

Politecnico di Milano

Facoltà di Ingegneria Industriale

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Aeronautica



Miscelamento in microcanali: miglioramento dell'efficienza con il metodo delle equazioni aggiunte

Relatore: Prof. Maurizio Quadrio

Correlatore: Ing. Samuele Zampini

Tesi di laurea di:

Domenico Sgrò

Matr. 766120

Anno Accademico 2012 - 2013

Indice

Sommario	1
Abstract	2
Introduzione	4
1 Stato dell'arte	9
1.1 Perché microcanali?	9
1.1.1 Quantificazione del mescolamento	13
1.2 Dispositivi esistenti	15
1.2.1 Correlazione tra i dispositivi esistenti	15
1.3 Regimi di moto del T-mixer	18
1.4 Tecniche sperimentali	22
1.5 Tecniche numeriche	22
2 La corrente nel T-mixer	25
2.1 Geometria	25
2.2 Soluzione numerica	27
2.2.1 Discretizzazione a volumi finiti	27
2.2.2 Generazione della mesh	29
2.2.3 Condizioni al contorno	31
2.2.4 Criteri di convergenza	33
2.3 Regimi di moto	35
2.3.1 $Re = 100$	37
2.3.2 $Re = 144$	38
2.3.3 $Re = 480$	44
3 Equazioni aggiunte	49
3.1 Impostazione del problema	49
3.2 Derivazione delle equazioni aggiunte	51
3.3 Specializzazione per flussi interni	53

3.3.1	Inlet e parete	54
3.3.2	Outlet	54
3.3.3	Riassumendo	55
3.4	Sensitività superficiale	56
3.5	Solutore	58
4	Risultati	61
4.1	Scelta della funzione costo	61
4.1.1	Derivazione delle condizioni al contorno	62
4.1.2	Aspetti numerici	62
4.2	Sensitività superficiale	63
4.2.1	$Re = 100$	64
4.2.2	$Re = 144$	66
4.3	Campi di moto nel dominio modificato	66
4.3.1	$Re = 100$	67
4.3.2	$Re = 144$	72
4.4	Discussione	76
	Conclusioni	83
A	$Re = 527$	85

Elenco delle figure

1	Numero di pubblicazioni presenti all'interno del database Scopus contenenti nel titolo i termini <i>microchannel</i> , <i>micromixer</i> o <i>microreactor</i>	6
2	Generico canale a T.	7
1.1	Alcune tipologie di microcanali passivi tratti da [26]. (a) struttura a Tesla; (b) forma a C; (c) forma ad L; (e) a spirale.	16
1.2	Alcune tipologie di microcanali attivi tratti da [26]. (a) ad alimentazione alternata; (b) a disturbi di pressione; (c) ad agitatore integrato; (e) a disturbo elettroidrodinamico.	16
1.3	Andamento del tempo di mescolamento rispetto alla potenza specifica consumata per vari dispositivi documentati in letteratura.	19
1.4	Visualizzazione dei tre regimi di moto stazionari attraverso linee di corrente tratta da [32].	20
2.1	Microcanale studiato.	26
2.2	Dominio geometrico del tratto di canale utilizzato per ottenere il profilo laminare completamente sviluppato.	32
2.3	Evoluzione temporale del profilo di velocità [m/s]; (a) $t = 0\text{ ms}$; (b) $t = 0.3\text{ ms}$; (c) $t = 0.6\text{ ms}$; (d) $t = 0.9\text{ ms}$; (e) $t = 20\text{ ms}$; (f) $t = 50\text{ ms}$	34
2.4	Grado di mescolamento alla sezione di uscita, δ_m , in funzione del numero di Reynolds per il microcanale studiato da Galletti et al. in [13].	36
2.5	Campo di pressione, p , all'interno del microcanale per $Re = 100$, [Pa].	37
2.6	Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale per $Re = 100$	38
2.7	Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale per $Re = 100$	38

2.8	Campo di concentrazione dello scalare passivo per $Re = 100$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$	39
2.9	Andamento del grado di mescolamento con l'ascissa del canale di mescolamento per $Re = 100$. Nell'ultimo tratto del canale, tra $x = 3050 \mu m$ e $x = 3150 \mu m$, il valore di δ calcolato decresce; l'errore è imputabile all'influenza delle condizioni al contorno che si sono poste su Γ_{out}	40
2.10	Campo di pressione, p , per $Re = 144$, [Pa].	40
2.11	Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale per $Re = 144$	41
2.12	Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale per $Re = 144$	41
2.13	Campo di concentrazione dello scalare passivo per $Re = 144$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$	42
2.14	Andamento del grado di mescolamento δ con l'ascissa del canale di uscita per $Re = 144$. Nell'ultimo tratto del canale, tra $x = 3050 \mu m$ e $x = 3150 \mu m$, il valore di δ calcolato decresce; l'errore è imputabile all'influenza delle condizioni al contorno che si sono poste su Γ_{out}	43
2.15	Modulo della velocità sulla sezione di uscita per $Re = 480$, [m/s]; (a) $t = 1.5 ms$; (b) $t = 2 ms$; (c) $t = 2.5 ms$; (d) $t = 3 ms$; (e) $t = 3.5 ms$; (f) $t = 4 ms$	45
2.16	Modulo della proiezione della velocità sulla sezione di uscita per $Re = 480$, [m/s]; (a) $t = 1.5 ms$; (b) $t = 2 ms$; (c) $t = 2.5 ms$; (d) $t = 3 ms$; (e) $t = 3.5 ms$; (f) $t = 4 ms$	46
2.17	Vista, allineata al canale di mescolamento, di alcune linee di corrente del campo di moto per $Re = 480$; (a) $t = 1.5 ms$; (b) $t = 2 ms$; (c) $t = 2.5 ms$; (d) $t = 3 ms$; (e) $t = 3.5 ms$; (f) $t = 4 ms$	47
2.18	Vista di alcune linee di corrente del campo di moto per $Re = 480$; (a) $t = 2.5 ms$; (b) $t = 3 ms$; (c) $t = 3.5 ms$; (d) $t = 4 ms$	48
4.1	Valore di $\partial J / \partial \beta$ per i punti della parete del canale avente normale discorde all'asse x , [$m^4 s^{-3}$].	64
4.2	Parete del canale avente normale discorde all'asse x deformata; nell'ingrandimento si mostra una defomazione con la medesima forma, ma tripla negli spostamenti dei singoli punti, al fine di renderla più facilmente apprezzabile.	65

4.3	Confronto tra il valore di sensitività, $[m^4s^{-3}]$, (a), e lo spostamento dei nodi di griglia rispetto alla condizione indeformata, $[\mu m]$, (b).	66
4.4	Valore di $\partial J/\partial\beta$ per i punti della parete del canale avente normale discorde all'asse x a $Re = 144$, $[m^4s^{-3}]$	67
4.5	Campo di pressione, p , all'interno della geometria deformata per $Re = 100$, $[Pa]$	67
4.6	Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale modificato per $Re = 100$	68
4.7	Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale modificato per $Re = 100$	68
4.8	Modulo del vettore velocità giacente nella sezione di efflusso per $Re = 100$, $[m/s]$	69
4.9	Campo di concentrazione, c , dello scalare passivo nel canale modificato per $Re = 100$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$	70
4.10	Confronto tra il livello di mescolamento, δ , nel canale di efflusso per le geometria di riferimento e deformata a $Re = 100$	71
4.11	Confronto tra le dimensioni del canale in geometria di riferimento e il canale ottimizzato che produce in uscita lo stesso grado di mescolamento in corrispondenza di $x = 205 \mu m$	72
4.12	Campo di pressione, p , all'interno della geometria deformata per $Re = 144$, $[Pa]$	73
4.13	Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale modificato per $Re = 144$	73
4.14	Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale modificato per $Re = 144$	73
4.15	Modulo del vettore velocità giacente nella sezione di efflusso per $Re = 144$	74
4.16	Campo di concentrazione, c , dello scalare passivo nel canale modificato per $Re = 144$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$	75
4.17	Confronto tra il livello di mescolamento, δ , nel canale di efflusso per le geometria di riferimento e doformata a $Re = 144$	76
4.18	Microcanale con deformazione casuale, ma di dimensioni confrontabili con le deformazioni imposte sull'analisi della sensitività. Nell'ingrandimento si mostra una sezione normale all'asse z della regione contornata.	77

4.19	Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale con modifica casuale per $Re = 144$	78
4.20	Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale con modifica casuale per $Re = 144$	78
4.21	Modulo del vettore velocità giacente nella sezione di efflusso per $Re = 144$, [m/s].	79
4.22	Campo di concentrazione, c , dello scalare passivo nel canale con modifica a gradino per $Re = 144$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$	80
4.23	Modulo del vettore velocità giacente nella sezione di efflusso per $Re = 144$	81
A.1	Andamento iniziale dei residui per $Re = 527$	86
A.2	Andamento dei residui per $Re = 527$	86
A.3	Campo di concentrazione dello scalare passivo per $Re = 527$ nella geometria di riferimento, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 650 \mu m$; (c) $x = 1150 \mu m$; (d) $x = 1650 \mu m$; (e) $x = 2150 \mu m$; (f) $x = 2650 \mu m$	87
A.4	Campo di sensitività superficiale sulla parete avente normale discorde all'asse x per il microcanale a $Re = 527$	88
A.5	Linee di corrente per il microcanale a $Re = 527$; (a) geometria standard; (b) geometria modificata.	88
A.6	Campo di concentrazione dello scalare passivo per $Re = 527$ nella geometria modificata, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 650 \mu m$; (c) $x = 1150 \mu m$; (d) $x = 1650 \mu m$; (e) $x = 2150 \mu m$; (f) $x = 2650 \mu m$	89
A.7	Confronto tra i campi di concentrazione sulla superficie di uscita nella geometria di riferimento ed in quella modificata a $Re = 527$	90
A.8	Confronto tra l'andamento del grado di mescolamento nella geometria di riferimento ed in quella modificata a $Re = 527$	90

Sommario

Questo lavoro descrive lo sviluppo e l'utilizzo di uno strumento di ottimizzazione di forma in contesti fluidodinamici che è basato sulla soluzione numerica delle *equazioni aggiunte*. Il nostro obiettivo è condurre l'analisi e l'ottimizzazione usando esclusivamente software *open-source* a volumi finiti orientato ad applicazioni industriali: benché questo primo passo della ricerca riguardi un problema geometricamente semplice, il metodo è pensato per essere in grado di descrivere geometrie complesse.

È stato scelto un problema di ottimizzazione all'interno del moderno campo di ricerca della microfluidica: come aumentare l'efficienza al mescolamento di un microcanale a T. Innanzitutto vengono descritti i principi di funzionamento del T-mixer e sono condotte simulazioni del campo di moto, ricavandone indicatori delle prestazioni. Confermiamo i risultati disponibili in letteratura, e aggiungiamo al dibattito in corso un quesito: se il campo di moto a valori sufficientemente alti del numero di Reynolds presenti o meno un comportamento instazionario non periodico. Successivamente, il problema di ottimizzazione è posto in termini di massimizzazione del mescolamento nel dispositivo attraverso cambiamenti minimi della geometria nominale. A questo fine è stata definita un'opportuna funzione costo, e vengono derivate ed implementate le corrispondenti condizioni al contorno per le equazioni aggiunte. È stata calcolata la sensitività di questa funzione costo rispetto a deformazioni della geometria ed è stata usata per ottenere un microcanale a T migliorato. Il nuovo dispositivo produce prestazioni estremamente buone: a parità di lunghezza del condotto di efflusso otteniamo un livello di mescolamento cinque volte superiore rispetto alla geometria nominale, mentre un pari livello di mescolamento è ottenuto con una riduzione del 99.5% della lunghezza del canale stesso.

Abstract

This work describes the development and use of a shape optimization tool in fluid dynamics that is based on the numerical solution of the *adjoint equations*. Our goal is to carry out the analysis and optimization by using industry-oriented, finite-volumes-based open-source software only: although this first step of the research concerns a geometrically simple problem, describing complex geometries is deemed as a necessary capability of the method.

An optimization problem is chosen within the modern research field of microfluidics: how to increase the mixing efficiency of a T-shaped microchannel. First the operating principles of the T-mixer are described and calculations of the flow field and performance indicators are carried out. We confirm available literature results, and add to the ongoing debate on whether or not the flow field at high enough values of the Reynolds number presents an unsteady, non-periodic behaviour. Next, the optimization problem is set up as one of maximizing the mixing in the device via minimal changes to the nominal geometry. To this purpose a suitable cost function is defined, and the corresponding boundary conditions for the adjoint equations are derived and implemented. The surface sensitivity of this cost function with respect to geometry deformations is computed and used to obtain an improved T-microchannel. The new device yields extremely good performances: with the same length of the outlet channel we obtain a degree of mixing five times higher than the one calculated in the nominal geometry, while an equal degree of mixing is obtained with a reduction of the 99.5 % of the length of the channel.

Introduzione

Questo lavoro si propone di valutare l'efficacia di un metodo di ottimizzazione di forma che ha cominciato a diffondersi in anni recenti e che si basa sulle cosiddette *equazioni aggiunte*. Più in particolare, il contesto fenomenologico in cui tale approccio verrà testato è rappresentato da una branca della scienza che si trova a confine tra discipline diverse, come l'ingegneria, la chimica e la microbiologia, e che prende il nome di *microfluidica*.

Con questo termine si indica lo studio di correnti fluide in condotti di dimensioni caratteristiche comprese tra i 10^{-3} ed i $10^{-6}m$, ossia nell'ordine del millimetro o di sue frazioni. In dispositivi di questo tipo, in cui i volumi di fluido tipicamente sono compresi tra i nano- ed i micro-litri ($10^{-6} \div 10^{-9}$ l), divengono rilevanti fenomeni solitamente secondari alle scale ordinarie.

In anni recenti l'interesse per questa branca della fluidodinamica è molto cresciuto, soprattutto per il grande numero di potenziali applicazioni. Esse sono sia industriali, ad esempio l'industria farmaceutica (per la produzione di dispositivi diagnostici mini-invasivi o di medicinali) o l'industria chimica di base, sia di carattere scientifico, come ad esempio i sistemi di analisi microbiologica. In generale, ricorrono ai dispositivi microfluidici, che prendono spesso anche il nome di *microcanali*, *microreattori* o *micromixer*, tutte le branche della ricerca e dell'industria che si basano sul concetto di *lab-on-a-chip*. Come riportato da Kim e Stone in [35], già nel 2000 il giro di affari attorno ad essi ammontava a 200 milioni di dollari e a conferma della ricerca che oggi viene condotta sull'argomento, la figura 1 riporta il numero rapidamente crescente di pubblicazioni scientifiche riguardanti i microcanali nel corso degli ultimi anni.

Sebbene per scopi diversi – come diversi sono i campi d'impiego di tali dispositivi – i microcanali sono sempre utilizzati per miscelare efficacemente, in termini energetici, di ingombro o temporali, liquidi o soluzioni liquide differenti, spesso reagenti tra loro. La capacità di mescolamento di tali oggetti ne rappresenta uno dei parametri di merito più importanti e costituisce altresì la ragione che ha spinto numerosi studiosi a considerare, nel corso degli anni, geometrie varie e anche assai complesse.

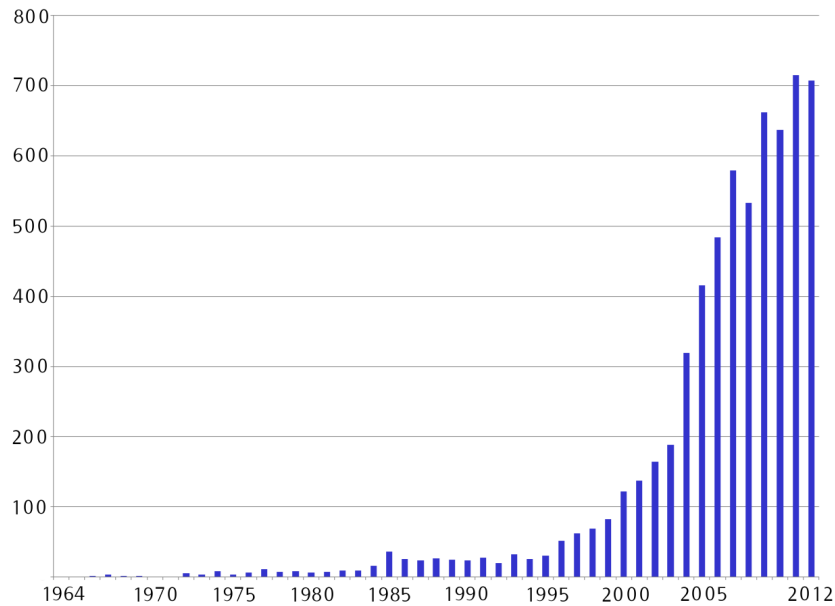


Figura 1: Numero di pubblicazioni presenti all'interno del database Scopus contenenti nel titolo i termini *microchannel*, *micromixer* o *microreactor*.

