aumentar el valor del parámetro de mojado, como se observa en la Fig. 4.17. Por lo tanto, se considera un rango de valores de A_s en el cual se puede calcular fácilmente la frecuencia de modulación. En la Fig. 4.23 se puede observar que la frecuencia de modulación crece al aumentar el valor del parámetro de mojado y que no hay una dependencia clara con la frecuencia de forzamiento. Por otro lado, encontramos que la



Figura 4.23: Frecuencia de modulación como función del parámetro de mojado para distintos valores de la frecuencia de forzamiento. La escala superior corresponde al promedio temporal del ángulo de contacto dinámico $\langle \theta_d(t) \rangle$ en grados.

frecuencia de modulación cambia con el valor del parámetro α , asociado a la inercia del sistema. Este resultado se muestra para diferentes frecuencias de forzamiento en la Fig. 4.24. En ésta se puede observar que la frecuencia de modulación crece al aumentar el valor de α .



Figura 4.24: Frecuencia de modulación como función del parámetro α para distintos valores de la frecuencia de forzamiento.

A partir de un análisis dimensional encontramos tres frecuencias características del sistema dadas por:

$$\omega_{\eta} = \frac{\eta}{\rho b^2}, \tag{4.85}$$

$$\omega_{\sigma/\eta} = \frac{\sigma}{b\eta} \quad y \tag{4.86}$$

$$\omega_p^2 = \frac{|p_{a_{int}}|}{\rho b^2}, \qquad (4.87)$$

en donde, $p_{a_{int}}$ es la presión capilar si consideramos que la presión en el aire es cero. Con ayuda de éstas obtenemos una expresión para la frecuencia de modulación que involucra la frecuencia viscosa (ecuación 4.85), una frecuencia asociada a la presencia de una interfase a través de la tensión superficial (ecuación 4.86) y una frecuencia asociada a la presión capilar (ecuación 4.87), esto es:

$$\omega_m = \left(\frac{\omega_p}{\omega_\eta}\right)^{1/2} \omega_{\sigma/\eta} = \left(\frac{|p_{a_{int}}|\rho b^2}{\eta^2}\right)^{1/2} \frac{\sigma}{b\eta}.$$
(4.88)

En términos de las variables del modelo de campo las frecuencias características están dadas por:

$$\omega_{\eta} = \frac{1}{10\alpha}, \tag{4.89}$$

$$\omega_{\sigma/\eta} = \frac{12M\sigma}{b^3} \quad y \tag{4.90}$$

$$\omega_p^2 = \frac{6M|\mu_{a_{int}}|}{5\alpha b^2}.$$
(4.91)

Por lo tanto, la frecuencia de modulación (ecuación 4.88) toma la forma:

$$\omega_m = \left(\frac{120\alpha M |\mu_{a_{int}}|}{b^2}\right)^{1/2} \frac{12M\sigma}{b^3}.$$
(4.92)

Del perfil de potencial químico $\mu(x, z, t)$, equivalente a un perfil de presión, calculamos el promedio temporal y espacial del potencial químico medido antes de la interfase, $\mu_{a_{int}}$, para diferentes valores del parámetro de mojado y del valor de α . Los resultados se pueden observar en las gráficas de la Fig. 4.25.



Figura 4.25: Valor del promedio temporal y espacial de la presión medida antes de la interfase a) como función del parámetro de mojado y b) como función de α .

Utilizando tanto el valor de $\mu_{a_{int}}$ como los parámetros del modelo de campo, calculamos la frecuencia de modulación dada por la ecuación 4.88. Comparamos el valor de esta frecuencia con el que se obtiene a partir de la posición de la interfase. El resultado se puede observar en la Fig. 4.26, en la cual, se muestra como referencia una línea con pendiente m = 1, que corresponde al caso en que ambas frecuencias son iguales. En dicha gráfica, los puntos corresponden a un valor de α constante y diferentes valores del parámetro de mojado, y los cuadrados corresponden a un valor del parámetro de mojado constante y diferentes valores de α , ambos para diferentes frecuencias del forzamiento. Encontramos que la expresión propuesta para la frecuencia de modulación reproduce de forma razonable la frecuencia de las integraciones numéricas del modelo de campo, ya que la pendiente es muy cercana a uno, esto es, m = 1.0066 con un coeficiente de correlación de R = 0.973.



Figura 4.26: Frecuencia de modulación obtenida de la posición de la interfase como función de la frecuencia de modulación que se obtiene de la ecuación 4.88. Los puntos corresponden a un valor α constante y diferentes valores del parámetro de mojado, y los cuadrados corresponden a un valor del parámetro de mojado constante y diferentes valores de α , ambos para diferentes frecuencias del forzamiento pulsado. La línea se muestra como referencia y corresponde al caso en que ambas frecuencias son idénticas.

Nuestros resultados indican que para valores intermedios del parámetro de mojado la modulación espontánea del movimiento se deriva de la combinación de tres efectos, el del mojado, a través de la presión capilar, el de la viscosidad y el de la tensión superficial.

4.12. Efecto de la intensidad del forzamiento

Los resultados anteriores se obtuvieron para una amplitud constante del forzamiento impuesto en la entrada del microcanal, $|\mu(x = 0)|$. El efecto de cambiar dicha amplitud muestra un comportamiento muy rico que se puede resumir en el diagrama de la Fig 4.27. En éste se muestran: con puntos rojos, los pares de parámetros (amplitud de forzamiento, mojado) que corresponden al régimen en el que domina el forzamiento; con cuadrados verdes los pares correspondientes al régimen en el que domina el mojado; y con triángulos azules, los pares correspondientes al régimen en el que hay una competencia entre el forzamiento y el mojado, en éste último régimen se observa una frecuencia de modulación.



Figura 4.27: Diagrama en el que se muestran las diferentes regiones para la dinámica de la interfase como función de la amplitud del forzamiento y del parámetro de mojado.

4.13. Conclusiones y perspectivas

Desarrollamos un nuevo modelo de campo que en límite de una interfase bien definida reproduce un término relacionado a la inercia del sistema. Este término se vuelve relevante cuando se desean estudiar movimientos pulsados a frecuencias arbitrarias. Una de las principales ventajas de nuestro modelo es que evita el problema de fronteras libres y que su solución numérica se puede implementar de manera sencilla. Además, en este tipo de formulación, se pueden introducir interacciones del fluido con la pared, a través de las condiciones de frontera del sistema. Esto abre la posibilidad de estudiar sistemas con geometrías arbitrarias, en los que además, se pueden tener paredes con propiedades superficiales diferentes.

Encontramos que en el límite de una interfase bien definida nuestro modelo reproduce una ley de Darcy generalizada para la velocidad de la interfase, en donde la permeabilidad analítica coincide de manera razonable con la permeabilidad de un fluido Newtoniano.

Para el caso en el que no se tienen interacciones fluido-pared, la dinámica del bulto de uno de los fluidos es igual a la dinámica de la interfase, ya que en ausencia de curvatura el efecto de la interfase no afecta la dinámica del fluido (al menos en la aproximación de equilibrio local). Esta consideración nos permitió encontrar identificaciones entre las variables del modelo mesoscópico y del modelo macroscópico.

Por otro lado, para un forzamiento pulsado y un microcanal neutro, la integración numérica

de nuestro modelo de campo, confirma que la permeabilidad dinámica es la del límite de una interfase bien definida.

Estudiamos el movimiento de una interfase en un canal hidrofílico al imponer un forzamiento pulsado y encontramos tres diferentes comportamientos para la dinámica de la misma, los cuales corresponden a diferentes régimenes como función de la hidrofilicidad:

- Cuando el parámetro de hidrofilicidad es pequeño, la dinámica de la interfase está dominada por el forzamiento pulsado y la interfase oscila con la frecuencia del forzamiento alrededor de una posición promedio constante.
- Para valores intermedios del parámetro de hidrofilicidad, la interfase avanza mientras oscila, con la frecuencia impuesta por el forzamiento pulsado, y de manera espontánea surge además una frecuencia de modulación. Desarrollamos una expresión para la frecuencia de modulación del movimiento, la cual se derivó de la combinación de tres frecuencias características: la de mojado, la viscosa y una frecuencia asociada a la tensión superficial.
- Para valores grandes del parámetro de mojado, encontramos que la dinámica de la interfase está dominada por la hidrofilicidad de las paredes y que dicha dinámica puede ser descrita a través de una ley tipo Washburn.

Esperamos que este nuevo modelo sea una herramienta teórico-computacional para el diseño y estudio de nuevos dispositivos de microfluídica en los que existan flujos bifásicos.

Carátulas de las publicaciones derivadas de este trabajo



tending and contracting blood vessels (e.g., it pro-

duces the pulse that can be felt in the wrist) and

producing changes in blood pressure and flow in time

and space. These changes are determined by physical

properties of the cardiovascular system, some of which

are altered by disease; e.g., heart contraction, arterial

stiffness, and peripheral vascular resistance. Therefore,

the shapes of pressure and flow contours (also called

pulse waves) measured at a given arterial site carry

valuable information about the functionality of the

cardiovascular system. However, it is not clear yet

what is the relative role of physical properties of the

heart, large arteries and smaller blood vessels in gen-

erating arterial pulse waves in normal conditions or

to study arterial blood flow. Lumped parameter zero-

dimensional (0-D) models, group the properties of the cardiovascular system without considering its spatial

characteristics. They are described by ordinary differ-

ential equations and, hence, provide a computationally

inexpensive and mathematically simple framework to study whole-system dynamics.^{13,21,46,50,52} However, they are not suitable for studying pulse wave propa-

gation phenomena. 0-D accumulated and one-dimensional (1-D) models can accurately describe pulsatile

blood flow in the arterial network while keeping the

computational cost down.^{1,4,6,7,20,27,29,32,33,35,39,41,47,54}

Three-dimensional (3-D) techniques are used to describe complex 3-D flow features and their interaction with the vessel wall, such as those observed in stenosis

Different modelling approaches have been proposed

with diseases such as hypertension.

A Novel Analytical Approach to Pulsatile Blood Flow in the Arterial Network

JOAQUÍN FLORES ,¹ JORDI ALASTRUEY,² and EUGENIA CORVERA POIRÉ^{1,3}

¹Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, 04510 Mexico, D.F., Mexico; ²Division of Imaging Sciences and Biomedical Engineering, St. Thomas' Hospital, King's College London, London SE1 7EH, UK; and ³Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, Diagonal 647, 08028 Barcelona, Spain

(Received 4 March 2016; accepted 20 April 2016; published online 2 May 2016)

Associate Editor Umberto Morbiducci oversaw the review of this article.

Abstract-Haemodynamic simulations using one-dimensional (1-D) computational models exhibit many of the features of the systemic circulation under normal and diseased conditions. We propose a novel linear 1-D dynamical theory of blood flow in networks of flexible vessels that is based on a generalized Darcy's model and for which a full analytical solution exists in frequency domain. We assess the accuracy of this formulation in a series of benchmark test cases for which computational 1-D and 3-D solutions are available. Accordingly, we calculate blood flow and pressure waves, and velocity profiles in the human common carotid artery, upper thoracic aorta, aortic bifurcation, and a 20artery model of the aorta and its larger branches. Our analytical solution is in good agreement with the available solutions and reproduces the main features of pulse waveforms in networks of large arteries under normal physiological conditions. Our model reduces computational time and provides a new approach for studying arterial pulse wave mechanics; e.g., the analyticity of our model allows for a direct identification of the role played by physical properties of the cardiovascular system on the pressure waves.

Keywords—1-D arterial haemodynamics, Pulse wave propagation, 1-D blood flow modelling, Generalized Darcy's model, Benchmark test cases.

INTRODUCTION

Pulsatile blood flow in the systemic arterial tree is generated by the contraction of the left ventricle (LV). The pulse wave propagates in the arterial tree dis-

and aneurysms.^{9,17,23,24,37,38,45,48} On the downside, using 3-D techniques to investigate arterial pulse wave propagation is computationally expensive.

Address correspondence to Eugenia Corvera Poiré, Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, 04510 Mexico, D.F., Mexico. Electronic mails: joaquin.flores.iq@ gmail.com, jordi.alastruey-arimon@kcl.ac.uk, and eugenia.corvera@ gmail.com

5th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering - CMBE2017 10–12 April 2017, United States P. Nithiarasu, A.M. Robertson (Eds.)

ANALYTICAL SOLUTIONS OF WAVEFORMS IN THE ARTERIAL NETWORK AND PRESSURE DECOMPOSITION ANALYSIS

J. Flores¹, J. Alastruey², and E. Corvera Poiré¹

¹Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Ciudad de México 04510, Mexico. joaquin.flores.iq@gmail.com,eugenia.corvera@gmail.com
²Imaging Sciences and Biomedical Engineering Division, King's College, St Thomas' Hospital, London, UK.jordi.alastruey-arimon@kcl.ac.uk

SUMMARY

We present analytical solutions of a 1-D dynamical theory of blood flow in networks of flexible vessels that is based on a generalized Darcy's theory. We explore the structure of such analytical solutions for single vessels and simple networks, and identify the role of the different contributions to the pressure wave in such systems. We also show how reducing our 1-D model to a simpler 0-D Windkessel-type model allows us to obtain analytically parameters related to the system compliance and resistance.

Key words: 1-D arterial haemodynamics; 1-D blood flow modelling; Generalized Darcy's model; Pulse wave propagation; Pressure decomposition.

1 INTRODUCTION

The pulse wave generated by the contraction of the left ventricle propagates in the arterial tree and produces changes in blood pressure and flow in time and space. These changes are determined by physical properties of the cardiovascular system, some of which are altered by disease. The shapes of pressure and flow contours carry valuable information about the functionality of the cardiovascular system. An analytical model of the aorta and large arteries would allow one, in principle, to investigate the role of individual physical properties of the cardiovascular system on pulse waveforms; and to identify properties responsible for pathological conditions that should be targeted for treatment.

We have recently presented a novel linear 1-D dynamical theory of blood flow in networks of flexible vessels [1], that is based on a generalized Darcy's theory [2, 3], and for which a full analytical solution exists in frequency domain (ω -domain). Our model has shown good agreement with existing 1-D and 3-D numerical schemes [4]. Our analytical solution captures the main features of pulse waveforms in large arteries and networks and it enables the understanding of relevant mechanisms.

Our aim in this work is to further explore the structure of such analytical solutions. We present the example of the upper thoracic aorta pressure decomposition, for which our analytical treatment allows us to identify the terms leading to some of the features of the pressure wave, such as the advancement of the dicrotic notch and the pressure decay during diastole.

Our aim is also to show that this type of analytical solutions can be reduced to simpler 0-D models of the Windkessel type, and that this allows one to know how the vessel parameters and the boundary conditions enter the system compliance and resistance.

2 METHODOLOGY

By assuming the vessel wall to be impermeable, blood to be a Newtonian fluid, of density ρ and viscosity η , and no-slip boundary conditions for the axial velocity at the average wall position, R_0 , conservation of momentum, in ω -domain, gives an expression for the local axial velocity of the fluid, that is linearly related to the pressure gradient along the flow direction x. Averaging such expression over the cross sectional area at a certain x, leads to a linear relation between the average flow, and

LEY DE DARCY GENERALIZADA PARA UN TUBO RÍGIDO

La derivación de las ecuaciones presentadas en este apéndice fueron tomadas de la tesis de licenciatura de Collepardo Guevara [84].

