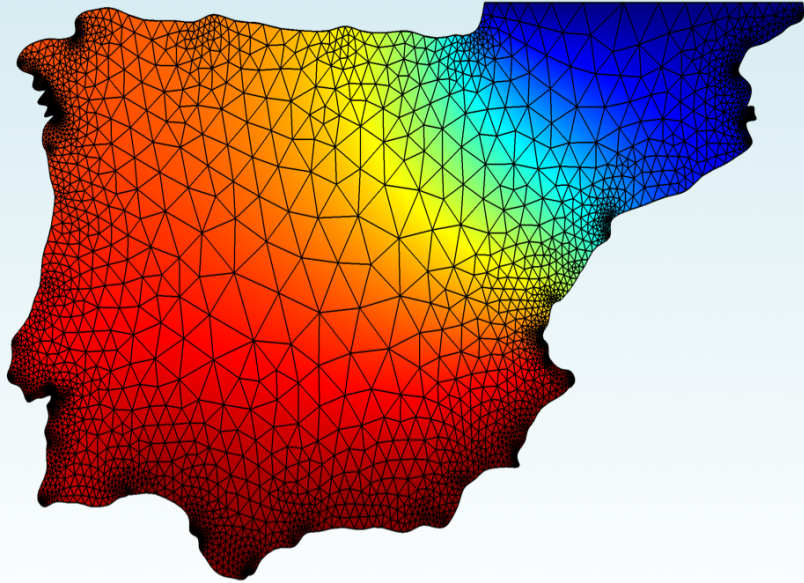




iberiancomsolconference.es



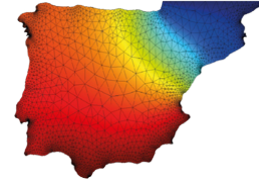
CONFERENCIA de COMSOL Multiphysics

Málaga. 28 Junio 2019



UNIVERSIDAD DE MÁLAGA

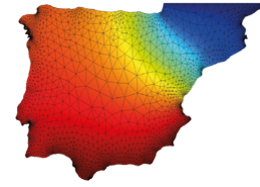




Conferencia de COMSOL Multiphysics 2019

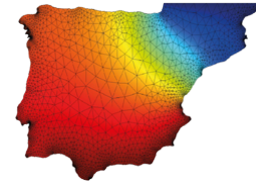
Málaga, 28 de junio de 2019

Libro de la Conferencia. Resúmenes y Artículos



Índice de contenidos

¡Bienvenidos a la Conferencia de COMSOL Multiphysics 2019 en Málaga!	4
Programa de la Conferencia	5
Conferencias invitadas y Minicursos	6
Resúmenes de las Presentaciones	11
Artículos	57
Comités	81



¡Bienvenidos a la Conferencia de COMSOL Multiphysics 2019 en Málaga!

Con gran placer le damos la bienvenida al principal evento en español sobre Modelado y Simulación Multifísica en Ciencias e Ingeniería: la Conferencia de COMSOL Multiphysics 2019. La Conferencia de COMSOL Multiphysics 2019 se celebró el 28 de junio en el Rectorado de la Universidad de Málaga, Málaga, España. La conferencia está co-organizada por la Universidad de Málaga y las empresas Addlink Software Científico (Barcelona, España) y COMSOL AB (Estocolmo, Suecia).

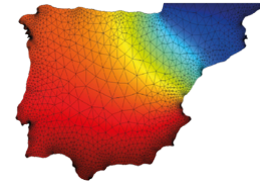
Tras las ediciones de 2014 y 2015, la «Iberian COMSOL Multiphysics Conference» ha sido rediseñada para ofrecer un espacio único a los profesionales interesados en el modelado multifísico, donde prima la formación en tecnología puntera para simulación multifísica, compartir las experiencias personales en el campo de la simulación por elementos finitos y favorecer un clima para establecer redes de contactos. La «Iberian COMSOL Multiphysics Conference», foro de encuentro de la comunidad de usuarios de COMSOL Multiphysics del mundo académico y de la industria, pasa a denominarse «Conferencia de COMSOL Multiphysics» y adopta el castellano como idioma oficial

Nuestro objetivo ha sido reunir a una gran comunidad, científicamente diversa, en un evento que promociona la compartición de experiencias inspiradoras sobre el uso de COMSOL Multiphysics. Para ello, hemos celebrado de nuevo y con gran ilusión este evento internacional, de primer nivel para la simulación y el modelado multifísico. Ha constituido un foro magnífico para conectar con los usuarios de COMSOL Multiphysics y participar en oportunidades de capacitación y actividades diseñadas específicamente para la comunidad científico-académica y de ingeniería profesional. Las presentaciones orales y tipo póster han ejemplificado los novedosos logros en modelado y simulación multifísica utilizando COMSOL Multiphysics.

Además de la inspiración en nuevos métodos, ideas y conocimientos, los asistentes también han podido descubrir y disfrutar de la ciudad de Málaga. Sus orígenes se remontan a los sitios arqueológicos fenicios y púnicos de la época de la fundación de la ciudad. Posteriormente fue un municipio romano con una gran actividad comercial y durante la era árabe se convirtió en la capital de un pequeño reino independiente. Desde la década de 1960, ha sido un destino turístico internacional y el centro de una de las regiones más prósperas del sur de España. Málaga es una ciudad para todos los gustos con actividades para todos, y una ciudad perfecta para ir de compras mientras se explora el centro histórico de la ciudad. Con más de veinte museos, quince de ellos concentrados en el centro histórico, Málaga se ha convertido actualmente en una ciudad de museos. Solamente en el centro histórico hay hasta 24 museos que hacen de Málaga una de las ciudades más densamente desarrolladas en su oferta museística: Museo Picasso, Museo Carmen Thyssen, Centre Pompidou, Centro de Arte Contemporáneo, Colección del Museo Ruso San Petersburgo, Museo Automovilístico y de la Moda, etc.

Finalmente, queremos expresar nuestro agradecimiento a Addlink Software Científico, COMSOL AB, la Secretaría Técnica de la FGUMA, la Universidad de Málaga, al Comité Científico y a todos los conferenciantes por su contribución y asistencia. También a todas las manos que han ayudado, cuyos esfuerzos indudablemente han conseguido que la Conferencia de COMSOL Multiphysics 2019 sea una conferencia para recordar.

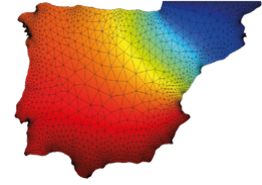
El Comité Organizador de la Conferencia de COMSOL Multiphysics 2019.



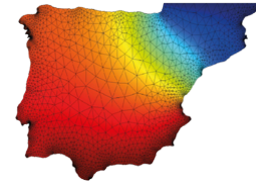
Programa de la Conferencia

Sesión de mañana	
9:00	Registro
9:15 – 9:30	Bienvenida e Introducción
9:30 – 10:30	El entorno de desarrollo de COMSOL Multiphysics Ed Fontes. <i>COMSOL AB, Suecia.</i>
10:30 – 11:45	Minicurso 1 Construcción y distribución de Aplicaciones. Métodos de Modelo. Alejandro Cifuentes López. <i>Addlink Software Científico, España.</i>
11:45 – 12:15	Descanso – Café
12:15 – 13:00	Presentaciones rápidas 1
13:00 – 13:30	Sesión de pósteres 1
13:30 – 15:00	Almuerzo

Sesión de tarde	
15:00 – 16:15	Minicurso 2 Prácticas recomendadas en modelado con COMSOL Multiphysics Ed Fontes. <i>COMSOL AB, Suecia.</i>
16:15 – 16:45	COMSOL Multiphysics en la Industria: La experiencia de Nanusens Josep Montanyà i Silvestre. <i>Nanusens, España.</i>
16:45 – 17:30	Presentaciones rápidas 2
17:30 – 18:00	Sesión de pósteres 2 - Café
18:00 – 19:15	Minicurso 3 Interfaz COMSOL Multiphysics – MATLAB para la resolución de problemas de carácter industrial. María Crespo Moya. <i>Universidad Politécnica de Madrid, España.</i>
19:15 – 19:30	Presentación del Máster de Simulación Numérica en Ciencia e Ingeniería con COMSOL Multiphysics
19:30	Clausura de la conferencia
21:00	Cóctel-cena de la conferencia



Conferencias invitadas y Minicursos



Conferenciantes invitados



Dr. Ed Fontes. COMSOL AB, Sweden.

Doctor en Ingeniería Electroquímica por el Instituto Real de Tecnología (KTH) en Estocolmo, Suecia. Ed Fontes es el Director de tecnología de COMSOL. Durante muchos años fue el responsable de el desarrollo de los productos de mecánica de fluidos, ingeniería química y transferencia de calor. Actualmente forma parte del grupo que establece el desarrollo de COMSOL Multiphysics y de sus módulos, y de COMSOL Server. También está involucrado en las especificaciones e implementación de la funcionalidad de ingeniería electroquímica en COMSOL.

Presentación 1.- El entorno de desarrollo de COMSOL Multiphysics.

La base del entorno de desarrollo de COMSOL Multiphysics está en su núcleo basado en ecuaciones. La interfaz de usuario recibe la definición del problema por parte del usuario en forma de propiedades de material, condiciones de contorno, condiciones iniciales, fuentes, sumideros, restricciones, cargas, etc., y formula un sistema completamente acoplado de ecuaciones diferenciales parciales (EDP). Estas EDP, o sistemas de EDP, se expresan de forma analítica en el modelo matemático, donde el acoplamiento entre ecuaciones y variables dependientes viene definido por sus nombres y sus derivadas, como haríamos con lápiz y papel. Todo este proceso se hace automáticamente.

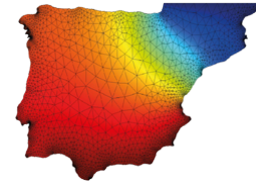
Una vez definido este modelo matemático, se discretiza utilizando métodos de elementos finitos, métodos de elementos de contorno, métodos de Galerkin discontinuos y el método de líneas para formar el modelo numérico. Las ecuaciones numéricas del modelo expresan el mismo acoplamiento detallado entre ecuaciones y variables dependientes que las ecuaciones matemáticas originales del modelo. Las ecuaciones numéricas del modelo se resuelven utilizando una variedad de métodos lineales, no lineales y dependientes del tiempo.

El entorno de desarrollo de COMSOL Multiphysics permite al usuario definir modelos matemáticos y resolver las ecuaciones del modelo en el Model Builder. Estos modelos matemáticos se pueden usar como base para las aplicaciones de simulación que utilizan el Application Builder, con el que se puede construir una interfaz de usuario con una tarea específica sobre el modelo. El COMSOL Compiler se puede usar para compilar estas aplicaciones de simulación en aplicaciones independientes.

Minicurso 3.- Prácticas recomendadas en modelado con COMSOL Multiphysics.

El Model Builder está considerado como un entorno muy fácil de usar para la definición del modelo. Sin embargo, hay métodos y prácticas que hacen que los modelos y los archivos de modelos sean aún más reproducibles, menos propensos a errores y más transparentes. En este minicurso, trataremos los siguientes aspectos de la definición del modelo en el Model Builder:

1. Parámetros y unidades.
2. Operadores de acoplamiento y variables.
3. Parametrización de la geometría y selecciones acumuladas.
4. Operaciones virtuales.



5. Selecciones explícitas.
 6. Materiales y conmutadores de materiales.
 7. Selecciones acumulativas y selecciones en la definición del problema físico.
 8. Nodos exclusivos y contribuyentes.
 9. Modificación del árbol del modelo en el paso de estudio.
 10. Uso de estudios y pasos de estudio.
 11. Uso de secuencias de trabajo.
 12. Resolvedores segregados o acoplados.
 13. Barridos paramétrico y resolvedor de continuación.
 14. Estudios de convergencia de mallas.
 15. Nodos del árbol del modelo especificados por el usuario: grabación y ejecución de métodos.
 16. Generador de informes.
 17. Parámetros en la secuencia de resultados.
 18. Selecciones para gráficos.
 19. Zoom y trávelin.
 20. Gestión de puntos de vista.
 21. Componentes con múltiples modelos.
-



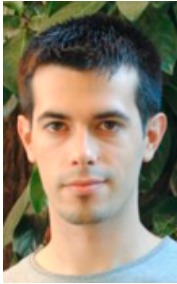
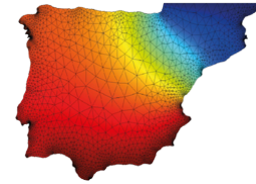
Dr. Josep Montanyà i Silvestre. CEO de Nanusens, Barcelona, España

Lleva más de 14 años trabajando en el diseño de MEMS y en la generación de patentes y negocios en el sector de la industria de semiconductores. Anteriormente, fundó Baolab Microsystems, donde desempeñó el cargo de CTO. Esta empresa también ganó los Premios Elektra en la categoría de I+D y se incluyó dos veces en el ranking *EE Times Silicon 60* de las nuevas empresas electrónicas más prometedoras del mundo. Además de administrar la compañía, es responsable de asegurar una sólida cartera de patentes para proteger las invenciones que se están generando regularmente en Nanusens.

Presentación 2.- COMSOL Multiphysics en la Industria: La experiencia de Nanusens.

Dos años después de que Apple lanzara al mercado los AirPods, el mercado de los earbuds ha empezado a crecer de forma exponencial, pasando de los 100 millones de unidades vendidas en el año 2018, a más de 3.000 millones de unidades que se espera vender anualmente a partir del 2021. Esto supone que el mercado de muchos dispositivos MEMS, incluyendo los sensores inerciales, se multiplicará x4 en 3 años. Dos requerimientos clave de los earbuds para los chips MEMS son tamaño pequeño y bajo coste, además de elevadas prestaciones y fiabilidad.

Nanusens puede satisfacer estas necesidades mejor que ninguna otra empresa, gracias a su tecnología, fabricando los MEMS en un proceso CMOS estándar. Poder salir al mercado cuanto antes es un factor clave, pero los tiempos de fabricación de semiconductores se cuentan en meses. Gracias a COMSOL se pueden simular las prestaciones y ajustar muchos parámetros del diseño, reduciendo el número de ciclos de silicio, y acelerando la salida al mercado de nuevos productos.



Ing. Alejandro Cifuentes López. Addlink Software Científico, España

D. Alejandro Cifuentes López es Ingeniero de Energías por la Universidad Politécnica de Cataluña y Máster en Energías Renovables y Sostenibilidad Energética por la Universidad de Barcelona. Actualmente trabaja en Addlink Software Científico como Ingeniero de Aplicaciones en el Software COMSOL Multiphysics. Además, imparte seminarios y talleres de formación sobre diversos aspectos de COMSOL Multiphysics. Ha trabajado como profesor asociado en la Universidad Politécnica de Cataluña en la asignatura de Simulación Computacional en Mecánica de Fluidos y Transferencia de Calor.

Su especialización profesional se centra en técnicas de producción de hidrógeno de forma sostenible, ya sea por electrólisis mediante pilas de combustible (proyecto COSIN, Instituto de Robótica Industrial de Barcelona) o mediante el reformado de bioalcoholes. En ambos casos realizó extensivas simulaciones numéricas con COMSOL Multiphysics, modelando un reformador de bioetanol real y encontrando sus condiciones operativas optimizadas para maximizar el rendimiento de producción de hidrógeno.

Minicurso 1.- Construcción y distribución de Aplicaciones. Métodos de Modelo.

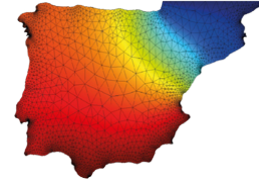
Abordaremos el funcionamiento del Constructor de Aplicaciones, que es una herramienta incluida en la versión Windows de COMSOL Multiphysics. Explicaremos, mediante ejemplos en vivo, la creación y gestión de aplicaciones a partir de modelos numéricos. Además, veremos como se pueden integrar estas aplicaciones en COMSOL Server para su distribución o crear archivos autoejecutables gracias a COMSOL Compiler. Por último, mostraremos cómo podemos automatizar y acelerar la construcción de nuestros modelos mediante el uso de los Métodos de Modelo (“Model Methods”), así como la creación de macros.



Dra. María Crespo Moya. Universidad Politécnica de Madrid, España

Doctora en Investigación Matemática por la Universidad Complutense de Madrid (UCM) y Profesora en el Departamento de Matemática Aplicada a la Ingeniería Industrial de la Universidad Politécnica de Madrid (UPM). Utiliza COMSOL Multiphysics y su interfaz con MATLAB de forma habitual, esencialmente para estudiar distintos fenómenos en el ámbito de la hidrodinámica. Ha participado en diversas actividades formativas para el uso de este software como la “Jornada de Modelización y Optimización con COMSOL Multiphysics” y la “XI Modelling Week”, ambas organizadas en la UCM.

Centra su labor investigadora en abordar problemas de carácter industrial a través de la modelización, el análisis matemático y la optimización. Principalmente ha trabajado con problemas de descontaminación de aguas mediante biorreactores y de gestión de la calidad del agua en recursos naturales (por ejemplo, lagos). También ha trabajado en la caracterización del comportamiento de cristales líquidos confinados en un microcanal y sometidos al flujo de un fluido.

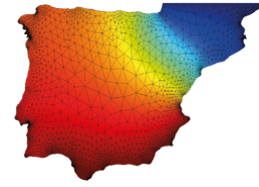


***Minicurso 2.- Interfaz COMSOL Multiphysics – MATLAB
para la resolución de problemas de carácter industrial.***

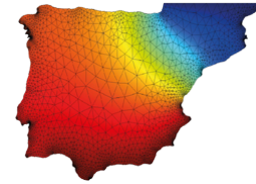
La interfaz de COMSOL Multiphysics a MATLAB (*LiveLink for MATLAB*) proporciona una potente herramienta para la automatización de simulaciones y la realización de operaciones de pre- y postprocesado de las soluciones.

Durante el minicurso veremos cómo utilizar una función MATLAB (ya sea incluida en su librería o autoimplementada) desde el propio escritorio de COMSOL Multiphysics. También aprenderemos a transformar un modelo completo de COMSOL Multiphysics en un script ejecutable de MATLAB y cuáles son los comandos básicos para su manipulación (elección de geometría, mallado, resolvidor numérico, ..., etc.). Esta conversión permite, por ejemplo, que el modelo numérico pueda ser ejecutado dentro de un bucle o empleado como función objetivo en un proceso de optimización.

El aprendizaje de estas técnicas se realizará a través de la resolución in situ de problemas sencillos de carácter industrial.



Resúmenes de las Presentaciones



Índice y Horario de Comunicaciones

Pósteres P1 a P10	12:15 – 13:00	Presentaciones rápidas 1
	13:00 – 13:30	Sesión de pósteres 1

P1: *Ciclos Profundos de Carga y Descarga en Baterías de Litio*, M. M. Cerrillo-González, J. M. Paz-García y M. Villén-Guzmán.

P2: *Reciclado de Baterías Secundarias mediante Técnicas Electrocinéticas*, M. Villén-Guzmán, M. M. Cerrillo-González, J. M. Paz-García.

P3: *Modelado y Simulación de una Columna de Destilación Reactiva*, J. M. Paz-García, M. M. Cerrillo-González y M. Villén-Guzmán.

P4: *Simulación Numérica del Flujo Electro-termo-plasmónico sobre una Matriz de Nanoantenas de Oro para Biodetección*, C. D. González-Gómez, E. Ruiz-Reina, R. A. Rica.

P5: *Metodología de Cálculo de Energía para Carga por Inducción Dinámica*, O. García-Izquierdo, J. L. Villa y J. F. Sanz.

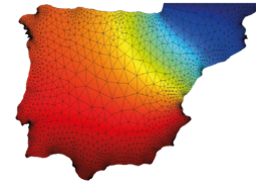
P6: *Análisis Electromagnético de Cables Submarinos Trifásicos Armados mediante Modelos 3D*, J. C. del-Pino-López y P. Cruz-Romero.

P7: *Análisis del Uso de un Sensor Resistivo como Sensor de Proximidad Capacitivo*, J. Castellanos-Ramos, R. Navas-González y F. Vidal-Verdú.

P8: *Modelado multifísico para prevenir la contaminación por fósforo en los Everglades, Florida*, J. García, A. Solimeno, L. Zhang y W. J. Mitsch.

P9: *Reconstrucción topográfica aplicada al Microscopio de Fuerzas Electroestáticas (EFM)*, G. Gomila, R. Millán-Solsona y M. Checa.

P10: *Optimization of a Rectangular Microwave Cavity*, R. Manno, H. Nigar, V. Sebastián, B. García-Baños, J.M. Catalá-Civera, J. Santamaría, F.L. Peñaranda-Foix and R. Mallada.



Pósteres P11 a P20	16:45 – 17:30	Presentaciones rápidas 2
	17:30 – 18:00	Sesión de pósteres 2

P11: *Descarga Corona Positiva Como Nuevo Método de Refrigeración Avanzada en Aire Atmosférico para Aplicaciones Aeronáuticas*, M. M. Cogollo, A. Díaz-Lantada y H. Puago.

P12: *Simulaciones para el Estudio y Aplicaciones en Nanofotónica de la Dispersión de Luz por Nanohilos Metálicos Plasmónicos*, J. Muñoz-Madrid, E. Ruiz-Reina, C.D. González-Gómez, I. Iglesias, J. Colchero.

P13: *Dinámica Computacional de Fluidos (CFD) Aplicada al Diseño de Fotobiorreactores para la Producción de Microalgas*, C. Inostroza-González, A. Solimeno, J. García-Serrano, F.G. Acien-Fernández y J.M. Fernández-Sevilla.

P14: *Predicting the Fate of Contaminant and Remediating Nano-particles in a Polluted Aquifer with an Integrated Modeling Approach*, S. Nilabh, F. Grandia.

P15: *Uso de App Builder para la Implementación en COMSOL Multiphysics de Recursos Docentes para su uso en Prácticas de Laboratorio de Mecánica de Fluidos y Transferencia de Calor*, A. Cifuentes, A. Martínez, V. Roda, J. Grau, R. Torres.

P16: *Challenges in Finite Element Analysis of a Deformed Metasurface Unit Cell Using COMSOL Multiphysics*, R. Karimi-Mahabadi, T. Goudarzi, R. Fleury, S. Sohrabpour and Reza Naghdabadi.

P17: *Modelo Numérico Multiescala para Reproducir la Propagación de Grieta en Geometrías 3D*, J. M. Muñoz-Guijosa, C. Aguanell-Garrido y G. Fernández-Zapico.

P18: *Modelización, Simulación y Optimización para la Gestión de la Calidad del Agua en Lagos*, M. Crespo-Moya y A. Rapaport.

P19: *Modelado y Simulación de un Reactor Catalítico*, P. García Ruiz, A. G. Michelangelli-Cedeño y J. M. Paz-García.

P20: *Modelado y Simulación de Deposición de Elementos Presentes en la Corriente de Alimentación en Catálisis Heterogénea*, A. G. Michelangelli-Cedeño, P. García-Ruiz y J. M. Paz-García.

Ciclos Profundos de Carga y Descarga en Baterías de Litio

M.M. Cerrillo-González¹, J.M. Paz-García^{1*} y M. Villén-Guzmán¹

¹Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga

*Autor de contacto: Facultad de Ciencias, Campus de Teatinos s/n. 29071 Málaga.

juanma.paz@uma.es

Resumen

Las baterías de litio juegan un papel fundamental en nuestra sociedad, ya que son los sistemas de almacenamiento de energía más utilizados en los dispositivos electrónicos portátiles, y los que dominan el sector de los vehículos eléctricos. Además, estas baterías tienen un gran potencial para ser utilizadas como sistemas de alimentación eléctrica proveniente de fuentes renovable [1].

Una de las propiedades más importantes de las baterías de litio es su durabilidad. Aunque la degradación de la batería es inevitable, esta se ve acelerada cuando se producen sobrecargas [1]. Para evitar que esto ocurra, las baterías disponen de un sistema de seguridad conocido como BMS, del inglés “*Battery management system*”, que detiene la carga o descarga cuando se alcanzan los valores límites de voltaje en la celda [2], aunque el estado de carga (SoC) o profundidad de descarga (DoC) no sean del 100%. Si se quiere conseguir dicho valor, la batería ha de someterse a ciclos “profundos” de carga y descarga, en los cuales, una vez alcanzado los valores límites de voltaje y manteniéndolos constantes, se va disminuyendo la intensidad de corriente hasta llegar aproximadamente al 2% de la intensidad nominal de la batería [2].

El presente estudio se ha realizado con el objetivo de conocer el comportamiento de las baterías cuando son sometidas a ciclos profundos de carga y descarga. Para ello, se ha estudiado la ciclabilidad de baterías de litio-polímero a diferentes velocidades de carga, lo que ha permitido conocer la carga remanente de las baterías una vez alcanzado los voltajes límites de la celda, como influye la descarga en la carga posterior, así como la degradación y pérdida de capacidad después de un número determinado de ciclos de carga. Los resultados experimentales han sido comparados con simulaciones basadas en el modelo de Newman y el modelo de partículas simples para baterías de Litio Polímero. Para ello, se ha hecho uso del módulo “Battery and fuel cell module”, concretamente el interfaz de baterías de ion litio.

Referencias

1. G. Zubi, R. Dufo-López, M. Carvalho, G. Pasaoglu, The lithium-ion battery: State of the art and future perspectives, *Renew. Sustain. Energy Rev.* **89**, 292–308 (2018).
2. Z. Wang, S. Zeng, J. Guo, T. Qin, State of health estimation of lithium-ion batteries based on the constant voltage charging curve, *Energy*, **167**, 661–669 (2019).

Reciclado de Baterías Secundarias mediante Técnicas Electrocinéticas

M. Villén-Guzmán¹, M. M. Cerrillo-González¹, J. M. Paz-García^{1*}

¹Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga

*Autor de contacto: Facultad de Ciencias, Campus de Teatinos s/n. 29071 Málaga
juanma.paz@uma.es

Resumen

La necesidad de desarrollar procesos de reciclado de baterías cobra protagonismo debido al aumento del consumo de este tipo de baterías en dispositivos electrónicos y vehículos eléctricos. Los procesos de reciclado deben estar dirigidos tanto a disminuir el impacto negativo sobre el medio ambiente como a reutilizar los recursos naturales. En este sentido, cabe destacar que algunos de los componentes de las baterías de Ion-Litio, tales como el cobalto y el grafito natural, se clasifican como materias primas críticas para la Unión Europea debido a su gran relevancia por motivos económicos y por el riesgo de escasez. Asimismo, otros componentes fundamentales de las baterías, tales como el litio y el níquel, son considerados también materias primas de gran valor desde el punto de vista económicos por motivos de disponibilidad y su gran impacto industrial [1].

En este trabajo, se evaluará la aplicación de la técnica electrodiálítica a los residuos de baterías. Esta tecnología se fundamenta en la combinación del uso de corriente eléctrica con el de membranas intercambiadoras de iones que separan el sólido de las disoluciones contenidas en los compartimentos electrolíticos. Las especies presentes en la matriz contaminada son transportadas por medio de diversos mecanismos, principalmente, electromigración y difusión química, hacia los compartimentos electrolíticos. La configuración del sistema experimental, es decir, el número de compartimentos de las celdas, el tipo de membrana seleccionada y el mecanismo de agitación deberá optimizarse en base a, entre otros parámetros, la composición de la batería a reciclar y los componentes que se quieran recuperar [2].

Mediante simulaciones realizadas basadas en Nernst-Planck-Poisson, usando los módulos “Battery and fuel cell module” y “Chemical Reaction Engineering Module”, se obtienen resultados que aportan relevante información para el desarrollo de la tecnología sobre el transporte y el equilibrio de las especies químicas presentes [3]. Los resultados permitirán tanto la optimización de las condiciones experimentales para maximizar la recuperación de los componentes de interés como la predicción del tratamiento dependiendo de la composición del residuo procedente de baterías secundarias.

Agradecimientos

Este trabajo ha recibido financiación mediante el programa europeo de investigación e innovación Horizonte 2020 mediante la acción “Marie Skłodowska-Curie” (Ref. 778045). Asimismo, M.Villén-Guzmán agradece a la Universidad de Málaga la financiación de este trabajo mediante un contrato postdoctoral del Plan Propio de Investigación.

Referencias

1. European Commission DG Environment by the Science Communication Unit, Science for Environment Policy. Towards the battery of the future (2018). ISBN: 978-92-79-84040-1.
2. M. Villen-Guzman, B. Arhoun, C. Vereda-Alonso, C. Gomez-Lahoz, J.M. Rodriguez-Maroto, J.M. Paz-Garcia. Electrolytic processes in solid matrices. New insights into battery recycling. A review. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, **94**, 1727-1738 (2019).
3. J.M. Paz-Garcia, M. Villen-Guzman, A. Garcia-Rubio, S. Hall, M. Ristinmaa, C. Gomez-Lahoz. A coupled reactive-transport model for electrokinetic remediation in *Electrokinetics Across Disciplines and Continents*. Springer, Switzerland (2016).