T-mixer

Tra le numerose geometrie di microcanali, una di esse ha trovato particolare riscontro: il cosiddetto *T-mixer*. Come è possibile osservare in figura 2, questo tipo di dispositivi è formato da due canali di ingresso, uguali tra loro e di sezione quadrata o rettangolare di lati H e W e lunghezza L_{in} , che convergono in un unico canale di efflusso, di lati H e W' e lunghezza L_{out} , assumendo così una caratteristica forma a T. La regione che si trova all'intersezione di questi tre bracci prende il nome di *zona di mescolamento*, poiché vi ha sede il primo contatto tra le due correnti fluide. Le ragioni del successo di questa categoria di microcanali sono varie, prima tra tutte la capacità di unire efficacia e semplicità geometrica, che ne consente una veloce e relativamente economica prototipizzazione. Inoltre, tale semplice geometria viene sovente a far parte di sistemi più complessi come elemento di raccordo tra elementi diversi. Per queste ragioni il T-mixer è stato oggetto di analisi, sia numerica che sperimentale, particolarmente attenta e costituisce per altri studi un ideale caso di riferimento.

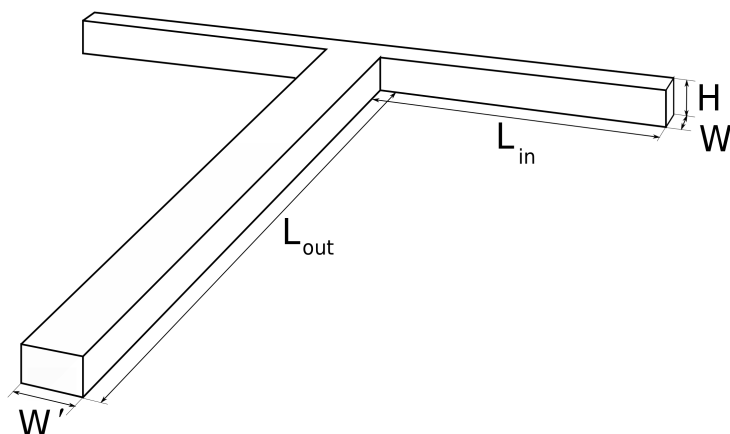


Figura 2: Generico canale a T.

Obiettivi e procedura

Con lo scopo di ottenere un mescolamento sempre migliore, nel corso degli anni sono state proposte moltissime geometrie differenti, derivanti usualmente da intuizioni e considerazioni fisiche basate sull'analisi dei dispositivi preesistenti. L'obiettivo di questo lavoro è quello di affrontare il problema da un diverso ed innovativo punto di vista. Anziché produrre una nuova geometria di micromixer basata su ragionamenti fenomenologici, si vuole applicare a questo problema il cosiddetto *metodo aggiunto*. Come si avrà modo di approfondire in seguito, dato un certo problema fluidodinamico, tale metodo permette di minimizzare una funzione costo definita arbitrariamente sulle variabili del campo di moto e di una variabile di progetto. Il procedimento conduce alla scrittura di un sistema di equazioni, dette appunto *aggiunte* e duali alle equazioni di Navier–Stokes, che descrivono il moto del fluido. La soluzione di tali equazioni, corredate dalle opportune condizioni al contorno, permette di ottenere la sensitività della funzione costo rispetto ad una variazione della variabile di progetto. La sensitività quindi può guidare il progettista al miglioramento del dispositivo.

Questo lavoro si articola in ulteriori quattro capitoli. Nel primo verrà brevemente discusso lo stato dell'arte riguardante i microcanali. Il secondo capitolo entrerà nel merito di un particolare canale a T, del quale verranno risolti e descritti il campo di moto ed il campo di uno scalare passivo. Nel Capitolo 3 verranno ricavate le equazioni aggiunte, le appropriate condizioni

al contorno e si illustrerà più chiaramente il concetto di sensitività. Proseguendo, nel Capitolo 4 la soluzione del problema aggiunto verrà sfruttata per progettare un micromixer migliorato, le cui prestazioni verranno successivamente discusse. In ultimo, un capitolo conclusivo trarrà le somme del lavoro svolto, effettuerà un confronto tra i risultati ottenuti e quelli noti in precedenza e descriverà la via per ulteriori sviluppi.

Capitolo 1

Stato dell'arte

1.1 Perché microcanali?

È utile cominciare con una domanda:

Cosa succede di diverso alle microscale rispetto alle scale ordinarie?

La risposta a tale quesito prende le mosse da una giustificazione di tipo metodologico. Date le dimensioni fisiche dei dispositivi microfluidici, è lecito dubitare della validità dell'ipotesi del continuo, sulla quale si regge la possibilità di descrivere le leggi del moto attraverso relazioni di tipo differenziale. Come è noto, l'ipotesi del continuo comporta la definizione di un numero adimensionale, il numero di Knudsen, Kn :

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.1)$$

in cui λ indica il libero cammino medio delle molecole del fluido ed L è una dimensione caratteristica del problema in esame, che nel caso di flussi interni è solitamente il diametro idraulico, indicato nel seguito con D_h . Per un condotto di sezione A e perimetro p , esso viene definito come:

$$D_h = \frac{4A}{p}. \quad (1.2)$$

Solitamente, in questo tipo di problemi $D_h = \mathcal{O}(10^{-4})m$ e il libero cammino medio dell'acqua, tipico fluido di lavoro, è circa $\lambda_{acqua} = 1 \times 10^{-10}m$. Concludendo, risulta che:

$$Kn = \frac{1 \times 10^{-10}}{10^{-4}} = \mathcal{O}(10^{-6}). \quad (1.3)$$

È noto invece [2] che scostamenti apprezzabili dalla teoria newtoniana sussistono per $Kn > 0.001$. Pertanto anche alle microscale è possibile ritenere soddisfatta l'ipotesi del continuo: le equazioni che descrivono il moto sono le equazioni di Navier–Stokes.

Nonostante questo i problemi microfluidici presentano alcune peculiarità. Per comprenderne l'origine ripercorriamo qui il ragionamento seguito da Bothe, Stemich e Warnecke in [4] e [5], e discusso da altri autori [15, 14, 12, 16, 20, 21, 23, 25]. Le equazioni di Navier–Stokes in forma adimensionale per flussi incomprimibili sono:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v} = -\nabla p \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \end{cases} \quad (1.4)$$

in cui \mathbf{v} e p indicano la velocità e la pressione adimensionali, mentre il numero di Reynolds, Re , è definito come:

$$Re = \frac{V_m D_h}{\nu}, \quad (1.5)$$

ed è costruito con la viscosità cinematica del fluido, ν , e con una velocità caratteristica, in questo caso la velocità media nel canale V_m in una sua sezione di area A e definita da:

$$V_m = \frac{1}{A} \int_A \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Omega. \quad (1.6)$$

Osservando questo sistema di equazioni non appare evidente la peculiarità dei sistemi microfluidici. Per due problemi geometricamente in scala tra loro, infatti, mantenuto costante Re , è uguale la soluzione in termini adimensionali e non è apprezzabile alcun effetto legato puramente alle dimensioni fisiche del canale, siano esse micrometriche o meno.

I micromixer vengono usualmente utilizzati per miscelare tra loro, nel minor tempo possibile, liquidi inizialmente separati. Per modellare tale fenomeno si ricorre all'equazione dello scalare passivo, nella quale si modellano il trasporto, la diffusione e la reazione di un campo di concentrazione c . Per sistemi chimicamente reattivi, tuttavia, l'equazione dello scalare passivo deve esser completata da un ulteriore termine, detto di reazione. Le reazioni chimiche la cui velocità dipende solo da una costante cinetica, indicata con k , e dalla concentrazione di un reagente si dicono di primo ordine, quelle la cui velocità dipende dalla costante cinetica e dal quadrato della concentrazione di un reagente, o dal prodotto delle concentrazioni di due reagenti si dicono

del secondo ordine e così via. Nel caso particolare di reazione di primo ordine si deve scrivere, sempre in forma adimensionale:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \frac{1}{Re Sc} \nabla^2 c - Da c, \quad (1.7)$$

ove Sc è il numero di Schmidt, definito come:

$$Sc = \frac{\nu}{D}, \quad (1.8)$$

D indica il coefficiente di diffusività molecolare della sostanza e Da è:

$$Da = \frac{kD_h}{V_m}. \quad (1.9)$$

In questa espressione compare un nuovo parametro adimensionale, il numero di Damköhler Da , che in una reazione chimica rappresenta il rapporto tra la velocità massima di reazione e la velocità convettiva del fluido reagente. Per via del numero di Damköhler non è possibile ottenere la similarità idrodinamica e quella chimica contemporaneamente. Ciò è dovuto al fatto che il numero di Reynolds dipende dal prodotto $V_m l$, mentre il coefficiente Da è funzione del rapporto l/V_m . Fissato D_h/l , ossia fissato il rapporto di forma del canale, non tutti e tre i numeri adimensionali possono essere mantenuti costanti. Per quantificare l'effetto dimensionale, si pensi a due problemi in scala geometrica tra loro. Indicando con l'apice le grandezze caratteristiche di un sistema microfluidico e senza apice quelle di un sistema di scala ordinaria, si introduce quindi il fattore di scala geometrico ϱ , tale che valgano:

$$l' = \varrho l, \quad D_h' = \varrho D_h. \quad (1.10)$$

Per ottenere lo stesso campo di moto occorre imporre $Re' = Re$, condizione dalla quali si ricava $V_m' = V_m/\varrho$. A questo punto, fissate le geometrie (e quindi fissato D_h/l), e fissate le velocità V_m e V_m' , si osserva che i tre parametri adimensionali che governano l'equazione risultano:

$$Re' = Re, \quad Sc' = Sc, \quad Da' = \varrho^2 Da. \quad (1.11)$$

Queste considerazioni fisiche dimostrano che il fattore geometrico ϱ scala (al quadrato) unicamente il peso del termine di reazione. In particolare, considerando Re e Sc fissati, se $\varrho \ll 1$, ossia se si passa dalle scale ordinarie alle micro-scale, esso viene molto ridotto. Questo fenomeno è dovuto al cambiamento delle scale temporali della convezione, del trasporto e della reazione. Tali tempi caratteristici sono dati, rispettivamente, da:

$$\tau_C = \frac{l}{V_m}, \quad \tau_T = \frac{D_h^2}{D}, \quad \tau_R = \frac{1}{k}. \quad (1.12)$$

Con la stessa procedura utilizzata in precedenza e mantenendo il significato di λ , questi tre tempi scalano come:

$$\tau'_C = \lambda^2 \tau_C, \quad \tau'_T = \varrho^2 \tau_T, \quad \tau'_R = \tau_R. \quad (1.13)$$

Evidentemente quindi, la scala temporale del termine di reazione non varia con una riduzione geometrica del problema, ma diminuiscono con ϱ^2 i tempi caratteristici di trasporto e diffusione. Per questa ragione, reazioni chimiche troppo veloci per essere condotte in dispositivi ordinari diventano realizzabili nei microcanali, per questo motivo vengono chiamati anche microreattori o micromixer.

Allo scopo di familiarizzare con questa classe di problemi, con i tempi caratteristici che li governano e con le dimensioni tipiche alle quali avvengono, si prosegue ora con ulteriori ragionamenti dimensionali. In primo luogo si definisca un nuovo parametro adimensionale, il numero di Péclet, Pe , che quantifica il rapporto tra i tempi caratteristici della diffusione e quelli del trasporto convettivo:

$$Pe = \frac{V_m D_h}{D}. \quad (1.14)$$

Siccome il coefficiente di diffusività molecolare varia solitamente da $10^{-9} m^2/s$, per molecole molto piccole, a $10^{-11} m^2/s$ per le molecole di più grandi dimensioni (ad esempio l'emoglobina in acqua ha $D = 0.7 \times 10^{-11} m^2/s$) e poiché in flussi tipici $D_h = \mathcal{O}(10^{-4}) m$ e $V_m = \mathcal{O}(1) m/s$, il valore di Pe varia tra 10^5 e 10^7 , indicando che la convezione è molto più rapida della diffusione. Per questa ragione, nonostante le ridotte dimensioni del problema, non si può contare sulla sola diffusione per ottenere mescolamento in un ragionevole lasso di tempo. Sia ora s_0 la scala iniziale di lunghezza della segregazione dello scalare disciolto, mentre sia $s(t)$ la stessa grandezza dopo un lasso di tempo Δt . All'inizio del canale s avrà dimensioni paragonabili al diametro idraulico del condotto, ossia:

$$s_0 \sim D_h = \mathcal{O}(10^{-4}) m. \quad (1.15)$$

La scala temporale impiegata dalla sola diffusione per omogeneizzare il flusso su una distanza pari al diametro idraulico risulterà essere:

$$t \sim \frac{s^2}{D} \sim \frac{D_h^2}{D} = 10 s \div 16 min \quad (1.16)$$

in funzione del coefficiente di diffusività molecolare, in ogni caso enormemente troppo grande per ottenere un mescolamento efficiente nei comuni micromixer. Difatti, per due flussi miscibili che scorrono l'uno di fianco all'altro, occorrerebbe una lunghezza di mescolamento $L \sim V_m t$, che varia tra i 10 ed i 1000 m .

Se si chiede invece che il tempo caratteristico della diffusione sia nell'ordine di $10^{-2} \tau_R$, affinché la reazione non sia rallentata dalla diffusione stessa, dalle relazioni precedenti si deduce allora che la scala s della segregazione deve divenire:

$$s = 0.1 \sqrt[2]{D\tau_R}. \quad (1.17)$$

Con valori tipici di τ_R di 1 ms questo conduce a

$$s \simeq 10^{-8} \div 10^{-7} \text{ m} \quad (1.18)$$

e quindi si deve chiedere che:

$$\frac{s}{s_0} = 10^{-4} \div 10^{-3}. \quad (1.19)$$

Appare evidente, dunque, come la necessità di elevata risoluzione temporale richiesta dalle applicazioni porti spontaneamente verso l'utilizzo dei microcanali.

1.1.1 Quantificazione del mescolamento

Una delle caratteristiche più apprezzate dei microcanali è la capacità di miscelare efficacemente due fluidi. Occorre definire dei parametri da considerare come cifra di merito per questa proprietà, e che consentano di paragonare dispositivi diversi. Tra le varie definizioni proposte in letteratura, si sceglie qui quella proposta da Galletti et al. in [13]. Sia quindi A l'area di una sezione trasversale del canale, sia c la concentrazione del soluto e sia v_n il modulo della componente della velocità normale alla sezione. Si definisce *scarto quadratico medio pesato* della concentrazione la quantità:

$$\overline{(\Delta c)^2} = \frac{\langle (c - \bar{c})^2 v_n \rangle}{\langle v_n \rangle}, \quad (1.20)$$

in cui il termine \bar{c} che vi compare è così definito:

$$\bar{c} = \frac{\langle cv_n \rangle}{\langle v_n \rangle} \quad (1.21)$$

e dove il simbolo $\langle \cdot \rangle$ indica l'operatore integrale:

$$\langle \cdot \rangle = \frac{1}{A} \int_A \cdot \, dA. \quad (1.22)$$

L'aggettivo *pesato*, associato allo scarto quadratico medio, si riferisce alla pesatura che v_n compie sul valore di c , che contribuisce maggiormente a

$\overline{(\Delta c)^2}$ nelle regioni della sezione in cui la velocità del flusso è maggiore. Si definisce ora lo *scarto quadratico medio normalizzato* σ_{cm}^2 come:

$$\sigma_{cm}^2 = \frac{\overline{(\Delta c)^2}}{(\Delta c)_{max}^2}. \quad (1.23)$$

Chiaramente, lo scarto quadratico medio massimo si ottiene quando i due flussi sono completamente non miscelati. Se si ipotizza che i flussi siano immessi con pari portata ed abbiano, rispettivamente, $c = 0$ e $c = 1$, allora lo scarto quadratico medio massimo sarà:

$$\overline{(\Delta c)^2}_{max} = \frac{1}{4}. \quad (1.24)$$

Per questioni di chiarezza ed immediatezza di lettura, si è soliti traslare tale parametro, definendo in ultimo il *grado di mescolamento* δ come:

$$\delta = 1 - \sigma_{cm}, \quad (1.25)$$

che ha valori compresi tra 0, quando i due flussi sono completamente segregati, ed 1, caso in cui si ha mescolamento completo.