Las ecuaciones que describen el flujo pulsado en una geometría dada se pueden obtener a partir de las ecuaciones de balance de momento, la ecuación de continuidad y una ecuación constitutiva que describa al tipo de fluido que se desea estudiar. Con la finalidad de tener una relación lineal entre la velocidad y el gradiente de presión en el dominio de la frecuencia y dado que los números de Reynolds en los vasos que conforman las redes de flujo estudiadas son pequeños, despreciamos los términos convectivos de la ecuaciones de balance de momento, con ello dichas ecuaciones se reducen a:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p - \nabla \cdot \tau, \tag{A.1}$$

en donde, ρ es la densidad del fluido, **v** es el campo de velocidades del mismo, p es la presión y $\nabla \cdot \tau$ representa la divergencia del tensor de esfuerzos viscosos. Para nuestro estudio decidimos utilizar un fluido de Maxwell, el cual es el fluido más simple que presenta un comportamiento viscoelástico. Para dicho fluido la velocidad y el tensor de esfuerzos están relacionados por la ecuación:

$$t_r \frac{\partial \tau}{\partial t} + \tau = -\eta \nabla \mathbf{v},\tag{A.2}$$

en donde t_r es el tiempo de relajación de Maxwell, el cual es el cociente de la viscosidad, η , entre el módulo elástico, G; *i.e.* $t_r = \frac{\eta}{G}$. En el límite en el que el tiempo de relajación es cero, la ecuación A.2 se reduce a la ecuación constitutiva de un fluido Newtoniano, $\tau = \eta \nabla \mathbf{v}$.

Introducimos la ecuación de balance de momento (Ec. A.1) en la ecuación constitutiva de un fluido de Maxwell (Ec. A.2) y obtenemos,

$$t_r \ \rho \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial t^2} + \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -t_r \frac{\partial \nabla p}{\partial t} - \nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v}, \tag{A.3}$$

que es la ecuación diferencial para la velocidad de un fluido de Maxwell.

La ecuación A.3 es valida para cualquier geometría. Para nuestro estudio asumimos que las paredes de un vaso tienen una geometría cilíndrica con radio R_0 (vea la Fig. A.1). Además, consideramos que la velocidad radial es mucho más pequeña que la velocidad axial. En consecuencia, las ecuaciones A.3, se reducen a:

$$t_r \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} - t_r \frac{\partial^2 p}{\partial t \partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r}\right)$$
(A.4)

$$y \quad \frac{\partial p}{\partial r} = 0, \tag{A.5}$$

en donde, u es la velocidad en la dirección axial.



Figura A.1: Geometría utilizada para el desarrollo de las ecuaciones de tubo rígido.

La ecuación A.5 implica que la presión sólo depende de: x y t; y que se ajusta instantáneamente en cualquier punto en el área de la sección transversal.

En situaciones dinámicas, la ecuación A.4 se puede resolver utilizando la transformada de Fourier, la cual es una herramienta matemática que sirve para resolver algunas ecuaciones diferenciales de manera más sencilla. Una vez que se resuelve la ecuación en el dominio de Fourier se usa la transformada inversa para regresar la solución al dominio original.

A.1. Solución en el dominio de Fourier

Utilizamos la transformada de Fourier de acuerdo a la siguiente definición:

$$\hat{f}(r,\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(r,t) e^{i\omega t} dt, \qquad (A.6)$$

en donde ω es la frecuencia y la función $\hat{f}(r, \omega)$ es la transformada de Fourier de f(r, t). Denotaremos las funciones en el dominio de Fourier con gorro (^).

La transformada de Fourier inversa está dada por:

$$f(r,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(r,\omega) e^{-i\omega t} d\omega.$$
 (A.7)

En el dominio de Fourier la ecuación A.4 tiene la siguiente forma:

$$r^2 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial r^2} + r \frac{\partial \hat{u}}{\partial r} + k^2 r^2 \hat{u} = Br^2, \qquad (A.8)$$

en donde, por simplicidad de notación, hemos definido $k^2 = \frac{\rho}{\eta} (t_r \omega^2 + i\omega)$ y $B(x, \omega) = \left(\frac{1-i\omega t_r}{\eta}\right) \frac{d\hat{p}}{dx}$. La ecuación A.8 es una ecuación diferencial de Bessel, cuya solución general está dada por:

$$\hat{u}(x,r,\omega) = aJ_0(kr) + bN_0(kr) + \hat{u}^p(x,\omega),$$
 (A.9)

en donde J_0 es la función de Bessel de orden cero de primera clase y N_0 es la función de Bessel de orden cero de segunda clase. La solución particular, $\hat{u}^p(x,\omega)$, esta dada por:

$$\hat{u}^p = \frac{B}{k^2} = \frac{1}{i\omega\rho} \frac{d\hat{p}}{dx}.$$
(A.10)

Por tanto, la solución general para $\hat{u}(x, r, \omega)$ es,

$$\hat{u}(x,r,\omega) = aJ_0(kr) + bN_0(kr) + \frac{1}{i\omega\rho} \frac{d\hat{p}(x,\omega)}{dx}.$$
(A.11)

Con el fin de determinar los valores de las constantes $a \neq b$, imponemos las siguientes condiciones a la frontera: la velocidad axial, \hat{u} , tiene un valor finito en r = 0 y es igual a cero en la pared del tubo. De la condición de frontera $\hat{u}(r = 0) = finita$, se pude concluir que b = 0, ya que N_0 diverge. De la condición de frontera $\hat{u}(r = R_0) = 0$ y la ecuación (A.11), se tiene que

$$a = -\frac{1}{i\omega\rho J_0(kR_0)}\frac{d\hat{p}}{dx}.$$
(A.12)

Al sustituir los valores de $a \ge b$ en la ecuación A.11, obtenemos

$$\hat{u} = -\frac{K_L(r,\omega)}{\eta} \frac{\partial \hat{p}}{\partial x},\tag{A.13}$$

en donde, K_L es la permeabilidad dinámica local y está dada por:

$$K_L(r,\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{J_0(kr)}{J_0(kR_0)} \right].$$
(A.14)

La transformada inversa de Fourier de la ecuación A.13 permite obtener los perfiles de velocidad u(x, r, t) en el dominio del tiempo.

Para obtener una ley de Darcy generalizada promediamos la ecuación A.13 en el área de la sección transversal,

$$\langle \hat{u} \rangle = -\frac{\langle K_L(r,\omega) \rangle}{\eta} \frac{\partial \hat{p}}{\partial x},$$
 (A.15)

en donde

$$\langle K_L(r,\omega)\rangle = K(\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{\langle J_0(kr)\rangle}{J_0(kR_0)} \right].$$
 (A.16)

El promedio de la función de Bessel de orden cero $\langle J_0(kR_0) \rangle$ que da en términos de la función de Bessel de primer orden, J_1 , esto es:

$$\langle J_0(kr)\rangle = \frac{1}{\pi R_0^2} \int_0^{R_0} 2\pi r J_0(kr) \ dr = \frac{2}{k^2 R_0^2} \int_0^{kR_0} x \ J_0(x) \ dx = \frac{2J_1(kR_0)}{kR_0}.$$
 (A.17)

Al sustituir la ecuación A.17 en la ecuación A.16, obtenemos la permeabilidad dinámica, $K(\omega)$, para un tubo rígido, esto es,

$$K(\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{2J_1(kR_0)}{kR_0 J_0(kR_0)} \right].$$
 (A.18)

La permeabilidad dinámica es una medida de la resistencia a fluir de algún fluido en un medio en particular, es decir, dado un gradiente de presión, una permeabilidad grande implica una mayor magnitud de flujo y viceversa.

PARÁMETROS DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA DE WINDKESSEL

В

Este apéndice contiene las ecuaciones utilizadas para calcular los parámetros, R_1 , $R_2 \ge C_{_{Wk}}$ de las condiciones de frontera del modelo de Windkessel (ver Fig. B.1). El método para calcular dichos parámetros fue tomado de las referencias [13] y [55].



 $\begin{array}{c|c} & & & & \\ & & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & & \\ & & & \\ & & & & \\ & & &$

Empleando valores conocidos de la presión diastólica, p_d , sistólica, p_s y del promedio del flujo incidente, \overline{Q}_{in} , correspondientes a un cierto modelo de red, se calcula un estimado inicial de los parámetros R_2 y C_{wk} de cada modelo de Windkessel acoplado a un vaso terminal. Para ello se calcula un estimado inicial de la resistencia periférica total de la red, esto es,

$$R_T = \frac{p_m - p_{out}}{\overline{Q}_{in}},\tag{B.1}$$

en donde, $p_m = p_d + \frac{1}{3}(p_s - p_d)$ es la presión media.

La resistencia periférica total de cada condición de frontera acoplada al vaso terminal j, $R_T^j = R_1^j + R_2^j$, se calcula con el porcentaje del flujo de entrada que sale del vaso terminal j, Q_{out}^j , esto es,

$$R_T^j = R_T \frac{\bar{Q}_{in}}{Q_{out}^j},\tag{B.2}$$

de modo que la suma de las resistencias periféricas totales de los modelos de Windkessel es igual a la resistencia periférica total de la red, es decir:

$$\frac{1}{R_T} = \sum_{j=1}^m \frac{1}{R_T^j} = \sum_{j=1}^m \frac{1}{R_1^j + R_2^j},$$
(B.3)

en donde, m es el número de vasos terminales de la red.

Con la finalidad de reproducir de manera adecuada la reflexión de ondas en los vasos terminales, la primera resistencia del modelo de Winkessel acoplado al vaso terminal j, R_1^j , se fija igual a la impedancia característica del vaso terminal j, esto es,

$$R_1^j = \frac{\rho c_d^j}{A_d^j},\tag{B.4}$$

en donde, ρ es la densidad de la sangre, A_d^j es el área en diástole, $c_d^j = \left(\frac{2E^jh^j}{3\rho r_d^j}\right)^{1/2}$ es la velocidad de propagación de la onda con E^j el modulo elástico, h^j el espesor y r_d^j el radio en diástole, correspondientes al vaso j. La segunda resistencia del modelo de Windkessel acoplado al vaso terminal j, se puede calcular como:

$$R_2^j = R_T^j - R_1^j. (B.5)$$

La distensibilidad total del sistema, C_T , se puede calcular de dos maneras. La primera es utilizando la constante temporal del decaimiento de la presión en diástole, τ , (la cual se determina de señales de presión medidas *in vivo*), esto es:

$$C_T = \frac{\tau}{R_T}.\tag{B.6}$$

La segunda manera es utilizando una aproximación del cambio del volumen con respecto al cambio en la presión, $C_T = \frac{dV}{dP}$, dada por:

$$C_T = \frac{Q_{max} - Q_{min}}{P_s - P_d} \Delta t, \tag{B.7}$$

en donde, Q_{max} y Q_{min} corresponden a los valores del máximo y del mínimo en la condición de frontera de flujo en la entrada y Δt es la diferencia temporal entre el tiempo correspondiente a Q_{min} y el tiempo correspondiente a Q_{max} .

La distensibilidad total del sistema tiene dos contribuciones, la de los vasos que conforman la red, C_c y la periférica, C_p , esto es:

$$C_T = C_c + C_p,\tag{B.8}$$
en donde,

$$C_{c} = \sum_{i=1}^{N} C_{seg}^{i} = \sum_{i=1}^{N} \frac{A_{d}^{i} l^{i}}{\rho \left(c_{d}^{i}\right)^{2}},$$
(B.9)

con l_i la longitud del vaso i y N el número total de vasos en la red. La distensibilidad periférica total, C_p , se puede calcular a partir de la ecuación B.8, esto es:

$$C_p = C_T - C_c. \tag{B.10}$$

Una vez que se conoce la distensibilidad periférica total, utilizando el porcentaje del flujo de entrada que sale de cada vaso terminal j, se calcula la distensibilidad periférica asociada a cada vaso terminal j, \tilde{C}_i , es decir,

$$\widetilde{C}_j = C_p \frac{Q_{out}^j}{\overline{Q}_{in}}.$$
(B.11)

Finalmente la distensibilidad del modelo de Windkessel asociado al vaso terminal j está dada por:

$$C^j_{_{Wk}} = \widetilde{C}_j \frac{R^j_T}{R^j_2}.\tag{B.12}$$

Utilizando la condición de frontera de flujo incidente, las ecuaciones del modelo de la red correspondiente y los valores de R_1^j e iniciales de R_2^j y C_{Wk}^j , se calcula la señal de presión en la entrada del sistema, de la cual se obtienen valores iniciales de la presión diastólica, p_d^0 , y sistólica, p_s^0 .

Los valores de los parámetros R_2^j y C_{Wk}^j se ajustan de modo que los valores de la presión diastólica y de la presión de pulso, $p_{pulso} = p_s - p_d$, de la señal de presión calculada con un cierto modelo, se acercan a los valores de la presión diastólica y de la presión de pulso conocidos para dicho modelo. Para ello se realiza un proceso de iteración en el que se utilizan expansiones a primer orden en series de Taylor de las ecuaciones B.1 y B.7. Para la ecuación B.1 el desarrollo se realiza alrededor de la presión media, esto es,

$$R_T^{n+1} = R_T^n + \frac{\Delta p_m}{\overline{Q}_{in}},\tag{B.13}$$

en donde, n denota el paso de iteración y $\Delta p_m = p_d - p_d^n$, es una aproximación de la diferencia de las presiones medias, p_d^n es el valor en la iteración n de la presión diastólica de la señal de presión calculada. El valor inicial de la resistencia total de la red R_T^0 está dado por la ecuación B.1. Para la ecuación B.7 el desarrollo se realiza alrededor de la presión de

pulso, esto es,

$$C_T^{n+1} = C_T^n - \frac{Q_{max} - Q_{min}}{\left(p_{pulso}^n\right)^2} \Delta t \Delta p_{pulso}^n, \tag{B.14}$$

en donde, $\Delta p_{pulso}^n = p_{pulso} - p_{pulso}^n = (p_s - p_d) - (p_s^n - p_d^n)$. El valor inicial de la distensibilidad total del sistema, C_T^0 , está dado por la ecuación B.7.

Con los nuevos valores de la resistencia periférica total y de la distensibilidad total del sistema, se calculan, a través de las ecuaciones B.2 y B.5, nuevos valores para las resistencias periféricas R_2^j y a través de las ecuaciones B.10, B.11 y B.12 nuevos valores para la distensibilidad C_{wk}^j . Con ello se calcula una nueva señal de presión, de donde se obtienen nuevos valores de la presión diástolica y sistólica. El proceso de iteración se detiene cuando tanto la diferencia entre la presión diastólica calculada y conocida como la diferencia entre la presión de pulso calculada y conocida son menores al 1%.

Para el modelo de la aorta y sus principales ramificaciones se utilizó la siguiente distribución del flujo de entrada en cada vaso terminal.