Modelado y Simulación de una Columna de Destilación Reactiva

J. M. Paz-García^{*1}, M. M. Cerrillo-González¹ y M. Villén-Guzmán¹

¹Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga

*Autor de contacto: Facultad de Ciencias, Campus de Teatinos s/n. 29071 Málaga

juanma.paz@uma.es

Resumen

La destilación reactiva es la combinación de los procesos de destilación continua y reacción química en un único aparato. La combinación de operaciones químicas, dentro de lo que se conoce como la intensificación de procesos, aporta numerosas ventajas con respecto a los procesos secuenciales tradicionales. En particular, la destilación reactiva es capaz de llevar a cabo procesos de reacción con destilación que estarían de otra forma limitados por el equilibrio químico o la formación de azeótropos, respectivamente, de ser llevados a cabo en un reactor y una columna de destilación. Asimismo, los procesos de destilación reactiva son capaces de obtener el mismo producto utilizando un número considerablemente menor de aparatos, lo que supone un ahorro en muchos aspectos, tales como en energía, personal, mantenimiento y control.

Utilizando el módulo de Ingeniería de la Reacción Química, se ha llevado a cabo la simulación de una columna de destilación reactiva para la formación de acetato de metilo a partir de ácido acético y metanol. A través de la intensificación de procesos, es posible llevar a cabo la formación del producto mediante el uso de tres aparatos (columna de destilación reactiva, caldera y condensador), en lugar de los veintisiete aparatos que harían falta para obtener la misma coinversión con métodos convencionales.

En este trabajo, se muestran los resultados de la simulación comparando el supuesto de equilibrio químico local en cada etapa con el proceso en condiciones de control cinético. Asimismo, el modelo permite evaluar la variación de la pureza en función del número de platos de la columna para una alimentación determinada. La columna de destilación reactiva modelada en este trabajo puede fácilmente adaptarse para la obtención de otros productos químicos a través de procesos de destilación reactiva.

Referencias

1. Andrzej Stankiewicz, Reactive separations for process intensification: an industrial perspective, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, **42**, 137-144 (2003).
2. R.Krishna, Reactive separations: more ways to skin a cat, *Chemical Engineering Science*, **57**, 1491-1504 (2002).
3. Yingjie Ma, Yiqing Luo, Xigang Yuan, Equation-oriented optimization of reactive distillation systems using pseudo-transient models, *Chemical Engineering Science*, **195**, 381-398 (2019).
4. Y. Tian, S. Demirel, M. Hasan, E.N. Pistikopoulos. An overview of process systems engineering approaches for process intensification: State of the art, *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, **133**, 160-210 (2018).

Simulación Numérica del Flujo Electro-termo-plasmónico sobre una Matriz de Nanoantenas de Oro para Biodetección

C. D. González-Gómez^{*1}, E. Ruiz-Reina¹, R.A. Rica^{2,3}

¹Departamento de Física Aplicada II, Universidad de Málaga.

²Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada.

³ICFO-Institut de Ciències Fotòniques.

*Autor de contacto: Departamento de Física Aplicada II, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, 29071 - Málaga, cdgg@uma.es

Resumen

Los biosensores basados en sensores plasmónicos se perfilan como una plataforma potente, económica y portátil para la detección de patógenos y biomarcadores. En particular, los sistemas fundamentados en la resonancia de plasmones superficiales localizados (LSPR), que se basan en la identificación de desplazamientos en la resonancia, ofrecen alta sensibilidad, especificidad y detección en tiempo real [1]. No obstante, el rendimiento está fuertemente limitado por la lentitud impuesta por el transporte difusivo de las especies. Varios autores han analizado diferentes vías para solventar esta limitación, utilizando optofluídica [2] y efectos electrocinéticos [3,4].

COMSOL Multiphysics se ha utilizado para resolver la dinámica del flujo electro-termo-plasmónico en un microchip con sensor plasmónico. La dinámica queda descrita por un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales acopladas. Hemos modelado cómo el gradiente de temperatura producido por un haz láser incidente en la nanoestructura, combinado con un campo eléctrico alterno, da lugar a flujos convectivos, y el transporte de partículas asociado, dentro del micronal [5,6]. Para ello, se hizo uso de las interfaces físicas Creeping Flow y Heat Transfer in Fluids, con una fuerza volumétrica de efecto electro-termo-plasmónico. Los resultados numéricos han sido contrastados con ensayos experimentales [7].

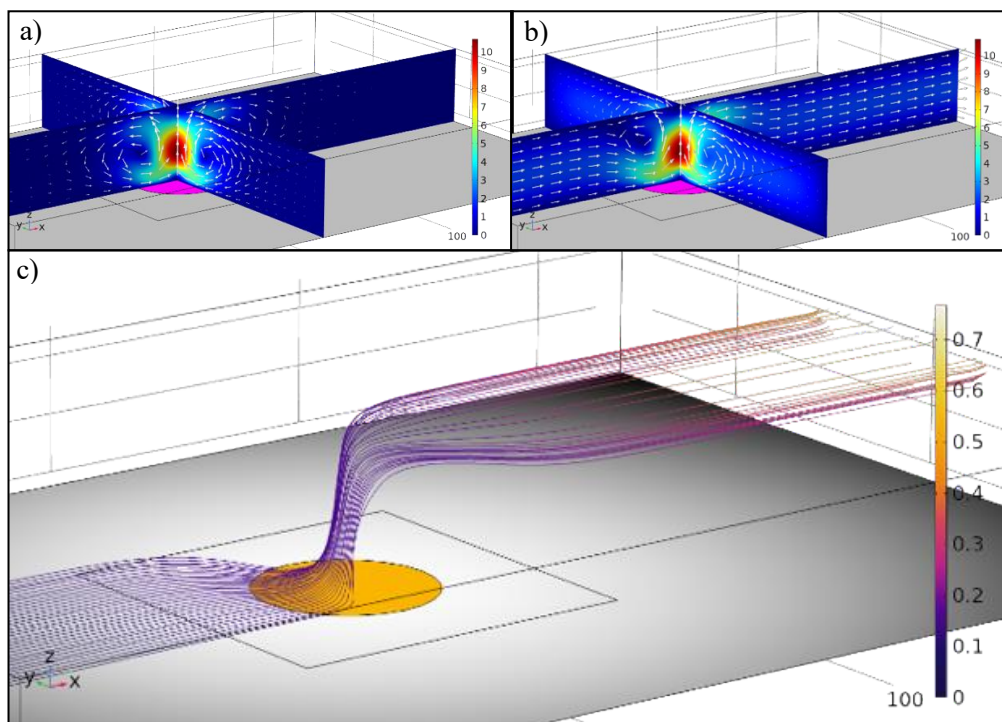


Figura 1: Simulación de los flujos electro-termo-plasmónicos generados dentro del microcanal. (a) Sin flujo de entrada en el microcanal. (b) Con flujo de entrada (bomba microfluídica encendida). (c) Trayectoria de las partículas entrantes.

Concluimos que el efecto electro-termo-plasmónico puede implementarse en un biosensor de modo que conseguimos superar las limitaciones impuestas por la difusión y maximizar el rendimiento de detección. Los resultados obtenidos permitirán la construcción de diseños optimizados de dispositivos *lab-on-a-chip*.

Referencias

1. S.S. Acimovic *et al.*, LSPR Chip for Parallel, Rapid, and Sensitive Detection of Cancer Markers in Serum, *Nano Letters*, **14**, 2636-2641 (2014).
2. G. Baffou and R. Quidant, Thermo-plasmonics: using metallic nanostructures as nano-sources of heat. *Laser & photonics Reviews*, **7**, 171-187 (2013).
3. B.J. Roxworthy *et al.*, Understanding and controlling plasmon-induced convection, *Nature Communications*, **5**, 3173-3181 (2014).
4. Protiva Rani Roy *et al.*, Enhancing the Performance of Surface-based Biosensors by AC Electrokinetic Effects – a Review, *Biosensors – Emerging Materials and Applications*, Prof. Pier Andrea Serra (Ed.), InTech, 243-264 (2011).
5. N.G. Green *et al.*, Electrothermally induced fluid flow on microelectrodes, *Journal of Electrostatics*, **53**, 71-87 (2001).
6. J.C. Ndukaife *et al.*, Long-range and rapid transport of individual nano-objects by a hybrid electrothermoplasmonic nanotweezer, *Nature nanotechnology*, **11**, 53-59 (2016).
7. J. Garcia-Guirado *et al.*, Overcoming diffusion-limited biosensing by electro-thermo-plasmonics, *ACS Photonics*, **5**, 3673-3679 (2018).

Metodología de Cálculo de Energía para Carga por Inducción Dinámica

O. García-Izquierdo¹, J. L. Villa^{*2} y J. F. Sanz³

¹Fundación CIRCE,

²Departamento de Ingeniería Eléctrica, Universidad de Zaragoza,

³Departamento de Ingeniería Eléctrica, Universidad de Zaragoza

*Oscar García-Izquierdo Gango: Parque Empresarial Dinamiza Avda. de Ranillas 3D, 1ª Planta
50018 Zaragoza, ogarcia@fcirce.es

Resumen

Actualmente la carga del vehículo eléctrico (VE) se lleva a cabo principalmente por métodos conductivos de distintas potencias, no obstante, también se han empezado a desarrollar sistemas de carga inalámbrica mediante inducción o WPT (Wireless Power Transfer) [1], los cuales permiten minimizar el impacto visual y aumentar la seguridad del usuario. Algunos de estos sistemas de carga mediante inducción permiten la carga del VE en movimiento al colocarse en las carreteras, lo cual podría ayudar a aumentar la autonomía.

La metodología de análisis de cálculo de energía para carga por inducción dinámica que se va a presentar consta de dos partes, la primera está basada en la herramienta COMSOL Multiphysics y la segunda en MATLAB.

En la primera parte se realizará la simulación electromagnética mediante COMSOL Multiphysics del sistema inductor simplificado (Figura 1), el cual está formado por el conjunto inductor de tierra, ferrita y apantallamiento, y por el conjunto inductor de abordaje, ferrita y apantallamiento. El modelado del sistema se realizará mediante la introducción de una densidad de corriente en el inductor de tierra (Figura 2); posteriormente se obtendrán los parámetros de autoinductancia y acoplamiento magnético, mediante la introducción de las fórmulas analíticas [2]. Esta simulación se repetirá desplazando el inductor secundario según el eje y, para poder modelar de esta manera el movimiento del VE.

En la segunda parte mediante MATLAB y gracias a los resultados previamente obtenidos, se determinará el comportamiento eléctrico (potencias, tensiones máximas y corrientes máximas) en los diferentes elementos que forman el circuito (Figura 3), y en las diferentes posiciones de carga analizadas previamente. Este modelado mediante simulación permite dimensionar adecuadamente los diferentes componentes electrónicos, a la vez que analizar diferentes estrategias de control.

Esta metodología de cálculo permitirá los siguientes resultados tanto en el dimensionamiento del inductor como de la electrónica:

- Reducción en tiempo y precio en el diseño de un sistema dinámico de transferencia de energía inalámbrica, al contar con un modelo matemático parametrizado que permite el análisis de diferentes soluciones de una manera rápida.
- Optimización del sistema inductor enfocado, sobre todo, a sistemas de carga dinámica.
- Dimensionamiento de la electrónica y teniendo en cuenta regulaciones como la de corriente máxima.
- Cálculo de la energía transferida en función de las dimensiones del sistema inductor.

- Obtención de un adecuado sistema de control del proceso de carga.

En el congreso, se presentará una metodología de análisis de un sistema de transferencia de energía mediante inducción, la cual permitirá un correcto dimensionamiento y abrir el campo de estudio de este tipo de cargas para VE, permitiendo su optimización y comparativas entre diferentes formas de inductores o distintas topologías de electrónica.

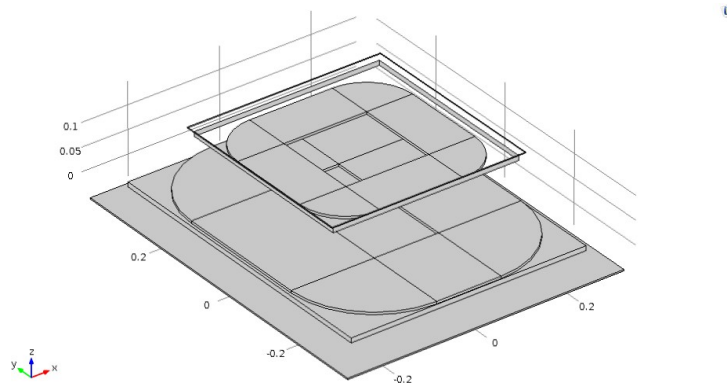


Figura 1: Modelado de la geometría.

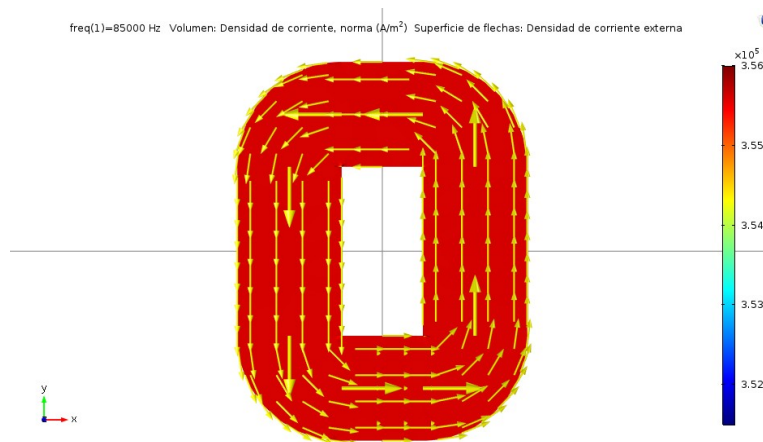


Figura 2: Densidad de corriente definida en el inductor de tierra.

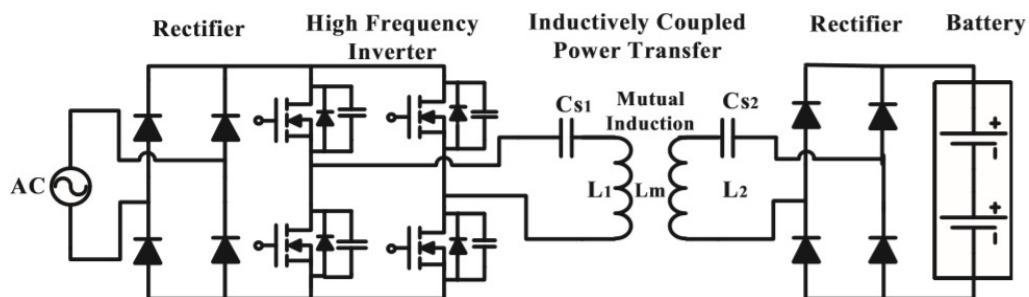


Figura 3: Topología de transferencia de energía por inducción S-S.

Referencias

1. J. Villa, J. Sallán, J. Sanz and A. Llombart, High-Misalignment Tolerant Compensation Topology For ICPT Systems, *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, ISSN 0278-0046 , **59** (2012), 945- 951.
2. C. Carretero et al., Elliptic Flat-Type Inductor for Low-Cost Flexible Active Surface Implementations of Domestic Induction Heating Appliances, Twenty-Eighth Annual IEEE Applied Power Electronics Conference and Exposition (APEC), 2013.

Análisis Electromagnético de Cables Submarinos Trifásicos Armados mediante Modelos 3D

J. C. del-Pino-López*¹ y P. Cruz-Romero¹

¹Departamento de Ingeniería Eléctrica, Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Universidad de Sevilla

*Autor de contacto: Camino de los Descubrimientos s/n, 41092, Sevilla, España, vaisat@us.es

Resumen

En los últimos años se ha producido un importante despliegue de parques eólicos a nivel mundial, especialmente en entornos marinos. El alto coste económico de dichas instalaciones hace necesario optimizar el diseño y fiabilidad de cada uno de sus elementos, como los cables de interconexión y exportación de la energía producida [1]. En el caso de cables trifásicos armados, sus parámetros eléctricos y pérdidas electromagnéticas se han caracterizado hasta ahora en base a suposiciones erróneas debidas al uso de geometrías en 2D que omiten el hecho de que las fases y los hilos de la armadura están trenzados entre sí, dando lugar a cables sobredimensionados [2-4]. Esto pone de manifiesto la necesidad de actualizar las expresiones normalizadas empleadas hasta el momento, para lo cual es necesario disponer de nuevas herramientas que faciliten el estudio de cables de esta complejidad para optimizar su diseño y reducir el número de costosas experiencias de laboratorio. En este punto, COMSOL Multiphysics se postula como una potente herramienta de simulación adecuada para esta tarea.

Mediante el módulo AC/DC se han realizado modelos 3D de cables armados trifásicos desde 10 kV hasta 245 kV, obteniéndose sus parámetros eléctricos (impedancia de secuencia directa) y las pérdidas producidas en fases, pantallas y armadura (Figura 1). Para ello se aprovecha la periodicidad geométrica del cable (Figura 2) para aplicar condiciones de contorno de periodicidad, siendo necesaria una longitud para el modelo igual al mínimo común múltiplo del paso de trenzado de fases y armadura. Esta longitud conlleva altos tiempos de computación, siendo necesarios equipos de altas prestaciones computacionales. Sin embargo, gracias a las herramientas que ofrece COMSOL Multiphysics para el análisis y la representación gráfica de resultados, se ha observado un cierto patrón, tanto en el flujo magnético (Figuras 2 y 3) como en las corrientes inducidas, que permite acortar apreciablemente la longitud del modelo 3D (Figura 3) mediante la aplicación de las pertinentes condiciones de contorno [5,6].

Este trabajo ha permitido caracterizar la mínima longitud con la que realizar el modelo electromagnético en 3D de cables armados trifásicos, siendo aquella para la cual un determinado hilo de la armadura se cruza de nuevo con una cierta fase (indicado con flechas rojas en la Figura 2). Así, solo es necesario modelar en 3D una porción como la de la Figura 3, donde la condición de periodicidad debe modificarse adecuadamente para considerar la posición relativa entre las caras origen y destino del modelo (Figura 4). Este nuevo método permite reducir el tiempo de simulación hasta más de un 90 % dependiendo del cable. Además, los parámetros eléctricos obtenidos mediante este modelo acortado solo difieren en menos del 2 % respecto a medidas experimentales.

Gracias a las prestaciones de COMSOL Multiphysics ha sido posible plantear una nueva aproximación para la simulación de cables trifásicos armados en 3D con objeto de caracterizar sus parámetros eléctricos y las pérdidas que en ellos se producen, reduciéndose enormemente los requisitos y tiempos de computación.

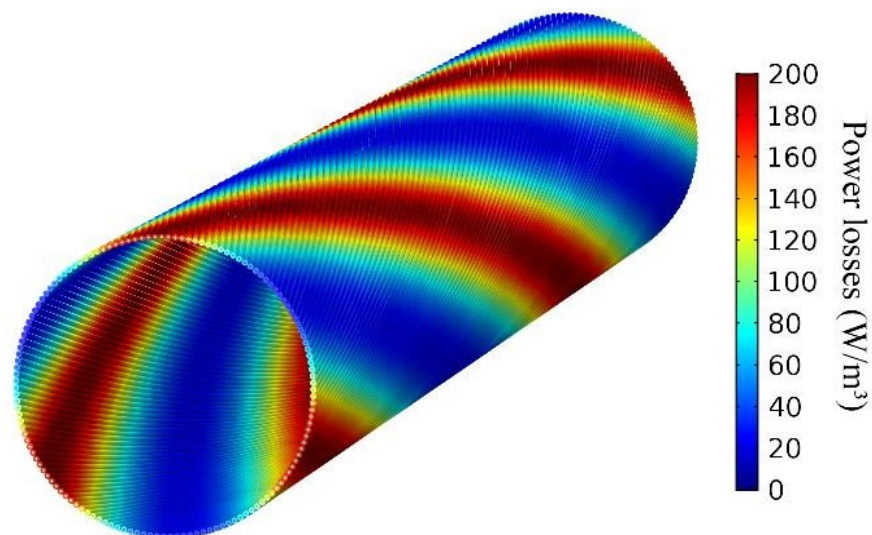


Figura 1: Densidad de pérdidas en armadura.

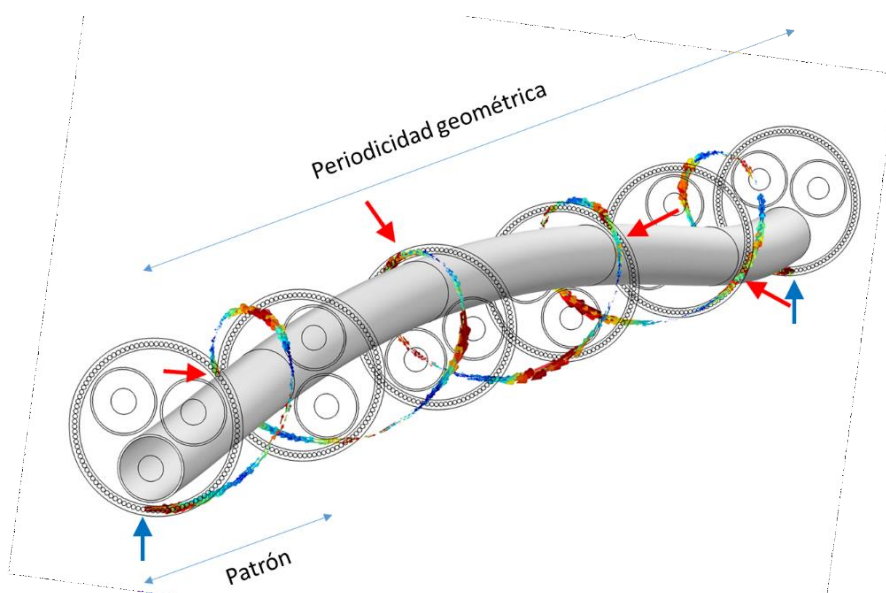


Figura 2: Periodicidad geométrica y patrón.

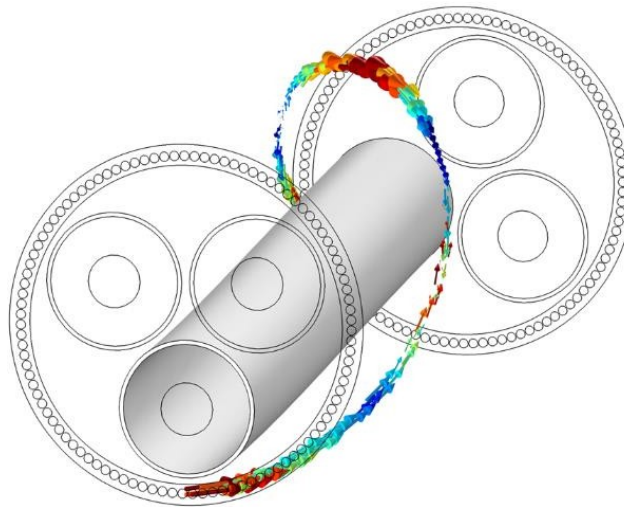


Figura 3: Modelo 3D acortado.

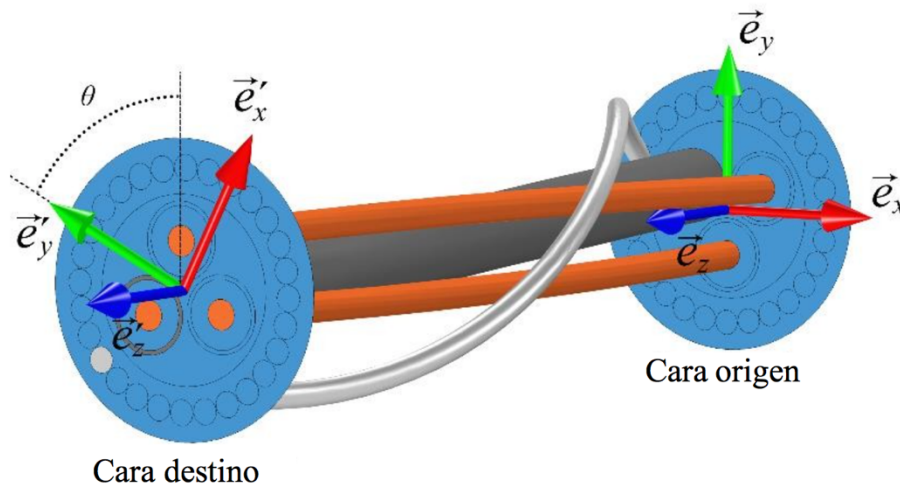


Figura 4: Orientación relativa de caras origen y destino en modelo 3D acortado.

Referencias

1. S. Rodrigues, C. Restrepo, E. Kontos, R. Teixeira Pinto, P. Bauer, Trends of offshore wind projects, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, **49**, 1114-1135 (2015).
2. W. Frelin, C. Moreau, D. Willen, C. Thidemann, G. De Robien, N. Boudinet, Measurements of losses on three core power cables, *Proceedings of JiCable* (2015).
3. M. Hatlo, E. Olsen, R. Stølan, Accurate analytical formula for calculation of losses in three-core submarine cables, *Proceedings of JiCable* (2015).
4. F. F. da Silva, T. Ebdrup, C. L. Bak, C. F. Jensen, Understanding losses in three core armored submarine cables, *Proceedings of the CIGRÉ Session* (2014).
5. J. C. del-Pino-López, M. Hatlo, P. Cruz-Romero, A 3D Parametric Analysis of Three-core Armored Power Cables Series Impedance, *Proceedings of International Conference on Smart Energy Systems and Technologies* (2018).
6. J. C. del-Pino-López, M. Hatlo, P. Cruz-Romero, On simplified 3D finite element simulations of three-core armoured power cables, *Energies*, **11**, 3081 (2018).

Análisis del Uso de un Sensor Resistivo como Sensor de Proximidad Capacitivo

J. Castellanos-Ramos^{1*}, R. Navas-González¹ y F. Vidal-Verdú¹

¹Departamento de Electrónica, Universidad de Málaga

*Autor de contacto: Escuela de Ingenierías Industriales, Ampliación Campus de Teatinos, 29071 Málaga, jcramos@uma.es

Resumen

En el campo de la robótica está muy extendido el uso de los sensores táctiles en tareas de manipulación y asistencia. Pero estos sensores proporcionan información una vez han entrado en contacto con el objetivo. En tareas de asistencia, en la que hay una interacción hombre-máquina, es importante la detección antes del contacto. Y es aquí donde los sensores de proximidad en robots de cooperación o asistencia cobran especial relevancia para prevenir daños a humanos u objetos [1][2]. Hay numerosos autores que proponen sensores duales capaces de dar información antes y después del contacto [3][4].

Los autores proponen el uso de un sensor de fuerza resistivo comercial (FSR) de Interlink Electronics [5] para ser usado como sensor dual capaz de detectar proximidad y fuerza (ver

Figura 1). Estos sensores resistivos, diseñados para suministrar información acerca de la fuerza aplicada sobre ellos, pueden usarse para detectar la proximidad explotando las capacidades parásitas entre sus electrodos.

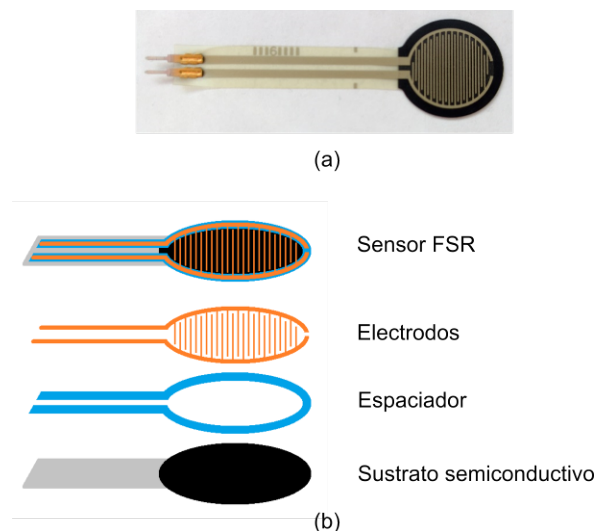


Figura 1: Foto (a) y esquema (b) de las capas de un sensor FSR.

La herramienta COMSOL Multiphysics se ha utilizado para hacer un estudio de la variación de la capacidad en el condensador plano que se crea entre los electrodos del sensor FSR y el plano de masa del circuito impreso en el que se integra. Para realizar el estudio se utiliza el módulo AC/DC [6].

La geometría del modelo viene definida por los electrodos del sensor FSR, el plano de masa que lo envuelve en la placa de circuito impreso en la que el sensor se integra, una placa cuadrada del tamaño de la parte activa del sensor FSR y una esfera de aire (ver Figura 2). La placa cuadrada simula el efecto de un material conductor, como puede ser cualquier parte de un ser humano, acercándose o alejándose del sensor.