Come suggerito da Bothe, Stemich e Warnecke in [5], un'analisi quantitativa del mescolamento, oltre a prendere in considerazione lo scostamento della concentrazione dal suo valore medio, ossia il grado di mixing δ , deve comprendere anche una misura della scala della segregazione dello scalare passivo, ossia la lunghezza caratteristica su cui operano i gradienti di concentrazione. Per fare ciò sono chiaramente necessarie informazioni sulla struttura del campo di concentrazione. Si indichi con s , come fatto in precedenza, lo spessore delle striature del campo di concentrazione. Si definisce la quantità Φ :

$$\Phi(A) = \frac{1}{A} \int_A \|\nabla f\| dA \quad \text{in cui} \quad f = \frac{c}{c_{max}}. \quad (1.26)$$

Il reciproco di Φ ha le dimensioni di una lunghezza e può essere interpretato come la distanza media tra regioni ad alta e bassa concentrazione:

$$s = \Phi^{-1}. \quad (1.27)$$

L'osservazione di s ha una duplice valenza. Innanzitutto il suo valore può essere preso come indicatore del grado di mescolamento al pari di δ . Infatti, siccome la distribuzione dello scalare è lontana dall'essere statisticamente omogenea, la scala integrale di lunghezza è molto più importante della scala più piccola in quanto l'efficacia di una reazione chimica può essere del tutto indifferente alle scale di lunghezza minori, dal momento che queste sono

presenti in piccole regioni della sezione, mentre può mostrare una forte dipendenza dalla scala integrale. Inoltre Φ può certamente un metro di giudizio per capire se tutte le scale dimensionali rilevanti sono risolte dalla discretizzazione numerica. Gli stessi autori hanno compiuto osservazioni sull'andamento di s a vari numeri di Reynolds e su diversi canali. Essi hanno riscontrato che, dato un valore di Re , l'andamento di Φ con il numero di Schmidt risulta lineare in scala logaritmica, valendo una relazione del tipo:

$$\Phi = a_0 + a_1 \log(Sc) , \quad (1.28)$$

in cui a_0, a_1 sono funzioni di Re . Nell'ottica di una soluzione numerica del problema, ad esempio attraverso un metodo a volumi finiti, se si assume che il numero di celle della griglia di calcolo sia legato alla risoluzione di Φ , ossia se $n \sim \Phi$, allora $n \sim \log(Sc)$. Per dare un confronto, nel caso di trasporto turbolento (sotto le ipotesi di turbolenza omogenea ed isotropa) a Reynolds fissato il numero di gradi di libertà cresce con $Sc^{3/2}$.

1.2 Dispositivi esistenti

Nella classificazione dei microcanali si percorre usualmente la strada adottata per primi da Nguyen e Wu [26] e che si basa sulla distinzione dei dispositivi in funzione del principio di mescolamento che utilizzano. In generale, infatti, i micromixer possono essere raggruppati in due categorie: passivi ed attivi. I primi sono così chiamati perché non richiedono fonti di energia esterne oltre a quella di alimentazione del flusso ed in essi il mescolamento si basa unicamente sui meccanismi di diffusione e convezione naturali. I dispositivi attivi richiedono invece un'azione esterna, che può essere di vario tipo. Tra questi si possono annoverare disturbi di pressione, di temperatura, elettrodrodinamici, dielettroforetici, elettrocinetici, magnetoidrodinamici ed acustici. Tuttavia, oltre a richiedere una fonte di energia ulteriore, la struttura dei dispositivi attivi risulta più complessa e spesso richiede articolati processi di produzione. Di contro, i micromixer passivi possono vantare una maggiore robustezza, affidabilità e stabilità, risultando inoltre più facilmente integrabili in sistemi complessi. Per queste ragioni i secondi vengono preferiti ai primi. Nelle figure 1.2 e 1.2 sono mostrati alcuni esempi, tratti da [26], di geometrie comunemente utilizzate.

1.2.1 Correlazione tra i dispositivi esistenti

Nel paragrafo precedente il problema è stato affrontato solamente in termini di efficacia, ossia badando al grado di mescolamento di per sé; ora si vuole

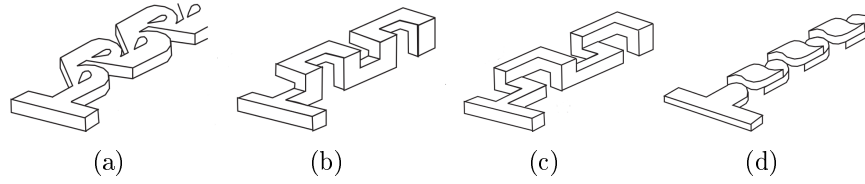


Figura 1.1: Alcune tipologie di microcanali passivi tratti da [26]. (a) struttura a Tesla; (b) forma a C; (c) forma ad L; (e) a spirale.

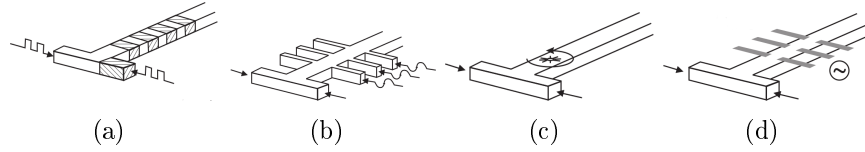


Figura 1.2: Alcune tipologie di microcanali attivi tratti da [26]. (a) ad alimentazione alternata; (b) a disturbi di pressione; (c) ad agitatore integrato; (e) a disturbo elettroidrodinamico.

introdurre un ragionamento legato all'efficienza, ossia al rapporto tra mescolamento ottenuto ed energia spesa per ottenerlo. Per far ciò si seguirà la linea di pensiero proposta per primi da Falk e Commenge in [10] e proposta in forme simili anche da altri autori [19]. Per semplicità si supponga un canale rettilineo a sezione circolare di diametro D_h , nel quale scorre acqua a condizioni ambientali con una velocità media V_m . Per numeri di Reynolds inferiori a circa 2000 in tale tubo si svilupperà una corrente laminare di Hagen–Poiseuille. Dalla soluzione esatta delle equazioni di Navier–Stokes si ottiene il seguente legame tra la portata volumica Q fluente nel condotto e il gradiente di pressione:

$$Q = -\frac{\pi D_h^4}{128\mu} \frac{dp}{dx}, \quad (1.29)$$

con x coordinata allineata con l'asse del canale. Invertendo la relazione, così da esplicitare il gradiente di pressione si perviene alla forma seguente:

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{128\mu}{\pi D_h^4} Q = -\frac{128\mu}{\pi D_h^4} \pi V_m \frac{D_h^2}{4} = -\frac{32\mu}{\pi D_h^2} V_m. \quad (1.30)$$

Poiché il gradiente di pressione risulta costante, è immediato calcolare la caduta di pressione, Δp , tra due sezioni a distanza L . Essa risulta:

$$\Delta p = \frac{32\mu}{D_h^2} V_m L. \quad (1.31)$$

La potenza dissipata in questo tratto del canale, P , è facilmente calcolabile come prodotto della caduta di pressione per la portata volumica:

$$P = Q \Delta p. \quad (1.32)$$

A questo punto si può calcolare la potenza dissipata per unità di massa di fluido, ϵ , ottenendo:

$$\epsilon = \frac{Q \Delta p}{\rho L A} = \frac{\pi V_m \frac{D_h^2}{4} \frac{32\mu}{D_h^2} V_m L}{\rho \pi \frac{D_h^2}{4} L} = \frac{32\nu}{D_h^2} V_m^2. \quad (1.33)$$

Volendo mettere ϵ in relazione con il gradiente di velocità del fluido a parete, $\dot{\gamma}$, procediamo calcolando lo sforzo a parete, τ_w . Nel tratto di condotto considerato, essendo il flusso stazionario, la risultante degli sforzi tangenziali a parete deve uguagliare la differenza delle pressioni a monte e a valle, Δp , moltiplicata per la superficie su cui agisce. Essendo la corrente di Hagen-Poiseuille invariante con x e con la coordinata angolare, τ_w è uguale in ogni punto delle pareti del canale. Il bilancio di quantità di moto porta allora a scrivere:

$$\Delta p A = \tau_w \pi D_h L. \quad (1.34)$$

Da questa relazione si può esplicitare lo sforzo a parete:

$$\tau_w = \frac{\Delta p D_h}{4L}, \quad (1.35)$$

che può essere riscritto utilizzando la relazione (1.31):

$$\tau_w = \frac{\Delta p D_h}{4L} = \frac{32\mu}{D_h^2} V_m L \frac{D_h}{4L} = \frac{8\mu V_m}{D_h}. \quad (1.36)$$

Siccome per un fluido newtoniano vale la relazione:

$$\tau_w = \mu \dot{\gamma}, \quad (1.37)$$

è possibile scrivere $\dot{\gamma}$ in funzione della velocità media e del diametro:

$$\dot{\gamma} = \frac{\tau_w}{\mu} = \frac{8V_m}{D_h}. \quad (1.38)$$

Poiché l'espressione (1.33) mette in relazione V_m ed ϵ , è possibile esplicitare la velocità media, sostituirla nella (1.38) ed ottenere:

$$\dot{\gamma} = \left(\frac{2\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} \quad (1.39)$$

L'energia meccanica è spesa per generare il moto del fluido all'interno del canale e solo una sua parte contribuisce al mescolamento. Sulla base di questa osservazione Ottino et al. in [30] hanno proposto l'introduzione della cosiddetta *efficienza energetica di mescolamento*, η , così definita:

$$\eta = \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{tot}} = \frac{\dot{\gamma}}{\sqrt{2\epsilon/\nu}}, \quad (1.40)$$

dove $\dot{\gamma}$ rappresenta il gradiente di velocità che è effettivamente speso per il mescolamento e $\dot{\gamma}_{tot}$ il gradiente di velocità totale usato per il flusso ricavato nella (1.39). Sebbene sia impossibile individuare teoricamente il valore di η , esso è stimabile sperimentalmente e gli autori hanno riscontrato valori tipici compresi tra l'1 ed il 3%.

Gli stessi autori hanno anche proposto una stima del tempo di mescolamento t_m in funzione di ϵ , secondo la relazione seguente:

$$t_m = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \ln(1.52Pe). \quad (1.41)$$

Per micromixer dei quali sono disponibili dati sperimentali sulla caduta di pressione tra inlet ed outlet, gli autori hanno calcolato la potenza dissipata specifica ϵ e l'hanno messa in relazione con il grado di mescolamento raggiunto, producendo il grafico di figura 1.2.1. Nell'immagine è possibile notare come effettivamente i microcanali studiati finora seguano, nel legame $t - \epsilon$, una legge di potenza con esponente -0.45 , molto prossimo al valore di $-1/2$ dedotto analiticamente. Gli autori sottolineano come ben l'80% di essi giaccia in un intervallo di errore del $\pm 30\%$ rispetto al valore teorico. Dal grafico si può dedurre anche che, qualunque sia la geometria interna di un micromixer, l'unica variabile di progetto utilizzabile per migliorare il mescolamento, e quindi per minimizzare t_m , risulti essere la potenza dissipata, sulla quale pare riflettersi qualunque tentativo di innovazione geometrica.

1.3 Regimi di moto del T-mixer

Come già accennato, per via della loro semplicità di realizzazione e di implementazione in sistemi fluidodinamici anche complessi, tra le varie tipologie di microcanali particolare sforzo è stato dedicato allo sviluppo dei micromixer statici, nei quali il mescolamento è affidato al solo ricombinamento del campo di moto [22]. Tra questi, le geometrie più semplici sono i canali a T ed a Y, in cui i condotti di afflusso si intersecano tra loro con geometrie, appunto, a T o Y [18]. Soleymani, Kolehmainen e Turunen, in [32], attraverso studi sia

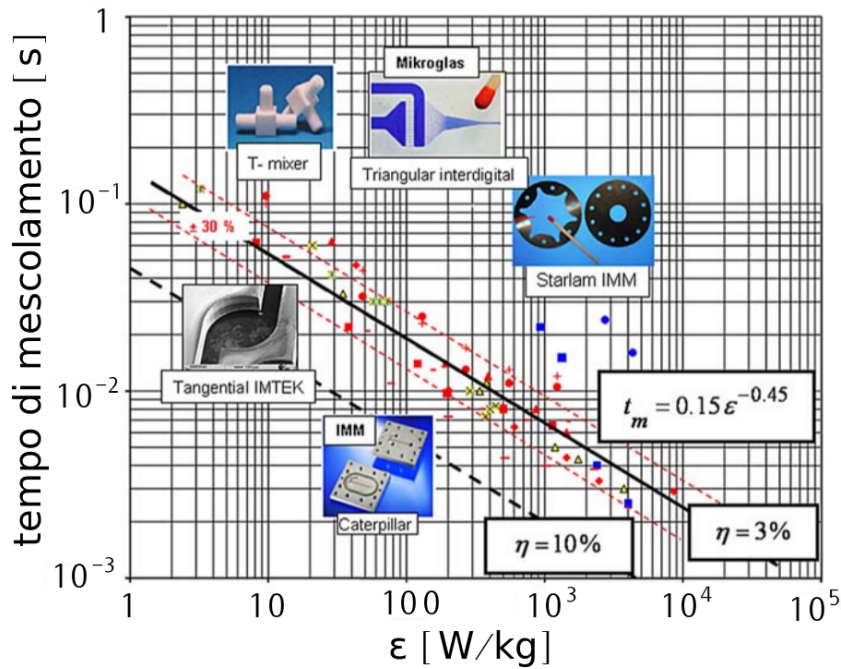


Figura 1.3: Andamento del tempo di mescolamento rispetto alla potenza specifica consumata per vari dispositivi documentati in letteratura.

numerici che sperimentali, hanno compiutamente descritto la natura del flusso in un microcanale a T per diverse condizioni di lavoro. Si consideri quindi un dispositivo come raffigurato in figura 2. Sono presenti due piani di simmetria geometrica; il primo perpendicolare ai condotti di inlet e passante per il piano medio del canale di outlet, il secondo invece è parallelo alle facce superiore ed inferiore del canale. Per quel che concerne le dimensioni delle sezioni dei canali, in letteratura non è presente un unico caso di riferimento, bensì geometrie tra loro diverse, ma in cui le dimensioni dei lati rimangono sempre comprese nell'intervallo $50 \mu m < H, W < 500 \mu m$. Fissata una geometria, il campo di moto che si sviluppa all'interno di un microcanale a T è descrivibile in funzione del numero di Reynolds, così come è stato definito nell'equazione (1.5). Imponendo usualmente condizioni simmetriche sulle sezioni di ingresso, la prima osservazione da compiere riguarda la simmetria del campo di moto stesso. Per numeri di Reynolds molto bassi, nel range $0 < Re < 50$, chiamato *laminar regime*, si osserva l'instaurarsi di un campo di moto perfettamente simmetrico. In esso i due flussi immessi scorrono l'uno di fianco all'altro e rimangono del tutto segregati, risultando in un mescolamento estremamente basso. Per Re leggermente maggiori, usualmente nell'intervallo $50 < Re < 150$, si entra nel cosiddetto *vortex regime* e si osserva la nascita

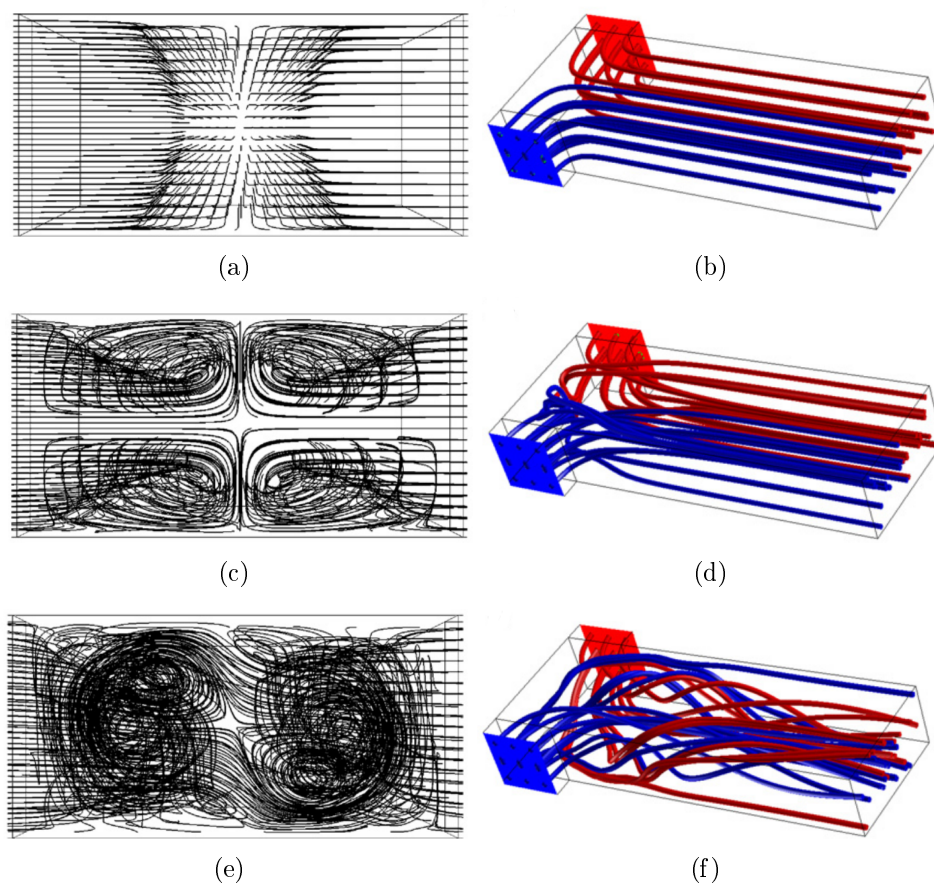


Figura 1.4: Visualizzazione dei tre regimi di moto stazionari attraverso linee di corrente tratta da [32].