Vaso terminal	% del flujo de entrada
11. Braquiocefálica	10.40
12. Carótida Com. I.	2.14
13. Subclavia I.	8.27
14. Celiaca	13.24
15. Mesentérica Sup.	15.97
16. Renal D.	13.15
17. Renal I.	13.15
18. Mesentérica Inf.	2.16
19. Ilíaca Com. D.	10.76
20. Ilíaca Com. I.	10.76

Tabla B.1: Distribución del flujo de entrada que sale de los vasos terminales.

Los valores se tomaron de la referencia [13], Xiao et al.

С

MODELO DE LA AORTA COMPLETA

En este apéndice describimos la solución analítica del modelo de la aorta completa. Dicho modelo consiste de 20 vasos los cuales representan a la aorta torácica y sus principales ramificaciones. A la entrada de la aorta ascendente, se impone como condición de frontera una señal de flujo medida *in vivo*, $Q_{in}(t)$. Los vasos terminales se acoplan a modelos de Windkessel de tres elementos, los cuales representan la presión y el flujo en los vasos circundantes.

Utilizando la notación de la Fig. 3.11, el nodo 1 es de Tipo I; los nodos 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9 y 10 son de Tipo II; el nodo 4 es de Tipo III; y los nodos 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19 y 20 son del Tipo IV. De acuerdo con las ecuaciones 3.39, 3.40, 3.41 y 3.42, el sistema de ecuaciones para las presiones en los nodos en forma matricial, escrito términos de las funciones κ_1^i , κ_2^i y κ_3^i (definidas en las ecuaciones 3.38), está dado por: $\vec{p} = \mathbf{K}^{-1}\vec{Q}$. En donde \vec{p} es el vector de 20 elementos para las presiones en los nodos, \vec{Q} es el vector de condiciones de frontera de flujos de entrada. Para nuestro sistema el único elemento diferente de cero es el primero y está dado por $-\frac{\hat{Q}_{in}^1}{\cos(k_c^1l^1)}$. \mathbf{K}^{-1} es la matriz inversa de \mathbf{K} , ambas matrices pueden considerarse funciones respuesta del sistema. \mathbf{K} está dada por:

en donde

$$\begin{split} a &= \kappa_1^1 - \kappa_1^2 - \kappa_1^{11}, \qquad f = -\kappa_1^6 - \kappa_1^7 - \kappa_1^{15}, \qquad l = -\kappa_1^{11} - \frac{1}{z_{11}}, \qquad r = -\kappa_1^{16} - \frac{1}{z_{16}}, \\ b &= -\kappa_1^2 - \kappa_1^3 - \kappa_1^{12}, \qquad g = -\kappa_1^7 - \kappa_1^8 - \kappa_1^{16}, \qquad m = -\kappa_1^{12} - \frac{1}{z_{12}}, \qquad s = -\kappa_1^{17} - \frac{1}{z_{17}}, \\ c &= -\kappa_1^3 - \kappa_1^4 - \kappa_1^{13}, \qquad h = -\kappa_1^8 - \kappa_1^9 - \kappa_1^{17}, \qquad n = -\kappa_1^{13} - \frac{1}{z_{13}}, \qquad t = -\kappa_1^{18} - \frac{1}{z_{18}}, \\ d &= -\kappa_1^4 - \kappa_1^5, \qquad j = -\kappa_1^9 - \kappa_1^{10} - \kappa_1^{18}, \qquad p = -\kappa_1^{14} - \frac{1}{z_{14}}, \qquad u = -\kappa_1^{19} - \frac{1}{z_{19}}, \\ e &= -\kappa_1^5 - \kappa_1^6 - \kappa_1^{14}, \qquad k = -\kappa_1^{10} - \kappa_1^{19} - \kappa_1^{20}, \qquad q = -\kappa_1^{15} - \frac{1}{z_{15}}, \qquad v = -\kappa_1^{20} - \frac{1}{z_{20}}. \end{split}$$

La inversión simbólica de la matriz \mathbf{K} se realizó con Mathematica, lo cual tarda menos de un segundo en una computadora personal estándar. No obstante, la cantidad de texto requerida para escribir de forma explícita las presiones en los nodos y \mathbf{K}^{-1} es excesivamente larga para presentarla en un apéndice.

Una vez que se conocen las presiones en los nodos, se pueden obtener expresiones analíticas para calcular la presión, el flujo y los perfiles de velocidad. Para el vaso 1 esto se obtiene a partir de las ecuaciones 3.23, 3.24 y 3.25 y para el resto de los vasos a partir de las ecuaciones 3.17, 3.19 y 3.21. Por ejemplo, para el primer segmento aórtico, la presión en el primer nodo $\hat{p}^{[1]}$, es necesaria en las ecuaciones 3.23, 3.24 y 3.25, en donde $\hat{p}_o = \hat{p}^{[1]}$. Dicha presión está dada por:

$$\hat{p}^{[1]} = -\frac{n \kappa_2^3 \mathcal{F} 1 \, \hat{Q}_{\text{in}}^1}{\kappa_2^2 \kappa_2^{13} \cos(k_c^{11})} - \frac{B \, \hat{Q}_{\text{in}}^1}{\kappa_2^2 \kappa_2^{11} \kappa_2^{12} \cos(k_c^{1l})} \left[\frac{p \kappa_2^4 \kappa_2^5 \kappa_2^{12} \mathcal{F} 2}{d m \kappa_2^3 \kappa_2^{14}} - \frac{\mathcal{F} 1 \, \text{T9}}{d m \kappa_2^3 (\kappa_2^{13})^2} \right], \quad (C.1)$$

 con

$$\mathcal{F}1 = \frac{\mathcal{F}2 \text{ T7}}{n \kappa_2^4 \kappa_2^5 \kappa_2^{14}} + \frac{d \ q \ \kappa_2^6 \ \kappa_2^{13} \ \mathcal{F3}}{n \ \kappa_2^4 \ \kappa_2^5 \ \kappa_2^{15}},\tag{C.2}$$

$$\mathcal{F}2 = -\left(\frac{F \ \mathcal{F}3}{p \ \kappa_2^6 \ \kappa_2^{15}} + \frac{r \ \kappa_2^7 \ \kappa_2^{14} \ \mathcal{F}4}{p \ \kappa_2^6 \ \kappa_2^{16}}\right),\tag{C.3}$$

$$\mathcal{F}3 = -\left(\frac{G \ \mathcal{F}4}{q \ \kappa_2^7 \ \kappa_2^{16}} + \frac{s \ \kappa_2^8 \ \kappa_2^{15} \ \mathcal{F}5}{q \ \kappa_2^7 \ \kappa_2^{17}}\right),\tag{C.4}$$

$$\mathcal{F}4 = -\left(\frac{H\mathcal{F}5}{r\,\kappa_2^8\,\kappa_2^{17}} + \frac{t\,\kappa_2^9\,\kappa_2^{16}\mathcal{F}6}{r\,\kappa_2^8\,\kappa_2^{18}}\right),\tag{C.5}$$

$$\mathcal{F}5 = \frac{\mathrm{N3}}{\mathcal{M}} - \frac{J\mathcal{F}6}{s \kappa_2^9 \kappa_2^{18}},\tag{C.6}$$

$$\mathcal{F}6 = \frac{\mathrm{N1} - \mathrm{N2}}{\mathcal{M}}.\tag{C.7}$$

Estas cantidades contienen otra serie de expresiones dadas por:

$$N1 = dlmnpqrsu \ \kappa_2^2 \kappa_2^3 \kappa_2^4 \kappa_2^5 \kappa_2^6 \kappa_2^7 \kappa_2^8 \kappa_2^9 \kappa_2^{11} \left(\kappa_2^{12} \kappa_2^{14} \kappa_2^{15} \kappa_2^{16} \kappa_2^{17} \kappa_2^{18} \kappa_2^{20}\right)^2 \left(\kappa_2^{13}\right)^3 K,$$
(C.8)

$$N2 = dlmnpqrsv \ \kappa_2^2 \kappa_2^3 \kappa_2^4 \kappa_2^5 \kappa_2^6 \kappa_2^7 \kappa_2^8 \kappa_2^9 \kappa_2^{11} \left(\kappa_2^{12} \kappa_2^{14} \kappa_2^{15} \kappa_2^{16} \kappa_2^{17} \kappa_2^{19} \kappa_2^{20}\right)^2 \left(\kappa_2^{13} \kappa_2^{18}\right)^3, \quad (C.9)$$

N3 = dlmnpqrtuv
$$\kappa_2^2 \kappa_2^3 \kappa_2^4 \kappa_2^5 \kappa_2^6 \kappa_2^7 \kappa_2^8 \kappa_2^{11} \left(\kappa_2^{10} \kappa_2^{12} \kappa_2^{14} \kappa_2^{15} \kappa_2^{16} \kappa_2^{18} \kappa_2^{20}\right)^2 \left(\kappa_2^{13} \kappa_2^{17}\right)^3$$
, (C.10)

$$\mathcal{M} = -v \,\kappa_2^{18} \kappa_2^{20} \left(\kappa_2^{19}\right)^2 \mathrm{T1} + u \,\kappa_2^{20} \left(K \,\mathrm{T1} - t \,v \,\kappa_2^{17} \,\kappa_2^{18} \,\kappa_2^{20} \left(\kappa_2^{10}\right)^2 \mathrm{T2}\right), \tag{C.11}$$

$$T1 = \kappa_2^{20} J T2 - s t \kappa_2^{16} \kappa_2^{17} \kappa_2^{18} \kappa_2^{20} \left(\kappa_2^9\right)^2 T3,$$
(C.12)

$$T2 = \kappa_2^{18} H T3 - r \ s \ \kappa_2^{15} \ \kappa_2^{16} \ \kappa_2^{17} \kappa_2^{18} \left(\kappa_2^8\right)^2 T4, \tag{C.13}$$

$$T3 = \kappa_2^{17} \ G \ T4 - q \ r \ \kappa_2^{14} \ \kappa_2^{15} \ \kappa_2^{16} \kappa_2^{17} \left(\kappa_2^7\right)^2 T5, \tag{C.14}$$

$$T4 = \kappa_2^{16} \ F \ T5 - d \ p \ q \ \kappa_2^{13} \ \kappa_2^{14} \ \kappa_2^{15} \kappa_2^{16} \left(\kappa_2^6\right)^2 T6, \tag{C.15}$$

$$T5 = \kappa_2^{15} T6 T7 + n p \kappa_2^{12} \kappa_2^{14} \kappa_2^{15} \left(\kappa_2^4 \kappa_2^5 \kappa_2^{13}\right)^2 T8,$$
(C.16)

$$T6 = d \ m \ n \ \kappa_2^{11} \ \kappa_2^{14} \left(\kappa_2^3 \ \kappa_2^{12} \ \kappa_2^{13}\right)^2 A - \kappa_2^{14} \ T8 \ T9, \tag{C.17}$$

T7 =
$$p D - d \kappa_2^{13} (\kappa_2^{14})^2$$
, (C.18)

$$T8 = \kappa_2^{12} \kappa_2^{13} A B - l m \kappa_2^{11} \kappa_2^{12} \kappa_2^{13} (\kappa_2^2)^2, \qquad (C.19)$$

$$T9 = d \ C \ \kappa_2^{13} - n \ \kappa_2^{12} \kappa_2^{13} \left(\kappa_2^4\right)^2, \tag{C.20}$$

que a su vez contienen una tercera seria de definiciones dadas por,

$$A = a \ l - \left(\kappa_2^{11}\right)^2, \tag{C.21}$$

$$B = b \ m \ \kappa_2^{11} - \kappa_2^{11} \left(\kappa_2^{12}\right)^2, \tag{C.22}$$

$$C = c \ n \ \kappa_2^{12} - \kappa_2^{12} \left(\kappa_2^{13}\right)^2, \tag{C.23}$$

$$D = d \ e \ \kappa_2^{13} - \kappa_2^{13} \left(\kappa_2^5\right)^2, \tag{C.24}$$

$$F = f \ q \ \kappa_2^{14} - \kappa_2^{14} \left(\kappa_2^{15}\right)^2, \tag{C.25}$$

$$G = g \ r \ \kappa_2^{15} - \kappa_2^{15} \left(\kappa_2^{16}\right)^2, \tag{C.26}$$

$$H = h \ s \ \kappa_2^{16} - \kappa_2^{16} \left(\kappa_2^{17}\right)^2, \tag{C.27}$$

$$J = j \ t \ \kappa_2^{17} - \kappa_2^{17} \left(\kappa_2^{18}\right)^2, \tag{C.28}$$

$$K = k \ v \ \kappa_2^{18} - \kappa_2^{18} \left(\kappa_2^{20}\right)^2. \tag{C.29}$$

CÁLCULO DE ERRORES

D

Para los modelos de referencia, desde la artería carótida común hasta el de la aorta y sus principales ramificaciones, las soluciones dadas por el MELDG, para la presión (p), diferencia de presiones entre la entrada y salida (Δp) , flujo volumétrico (Q) y el cambio en el radio (Δr) , fueron comparadas con las correspondientes soluciones numéricas de dos formulaciones, 1-D y 3-D. Para calcular los errores de p y Q, utilizamos las siguientes métricas:

$$\mathcal{E}_{p}^{RCP} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{p_{i}^{\text{MELDG}} - \mathscr{P}_{i}}{\mathscr{P}_{i}}\right)^{2}}, \qquad \mathcal{E}_{Q}^{RCP} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{Q_{i}^{\text{MELDG}} - \mathscr{Q}_{i}}{\max_{j}(\mathscr{Q}_{j})}\right)^{2}}, \qquad (D.1)$$

$$\mathcal{E}_{p}^{MAX} = \max_{i} \left| \frac{p_{i}^{\text{MELDG}} - \mathscr{P}_{i}}{\mathscr{P}_{i}} \right|, \qquad \qquad \mathcal{E}_{Q}^{MAX} = \max_{i} \left| \frac{Q_{i}^{\text{MELDG}} - \mathscr{Q}_{i}}{\max_{j}(\mathscr{Q}_{j})} \right|, \qquad (D.2)$$

$$\mathcal{E}_{p}^{SIS} = \frac{\mathrm{máx}\left(p^{\mathrm{MELDG}}\right) - \mathrm{máx}(\mathscr{P})}{\mathrm{máx}(\mathscr{P})}, \qquad \mathcal{E}_{Q}^{SIS} = \frac{\mathrm{máx}\left(Q^{\mathrm{MELDG}}\right) - \mathrm{máx}(\mathscr{Q})}{\mathrm{máx}(\mathscr{Q})}, \qquad (\mathrm{D.3})$$

$$\mathcal{E}_{p}^{DIAS} = \frac{\min\left(p^{\text{MELDG}}\right) - \min(\mathscr{P})}{\min(\mathscr{P})}, \qquad \mathcal{E}_{Q}^{DIAS} = \frac{\min\left(Q^{\text{MELDG}}\right) - \min(\mathscr{Q})}{\max(\mathscr{Q})}, \qquad (D.4)$$

en donde, p_i^{MELDG} y Q_i^{MELDG} corresponden a los resultados obtenidos de la formulación analítica del MELDG dados una posición espacial y un tiempo i (i = 1, ..., n). Para una misma posición espacial y tiempo (i), \mathscr{P}_i y \mathscr{Q}_i son: ya sea la presión y el flujo dados por la solución numérica del modelo 1-D o la presión y flujo -promediados en el área de la sección transversal- dados por la solución numérica del modelo 3-D. El número de puntos n se determina a partir del número de datos que se tienen en la solución 3-D. \mathcal{E}_p^{RCP} y \mathcal{E}_Q^{RCP} son la raíz cuadrada del promedio de los errores relativos para la presión y el flujo; \mathcal{E}_p^{MAX} y \mathcal{E}_Q^{MAX} son los errores relativos máximos para la presión y el flujo; \mathcal{E}_p^{SIS} y \mathcal{E}_Q^{SIS} son los errores en sístole para la presión y el flujo; y \mathcal{E}_p^{DIAS} y \mathcal{E}_Q^{DIAS} son los errores en diástole para la presión y el flujo, respectivamente. Los errores para el flujo se normalizaron con el máximo valor de flujo en un ciclo cardiaco ya que con ello se evita la división por números pequeños. Para calcular los errores de Δp y Δr utilizamos las mismas métricas que para el flujo. Todos las métricas se calcularon en un ciclo cardiaco, utilizando los resultados numéricos de formulaciones 1-Dy 3-D.