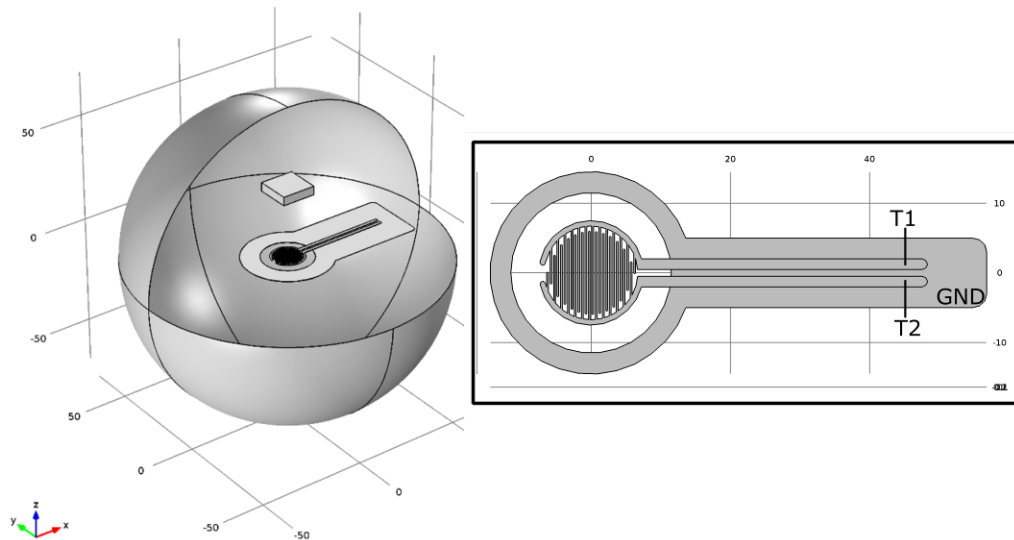


Figura 2: Geometría del modelo.

El sensor FSR tiene dos terminales T1 y T2. La capacidad entre estos dos electrodos no puede ser usada debido a la geometría en forma de peine del sensor que hace que las líneas de campo estén muy concentradas, lo que implica un rango y una sensibilidad del sensor de proximidad muy pequeños. Por lo tanto, se analizará la capacidad creada entre uno de los electrodos T1 y el plano de masa GND. Por otro lado, se analizará la influencia del potencial eléctrico definido en el otro terminal T2. Se realizan simulaciones paramétricas para obtener curvas de variación de la capacidad con la distancia de la placa al sensor. Además, se analiza la salida cuando la placa está conectada a masa, o flotante (ver Figura 3). Haciendo uso del módulo “LiveLink for Matlab” se extraen y combinan los datos para ser mostrados.

Se observa en la Figura 3 que la capacidad entre el terminal T1 y GND varía de forma monótona decreciente con el aumento de la distancia al sensor FSR, y que además, el terminal T2 hay que conectarlo al mismo potencial que T1 (5V en este caso) para obtener un mayor rango y sensibilidad.

El sensor FSR resistivo puede aprovecharse, con la electrónica de acondicionamiento adecuada, para fabricar un sensor dual capaz de medir proximidad y fuerza.

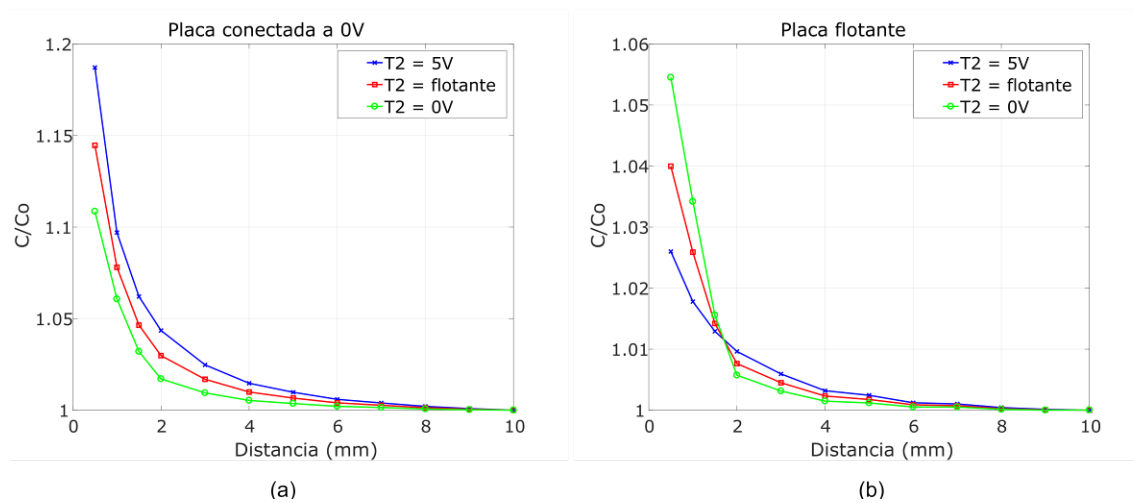


Figura 3. Variación de la capacidad con la distancia de la placa conectada a masa (a) y flotante (b), y el terminal T2 conectado a diferentes voltajes.

Referencias

1. V. J. Lumelsky, M. S. Shur, and S. Wagner, "Sensitive skin," *IEEE Sens. J.*, vol. 1, no. 1, pp. 41–51, Jun. 2001.
2. J. L. Novak and I. T. Feddema, "A capacitance-based proximity sensor for whole arm obstacle avoidance," in *Proceedings 1992 IEEE International Conference on Robotics and Automation*, 1992, pp. 1307–1314.
3. D. Goger, H. Alagi, and H. Worn, "Tactile proximity sensors for robotic applications," in *Proceedings of the IEEE International Conference on Industrial Technology*, 2013, pp. 978–983.
4. H. K. Lee, S. Il Chang, and E. Yoon, "Dual-Mode Capacitive Proximity Sensor for Robot Application: Implementation of Tactile and Proximity Sensing Capability on a Single Polymer Platform Using Shared Electrodes," *IEEE Sens. J.*, vol. 9, no. 12, pp. 1748–1755, 2009.
5. Interlink Electronics, "FSR Integration guide," 2017. [Online]. Available: http://www.produktinfo.conrad.com/datenblaetter/500000-524999/503368-an-01-en-DRUCKSENSOR_FSR_400.pdf. [Accessed: 04-Feb-2019].
6. COMSOL Multiphysics, "AC/DC Module: Model Library Manual," 2013.

Modelado multifísico para prevenir la contaminación por fósforo en los Everglades, Florida

J. García^{*1}, A. Solimeno², L. Zhang³ y W. J. Mitsch³

¹GEMMA-Group of Environmental Engineering and Microbiology, Department of Civil and Environmental Engineering, Technical University of Catalonia-BarcelonaTech, Spain;

²Technical Institute of Canary Islands, Gran Canaria, Spain;

³Everglades Wetland Research Park, Florida Gulf Coast University, Naples, FL, USA.

*Autor de contacto: c/Jordi Girona 1-3, 08034 Barcelona; joan.garcia@upc.edu

Resumen

Los Everglades constituyen una de las mayores zonas húmedas del mundo, con un alto valor ecológico y una gran biodiversidad. El crecimiento rápido agrícola y urbano en el sur de Florida ha alterado la hidrología de la zona, además de aumentar los vertidos de contaminantes a un ecosistema sensible. Los Everglades están amenazados por descargas de escorrentía agrícola con concentraciones elevadas de fósforo (P) procedente de los abonos empleados en la producción agrícola. Para evitar esta contaminación las instituciones públicas del sur de Florida han construido zonas húmedas artificiales (llamadas STA, “storm treatment áreas”), ocupando más de 20000 ha y con la previsión de ampliar la superficie mucho más. El agua de escorrentía se hace pasar por estas zonas antes de llegar a los Everglades, con objeto que el agua de salida en las STA tenga concentración de P menor de 10 µg/L. Esto supone un reto científico y técnico de gran envergadura, ya que es casi el nivel de fondo de los humedales (el nivel de concentración que de forma natural ya tienen). En este trabajo se ha desarrollado un modelo matemático completo que se ha implantado en COMSOL Multiphysics para estudiar diferentes configuraciones/diseños en humedales artificiales (2D) con objeto de alcanzar la concentración de P. El objetivo es optimizar el diseño de los STA usando COMSOL Multiphysics como herramienta de simulación.

El modelo matemático consta de 4 submodelos: 1) el hidráulico que se ha implantado con el módulo de flujo laminar, usando dominios de flujo libre y de medio poroso, 2) el de transporte para el que se ha usado el módulo de especies diluidas, 3) el de las plantas con el módulo de ecuaciones diferenciales globales, y 4) el cinético que se ha implantado añadiendo términos reactivos al módulo de especies diluidas. El modelo se ha calibrado con un mesocosmos (pequeño humedal de 6x1x1 m) que se construyó cerca de los STA existentes y se monitorizó estrictamente durante 3 años. Para la calibración se ha requerido datos de radiación solar, temperatura del aire y del agua, precipitación, evaporación y las concentraciones de fósforo registradas en el humedal. En total el modelo tiene 17 variables dependientes y más de 50 parámetros que se han ajustado mediante el módulo de barrido paramétrico de COMSOL Multiphysics.

El modelo ha permitido comprobar que existen gradientes enormes de fósforo desde el agua libre hasta el suelo, de manera que el suelo actúa como fuente de P liberando su forma orgánica disuelta (Figura 1).

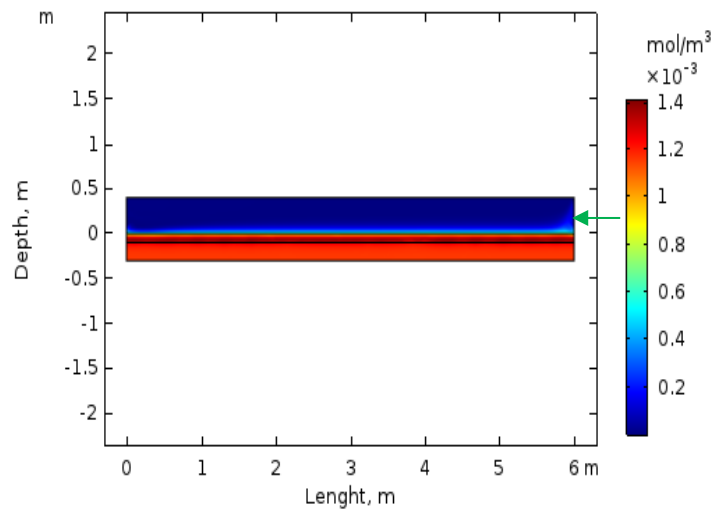


Figura 1: Sección 2D del mesocosmos mostrando la concentración de P orgánico disuelto. Se puede observar como el suelo (rojo) tiene una concentración mucho más alta que el agua (azul) y que cerca de la zona de salida del agua (flecha verde) el agua arrastra parte del P del suelo.

El estudio de diferentes configuraciones/diseños se ha llevado a cabo a partir de diferentes escenarios que se han sometido a simulación. Se ha observado que los mejores resultados se obtienen con humedales funcionando en paralelo y con alimentación por la parte inferior. Los resultados de este trabajo son prometedores porque han permitido observar que es posible llegar al límite de $10 \mu\text{g P/L}$.

Reconstrucción topográfica aplicada al Microscopio de Fuerzas Electroestáticas (EFM)

G. Gomila^{1,2}, R. Millán-Solsona^{*1,2}, and M. Checa^{1,2}

¹Institut de Bioenginyeria de Catalunya (IBEC),

²Departament d'Enginyeria Electrònica i Biomèdica, Universitat de Barcelona

*Autor de contacto: Institut de Bioenginyeria de Catalunya (IBEC), 08028 Barcelona, Spain, rmillan@ibecbarcelona.eu

Resumen

Existen una multitud de técnicas de microscopia de sonda de proximidad tales como *Scanning Capacitance Microscopy* (SCM), *Nanoscale Impedance Microscopy* (NIM), *Scanning Microwave Microscopy* (SMM), y *Electrostatic Force Microscopy* (EFM), que permiten medir las propiedades dieléctricas a la nanoscala de óxidos, membranas, proteínas y más recientemente estructuras biológicas más complejas [1-3]. Todas estas técnicas, para obtener las propiedades dieléctricas, requieren comparar los resultados experimentales con modelos que tengan en cuenta la geometría muestra-sonda. Hasta ahora, dada la complejidad topográfica de las muestras a analizar, los mapas de permitividad eléctrica se obtenían mediante la utilización de modelos topográficos idealizados describibles mediante figuras geométricas simples [4].

Aquí presentamos un método automatizado que, a partir de los datos de la imagen topográfica medida por el microscopio, construye un modelo topográfico fiel de la muestra para ser incorporado en el modelaje. La incorporación se hace píxel a píxel con el fin de obtener un mapa de permitividad eléctrica, $\epsilon_r(x, y)$ de la muestra. Para ello se utiliza COMSOL Multiphysics enlazado con Matlab mediante LiveLink™.

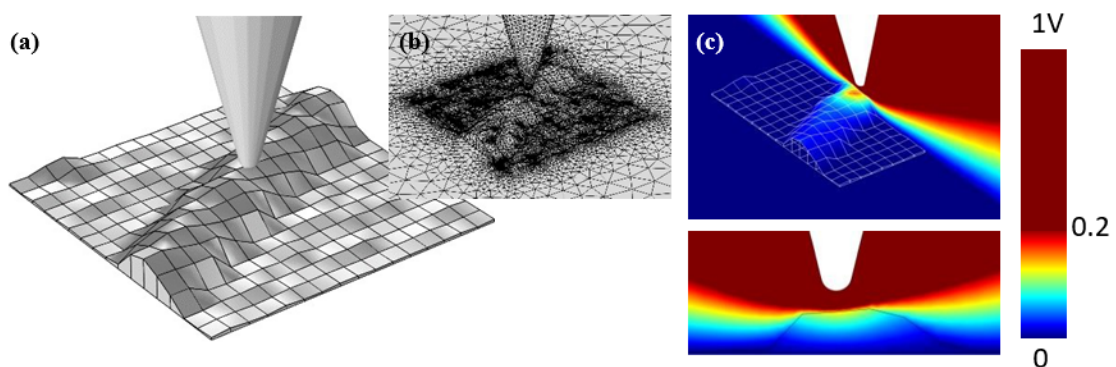


Figura 1: (a) Geometría del modelo 3D sonda-muestra. (b) Detalle de la malla. (c) Distribución de potencial eléctrico obtenido con COMSOL Multiphysics.

El modelo 3D geométrico construido consta de la sonda de medida, que se modela como un cono terminado en una semiesfera, y de la muestra, que se modela como una matriz de hexaedros irregulares que reconstruyen la topografía y descansan sobre un sustrato metálico, todo encerrado en un dominio cilíndrico con dominios infinitos en los límites de la simulación. Para reconstruir la topografía sólo se considera una zona de la muestra ya que el campo eléctrico disminuye fuertemente con la distancia. Esto nos permite reconstruir solo la zona donde se notan los efectos del campo eléctrico. De esta forma conseguimos optimizar el proceso de reconstrucción y mallado del modelo. Finalmente, se resuelve el problema electrostático correspondiente y se calcula la fuerza eléctrica que actúa sobre la punta, que es el parámetro que se quiere modelar. Para ello se utiliza el módulo electrostático de AC/DC de COMSOL Multiphysics.

Como ejemplos, presentaremos los primeros resultados cuantitativos para una imagen en la que hay presentes un pilar de SiO₂, una bacteria *P. Aeruginosa* y su flagelo.

La metodología presentada aquí se puede adaptar a todas las técnicas de microscopia descritas anteriormente, no solo para obtener los mapas de propiedades dieléctricas, sino también como simuladores de microscopia. A su vez, se pueden modificar los modelos para que la técnica abarque imágenes de microscopia en medio líquido, como presentaremos en futuros trabajos.

Referencias

1. Helena Lozano, Rene Fabregas, Núria Blanco-Cabra, Ruben Millan-Solsona, Eduard Torrents, Laura Fumagalli and Gabriel Gomila, Dielectric constant of flagellin proteins measured by scanning dielectric microscopy, *Nanoscale*, **10**, 19188-19194 (2018).
2. Marc Van Der Hofstadt, Rene Fabregas, Ruben Millan-Solsona, Antonio Juarez, Laura Fumagalli, and Gabriel Gomila, *Internal Hydration Properties of Single Bacterial Endospores Probed by Electrostatic Force Microscopy*, *ACS Nano*, **10(12)**, 11327–11336 (2016).
3. A. Dols-Perez, G. Gramse, A. Calò, G. Gomila and L. Fumagalli, Nanoscale electric polarizability of ultrathin bilayers on insulating substrates by electrostatic force microscopy, *Nanoscale*, **7**, 18327- 18336 (2015).
4. Maria Chiara Biagi, Giorgio Badino, Rene Fabregas, Georg Gramse, Laura Fumagalli and Gabriel Gomila, Direct mapping of the electric permittivity of heterogeneous non-planar thin films at gigahertz frequencies by scanning microwave microscopy, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **19(5)**, 3884-3893 (2017).

Optimization of a Rectangular Microwave Cavity

R. Manno¹, H. Nigar², V. Sebastian^{1,3}, B. García-Baños⁴, J.M. Catalá-Civera⁴, J. Santamaría^{1,3},
F.L. Peñaranda-Foix^{4*} and R. Mallada^{1,3*}

¹Nanoscience Institute of Aragon and Chemical and Environmental Engineering Department, University of Zaragoza,

²Process&Energy Department, Delft University of Technology,

³Networking Research Center CIBER-BBN,

⁴ITACA Institute, Universitat Politècnica de València.

*Autor de contacto: Nanoscience Institute of Aragon, University of Zaragoza, Calle Mariano Esquillor, s/n, 50018, Zaragoza, Spain, rmallada@unizar.es

Abstract

One of the main advantages of microwave heating is represented by the possibility of selectively heat the sample drastically reducing power dissipation. The energy absorbed by the sample may shift from 20-30% by an electric furnace to approximately 70% by microwave heating, saving energy and time¹. COMSOL Multiphysics allows to perform an optimization of EM field distribution.

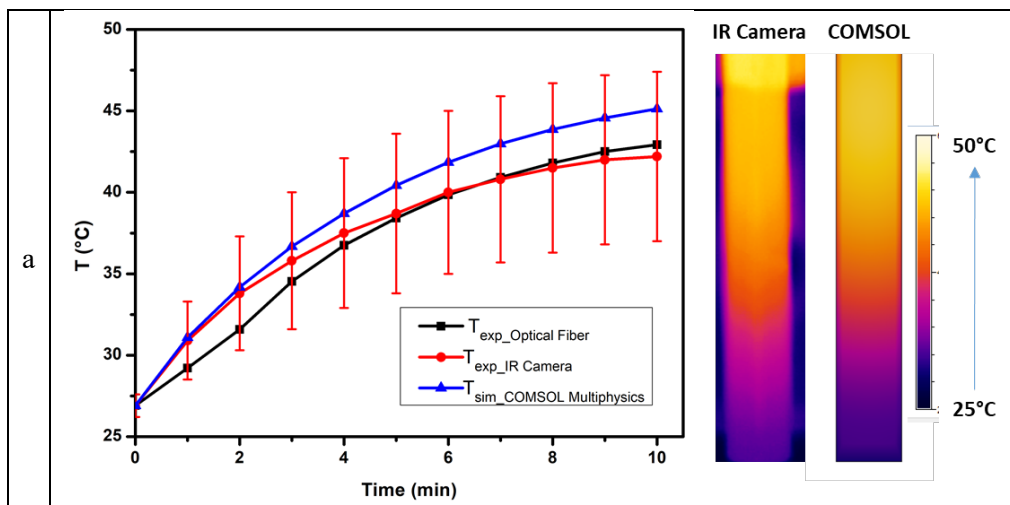
COMSOL Multiphysics was adopted to simulate the EM field of a single-mode rectangular cavity provided by Sairem Iberica and consisted of a solid-state microwave generator operating at 2.43-2.47 GHz, a TE10 monomode microwave cavity with a WR340 waveguide². A quartz cylinder filled with water at 25°C was located in the center of the MW cavity, surrounded by air. S11 parameter was determined in four different situations: absence of tuning system, short plunger, iris and three stub tuner. Furthermore, Electromagnetic Waves, Heat Transfer and Laminar Flows modules were combined to determine the temperature profile of water in a microfluidic reactor comparing simulated and experimental data.

In table 1, we reported a comparison of EM field for four different configurations. The design of a proper iris may increase the efficiency of the microwave cavity up to 95%. Unfortunately, the iris design lacks versatility. On the other hand, the three stub tuner offers the possibility to easily modify the configuration with an increase of the maximum efficiency up to 65%.

Tabla 1: COMSOL Simulations Data of a rectangular MWs cavity.

Configuration	Smith Chart	S11	Efficiency
Absence of tuning system		-1.29dB	26%
Short Plunger		-2.93dB	49%
Iris		-13,01dB	95%
Three Stub Tuner		-4.52dB	65%

In figure 1, the temperature profile of water in a cylindrical vial (a) and under continuous flow (b), comparing experimental (IR Camera) and simulated values.



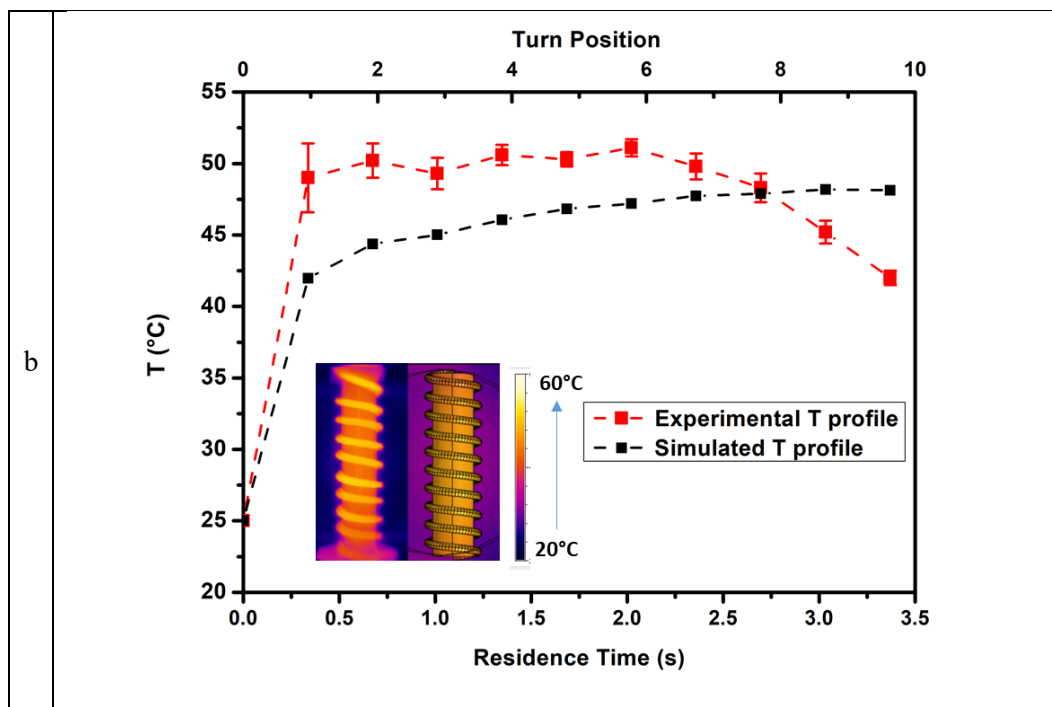


Figure 1: Experimental and Simulated Temperature Profile for MW heating of water in a quartz cylindrical vial (a.) and in a continuous flow reactor (b).

A detailed analysis of EM field distribution was essential to adopt the proper tuning system, strongly increasing the efficiency of a commercial MW cavity up to 95%. Furthermore, a good approximation of temperature was obtained, included in continuous flow reaction.

Acknowledgments

This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 721290. This publication reflects only the author's view, exempting the Community from any liability. Project website: <http://cosmic-etn.eu/>.

Referencias

1. Horikoshi, S.; Schiffman, R.; Fukushima, J.; Serpone, N. *Microwave Chemical and Materials Processing. A Tutorial*, Springer, 402 (2018).
2. Nigar H., Sturm G.S.J., Garcia-Baños B., Peñaranda-Foix F.L., Catalá-Civera J.M., Mallada R., Stankiewicz, A., S. J. Numerical Analysis of Microwave Heating Cavity: Combining Electromagnetic Energy, Heat Transfer and Fluid Dynamics for a NaY Zeolite Fixed-Bed. *Appl. Therm. Eng.*, **155**, 16 (2018).

Descarga Corona Positiva Como Nuevo Método de Refrigeración Avanzada en Aire Atmosférico para Aplicaciones Aeronáuticas

M. M. Cogollo^{1,2}, A. Díaz-Lantada¹ y H. Puago²

¹Laboratorio de Desarrollo de Productos, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España e-mail: mmar.cogollo@upm.es, adiaz@etsii.upm.es, web page: <http://ldp.etsii.upm.es/>

²Departamento de i+D+I, CEDRIÓN, Leganés, España e-mail: h.puago@cedrion.com, web page: <http://cedrion.com/>

Resumen

En los últimos años, *la descarga corona* positiva por corriente continua está despertando gran interés en la industria debido a sus posibles aplicaciones, por ejemplo, como método de refrigeración (*Fig.1*). Esta tecnología se centra en aplicar un campo eléctrico entre dos electrodos, presentando uno de ellos un menor radio de curvatura. En este caso, el primer electrodo es llamado electrodo corona o activo mientras que el segundo es el electrodo a masa o colector. Superada la rigidez dieléctrica del aire, la ionización de las moléculas del aire alrededor del electrodo de alta tensión induce a una descarga corona. La presencia del campo eléctrico y las múltiples colisiones entre iones en movimiento y moléculas de aire neutras que se encuentran en la zona de la descarga produce un flujo denominado “viento iónico”^{1,2}.

La distancia entre los dos electrodos es un parámetro clave para un correcto funcionamiento del dispositivo de refrigeración y, por lo tanto, objeto de estudio en diversas investigaciones^{3,4}.

En el presente proyecto se analiza el comportamiento químico del plasma frío generado en la descarga corona en aire atmosférico en función de diferentes distancias (1, 1.5, 2, 2.5 y 3 mm de gap) considerando un hilo micrométrico como electrodo corona (25 μm) y una geometría curvada específica como electrodo colector (*Fig.2*). Mediante el software *COMSOL Multiphysics (Módulo de Plasma)* optimizamos el campo eléctrico, la química generada (concentración de electrones, iones y partículas activas) y la direccionalidad del fluido iónico en función de la distancia entre los dos electrodos a partir de un modelo 1D y 2D consecutivamente (*Fig.3*).

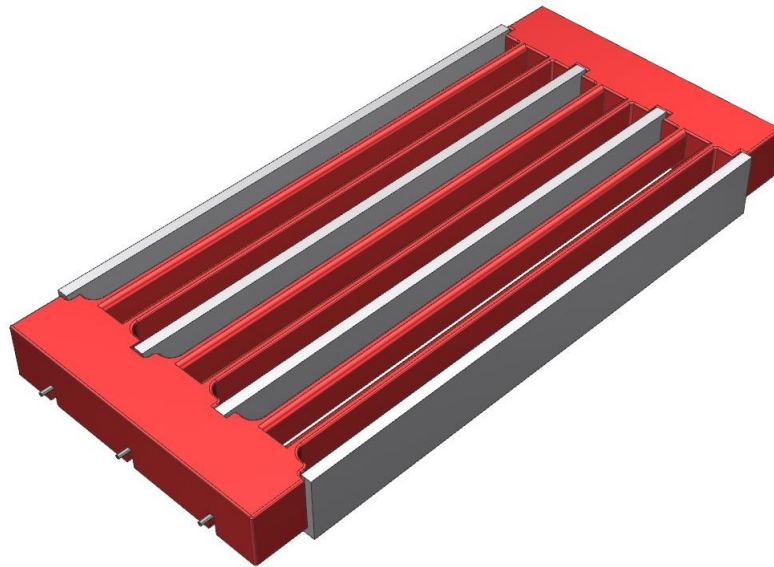


Figura 1: Prototipo del dispositivo de refrigeración por descarga corona utilizando hilo-Plano con curvatura en los extremos.