di due coppie di vortici, allineati lungo l'asse del canale di mescolamento. Tali vortici tuttavia rimangono inclusi entro regione di canale occupata da un singolo tubo di flusso e pertanto non producono un aumento della superficie di contatto tra le due correnti, cosicché δ presenta un aumento molto lieve. Superato tale regime di moto, per numeri di Reynolds ancora maggiori si osserva la rottura nella simmetria del campo, con linee di corrente che attraversano il piano di simmetria del microcanale. In queste condizioni, proprie del cosiddetto *engulfment regime*, il grado di mescolamento aumenta sensibilmente, tanto da costituire il regime di funzionamento ideale per questo genere di dispositivi. Nell'immagine 1.3, tratta da [32], è possibile osservare una visualizzazione attraverso linee di corrente dei campi di moto appena descritti. Alcuni studi, talvolta anche sperimentali come quello di Mouheb et al. [1], non riscontrano ulteriori cambiamenti nella struttura del

campo di moto al crescere di Re , fino almeno al valore soglia di $Re = 1000$ in cui il flusso può presentare caratteristiche turbolente. Altri autori invece, come Dreher et al. in [7], hanno mostrato, sia numericamente che sperimentalmente, che successivamente all'*engulfment regime* i microcanali a T evidenziano comportamenti complessi. In particolare, per $Re < 500$ circa essi hanno riscontrato l'insorgere di un regime pulsato periodico e per numeri di Reynolds ancora maggiori l'abbandono della periodicità in favore di un flusso instazionario caotico.

Pur limitando l'indagine al campo dei regimi stazionari, resta da individuare un parametro che consenta di prevedere il comportamento di T-mixer differenti tra loro. Più specificatamente, Soleymani, Yousefi e Turunen in [33] hanno cercato, con un discreto successo, di identificare un nuovo numero adimensionale, che identifichi l'insorgenza dell' *engulfment regime*. Si faccia ancora riferimento all'immagine di figura 2. Nella loro trattazione, questi autori suppongono che il campo di moto all'interno del micromixer sia funzione di Re e di parametri geometrici, secondo l'espressione:

$$f \left(Re, \frac{W}{H}, \frac{D_{hin}}{D_{hout}}, \frac{W'}{H} \right) = 0, \quad (1.42)$$

dove D_{hin} e D_{hout} sono i diametri idraulici dei condotti di inlet e di quello di outlet, rispettivamente. Il numero adimensionale che descrive la transizione tra il *vortex verime* e l'*engulfment regime* viene indicato con K e se ne esprime la dipendenza dai parametri indicati nella (1.42) nel modo seguente:

$$K = Re^\alpha \left(\frac{W}{H} \right)^\beta \left(\frac{D_{hin}}{D_{hout}} \right)^\gamma \left(\frac{W'}{H} \right)^\zeta. \quad (1.43)$$

Per ottenere il valore dei quattro parametri $\alpha, \beta, \gamma, \zeta$ i ricercatori hanno condotto simulazioni numeriche per 30 diversi micromixer a T e per vari numeri di Reynolds, così da identificare per ciascuno il valore critico per la transizione. Queste simulazioni hanno condotto alla definizione dei parametri fino a fornire l'espressione seguente, che definisce un unico numero adimensionale, K appunto, da cui dipende la dinamica del sistema. Sia quindi:

$$K = Re^{0.82} \left(\frac{W}{H} \right)^{-0.79} \left(\frac{D_{hin}}{D_{hout}} \right)^{-1.5} \left(\frac{W'}{H} \right)^{0.15}. \quad (1.44)$$

Si è osservato che la transizione tra il secondo ed il terzo regime di moto avviene, per ogni canale, in corrispondenza di un determinato valore di K , che verrà denominato critico e che corrisponde a $K_C = 100$, con un'ottima approssimazione per tutte le geometrie.

1.4 Tecniche sperimentali

Accanto alle simulazioni numeriche, le tecniche di analisi sperimentali rappresentano un supporto indispensabile nello studio dei fenomeni che governano i microcanali. Originariamente la loro produzione si basava sulle tecnologie sviluppate per i sistemi micro-elettomeccanici (MEMS), per le quali silicio e vetro costituivano i materiali di base. Più recentemente, nell'ottica di una riduzione dei costi di prototipizzazione e spinti dalla necessità di bio-compatibilità dei dispositivi, si sono affacciati nuovi materiali polimerici. Una fase cruciale di qualunque procedura sperimentale è rappresentata dalla determinazione del grado di mescolamento, operazione spesso ardua. La procedura di misura più comune si basa sulla diluizione di inchiostro fluorescente in uno dei due flussi immessi del dispositivo. Dopo aver catturato un'immagine attraverso un microscopio dotato di filtro, la concentrazione può essere dedotta dalla deviazione standard dell'intensità di ogni pixel, poiché l'intensità dell'immagine è proporzionale alla concentrazione dell'inchiostro. In alcuni casi, se la deviazione standard dell'intensità dell'immagine non è sufficiente per riconoscere le differenze tra diverse regioni nell'immagine acquisita, può essere utilizzata una funzione di densità di probabilità spaziale dell'intensità, integrata su regioni limitate [26]. Inoltre, anche lo spettro di potenza dell'intensità dell'immagine può essere considerato come metodo di quantificazione. Le procedure finora citate dipendono dalla direzione relativa delle linee di corrente rispetto alla direzione da cui è presa l'immagine. Se lo scatto è preso da una direzione perpendicolare alle linee di flusso, le correnti risultano sempre perfettamente mescolate, anche quando sono in realtà del tutto segregate. In questi casi risulta necessario un sistema microscopico a lenti cofocali, così da poter ricostruire la distribuzione tridimensionale del campo di concentrazione. Un secondo metodo d'indagine consiste nel misurare il prodotto fluorescente di una reazione chimica. Tipicamente questo processo è una reazione acido-base con un inchiostro avente una fluorescenza che è pH-dipendente e, come in precedenza, l'intensità della fluorescenza è proporzionale al grado di mescolamento.

1.5 Tecniche numeriche

Accanto alle prove sperimentali, le tecniche di simulazione numerica sono state ampiamente utilizzate nell'indagine dei dispositivi microfluidici ([13], [9], [32], [31]). Sebbene recentemente Fani, Camarri e Salvetti [11] abbiano introdotto l'impiego di tecniche numeriche alternative, come la DNS o l'analisi ad elementi finiti, per la maggior parte le simulazioni documentate

in letteratura sono state svolte con codici a volumi finiti. Tale approccio costituisce uno strumento ormai collaudato e diffuso anche al di fuori del mondo accademico. Inoltre l'integrazione diretta delle equazioni del moto è computazionalmente onerosa e, ad oggi, è applicabile solamente a geometrie molto semplici. Di contro i metodi a volumi finiti godono di grande flessibilità e sono adatti anche a simulazioni in domini complessi. Benché il microcanale che verrà esaminato non presenti particolari complessità geometriche, questa tesi vuole essere il primo passo di uno studio di lungo termine e mira quindi a sviluppare uno strumento numerico facilmente applicabile anche a problemi diversi e geometricamente articolati. Oltre a non richiedere un onere computazionale eccessivo, questo metodo si è dimostrato estremamente efficace in numerosi studi comparativi con prove sperimentali, poiché la natura laminare dei flussi alle microscale consente di evitare la modellazione dei termini turbolenti delle Navier–Stokes. Sulla scorta della letteratura più consolidata, tutte le simulazioni presenti in questa tesi sono prodotte con l'utilizzo di un codice a volumi finiti *open-source*, *OpenFOAM*, che viene presentato nel capitolo successivo.

Capitolo 2

La corrente nel T-mixer

2.1 Geometria

Per condurre il presente studio si è scelto, tra i vari canali a T descritti in letteratura, quello utilizzato da Galletti et al. in [13]. Si faccia riferimento all'immagine di figura 2.1, che descrive anche il sistema di riferimento cartesiano utilizzato. Il canale di mescolamento è lungo $L_{out} = 3000 \mu m$, ha altezza H pari a $200 \mu m$ e profondità W' di $300 \mu m$. I due condotti di afflusso, denominati *inlet 1* ed *inlet 2* e uguali tra loro, abbiano lunghezza L_{in} pari a $1500 \mu m$, profondità $W = 150 \mu m$ ed anch'essi altezza H . Secondo la definizione di equazione (1.2), il diametro idraulico dei condotti di inlet risulta $D_{h_{in}} = 171.4 \mu m$ e quello del condotto di outlet è $D_{h_{out}} = 240 \mu m$. Il fluido di lavoro è acqua a condizioni ambientali e viene iniettato con la medesima portata, costante nel tempo, alle due sezioni di inlet. Nella tabella 2.1 si riportano le proprietà fisiche dell'acqua alle condizioni di impiego.

Descritto il dominio, le proprietà fisiche dell'acqua e le equazioni che ne governano il moto, cioè le equazioni di Navier–Stokes incomprimibili (1.4), il problema risulta completo quando accompagnato da un opportuno set di condizioni al contorno. Si indichi a questo punto con Ω il dominio di calcolo e sia $\Gamma = \partial\Omega$ il suo bordo, che verrà considerato suddiviso in tre parti, Γ_{in} , Γ_{out} e Γ_w tali che:

$$\Gamma = \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \cup \Gamma_w, \quad \Gamma_{in} \equiv \Gamma_{in1} \cup \Gamma_{in2}, \quad (2.1)$$

$\rho [kg/m^3]$	$\mu [kg/ms]$	$\nu [m^2/s]$	$\lambda [m]$
998	10^{-3}	1.02×10^{-6}	1×10^{-10}

Tabella 2.1: Proprietà fisiche dell'acqua a condizioni ambientali.

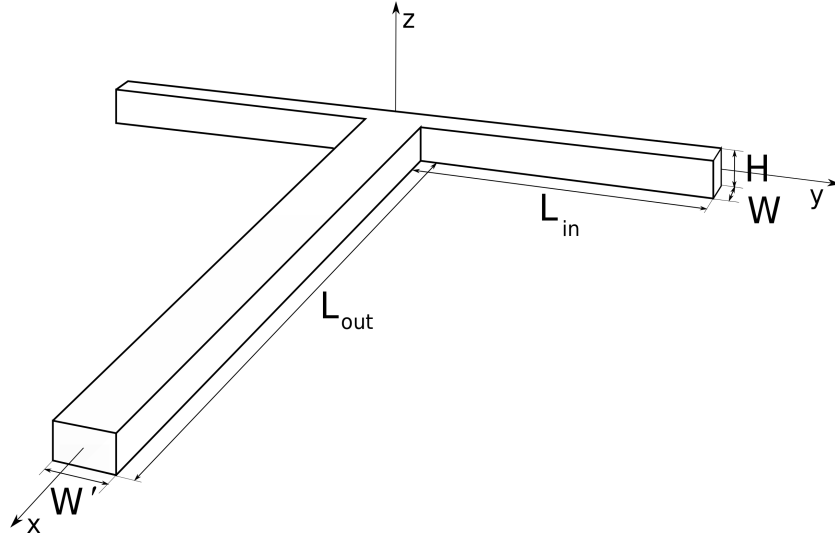


Figura 2.1: Microcanale studiato.

in cui Γ_{in} rappresenta la porzione di bordo corrispondente alle superfici di inlet, Γ_{out} ne rappresenta la porzione corrispondente all'outlet e Γ_w corrisponde alle pareti solide del condotto. In ultimo siano Γ_{in1} e Γ_{in2} le superfici di ingresso aventi rispettivamente normale discorde e concorde all'asse y . Per il flusso in un condotto si impongono condizioni di adesione sulle pareti solide, un profilo assegnato di velocità sugli ingressi e condizioni di gradiente nullo sull'uscita, ovvero le (2.2):

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \quad \text{su } \Gamma_{in} \quad (2.2a)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{0} \quad \text{su } \Gamma_w \quad (2.2b)$$

$$(\nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{su } \Gamma_{out}. \quad (2.2c)$$

Il flusso immesso in Γ_{in1} ha concentrazione $c = 1$, mentre quello in ingresso in Γ_{in2} ha concentrazione nulla. Lo scalare passivo ha coefficiente di diffusività molecolare $D = 3 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. All'uscita e sulle pareti solide di impongono su c condizioni di derivata normale nulla, risultando nel seguente insieme di condizioni al contorno:

$$c = 1 \quad \text{su } \Gamma_{in1} \quad (2.3a)$$

$$c = 0 \quad \text{su } \Gamma_{in2} \quad (2.3b)$$

$$(\nabla c) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{su } \Gamma_{out} \text{ e } \Gamma_w. \quad (2.3c)$$

2.2 Soluzione numerica

Per la soluzione numerica del problema differenziale descritto nel paragrafo precedente si è scelto di utilizzare *OpenFOAM*, un software *open-source*. Tale pacchetto si basa su un codice a volumi finiti che ha trovato nel corso degli anni sempre più utilizzatori, sia in campo accademico che industriale, ed oggi vanta una vasta comunità di utenti. Esso racchiude anche moduli di *pre-processing* e di *post-processing*, facendone uno strumento completo. Il vantaggio principale derivante dall'utilizzo di OpenFOAM risiede nel fatto che il codice sorgente è liberamente accessibile. Ciò permette di controllare nel dettaglio tutti gli aspetti della procedura di calcolo e costituisce un ottimo strumento didattico per chi si avvicina alla fluidodinamica computazionale. Inoltre, sempre per via della sua accessibilità, è possibile modificare il codice esistente a seconda delle esigenze applicative, implementando nuove funzioni e solutori. Come si vedrà, questa è una caratteristica cruciale per il presente lavoro.

2.2.1 Discretizzazione a volumi finiti

Un qualunque metodo a volumi finiti si basa sulla scrittura delle equazioni di Navier–Stokes in forma conservativa [3], [17]. Esse possono essere sinteticamente scritte nella forma integrale seguente:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{W} \, d\Omega + \oint_{\partial\Gamma} (\mathbf{F}_c - \mathbf{F}_v) \, dS = \int_{\Omega} \mathbf{Q} \, d\Omega. \quad (2.4)$$

Il vettore delle cosiddette *variabili conservative* \mathbf{W} è definito come

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}(x, y, z) = (p, \rho\mathbf{v})^T, \quad (2.5)$$

mentre il vettore dei *flussi convettivi* \mathbf{F}_c è costruito:

$$\mathbf{F}_c = (\rho v_n, \rho v_n \mathbf{v} + p\mathbf{n})^T, \quad (2.6)$$

essendo $v_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ la componente della velocità normale alla superficie di Ω . \mathbf{F}_v è il vettore dei flussi viscosi ed infine \mathbf{Q} rappresenta il termine sorgente:

$$\mathbf{Q} = (0, \rho\mathbf{f}_e)^T, \quad (2.7)$$

ove \mathbf{f}_e sono le forze esterne per unità di volume. Il primo passo per la discretizzazione numerica del problema consiste nel suddividere il dominio occupato dal fluido in un insieme di cosiddette *celle*. Tale suddivisione viene eseguita soddisfacendo tre requisiti:

1. il dominio deve essere completamente coperto dalla griglia,
2. non deve esserci spazio tra le celle,
3. le celle non si devono sovrapporre tra loro.