LEY DE DARCY GENERALIZADA PARA UN CANAL RÍGIDO

Ε

Para un canal rectangular rígido, las ecuaciones de Navier-Stokes se reducen a:

$$\rho \frac{\partial v_x}{\partial t} = -\frac{dp}{dx} + \eta \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2},\tag{E.1}$$

en donde, v_x es la velocidad en la dirección axial, η es la viscosidad del fluido, z es la dirección normal a las paredes y p es la presión.

En estado estacionario, la solución de la ecuación anterior, junto con las condiciones de frontera de no resbalamiento,

$$v_x\left(z = -\frac{b}{2}\right) = v_x\left(z = \frac{b}{2}\right) = 0,$$
(E.2)

permite calcular el perfil de velocidades de Poiseuille, esto es:

$$v_x(z) = \frac{1}{2\eta} \frac{dp}{dx} \left(z^2 - \frac{b^2}{4} \right), \tag{E.3}$$

en la Fig. E.1 se puede observar un esquema de dicho perfil.



Figura E.1: Perfil de Poiseuille para la velocidad como función de la posición z, independiente de la posición en x.

La ecuación anterior promediada en la dirección normal a las paredes permite obtener

la ley de Darcy en estado estacionario, esto es,

$$\langle v_x \rangle = \frac{1}{b} \int_{-b/2}^{b/2} v_x(z) dz = -\frac{K_0}{\eta} \frac{dp}{dx}$$
(E.4)

en donde,

$$K_0 = \frac{b^2}{12}$$
(E.5)

es la permeabilidad de estado estacionario para una celda rectangular.

Para situaciones dinámicas, la ecuación E.1 se pude resolver de una manera sencilla en el dominio de Fourier. Para ello utilizamos la transformada y la transformada inversa de acuerdo con las definiciones establecidas en las ecuaciones A.6 y A.7.

En el dominio de Fourier la ecuación E.1 tiene la siguiente forma:

$$-\frac{i\omega\rho}{\eta}\hat{v}_x = -\frac{1}{\eta}\frac{d\hat{p}}{dx} + \frac{\partial^2\hat{v}_x}{\partial z^2},\tag{E.6}$$

Para simplificar la notación definimos $k^2 = \frac{i\omega\rho}{\eta}$ y $B(x,\omega) = \frac{1}{\eta} \frac{d\hat{p}}{dx}$. Con ello, la ecuación E.6 se puede escribir como,

$$\frac{\partial^2 \hat{v}_x}{\partial z^2} + k^2 \hat{v}_x = B,\tag{E.7}$$

cuya solución está dada por:

$$\hat{v}_x = c_1 \cos(kz) + c_2 \sin(kz) + \hat{v}_x^p$$
 (E.8)

en donde la solución particular, \hat{v}_x^p , es;

$$\hat{v}_x^p = \frac{B}{k^2} = \frac{1}{i\omega\rho} \frac{d\hat{p}}{dx}.$$
(E.9)

Para determinar las constantes c_1 y c_2 , se imponen las condiciones de frontera de no resbalamiento (ecuaciones E.2), con lo que la ecuación E.8 se puede escribir como,

$$\hat{v}_x = \frac{1}{i\omega\rho} \frac{d\hat{p}}{dx} \left[1 - \frac{\cos\left(kz\right)}{\cos\left(k\frac{b}{2}\right)} \right].$$
(E.10)

La ecuación E.10 se puede promediar en la dirección normal a las paredes, z, esto es,

$$\langle \hat{v}_x \rangle = \frac{1}{b} \int_{-\frac{b}{2}}^{\frac{b}{2}} \hat{v}_x(z) dz = -\frac{K(\omega)}{\eta} \frac{d\hat{p}}{dx}$$
(E.11)

en donde, la permeabilidad dinámica como función de la frecuencia, $K(\omega)$, está dada por:

$$K(\omega) = -\frac{\eta}{i\omega\rho} \left[1 - \frac{2\tan\left(k\frac{b}{2}\right)}{kb} \right].$$
 (E.12)

Las ecuaciones A.18 y E.12 son similares, la primera es válida para el bulto de un fluido de Maxwell en una geometría cilíndrica y la segunda es válida para un fluido Newtoniano en una geometría rectangular.

En la Fig E.2 se muestran la parte real e imaginaria de la permeabilidad dinámica como función de la frecuencia para un fluido Newtoniano en un microcanal con $b = 100 \mu m$.



La ecuación E.11 se conoce como la ley de Darcy generalizada ya que relaciona la velocidad y el gradiente de presión, ambos en el dominio de la frecuencia. Para obtener la velocidad en el dominio del tiempo, dado un gradiente de presión oscilatorio, $\nabla p(t)$, éste se transforma al dominio de la frecuencia, se sustituye, $\nabla \hat{p}(\omega)$ en la ley de Darcy generalizada (ecuación E.11) con lo que se obtiene la velocidad, $\hat{v}(\omega)$, en el dominio de Fourier y finalmente se anti-transforma dicha velocidad para tener en el dominio del tiempo, v(t).

E.1. $v_x(t)$ para un gradiente de presión de serie de Fourier

Cualquier función periódica se puede expresar como una suma de senos y cosenos de la forma:

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{n=\infty} a_n \cos(n\omega_0 t) + \sum_{n=1}^{n=\infty} b_n \sin(n\omega_0 t),$$
(E.13)

Los coeficientes a_0 , $a_n \neq b_n$, se determinan por medio de las integrales,

$$a_n = \frac{\omega_0}{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega_0}} f(t) \cos(n\omega_0 t) dt, \qquad (E.14)$$

$$b_n = \frac{\omega_0}{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega_0}} f(t) \operatorname{sen}(n\omega_0 t) dt, \qquad (E.15)$$

en donde n = 0, 1, 2, ...

Por tanto, cualquier gradiente de presión periódico se puede expresar como una serie de Fourier, esto es,

$$\nabla p(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{n=\infty} a_n \cos(n\omega_0 t) + \sum_{n=1}^{n=\infty} b_n \sin(n\omega_0 t).$$
(E.16)

Con la finalidad de simplificar la solución de la ecuación E.1, para un gradiente de presión dado por la ecuación E.16, tomaremos solamente un modo del mismo,

$$\nabla p(t) = a_1 \cos(\omega_0 t) + b_1 \sin(\omega_0 t). \tag{E.17}$$

El término constante del gradiente de presión $\frac{a_0}{2} = \nabla p_0$, reproduce la ley de Darcy de estado estacionario, ecuación E.4. Hacemos la transformada de Fourier de la ecuación anterior, esto es,

$$\nabla \hat{p}(\omega) = \frac{a_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega_0 t) e^{i\omega t} dt + \frac{b_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sin(\omega_0 t) e^{i\omega t} dt$$
(E.18)
$$= \frac{a_1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega_0 t) \cos(\omega t) dt + i \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega_0 t) \sin(\omega t) dt \right] + \frac{b_1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \sin(\omega_0 t) \cos(\omega t) dt + i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(\omega_0 t) \sin(\omega t) dt \right].$$

Utilizando las identidades trigonométricas del producto a suma, la ecuación anterior se puede escribir como,

$$\nabla \hat{p}(\omega) = \frac{a_1}{2\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega - \omega_0) t \, dt + \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega + \omega_0) t \, dt \right] + i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(\omega - \omega_0) t \, dt + i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(\omega + \omega_0) t \, dt \right] - \frac{ib_1}{2\sqrt{2\pi}} \left[i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(\omega + \omega_0) t \, dt - i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(\omega - \omega_0) t \, dt \right] - \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega - \omega_0) t \, dt + \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega + \omega_0) t \, dt \right].$$
(E.19)

Con la identidad de Euler la ecuación anterior se simplifica a

$$\nabla \hat{p}(\omega) = \frac{a_1}{2\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-\omega_0)t} dt + \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega+\omega_0)t} dt \right] \\ + \frac{ib_1}{2\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega+\omega_0)t} dt - \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-\omega_0)t} dt \right].$$
(E.20)

Utilizando la definición de la función delta de Dirac,

$$\delta(\omega - \omega_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - \omega_0)t} dt,$$
(E.21)

la ecuación E.20 se puede escribir como,

$$\nabla \hat{p}(\omega) = a_1 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0) \right] + i b_1 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[\delta(\omega + \omega_0) - \delta(\omega - \omega_0) \right].$$
(E.22)

Sustituimos la expresión anterior en la ley de Darcy generalizada y obtenemos la velocidad en el dominio de Fourier,

$$\hat{v}(\omega) = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{K(\omega)}{\eta} \left(a_1 \left[\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0) \right] + i b_1 \left[\delta(\omega + \omega_0) - \delta(\omega - \omega_0) \right] \right). \quad (E.23)$$

Hacemos la transformada inversa de la velocidad, $\hat{v}(\omega)$, para obtener la velocidad en el dominio del tiempo,

$$v(t) = -\frac{a_1}{2\eta} \left[\int_{-\infty}^{\infty} K(\omega)\delta(\omega - \omega_0)e^{-i\omega t}d\omega + \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega)\delta(\omega + \omega_0)e^{-i\omega t}d\omega \right] -\frac{ib_1}{2\eta} \left[\int_{-\infty}^{\infty} K(\omega)\delta(\omega + \omega_0)e^{-i\omega t}d\omega - \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega)\delta(\omega - \omega_0)e^{-i\omega t}d\omega \right] = -\frac{a_1}{2\eta} \left[K(\omega_0)e^{-i\omega_0 t} + K(-\omega_0)e^{i\omega_0 t} \right] - \frac{ib_1}{2\eta} \left[K(\omega_0)e^{-i\omega_0 t} - K(-\omega_0)e^{i\omega_0 t} \right].$$
(E.24)

Para que la función v(t) sea real, la permeabilidad dinámica debe cumplir con $K(-\omega) = K(\omega)^*$. Utilizando la expresión para la permeabilidad $K(\omega) = \operatorname{Re}[K(\omega)] + i\operatorname{Im}[K(\omega)]$, la ecuación E.24 se puede escribir como,

$$v(t) = -\frac{a_1}{\eta} \left[\operatorname{ReK}(\omega_0) \cos(\omega_0 t) + \operatorname{ImK}(\omega_0) \sin(\omega_0 t) \right] - \frac{b_1}{\eta} \left[\operatorname{ReK}(\omega_0) \sin(\omega_0 t) - \operatorname{ImK}(\omega_0) \cos(\omega_0 t) \right]$$

Un tratamiento similar se puede realizar para cada modo en el gradiente de presión, por lo que la velocidad, para el gradiente de presión dado por la ecuación E.16, es:

$$v(t) = -K(0)\frac{\nabla p_0}{\eta} - \sum_{n=1}^{n=\infty} \frac{a_n}{\eta} \left[\operatorname{ReK}(n\omega_0)\cos(n\omega_0 t) + \operatorname{ImK}(n\omega_0)\sin(n\omega_0 t) \right] - \sum_{n=1}^{n=\infty} \frac{b_n}{\eta} \left[\operatorname{ReK}(n\omega_0)\sin(n\omega_0 t) - \operatorname{ImK}(n\omega_0)\cos(n\omega_0 t) \right].$$
(E.25)

DESARROLLO ASINTÓTICO DEL MODELO DE CAMPO

F

Para realizar el desarrollo asintótico se tomó como guía, el elaborado para la ecuación de movimiento dada por la ecuación 4.27, el cual se puede consultar en la tesis de Ledesma [80].

Para el nuevo modelo de campo la ecuación de movimiento está dada por:

$$\alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = M \nabla^2 \mu(\phi), \tag{F.1}$$

en donde, el potencial químico, $\mu(\phi)$, tiene la forma

$$\mu(\phi) = \mu_B(\phi) - \epsilon^2 \nabla^2 \phi, \tag{F.2}$$

 $\mu_B(\phi)$ es el potencial químico en el bulto y está dado por:

$$\mu_B(\phi) = -\phi + \frac{\phi^3}{\phi_{eq}^2}.$$
(F.3)



Figura F.1: Coordenadas curvilíneas (u,s), para la región externa y (U,S), para la región interna. Ambas están referidas a la curva de nivel $\phi = 0$. Las líneas punteadas corresponden a puntos en los que u es constante. La velocidad de la curva en la dirección normal, está dada por $v = -\frac{\partial U}{\partial t}$.

Las ecuaciones macroscópicas 4.7, 4.8 y 4.9, se pueden recuperar mediante un análisis del comportamiento de las ecuaciones del modelo de campo en el límite en el que ϵ tiende

a cero. Dicho límite corresponde al de una interfase bien definida, en el cual la región interfacial es un línea matemática y el parámetro de orden se vuelve discontinuo. Para tal análisis es necesario expresar las variables del modelo de campo en potencias de ϵ . Debido a que existen variaciones abruptas de dichas variables a través de la interfase, es necesario realizar el análisis en dos regiones, externa e interna. También es necesario definir el sistema coordenado curvilíneo y calcular sus factores de escala. Para ello, se utiliza la curva de nivel $\phi = 0$ y sus coordenadas intrínsecas $s(\vec{r})$, la longitud de arco a lo largo de la curva y $u(\vec{r})$, la distancia normal a la curva, positiva para un punto $\phi > 0$ y negativa para un punto $\phi < 0$ (ver Fig. F.1). Las letras mayúsculas y minúsculas se utilizan para denotar variables en la región interna y externa, respectivamente, de forma que $U(\vec{r},t)$ y $S(\vec{r},t)$ corresponden a las coordenadas curvilíneas en la región interna. En esta región se re-escala la coordenada normal a la interfase, como, $\omega \equiv U/\epsilon$, de forma que en el límite $\epsilon \rightarrow 0$ la coordenada ω toma valores en el rango $-\infty < \omega < \infty$. En dicho límite, la coordenada normal a la interfase en el rango,

$$0^+ \le u < \infty$$
 para el fluido 1 y (F.4)

$$-\infty < u \le 0^-$$
 para el fluido 2. (F.5)

Las variables en la región externa e interna se pueden escribir en potencias de ϵ como,

$$a(u, s, t) = a_0 + \epsilon a_1 + \epsilon^2 a_2 + \cdots$$
 y

$$A(\omega, S, t) = A_0 + \epsilon A_1 + \epsilon^2 A_2 + \cdots$$
 (F.6)

Por tanto se pueden establecer las siguientes condiciones de continuidad:

$$\lim_{u \to \pm 0} a_i = \lim_{\omega \to \pm \infty} A_i, \tag{F.7}$$

$$\lim_{u \to \pm 0} \frac{\partial a_i}{\partial u} = \lim_{\omega \to \pm \infty} \frac{\partial A_{i+1}}{\partial \omega}, \quad \text{para} \quad i \ge 0,$$
(F.8)

$$\lim_{\omega \to \pm \infty} \frac{\partial A_0}{\partial \omega} = 0, \tag{F.9}$$

en donde, el índice *i* se refiere a un término de la serie de potencias. Como efecto de la transformación de coordenadas, el índice en la ecuación F.8 está fuera de fase. Estamos interesados en estudiar el comportamiento de la ecuación de movimiento (Ec. F.1) a tiempos largos, así es que re-escalamos el tiempo como $\tau = \epsilon t$.