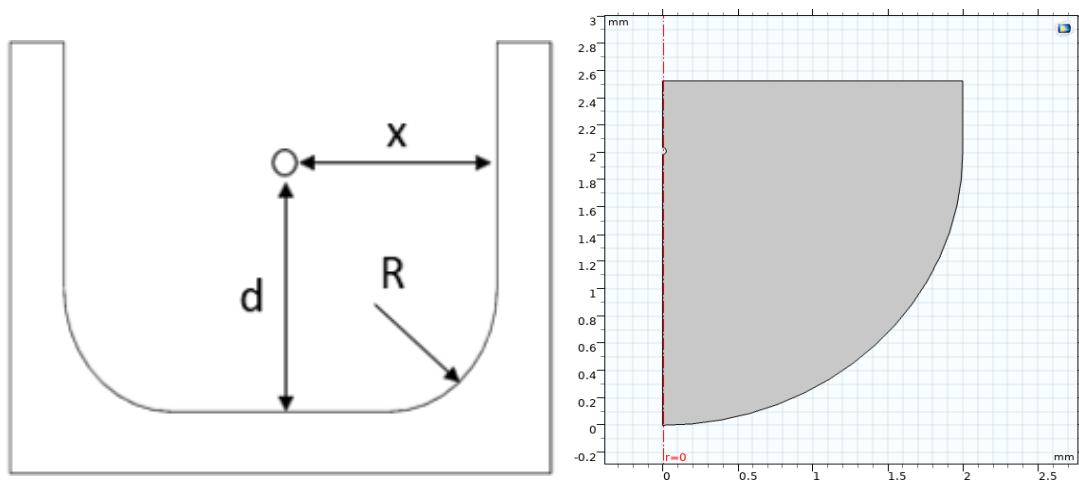


Figura 2: Modelo 2D de la disposición de los electrodos estudiados [hilo micrométrico y electrodo colector con curvatura en sus extremos para redirigir el aire ($R=2\text{ mm}$)].

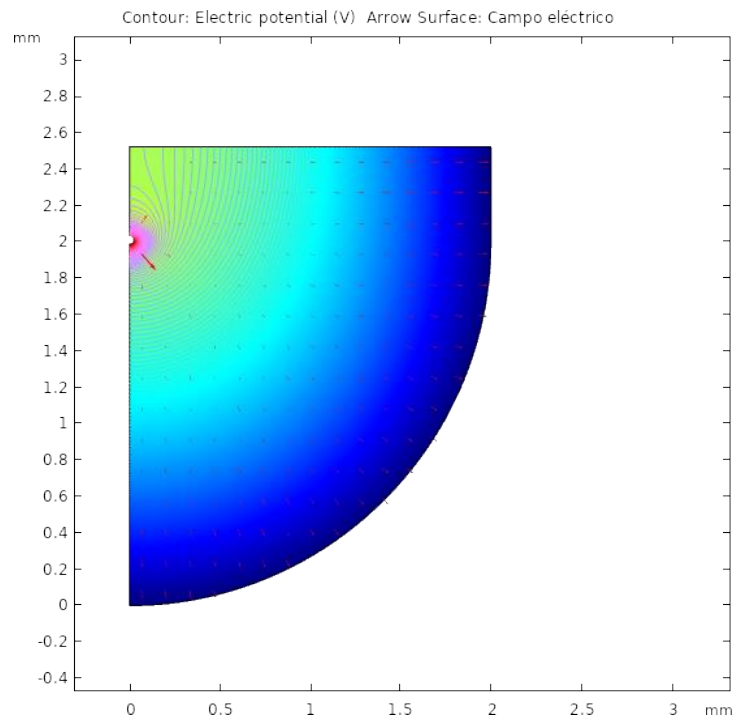


Figura 3: Resultados del estudio del campo eléctrico con 2 mm de gap entre electrodos.

Referencias

1. M. J. Johnson and D. B. Go, "Recent Advances in Electrohydrodynamic Pumps Operated by Ionic Winds: A Review," *Plasma Sources Science and Technology*, vol. **26**, 2017. DOI: 10.1088/1361-6595/aa88e70963-0252.
2. Y. Guan, R. S. Vaddi, "Analytical model of electro-hydrodynamic flow in corona discharge", *Physics of Plasmas*, vol **25**, 2018. DOI: 10.1063/1.5029403.
3. H. Sun, S. Huang, "Characteristics of Negative Corona Discharge in Air at Various Gaps", *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol **99** (1-6), 2019. DOI: 10.1109/TPS.2018.2884696.
4. Y. K. Stishkov, A. V. Samusenko and I. A. Ashikhmin" Corona discharge and electrogasdynamic flows in the air", *Physics-Uspokhi (Advances in Physical Sciences)*, vol **61** (12), 2018. DOI: 10.3367/UFNe.2018.06.038358.

Simulaciones para el Estudio y Aplicaciones en Nanofotónica de la Dispersión de Luz por Nanohilos Metálicos Plasmónicos

J. Muñoz-Madrid^{*1}, E. Ruiz-Reina², C.D. González-Gómez², I. Iglesias³, J. Colchero³

¹Departamento de Electromagnetismo y Electrónica, Universidad de Murcia.

²Departamento de Física Aplicada II, Universidad de Málaga.

³Departamento de Física, Universidad de Murcia.

*Autor de contacto: Departamento de Electromagnetismo y Electrónica, Universidad de Murcia, Campus de Espinardo, 30100-Murcia, España, juanmu@um.es

Resumen

La computación electromagnética del acoplamiento de la luz con nanoestructuras metálicas es importante en el diseño de dispositivos fotónicos [1]. Mediante simulación con COMSOL Multiphysics analizamos el campo cercano y lejano dispersado por un nanohilo de metal noble para estudiar las características de la alta concentración de campo electromagnético que se produce sobre la superficie del nanohilo (plasmones) y para obtener la imagen óptica del mismo, respectivamente. El método utilizado puede ser contrastado con el de otros autores que han presentado la simulación de este problema con diferente objetivo [2].

Se han construido los siguientes modelos en el dominio de la frecuencia:

- a) Simulación 2D de la distribución de campo dispersado por un nanohilo infinito en un medio homogéneo en el que se propaga una onda plana. Se utilizan condiciones de paredes perfectamente absorbentes (PMLs) cerrando el dominio mientras que la polarización y dirección de la onda plana es definida por el usuario en el “background”.
- b) Simulación 3D de la distribución del campo dispersado por un nanohilo finito en un medio homogéneo y en presencia de dos medios (nanohilo en aire descansando sobre sustrato de vidrio) cuando una onda plana incide oblicuamente desde el vidrio sobre la superficie de separación con el aire. El dominio de observación se rodea con paredes absorbentes (PMLs). El problema se resuelve en dos etapas. En la primera se resuelven las ecuaciones para el campo considerando solamente los dominios de aire y vidrio. La onda plana, definida por el usuario, se introduce en la simulación mediante un puerto activo y abandona la misma sin reflexión mediante un puerto pasivo. Se aplica periodicidad de Floquet entre planos perpendiculares al de incidencia, simulando así medios indefinidos en ambas direcciones. En la segunda etapa se resuelven las ecuaciones para el campo dispersado por el nanohilo a partir del campo “background” de la etapa anterior.

En ambos casos se ha estudiado la distribución de campo dispersado en diferentes condiciones y en función de distintos parámetros: longitud de onda de trabajo, ángulo de incidencia, estado de polarización de la onda incidente y diámetro del nanohilo. Las propiedades del material del nanohilo se han tomado de la librería de COMSOL Multiphysics a frecuencias ópticas.

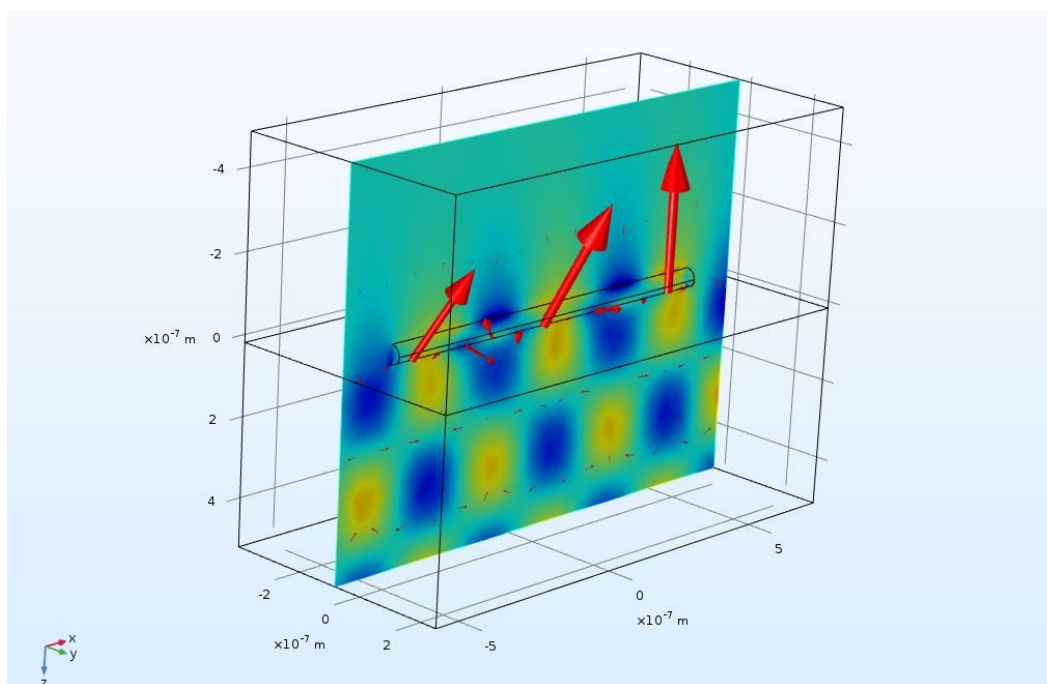


Figura 1: Distribución de campo cercano, H_y , y su polarización (vectores E), dispersado por un nanohilo de Ag que descansa sobre un bloque de vidrio a lo largo del eje X, cuando una onda plana de longitud de onda 475 nm incide oblicuamente, con polarización paralela al plano de incidencia Z-X, sobre la superficie vidrio- aire en condiciones de reflexión total (longitud del hilo: 1μ ; radio del hilo: 25 nm). Puede observarse la concentración de campo sobre la superficie del hilo y cambios en la polarización inicial.

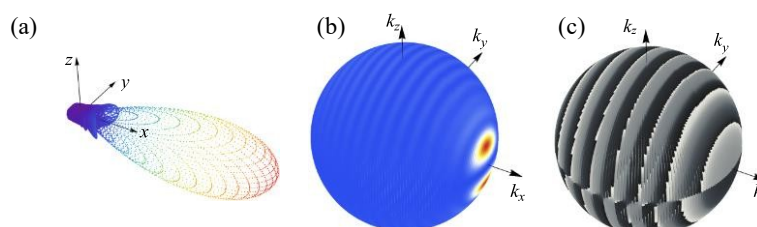


Figura 2: (a) Representación del módulo del campo eléctrico lejano generado por un nanohilo de Au iluminado por una onda plana que se propaga según el eje X; (b) intensidad; (c) fase.

El uso de COMSOL Multiphysics ha permitido estudiar la relación entre la aparición de altas concentraciones de campo sobre un nanohilo de metal noble con las condiciones de trabajo y los parámetros que intervienen de manera muy eficaz, dada la gran casuística que presenta el fenómeno. Además, sus herramientas de post-procesado han permitido una mejor comprensión de los fenómenos involucrados, así como observar manifestaciones de los mismo difíciles de prever. Igualmente, COMSOL Multiphysics será de gran utilidad para extender en el futuro estos estudios a los casos de hilos multimetálicos e incidencia focalizada en una parte del hilo.

Referencias

1. Hongxing Xu, *Nanophotonics*, Pan Stanford Pub., Singapore (2018).
2. Vladimir D. Miljkovic, Timur Shegai, Peter Johansson, and Mikael Käll, Simulating light scattering from supported plasmonic nanowires, *Optics Express*, **20**, 10816-10826 (2012).

Dinámica Computacional de Fluidos (CFD) Aplicada al Diseño de Fotobiorreactores para la Producción de Microalgas

C. Inostroza-González^{1*}, A. Solimeno², J. García-Serrano³, F.G. Acien-Fernandez¹ y J.M. Fernández-Sevilla¹

¹Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Almería, E-04071 Almería. España.

²Departamento de Biotecnología, Instituto tecnológico de Canarias, Las Palmas. España.

³Departamento de Ingeniería Civil y Medioambiente. Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona. España.

*Carretera Sacramento s/n, E04120 Almería, España. cristianenrique.inostroza@gmail.com

Resumen

La producción de microorganismos fotosintéticos como microalgas y cianobacterias es un sector biotecnológico emergente, siendo cada vez mayor tanto la escala como las aplicaciones comerciales de este tipo de procesos. Dichas aplicaciones incluyen desde la producción de cosméticos, nutraceúticos y alimentos, como también su uso como fuente de biocombustibles y la biorremediación de aguas residuales (Borowitzka, 1999; Richmond, 2000; Bordignon *y col.*, 2015). Cabe destacar la utilización de microalgas en la valorización de desechos ricos en nutrientes y el desarrollo de nuevos productos para la agricultura y la acuicultura, objetivos de estudio que se llevan a cabo en el marco del Proyecto SABANA "Sustainable Algae Biorefinery for Agriculture and Aquaculture".

Actualmente existen dos tecnologías de producción de microalgas, los fotobiorreactores abiertos como los raceway y los cerrados como los tubulares. Los primeros son más utilizados por su bajo coste de implementación y menor gasto energético, y su alta capacidad volumétrica es ideal para tratar grandes cantidades de aguas residuales. Sin embargo, muestran una serie de desventajas debido a que sus características geométricas no permiten una fluidodinámica propicia para el correcto desarrollo de los microorganismos fotosintéticos que se reproducen en medio acuoso. El principal reto es diseñar un fotobiorreactor que permita un flujo con alta capacidad de mezcla a una frecuencia constante de interacción de las células con la radiación solar y a una velocidad de circulación que estimule una tasa de crecimiento superior, minimizando las pérdidas de carga hidráulica y la disipación de energía en forma de vórtices, las cuales son zonas retenidas generando muerte celular.

Se realizará un estudio numérico mediante COMSOL Multiphysics del diseño de fotobiorreactores raceway a escala piloto (500 m²), validando empíricamente los resultados obtenidos en un reactor ya existente (modelo CAD en Figura 1a). El reactor disponible cuenta con un mecanismo giratorio (Figura 1b) para provocar la circulación por un único canal cerrado. El análisis de validación se llevará a cabo en flujo multifásico con maquinaria de rotación con un modelo de mezcla en régimen turbulento (k- ϵ) buscando una tendencia a un Numero de Reynolds en transición. Las fases corresponden a agua y aire con una alta interacción en la zona de la pala rotativa. El modelo utilizado para el diseño hidráulico será Euler-Euler con una malla fija hexaédrica. Tendrá especial énfasis los resultados correspondientes a los perfiles de velocidad, presión, la intensidad y disipación de las turbulencias con el fin de establecer entre las alternativas

el diseño que mantiene las corrientes de flujo distribuidas por todo el dominio computacional con las menores zonas de retención o de baja mezcla, de forma tal, de mantener ciclos de transito de partículas en sentido horizontal y vertical.

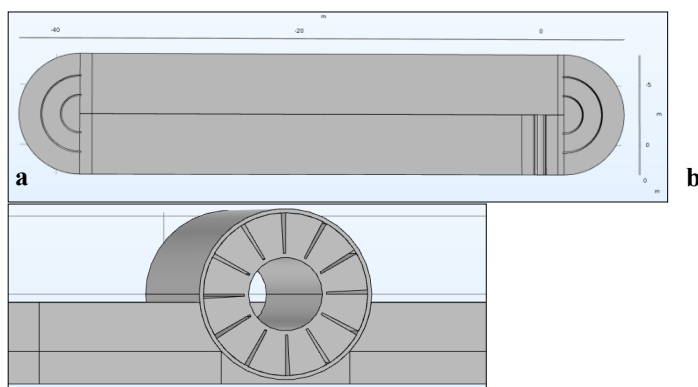


Figura 1: a) Dominio completo de análisis y b) Maquinaria de rotación del modelo.

Este estudio de hidráulica será el origen de posteriores estudios multifásicos a los cuales se les acoplarán interacción fotosintética a partículas discretas, análisis estructural de los variados componentes mecánicos, dinámica con burbujas, fenómenos de transferencia de materia y reacciones químicas para bioprocesos donde predomina la multiplicación de microorganismos.

Agradecimientos

Este trabajo cuenta con el apoyo del proyecto H2020 SABANA 727874 financiado por la Unión Europea, en el programa Blue-Growth, así como del proyecto nacional PURASOL, CTQ2017-84006-C.

Referencias

1. Bordignon, G., Perosa, A., Ravagnan, G., Zinoviev, S. 2015. Algae as a Potential Source of Food and Energy in Developing Countries Sustainability, Technology and Selected Case Studies. Edizioni Ca'Foscari.
2. Borowitzka, M.A. 1999. Commercial production of microalgae: ponds, tanks, tubes and fermenters. *J. Biotechnol.* **70**: 313–321.
3. Richmond, A. 2000. Microalgal biotechnology at the turn of the millennium: A personal view. *J. Appl. Phycol.* **12**: 441–451.

Predicting the Fate of Contaminant and Remediating Nano-particles in a Polluted Aquifer with an Integrated Modeling Approach

S. Nilabh^{1,2*}, F. Grandia¹

¹Amphos 21 Consulting S.L.,

²Department of Geology, University of Salamanca.

* Autor de contacto: Amphos 21 Consulting S.L., Barcelona, España, e-mail:

shikhar.nilabh@amphos21.com

Abstract

The presence of anthropogenic or natural pollutants in groundwater system poses a threat to water resources. Several remediation techniques have been explored and developed in order to decrease the concentration of contaminants. One such remediation technique, injection of nano-particles in the contaminated aquifers, has become promising owing to its high retention capacity (very large surface area) and negligible toxic by-products. To develop an optimized remediation strategy and to evaluate the efficiency of particles for treatment of contaminants, a predictive tool based on mathematical models becomes significantly useful. An integrated model approach is developed in this study which addresses the different stages of remediation process

From the numerical solution point of view, the solution is obtained by finite element analysis with the help of the software package COMSOL Multiphysics. In the first stage, a mathematical formulation for two- phase flow is developed to model the infiltration of DNAPL in a small scale 2-Dimensional. The fluid flow equations were manually entered in the 'coefficient form PDE' module and the formulation was verified with the benchmark models [1]. Subsequently, a model for injection of nano-particles in a sand column is developed using 'Transport of Diluted Species in the Porous Media' and 'Domain ODEs and DAEs' modules. The formulation for this model was verified with the benchmark models [2].

The remediation is modeled in four studies. The first study shows that the DNAPL would take nearly 15 days phase to reach the bedrock beneath the aquifer. However, a significant part of it is predicted to become immobile in clay lenses acting as secondary source for contamination in the aquifer. In the next study, the miscibility of DNAPL is simulated to estimate the formation of a steady state dissolved contaminant plume in the aquifer. In the third study, the injection of surface-modified sZVI particles was modelled, focusing on the transport mechanism as well as the particle-mineral interaction. With sZVI injection of concentration 0.1 kg/m^3 , the radius of influence (RI) formed by deposited particle was predicted to be 1.6 m laterally and 3 m in depth. In the final study, the contaminant and particle interaction are modeled using a pseudo-first order kinetic rate. The result shows that the contaminant within the reach of the RI is degraded rapidly while the contaminant beyond it remain undegraded.

From all these results as shown I figure 1, it can be concluded that this multi-stage model has been proved to be an effective tool to anticipate the distribution of contaminant as well as efficiency of remediating particles and can be used for the optimization processes.

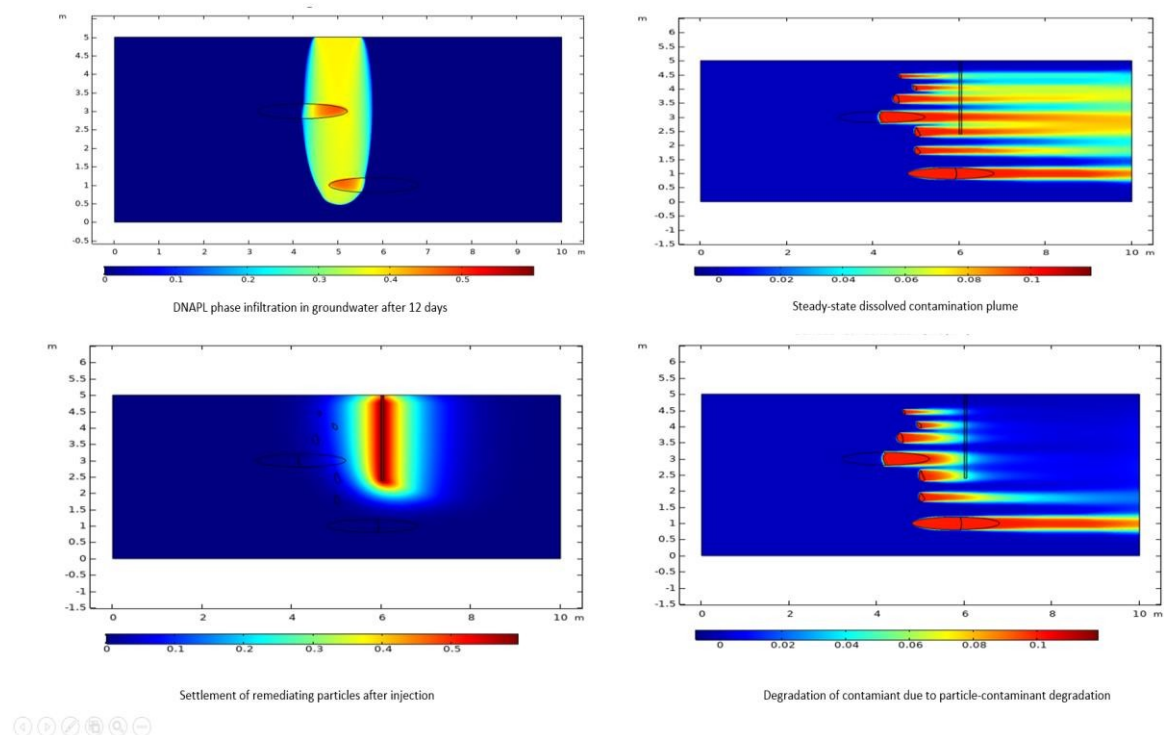


Figure 1: Model prediction of DNAPL infiltration in a polluted aquifer and formation of secondary sources leading to steady state contaminant plumes. With the injection of remediating particles, the contaminant is predicted to degrade due to their interaction with the settled nanoparticulates.

References

1. Kolditz, Olaf, et al., eds. Thermo-hydro-mechanical-chemical processes in porous media: benchmarks and examples. Vol. 86. Springer Science & Business Media, (2012)
2. Tosco, T.; Sethi, R., 2009. MNM1D: a numerical code for colloid transport in porous media: implementation and validation. American Journal of Environmental Sciences, 5(4), 517-525

Uso de App Builder para la Implementación en COMSOL Multiphysics de Recursos Docentes para su uso en Prácticas de Laboratorio de Mecánica de Fluidos y Transferencia de Calor

A. Cifuentes¹, A. Martínez¹, V. Roda¹, J. Grau¹, R. Torres^{1*}

¹Departamento de Mecánica de Fluidos, Universidad Politécnica de Cataluña (UPC)

*Autor de contacto: Av. Eduard Maristany, 16, 08019 Barcelona, ricardo.torres@upc.edu

Resumen

En el presente trabajo se describe el uso del constructor de aplicaciones de COMSOL Multiphysics para la elaboración de material académico y didáctico complementario a la formación en experimentación en ámbitos como los de la mecánica de fluidos y de la transferencia de calor. Los campus digitales habituales de prácticamente todas las universidades permiten el diseño de herramientas de interacción muy dinámicas como las que provee el constructor de aplicaciones de COMSOL Multiphysics y, con él, se han implementado algunas de las prácticas de laboratorio de Mecánica de Fluidos de la Escuela de Ingeniería de Barcelona Este (EEBE) de la UPC. El objetivo es poner al alcance de los estudiantes soluciones de simulaciones complejas mediante la interacción a través de Apps desarrolladas con COMSOL Multiphysics.

Las temáticas tratadas necesitan en el caso más general, los módulos de CFD, Heat Transfer y App Builder para el tratamiento adecuado de las ecuaciones de Navier-Stokes, la ecuación de la energía y el desarrollo de las interfaces gráficas de interacción. A modo de ejemplo se presentan los resultados relacionados con la práctica de medida del flujo, específicamente un Venturi (Figura 1) y con la de intercambiadores de flujo cruzado (Figura 2).

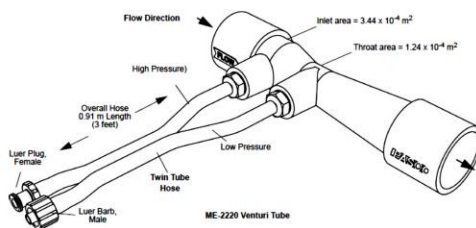


Figura 1: Venturi Pasco ME-220

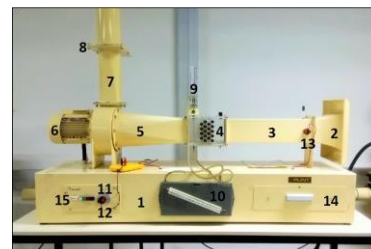


Figura 2: Equipo intercambiador de calor TecEquipment

El objetivo perseguido es múltiple. Por una parte, la virtualización de algunas de las prácticas como medio para la mejora de la comprensión de los fenómenos y conceptos físicos bajo estudio en varias dimensiones y en regímenes, en general, evolutivos. En segundo lugar, la posibilidad de contrastar el modelo computacional con observaciones experimentales reales y la importancia de la correcta selección del modelo físico, así como de las condiciones iniciales y de contorno apropiadas que aseguren un mínimo de verosimilitud en los resultados de las simulaciones. En tercer lugar, el uso de la computación numérica como elemento consustancial y complemento natural en la formación en disciplinas como la mecánica de fluidos y afines y el uso de este tipo de material docente como idóneo para el inicio en la formación en ámbitos de computación numérica.

Se presentan las interfaces gráficas desarrolladas, los modelos implementados en COMSOL Multiphysics, así como el contraste de las simulaciones con los datos experimentales. Las variables ajustables y las especificaciones de las simulaciones se han seleccionado para asegurar el compromiso necesario entre versatilidad y funcionalidad y tiempos de cálculo.

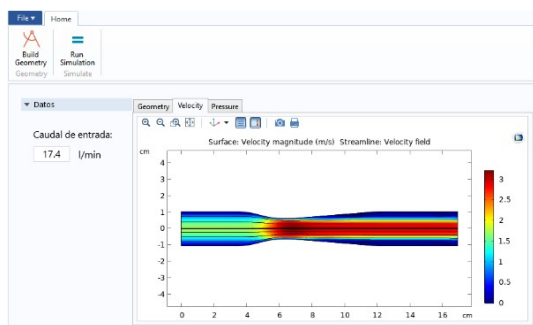


Figura 3: Interficie gráfica para la práctica del Venturi.

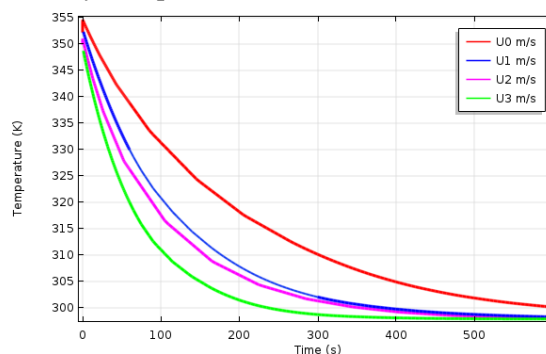


Figura 4: Curvas de enfriamiento simuladas en el intercambiador de flujo cruzado.

Los resultados obtenidos de la implantación de esta metodología y el uso de este tipo de material docente han demostrado un interés mucho mayor por parte del alumnado en la realización de sus tareas experimentales pues, entre otros aspectos, facilitan una mejor comprensión de la física que controla los fenómenos bajo estudio agilizando la obtención de nuevos resultados para su discusión, dinamiza enormemente la participación y la discusión entre los miembros de los grupos de prácticas durante la realización de las mismas, introduce elementos transversales en su formación a la hora de valorar la bondad de los contrastes experimentales y de simulación y permite la inferencia de resultados novedosos por cuanto se pueden resolver otros ensayos en unas condiciones en ocasiones imposibles de implementar por limitaciones inherentes a los propios equipos de laboratorio disponibles.

Referencias

1. Çengel, Y.A. et al, *Transferencia de Calor y Masa*. McGraw-Hill, México (2011).
2. White, F., *Mecánica de Fluidos*, McGraw-Hill, México (2008).
3. Lewis, R. W. et al., *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*, John Wiley & Sons (2004).
4. Ehsan Fadhil Abbas, The Effect of Position of Heated Rod in Tube Banks on the Heat Transfer Coefficient, *Mechanical Engineering Research (Published by Canadian Center of Science and Education)*, Vol. 5, No. 1 (2015)
5. COMSOL Multiphysics®. *Introduction to COMSOL Multiphysics 5.4* (2018)

Challenges in Finite Element Analysis of a Deformed Metasurface Unit Cell Using COMSOL Multiphysics

R. Karimi-Mahabadi^{1,2}, T. Goudarzi³, R. Fleury², S. Sohrabpour¹ and R. Naghdabadi^{*1}

¹Department of Mechanical Engineering, Sharif University of Technology,

²Department of Electrical Engineering, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL),

³Department of Mechanical Engineering, Amirkabir University of Technology.