La griglia risultante è univocamente descritta dalle coordinate (x, y, z) dei punti nodali e dagli indici i, j, k di ogni singolo elemento. Ogni cella costituisce un volume di controllo, sul quale vengono calcolati i flussi e i termini sorgenti. Si consideri un volume di controllo nel quale il valore di \mathbf{W} sia costante. Per tale volume si può quindi semplificare il termine temporale dell'equazione (2.4) come

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{W} \, d\Omega = \Omega \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t}, \quad (2.8)$$

perciò l'equazione (2.4) diviene:

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} = -\frac{1}{\Omega} \left[\oint_{\partial\Omega} (\mathbf{F}_c - \mathbf{F}_v) \, dS + \int_{\Omega} \mathbf{Q} \, d\Omega \right]. \quad (2.9)$$

Il termine di integrale di superficie viene approssimato attraverso i flussi sulle singole facce della cella, sulle quali \mathbf{W} viene ritenuto costante ed è valutato al centro della faccia, mentre il termine sorgente viene ritenuto costante all'interno del volume. Per ogni volume si può scrivere quindi:

$$\frac{d\mathbf{W}_{i,j,k}}{dt} = -\frac{1}{\Omega} \left[\sum_{m=1}^{N_f} (\mathbf{F}_c - \mathbf{F}_v)_m \Delta S_m - \mathbf{Q}\Omega_{i,j,k} \right]. \quad (2.10)$$

Nell'equazione (2.10) N_f indica il numero di facce che compongono la cella i, j, k e la grandezza ΔS_m è l'area della faccia m -esima. Il termine di destra della (2.10) è usualmente chiamato *residuo* ed indicato con $\mathbf{R}_{i,j,k}$, cosicché si può riscrivere l'espressione precedente nella seguente forma compatta:

$$\frac{d\mathbf{W}_{i,j,k}}{dt} = -\frac{1}{\Omega} \mathbf{R}_{i,j,k}. \quad (2.11)$$

Scrivendo l'equazione (2.11) per ogni cella si ottiene un sistema di equazioni differenziali ordinarie del prim'ordine nel tempo. Risolvendo numericamente questo sistema, la prima difficoltà che si incontra è come definire i volumi di controllo a partire dai nodi della griglia di calcolo; questo problema è approcciabile attraverso tre strategie differenti:

1. schemi cosiddetti *cell-centred*, in cui i volumi di controllo coincidono con le celle della griglia e le variabili del flusso sono valutate al centroide della cella;
2. schemi *vertex-centred* con volumi di controllo sovrapposti, nei quali le variabili sono valutate ai nodi (o vertici) della griglia ed i volumi di controllo sono definiti come l'insieme delle celle avanti un certo nodo in comune. Questo fa sì che due volumi di controllo associati a due nodi consecutivi si sovrappongano parzialmente, ragion per cui tale metodo viene raramente usato;
3. schemi *vertex-centred* con volumi di controllo duali, che sono determinati connettendo i punti medi delle celle aventi un certo nodo in comune, mentre le variabili sono valutate ai nodi della griglia; in tal modo i volumi di controllo non si sovrappongono.

I metodi a volumi finiti godono intrinsecamente di grande flessibilità nel trattamento di ogni tipo di griglia di calcolo. Queste ultime, in generale, possono essere suddivise in due diverse categorie:

1. *mesh strutturate*, nelle quali tutti i punti della griglia giacciono all'intersezione di sole due o tre famiglie di linee;
2. *mesh non strutturate*, nelle quali i vertici delle celle non possono essere identificati come appartenenti a linee coordinate. Per questa ragione i nodi non possono essere indicati da un insieme di interi - ad esempio i, j, k - ma devono essere numerate individualmente in un certo ordine. Benché le mesh non strutturate richiedano un metodo di ordinamento più articolato, esse offrono maggiore flessibilità per domini di geometria complessa.

2.2.2 Generazione della mesh

La generazione della mesh viene eseguita attraverso un'utility, interna ad OpenFOAM, chiamata *blockMesh*. Essa consente di ottenere griglie strutturate con elementi esaedrici e si è dimostrata uno strumento affidabile e veloce, oltre ad essere facilmente interfacciabile con il solutore. BlockMesh è controllato da un dizionario che prende il nome di *blockMeshDict* e che contiene tutte le informazioni necessarie per la costruzione della mesh e per la definizione delle superfici di bordo. Una struttura tipica di questo dizionario comprende varie voci, le principali delle quali sono:

1. Una lista dei vertici del dominio geometrico, descritti tramite le rispettive coordinate:

```

convertToMeters 1e-6;

vertices
(
    (0   -750 0)    // 0
    (100 -750 0)   // 1
    (100  -50 0)   // 2
    ...
);

```

2. Un elenco di *blocchi*, descritti dalle etichette dei vertici che li compongono. Per ogni blocco è possibile specificare il numero di celle che la mesh dovrà avere in ciascuna direzione dello spazio, mentre il comando `simpleGrading` permette di indicare un gradiente nella dimensione delle celle:

```

blocks
(
    hex (0 1 10 11 4 5 14 15) (38 826 50)
    simpleGrading (1 1 1)

    hex (2 16 17 9 6 19 18 13) (750 76 50)
    simpleGrading (1 1 1)
    ...
);

```

3. Un elenco di superfici, costituenti il bordo del dominio e sulle quali si specificheranno le condizioni al contorno:

```

boundary
(
    wall
    {
        type wall;
        faces
        (
            (0 1 10 11)
            (4 5 14 15)
            ...
        );
    };

```

```

    }
    inlet1
    {
        type wall;
        faces
        (
            (0 1 5 4)
        );
    }
    ...
);

```

La mesh adottata per le soluzioni più significative descritte nel seguito è composta da elementi cubici, tutti uguali tra loro e di lato $4\mu\text{m}$; ciò risulta in numero di circa 4.2 milioni di elementi. I solutori utilizzati per produrre i risultati di questo capitolo sono:

1. *simpleFoam* per le simulazioni delle N–S stazionarie,
2. *pimpleFoam* per le simulazioni delle N–S instazionarie,
3. *scalarTransportFoam* per le simulazioni dell’equazione di diffusione e trasporto dello scalare passivo.

Dal momento che la letteratura documenta ampiamente la natura laminare dei flussi che si generano all’interno dei microcanali, tutte le simulazioni saranno di tipo laminare.

2.2.3 Condizioni al contorno

Le condizioni al contorno da imporre per la velocità sul bordo sono quelle descritte dalle equazioni (2.2). Tuttavia, le condizioni al contorno su Γ_{in} necessitano di una particolare attenzione. Galletti et al. in [13] hanno dimostrato che il flusso che si sviluppa all’interno del condotto è molto sensibile alle condizioni di velocità imposte su queste superfici. Volendo operare a portata costante, le alternative più naturali sono due: la prima prevede l’imposizione di un profilo di velocità costante sulla sezione, la seconda l’imposizione di un profilo laminare completamente sviluppato. Dombrowski et al. [6], per quantificare la lunghezza di canale necessaria a consentire lo sviluppo di un profilo laminare a partire da uno uniforme, hanno proposto l’espressione seguente:

$$\frac{L_{iFD}}{D_{hin}} = 0.379e^{-0.148Re_{in}} + 0.055Re_{in} + 0.26, \quad (2.12)$$

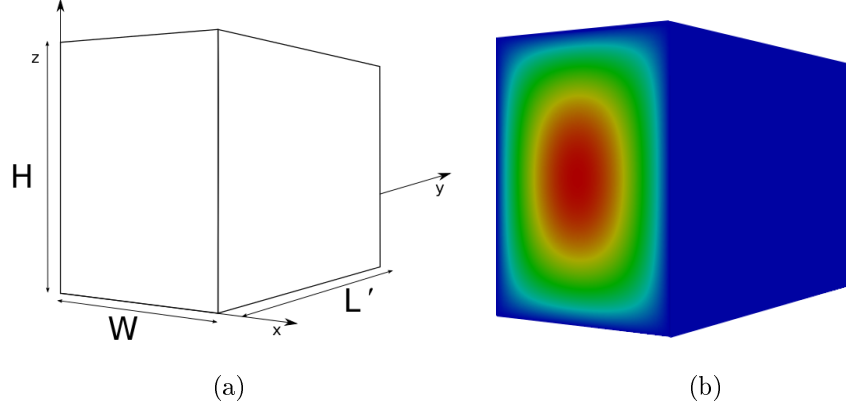


Figura 2.2: Dominio geometrico del tratto di canale utilizzato per ottenere il profilo laminare completamente sviluppato.

nella quale si è indicata con L_{iFD} tale lunghezza e con Re_{in} il numero di Reynolds costruito con D_{hin} e la velocità media dei condotti di inlet. In questo contesto, per il numero di Reynolds massimo in esame, $Re_{inmax} = 480$, si ottiene:

$$\frac{L_{iFD}}{D_{hin}} \simeq 25 \quad (2.13)$$

che corrisponderebbe ad una lunghezza dei canali di alimentazione di $L_{iFD} = 4258 \mu m$, ben maggiore della lunghezza da noi considerata di $1500 \mu m$. Per via di questa osservazione i due tipi di condizioni agli ingressi non sono affatto equivalenti. In questo lavoro si è scelto di imporre su Γ_{in1} e Γ_{in2} condizioni di profilo sviluppato. La distribuzione laminare di velocità $\mathbf{v}(x, z)$ necessaria è ottenuta attraverso una simulazione ausiliaria. Essa consiste nell'imporre in un dominio prismatico una certa portata costante, lasciando che in esso si sviluppi il profilo laminare. Il dominio di calcolo è geometricamente simile ad un qualunque tratto dei condotti di ingresso ed è presentato in figura 2.2. Le dimensioni della sezione sono $200 \mu m$ e $150 \mu m$, mentre la lunghezza è $L' = 300 \mu m$. La discretizzazione è identica a quella utilizzata nel calcolo successivo. Sulle pareti laterali si impongono condizioni di adesione, mentre sulle sezioni di ingresso ed uscita si impongono condizioni periodiche. Su questo dominio si procede con una simulazione instazionaria, cosicché si possa fisicamente sviluppare il profilo laminare d'interesse. Nelle immagini di figura 2.3 si mostra la sezione d'ingresso di tale dominio e lo sviluppo del profilo laminare per vari istanti di tempo nel caso di $Re = 480$, corrispondente ad una velocità media di $2 m/s$. Si noti che, in un intervallo di tempo di $5 \times 10^{-3} s$, una particella fluida che si muove alla velocità media percorre

un tratto equivalente di canale lungo $1 \times 10^{-2} m$, ben maggiore di $L_{i_{FD}} \simeq 4 \times 10^{-3} m$. Per questa ragione, tale intervallo può essere ritenuto sufficiente allo sviluppo del profilo laminare.

2.2.4 Criteri di convergenza

Per giudicare la bontà dei risultati prodotti tramite simulazioni stazionarie si è soliti fare riferimento ai cosiddetti *residui*, in genere utilizzati come criteri per verificare la convergenza di una simulazione iterativa. Alla luce di ciò, diventa particolarmente importante comprendere come tali residui siano definiti e calcolati all'interno di OpenFOAM. Come riportano Damiàn e Nitro in [24], si consideri il sistema algebrico lineare risultante dalla discretizzazione a volumi finiti delle N-S, scritto nella consueta forma:

$$A \mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (2.14)$$

dove $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathfrak{R}^n$ ed A è una matrice di ordine n . Rispetto alla soluzione esatta dal sistema, \mathbf{x}_e , si definisce *errore* il vettore

$$\mathbf{e} = \mathbf{x}_e - \mathbf{x}. \quad (2.15)$$

Si indichi ora con *residuo* il vettore:

$$\mathbf{R} = \mathbf{b} - A \mathbf{x}. \quad (2.16)$$

Ad \mathbf{R} si applica una normalizzazione attraverso un fattore definito nel modo seguente. Sia \mathbf{x}_{ref}

$$\mathbf{x}_{ref} = \bar{\mathbf{x}} \quad (2.17)$$

e siano \mathbf{w}_A e \mathbf{p}_A così definiti:

$$\mathbf{w}_A = A \mathbf{x} \quad (2.18a)$$

$$\mathbf{p}_A = A \mathbf{x}_{ref}. \quad (2.18b)$$

Il fattore di normalizzazione viene definito come:

$$F = \Sigma \|\mathbf{w}_A - \mathbf{p}_A\| + \|\mathbf{b} - \mathbf{p}_A\| + 1 \times 10^{-20}. \quad (2.19)$$

I residui normalizzati sono quindi:

$$r = \frac{\Sigma \|\mathbf{b} - \mathbf{w}_A\|}{F}. \quad (2.20)$$

L'errore è legato ai residui dall'espressione (2.20), cosicché ad una riduzione dei residui si accompagna una riduzione dell'errore. Si noti come il denominatore di questa relazione tenda ad un valore costante, perché ad un valore

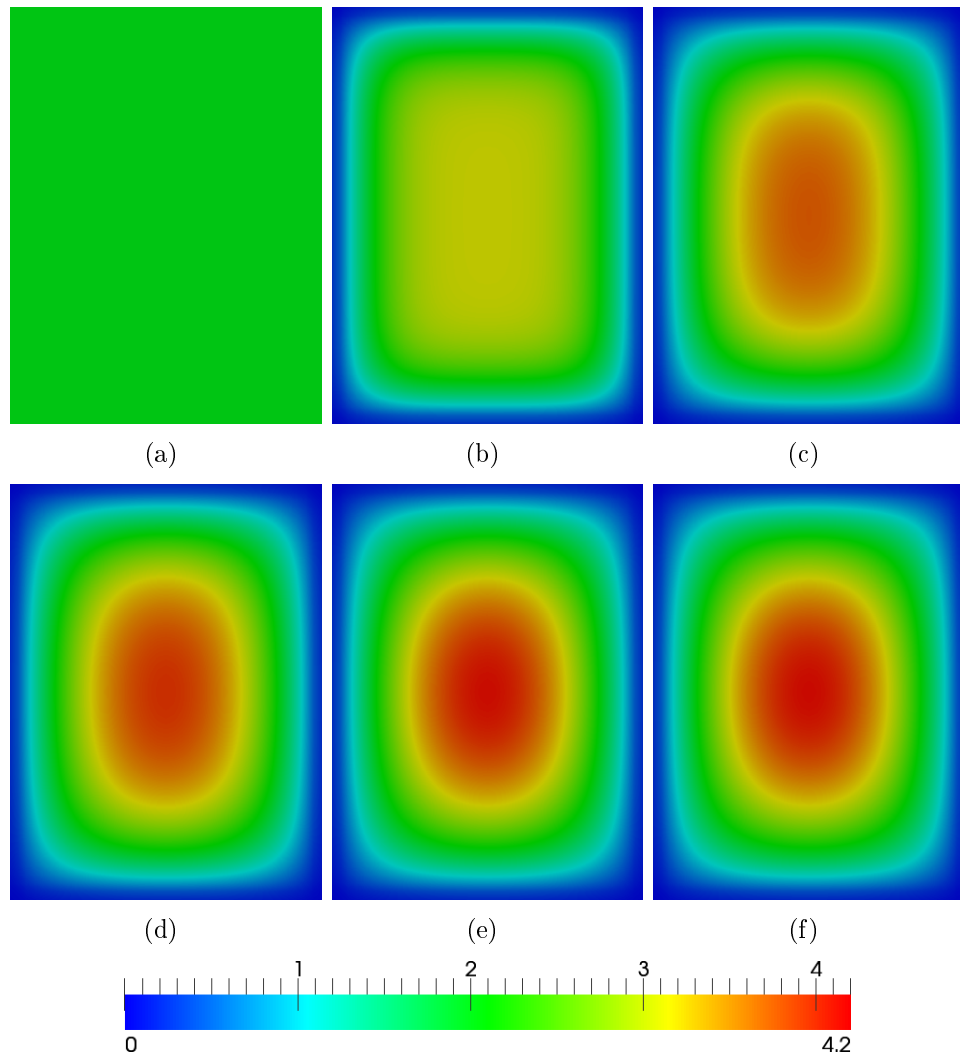


Figura 2.3: Evoluzione temporale del profilo di velocità [m/s]; (a) $t = 0 \text{ ms}$; (b) $t = 0.3 \text{ ms}$; (c) $t = 0.6 \text{ ms}$; (d) $t = 0.9 \text{ ms}$; (e) $t = 20 \text{ ms}$; (f) $t = 50 \text{ ms}$.

costante tende la differenza tra la soluzione ed il campo medio. Pertanto, poiché il numeratore tende a zero se la simulazione converge, a sua volta il residuo deve tendere a zero come prova di convergenza. Si può affermare che, quando i residui sono diminuiti di 5 – 6 ordini di grandezza rispetto al loro valore iniziale, anche la norma dell'errore è diminuita di una quantità paragonabile. Se alla prima iterazione \mathbf{v} e p sono posti

$$\mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad p = 0, \quad (2.21)$$

in tutto il dominio, allora l'errore iniziale coincide con la soluzione stessa. Se r viene ridotto di n ordini di grandezza anche l'errore verrà ridotto della stessa quantità ed avrà norma di dimensione 10^{-n} . Nella presente trattazione si è scelto, come equo compromesso tra accuratezza e costo computazionale, $n = 6$, cosicché l'errore sia nell'ordine dell' 10^{-4} % sulla soluzione.