F.1. Ecuaciones en la región externa

La expansión de las variables del modelo de campo en la región externa se pueden escribir como,

$$\phi = \phi_0 + \epsilon \phi_1 + \epsilon^2 \phi_2 + \cdots \tag{F.10}$$

$$\mu = \mu_0 + \epsilon \mu_1 + \epsilon^2 \mu_2 + \cdots . \tag{F.11}$$

Podemos escribir el lado derecho de la ecuación de movimiento en términos del tiempo τ y de la expansión del parámetro de orden en potencias de ϵ , esto es,

$$\alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \tau} \frac{d\tau}{dt} \right) \frac{d\tau}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \frac{d\tau}{dt} = \alpha \epsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \tau^2} + \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \alpha \epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \left(\phi_0 + \epsilon \phi_1 + \epsilon^2 \phi_2 + \cdots \right) + \epsilon \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\phi_0 + \epsilon \phi_1 + \epsilon^2 \phi_2 + \cdots \right),$$

que a segundo orden en ϵ se reduce a:

$$\alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial \phi_0}{\partial \tau} + \epsilon^2 \left(\alpha \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial \tau^2} + \frac{\partial \phi_1}{\partial \tau} \right).$$
(F.12)

Sustituyendo la ecuación F.11 en el lado derecho de la ecuación F.1, tenemos:

$$M\nabla^2 \mu = M\nabla^2 \mu_0 + \epsilon M\nabla^2 \mu_1 + \epsilon^2 M\nabla^2 \mu_2 + \cdots .$$
 (F.13)

Comparamos términos del mismo orden en ϵ en ambos lados de la ecuación de movimiento (ecuaciones F.12 y F.13), esto es,

$$\epsilon^0: \qquad M\nabla^2 \mu_0 = 0 \tag{F.14}$$

$$\epsilon^1: \qquad M\nabla^2 \mu_1 = \frac{\partial \phi_0}{\partial \tau}$$
 (F.15)

$$\epsilon^2$$
: $M\nabla^2 \mu_2 = \alpha \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial \tau^2} + \frac{\partial \phi_1}{\partial \tau}.$ (F.16)

De la ecuación F.10 tenemos que $\phi(\epsilon = 0) = \phi_0$. Desarrollamos el potencial químico alrededor de ϕ_0 , con ello obtendremos ecuaciones que utilizaremos posteriormente. Comenzamos por desarrollar el potencial químico en el bulto (primer término del lado derecho de la ecuación F.2), esto es,

$$\mu_B = \mu_{B0} + \mu'_{B0}(\phi - \phi_0) + \frac{1}{2}\mu''_{B0}(\phi - \phi_0)^2 + \cdots$$
 (F.17)

Sustituimos la ecuación F.10 en la ecuación F.17,

$$\mu_B = \mu_{B0} + \mu'_{B0}(\epsilon\phi_1 + \epsilon^2\phi_2) + \frac{1}{2}\mu''_{B0}(\epsilon\phi_1 + \epsilon^2\phi_2)^2 + \cdots, \qquad (F.18)$$

que a segundo orden en ϵ , se reduce a:

$$\mu_B = \mu_{B0} + \epsilon \mu'_{B0} \phi_1 + \epsilon^2 \left(\mu'_{B0} \phi_2 + \frac{1}{2} \mu''_{B0} \phi_1^2 \right).$$
 (F.19)

Utilizando la ecuación F.10 el segundo término del lado derecho de la ecuación F.2 se puede escribir como,

$$\epsilon^2 \nabla^2 \phi = \epsilon^2 \nabla^2 (\phi_0 + \epsilon \phi_1 + \epsilon^2 \phi_2 + \cdots), \qquad (F.20)$$

que a segundo orden en epsilon, se reduce a:

$$\epsilon^2 \nabla^2 \phi = \epsilon^2 \nabla^2 \phi_0. \tag{F.21}$$

En la región externa, el laplaciano en coordenadas curvilíneas (Ec. F.96) es

$$\nabla^2 = -\kappa \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \nabla^2 s \frac{\partial}{\partial s} + |\nabla s|^2 \frac{\partial^2}{\partial s^2}.$$
 (F.22)

Aplicamos el laplaciano a ϕ_0 (Ec. F.21), sustituimos el resultado de ello junto con la ecuación F.19 en la ecuación F.2, con lo que el potencial químico se puede escribir como:

$$\mu = \mu_{B0} + \epsilon \mu_{B0}' \phi_1 + \epsilon^2 \left(\mu_{B0}' \phi_2 + \frac{1}{2} \mu_{B0}'' \phi_1^2 + \kappa \frac{\partial \phi_0}{\partial u} - \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial u^2} - \nabla^2 s \frac{\partial \phi_0}{\partial s} - |\nabla s|^2 \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial s^2} \right).$$
(F.23)

Comparamos términos del mismo orden en ϵ de las ecuaciones F.11 y F.23, esto es,

$$\epsilon^0: \qquad \mu_0 = \mu_{B0} \tag{F.24}$$

$$\mu_1 = \mu'_{B0}\phi_1 \tag{F.25}$$

$$\epsilon^2$$
: $\mu_2 = \mu'_{B0}\phi_2 + \frac{1}{2}\mu''_{B0}\phi_1^2$ (F.26)

$$+ \kappa \frac{\partial \phi_0}{\partial u} - \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial u^2} - \nabla^2 s \frac{\partial \phi_0}{\partial s} - |\nabla s|^2 \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial s^2}.$$

Utilizaremos estas ecuaciones para la expansión en la región interna.

F.2. Ecuaciones en la región interna

 ϵ^1

En la región externa la longitud de escala involucrada es mucho más grande que ϵ , por lo que el sistema coordenado utilizado (u, s) es independiente del tiempo. En el caso de la región interna, la coordenada U es dependiente del tiempo y la curva no se mueve con respecto a la coordenada S.

La ecuación de movimiento (Ec. F.1) en la región interna esta dada por:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} = M \nabla^2 \mathcal{M}(\Phi).$$
 (F.27)

en donde, $\Phi = \Phi(U(t), S, t)$.

Las expansiones de las variables del modelo de campo en la región interna son:

$$\Phi = \Phi_0 + \epsilon \Phi_1 + \epsilon^2 \Phi_2 + \cdots \tag{F.28}$$

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_0 + \epsilon \mathcal{M}_1 + \epsilon^2 \mathcal{M}_2 + \cdots$$
 (F.29)

$$v \equiv -\frac{\partial U}{\partial t} = v_0 + \epsilon v_1 + \epsilon^2 v_2 + \dots \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial t} \equiv -\frac{\partial^2 U}{\partial t^2},$$
 (F.30)

en donde, v es la velocidad de la curva. El signo menos en la derivada temporal de la coordenada normal a la interfase (Ec. F.30) hace que la velocidad de la curva sea positiva cuando el fluido en el que $\phi > 0$ desplaza al fluido en el que $\phi < 0$, vea la Fig. F.1.

El lado izquierdo de la ecuación F.27, para $\Phi = \Phi(U(t), S, t)$, está dada por:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \alpha \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial t} \right) \right] + \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial t}.$$
(F.31)

Dado que relativo a la longitud de arco la curva no se mueve $\frac{\partial S}{\partial t} = 0$, con ello, la ecuación F.31 se puede escribir como:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \alpha \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} - \frac{v}{\epsilon} \frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \right) \right] + \epsilon \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} - \frac{v}{\epsilon} \frac{\partial \Phi}{\partial \omega}$$

$$= \alpha \left[\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} \right) \frac{\partial \tau}{\partial t} - \frac{v}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} - \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial v}{\partial t} \frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \right] + \epsilon \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} - \frac{v}{\epsilon} \frac{\partial \Phi}{\partial \omega}$$

$$= \alpha \left[\epsilon^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \tau^2} + \frac{v^2}{\epsilon^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \omega^2} - \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial v}{\partial t} \frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \right] + \epsilon \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} - \frac{v}{\epsilon} \frac{\partial \Phi}{\partial \omega}.$$
(F.32)

Substituyendo las ecuaciones F.28 y F.30 en la ecuación F.32, llegamos a:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \alpha \epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \left(\Phi_0 + \epsilon \Phi_1 + \epsilon^2 \Phi_2 \right) + \frac{\alpha}{\epsilon^2} \left(v_0 + \epsilon v_1 + \epsilon^2 v_2 \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \omega^2} \left(\Phi_0 + \epsilon \Phi_1 + \epsilon^2 \Phi_2 \right)$$

$$-\frac{\alpha}{\epsilon}\frac{\partial}{\partial t}\left(v_{0}+\epsilon v_{1}+\epsilon^{2}v_{2}\right)\frac{\partial}{\partial \omega}\left(\Phi_{0}+\epsilon\Phi_{1}+\epsilon^{2}\Phi_{2}\right)+\epsilon\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\Phi_{0}+\epsilon\Phi_{1}+\epsilon^{2}\Phi_{2}\right)$$
$$-\frac{1}{\epsilon}\left(v_{0}+\epsilon v_{1}+\epsilon^{2}v_{2}\right)\frac{\partial}{\partial \omega}\left(\Phi_{0}+\epsilon\Phi_{1}+\epsilon^{2}\Phi_{2}\right).$$
(F.33)

La ecuación anterior, a orden ϵ^0 , se puede escribir como:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon^2} \left[\alpha v_0^2 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} \right] + \frac{1}{\epsilon} \left[\alpha v_0^2 \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \omega^2} + 2\alpha v_0 v_1 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} - \alpha \frac{\partial v_0}{\partial t} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} \right] + \epsilon^0 \left[\alpha v_0^2 \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \omega^2} + 2\alpha v_0 v_1 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} - \alpha \frac{\partial v_0}{\partial t} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega^2} - \alpha \frac{\partial v_0}{\partial t} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} \right] + \epsilon^0 \left[\alpha v_0^2 \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \omega^2} - \alpha \frac{\partial v_0}{\partial t} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega^2} - \alpha \frac{\partial v_0}{\partial t} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} \right]$$

$$(F.34)$$

El lado derecho de la ecuación F.27 está dada por:

$$M\nabla^{2}\mathcal{M} = M\nabla^{2}\left(\mathcal{M}_{0} + \epsilon\mathcal{M}_{1} + \epsilon^{2}\mathcal{M}_{2}\right).$$
 (F.35)

En la región interna, el laplaciano en coordenadas curvilíneas (Ec. F.101) es

$$\nabla^2 f = -\frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial f}{\partial \omega} + \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \omega^2} + \nabla^2 S \frac{\partial f}{\partial S} + |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial S^2}, \tag{F.36}$$

aplicándolo a \mathcal{M} (Ec. F.35), llegamos a:

$$\begin{split} M\nabla^2 \mathcal{M} &= M \left[-\frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \mathcal{M}_0}{\partial \omega} + \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\partial^2 \mathcal{M}_0}{\partial \omega^2} + \nabla^2 S \frac{\partial \mathcal{M}_0}{\partial S} + |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 \mathcal{M}_0}{\partial S^2} \right. \\ &- \kappa \frac{\partial \mathcal{M}_1}{\partial \omega} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial^2 \mathcal{M}_1}{\partial \omega^2} + \epsilon \nabla^2 S \frac{\partial \mathcal{M}_1}{\partial S} + \epsilon |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 \mathcal{M}_1}{\partial S^2} \\ &- \kappa \frac{\partial \mathcal{M}_2}{\partial \omega} + \frac{\partial^2 \mathcal{M}_2}{\partial \omega^2} + \epsilon^2 \nabla^2 S \frac{\partial \mathcal{M}_2}{\partial S} + \epsilon^2 |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 \mathcal{M}_2}{\partial S^2} \right]. \end{split}$$

Re-ordenamos la ecuación anterior en potencias de ϵ , con lo que hasta orden ϵ^0 tenemos,

$$M\nabla^{2}\mathcal{M} = \frac{M}{\epsilon^{2}} \left[\frac{\partial^{2}\mathcal{M}_{0}}{\partial\omega^{2}} \right] + \frac{M}{\epsilon} \left[\frac{\partial^{2}\mathcal{M}_{1}}{\partial\omega^{2}} - \kappa \frac{\partial\mathcal{M}_{0}}{\partial\omega} \right] + \epsilon^{0}M \left[\frac{\partial^{2}\mathcal{M}_{2}}{\partial\omega^{2}} - \kappa \frac{\partial\mathcal{M}_{1}}{\partial\omega} + \nabla^{2}S \frac{\partial\mathcal{M}_{0}}{\partialS} + |\nabla S|^{2} \frac{\partial^{2}\mathcal{M}_{0}}{\partialS^{2}} \right].$$
(F.37)

Comparamos términos del mismo orden en ϵ en ambos lados de la ecuación de movimiento en la región interna (ecuación F.34 para el lado izquierdo y ecuación F.37 para el lado

derecho), esto es,

$$\epsilon^{-2} : \alpha v_0^2 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} = M \frac{\partial^2 \mathcal{M}_0}{\partial \omega^2}$$
(F.38)

$$\epsilon^{-1} : \alpha v_0^2 \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \omega^2} + 2\alpha v_0 v_1 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} - \alpha \frac{\partial v_0}{\partial t} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} = M \left(\frac{\partial^2 \mathcal{M}_1}{\partial \omega^2} - \kappa \frac{\partial \mathcal{M}_0}{\partial \omega} \right)$$
(F.39)

$$\epsilon^0 : \alpha v_0^2 \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \omega^2} + 2\alpha v_0 v_1 \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \omega^2} + \alpha \left(2v_0 v_2 + v_1^2 \right) \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} - \alpha \frac{\partial v_0}{\partial t} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} - \alpha \frac{\partial v_1}{\partial t} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} - \alpha \frac{\partial \Phi_1}{\partial t} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - v_0 \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} - \alpha \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega$$

El potencial químico en la región interna se puede escribir como:

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_B - \epsilon^2 \nabla^2 \Phi. \tag{F.41}$$