*Corresponding Author: Department of Mechanical Engineering, Sharif University of Technology, Tehran 11155-9567, Iran. naghdabd@sharif.edu

Abstract

In multiphysics problems, linking the used commercial softwares for different physics is often a challenge and commercial packages are developing their codes to support multiphysics simulations. One of the most used commercial software for this type of problems is COMSOL Multiphysics.

Here, we present a strategy to address the different challenges one might face in a multiphysics simulation involving a metasurface unit cell under mechanical deformation and the available approach for this simulation with COMSOL Multiphysics. The principal problem stems from the needed air layers (Figure 1) as a propagating medium for the electromagnetic analysis, which are not involved in the mechanical analysis. To this end, the available options of COMSOL Multiphysics are explored and a solution is proposed.

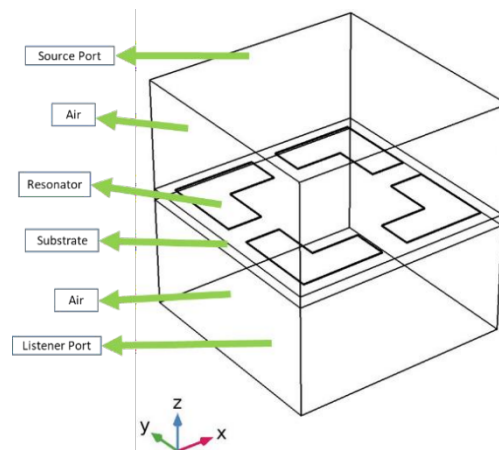
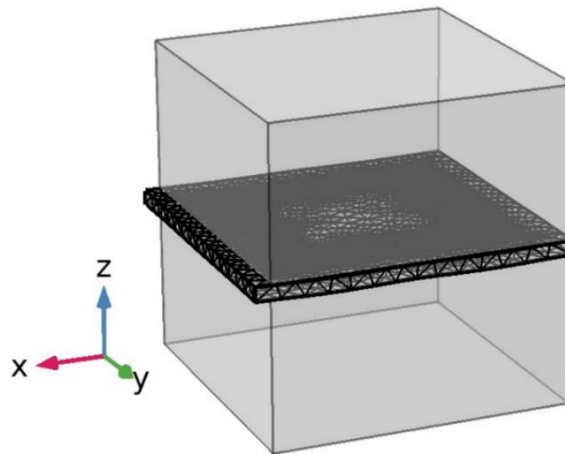


Figure 1: Schematic view of the model.

We modelled the unit cell in the solid mechanics module using cell periodicity option, which guarantees periodic boundary conditions and we applied the deformation by defining the average strain tensor within the cell. For the electromagnetic analysis, we added a frequency domain electromagnetic waves module. A plane wave is set normally incident onto the unit cell (periodic ports on top and bottom of the unit cell) with surrounding periodic boundary conditions (Floquet periodicity).

A central problem of this approach is that after deforming the substrate, a size mismatch occurs between the deformed substrate and the air layers (Figure 2), and as a result, the electromagnetic analysis of the deformed unit cell is not possible. To solve this issue, we have tried to assign mechanical properties to the air layers and include them in the mechanical analysis as well as the electromagnetic analysis. Although this now solves the mismatch problem, this approach results in convergence issues depending on the mechanical properties assigned to the air layers and inevitably increasing the computational required to solve this problem. Another point that should be mentioned regarding this approach is about the cell periodicity option in the mechanical analysis. Since the air layers have a contribution in the strain field, we do not get the expected results by assigning average strain or stress matrix in the cell periodicity option. Hence, we should apply the mechanical periodicity by the linear extrusion option.

Figure 2: Size mismatch between air layers and the substrate.



Instead, one can try to solve the problem by including the air layers in a moving mesh physics. This approach is challenging, as it results in a local stretch of the air layers that will lead to errors in defining the periodic boundary conditions in the electromagnetic analysis. Therefore, we have used the general extrusion option to apply a more consistent mesh displacement for the air layers in addition to the linear extrusion for the substrate to apply the periodic boundary conditions in the mechanical analysis.

Modelo Numérico Multiescala para Reproducir la Propagación de Grieta en Geometrías 3D

J. M. Muñoz-Guijosa¹, C. Aguanell-Garrido¹, G. Fernández-Zapico¹

¹División de Ingeniería de Máquinas, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España

E-mail: jmguijosa@etsii.upm.es c.aguanell@alumnos.upm.es g.fzapico@alumnos.upm.es

Página web: <http://www.dim.etsii.upm.es/>

Resumen

En este trabajo, se realiza un modelo numérico multiescala (en COMSOL Multiphysics) para predecir el comportamiento relativo a la mecánica de la fractura en nanocomposites, en concreto, nanocomposites epoxi-óxido de grafeno.

Para entender el comportamiento del material a macroescala, esta herramienta analiza su comportamiento a nanoescala. Esta herramienta permite una aproximación más próxima a los datos experimentales que otros modelos teóricos aportaban. Los resultados obtenidos de las simulaciones se comparan con ensayos reales propios para materiales con las mismas características y se comprueba la buena correlación entre resultados analíticos y experimentales.

Se parte de un modelo a escala nanométrica de 2 materiales (nanofiller y matriz) el cual es homogenizado para obtener las propiedades como si de un único material se tratase. Estas propiedades varían en función del tensor de deformaciones en cada momento. Se realiza el mismo proceso a escala macroscópica, homogenizando un dominio formado por el material homogenizado con diferentes propiedades, pues en cada punto existe diferente deformación.

Para reproducir la descohesión de superficies se utilizan modelos de elementos cohesivos (cohesive zone models, CZM). En estos modelos el comportamiento de las superficies posibles de fractura se expresa mediante una ley bilineal de tracción-separación. Dependiendo de las propiedades del material, se obtiene la ley correspondiente, y a partir de la ley se obtiene la rigidez (stiffness) entre las interfaces de grieta. Esta rigidez varía según el daño entre estas superficies. Mediante COMSOL Multiphysics es posible implementar esta ley a través de “*thin elastic layers (thl)*” con una rigidez variable según la ley de descohesión del material.

La metodología seguida se muestra en la figura 2.

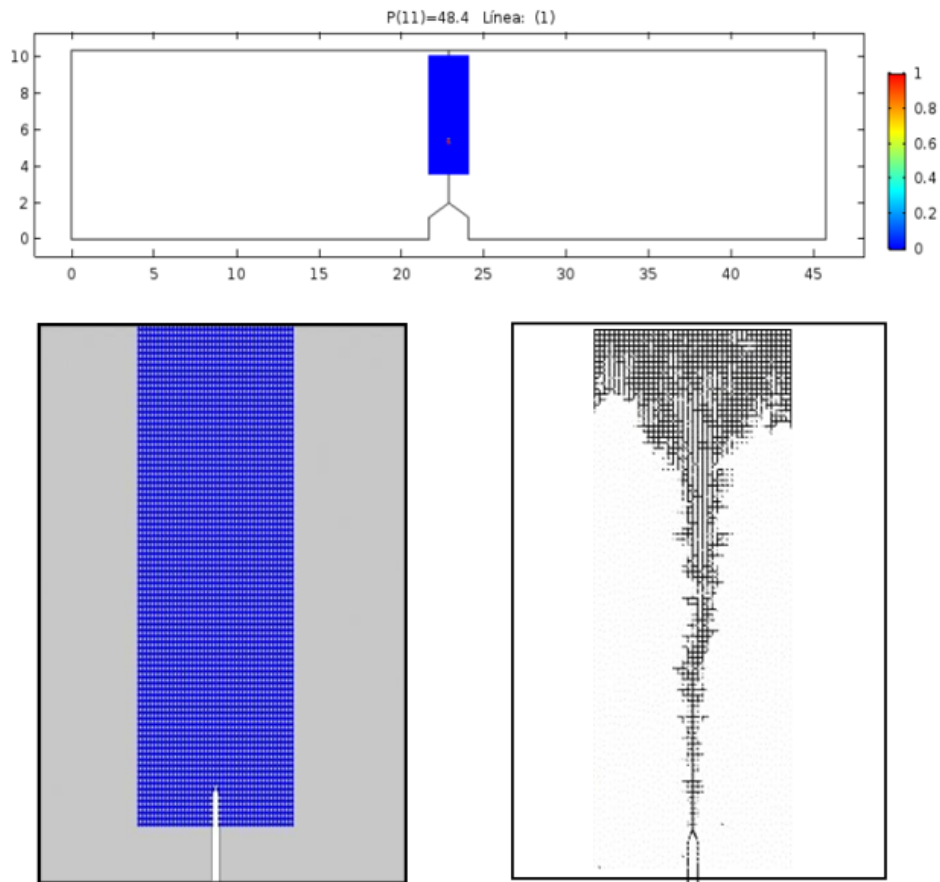


Figura 1: Propagación de grieta en un modelo 2D.

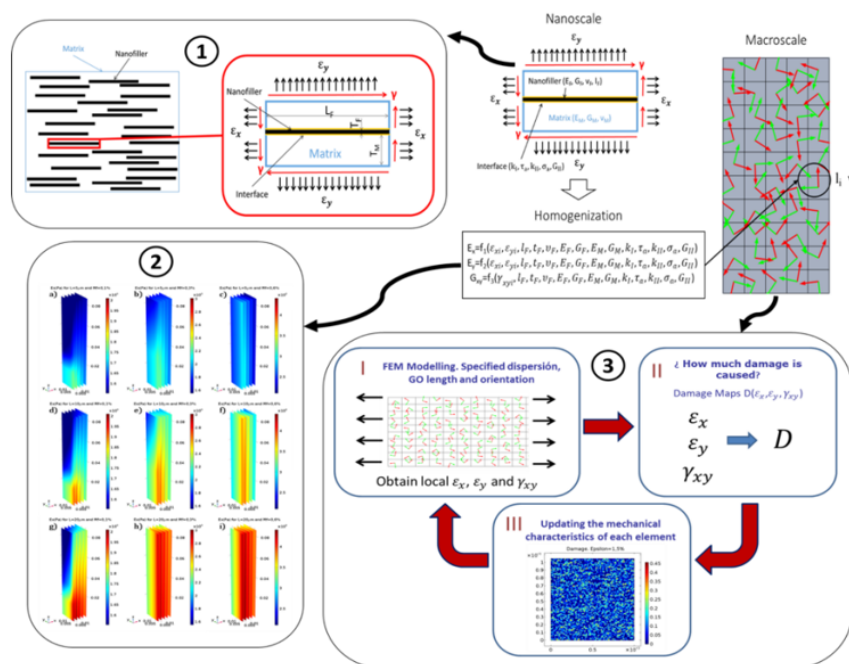


Figura 2: Metodología.

Referencias

1. «Linking bilinear traction law parameters to cohesive zone length for laminated composites and bonded joints,» *Advances in Aircraft and Spacecraft Science, Vol. 1, No. 2 (2014) 177-196.*
2. P. P. Camanho, C. G. Davila y M. F. De Moura, «Numerical Simulation of Mixed-Mode Progressive Delamination in Composite Materials,» *Journal of Composite Materials, 1/1/2003, Vol.37(16), pp.1415-1438, 2003.*
3. COMSOL, «Mixed-Mode Debonding of a Laminated Composite,» [En línea]. Available: <http://www.comsol.com/model/mixed-mode-debonding-of-a-laminated-composite-19961>.
4. G. Guo y Y. Zhu, «Cohesive-Shear-Lag Modeling of Interfacial Stress Transfer Between a Monolayer Graphene and a Polymer Substrate,» *Journal of Applied Mechanics MARCH 2015, Vol. 82.*
5. C. Aguanell Garrido, TFG-Modelización y validación experimental de los mecanismos de fractura en nanocomposites de óxido de grafeno-epoxi, Madrid: ETSII UPM, 2018.
6. G. Fernández Zapico, J. Muñoz-Guijosa, B. del Río y H. Akasaka, «Effect of transverse strains and angular distortions on the nanoscale elastic behavior of platelet nanocomposites,» *Composites Part B: Engineering*, vol. **154**, pp. 10-19, 2018.
7. J. Muñoz-Guijosa, G. Fernández-Zapico, H. Akasaka y E. Chacón, «Analysis of the effect of manufacturing imperfections in the elastic properties of platelet nanocomposites,» *Composites Science and Technology*, vol. **167**, pp. 507-514, 2018.

Modelización, Simulación y Optimización para la Gestión de la Calidad del Agua en Lagos

M. Crespo-Moya^{*1} y A. Rapaport²

¹DMAII, Universidad Politécnica de Madrid,

²UMR MISTEA, Université de Montpellier

*Autor de contacto: c/ José Gutiérrez Abascal 2, 28006 Madrid, maria.crespo@upm.es

Resumen

Para enfrentar el déficit hídrico que se presenta en el Lago Jaunay, Francia, la empresa *Vendée Eau* propone rellenar el lago con agua reutilizada (que contiene contaminantes) proveniente de una planta de tratamiento de aguas. Esta investigación pretende determinar ubicaciones apropiadas para la inyección de agua para lograr dos objetivos: minimizar la concentración de contaminante en la zona de usos recreativos, y no sobrepasar la concentración máxima permitida de contaminante para agua potable en las zonas de sustracción de agua. La Figura 1 muestra una representación esquemática del balance de agua que tiene lugar en el lago Jaunay.

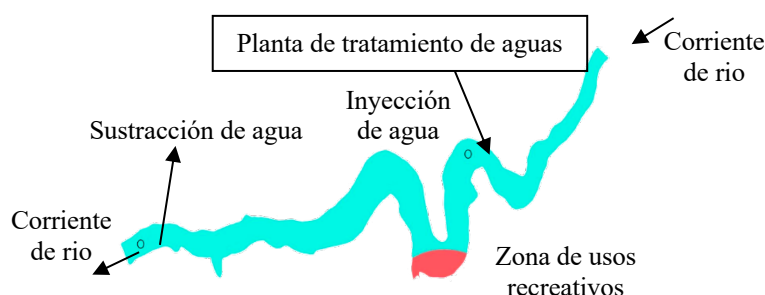


Figura 4: Representación esquemática de la configuración del lago Jaunay.

Para describir la concentración de contaminante en el lago, se asume que éste permanece en la superficie (debido a su densidad) y que las variaciones de volumen del lago son despreciables. Así, el modelo matemático propuesto asume que la concentración de contaminante varía debido a:

- La difusión del contaminante.
- El transporte debido al viento.
- El transporte debido a las corrientes de agua.
- Los procesos de sustracción y reinyección.

La solución al modelo matemático propuesto se ha aproximado numéricamente utilizando el software COMSOL Multiphysics 5.3., en particular los módulos *Flujo Laminar* y *Transporte de especies diluidas*. El modelo debe ser resuelto considerando distintas ubicaciones de reinyección de agua, para posteriormente determinar qué ubicaciones proporcionan resultados óptimos. Por ello, se ha empleado la interfaz de COMSOL Multiphysics con el software MATLAB, el cual lleva a cabo el proceso de optimización, llamando a COMSOL Multiphysics cada vez que quiere evaluar la función objetivo.

El problema de optimización propuesto por la empresa *Vendée Eau* es bi-objetivo (ya que pretende reducir la concentración de contaminante en dos zonas del lago), y puede tener múltiples soluciones óptimas dependiendo de lo restrictivas que sean las restricciones en cada uno de los objetivos.

En la Figura 2 se muestran los posibles resultados de optimización, obtenidos evaluando la solución del modelo con 1400 posibles ubicaciones de reinyección de agua y trazando el Frente de Pareto (Aubin, 1984), una curva que informa al responsable de la toma de decisiones sobre cómo mejorar un objetivo está relacionado con empeorar el segundo a medida que nos movemos sobre dicha curva.

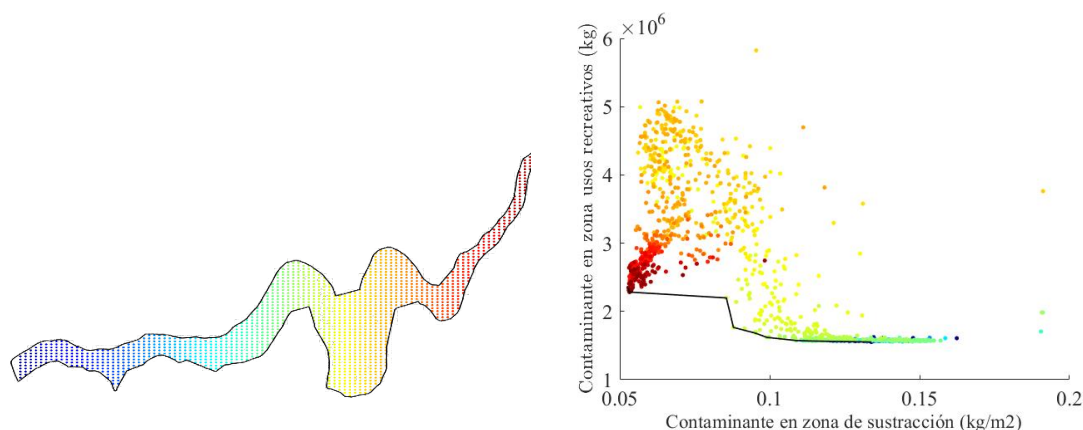


Figura 2: Frente de Pareto asociado a 1400 posibles ubicaciones de reinyección de agua.

Hemos propuesto una metodología para optimizar el proceso de reinyección de aguas en recursos naturales, fácilmente aplicable a otros casos. Como trabajo futuro, se pretende incluir contaminantes de tipo diluido, posibles variaciones en el volumen del lago y su batimetría.

Referencias

1. M. Crespo, J. Orsoni, J. Bortoli, A. Rapaport, A. Rousseau y V. Jauzein. Optimal strategies to refill hydric reservoirs with reused water – application to the Jaunay Lake case study. *Revue des Sciences de l'Eau*, **3** (4): 377-385 (2018).
2. AUBIN J.P. *L'analyse non lineaire et ses motivations economiques*. Coll. Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise, Masson, France (1984).

Modelado y Simulación de un Reactor Catalítico

P. García-Ruiz^{*1}, A. G. Michelangelli-Cedeño¹ y J. M. Paz-García¹

¹Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga (Spain).

*Autor de contacto: Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga (Spain)
Facultad de Ciencias, Campus de Teatinos, 29071 Málaga, p.garcia@uma.es

Resumen

El transporte reactivo de materia es uno de los instrumentos que integra diversos procesos acoplados de la física, la geoquímica y más recientemente la microbiología. Permite con un cierto grado de rigor, predecir y conocer procesos que se encuentran fuera del rango de experimentación en el tiempo y en el espacio. Este fenómeno tiene, entre otros, dos componentes importantes: las ecuaciones de transporte, las cuales describen la continuidad másica de cada especie química en el medio poroso y el modelo de equilibrio químico cuya problemática radica en reducir los grados de libertad en las operaciones de transporte reactivo.

El modelado de transporte reactivo es muy útil para obtener un nivel de comprensión y cantidad de información cuantitativa de alto valor del proceso en cuestión. La presencia de diversas especies química hace que el modelado de estos sistemas contenga un alto número de grados de libertad, por lo que resultan especialmente complejos para resolverlos o analizarlos. Por ello es necesario el desarrollo de técnicas de reducción de modelos para poder desarrollar estos sistemas. Sus aplicaciones se extienden desde problemas típicos de celdas de combustibles hasta el diseño de diferentes reactores incluyendo biochips y componentes de semiconductores.

En este trabajo, se muestra los resultados en diferentes dimensiones para el modelado de un reactor catalítico para la eliminación de contaminantes de una corriente gaseosa por medio de la reacción química, utilizando COMSOL Multiphysics. Para esto se ha empleado los módulos de ingeniería de la reacción Química, transporte de calor en medio poroso y transporte de especies diluidas en medio poroso en la simulación del reactor.

Referencias

1. C. Ayora. Transporte reactivo en la zona no saturada. Seminarios de la SEM (2006), Vol. 4, 118-149.
2. L. do N. Guimaraes, S. Olivella. Coupled Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Geo-Systems. Elsevier Geo-Engineering Book Series, (2004).
3. A. E. Amikiya, M. K. Banda. Modelling and simulation of reactive transport phenomena. Journal of Computational Science, (2018), 155-167.

Modelado y Simulación de Deposición de Elementos Presentes en la Corriente de Alimentación en Catálisis Heterogénea

A. G. Michelangelli-Cedeño^{1*}, P. García-Ruiz¹ y J. M. Paz-García¹

¹Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga (Spain).

*Autor de contacto: Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga (Spain)

Facultad de Ciencias, Campus de Teatinos, 29071 Málaga, Michelangelli.agatha@gmail.com.

Resumen

Los procesos catalíticos representan más del 90% de los procesos de fabricación química en todo el mundo, y el papel del catalizador consiste en aumentar la velocidad y controlar la selectividad de las reacciones químicas involucradas. Un proceso catalítico se considera como heterogéneo cuando los reactantes y el catalizador se encuentran en distintas fases. En catálisis heterogénea, el fenómeno catalítico está relacionado con las propiedades químicas de la superficie del catalizador y no involucra el interior del sólido. Los catalizadores se pueden desactivar por múltiples mecanismos, siendo uno de los principales mecanismos de desactivación el ensuciamiento. El ensuciamiento se refiere a los fenómenos por los cuales la superficie del catalizador se cubre con un depósito, normalmente por adsorción física (mecánica), de las especies de la alimentación, lo que resulta en la pérdida de actividad debido a la obstrucción de los sitios activos y/o poros.

La influencia sobre la actividad del catalizador se estudió primero con la interfaz de Ingeniería de Reacción en un modelo de reactor ideal. Esto se extendió a un modelo dependiente del espacio y el tiempo donde se cuenta la disminución de la porosidad debida al ensuciamiento. Esta simulación es aplicable al estudio de diversos procesos como el tratamiento de gases de escape, síntesis de amoníaco, síntesis de ácido sulfúrico y producción de margarina.

En este trabajo, se muestran los resultados de la simulación y compara el comportamiento del reactor ideal con las consecuencias causadas por el ensuciamiento del catalizador.

Referencias

1. Francisco Rodríguez, The Role of Carbon Materials in Heterogeneous Catalysis, *Carbon*, 36, 159-175 (1998).
2. Néstor Eduardo Mendieta Reyes, Estudio de la Reducción de CO₂ y la Degradación Sonofotocatalítica de Contaminantes Sobre Óxidos de Metales de Transición, Universidad de Alicante (2018).
3. Efraín Arturo Chacón Ferra, Estudio de Estabilidad Térmica y Química de Catalizadores de Sulfuro de Rutenio y Sulfuro de Rutenio Promovido con Titanio, Centro de Investigación de Materiales Avanzados S.C. (2017).

Artículos

Simulación Numérica del Flujo Electro-termo-plasmónico generado en una Matriz de Nanoantenas de Oro para Biodetección

Carlos David González-Gómez^{1*}, Emilio Ruiz-Reina¹ y Raúl Alberto Rica Alarcón²

¹Departamento de Física Aplicada II, Universidad de Málaga.

²Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada.

*Autor de contacto: Departamento de Física Aplicada II, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, 29071 – Málaga, cdgg@uma.es

Resumen: Los biosensores basados en sensores plasmónicos se perfilan como una plataforma potente, económica y portátil para la detección de patógenos y biomarcadores. En particular, se ha demostrado que los sistemas fundamentados en la resonancia de plasmones superficiales localizados (LSPR) implementados en dispositivos microfluidicos constituyen una plataforma robusta que permite la detección ultrasensible [1]. Sin embargo, el confinamiento provocado por los microcanales restringe el flujo a régimen laminar. Por tanto, la aproximación de las especies a detectar a los sensores superficiales se limita al transporte por difusión, que es inherentemente lento [2]. A pesar de ello, existen varias estrategias para inducir flujo convectivo dentro de microcanales [2-5], pero las restricciones en la máxima temperatura permisible impuestas por la estabilidad de los biomarcadores dan lugar a flujos insuficientes. En este trabajo, se estudia numéricamente la generación de flujo convectivo dentro de un microcanal mediante el efecto electro-termo-plasmónico [6], que provoca flujos intensos a partir de un pequeño gradiente de temperatura combinado con un campo eléctrico alterno [7].

Palabras clave: LSPR, biosensores, ETP, plasmones, lab-on-a-chip.

1. Introducción

Las propiedades ópticas únicas que poseen los resonadores ópticos basados en micro- y nano-estructuras metálicas hacen que éstas jueguen un papel muy importante en un amplio espectro de áreas científicas y tecnológicas, desde el procesado de información hasta la biomedicina [8-15]. En concreto, en el campo de la biodetección, las nanoestructuras plasmónicas resonantes están dando lugar a sistemas de detección muy prometedores, con niveles de sensibilidad que pueden ser ajustados

para la detección de enlaces de moléculas simples [16-20]. Además, la combinación de la resonancia de plasmones superficiales localizados (LSPR) con tecnología microfluidica [21,22], ha permitido la implementación de ensayos de detección con dispositivos lab-on-a-chip [1,23-25]. No obstante, esta tecnología, como el resto de los conceptos de detección fundamentados en esquemas de transducción cuasi plana, se enfrenta a un impedimento inherente a la dinámica propia de los canales de sección micrométrica, donde el transporte de especies queda restringido al límite impuesto por la difusión browniana [26-29]. De esta forma, la capacidad de transporte del analito hacia los sensores es reducida, lo que afecta directamente a la duración del ensayo y a la cantidad de especie necesaria para completarlo satisfactoriamente.

Se han propuesto diferentes alternativas para vencer el límite de transporte por difusión en esquemas de detección basados en LSPR. Por un lado, la literatura previa afirma que fuertes gradientes de temperatura creados alrededor de nanoestructuras plasmónicas resonantes pueden generar flujos convectivos en el fluido circundante [3,30]. Mientras que tales convecciones inducidas exclusivamente por la absorción de luz pueden ser potencialmente utilizadas para alterar flujos en régimen laminar a través de un canal microfluidico, estos están asociados con altas temperaturas de las nanoestructuras metálicas, incompatibles con la mayoría de los ensayos de biodetección que normalmente involucran biomoléculas sensibles a la temperatura. Por otro lado, se pueden utilizar para manipulación activa de flujo determinados fenómenos electrocinéticos como la dielectroforesis y electro-osmosis [31].

Una prometedora técnica electroóptica basada en la generación de un flujo electrotérmico [32,33], denominada efecto electro-termo-plasmónico (ETP) [34], se ha

utilizado para generar flujos que arrastran partículas hacia estructuras plasmónicas en la superficie de un chip [35-37]. En estos dispositivos, el calentamiento local de las nanoestructuras plasmónicas crea un cambio local en la conductividad eléctrica del fluido que, bajo un campo eléctrico generado por dos electrodos planos y paralelos, conduce a la generación de vórtices.

En este trabajo se proponen varias simulaciones hidrodinámicas para estudiar la mejora que ofrece la introducción del efecto ETP en la biodetección por LSPR.

2. Caracterización del Flujo ETP

El flujo electro-termo-plasmónico (ETP) se origina a partir de un gradiente de temperatura local, que causa gradientes en la conductividad y permitividad eléctrica en el fluido circundante. Consecuentemente, la aplicación de un campo eléctrico alterno de frecuencia ω produce una fuerza volumétrica que provoca la formación de vórtices dentro del microcanal [32,34]. Para este propósito, el gradiente térmico puede ser generado por las pérdidas metálicas inherentes a la excitación resonante de las nanoantenas de oro [38-41].

Por su parte, la fuerza volumétrica contiene una componente estacionaria y otra que oscila al doble de la frecuencia del campo eléctrico 2ω . En alta frecuencia (cerca de 1 kHz en solución acuosa), predomina el término estacionario y, por lo tanto, un campo eléctrico alterno puede provocar una fuerza neta en el fluido, que genere flujos convectivos estables en el seno del canal sin los inconvenientes de los campos eléctricos de corriente continua [32]. Para un elemento de fluido dado en un gradiente de temperatura $\nabla T(\mathbf{r})$ y un campo eléctrico \mathbf{E} , la fuerza volumétrica electrotérmica por unidad de volumen en el fluido queda expresada por [32]:

$$\mathbf{F}_{\text{ETP}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\frac{\varepsilon(\alpha - \beta)}{1 + i\omega\tau} (\nabla T(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E}^* - \frac{1}{2} \varepsilon \alpha |\mathbf{E}|^2 \nabla T(\mathbf{r}) \right] \quad (1)$$

donde $\alpha = (1/\varepsilon)(\partial\varepsilon/\partial T)$, $\beta = (1/\sigma)(\partial\sigma/\partial T)$ y σ y ε son la conductividad y permitividad del fluido, respectivamente, para un valor de frecuencia angular ω . En último lugar, $\tau = \varepsilon/\sigma$ es el tiempo de relajación de carga del líquido y su inversa determina una frecuencia de corte a partir de la cual, el segundo término en el lado derecho de la ecuación 1 comienza a predominar sobre el primero, provocando una inversión en la dirección de fluido. Dicha inversión se espera

que ocurra en el rango de MHz para cualquier solución amortiguadora. De esta forma, se considerarán frecuencias inferiores para el campo eléctrico aplicado. Por otro lado, los efectos de polarización de electrodos aparecen a baja frecuencia, los cuales se pueden evitar a partir de pocos kHz. Por tanto, se han considerado las frecuencias dentro del rango comprendido entre 10 kHz y 1 MHz, donde no se espera ninguna dependencia importante de la frecuencia. Tal como se demostrará, dicha fuerza volumétrica puede mejorar la mezcla dentro del microcanal a partir de intensidades de campo eléctrico moderadas combinadas con un incremento de temperatura todavía compatible con experimentos de biodetección.