2.3 Regimi di moto

Galletti et al. [13] hanno estesamente studiato le caratteristiche del T-mixer in esame con un solutore a volumi finiti commerciale, *Fluent*, di *Ansys Inc.*. Il valore di δ all'uscita che questi autori hanno riscontrato è riportato in figura 2.4 in funzione del numero di Reynolds. In questa immagine sono riportati i risultati inerenti a due famiglie di simulazioni; la prima è caratterizzata dall'imposizione di un profilo di velocità uniforme su Γ_{in1} e Γ_{in2} , mentre la seconda è stata ottenuta con un profilo laminare sviluppato. Questo secondo caso corrisponde al problema affrontato in questo lavoro, per cui verrà preso a riferimento e si potrà fare un confronto tra i risultati ottenuti. Dal grafico è possibile osservare l'andamento di δ con Re , individuando la transizione dal *vortex* all'*engulfment regime* attorno a $Re = 192$. Per $Re = 220$, inoltre, essi calcolano il maggior valore del livello di mescolamento, che si aggira attorno a $\delta = 0.4$. Al crescere del numero di Reynolds, per valori compresi tra 288 e 393 gli autori hanno riscontrato l'insorgenza di un moto instazionario, per il quale non riportano il valore del grado di mescolamento prodotto. Per valori di Re ancora superiori, in particolare per $Re = 432$ e $Re = 480$, essi hanno osservato il ritorno ad un moto stazionario. Il presente lavoro si basa su simulazioni condotte a $Re = 100$, $Re = 144$ e $Re = 480$, mostrando risultati in parte coincidenti ed in parte diversi da quelli descritti in [13]. Si prosegue descrivendo compiutamente ognuno dei casi.

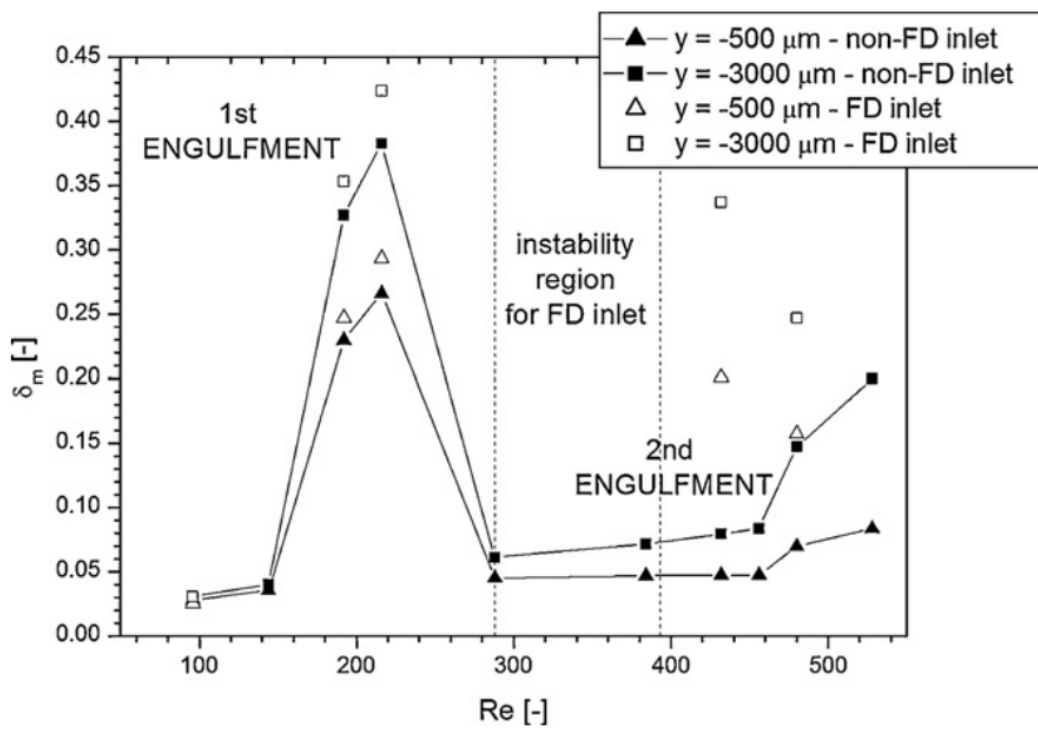


Figura 2.4: Grado di mescolamento alla sezione di uscita, δ_m , in funzione del numero di Reynolds per il microcanale studiato da Galletti et al. in [13].

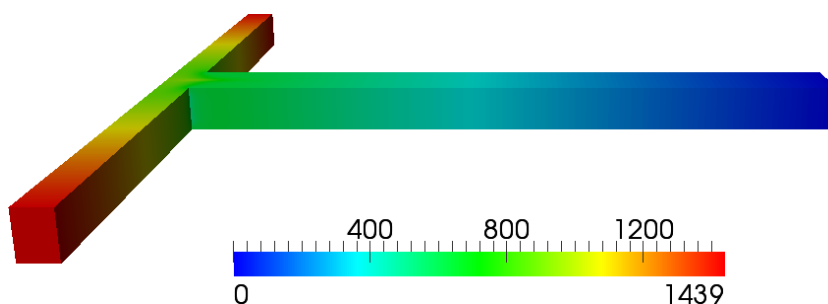


Figura 2.5: Campo di pressione, p , all'interno del microcanale per $Re = 100$, [Pa].

2.3.1 $Re = 100$

In questa sezione si mostrano i risultati ottenuti per il flusso a $Re = 100$, che corrisponde ad una velocità media, in ciascuno dei canali, di 0.42 m/s . La portata massica, Q_m , fluente nel canale di mescolamento risulta di $2.5 \times 10^{-5} \text{ Kg/s}$.

Campo di moto

In figura 2.5 si mostra il T-mixer, del quale si può apprezzare il campo di pressione. Il valore della perdita di pressione Δp , misurato come differenza dei valori di p tra gli ingressi e l'uscita, risulta $\Delta p = 1439.2 \text{ Pa}$. Tale valore è in ottimo accordo con quanto ricavato da Galletti et al. [13]. La potenza dissipata per attrito viscoso, P , è circa di $3.63 \times 10^{-5} \text{ W}$, pari ad una potenza dissipata per unità di massa, ϵ , di 130.35 W/Kg . Nelle immagini di figura 2.6 e 2.7 è possibile osservare alcune linee di corrente del campo di moto ottenute con *ParaView*; esse sono state colorate in rosso se provenienti da Γ_{in1} ed in blu se provenienti Γ_{in2} . Si nota come i due tubi di flusso rimangano segregati per tutta la lunghezza del canale di mescolamento, generando un campo di moto perfettamente simmetrico. Nella figura 2.7, che mostra le stesse linee di corrente per una vista allineata con canale di efflusso, si osservano le due coppie di vortici caratteristiche del *vortex regime*.

Campo di concentrazione

Descritto il campo di moto, non resta che osservare il campo di concentrazione che esso produce, stando alle condizioni al contorno descritte dalle (2.3). Tale campo è descritto dalle immagini di figura 2.3.1. A questo campo di concentrazione corrisponde un valore del grado di mescolamento, δ , calcolato per diverse sezioni del canale di efflusso secondo la definizione (1.25)

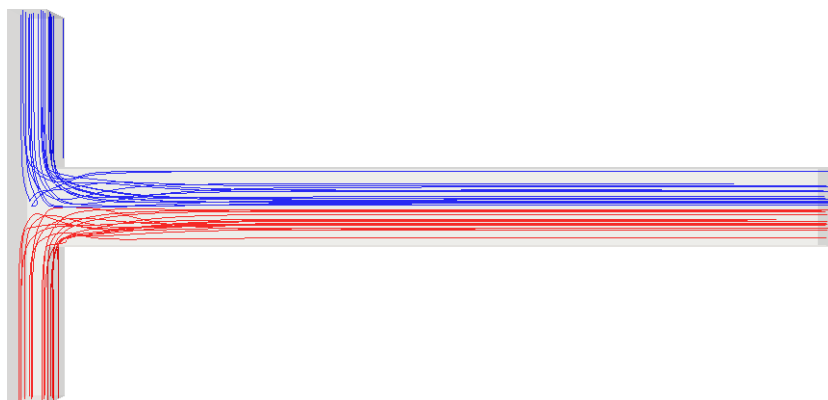


Figura 2.6: Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale per $Re = 100$.

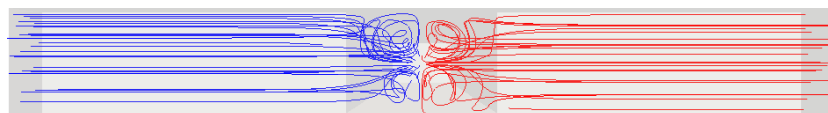


Figura 2.7: Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale per $Re = 100$.

ed il cui andamento è rappresentato in 2.9. Si indica con δ_{max} il valore di tale parametro risulta sulla sezione di uscita. Esso risulta $\delta_{max} = 0.0384$, trovandosi in ottimo accordo con il valore di figura 2.4. Purtroppo non è possibile calcolare il valore dell'efficienza energetica di mescolamento η come definita dalla (1.40), poiché la quantificazione di $\dot{\gamma}$ a partire dalla definizione è un'operazione complessa ed in genere tale parametro viene stimato indirettamente attraverso il tempo di mescolamento. Nel caso in esame però non si raggiunge mescolamento completo all'uscita e quindi non è possibile calcolare t_m .

2.3.2 $Re = 144$

Campo di moto

In figura 2.10 si mostra il campo di pressione che si instaura all'interno del canale per un numero di Reynolds di 144, corrispondente ad una velocità media di 0.6 m/s . In questo secondo caso il valore della perdita di pressione risulta $\Delta p = 2.212\text{ Pa}$. Anche tale valore si trova in accordo da quanto ricavato da Galletti et al. [13]. La potenza dissipata P è di $7.98 \times 10^{-5}\text{ W}$, pari ad una potenza dissipata per unità di massa, ϵ , di 286.42 W/Kg . Come

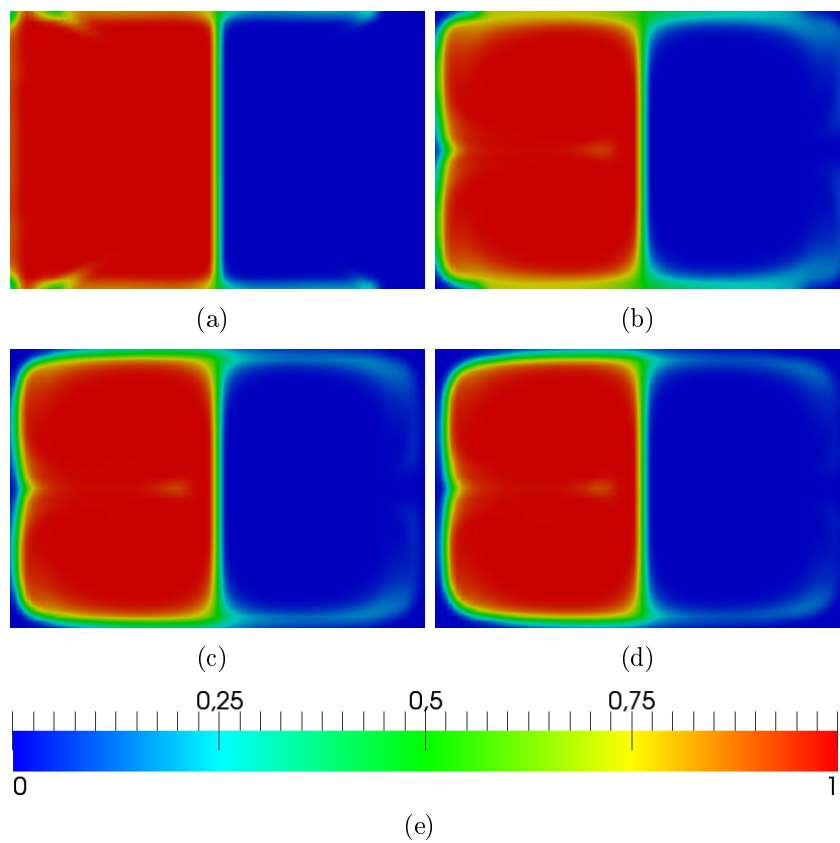


Figura 2.8: Campo di concentrazione dello scalare passivo per $Re = 100$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$.

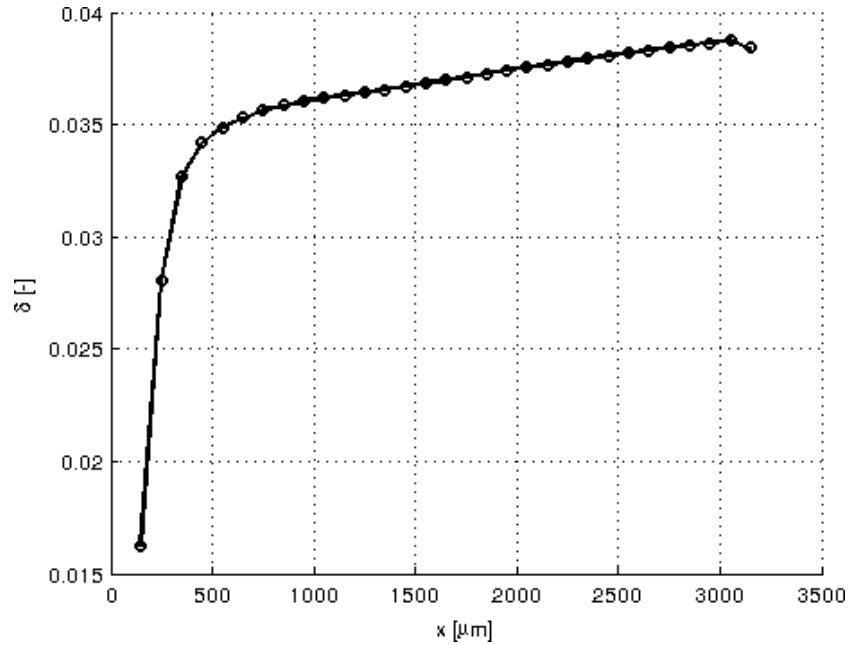


Figura 2.9: Andamento del grado di mescolamento con l'ascissa del canale di mescolamento per $Re = 100$. Nell'ultimo tratto del canale, tra $x = 3050 \mu m$ e $x = 3150 \mu m$, il valore di δ calcolato decresce; l'errore è imputabile all'influenza delle condizioni al contorno che si sono poste su Γ_{out} .

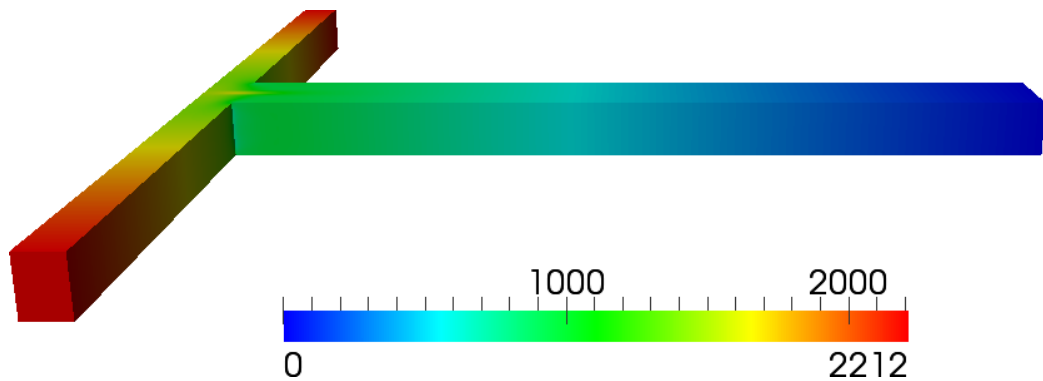


Figura 2.10: Campo di pressione, p , per $Re = 144$, [Pa].