Desarrollamos el potencial químico en el bulto, \mathcal{M}_B , alrededor de Φ_0 ,

$$\mathcal{M}_{B} = \mathcal{M}_{B0} + \mathcal{M}'_{B0}(\Phi - \Phi_{0}) + \frac{1}{2}\mathcal{M}''_{B0}(\Phi - \Phi_{0})^{2} + \cdots, \qquad (F.42)$$

substituimos la ecuación F.28 en la expresión anterior,

$$\mathcal{M}_B = \mathcal{M}_{B0} + \mathcal{M}'_{B0}(\epsilon \Phi_1 + \epsilon^2 \Phi_2) + \frac{1}{2}\mathcal{M}''_{B0}(\epsilon \Phi_1 + \epsilon^2 \Phi_2)^2 + \cdots, \qquad (F.43)$$

que a segundo orden en ϵ se simplifica a:

$$\mathcal{M}_B = \mathcal{M}_{B0} + \epsilon \mathcal{M}'_{B0} \Phi_1 + \epsilon^2 \left(\mathcal{M}'_{B0} \Phi_2 + \frac{1}{2} \mathcal{M}''_{B0} \Phi_1^2 \right).$$
(F.44)

Con la ecuación F.44, el laplaciano en la región interna (Ec. F.101) y la ecuación F.28 podemos escribir el potencial químico en la región interna (Ec. F.41) como:

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_{B0} + \epsilon \mathcal{M}'_{B0} \Phi_1 + \epsilon^2 \left(\mathcal{M}'_{B0} \Phi_2 + \frac{1}{2} \mathcal{M}''_{B0} \Phi_1^2 \right)$$
(F.45)
$$- \epsilon^2 \left[-\frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} + \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} + \nabla^2 S \frac{\partial \Phi_0}{\partial S} + |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial S^2} \right]$$
$$- \kappa \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \omega^2} + \epsilon \nabla^2 S \frac{\partial \Phi_1}{\partial S} + \epsilon |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial S^2}$$
$$- \epsilon \kappa \frac{\partial \Phi_2}{\partial \omega} + \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \omega^2} + \epsilon^2 \nabla^2 S \frac{\partial \Phi_2}{\partial S} + \epsilon^2 |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial S^2} \right],$$

a segundo orden en ϵ , tenemos,

$$\mathcal{M} = \epsilon^0 \left[\mathcal{M}_{B0} - \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} \right] + \epsilon^1 \left[\mathcal{M}'_{B0} \Phi_1 + \kappa \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \omega^2} \right] + \epsilon^2 \left[\mathcal{M}'_{B0} \Phi_2 + \frac{1}{2} \mathcal{M}''_{B0} \Phi_1^2 - \nabla^2 S \frac{\partial \Phi_0}{\partial S} - |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial S^2} + \kappa \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} - \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \omega^2} \right].$$
(F.46)

Comparamos términos del mismo orden en ϵ de las ecuaciones F.29 y F.46, esto es,

$$\epsilon^{0}: \mathcal{M}_{0} = \mathcal{M}_{B0} - \frac{\partial^{2} \Phi_{0}}{\partial \omega^{2}}$$
(F.47)

$$\epsilon^{1}: \mathcal{M}_{1} = \mathcal{M}_{B0}^{\prime} \Phi_{1} + \kappa \frac{\partial \Phi_{0}}{\partial \omega} - \frac{\partial^{2} \Phi_{1}}{\partial \omega^{2}}$$
(F.48)

$$\epsilon^{2}: \mathcal{M}_{2} = \mathcal{M}_{B0}^{\prime}\Phi_{2} + \frac{1}{2}\mathcal{M}_{B0}^{\prime\prime}\Phi_{1}^{2} - \nabla^{2}S\frac{\partial\Phi_{0}}{\partial S} - |\nabla S|^{2}\frac{\partial^{2}\Phi_{0}}{\partial S^{2}} + \kappa\frac{\partial\Phi_{1}}{\partial\omega} - \frac{\partial^{2}\Phi_{2}}{\partial\omega^{2}}.$$
 (F.49)

F.3. Solución para μ_0 y \mathcal{M}_0

Sustituimos la ecuación F.47 en la ecuación F.38 con lo que llegamos a,

$$\alpha v_0^2 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} = M \frac{\partial^2 \mathcal{M}_0}{\partial \omega^2} = M \frac{\partial^2}{\partial \omega^2} \left(\mathcal{M}_{B0} - \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} \right), \tag{F.50}$$

lo cual se puede escribir como:

$$M\frac{\partial^2}{\partial\omega^2}\left(\mathcal{M}_0 - \frac{\alpha v_0^2}{M}\Phi_0\right) = M\frac{\partial^2}{\partial\omega^2}\left(\mathcal{M}_{B0} - \frac{\partial^2\Phi_0}{\partial\omega^2} - \frac{\alpha v_0^2}{M}\Phi_0\right) = 0.$$
(F.51)

Integramos dos veces en ω el lado izquierdo de la ecuación anterior,

$$\mathcal{M}_0 - \frac{\alpha v_0^2}{M} \Phi_0 = c_1 + c_2 \omega. \tag{F.52}$$

Fijamos $c_2 = 0$, con lo que, en el límite $\omega \to \pm \infty$, $\mathcal{M}_0 - \frac{\alpha v_0^2}{M} \Phi_0$ tiene un valor finito. Una posible solución de la ecuación F.51 es,

$$\mathcal{M}_{B0} - \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} - \frac{\alpha v_0^2}{M} \Phi_0 = 0, \qquad (F.53)$$

en donde

$$\mathcal{M}_{B0}(\Phi) = -\Phi_0 + \frac{\Phi_0^3}{\Phi_{eq}^2},\tag{F.54}$$

(vea la ecuación F.3). Substituimos \mathcal{M}_{B0} en la ecuación F.53,

$$\frac{\Phi_0^3}{\Phi_{eq}^2} - \left(1 + \frac{\alpha v_0^2}{M}\right) \Phi_0 - \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} = 0.$$
 (F.55)

Para resolver la ecuación anterior hacemos el siguiente cambio de variables,

$$q = \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial q}{\partial \omega} = \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} = \frac{\partial q}{\partial \Phi_0} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} = \frac{\partial q}{\partial \Phi_0} q, \quad (F.56)$$

aplicando este cambio en la ecuación F.55, tenemos

$$q\frac{\partial q}{\partial \Phi_0} = \frac{\Phi_0^3}{\Phi_{eq}^2} - \left(1 + \frac{\alpha v_0^2}{M}\right)\Phi_0,\tag{F.57}$$

cuya solución es,

$$q^{2} = \frac{\Phi_{0}^{4}}{2\Phi_{eq}^{2}} - \left(1 + \frac{\alpha v_{0}^{2}}{M}\right)\Phi_{0}^{2} + c, \qquad (F.58)$$

fijamos $c = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\alpha v_0^2}{M}\right)^2 \Phi_{eq}^2$, con lo que podemos escribir la ecuación anterior como:

$$q^{2} = \frac{1}{2} \left[\frac{\Phi_{0}^{2}}{\Phi_{eq}} - \Phi_{eq} \left(1 + \frac{\alpha v_{0}^{2}}{M} \right) \right]^{2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \Phi_{0}}{\partial \omega} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\Phi_{0}^{2}}{\Phi_{eq}} - \Phi_{eq} \left(1 + \frac{\alpha v_{0}^{2}}{M} \right) \right].$$
(F.59)

Separamos variables e integramos,

$$\int \left[\frac{\Phi_0^2}{\Phi_{eq}} - \Phi_{eq}\left(1 + \frac{\alpha v_0^2}{M}\right)\right]^{-1} \partial \Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \int \partial \omega$$
$$-\left(1 + \frac{\alpha v_0^2}{M}\right)^{-1/2} \operatorname{arctanh}\left(\frac{\Phi_0}{\Phi_{eq}\sqrt{1 + \frac{\alpha v_0^2}{M}}}\right) = \frac{\omega}{\sqrt{2}} + c, \quad (F.60)$$

de donde, obtenemos:

$$\Phi_0 = \Phi_{eq} \left(1 + \frac{\alpha v_0^2}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \tanh\left[-\left(1 + \frac{\alpha v_0^2}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\omega}{\sqrt{2}} + c \right) \right].$$
(F.61)

Los límites de Φ_0 en la frontera de la región interna son:

$$\Phi_0(\omega \to \pm \infty) = \pm \Phi_{eq} = \pm 1. \tag{F.62}$$

Esta condición se satisface si $v_0 = 0$ en la ecuación F.61. Además, fijamos c = 0, de forma que $\Phi_0 (\omega = 0) = 0$, con lo que obtenemos:

$$\Phi_0 = \Phi_{eq} \tanh\left[-\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}}\right)\right]. \tag{F.63}$$

El potencial relacionado a este perfil es:

$$\mathcal{M}_0(\omega) = \frac{\Phi_0^3}{\Phi_{eq}^2} - \Phi_0 - \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} = 0, \qquad (F.64)$$

de forma que c1 = 0 en la ecuación F.52.

Utilizando las ecuaciones F.7, F.63 y F.64 podemos escribir las relaciones de continuidad entre la región interna y externa, como:

$$\phi_0(u \to \pm 0) = \Phi_0(\omega \to \pm \infty) = \pm \Phi_{eq} = \pm 1 \tag{F.65}$$

$$\mu_0(u \to \pm 0) = \mathcal{M}_0(\omega \to \pm \infty) = 0. \tag{F.66}$$

Con las ecuaciones F.14 y F.24, el laplaciano del potencial químico a orden ϵ^0 se puede escribir como:

$$M\nabla^2 \mu_0 = M\nabla^2 \mu_{B0} = 0. (F.67)$$

Una solución a esta ecuación diferencial que no diverge lejos de la interfase y que satisface la condición a la frontera F.66 es,

$$\mu_0(u) = 0,$$

de forma que el parámetro de orden en la región externa cumple con,

$$\frac{\phi_0^3}{\phi_{eq}^2} - \phi_0 = 0 \tag{F.68}$$

esta ecuación se satisface con las siguientes condiciones:

$$\phi_0(u) = \phi_{eq} = 1 \qquad \text{para} \qquad u > 0 \quad \Rightarrow \text{ Fluido 1} \qquad (F.69)$$

$$\phi_0(u) = -\phi_{eq} = -1 \qquad \text{para} \qquad u < 0 \quad \Rightarrow \text{ Fluido 2} \qquad (F.70)$$

F.4. Ecuaciones macroscópicas

F.4.1. Condición de equilibrio local

En esta sección vamos a obtener la condición local de equilibrio dada por la ecuación 4.8. Utilizamos el hecho de que $v_0 = 0$ y que $\mathcal{M}_0(\omega) = 0$ (Ec. F.64), con lo que la ecuación de movimiento en la región interna a orden ϵ^{-1} (Ec. F.39) se reduce a:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{M}_1}{\partial \omega^2} = 0. \tag{F.71}$$

Integramos dos veces en ω ,

$$\mathcal{M}_1 = a_1 \omega + b_1, \tag{F.72}$$

fijamos $a_1 = 0$, con lo que \mathcal{M}_1 tiene un valor finito en las fronteras, luego $\mathcal{M}_1 = b_1$. De la ecuación F.48, tenemos,

$$\mathcal{M}_1 = b_1 = \mathcal{M}'_{B0} \Phi_1 + \kappa \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \omega^2}, \qquad (F.73)$$

multiplicamos esta ecuación por $\frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega}$ e integramos en la región interna,

$$\mathcal{M}_{1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi_{0}}{\partial \omega} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{M}_{B0}^{\prime} \Phi_{1} \frac{\partial \Phi_{0}}{\partial \omega} d\omega + \int_{-\infty}^{\infty} \kappa \left(\frac{\partial \Phi_{0}}{\partial \omega}\right)^{2} d\omega - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^{2} \Phi_{1}}{\partial \omega^{2}} \frac{\partial \Phi_{0}}{\partial \omega} d\omega, \quad (F.74)$$

el primer término del lado derecho de la ecuación se puede integrar por partes, lo que da como resultado:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{M}'_{B0} \Phi_1 \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} d\omega = \left[\Phi_1 \mathcal{M}_{B0} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{M}_{B0} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} d\omega.$$
(F.75)

Para ello, se utilizó el cambio de variables dado por:

$$u = \Phi_1 \qquad \Rightarrow \qquad du = \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} d\omega$$
$$dv = \mathcal{M}'_{B0} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} d\omega = \frac{\partial \mathcal{M}_{B0}}{\partial \Phi_0} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} d\omega \qquad \Rightarrow \qquad v = \mathcal{M}_{B0},$$

ya que $\mathcal{M}_{B0}(\omega \to \pm \infty) = 0$ (Ecs. F.54 y F.65), el término $[\Phi_1 \mathcal{M}_{B0}]_{-\infty}^{\infty} = 0$. El último término de la ecuación F.74 también se puede integrar por partes, lo que da como resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \omega^2} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} d\omega = \left[\frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega} \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} d\omega, \tag{F.76}$$

para ello se utilizó el cambio de variables dado por:

$$\begin{split} u &= \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} \qquad \Rightarrow \qquad du = \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} d\omega \\ dv &= \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \omega^2} d\omega \qquad \Rightarrow \qquad v = \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega}, \end{split}$$

ya que $\frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega}(\omega \to \pm \infty) = 0$ (Ec. F.66), el término $\left[\frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \omega}\right]_{-\infty}^{\infty} = 0$. Sustituyendo el resultado de las integrales, podemos re-escribir la ecuación F.74 como:

$$\mathcal{M}_{1} \left[\Phi_{0} \right]_{-\infty}^{\infty} = -\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{M}_{B0} \frac{\partial \Phi_{1}}{\partial \omega} d\omega + \int_{-\infty}^{\infty} \kappa \left(\frac{\partial \Phi_{0}}{\partial \omega} \right)^{2} d\omega + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi_{1}}{\partial \omega} \frac{\partial^{2} \Phi_{0}}{\partial \omega^{2}} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \kappa \left(\frac{\partial \Phi_{0}}{\partial \omega} \right)^{2} d\omega - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi_{1}}{\partial \omega} \left(\mathcal{M}_{B0} - \frac{\partial^{2} \Phi_{0}}{\partial \omega^{2}} \right) d\omega.$$
(F.77)

Dado que $v_0 = 0$, la ecuación F.53 se puede simplificar a:

$$\mathcal{M}_{B0} - \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} = 0,$$

de forma que la ecuación F.77 se puede escribir como;

$$\mathcal{M}_1 = \frac{\kappa}{2\Phi_{eq}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial\Phi_0}{\partial\omega}\right)^2 d\omega.$$
(F.78)

Utilizando la condición de frontera $\lim_{\omega \to \pm \infty} \mathcal{M}_1 = \lim_{u \to \pm 0} \mu_1$ (Ec. F.7), la ecuación anterior se puede escribir como:

$$\mu_1 = \left(\frac{\gamma'}{2\Phi_{eq}}\right)\kappa\tag{F.79}$$

en donde, $\gamma' = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega}\right)^2 d\omega$. Esta ecuación es equivalente a la condición de frontera macroscópica que se obtiene de considerar un equilibro termodinámico local, ecuación 4.8.