Además de los experimentos realizados [7], se realizaron varias simulaciones electro-hidrodinámicas para obtener más información acerca de la generación de vórtices en el seno del microcanal, donde se tuvo en cuenta tanto el flujo laminar forzado externamente a lo largo del canal como el inducido por el efecto electro-termo-plasmónico. Los parámetros de la simulación se ajustaron comparando los valores obtenidos con los medidos de la velocidad de micropartículas usadas como trazadoras del flujo [7]. El mecanismo del flujo ETP está gobernado por dos ecuaciones en derivadas parciales acopladas, que se han resuelto utilizando el software de cálculo multifísico COMSOL Multiphysics:

$$\rho c_p \mathbf{u}(\mathbf{r}) \cdot \nabla T(\mathbf{r}) - \kappa \nabla^2 T(\mathbf{r}) = q(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$$\nabla \left[p(\mathbf{r}) \mathbf{I} - \mu (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{r}) + (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{r}))^T) \right] = \mathbf{F}(\mathbf{r})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0 \quad (3)$$

Estas dos ecuaciones acopladas son la ecuación de transporte de calor y la ecuación de Navier-Stokes incompresible. En ellas, las propiedades de material ρ , c_p , κ y μ son densidad volumétrica, capacidad calorífica específica, conductividad térmica y viscosidad dinámica de la solución acuosa amortiguadora, respectivamente. Asimismo, $T(\mathbf{r})$, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ y $p(\mathbf{r})$ son los valores de temperatura espacial y campos de velocidad de presión y fluido, correspondientemente. Por último, \mathbf{I} es la matriz cuadrada identidad de orden 3 y el superíndice T indica la transposición de la matriz.

La fuente de calor principal proviene de la región donde la matriz plasmónica es iluminada por un haz láser con longitud de onda en la región donde la absorción de la nanoestructura es máxima. Dicha fuente se modela como una condición de contorno de temperatura con una

distribución gaussiana, análoga al haz láser. El término de fuente de calor volumétrica $q(\mathbf{r})$ en la segunda ecuación representa el calor generado por unidad de volumen en el seno del dominio fluido, que en este caso es completamente debido al calentamiento Joule provocado por el campo eléctrico alterno aplicado:

$$q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sigma \text{Re}[\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^*] \quad (4)$$

donde \mathbf{E} es el campo eléctrico externo aplicado.

Tal como se puede apreciar, existe un fuerte acoplamiento bidireccional entre ambas ecuaciones. De un lado, la velocidad del flujo de fluido $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ aparece en el término convectivo de la ecuación de transporte de calor. Por otro lado, el campo de temperatura $T(\mathbf{r})$ y sus derivadas parciales $\nabla T(\mathbf{r})$ aparecen en la fuerza volumétrica total actuante en el fluido que, a su vez, aparece como término fuente en la ecuación de Navier-Stokes. La fuerza volumétrica total puede expresarse de la siguiente manera:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_{\text{buoy}}(\mathbf{r}) + \mathbf{F}_{\text{ETP}}(\mathbf{r}) \quad (5)$$

donde $\mathbf{F}_{\text{buoy}}(\mathbf{r})$ es la fuerza de flotación que depende del campo de temperatura $T(\mathbf{r})$ y que genera convección natural en el dominio fluido. $\mathbf{F}_{\text{ETP}}(\mathbf{r})$ es la fuerza volumétrica electro-termo-plasmónica definida en la ecuación 1, que es función de las derivadas parciales $\nabla T(\mathbf{r})$ del campo de temperatura.

3. Uso de COMSOL Multiphysics

Se han utilizado las interfaces físicas Creeping Flow y Heat Transfer in Fluids. En la primera, el efecto ETP se ha modelado como una fuerza volumétrica. Por otro lado, las condiciones de contorno son de tipo pared ($u = 0$) en el recinto del microcanal. Cuando se inyecta fluido se introducen condiciones de entrada y salida. No obstante, en ausencia de flujo, se fijan condiciones de contorno abierto.

Asimismo, en la interfaz de transferencia de calor, se han introducido tres capas delgadas para definir el recinto. Como se ha mencionado anteriormente, la actuación del láser se modela a través de una condición de contorno de temperatura con una distribución gaussiana. Se añade también una condición de generación de calor volumétrica debida al efecto Joule. Cuando se inyecta fluido, se establece una temperatura fija a la entrada y una condición de contorno de flujo saliente a la salida. En la otra situación, se sustituyen estas condiciones por condiciones de simetría.

4. Resultados

Las simulaciones predicen la generación de flujo convectivo dentro del canal, así como la formación de grandes vórtices alrededor del área iluminada, donde se genera un gradiente de temperatura (Fig. 1). En ausencia de flujo externo, las partículas permanecen atrapadas sobre las estructuras, acercándose y alejándose describiendo vórtices con una distribución similar a la de un toroide (Fig. 2), de acuerdo con los experimentos [7]. Las simulaciones también auguran el comportamiento observado experimentalmente, apreciable cuando un flujo impuesto externamente altera los vórtices convectivos inducidos por el efecto ETP (Fig. 3). Desde una vista cenital se observa que las partículas en el canal se transportan al centro de la estructura siguiendo los vórtices toroidales [7]. La vista transversal del flujo en el canal refleja que, según el fluido atraviesa el sensor, el campo de velocidad sufre una inflexión desde la parte inferior a la superior, muy de acuerdo con las observaciones experimentales donde las partículas detectadas fueron alejándose del foco después de la matriz sensible (Fig. 5). La presencia de este flujo hacia arriba no es adecuada para la aplicación de detección y, por ello, será necesario corregirlo en futuros desarrollos. Asimismo, en la figura 4 se recoge el perfil de la componente longitudinal del vector velocidad a lo largo del flujo, pudiéndose apreciar un máximo donde se encuentra situada la nanoestructura. Por último, tal como se ha demostrado anteriormente, se puede afirmar que estas simulaciones coinciden con las observaciones experimentales, las cuales predicen una mejora en la detección cuando se realiza un experimento de bio-detección mediante LSPR [7].

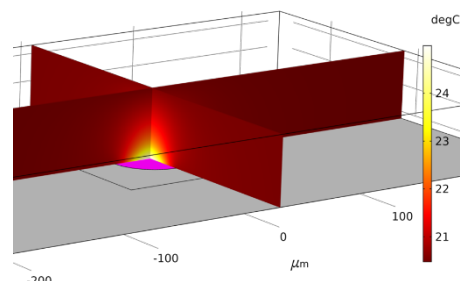


Figura 1. Simulación del gradiente de temperatura en el microcanal.

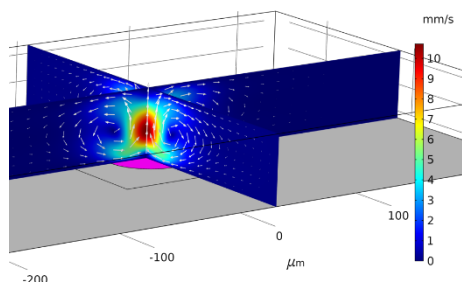


Figura 2. Simulación del perfil de flujo de fluido para condiciones estáticas.

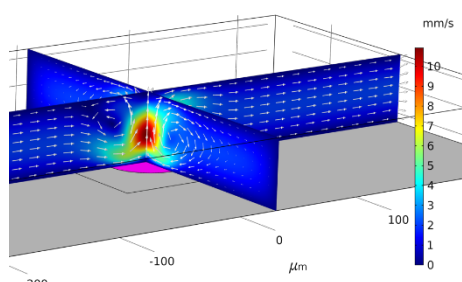


Figura 3. Simulación del perfil de flujo de fluido para condiciones de flujo.

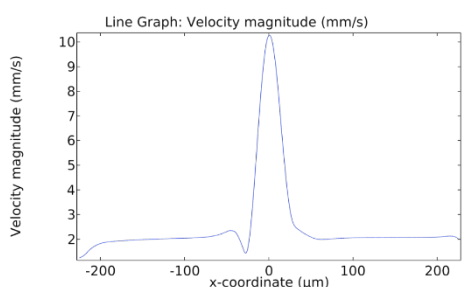


Figura 4. Velocidad de flujo dentro del microcanal.

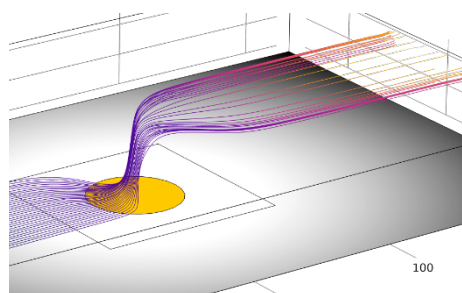


Figura 5. Simulación de la trayectoria de las partículas para condiciones de flujo.

7. Conclusiones

El efecto electro-termo-plasmónico puede implementarse en un biosensor de modo que se consigue superar las limitaciones impuestas por la difusión y maximizar el rendimiento de detección. Los resultados obtenidos permitirán la construcción de diseños optimizados de dispositivos lab-on-a-chip.

8. Referencias

1. Aćimović, S. S.; Ortega, M. a.; Sanz, V.; Berthelot, J.; Garcia-Cordero, J. L.; Renger, J.; Maerkl, S. J.; Kreuzer, M. P.; Quidant, R. LSPR Chip for Parallel, Rapid, and Sensitive Detection of Cancer Markers in Serum. *Nano Lett.* 2014, **14** (5), 2636–2641.
2. G. Baffou and R. Quidant, Thermo-plasmonics: using metallic nanostructures as nano-sources of heat. *Laser & photonics Reviews*, **7**, 171-187 (2013).
3. Roxworthy, B. J.; Bhuiya, A. M.; Vanka, S. P.; Toussaint, K. C. Understanding and Controlling Plasmon-Induced Convection. *Nat. Commun.* 2014, **5**, 1–8.
4. Protiva Rani Roy *et al.*, Enhancing the Performance of Surface-based Biosensors by AC Electrokinetic Effects – a Review, *Biosensors – Emerging Materials and Applications*, Prof. Pier Andrea Serra (Ed.), InTech, 243-264 (2011).
5. N.G. Green *et al.*, Electrothermally induced fluid flow on microelectrodes, *Journal of Electrostatics*, **53**, 71-87 (2001).
6. Ndukaife, J. C.; Shalaev, V. M.; Boltasseva, A. Plasmonics—Turning Loss into Gain. *Science (Washington, DC, U. S.)* 2016, **351** (6271), 334–335.
7. J. Garcia-Guirado *et al.*, Overcoming diffusion-limited biosensing by electro-thermo-plasmonics, *ACS Photonics*, **5**, 3673-3679 (2018).
8. Maier, S. A. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*; Springer, 2007.
9. Anker, J. N.; Hall, W. P.; Lyandres, O.; Shah, N. C.; Zhao, J.; Van Duyne, R. P. Biosensing with Plasmonic Nanosensors. *Nat. Mater.* 2008, **7** (6), 442–453.
10. Ozbay, E. Plasmonics: Merging Photonics and Electronics at Nanoscale Dimensions. *Science (Washington, DC, U. S.)* 2006, **311** (5758), 189–193.
11. Sun, M.; Xu, H. A Novel Application of Plasmonics: Plasmon-Driven Surface-Catalyzed Reactions. *Small* 2012, **8** (18), 2777–2786.
12. Schuller, J. A.; Barnard, E. S.; Cai, W.; Jun, Y. C.; White, J. S.; Brongersma, M. L. Plasmonics for Extreme Light Concentration and Manipulation. *Nat. Mater.* 2010, **9** (3), 193–204.
13. Zheludev, N. I.; Kivshar, Y. S. From Metamaterials to Metadevices. *Nat. Mater.* 2012, **11** (11), 917–924.
14. Cooper, M. A. Optical Biosensors in Drug Discovery. *Nat. Rev. Drug Discovery* 2002, **1** (7), 515–528.
15. Kristensen, A.; Yang, J. K. W.; Bozhevolnyi, S. I.; Link, S.; Nordlander, P.; Halas, N. J.;

- Mortensen, N. A. Plasmonic Colour Generation. *Nat. Rev. Mater.* 2017, **2** (1), na.
16. Aćimović, S. S.; Kreuzer, M. P.; González, M. U.; Quidant, R. Plasmon Near-Field Coupling in Metal Dimers as a Step toward Single-Molecule Sensing. *ACS Nano* 2009, **3** (5), 1231–1237.
17. Chen, S.; Svedendahl, M.; Käll, M.; Gunnarsson, L.; Dmitriev, A. Ultrahigh Sensitivity Made Simple: Nanoplasmonic Label-Free Biosensing with an Extremely Low Limit-of-Detection for Bacterial and Cancer Diagnostics. *Nanotechnology* 2009, **20** (43), 434015.
18. Chen, S.; Svedendahl, M.; Van Duyne, R. P.; Käll, M. Plasmon-Enhanced Colorimetric ELISA with Single Molecule Sensitivity. *Nano Lett.* 2011, **11** (4), 1826–1830.
19. Baaske, M. D.; Foreman, M. R.; Vollmer, F. Single-Molecule Nucleic Acid Interactions Monitored on a Label-Free Microcavity Biosensor Platform. *Nat. Nanotechnol.* 2014, **9** (11), 933–939.
20. Kim, E.; Baaske, M. D.; Schuldes, I.; Wilsch, P. S.; Vollmer, F. Label-Free Optical Detection of Single Enzyme-Reactant Reactions and Associated Conformational Changes. *Sci. Adv.* 2017, **3** (3), e1603044.
21. Thorsen, T.; Maerkl, S. J.; Quake, S. R. Microfluidic Large-Scale Integration. *Science* 2002, **298** (5593), 580–584.
22. Psaltis, D.; Quake, S. R.; Yang, C. Developing Optofluidic Technology through the Fusion of Microfluidics and Optics. *Nature* 2006, **442** (7101), 381–386.
23. Volpe, G.; Noack, M.; Aćimović, S. S.; Reinhardt, C.; Quidant, R. Near-Field Mapping of Plasmonic Antennas by Multiphoton Absorption in Poly(Methyl Methacrylate). *Nano Lett.* 2012, **12** (9), 4864–4868.
24. Acimovic, S. S.; Šípová, H.; Emilsson, G.; Dahlin, A. B.; Antosiewicz, T. J.; Käll, M. Superior LSPR Substrates Based on Electromagnetic Decoupling for On-a-Chip High-Throughput Label-Free Biosensing. *Light: Sci. Appl.* 2017, **6** (8), 1–8.
25. Yavas, O.; Svedendahl, M.; Dobosz, P.; Sanz, V.; Quidant, R. On-a-Chip Biosensing Based on All-Dielectric Nanoresonators. *Nano Lett.* 2017, **17** (7), 4421–4426.
26. Hatch, A.; Garcia, E.; Yager, P. Diffusion-Based Analysis of Molecular Interactions in Microfluidic Devices. *Proc. IEEE* 2004, **92** (1), 126–139.
27. Sheehan, P. E.; Whitman, L. J. Detection Limits for Nanoscale Biosensors. *Nano Lett.* 2005, **5** (4), 803–807.
28. Gervais, T.; Jensen, K. F. Mass Transport and Surface Reactions in Microfluidic Systems. *Chem. Eng. Sci.* 2006, **61** (4), 1102–1121.
29. Squires, T. M.; Messinger, R. J.; Manalis, S. R. Making It Stick: Convection, Reaction and Diffusion in Surface-Based Biosensors. *Nat. Biotechnol.* 2008, **26** (4), 417–426.
30. Donner, J. S.; Baffou, G.; McCloskey, D.; Quidant, R. Plasmon-Assisted Optofluidics. *ACS Nano* 2011, **5** (7), 5457–5462.
31. Delgado, A. V.; González-Caballero, F.; Hunter, R. J.; Koopal, L. K.; Lyklema, J. Measurement and Interpretation of Electrokinetic Phenomena. *J. Colloid Interface Sci.* 2007, **309** (2), 194–224.
32. Ramos, A.; Morgan, H.; Green, N. G.; Castellanos, A. Ac Electrokinetics: A Review of Forces in Microelectrode Structures. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1998, **31** (18), 2338–2353.
33. Ng, W. Y.; Goh, S.; Lam, Y. C.; Yang, C.; Rodríguez, I. DC-Biased AC-Electroosmotic and AC-Electrothermal Flow Mixing in Microchannels. *Lab Chip* 2009, **9** (6), 802–809.
34. Ndukaife, J. C.; Kildishev, A. V.; Nnanna, A. G. A.; Shalaev, V. M.; Wereley, S. T.; Boltasseva, A. Long-Range and Rapid Transport of Individual Nano-Objects by a Hybrid Electrothermoplasmonic Nanotweezer. *Nat. Nanotechnol.* 2015, **11** (1), 53–59.
35. Baffou, G.; Quidant, R.; García De Abajo, F. J. Nanoscale Control of Optical Heating in Complex Plasmonic Systems. *ACS Nano* 2010, **4** (2), 709–716.
36. Ndukaife, J. C.; Shalaev, V. M.; Boltasseva, A. Plasmonics—Turning Loss into Gain. *Science (Washington, DC, U. S.)* 2016, **351** (6271), 334–335.
37. Ndukaife, J. C.; Mishra, A.; Guler, U.; Nnanna, A. G. A.; Wereley, S. T.; Boltasseva, A. Photothermal Heating Enabled by Plasmonic Nanostructures for Electrokinetic Manipulation and Sorting of Particles. *ACS Nano* 2014, **8** (9), 9035–9043.
38. Ndukaife, J. C.; Xuan, Y.; Nnanna, A. G. A.; Kildishev, A. V.; Shalaev, V. M.; Wereley, S. T.; Boltasseva, A. High-Resolution Large-Ensemble Nanoparticle Trapping with Multifunctional Thermoplasmonic Nanohole Metasurface. *ACS Nano* 2018, **12** (6), 5376–5384.

9. Agradecimientos

C.D. González-Gómez agradece a Addlink Software Científico, S.L. la beca concedida. R.A. Rica agradece la financiación obtenida para los proyectos Juan de la Cierva-Incorporación IJCI-2015-26091 (Ministerio de



CONFERENCIA de
COMSOL Multiphysics
Málaga. 28 Junio 2019

Ciencia, Innovación y Universidades) y PPJI2018-12 (Plan Propio de Investigación de la Universidad de Granada). Los autores agradecen

el apoyo financiero del MICINN para el proyecto FIS2013-47666-C3-3R.

Metodología de Cálculo de Energía para Carga por Inducción Dinámica

Oscar García-Izquierdo^{1*}, Juan Luis Villa² y José Francisco Sanz³

¹Fundación CIRCE, ²Departamento de Ingeniería Eléctrica, Universidad de Zaragoza,

³Departamento de Ingeniería Eléctrica, Universidad de Zaragoza

*Oscar García-Izquierdo Gango: Parque Empresarial Dinamiza, Avda. de Ranillas 3D, 1ª Planta, 50018, Zaragoza, ogarcia@fcirce.es

Resumen: Actualmente la carga del vehículo eléctrico (VE) se lleva a cabo principalmente por métodos conductivos de distintas potencias, no obstante, también se han empezado a desarrollar sistemas de carga inalámbrica mediante inducción o WPT (Wireless Power Transfer) [1], los cuales permiten minimizar el impacto visual y aumentar la seguridad del usuario. Algunos de estos sistemas de carga mediante inducción, permiten la carga del VE en movimiento al colocarse en las carreteras, lo cual podría ayudar a aumentar la autonomía. Debido a todo ello nace la necesidad de un análisis en profundidad de estos sistemas, los cuales tienen la problemática adicional al mezclar un problema electromagnético, con un problema electrónico. Por todo ello, en el presente artículo se va a presentar una metodología de cálculo de la energía transferida a las baterías, que permita el estudio de sistemas de inducción dinámica en profundidad.

Palabras clave: Simulación electromagnética, carga dinámica, Wireless Power Transfer.

1. Introducción

En 2015 en París se dio lugar la Conferencia de las Partes (CMNUCC) donde se llegó a un acuerdo histórico para la reducción de las emisiones de Gases de efecto invernadero, por el cual se comprometían a mantener el aumento de la temperatura global muy por debajo de 2°C. Para el cumplimiento de dicho compromiso se necesita una descarbonización global. En este aspecto el sector del transporte es especialmente crítico, ya que represento el 23% de las emisiones mundiales en el año 2013, y el 75% de dichas emisiones fueron producidas por el transporte terrestre. Por ello la electrificación del transporte terrestre puede ser clave para la descarbonización y la mejora de la eficiencia energética del sector.

En este contexto se puede observar un rápido desarrollo de los VE en la actualidad, no

obstante, aunque la mayoría de estos vehículos producen la carga mediante métodos conductivos, se han empezado a desarrollar métodos de carga inductivos, los cuales incorporan importantes ventajas, como la reducción del impacto visual, reducción de problemas de vandalismo y aumento de la seguridad para el viajero. Una evolución de estos sistemas permite la carga del VE mientras el usuario esta conduciendo, mediante la colocación de bobinas bajo la carretera [2]. Este concepto se llama carga dinámica, la cual puede ser clave para la reducción del precio de los VE, ya que la mitad de su precio se estima se debe a las baterías. Además, permite la reducción del impacto medioambiental de este sistema, debido a la reducción de litio.

En este contexto internacional nace la normativa “SAE international J2954” [3] en Estados Unidos, con la intención de regular la carga por inducción estática para vehículos eléctricos, esta norma establece la frecuencia de trabajo en 85 kHz, la cual parece que se va a convertir en un estándar internacional para la carga inductiva.

Para el presente artículo se han utilizado las bobinas definidas en dicha norma para simularlas y poder comprobar su funcionamiento trabajando en modo de carga dinámica. En la norma se puede observar que se especifica completamente la geometría de las bobinas que se deben usar, tal y como se observa en las Figuras 1 y 2.

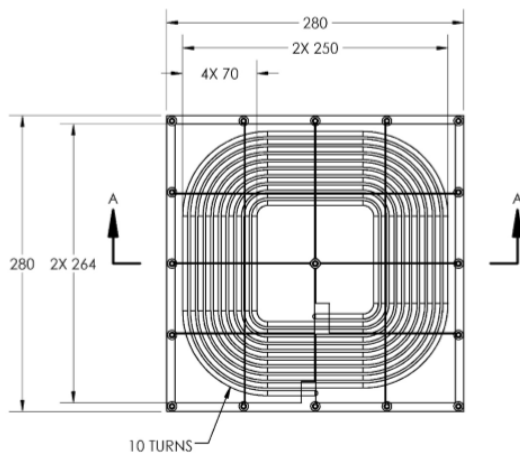


Figura 1. Geometría de la bobina embarcada en el vehículo.

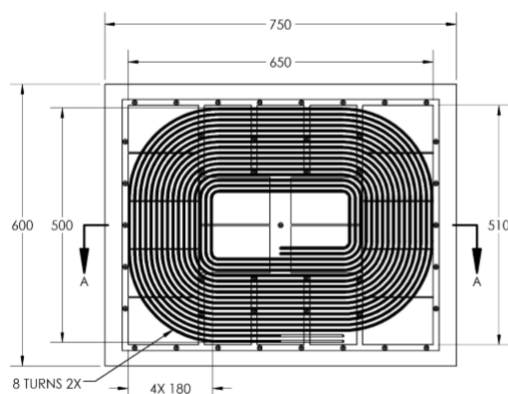


Figura 2. Geometría de la bobina enterrada.

Además, la norma en cuestión define el resto del sistema resonante tanto para una topología serie-serie como para una paralelo-paralelo. La topología seleccionada para el artículo ha sido la primera, debido a que es la más usada hoy en día de manera industrial (Figura 3).

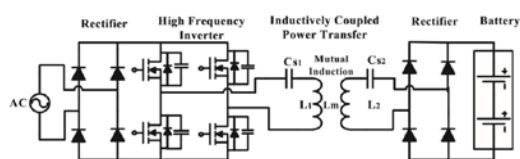


Figura 3. Topología serie-serie.

2. Definición del problema

En el artículo se presenta una metodología que requiere la simulación de todo el sistema completo, esta simulación incluye dos simulaciones interconectadas. La primera consta de la simulación del sistema inductor, la cual consiste en un problema electromagnético por lo cual se va a hacer uso de una herramienta de cálculo mediante elementos finitos en tres

dimensiones. En el caso de la segunda se usa los resultados obtenidos en la primera simulación para poder simular el sistema completo.

2.1 Sistema electromagnético

El sistema electromagnético consta de ambos inductores, estos se definen según el lugar que ocupan. De esta forma contamos con un inductor que se encuentra ubicado en el vehículo y otro enterrado en la carretera, pero tal y como se puede ver en la Figura 4 y 5 ambos están formados por las mismas partes, solo se modifica el lugar que ocupa cada elemento debido a sus funciones.

- **Bobinado:** El bobinado está formado por cable de Litz para reducir la contribución de las pérdidas de proximidad debido a la pequeña sección de las hebras que lo conforman. El diseño del bobinado se hace en función de la potencia que debe suministrar de manera que tenga el máximo rendimiento posible.
- **Concentradores de flujo:** Es un material con una permeabilidad relativa muy alta y con una conductividad eléctrica muy baja, generalmente ferritas. Su función es la amplificación de los campos que se producen en el bobinado.
- **Apantallamiento:** Se trata de un material conductor generalmente se usa un aluminio debido a su bajo peso, el cual tiene la función de proteger al usuario frente al campo magnético.

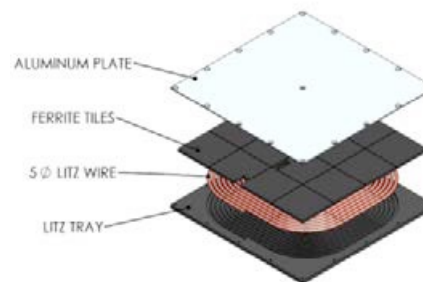


Figura 4. Sistema inductor embarcado en el vehículo.

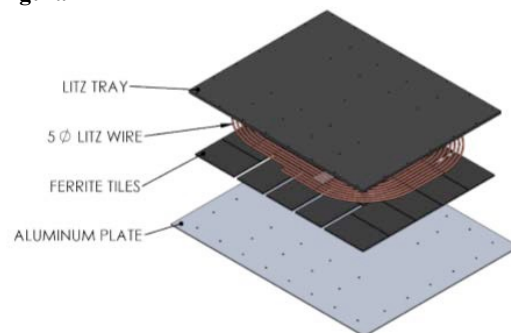


Figura 5. Sistema inductor de tierra.

2.2 Sistema electrónico

El sistema electrónico se puede dividir de manera similar al sistema electromagnético en dos. El primero estaría formado por la electrónica asociada al inductor de tierra, esta puede estar debajo del propio inductor o bien en un armario colocado cerca, y una segunda electrónica que se encuentra colocada en el vehículo.

La primera electrónica es la encargada de generar la corriente de alta frecuencia que producirá el campo magnético en el inductor. Para esta electrónica se han propuesto distintas soluciones [4], en el caso en estudio se ha utilizado una topología serie-serie, la cual está formada principalmente por:

- Convertidor AC-DC: Esta etapa de electrónica tiene la función de convertir la tensión alterna de la red en un bus de tensión continua.
- Puente completo: El puente completo está formado por cuatro elementos semiconductores que son los encargados de producir una señal de tensión cuadrada de la misma frecuencia que la corriente que circula por el inductor.
- Condensador de resonancia: El condensador de resonancia tiene la función de resonar con la inductancia para disminuir la energía reactiva en el sistema.

En el caso de la electrónica embarcada en el vehículo tiene la función de convertir la energía absorbida por el inductor en energía admisible en las baterías. Dicha electrónica está formada por una etapa AC-DC que convierte la corriente alterna de alta frecuencia transferida al inductor en una corriente continua almacenable en las baterías.

3. Uso de herramientas de simulación

En este apartado se va a definir como se ha realizado las simulaciones de ambos sistemas. Por un lado, se explicará cómo se ha usado el módulo AC-DC de COMSOL Multiphysics para la simulación electromagnética y posteriormente se indicará como se ha realizado la simulación electrónica mediante MATLAB-Simulink.

3.1 Uso de COMSOL Multiphysics

En el caso de la simulación electromagnética se ha hecho uso de la “co-simulación”, la cual consiste en el uso del software para la resolución de las leyes de Maxwell en cada uno de los puntos definidos por el mallado y posteriormente resolver las distintas ecuaciones que definen el

comportamiento de un inductor.