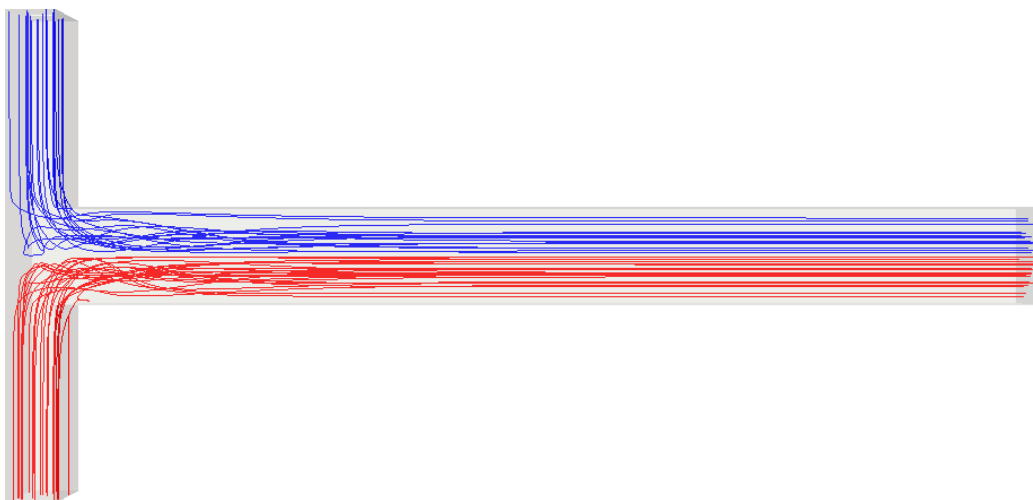


Figura 2.11: Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale per $Re = 144$.

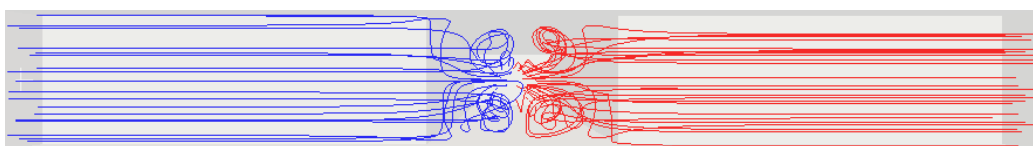


Figura 2.12: Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale per $Re = 144$.

descritto nel paragrafo precedente le immagini di figure 2.11 e 2.12 mostrano alcune linee di corrente del campo di moto. Anche in questo caso si nota che i due tubi di flusso risultano segregati sino all'efflusso, generando un campo di moto simmetrico. Nell'immagine 2.12, che mostra le stesse linee di corrente per una vista diretta come l'asse x , si osservano le stesse due coppie di vortici proprie del *vortex regime*.

Campo di concentrazione

Ricavato il campo di moto risulta immediato calcolare quello di concentrazione, descritto dalle immagini di figura 2.3.2 e dal quale si ricava l'andamento del grado di mescolamento riportato in figura 2.14. Tale parametro risulta $\delta_{max} = 0.0455$ sulla sezione di uscita e si trova anch'esso in accordo con il valore calcolato per lo stesso regime di moto da Galletti et al. in [13].

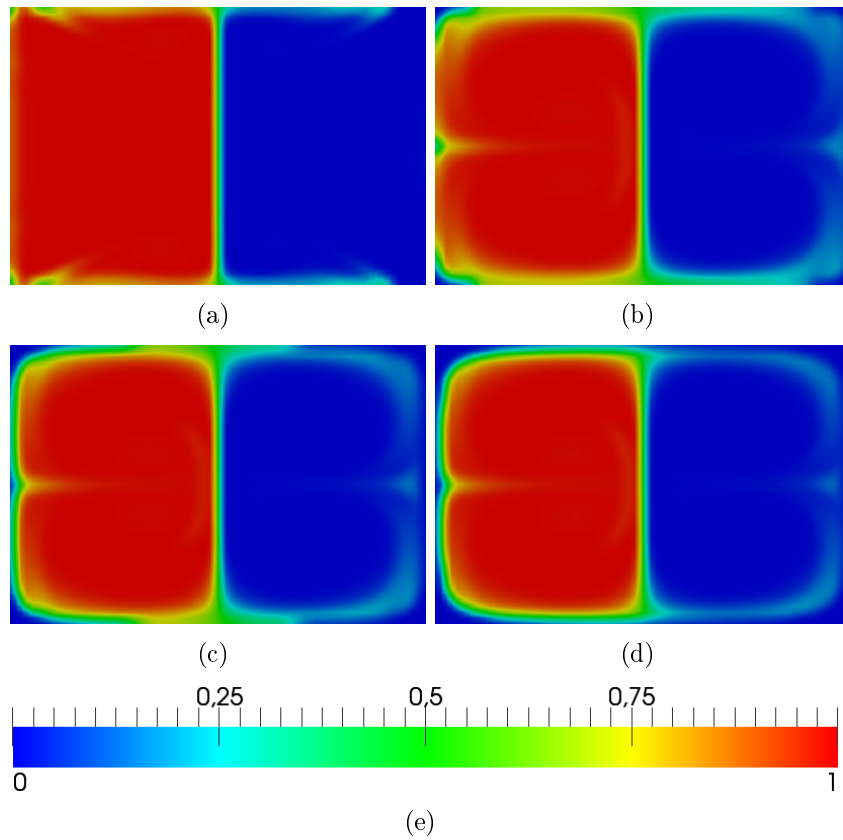


Figura 2.13: Campo di concentrazione dello scalare passivo per $Re = 144$, [-]; (a) $x = 150 \mu\text{m}$; (b) $x = 1150 \mu\text{m}$; (c) $x = 2150 \mu\text{m}$; (d) $x = 3150 \mu\text{m}$.

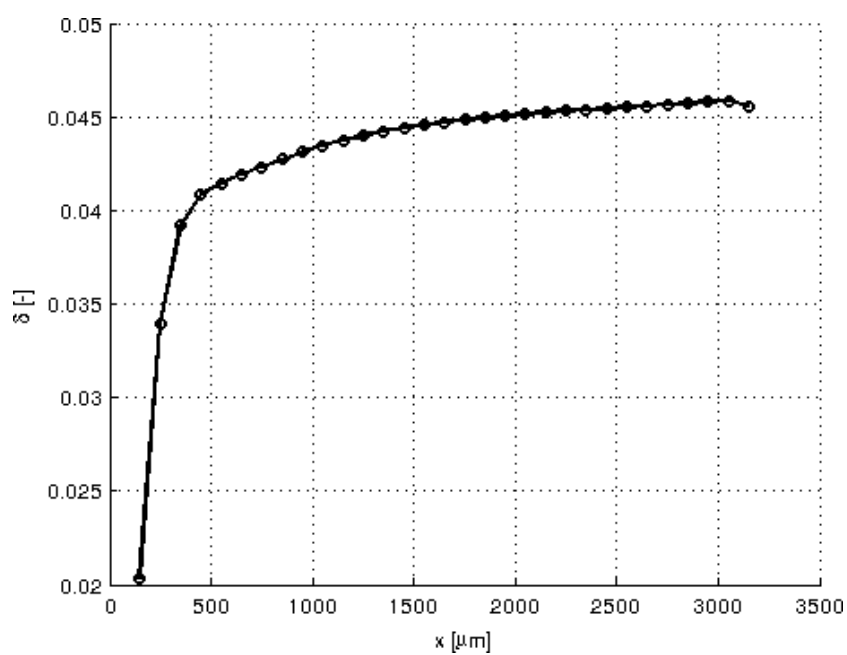


Figura 2.14: Andamento del grado di mescolamento δ con l'ascissa del canale di uscita per $Re = 144$. Nell'ultimo tratto del canale, tra $x = 3050 \mu\text{m}$ e $x = 3150 \mu\text{m}$, il valore di δ calcolato decresce; l'errore è imputabile all'influenza delle condizioni al contorno che si sono poste su Γ_{out} .

2.3.3 $Re = 480$

Questo regime di moto merita delle considerazioni particolari. Per via delle indicazioni ricavate da [13] si riteneva che anche per un numero di Reynolds di 480 il flusso all'interno del microcanale fosse stazionario; per questa ragione è stata effettuata una simulazione stazionaria, analogamente ai due casi precedenti. Tuttavia l'andamento dei residui rispetto al numero delle iterazioni ha assunto un andamento oscillante (per maggiori dettagli si rimanda l'Appendice A) e non è stato possibile ottenere convergenza numerica. Per questa ragione si è passati ad effettuarne una simulazione instazionaria, a partire da condizioni di fluido in quiete in tutto il campo di moto. Il calcolo è stato condotto per un intervallo di tempo $\Delta t = 5\text{ ms}$ con un campionamento della soluzione di 10000 Hz . Se si considera un tempo caratteristico T , calcolato con la velocità media, $V_m = 2\text{ m/s}$, e con la distanza tra gli ingressi e l'uscita del condotto, risulta $T \simeq 2.25\text{ ms}$. Poiché $\Delta t \simeq 2T$, è lecito considerare il tempo della simulazione sufficiente a descrivere l'evoluzione del campo di moto anche oltre il transitorio d'avviamento iniziale. Analizzando i risultati si è notato un comportamento della corrente instazionario e non periodico. Per questa ragione non si riportano i valori di perdita di carico e non si sono eseguite simulazioni di diffusione e trasporto dello scalare passivo, ma ci si limita a mostrare visualizzazioni del campo di moto nelle figure seguenti. Questa discussione apre di per sé un interrogativo interessante riguardo al comportamento di questo microcanale, e dei microcanali a T in generale, ad alti numeri di Reynolds, in quanto si trova in disaccordo con quanto rilevato da altri autori. Si rimanda a studi futuri il compito di dirimere la questione, dal momento che non rappresenta l'obiettivo primario di questa tesi.

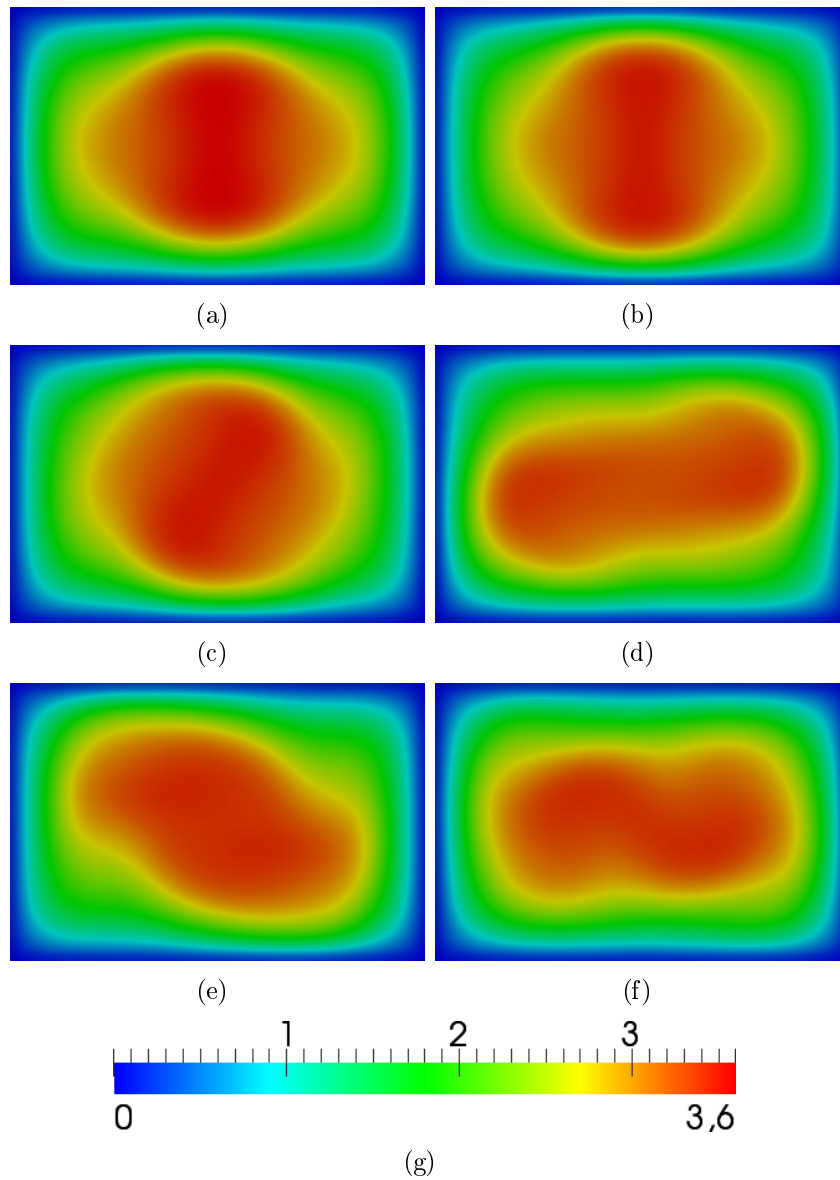


Figura 2.15: Modulo della velocità sulla sezione di uscita per $Re = 480$, $[m/s]$; (a) $t = 1.5 \text{ ms}$; (b) $t = 2 \text{ ms}$; (c) $t = 2.5 \text{ ms}$; (d) $t = 3 \text{ ms}$; (e) $t = 3.5 \text{ ms}$; (f) $t = 4 \text{ ms}$.

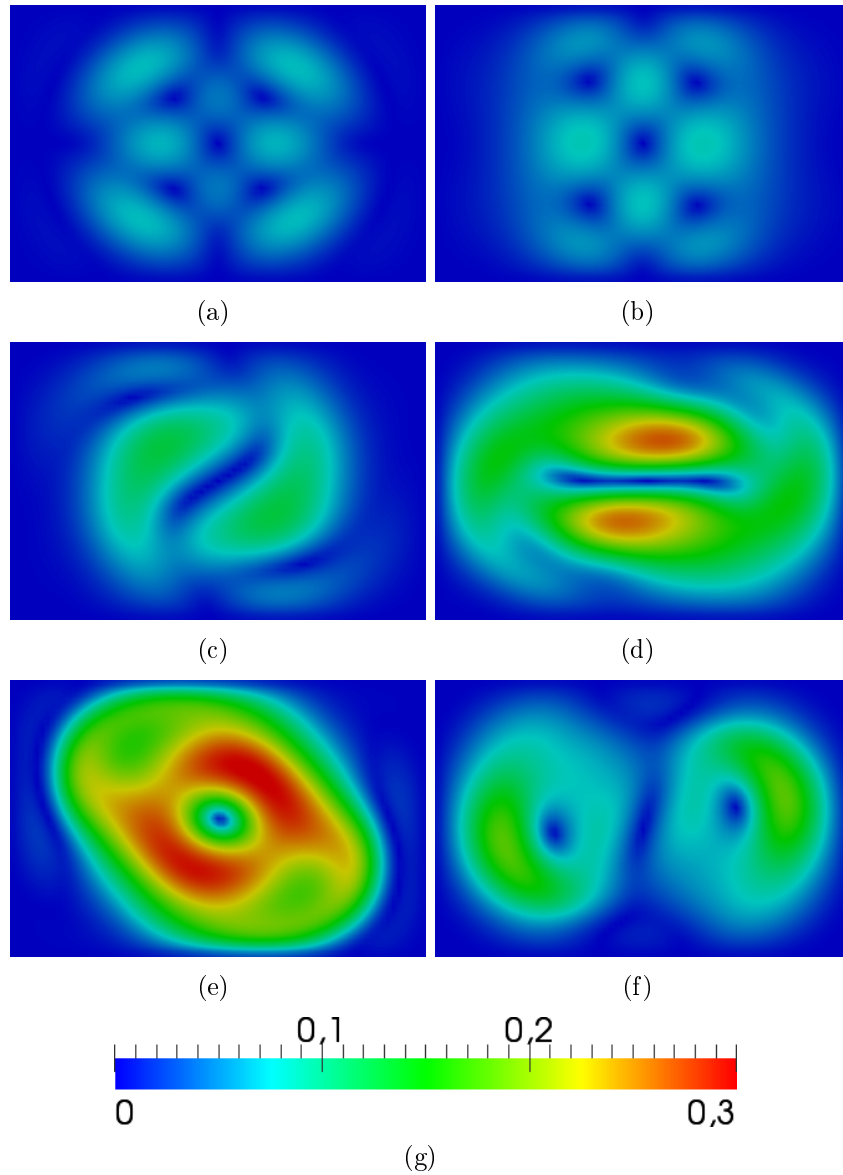


Figura 2.16: Modulo della proiezione della velocità sulla sezione di uscita per $Re = 480$, [m/s]; (a) $t = 1.5 \text{ ms}$; (b) $t = 2 \text{ ms}$; (c) $t = 2.5 \text{ ms}$; (d) $t = 3 \text{ ms}$; (e) $t = 3.5 \text{ ms}$; (f) $t = 4 \text{ ms}$.