F.4.2. Condición de continuidad para la velocidad normal

Utilizando $v_0 = 0$, $\mathcal{M}_0 = 0$ y la ecuación F.78, podemos simplificar la ecuación F.40 a:

$$v_1^2 \frac{\partial^2 \Phi_0}{\partial \omega^2} - \alpha \frac{\partial v_1}{\partial t} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - v_1 \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} = M \frac{\partial^2 \mathcal{M}_2}{\partial \omega^2}, \tag{F.80}$$

integrando en ω tenemos,

$$v_1^2 \frac{\partial \Phi_0}{\partial \omega} - \left(\alpha \frac{\partial v_1}{\partial t} + v_1\right) \Phi_0 = M \frac{\partial \mathcal{M}_2}{\partial \omega} + b_1, \tag{F.81}$$

fijamos $b_1 = 0$ de forma que \mathcal{M}_2 es finito en las fronteras. En los extremos de la zona interna $(\omega \to \pm \infty)$, la ecuación anterior se reduce a:

$$\omega \to \pm \infty \quad \Rightarrow \quad \pm \left(\alpha \frac{\partial v_1}{\partial t} + v_1\right) \Phi_{eq} = -M \frac{\partial \mathcal{M}_2}{\partial \omega},$$
 (F.82)

que con la condición a la frontera, $\lim_{\omega \to \pm \infty} \frac{\partial \mathcal{M}_2}{\partial \omega} = \lim_{u \to \pm 0} \frac{\partial \mu_1}{\partial u}$ (Ec. F.8), se puede escribir como,

$$u \to \pm 0 \quad \Rightarrow \quad \pm \left(\alpha \frac{\partial v_1}{\partial t} + v_1\right) = -\frac{M}{\Phi_{eq}} \frac{\partial \mu_1}{\partial u},$$
 (F.83)

esta ecuación constituye la ecuación de continuidad de la velocidad normal de la interfase, ecuación 4.9.

F.4.3. Ecuación para el bulto

El laplaciano del potencial químico a orden ϵ es (Ec. F.15),

$$M\nabla^2 \mu_1 = \frac{\partial \phi_0}{\partial \tau},\tag{F.84}$$

dado que adoptamos como marco de referencia a la interfase y el campo ϕ_0 se mueve con ella, la derivada temporal de dicho campo es igual a cero, por lo que la ecuación anterior se simplifica a:

$$M\nabla^2\mu_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla^2\mu_1 = 0.$$
 (F.85)

Esta ecuación constituye la ecuación de bulto, la cual es válida para los dos fluidos y es equivalente a la ecuación macroscópica dada por la ecuación 4.7, la cual se obtiene de combinar las ecuaciones 4.2 y 4.3.

F.5. Identificación de parámetros

Las ecuaciones 4.7, 4.8 y 4.9 de la formulación macroscópica, se pueden escribir como las ecuaciones F.85, F.79 y F.83 mediante la identificación de los siguientes parámetros:

$$p = \phi_{eq} \mu_1 \qquad \gamma = \frac{\gamma'}{2\phi_{eq}} \qquad K_0 = -\frac{M}{\phi_{eq}},\tag{F.86}$$

en donde, μ_1 tiene el efecto de la presión, M el papel de la permeabilidad de estado estacionario (K_0) y γ' es un parámetro relacionado a la tensión superficial.

F.6. Laplaciano en la región externa

Nuestro propósito es mostrar cómo se calcula el laplaciano en términos de las coordenadas locales $u ext{ y } s$. Para ello utilizamos las definiciones de gradiente y laplaciano en coordenadas curvilíneas generalizadas, esto es, respectivamente:

$$\nabla f = \frac{1}{h_u} \frac{\partial f}{\partial u} \hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{h_s} \frac{\partial f}{\partial s} \hat{\mathbf{s}}, \tag{F.87}$$

$$\nabla^2 f = \frac{1}{h_u h_s} \frac{\partial \left(\frac{h_s}{h_u}\right)}{\partial u} \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{1}{h_u^2} \frac{\partial^2 f}{\partial u^2} + \frac{1}{h_u h_s} \frac{\partial \left(\frac{h_u}{h_s}\right)}{\partial s} \frac{\partial f}{\partial s} + \frac{1}{h_s^2} \frac{\partial^2 f}{\partial s^2}.$$
 (F.88)

En las ecuaciones anteriores primero fijamos u como f y posteriormente s como f, calculamos la magnitud de los gradientes y los laplacianos. Para u tenemos,

$$\nabla u = \frac{1}{h_u} \frac{\partial u}{\partial u} \hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{h_s} \frac{\partial u}{\partial s} \hat{\mathbf{s}} \quad \Rightarrow \quad |\nabla u|^2 = \frac{1}{h_u^2}, \tag{F.89}$$

$$\nabla^2 u = \frac{1}{h_u h_s} \frac{\partial \left(\frac{h_s}{h_u}\right)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial u} + \frac{1}{h_u^2} \frac{\partial^2 u}{\partial^2 u} + \frac{1}{h_u h_s} \frac{\partial \left(\frac{h_u}{h_s}\right)}{\partial s} \frac{\partial u}{\partial s} + \frac{1}{h_s^2} \frac{\partial^2 u}{\partial^2 s} = \frac{1}{h_u h_s} \frac{\partial \left(\frac{h_s}{h_u}\right)}{\partial u}$$
(F.90)

y para s tenemos,

$$\nabla s = \frac{1}{h_u} \frac{\partial s}{\partial u} \hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{h_s} \frac{\partial s}{\partial s} \hat{\mathbf{s}} \quad \Rightarrow \quad |\nabla s|^2 = \frac{1}{h_s^2}.$$
 (F.91)

$$\nabla^2 s = \frac{1}{h_u h_s} \frac{\partial \left(\frac{h_s}{h_u}\right)}{\partial u} \frac{\partial s}{\partial u} + \frac{1}{h_u^2} \frac{\partial^2 u}{\partial^2 u} + \frac{1}{h_u h_s} \frac{\partial \left(\frac{h_u}{h_s}\right)}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial s} + \frac{1}{h_s^2} \frac{\partial^2 s}{\partial^2 s} = \frac{1}{h_u h_s} \frac{\partial \left(\frac{h_u}{h_s}\right)}{\partial s} \tag{F.92}$$

Con las ecuaciones F.89-F.92, podemos re-escribir el laplaciano (Ec. F.88) como:

$$\nabla^2 f = \nabla^2 u \frac{\partial f}{\partial u} + |\nabla u|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial u^2} + \nabla^2 s \frac{\partial f}{\partial s} + |\nabla s|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial s^2}.$$
 (F.93)

Con la finalidad de calcular los factores de escala h_u y h_s , utilizamos la curva de nivel $\phi = 0$ (vea la Fig. F.1). Llamamos θ al ángulo que va desde $\hat{\mathbf{y}}$ hasta $\hat{\mathbf{s}}$, por tanto, $\kappa = \frac{\partial \theta}{\partial s}$ es la curvatura de la curva de nivel $\phi = 0$. Denotamos X y Y como valores x y y de un punto sobre la curva $\phi = 0$. Si movemos infinitesimalmente dicho punto a lo largo de s, podemos expresar $dX = ds \operatorname{sen} \theta$ y $dY = ds \cos \theta$. Tomando en cuenta que el ángulo θ es el mismo que va desde $\hat{\mathbf{x}}$ hasta $\hat{\mathbf{u}}$, podemos escribir las coordenadas x y y, de un punto en la vecindad cercana de la curva de nivel $\phi = 0$ en el que $\phi \neq 0$, en términos de los valores X y Y, esto es, $x = X + u \cos \theta$ y $y = Y - u \sin \theta$. Con ello podemos calcular los siguientes factores de escala:

$$h_u^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial u}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u}\right)^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad h_u = 1$$
 (F.94)

$$h_s^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial s}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial s}\right)^2 = \left(\frac{\partial X}{\partial s} - u \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial s}\right)^2 + \left(\frac{\partial Y}{\partial s} - u \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial s}\right)^2 = (1 - u\kappa)^2 \quad \Rightarrow \quad h_s = |1 - u\kappa| \quad (F.95)$$

Substituimos la ecuación F.94 en la ecuación F.89 con lo que llegamos a: $|\nabla u|^2 = 1$. Por otro lado, con las ecuaciones F.94, F.95 y F.90 tenemos que $\nabla^2 u \approx -\kappa$, de forma que el

laplaciano (Ec. F.93) se puede expresar como,

$$\nabla^2 f = -\kappa \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial^2 f}{\partial u^2} + \nabla^2 s \frac{\partial f}{\partial s} + |\nabla s|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial s^2}.$$
 (F.96)

F.7. Laplaciano en la región interna

Utilizando la expresión para el laplaciano en la región externa (Ec. F.93), podemos escribir el laplaciano en la región interna como,

$$\nabla^2 f = \nabla^2 U \frac{\partial f}{\partial U} + |\nabla U|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial U^2} + \nabla^2 S \frac{\partial f}{\partial S} + |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial S^2}, \tag{F.97}$$

que en términos de la coordenada normal re-escalada éste está dado por:

$$\nabla^{2} f = \nabla^{2} U \frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial U} + |\nabla U|^{2} \frac{\partial}{\partial U} \left(\frac{\partial f}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial U} \right) + \nabla^{2} S \frac{\partial f}{\partial S} + |\nabla S|^{2} \frac{\partial^{2} f}{\partial S^{2}} \qquad (F.98)$$
$$= \frac{1}{\epsilon} \nabla^{2} U \frac{\partial f}{\partial \omega} + \frac{1}{\epsilon^{2}} |\nabla U|^{2} \frac{\partial^{2} f}{\partial \omega^{2}} + \nabla^{2} S \frac{\partial f}{\partial S} + |\nabla S|^{2} \frac{\partial^{2} f}{\partial S^{2}}.$$

Calculamos el factor de escala, h_U , como:

$$h_U^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial U}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial U}\right)^2 = \operatorname{sen}^2 \theta + \cos^2 \theta = 1 \quad \Rightarrow \quad h_U = 1,$$
(F.99)

en donde,

$$x = X + U\cos\theta$$
 y $y = Y - U\sin\theta$.

Para h_S , tenemos:

$$h_{S}^{2} = \left(\frac{\partial x}{\partial S}\right)^{2} + \left(\frac{\partial y}{\partial S}\right)^{2} = \left(\frac{\partial X}{\partial S} - U \operatorname{sen} \theta \frac{\partial \theta}{\partial S}\right)^{2} + \left(\frac{\partial Y}{\partial S} - U \cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial S}\right)^{2} = (1 - U\kappa)^{2} \quad \Rightarrow \quad h_{S} = |1 - U\kappa|, \quad (F.100)$$

en donde,

$$dY = dS \cos \theta$$
 and $dX = dS \sin \theta$.

Finalmente, el laplaciano en la región interna se puede escribir como:

$$\nabla^2 f = -\frac{\kappa}{\epsilon} \frac{\partial f}{\partial \omega} + \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \omega^2} + \nabla^2 S \frac{\partial f}{\partial S} + |\nabla S|^2 \frac{\partial^2 f}{\partial S^2}.$$
 (F.101)

Lista de los principales símbolos y abreviaciones usadas

C_{Wk}	distensibilidad del modelo de Windkessel
C	distensibilidad del vaso (compliance en inglés)
C_c	distensibilidad total de una red
C_p	distensibilidad periférica
C_T	distensibilidad total del sistema
C^i_{seq}	distensibilidad del vaso i de una red
K_L	permeabilidad dinámica local
K	permeabilidad dinámica
K_{MC}	permeabilidad dinámica del modelo de campo
p	presión
p_d	presión en diástole
p_{fb}	presión a frecuencias bajas
p_{in}	presión a la entrada de un vaso
p_m	presión media
p_o	presión a la salida de un vaso
p_{out}	presión a la salida de un modelo de Windkessel
p_s	presión en sístole
p_{Wk}	presión en un modelo de Windkessel
Q	flujo
Q_{in}	flujo a la entrada de un vaso
Q_o	flujo a la salida de un vaso
Q_{Wk}	flujo en un modelo de Windkessel
R	radio de un tubo rígido
R_d	radio en diástole
R_0	radio promedio de un tubo elástico
R_s	resistencia del sistema en nuestro modelo 0-D
R_T	resistencia total de una red
R_T^i	resistencia periférica total del vaso terminal \boldsymbol{i}
$R_1 \ge R_2$	resistencias del modelo de Windkessel
MEDG	modelo elástico de Darcy generalizado

BIBLIOGRAFÍA

- Wagshul Mark E., Eide Per K. and Madsen Joseph R., The pulsating brain: A review of experimental and clinical studies of intracranial pulsatility, *Fluids Barriers CNS*, 8, 5, 1-23, 2011.
- [2] Loth Francis, Yardimci M. Atif and Alperin Noam, Hydrodynamic modeling of cerebrospinal fluid motion within the spinal cavity, J Biomed Eng, 123, 71-79, 2000.
- [3] Bhatia Sangeeta N. and Ingber Donald E., Microfluidic organs-on-chips, Nature Biotechnol, 32, 760-772, 2014.
- [4] Lynn N. Scott and Dandy David S., Passive microfluidic pumping using coupled capillary/evaporation effects, *Lab Chip*, 9, 3422-3429, 2009.
- [5] Walker Glenn M. and Beebe David J., A passive pumping method for microfluidic devices, *Lab Chip*, 2, 131-134, 2002.
- [6] Nichols W. W. and O'Rourke M. F., McDonald's blood flow in arteries: Theoretical, experimental and clinical principles, New York, Oxford University Press, Sixth edition, 2005.
- [7] Shi Yubing, Lawford Patricia and Hose Rodney, Review of zero-D and 1-D models of blood flow in the cardiovascular system, *BioMed Eng Online*, 10, 33, 2011.
- [8] Stergiopulos Nikos, Westerhof Berend and Westerhof Nico, Total arterial inertance as the fourth element of the windkessel model, Am J Physiol, 276, H81–H88, 1999.
- [9] Wang Jiun J., O'Brien Aoife B., Shrive Nigel G., Parker Kim H. and Tyberg John V., Time-domain representation of ventricular-arterial coupling as a windkessel and wave system, Am J Physiol Heart Circ Physiol, 284, H1358–H1368, 2003.
- [10] Danielsen M. and Ottesen J., A cardiovascular model, Applied mathematical models in human physiology, Ottesen J., Olufsen M. and Larsen J. (Eds.), Philadelphia, SIAM monographs on mathematical human physiology, 2004.
- [11] Westerhof Nico, Lankhaar Jan-Willem and Westerhof Berend, The arterial windkessel, Med & Biol Eng & Comput, 47, 131–141, 2009.
- [12] Ursino Mauro, Interaction between carotid baroregulation and the pulsating heart: a mathematical model. Am J Heart Circ Physiol, 275, H1733-H1747, 1998.
- [13] Xiao Nan, Alastruey Jordi and Figueroa Alberto C., A systematic comparison between 1-D and 3-D hemodynamics in compliant arterial models, Int J Numer Meth Biomed Eng, 30, 204-231, 2014.