Para la definición del sistema inductor se ha propuesto una simplificación en la geometría, esta simplificación ha consistido en la sustitución del bobinado de Litz por un conductor sólido único sin pérdidas, es decir, donde la corriente se distribuye de manera uniforme tal y como se observa en la Figura 6. Con ello se consigue la reducción del coste computacional del sistema.

En el caso de la ferrita se ha modelado como un plano de ferrita, lo cual nos permite reducir aun más el número de elementos en el sistema. Estas simplificaciones permiten aumentar eficiencia de la simulación.

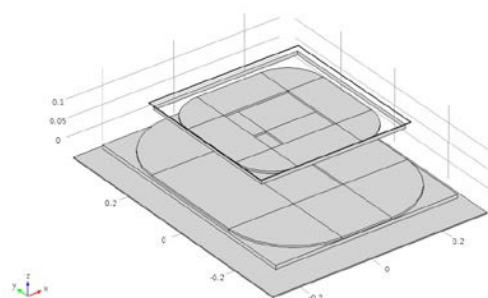


Figura 6. Modelado del sistema de transferencia de energía inalámbrica.

Además, para el correcto modelado del sistema inductor se deben realizar dos simulaciones. La primera permitirá modelar correctamente el sistema inductor primario y el acoplamiento del sistema visto desde dicho inductor, para ello se define como condición de contorno una densidad de corriente uniforme confinada en el inductor de tierra y siguiendo la trayectoria del inductor. La segunda simulación permite modelar el inductor secundario y el acoplamiento visto desde el secundario y para ello se define una densidad de corriente de manera similar al primer caso. En la Figura 7 se puede observar la densidad de corriente en el inductor, así como la dirección del inductor.

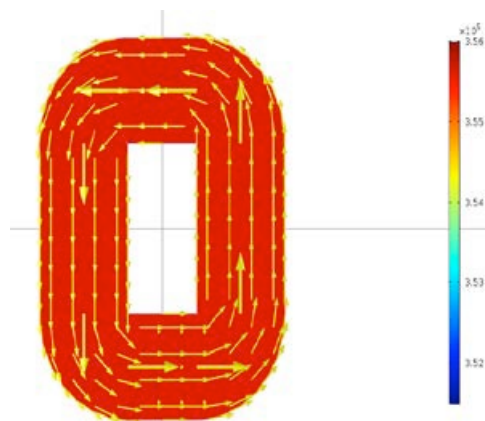


Figura 7. Campo magnético y corriente en el primario del sistema inductor.

Como se ha indicado anteriormente en el caso de la simulación electromagnética se ha realizado una “co-simulación”, por ello una vez simulado el sistema inductor se han introducido la siguiente ecuación en COMSOL Multiphysics [5] que nos permite conocer la tensión en bornes del inductor.

$$V(\omega) = -\frac{1}{S_{\text{espira}}} \int_V (E_x(\omega)l_x + E_y(\omega)l_y)dv \quad (1)$$

Donde “ $V(\omega)$ ” define la tensión en los bornes del inductor, “ S_{espira} ” consiste en la sección de una espira, “ $E_x(\omega)$ ” y “ $E_y(\omega)$ ” definen el campo magnético en el inductor en la dirección “x” e “y” respectivamente y “ l_x ” y “ l_y ” consiste en la dirección “x” e “y”.

Una vez obtenida la tensión en los bornes del inductor y conociendo la corriente, ya que es una condición de contorno, se pueden obtener la inductancia tal y como se observa en la ecuación dos.

$$L_i(\omega) = \text{imag} \left(\frac{V_i(\omega)}{I_i(\omega)} \right) \quad (2)$$

Donde “ $L_i(\omega)$ ” es la inductancia dependiente de la frecuencia e “ $I_i(\omega)$ ” es la corriente por el inductor.

$$M_{ij}(\omega) = \text{imag} \left(\frac{V_j(\omega)}{I_i(\omega)} \right) \quad (3)$$

$$M_{ji}(\omega) = \text{imag} \left(\frac{V_i(\omega)}{I_j(\omega)} \right) \quad (4)$$

De la misma forma podemos definir la inductancia mutua, “ $M_{ij}(\omega)$ ”, tal y como se muestra en la ecuación 3 y 4.

$$M_{ij}(\omega) = M_{ji}(\omega) \quad (5)$$

A su vez se puede demostrar que ambos valores de inductancia mutua son del mismo valor. Ya que la influencia de una sobre otra debe ser igual.

$$k = \frac{M_{ij}(\omega)}{\sqrt{L_i(\omega)L_j(\omega)}} \quad (6)$$

Por último, se ha calculado el factor de acoplamiento de dos bobinas acopladas magnéticamente, “ k ”.

Una vez caracterizada la bobina como se ha indicado, se ha modelado el movimiento del vehículo obteniendo las variables de una manera continua.

3.2 Uso de MATLAB-Simulink

En el caso de la simulación del sistema electrónico como se ha indicado anteriormente se ha utilizado el software comercial MATLAB con su simulador Simulink. Este software permite la introducción del sistema electrónico a través de su interfaz gráfica y posteriormente la programación de las simulaciones mediante MATLAB.

Para el diseño del sistema se ha simulado la electrónica asociada y se ha modelado el sistema inductor mediante dos bobinas acopladas. La definición de dos bobinas acopladas se ha realizado mediante las variables calculadas en COMSOL Multiphysics, como se puede ver en la Figura 8.

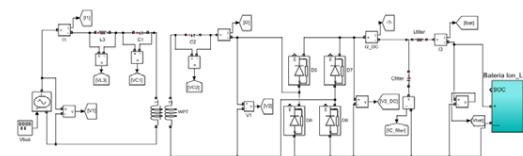


Figura 8. Modelado del sistema electrónico y electromagnético.

Como simplificación del sistema se ha modelado el puente completo anteriormente definido como una fuente de tensión.

Además, se ha utilizado la programación de MATLAB para simular el movimiento del vehículo.

4. Resultados

A continuación, se van a mostrar algunos de los resultados obtenidos.

4.1 Resultados en COMSOL Multiphysics

Como se ha indicado anteriormente en la simulación de COMSOL Multiphysics se ha hecho uso de la “co-simulación”, de manera que se usaba el software para el cálculo de las leyes de Maxwell en los distintos puntos definidos por el mallado. A continuación, en la Figura 9 se puede observar el campo magnético y la corriente de primario obtenido en la simulación

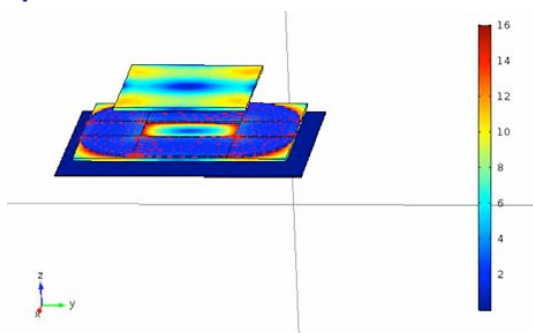


Figura 9. Campo magnético y la corriente en el primario del sistema inductor representado mediante flechas rojas.

Además, de por la relevancia que va a tener esta normativa “SAE internacional J2954” se ha elegido estos inductores porque nos facilitan los valores obtenidos para los inductores de manera experimental, lo que nos permite comparar la simulación en estático con el valor experimental y así validar la simulación. En la Tabla 1 se puede observar estos valores, así como el error observado. El error en el acoplamiento parece muy elevado, pero al definirse con un valor menor que uno la ecuación de error no parece la adecuada.

Variable	Simulación	Experimental	Error (%)
Inductancia primario (μH)	43,5	42,1 - 43,2	0,69%
Inductancia secundario (μH)	36,98	37,9 - 39	2,43%
Acoplamiento entre primario y secundario “k”	0,36	0,088 – 0,245	46,94 %

Tabla 1. Comparativa de los resultados por simulación y los experimentales.

Por último, en la Figura 10 se muestra la evolución de las variables del sistema durante el movimiento del inductor. Tal y como se observa, la inductancia mutua disminuye según el VE va moviéndose ya que el flujo concatenado entre ambos inductores es menor. De manera contraria pasa con la inductancia que aumenta ya que disminuyen las corrientes inducidas en el inductor secundario para cancelar el campo magnético generado en el primario.

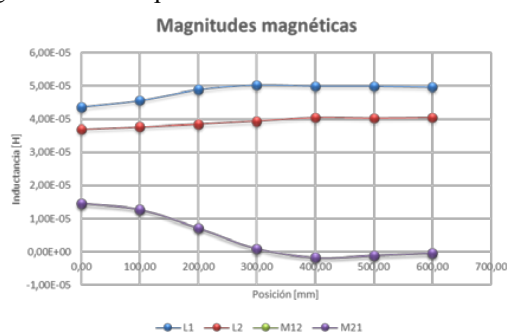


Figura 10. Evolución de los parámetros calculados en función del movimiento del vehículo.

4.2. Resultados en MATLAB-Simulink

A continuación, se van a mostrar los resultados obtenidos mediante MATLAB-Simulink. En este caso se sistema el sistema completo, tal y como se ha indicado

anteriormente, con esta simulación se puede conocer la potencia que se entrega a la batería. En este caso también se ha implementado un simulador del movimiento mediante MATLAB para conocer la potencia en toda la trayectoria del VE.

En la Figura 11, se puede observar el resultado, cuando el VE esta centrado la potencia que se entrega a la batería es máxima, pero según el VE se va moviendo la potencia entregada disminuye hasta convertirse en nula.

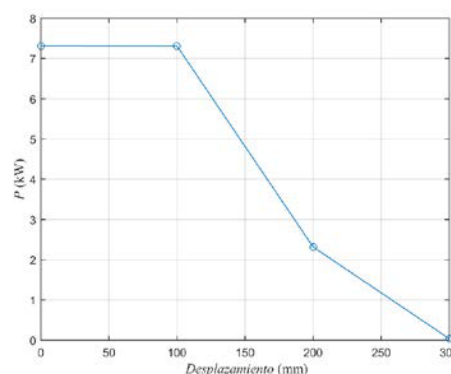


Figura 11. Evolución de la potencia en función del movimiento del vehículo.

Una vez obtenida la potencia en toda la trayectoria del VE, se puede calcular la energía entregada en función de la velocidad integrando la potencia, tal y como se observa en la Figura 12.

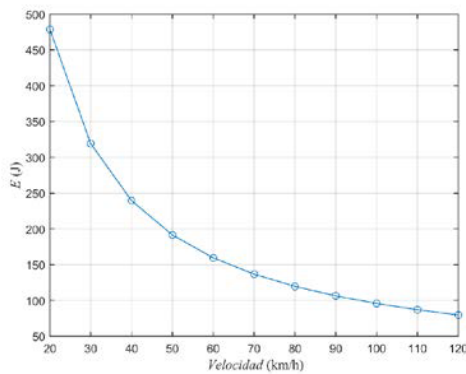
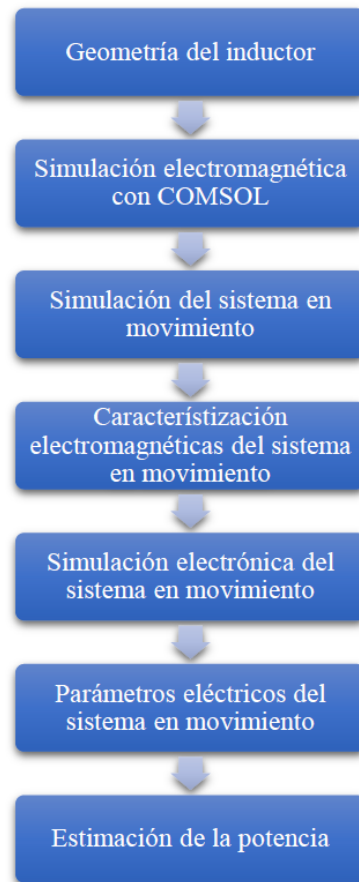


Figura 12. Cálculo de la energía entregada en función de la velocidad.

5. Conclusiones

En el presente artículo se presenta un método novedoso de simulación de carga dinámica por inducción que permite conocer el performance del sistema en la fase de simulación. Para ello se ha modelado de manera correcta el sistema inductor y la electrónica asociada al mismo mediante dos simuladores encadenados, permitiendo una automatización del diseño del sistema lanzando ambas simulaciones mediante MATLAB. Finalmente se presenta un flujo de trabajo para esta metodología.



6. Referencias

1. J. Villa, J. Sallán, J. Sanz and A. Llombart, High-Misalignment Tolerant Compensation Topology For ICPT Systems, *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, ISSN 0278-0046, **59** (2012), 945- 951.
2. Chirag Panchal, Sascha Stegen, Junwei Lu, Review of static and dynamic wireless electric vehicle charging system, *Engineering Science and Technology, an International Journal*, Volume **21**, Issue 5, October 2018, Pages 922-937.
3. Wireless Power Transfer for Light-Duty Plug-In/ Electric Vehicles and Alignment Methodology, *SAE International*, Mayo 2016.
4. Villa, J.L.; Sallan, J.; Sanz Osorio, J.F.; Llombart, A. High-Misalignment Tolerant Compensation Topology for ICPT Systems. *IEEE Trans. Ind. Electron.* 2012, **59**, 945–951.
5. C. Carretero et al., Elliptic Flat-Type Inductor for Low-Cost Flexible Active Surface Implementations of Domestic Induction Heating Appliances, *Twenty-Eighth Annual IEEE Applied Power Electronics Conference and Exposition (APEC)*, 2013.

Computational Fluid Dynamics (CFD) Applied to the Design of Photobioreactors for the Production of Microalgae

Cristian Inostroza^{1*}, Alessandro Solimeno^{2,3}, Joan García Serrano³, F. G. Ación Fernández², J. M. Fernández-Sevilla¹

¹Department of Chemical Engineering, Universidad de Almería, E04120 Almería, Spain

²Department of Biotechnology, Technological Institute of the Canary Islands, Las Palmas, Spain.

³GEMMA – Group of Environmental Engineering and Microbiology, Department of Hydraulic, Maritime and Environmental Engineering, Universitat Politècnica de Catalunya-BarcelonaTech, c/Jordi Girona, 1-3, Building D1, E-08034, Barcelona, Spain.

*Autor de contacto: Universidad de Almería, E04120 Almería, Spain,
cristianenrique.inostroza@gmail.com

Abstract: In this work, the hydrodynamic operating conditions of a 500 m² Raceway Photobioreactor (PBR-R) of prototype size, with a volumetric capacity of 100000 L., were defined using Computational Fluid Dynamics (CFD) to study the PBR- R (s) most used: Traditional, Isle Partition and Baffles Partition. By monophasic analysis generating a single hydraulic jump using the Finite Element Method (FEM) with COMSOL MultiphysicsTM, it was determined that the design with deflector curves is that which generates the best conditions for microalgal multiplication such as fluid velocity, lower dead zones, number of appropriate Reynolds, shorter residence time and a higher coefficient of dispersion.

Keywords: Photobioreactors, Microalgae, Computational Fluid Dynamics (CFD), COMSOL MultiphysicsTM.

1. Introduction

Computational Fluid Dynamics (CFD) is a generic term for numerical schemes that represent mass and momentum flow through one or more continuous fluids. The CFD has the advantage of not requiring a calibration stage since it is derived from the universal equations that govern the flow of fluids. The behavior of a flow within a Photobioreactor (PBR) to produce microalgae can be predicted by solving the differential equations that describe the conservation of mass and momentum. The interaction of the particles and their geometry make these equations very difficult to solve, but not with the use of CFD for this reason its use has

been massified to reduce design errors. It encompasses the techniques that are responsible for predicting the behavior of fluids (kinematics, heat transfer, chemical reactions, among others.) Numerically integrating the equations that govern these processes and performing their analysis through computer simulations. Due to experimental techniques because it has a substantial reduction in development times and costs in new designs, it has the possibility to study systems in which controlled experiments are difficult or impossible to perform, it has the ability to study systems under negative conditions or dangerous outside the normal operating limits, it has a practically unlimited level of detail in the results, among others.

The use of CFD to improve the design of PBRs is widely investigated as it is the most widely used technology, more than 90% of the worldwide production is based on this production platform (Barceló-Villalobos et al., 2019) and that allow high productivity to be obtained by reducing energy costs and requirements. The design of the photobioreactor has a significant impact on the growth of the microalgae: the degree of mixing, temperature, CO₂ consumption, O₂ elimination, nutritive salt supply, and pH the intensity and penetration of light or the frequency of cellular exposure to light (Ación et al., 2017).

One of the aspects to be considered in the design or improvement of a new photobioreactor is to maximize the surface-volume ratio useful, that is, by decreasing dead volumes that are high-pressure and low-velocity vortices (<0.1 ms⁻¹), and a length/width ratio (p/q) of 10 or larger is recommended (Chisti et al., 2016). A typical cultivation depth in an open pond of 0.25-0.30 m

was proposed more than 20 years ago but with increasing light penetration investigations proposed (Molina Grima et al., 1994) it has decreased the surface-to-volume ratio with depths not exceeding 0.2 m has even been reported high yields with 0.15 m, despite the fact that low depths in Raceways Photobioreactors generate a series of fluid mechanics problems since that increases the losses of friction and decreases the hydraulic jump product of the rotary machinery (Paddlewheel) causing decay of the microalgae and the nutritive salts, consecutively the death of the microorganism.

To avoid a low level of mixing and thermal stratification is necessary speeds over 0.05 ms^{-1} (Amini et al., 2016; Chisti et al., 2016), velocities greater than 0.1 ms^{-1} to avoid sedimentation, therefore, velocities are used greater than 0.2 ms^{-1} in straight sections. Although the most commonly used for correct operation is 0.3 ms^{-1} (Chisti et al., 2016) says that the safest criterion is to use a Reynolds number greater than 8000, which is considered slightly turbulent, to keep the nutritive salts and microalgae dissolved in the liquid medium with the optimal interaction times for the correct absorption. From this level of turbulence, it helps to dissolve CO_2 as a nutrient and prevent the accumulation of oxygen product of photosynthesis as waste, mainly this gas exchange generates in the Paddlewheel area since in the rest of the channel between the surface and the layers inferior is the mixing (Chisti et al., 2016). Very high Reynolds can mean very low frequency of interaction with solar radiation and nutrients and, above all, destabilizing the boundary layer at the edge of the walls, enhancing the viscous effects due to roughness, this is quite problematic since nutrients are added here to the walls and sequentially the microalgae each time forming a cup over another increasing friction more and more.

2. Materials and methods

Location of Real-Scale Raceway Reactor

A $60 \times 20 \text{ m}$ boundary area was available to build an industrial scale PBR at the Las Palmerillas Experimental Station of Fundación CAJAMAR, $36^\circ 48' \text{N}$ $-2^\circ 43' \text{W}$, Almería, Spain. The reactor is considered the largest experimentally built in the European Union. Said reactor must consider 500 m^2 of cultivation area, therefore, it is considered that it is constructed of $10 \times 50 \text{ m}$ to experimentally evaluate the operating parameters.

Discretization domains and governing equations

This method is completely valid for this type of analysis and has been adopted by numerous researchers in the past (Ali et al., 2014; Amini et al., 2016; Hadiyanto et al., 2013; Liffman et al., 2013; Singha et al., 2017).

The meshes have been created with mesh generator, structured hexahedral with 97-99% symmetrical quality, average element size of 0.2 L. The number of elements: TRADITIONAL = 100000, ISLE PARTITION = 111800, BAFFLES PARTITION = 364000.

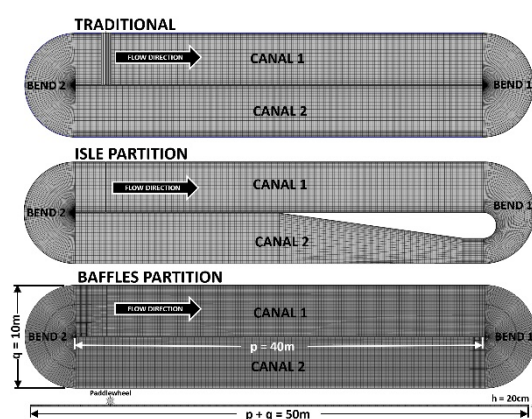


Fig. 1. Discretization domains for each case.

Newtonian fluid water with density (ρ) = 1000 Kg m^{-3} ; viscosity (μ) = $0.001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ was used as an initial condition, a regular flow rate of 0.22 ms^{-1} was used (Barceló-Villalobos et al., 2019), the upper wall at atmospheric pressure and the boundary walls was applied an Average Roughness (R_a) of 0.0015 mm . The equations that govern the study solve the mono-phase flow problem at steady state until equilibrium is reached, which is given as:

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-pl + K] + F + \rho g$$

$$\rho \nabla \cdot (u) = 0$$

$$K = (u + u_T)(\nabla u + (\nabla u)^T)$$

where $u = 0.22 \text{ ms}^{-1}$, F = volume forced vector (Nm^{-3}), $T = T_{\text{ref}} = 293.15 \text{ }^\circ \text{K}$, $p = p_{\text{ref}} = 101130 \text{ Pa}$, g = gravity, l = mixing length limit (m).

In this study we used standard k- ϵ turbulence model (Sompech et al., 2012) are as follows:

$$\rho(u \cdot \nabla)k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon$$

$$\rho(u \cdot \nabla)\varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} P_k$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

$$P_k = \mu_T [\nabla u : (\nabla u + (\nabla u)^T)]$$

where, k = turbulent kinetic energy, ε = turbulent dissipation rate, μ_T = turbulent viscosity (pa-s), $\sigma_k = 1.0$ (Prandtl number for kinetic energy), $\sigma_\varepsilon = 1.3$ (Prandtl number for dissipation rate), $C_{\varepsilon 1} = 1.44$ and $C_{\varepsilon 2} = 1.92$ (first and second constant for the dissipation rate), $C_\mu = 0.09$ (turbulent model constant).

The negative effect of the Dead Zone (DZ) is directly related to the fall in productivity energy loss and others, velocities lower than 0.1 ms^{-1} (Chisti et al., 2016) will be considered dead volumes. They can be calculated using the following model (Ali et al., 2014):

$$DZ = \frac{\text{Volume with velocity less than } 0.1 \text{ m/s}}{\text{Total volume of pond}}$$

To calculate the area and volume (Chisti, 2013), it can be done using the following expression (measured in Fig. 1. Discretization domains for each case.):

$$A = \frac{\pi q^2}{4} + pq$$

$$V = A \cdot h$$

The flow in a raceway needs to be turbulent to keep the cells to maintain mixing conditions. Whether the flow in turbulent depends on its Reynolds Number, Re , defined as:

$$Re = \frac{\rho u \sqrt[3]{d_c}}{\mu}$$

where, $\sqrt[3]{d_c}$ is the equivalent diameter of an element, measured by meshing controls.

It has been shown in a previous experiment that if the liquid velocity is 0.22 ms^{-1} , as in this case, the dispersion coefficient in the channels and the bends is the same with or without baffles. The dispersion coefficient (Dz) was calculated as a function of liquid velocity (v), the Bodenstein Number (Bo) was obtained from (Mendoza et al., 2013) and the length of the section (L_{section}) according to the equation:

3. Results and discussion

Tree-dimensional velocity contours (v_x, v_y, v_z) and flow lines have been designed to establish the hydrodynamic behavior of the 3 design cases, which were measured in the middle of the column (0.1m channel depth), as indicated in the following figure:

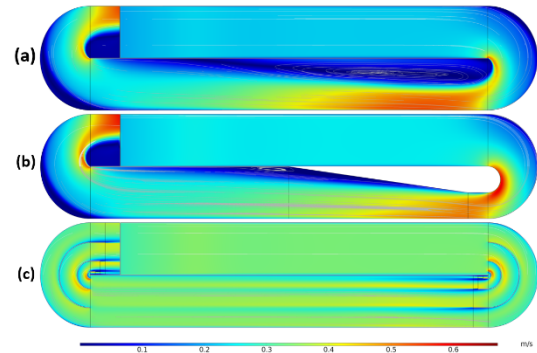


Fig. 2. Contour of velocity profiles and flow lines. (a) TRADITIONAL (b) ISLE PARTITION (c) BAFFLES PARTITION.

Remarkable differences in hydrodynamic behavior can be observed in this CFD analysis in relation to velocity profiles and dead zones. As indicated in Fig. 2, in the case TRADITIONAL has a behavior with high-velocity gradients which means a great economic cost in mechanical energy and biologically cellular stress. In addition, a very pronounced vortex which directly affects productivity. In the case ISLE PARTITION, the dead zone decreases markedly but the high-velocity gradients, the current venturi strangulation as a barrier to the passage of the liquid, generating high economic costs are maintained. In the case BAFFLES PARTITION the most interesting behavior is observed where the dead zone is diminished to the maximum, the velocity gradients are very low, it is observed that the use of baffles orders the fluid currents in relation to the A/V so that they can rotate with the necessary mechanical energy and reducing the rebound effect of the curves. Although for reasons of space the PBR was designed in a 1: 4 ratio ($q = 10$: $p = 40$) and not in 1:10 or larger ratio to avoid disturbances caused by curves (Chisti et al., 2016).

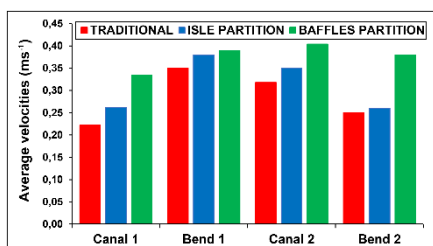


Fig. 3. Average velocities.

To be observed the velocity graph, it has been observed that TRADITIONAL and ISLE PARTITION have a similar tendency in both canals, maintaining a velocity not exceeding 0.25 ms^{-1} and producing a sharp increase in velocity in Bend 1 mainly due to the strangulation produced by the high-pressure vortex and the island-type septum respectively, in both cases both the vortex and the septum produce a similar hydrodynamic effect, in the Canal 2 and Bend 2 the velocity fall to velocity below 0.1 ms^{-1} showing high load losses and possible sedimentation (Chisti et al., 2016).

Different is the BAFFLES PARTITION there is an immediate gain in velocities in Canal 1 of 0.15 ms^{-1} , a slight increase in velocity in Bend 1 beneficial energetically and biologically by the shear effect of microalgal cells, the loss of velocity in Canal 2 and Bend 2 is practically negligible maintaining a constant microalgal transit with a turbulence effect throughout the journey with a constant mixture, resulting in a constant interaction of nutrients with the microalgae and a low sedimentation capacity.

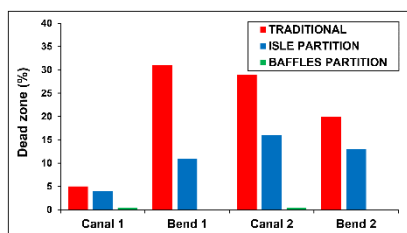


Fig. 4. Dead zones

Dead zones have many disadvantages that decrease productivity among them: retention of O_2 , accumulation and precipitation of mineral salts, dissipation and loss of mechanical energy. In the TRADITIONAL design it presents a total of 14%, in the ISLE PARTITION a total of 6% and in the BAFFLES PARTITION a total less than 1% of dead zones respectively. By sections the greatest presence is presented in the TRADITIONAL design in its Bend 1 and

Channel 2, conversely the BAFFLES PARTITION in which its presence is null. The decrease in dead zones has been a great advance in the profitability of the use of the raceway photobioreactor.

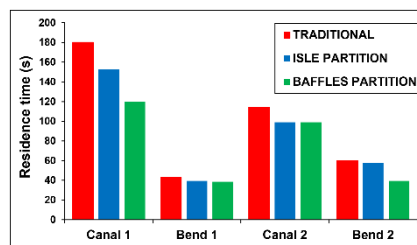


Fig. 5. Residence time.

The residence times observed in Canal 1 are $> 150\text{s}$ for the TRADITIONAL and ISLE PARTITION photobioreactor due to the disturbance produced by the high pressure generated in curve 1 that acts as an obstacle to the transit of the fluid that produces a greater retention of Microalgae particles, this avoids the light that penetrates deeper, also promotes agglomerations that increase the specific weight generating sedimentation, also generates a greater primary accumulation of nutrients in the walls that in the future will become biofilm causing greater friction. The BAFFLES PARTITION does not exceed 120s in your Canals in an orderly flow. For all case studies, neither Canal 2 nor both curves would pose fluid transit problems.

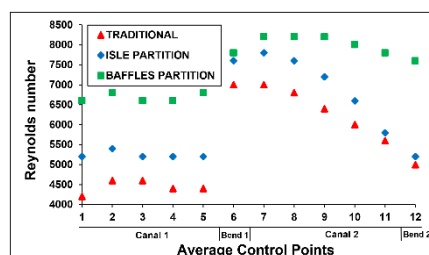


Fig. 6. Reynolds number

In the BAFFLES PARTITION achieves average Reynolds values in Canal 2 between 8000 and 8500, this being one of the most important PBR development criteria, this is achieved by the implementation of baffles that maintain a uniformity of flow (Chisti et al., 2016) helping not to lose velocity as it maintains a movement of particles in all the cartesian axes, especially in the vertical axis (x,y,z). Both TRADITIONAL and ISLE PARTITION fail to reach a minimum safe criterion value of 8000 since the flow needs to be turbulent to keep the microalgae in suspension, favor vertical mixing,

avoid thermal stratification and avoid oxygen accumulation (Chisti et al., 2016).