- [14] Bessems David, Giannopapa Christina G., Rutten Marcel C. and van de Vosse Frans N., Experimental validation of a time-domain-based wave propagation model of blood flow in viscoelastic vessels, J Biomech, 41, 284-291, 2008.
- [15] Mynard J. and Nithiarasu P., A 1D arterial blood flow model incorporating ventricular pressure, aortic valve and regional coronary flow using the locally conservative Galerkin (LCG) method, *Commun Numer Meth Eng*, 24, 367-417, 2008.
- [16] Olufsen Mette S., Peskin Charles S., Kim Won Yong, Pedersen Erik M., Nadim Ali and Larsen Jesper, Numerical simulation and experimental validation of blood flow in arteries with structured-tree outflow conditions, *Ann Biomed Eng*, 28, 1281-1299, 2000.
- [17] Formaggia Luca, Lamponi Daniele and Quarteroni Alfio, One-dimensional models for blood flow in arteries, J Eng Math, 47, 251-276, 2003.
- [18] Stergiopulos N., Young D. F., Rogge T. R., Computer simulation of arterial flow with applications to arterial and aortic stenoses, *J Biomech*, 25, 1477-1488, 1992.
- [19] Hughes Thomas and Lubliner J., On the one-dimensional theory of blood flow in the larger vessels, *Math Biosciences*, 18, 161-170, 1973.
- [20] Sherwin S. J., Franke V., Peiró J. and Parker K., One-dimensional modelling of a vascular network in space-time variables, *J Eng Maths*, 47, 217-250, 2003.
- [21] Reymond Philippe, Bohraus Yvette, Perren Fabienne, Lazeyras Francois and Stergiopulos Nikos, Validation of a patient-specific one-dimensional model of the systemic arterial tree, Am J Physiol Heart Circ Physiol, 301, H1173-H1182, 2011.
- [22] Alastruey Jordi, Khir A., Matthys K., Segers P., Sherwin S., Verdonck P., Parker K. and Peiró J., Pulse wave propagation in a model human arterial network: Assessment of 1-D visco-elastic simulations against *in vitro* measurements, *J Biomech*, 44, 2250-2258, 2011.
- [23] Cebral Juan R., Castro Marcelo A., Burgess James E., Pergolizzi Richard S., Sheridan Michael J. and Putman Christopher M., Characterization of cerebral aneurysms for assessing risk of rupture by using patient-specific computational hemodynamics models, Am J Neuroradiol, 26, 10, 2550-2559, 2005.
- [24] Gerbeau Jean F., Vidrascu Mariana and Frey Pascal, Fluid-structure interaction in blood flows on geometries based on medical imaging, *Comp Struct*, 83, 2-3, 155-165, 2005.
- [25] Figueroa C. Alberto, Vignon-Clemental Irene E., Jansen Kenneth E., Hughes Thomas J.R. and Taylor Charles A., A coupled momentum method for modeling blood flow in three-dimensional deformable arteries, *Comp Meth App Mech Eng*, 195, 5685-5706, 2006.
- [26] Hale J. F., McDonald D. A. and Womersley J. R., Velocity profiles of oscillating arterial flow, with some calculations of viscous drag and the Reynolds number, *J Physiol*, 128, 629-64, 1955.

- [27] Papadakis George, Wave propagation in tapered vessels: new analytic solutions that account for vessel distensibility and fluid compressibility, J Pressure Vessel Technol, 136, 014501, 1-9, 2014.
- [28] Vignon-Clementel Irene E., Figueroa C. Alberto, Jansen Kenneth E. and Taylor Charles A., Outflow boundary conditions for three-dimensional finite element modeling of blood flow and pressure in arteries, *Comp Meth App Mech Eng*, 195, 3776-3796, 2006.
- [29] del Río J. A., López de Haro M., and Whitaker S., Enhancement in the dynamic response of a viscoelastic fluid flowing in a tube, *Phys Rev E*, 58, 6323-6327, 1998.
- [30] del Río J. A., López de Haro M., and Whitaker S., Erratum: Enhancement in the dynamic response of a viscoelastic fluid flowing in a tube [Phys Rev E, 58, 6323 (1998)], Phys Rev E, 64, 039901, 2001.
- [31] Collepardo Guevara R. and Corvera Poiré E., Controlling viscoelastic flow by tuning frequency during occlusions, *Phys Rev E*, 76, 026301, 2007.
- [32] Flores Gerónimo J., Corvera Poiré E., del Ró J. A. and López de Haro M., A plausible explanation for heart rates in mammals, J Theor Biol, 265, 599-603, 2010.
- [33] Flores Gerónimo J., Meza Romero A., Travasso R. D. M. and Corvera Poiré E., Flow and anastomosis in vascular networks, J Theor Biol, 317, 257, 2013.
- [34] Torres Rojas A. M., Meza Romero A., Pagonabarraga I., Travasso R. D. M. and Corvera Poiré E., Obstructions in vascular networks: Relation between network morphology and blood supply, *PLOS One*, 10, e0128111, 2015.
- [35] Anderson D. M., McFadden G. B. and Wheeler A. A., Diffuse-interface methods in fluid mechanics, Annu Rev Fluid Mech, 30, 139-65, 1998.
- [36] Steinbach Ingo, Phase-field models in materials science, Modelling Simul Mater Sci Eng, 17, 073001, 2009.
- [37] Chen Long-Qing, Phase-Field Models for microstructure evolution, Annu Rev Mater Res, 32, 113-140, 2002.
- [38] Singer-Loginova I. and Singer H. M., The phase field technique for modeling multiphase materials, *Rep Prog Phys*, 71, 106501, 2008.
- [39] Folch R., Casademunt J., Hernández-Machado A. and Ramírez-Piscina L., Phase-field model for Hele-Shaw flows with arbitrary viscosity contrast. I Theoretical approach, *Phys Rev E*, 60, 1724, 1999.
- [40] Folch R., Casademunt J. and Hernández-Machado A., Phase-field model for Hele-Shaw flows with arbitrary viscosity contrast. II. Numerical study, *Phys Rev E*, 60, 1734, 1999.
- [41] Hernández-Machado A., Lacasta A. M., Mayoral E. and Corvera Poiré E., Phasefield model of Hele-Shaw flows in the high-viscosity contrast regime, *Phys Rev E*, 68, 046310, 2003.

- [42] Ledesma-Aguilar R., Quevedo-Reyes M., Corvera Poiré E. and Hernández-Machado A., Lateral instability in normal viscous fingers, *Phys Rev E*, 71, 016312, 2005.
- [43] Quevedo-Reves M., Hernández-Machado A. and Corvera Poiré E., Phase field approach to spatial perturbations in normal Saffman-Taylor fingers, *Phys Rev E*, 73, 066308, 2006.
- [44] Torralba M., Ortín J., Hernández-Machado A. and Corvera Poiré E., Fluctuations in Saffman-Taylor fingers with quenched disorder, *Phys Rev E*, 73, 046302, 2006.
- [45] Torralba M., Ortín J., Hernández-Machado A. and Corvera Poiré E., Experiments of periodic forcing of Saffman-Taylor fingers, *Phys Rev E*, 77, 036207, 2008.
- [46] de Gennes Pierre-Gilles, Brochard-Wyart Françoise and Quéré David, Capillarity and wetting phenomena. Drops, bubbles, pearls, waves, New York, Springer, 2004.
- [47] NCD Risk Factor Collaboration, Worldwide trends in blood pressure from 1975 to 2015: a pooled analysis of 1479 population-based measurement studies with 19.1 million participants, *Lancet* 389, 37-55, 2017.
- [48] Gal Iglesias Beatriz, López Gallardo Meritxell, Martí Velasco Ana I. y Prieto Montalvo Julio, Bases de la Fisiología, Madrid, Editorial Tébar, 2^a Edición, 2007.
- [49] Anthony M. Dart and Bronwyn A. Kingwell, Pulse pressure. A review of mechanisms and clinical relevance, J Am Coll Cardiol, 37, 4, 975-984, 2001.
- [50] Henry Gray, Anatomy of the Human Body, Revised and Re-edited by Warren H. Lewis, New York, Lea and Febiger 1918, Twentieth Edition, 2000.
- [51] Du Tao, Hu Dan and Cai David, Outflow boundary conditions for blood flow in arterial trees, *Plos One*, 10(5), e0128597, 2015.
- [52] Debao Guan, Fuyou Liang and Pierre A. Gremaud, Comparison of the Windkessel model and structured-tree model applied to prescribe outflow boundary conditions for a one-dimensional arterial tree model, J Biomech, 49, 1583-1592, 2016.
- [53] Alastruey Jordi, Moore S. M., Parker K., David T., Peiró J. and Sherwin S. J., Reduced modelling of blood flow in the cerebral circulation: Coupling 1-D, 0-D and cerebral auto-regulation models, *Int J Numer Meth Fluids*, 56, 1061-1067, 2008.
- [54] Alastruey Jordi, Hunt Anthony A. E. and Weinberg Peter D., Novel wave intensity analysis of arterial pulse wave propagation accounting for peripheral reflections, Int J Numer Meth Biomed Engng, 30, 249-279, 2014.
- [55] Alastruey Jordi, Xiao Nan, Fok Henry, Schaeffter Tobias and Figueroa C. Alberto, On the impact of modelling assumptions in multi-scale, subject-specific models of aortic haemodynamics, J R Soc Interface, 13, 119, 2016.
- [56] Mazumbdar J., An introduction to Mathematical Physiology and Biology, New York, Cambridge University Press, Second Edition, 1999.
- [57] Fung Y. C., Biomechanics: Circulation, New York, Springer-Verlag, 1984.

- [58] Avolio A., Multi-branched model of the human arterial system, Med and Biol Engng and Comput, 18, 709-718, 1980.
- [59] Azer K. and Peskin C., A one-dimensional model of blood flow in arteries with friction and convection based on the Womersley velocity profile, *Cardiov Eng*, 7, 51-73, 2007.
- [60] Sherwin S. J., Formaggia L., Peiró J. and Franke V., Computational modelling of 1D blood flow with variable mechanical properties and its application to the simulation of wave propagation in the human arterial system, *Int J Numer Meth Fluids*, 43, 673-700, 2003.
- [61] Smith N. P., Pullan A. and Hunter P. J., An anatomically based model of transient coronary blood flow in the heart, SIAM J Appl Math, 62, 990-1018, 2002.
- [62] Steele B. N., Wan Jing, Ku J. P., Hughes T. J. R. and Taylor C. A., In vivo validation of a one-dimensional finite-element method for predicting blood flow in cardiovascular bypass grafts, *IEEE Trans Biomed Eng*, 50, 649-656, 2003.
- [63] Willemet Marie, Lacroix Valérie, and Marchandise Emilie, Validation of a 1D patientspecific model of the arterial hemodynamics in bypassed lower-limbs: Simulations against in vivo measurements, *Med Eng Phys*, 35, 1573-1583, 2013.
- [64] Alastruey Jordi, Parker K. and Sherwin S., Arterial pulse wave haemodynamics, In: 11th International Conference on Pressure Surges, edited by Anderson S., Lisbon, Virtual PiE Led t/a BHR Group, 401-442, 2010.
- [65] Reymond Philippe, Merenda Fabrice, Perren Fabienne, Rüfenacht Daniel and Stergiopulos Nikos, Validation of a one-dimensional model of the systemic arterial tree, Am J Physiol Heart Circ Physiol, 297, H208-H222, 2009.
- [66] Chen Peng, Quarteroni Alfio and Rozza Gianluigi, Simulation-based uncertainty quantification of human arterial network hemodynamics, Int J Numer Meth Biomed Engng, 29, 698-721, 2013.
- [67] Willemet M. and Alastruey Jordi, A database of virtual healthy subjects to assess the accuracy of foot-to-foot pulse wave velocities for estimation of aortic stiffness, Am J Physiol Heart Circ Physiol, 309, H663-H675, 2015.
- [68] Huberts W., de Jonge C., van der Linden W. P. M., Inda M. A., Tordoir J. H. M., van de Vosse F. N. and Bosboom E., A sensitivity analysis of a personalized pulse wave propagation model for arteriovenous fistula surgery. Part A: Identification of most influential model parameters, *J Biomech*, 35, 810-826, 2013.
- [69] Eck V. G., Feinberg J., Langtangen H. P. and Hellevik L., Stochastic sensitivity analysis for timing and amplitude of pressure waves in the arterial system, Int J Numer Meth Biomed Eng, 31, 4, 2015.
- [70] Koch Kerstin, Bhushan Bharat and Barthlott Wilhelm, Diversity of structure, morphology and wetting of plant surfaces, *Soft Matter*, 4, 1943-1963, 2008.
- [71] Whitesides George M., The origins and the future of microfluidics, *Nature*, 442, 27, 2006.

- [72] Leslie Daniel C., Easley Christopher J., Seker Erkin, Karlinsey James M., Utz Marcel, Begley Matthew R. and Landers James P., Frequency-specific flow control in microfluidic circuits with passive elastomeric features, *Nat Phys*, 5, 231-235, 2009.
- [73] Zhao Chun-Xia and Middelberg Anton P. J., Two-phase microfluidic flows, *Chem Eng Sci*, 66, 1394-1411, 2011.
- [74] Atencia Javier and Beebe David J., Controlled microfluidic interfaces, Nature, 437, 648-655, 2005.
- [75] Kim Hyung Jin, Jang Woong Ki, Kim Byeong Hee and Seo Young Ho, Advancing liquid front shape control in capillary filling of microchannel via arrangement of microposts for microfluidic biomedical sensors, Int J Precis Eng Manuf, 17, 1, 59-63, 2016.
- [76] Queralt-Martín M., Pradas M., Rodríguez-Trujillo R., Arundell M., Corvera Poiré E. and Hernández-Machado A., Pinning and avalanches in hydrophobic microchannels, *Phys Rev Lett*, 106, 194501, 2011.
- [77] Zimmerman William B. J., Microfluidics: history, theory and applications, Italy, Springer Science & Business Media, 2006.
- [78] Pradas Gené Marc, Interfaces in disordered media. Scaling growth, avalanche dynamics, and microfluidic fronts, Tesis de Doctorado, Universidad de Barcelona, Barcelona, España, 2009.
- [79] Hohenberg P. C. and Halperin B. I., Theory of dynamic critical phenomena, Rev Mod Phys, 49, 435 1977.
- [80] Ledesma Aguilar Rodrigo A., Interfases en sistemas dependientes de la frecuencia, Tesis de Licenciatura, Facultad de Química, UNAM, Cuidad de México, México, 2004.
- [81] Sagan Hans, Introduction to the calculus of variations, New York, Dover Publications, 1992.
- [82] Arfken George B. and Weber Hans J., Mathematical methods for physicists, Boston, Academic Press, Fourth edition, 1995.
- [83] Kusumaatmaja H., Pooley C. M., Girardo S., Pisignano D. and Yeomans J. M., Capillary filling in patterned channels, *Phys Rev E*, 77, 067301, 2008.
- [84] Collepardo Guevara Rosana, Propuesta para aumentar el flujo sanguíneo en obstrucciones trombóticas y ateroscleróticas, Tesis de Licenciatura, Facultad de Química, UNAM, Ciudad de México, México, 2004.