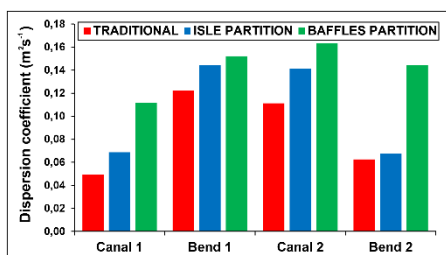


Fig. 7. Dispersion coefficient.

It can be seen in the dispersion coefficient that the use of baffles there is an improvement of the transport of particles by all sections of the PBR obtaining dispersion coefficients greater than $0.10 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ determining another improvement parameter of the mixture, it is observed in TRADITIONAL and ISLE PARTITION that the current Bend 1 as an obstacle to the transit of particles, as a wall would not exceed a dispersion coefficient of $0.07 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, causing microalgal and nutrient accumulation after of the rotary agitator, removing all agitation mechanism effectively.

4. Conclusion

In this first stage of design and study of Computational Fluid Dynamics (CFD), it has been determined that PBR with BAFFLES PARTITION has the best hydrodynamic conditions to achieve a successful production of microalgae.

5. References

1. Acién, F.G., Molina, E., Reis, A., Torzillo, G., Zittelli, G.C., Sepúlveda, C., Masojídek, J., 2017. Photobioreactors for the production of microalgae, Microalgae-Based Biofuels and Bioproducts: From Feedstock Cultivation to End-Products. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-101023-5.00001-7>
2. Ali, H., Cheema, T.A., Park, C.W., 2014. Effect of Paddle-Wheel Pulsating Velocity on the Hydrodynamic Performance of High-Rate Algal Ponds. *J. Energy Eng.* 141, 04014039. [https://doi.org/10.1061/\(asce\)ey.1943-7897.0000219](https://doi.org/10.1061/(asce)ey.1943-7897.0000219)
3. Amini, H., Hashemisohi, A., Wang, L., Shahbazi, A., Bikdash, M., KC, D., Yuan, W., 2016. Numerical and experimental investigation of hydrodynamics and light transfer in open raceway ponds at various algal cell concentrations and medium depths. *Chem. Eng. Sci.* 156, 11–23. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.09.003>
4. Barceló-Villalobos, M., Fernández-del Olmo, P., Guzmán, J.L., Fernández-Sevilla, J.M., Acien Fernández, F.G., 2019. Evaluation of photosynthetic light integration by microalgae in a pilot-scale raceway reactor. *Bioresour. Technol.* 280, 404–411. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.02.032>
5. Chisti, Y., 2013. Raceways-based production of algal crude oil. *Green* 3, 195–216. <https://doi.org/10.1515/green-2013-0018>
6. Chisti, Y., Large-scale production of algal biomass: Raceway ponds. In *Algae Biotechnology: Products and Processes*, Bux, F., Chisti, Y. (eds), Springer, New York, 2016, pp. 21–40.
7. Hadiyanto, H., Elmore, S., Van Gerven, T., Stankiewicz, A., 2013. Hydrodynamic evaluations in high rate algae pond (HRAP) design. *Chem. Eng. J.* 217, 231–239. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.12.015>
8. Liffman, K., Paterson, D.A., Liovic, P., Bandopadhyay, P., 2013. Comparing the energy efficiency of different high rate algal raceway pond designs using computational fluid dynamics. *Chem. Eng. Res. Des.* 91, 221–226. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2012.08.007>
9. Mendoza, J.L., Granados, M.R., de Godos, I., Acien, F.G., Molina, E., Banks, C., Heaven, S., 2013. Fluid-dynamic characterization of real-scale raceway reactors for microalgae production. *Biomass and Bioenergy*

- 54, 267–275.
<https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2013.03.017>
10. Molina Grima, E., García Camacho, F., Sánchez Pérez, J.A., Fernández Sevilla, J.M., Ación Fernández, F.G., Contreras Gómez, A., 1994. A mathematical model of microalgal growth in Light-Limited Chemostat Culture. *J. Chem. Technol. Biotechnol.* 61, 167–173.
<https://doi.org/10.1002/jctb.280610212>
11. Singha, N.B., Deb, U.K., Shahriar, M., 2017. Investigation of Flow Dynamics for a Microalgae Suspension in an Open Pond System. *Am. J. Comput. Math.* 07, 195–207.
<https://doi.org/10.4236/ajcm.2017.73018>
12. Sompech, K., Chisti, Y., Srinophakun, T., 2012. Design of raceway ponds for producing microalgae 3, 387–397.

6. Acknowledgments

This work is supported by the H2020 SABANA 727874 project financed by the European Union, in the Blue-Growth program, as well as the national PURASOL project, CTQ2017-84006-C.

Supplementary SUPPORT

PBR built-in Palmerillas Experimental Station, Almería. Spain.



Challenges in finite element analysis of a deformable metasurface unit cell using COMSOL Multiphysics

Rayehe Karimi Mahabadi^{1,2}, Taha Goudarzi³, Romain Fleury², Saeed Sohrabpour¹ and Reza Naghdabadi^{*1,4}

¹Department of Mechanical Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

²Department of Electrical Engineering, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Lausanne, Switzerland

³Department of Mechanical Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Tehran, Iran.

⁴Institute for Nanoscience and Technology, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

*Corresponding Author: Department of Mechanical Engineering, Sharif University of Technology, Tehran 11155-9567, Iran. naghdabd@sharif.edu

Abstract: Here, we present the different challenges one might face in multiphysics simulation of an electromagnetic metasurface unit cell under mechanical deformation. The principal problem stems from the required air layers as a propagating medium for the electromagnetic analysis, which are not involved in the mechanical analysis. In this regard, the available options of COMSOL Multiphysics® are explored and a framework for this simulation is presented.

Keywords: Electromagnetic metasurface, deformable, Finite element analysis.

1. Introduction

Metasurfaces are 2D counterparts of metamaterials. Like metamaterials, they can be engineered for achieving anomalous reflection/refraction properties. They have attracted attention due to their potential applications in optical cloaking, thin-film sensing, super-lensing, on-chip photonic and optoelectronic devices, and energy harvesting [1,2]. Researchers tried to add mechanical tunability to these structures to expand their spectrum of applications [3-7].

Metasurfaces are formed from a periodic unit cell consisted of a substrate and resonators. For this reason, only one unit cell can be analyzed instead of the whole structure in order to verify their physical responses. Performing an electromagnetic analysis on a deformed unit cell is a multiphysics problem. In multiphysics problems, linking the commercial software packages for different physics is often a challenge and ongoing developments are undertaken to support multiphysics simulations.

One of the famous commercial packages aiming at multiphysics problems is COMSOL Multiphysics® [8].

The challenge of simulating a deformed metasurface unit cell stems from the needed air layers (Figure 1) as a propagating medium for the electromagnetic analysis, which are not involved in the mechanical analysis. It is noted that these air layers make the multiphysics analysis more difficult than usual. Here, we address the different challenges one might face in a multiphysics simulation of a metasurface unit cell under mechanical deformation and the available approaches for this simulation with COMSOL Multiphysics®. To this end, the available options of COMSOL Multiphysics® for this simulation are explored and a solution is proposed.

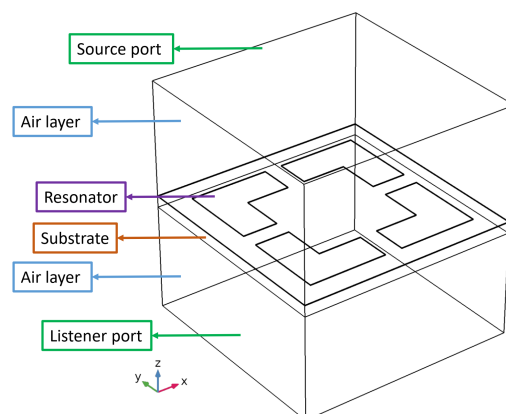


Figure 1. Schematic view of the model.

2. Problem definition

Here, we have considered the metasurface unit cell shown in Figure 2. It is a 5×5 (mm²) unit cell consisted of copper resonators (0.025 [mm]

thickness) and a PDMS substrate (0.25 [mm] thickness). The simulation is done in two consecutive mechanical and electromagnetic steps. Subsequent to the mechanical analysis, the electromagnetic analysis is done on the deformed geometry.

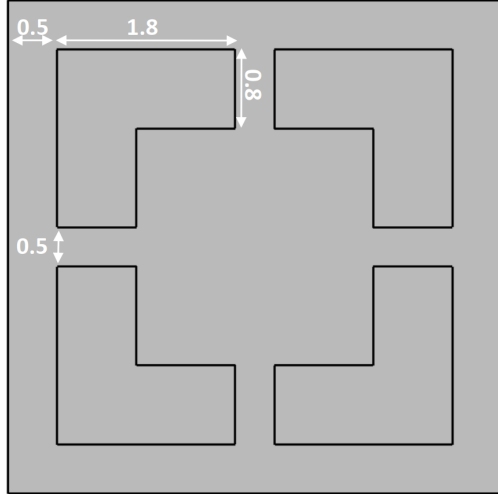


Figure 2. Dimensions of the simulated metasurface unit cell.

3. Simulation

We used the solid mechanics module for stationary mechanical analysis of the unit cell and linear constitutive relations are considered. We should apply the following equations to get the periodic boundary conditions.

$$U_{\text{destination}} = U_{\text{source}} + \varepsilon_{\text{avg}} (r_{\text{destination}} - r_{\text{source}}) \quad (1)$$

where U , r , and ε_{avg} represent the displacement vector in the boundary surfaces, the position vector, and the desired average strain of the unit cell, respectively. We applied Equation (1) by using the cell periodicity option. We considered 0.01 for XX component of the average strain and 0 for the other components.

For the electromagnetic analysis, we added a frequency domain electromagnetic waves module. We defined periodic source and listener ports on the top and bottom surfaces of the air layers, respectively (see Figure 1). For periodic structures a phase advance exists per unit cell [9,10]. We can define it using the Floquet periodicity, which is expressed using the following equation.

$$A_{\text{destination}} = e^{ik_F (r_{\text{destination}} - r_{\text{source}})} A_{\text{source}} \quad (2)$$

Equation (2) relates the field vector (A) on one side of the unit cell to the other side where k_F is the Floquet vector. This boundary condition is applied to the xz and yz surfaces of the model using the available option in COMSOL electromagnetic wave module with the k_F vector from the periodic port. A plane wave with the electric field vector polarized parallel to y direction was set normally incident onto the unit cell and the wave propagation is from top of the unit cell to its bottom.

To perform the electromagnetic analysis on a deformed unit cell of the metasurface, we have tried the following approaches to solve the issue with the simulation of air layers.

1. Performing the mechanical analysis on the unit cell and including the air layers just in the electromagnetic analysis.
2. Assigning mechanical properties to the air layers and including them in the mechanical as well as the electromagnetic analysis.
3. Including the air layers in the moving mesh physics as well as the electromagnetic physics.

4. Results and discussion

Here, we discuss the mentioned approaches in the previous section. The first approach fails with the error of “*Periodic ports must have planar boundaries*”. A central problem of this approach is the occurrence of size mismatch between the deformed substrate and the air layers (Figure 3). As a result, defining electromagnetic periodic boundary conditions fails and the electromagnetic analysis of the deformed unit cell is not possible.

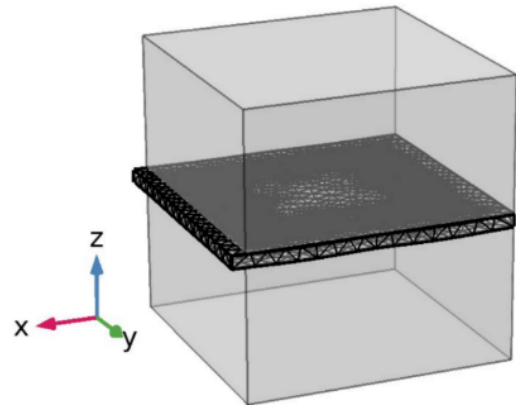


Figure 3. Size mismatch between air layers and the substrate.

For the second approach, the challenge is with assigning proper mechanical properties to the air layers. In assigning the mechanical properties, two points should be noted; these properties should be considered in a way that first, the air layers have the minimum contribution to the mechanical results of the unit cell; also the simulation should not face convergence issues. For these reasons, various mechanical properties are assigned to the air layers. We considered the Poisson's ratio to be equal to 0 (no lateral deformation), 0.35 (equal to the copper resonators) and 0.49 (the same as the PDMS substrate). The value for Young's modulus is increased gradually from 1 Pa to 1000 Pa. We have compared the volumetric average, maximum and minimum of the second Piola-Kirchhoff stress (S_{xx}) and Green-Lagrange strain (ϵ_{xx}) in the unit cell in addition to the dimensionless factor defined with respect to the time of each simulation ($t^* = t/t_{\text{without air}}$) in Table 1.

	S_{xx}^{mean}	$\epsilon_{xx}^{\text{mean}}$	S_{xx}^{max}	$\epsilon_{xx}^{\text{max}}$	S_{xx}^{min}	$\epsilon_{xx}^{\text{min}}$	t^*
Without air	1.47x10 ⁴	0.0096	1.70x10 ⁷	0.1440	-1.46x10 ⁷	-0.0193	1.0
E = 1(Pa), $\nu = 0$	1.47x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1314	-1.47x10 ⁷	-0.0226	5.2
E = 10(Pa), $\nu = 0$	1.47x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1314	-1.47x10 ⁷	-0.0226	4.5
E = 100(Pa), $\nu = 0$	1.48x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1316	-1.47x10 ⁷	-0.0226	4.7
E = 1000(Pa), $\nu = 0$	1.48x10 ⁴	0.0096	1.69x10 ⁷	0.1331	-1.44x10 ⁷	-0.0227	4.7
E = 1(Pa), $\nu = 0.35$	1.47x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1314	-1.47x10 ⁷	-0.0226	4.8
E = 10(Pa), $\nu = 0.35$	1.47x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1314	-1.47x10 ⁷	-0.0226	4.7
E = 100(Pa), $\nu = 0.35$	1.47x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1316	-1.47x10 ⁷	-0.0226	4.6
E = 1000(Pa), $\nu = 0.35$	1.48x10 ⁴	0.0096	1.70x10 ⁷	0.1329	-1.45x10 ⁷	-0.0227	4.7
E = 1(Pa), $\nu = 0.49$	1.47x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1314	-1.47x10 ⁷	-0.0226	4.5
E = 10(Pa), $\nu = 0.49$	1.47x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1314	-1.47x10 ⁷	-0.0226	4.6
E = 100(Pa), $\nu = 0.49$	1.47x10 ⁴	0.0096	1.71x10 ⁷	0.1315	-1.47x10 ⁷	-0.0226	4.6
E = 1000(Pa), $\nu = 0.49$	1.48x10 ⁴	0.0096	1.70x10 ⁷	0.1327	-1.45x10 ⁷	-0.0227	4.6

Table 1. Comparing stress, strain and simulation time in resonators and substrate.

Although this consideration, now, solves the mismatch problem, this approach results in convergence issues depending on the mechanical properties assigned to the air layers and inevitably increases the computation time. For a better illustration, the dimensions (apart from the thicknesses of the substrate and resonators) are 5 times scaled up. We have done the same simulation for this new unit cell and the results are tabulated in Table 2.

	S_{xx}^{mean}	$\epsilon_{xx}^{\text{mean}}$	S_{xx}^{max}	$\epsilon_{xx}^{\text{max}}$	S_{xx}^{min}	$\epsilon_{xx}^{\text{min}}$	t^*
Without air	1.95x10 ⁴	0.0097	4.40x10 ⁷	0.2517	-3.18x10 ⁷	-0.0294	1.00
E = 1(Pa), $\nu = 0$	No convergence						
E = 10(Pa), $\nu = 0$	1.95x10 ⁴	0.0097	4.12x10 ⁷	0.2875	-3.17x10 ⁷	-0.0448	14.85
E = 100(Pa), $\nu = 0$	1.96x10 ⁴	0.0097	3.91x10 ⁷	0.2932	-2.94x10 ⁷	-0.0457	15.62
E = 1000(Pa), $\nu = 0$	2.00x10 ⁴	0.0097	2.76x10 ⁷	0.3054	-1.68x10 ⁷	-0.0478	15.00
E = 1(Pa), $\nu = 0.35$	No convergence						
E = 10(Pa), $\nu = 0.35$	1.95x10 ⁴	0.0097	4.12x10 ⁷	0.2873	-3.18x10 ⁷	-0.0448	14.69
E = 100(Pa), $\nu = 0.35$	1.96x10 ⁴	0.0097	3.93x10 ⁷	0.2928	-2.97x10 ⁷	-0.0456	14.08
E = 1000(Pa), $\nu = 0.35$	1.99x10 ⁴	0.0097	2.87x10 ⁷	0.3041	-1.80x10 ⁷	-0.0476	14.15
E = 1(Pa), $\nu = 0.49$	1.95x10 ⁴	0.0097	4.15x10 ⁷	0.2855	-3.21x10 ⁷	-0.0446	15.85
E = 10(Pa), $\nu = 0.49$	1.95x10 ⁴	0.0097	4.12x10 ⁷	0.2873	-3.18x10 ⁷	-0.0448	14.38
E = 100(Pa), $\nu = 0.49$	1.96x10 ⁴	0.0097	3.92x10 ⁷	0.2929	-2.96x10 ⁷	-0.0456	14.62
E = 1000(Pa), $\nu = 0.49$	1.99x10 ⁴	0.0097	2.82x10 ⁷	0.3034	-1.75x10 ⁷	-0.0477	14.08

Table 2. Comparing stress, strain and simulation time in resonators and substrate of the bigger unit cell.

Comparing the results presented in Table 1 and 2, by scaling dimensions, we observe that effect of including the air layers plays a more important role in the mechanical analysis. Regarding the results in Table 2, some comments are in order:

- It is shown that including the air layers in the mechanical analysis will inevitably increase the computational cost.
- We showed that the choice of the mechanical properties could affect the convergence of the analysis. It should be noted that by decreasing Young's modulus of the air layers, as a result of the high contrast between the Young's modulus of the air layers and unit cell components, convergence issues arise from the ill-conditioned matrices.
- Since the air layers, now, carry a portion of the defined average strain in cell periodicity option, we get a different average strain from the one that we assigned in the cell periodicity option. Consequently, the computed average strain in the unit cell (0.097) is different from that of the assigned one (0.01).
- Although the XX component of the average strain in the unit cell for all the cases are similar, the maximum and minimum strains are different. The reason is that the assigned mechanical properties to the air layers affect the needed displacement field, which should be applied to the unit cell boundaries to get the same average strain in the unit cell. Thus, the maximum and minimum of the strain is not the same for different cases.

In a different approach, one can try to solve the problem by including the air layers in a moving mesh physics. In this way, the air layers are included in deforming domain node under the moving mesh modulus. This option means that the shape of the air layers are governed by the

domain boundaries that are controlled by the deformation of the adjacent boundaries. In this case, the adjacent boundaries are the shared edges between the unit cell and air layers. This approach is challenging, as it results in a local stretch of the air layers that leads to errors in defining the periodic boundary conditions in the electromagnetic analysis. Therefore, we have also included the general extrusion option (Figure 4) to apply a more consistent mesh displacement for the air layers. In this method, we have deformed the external surfaces of the air layers in x and y directions same as the shared edges with the unit cell and scaled the deformation in z direction from its value in the shared edges to zero in the ports edges. Moreover, we have constrained the port surfaces using symmetry/roller option to make sure that they are kept planar. Furthermore, to apply the periodicity in the mechanical analysis, we used the linear extrusion option (Figure 5) and fixed one of the edge nodes of the substrate to rule out the rigid body motion.

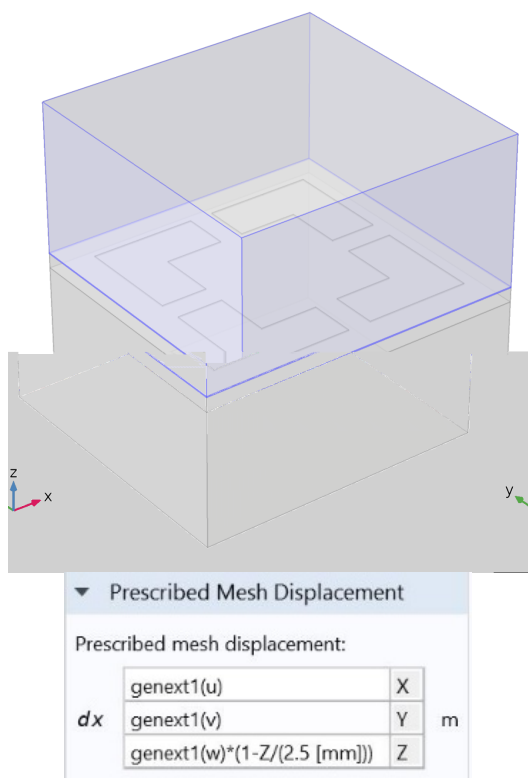


Figure 4. Applied general extrusion (Top surface of the substrate is $Z=0$).

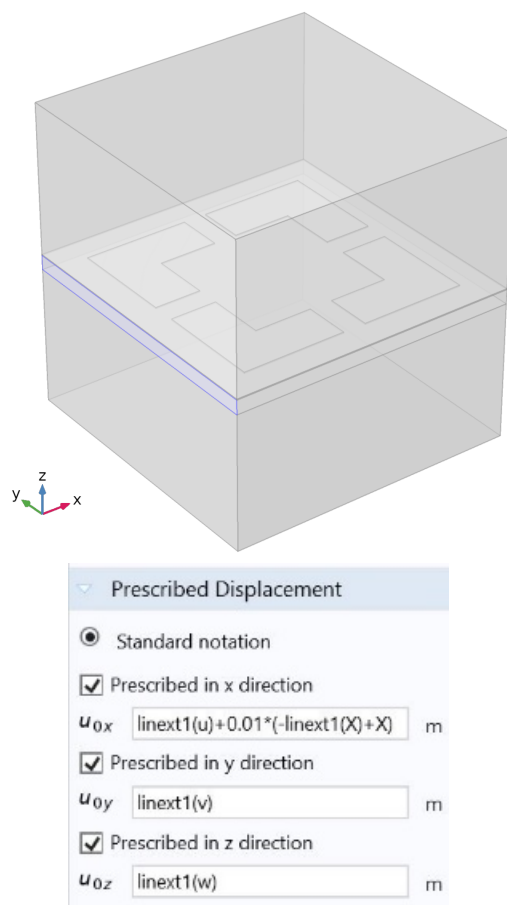


Figure 5. Applied linear extrusion.

Among the mentioned approaches, the last one is appropriate for this problem. Using this approach, the variations in the scattering parameter S21 of the deformed and undeformed unit cell are compared in Figure 7. It shows the results for various values of XX components of the average strain tensor in the unit cell. By increasing the applied deformation, the scattering parameter of the unit cell vary more.

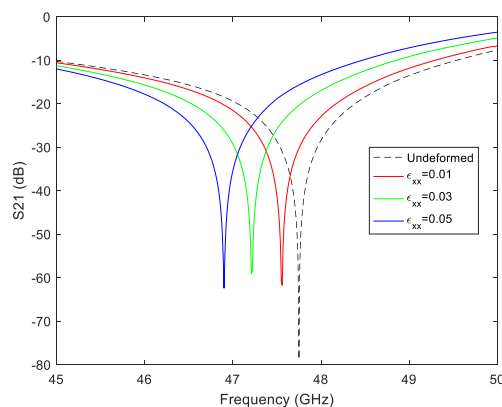


Figure 6. Comparing the scattering parameters of the deformed and undeformed unit cell.

5. Conclusions

Here, we presented the challenges one might face in modelling the deformable metasurface and we explored the available options in COMSOL Multiphysics®. We proposed an appropriate approach for modelling the unit cell in both mechanical and electromagnetic analyses, which is also a cost effective way.

6. References

1. Cui, T. J., Liu, S., & Zhang, L., Information metamaterials and metasurfaces. *Journal of Materials Chemistry C*, 5(15), 3644-3668 (2017).
2. Walia, S., Shah, C. M., Gutruf, P., Nili, H., Chowdhury, D. R., Withayachumnankul, W., Bhaskaran, M., & Sriram, S., Flexible metasurfaces and metamaterials: a review of materials and fabrication processes at micro-and nano-scales. *Applied Physics Reviews*, 2(1), 011303 (2015).
3. Melik, R., Unal, E., Kosku Perkgoz, N., Puttlitz, C., & Demir, H. V., Flexible metamaterials for wireless strain sensing. *Applied Physics Letters*, 95(18), 181105 (2009).
4. Melik, R., Unal, E., Perkgoz, N. K., Puttlitz, C., & Demir, H. V., Metamaterial-based wireless strain sensors. *Applied Physics Letters*, 95(1), 011106 (2009).
5. Arritt, B., Adomanis, B., Khraishi, T., & Smith, D., Parametric analysis of the strain-dependent behavior of a metamaterial electric resonator. *Applied Physics Letters*, 97(19), 191907 (2010).
6. Arritt, B. J., Smith, D. R., & Khraishi, T., Equivalent circuit analysis of metamaterial strain-dependent effective medium parameters. *Journal of Applied Physics*, 109(7), 073512 (2011).
7. Pryce, I. M., Aydin, K., Kelaita, Y. A., Briggs, R. M., & Atwater, H. A., Highly strained compliant optical metamaterials with large frequency tunability. *Nano letters*, 10(10), 4222-4227 (2010).
8. COMSOL Multiphysics® v. 5.4. www.comsol.com. COMSOL EPFL, Lausanne, Switzerland.
9. Smith, D. R., Vier, D. C., Koschny, T., & Soukoulis, C. M., Electromagnetic parameter retrieval from inhomogeneous metamaterials. *Physical review E*, 71(3), 036617 (2005).
10. Smith, D. R., & Pendry, J. B., Homogenization of metamaterials by field averaging. *JOSA B*, 23(3), 391-403 (2006).

7. Acknowledgments

R. K. M. would like to express special gratitude to Thierry Luthy from COMSOL support team in Zurich, Switzerland for providing useful help and guidance.

Comités

Comité Científico

- Ed Fontes. *COMSOL AB, Estocolmo, Suecia.*
- Emilio Ruiz Reina. *Universidad de Málaga, España (UMA).*
- Ricardo Torres Cámara. *Universidad Politécnica de Cataluña, España (UPC).*
- Juan Manuel Paz García. *Universidad de Málaga, España (UMA).*
- Benjamín Ivorra. *Universidad Complutense de Madrid, España (UCM).*
- José Manuel González Vida. *Universidad de Málaga, España (UMA).*

Comité Organizador

Emilio Ruiz Reina
Departamento de Física Aplicada II, Universidad de Málaga.
[+34] 95 195 22 91
eruizr@uma.es

Juan Antonio Rubio
Addlink Software Científico, S.L.
[+34] 93 415 49 04
jrubio@addlink.es

Antonio Molina Castellano
Addlink Software Científico, S.L.
[+34] 93 415 49 04
jrubio@addlink.es

Carlos David González Gómez
Departamento de Física Aplicada II, Universidad de Málaga
[+34] 660 68 53 78
cdgg@uma.es

Sesión de mañana	
9:00	Registro
9:15 – 9:30	Bienvenida e Introducción
9:30 – 10:30	El entorno de desarrollo de COMSOL Multiphysics Ed Fontes. <i>COMSOL AB, Suecia.</i>
10:30 – 11:45	Minicurso 1 Construcción y distribución de Aplicaciones. Métodos de Modelo. Alejandro Cifuentes López. <i>Addlink Software Científico, España.</i>
11:45 – 12:15	Descanso – Café
12:15 – 13:00	Presentaciones rápidas 1
13:00 – 13:30	Sesión de pósteres 1
13:30 – 15:00	Almuerzo

Sesión de tarde	
15:00 – 16:15	Minicurso 2 Prácticas recomendadas en modelado con COMSOL Multiphysics Ed Fontes. <i>COMSOL AB, Suecia.</i>
16:15 – 16:45	COMSOL Multiphysics en la Industria: La experiencia de Nanusens Josep Montanyà i Silvestre. <i>Nanusens, España.</i>
16:45 – 17:30	Presentaciones rápidas 2
17:30 – 18:00	Sesión de pósteres 2 - Café
18:00 – 19:15	Minicurso 3 Interfaz COMSOL Multiphysics – MATLAB para la resolución de problemas de carácter industrial. María Crespo Moya. <i>Universidad Politécnica de Madrid, España.</i>
19:15 – 19:30	Presentación del Máster de Simulación Numérica en Ciencia e Ingeniería con COMSOL Multiphysics
19:30	Clausura de la conferencia
21:00	Cóctel-cena de la conferencia