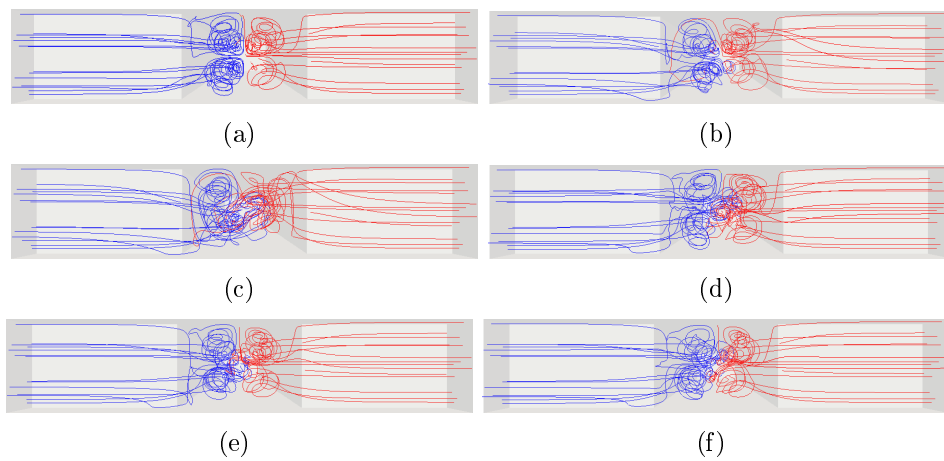


Figura 2.17: Vista, allineata al canale di mescolamento, di alcune linee di corrente del campo di moto per $Re = 480$; (a) $t = 1.5 \text{ ms}$; (b) $t = 2 \text{ ms}$; (c) $t = 2.5 \text{ ms}$; (d) $t = 3 \text{ ms}$; (e) $t = 3.5 \text{ ms}$; (f) $t = 4 \text{ ms}$.

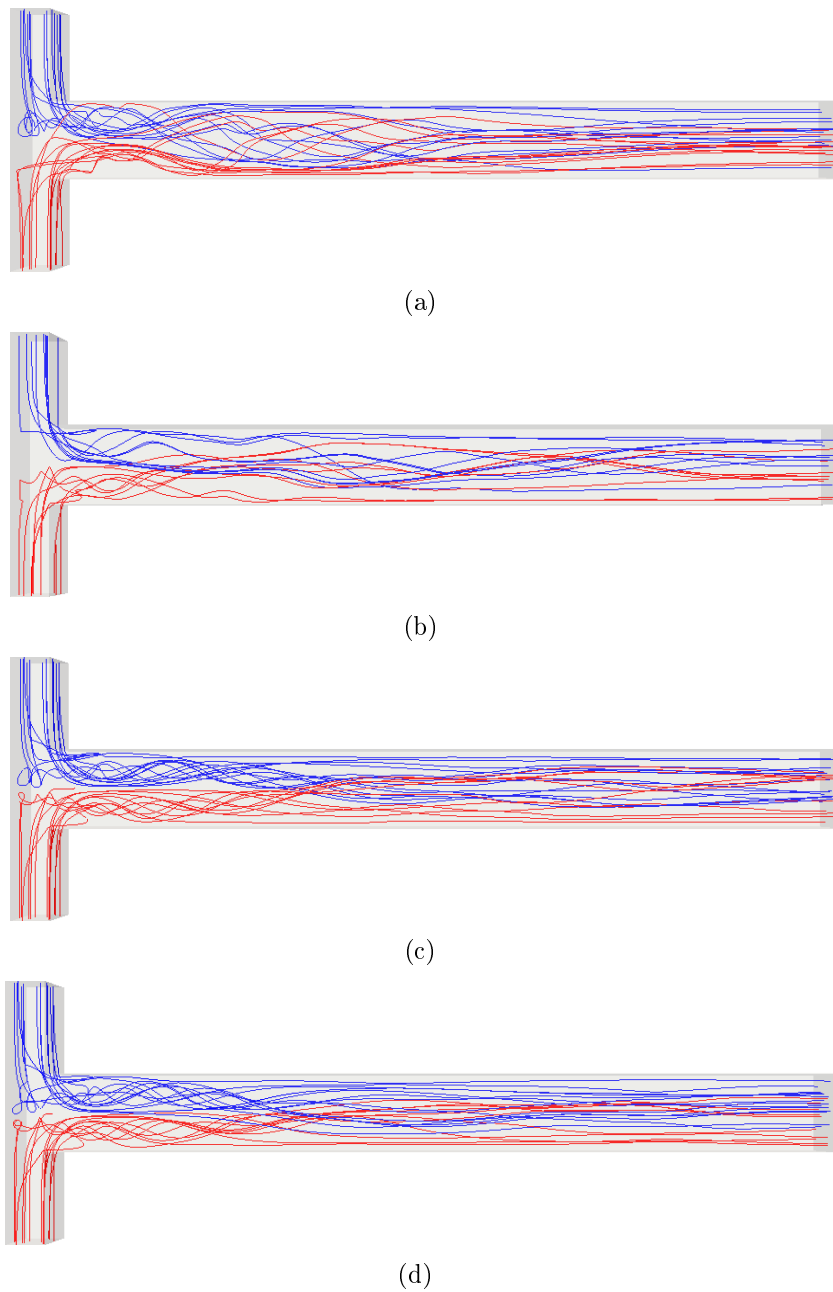


Figura 2.18: Vista di alcune linee di corrente del campo di moto per $Re = 480$; (a) $t = 2.5 \text{ ms}$; (b) $t = 3 \text{ ms}$; (c) $t = 3.5 \text{ ms}$; (d) $t = 4 \text{ ms}$.

Capitolo 3

Equazioni aggiunte

In questo capitolo, ripercorrendo quanto fatto da Othmer in [27] e da Othmer, de Villiers e Weller in [28], verrà ricavata la formulazione del problema aggiunto alle equazioni di Navier–Stokes partendo dal problema di minimizzazione di una funzione costo arbitrariamente definita. Questo approccio consentirà di ricavare la cosiddetta *sensitività superficiale*, ossia la sensibilità della cifra di merito rispetto ad una variabile progettuale.

3.1 Impostazione del problema

Supponiamo di voler minimizzare una cifra di merito J , funzione delle variabili fisiche velocità e pressione oltre che di un generico parametro di progetto β . E' possibile formulare questa richiesta sotto forma di un problema di minimizzazione vincolata, in cui il vincolo è costituito dalle equazioni di Navier–Stokes. Si intenda quindi

$$\text{minimizzare } J = J(\mathbf{v}, p; \beta) \text{ nel rispetto del vincolo } R(\mathbf{v}, p) = 0, \quad (3.1)$$

dove con \mathbf{v} e p si sono indicati la velocità e la pressione comunemente intesi e con $R(\mathbf{v}, p) = (R_1, R_2, R_3, R_4)^T$ le equazioni di governo, in questo caso le equazioni di Navier–Stokes stazionarie ed incomprimibili:

$$(R_1, R_2, R_3)^T = (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \nabla p - \nu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (3.2a)$$

$$R_4 = -\nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (3.2b)$$

Questo problema viene come di consueto trasformato nel problema di minimo di una funzione di Lagrange, L , così definita:

$$L \triangleq J + \int_{\Omega} (\mathbf{u}, q) R \, d\Omega, \quad (3.3)$$

in cui Ω indica il dominio fluido di bordo Γ , $\Gamma = \partial\Omega$, mentre come moltiplicatori di Lagrange sono stati introdotti $(\mathbf{u}, q) = (u_1, u_2, u_3, q)$, velocità e pressione aggiunti. In questa trattazione si assume che la variabile progettuale descriva il dominio, cosicché esista una diretta dipendenza di Ω da β . Per valutare la sensitività della funzione costo rispetto alla variabile di progetto β si procede calcolando la variazione totale di L rispetto a perturbazioni di \mathbf{v} , p e β . Essa risulta:

$$\delta L = \delta_\beta L + \delta_{\mathbf{v}} L + \delta_p L, \quad (3.4)$$

in cui i termini che vi compaiono hanno il seguente significato:

$$\delta_\beta L = \left(\frac{\partial J}{\partial \beta} + \int_{\Omega} (\mathbf{u}, q) \frac{\partial R}{\partial \beta} d\Omega \right) \delta \beta \quad (3.5a)$$

$$\delta_{\mathbf{v}} L = \left(\frac{\partial J}{\partial \mathbf{v}} + \int_{\Omega} (\mathbf{u}, q) \frac{\partial R}{\partial \mathbf{v}} d\Omega \right) \delta \mathbf{v} \quad (3.5b)$$

$$\delta_p L = \left(\frac{\partial J}{\partial p} + \int_{\Omega} (\mathbf{u}, q) \frac{\partial R}{\partial p} d\Omega \right) \delta p. \quad (3.5c)$$

Nella prima delle (3.5) $\delta\beta$ esprime la variazione della variabile di progetto rispetto al suo valore di riferimento $\bar{\beta}$, che a sua volta descrive il dominio di riferimento, ed è così definita:

$$\delta\beta = \beta - \bar{\beta}. \quad (3.6)$$

Dall'equazione (3.4) si legge che, oltre al termine esplicito $\delta_\beta L$ riconducibile alla variabile di progetto, sono presenti anche contributi dovuti alle variazioni di \mathbf{v} e p , poiché a variazioni di β corrispondono anche cambiamenti del campo di moto, causati dal cambiamento del dominio. Se, tuttavia, i moltiplicatori di Lagrange \mathbf{u} e q vengono scelti in modo tale che la variazione di L rispetto alle variabili di stato risulti identicamente nulla, ossia se:

$$\delta_{\mathbf{v}} L + \delta_p L = 0, \quad (3.7)$$

allora la sensitività può essere più semplicemente calcolata da:

$$\delta L = \delta_\beta L = \delta_\beta J + \int_{\Omega} (\mathbf{u}, q) \delta_\beta R d\Omega. \quad (3.8)$$

Tale relazione semplifica enormemente la trattazione e può essere considerata come l'elemento centrale del cosiddetto *metodo aggiunto*.

3.2 Derivazione delle equazioni aggiunte

Il punto di partenza per la derivazione delle equazioni aggiunte e delle corrispondenti condizioni al contorno è rappresentato dall'equazione (3.7), che, ricordando la definizione di L data dalla (3.3), è possibile riscrivere nel modo seguente:

$$\delta_v J + \delta_p J + \int_{\Omega} (\mathbf{u}, q) \delta_v R \, d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{u}, q) \delta_p R \, d\Omega = 0. \quad (3.9)$$

Se le equazioni di stato R sono le equazioni di Navier–Stokes incomprimibili e stazionarie, le loro variazioni prime rispetto ad una variazione di \mathbf{v} e p possono essere calcolate in modo immediato. Si suppongano quindi variazioni infinitesime di \mathbf{v} e p , tali che:

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \delta\mathbf{v} \quad (3.10a)$$

$$p = \bar{p} + \delta p \quad (3.10b)$$

e si sostituiscano nelle equazioni di stato R . Siano $\delta_v R$ e $\delta_p R$ definiti come:

$$\delta_v R = R(\bar{\mathbf{v}} + \delta\mathbf{v}) - R(\bar{\mathbf{v}}) \quad (3.11a)$$

$$\delta_p R = R(\bar{p} + \delta p) - R(\bar{p}). \quad (3.11b)$$

Eliminando i termini del second'ordine, si ottiene:

$$\delta_v (R_1, R_2, R_3)^T = (\delta\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \delta\mathbf{v} - \nu \nabla^2 \delta\mathbf{v} \quad (3.12a)$$

$$\delta_v R_4 = -\nabla \cdot \delta\mathbf{v} \quad (3.12b)$$

$$\delta_p (R_1, R_2, R_3)^T = \nabla \delta p \quad (3.12c)$$

$$\delta_p R_4 = 0 \quad (3.12d)$$

dove si sono posti $\delta_v \nu = 0$ e $\delta_p \nu = 0$; tali espressioni costituiscono un'affermazione esatta per flussi laminari, mentre costituiscono una comune approssimazione che prende il nome di *turbolenza congelata* per flussi turbolenti [8]. Con le variazioni appena calcolate, ora l'equazione (3.9) diventa:

$$\begin{aligned} \delta_v J + \delta_p J + \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot ((\delta\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \delta\mathbf{v} - \nu \nabla^2 \delta\mathbf{v}) \, d\Omega \\ - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \delta\mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla \delta p \, d\Omega = 0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Scomponendo J nelle sue parti di integrale sul volume e sul contorno Γ , ossia scrivendo:

$$J = \int_{\Omega} J_{\Omega} \, d\Omega + \int_{\Gamma} J_{\Gamma} \, d\Gamma, \quad (3.14)$$

è possibile riformulare l'equazione (3.13) nel modo seguente:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(-\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla q + \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial \mathbf{v}} \right) \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} \left(-\nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial p} \right) \delta p \, d\Omega + \\
& + \int_{\Gamma} \left(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial p} \right) \delta p \, d\Gamma - \int_{\Gamma} 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) \cdot \mathbf{u} \, d\Gamma + \\
& + \int_{\Gamma} \left(\mathbf{n}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{u}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) + \nu \mathbf{n} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} - q \mathbf{n} + \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial \mathbf{v}} \right) \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Gamma = 0,
\end{aligned} \tag{3.15}$$

in cui

$$\mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right). \tag{3.16}$$

L'equazione (3.15) deve essere soddisfatta per ogni coppia di variazioni $(\delta \mathbf{v}, \delta p)$ che soddisfa le equazioni di Navier–Stokes; ciò è possibile solo se si annulla ogni addendo della funzione integranda. Procedendo in questo modo, dagli integrali di volume si ricavano le equazioni aggiunte alle equazioni di Navier–Stokes e da quelli di superficie le condizioni al contorno ad esse associate. Dall'equazione (3.15) si ottengono quindi:

$$-\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla q + \nu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial \mathbf{v}} \tag{3.17a}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial p}, \tag{3.17b}$$

che, come detto, sono le equazioni di Navier–Stokes aggiunte. Procedendo analogamente coi i termini di integrale su Γ si perviene alle seguenti condizioni al contorno:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma} \left(\mathbf{n}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{u}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) + 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}) - q \mathbf{n} + \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial \mathbf{v}} \right) \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Gamma + \\
& - \int_{\Gamma} 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) \cdot \mathbf{u} \, d\Gamma = 0
\end{aligned} \tag{3.18a}$$

$$\int_{\Gamma} \left(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial p} \right) \delta p \, d\Gamma = 0. \tag{3.18b}$$

È subito possibile osservare che, sebbene lineari, le equazioni di Navier–Stokes aggiunte hanno struttura simile a quella delle equazioni primarie. Inoltre, se J non comprende contributi derivanti dall'interno del dominio, ossia se $J_{\Omega} = 0$, allora anche il campo aggiunto è a divergenza nulla. La più grande differenza tra questi due sistemi di equazioni è il segno negativo che compare di fronte al termine convettivo delle equazioni aggiunte.

3.3 Specializzazione per flussi interni

Dopo aver ricavato le equazioni aggiunte nel caso generale, si specializzano ora le loro espressioni per flussi interni. In questa categoria di problemi il bordo del dominio è usualmente diviso in tre porzioni - inlet, outlet e pareti solide - sulle quali è generalmente definita la cifra di merito J , che pertanto non contiene contributi derivanti dall'integrazione sull'interno di Ω . Sotto queste ipotesi, le equazioni aggiunte (3.17) si riducono a

$$-(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla q - \nu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (3.19a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.19b)$$

È di grande importanza osservare come queste equazioni non dipendano più da J e quindi la loro soluzione numerica non dovrà essere di volta in volta adattata alla cifra di merito utilizzata. Si procede ora rielaborando i termini di bordo delle equazioni (3.18). Se $\delta \mathbf{v}$ e \mathbf{u} sono campi a divergenza nulla e se almeno uno dei due è nullo su Γ , si può dimostrare che vale la seguente relazione:

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma} 2\nu \mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{v} - \mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) \cdot \mathbf{u}) \, d\Gamma = \\ & = \int_{\Gamma} \nu ((\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u} \cdot \delta \mathbf{v} - (\mathbf{n} \cdot \nabla) \delta \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \, d\Gamma + \\ & - \int_{\Gamma} \nabla \nu \cdot (u_n \delta \mathbf{v} - \delta v_n \mathbf{u}) \, d\Gamma, \end{aligned} \quad (3.20)$$

dove $u_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ e $v_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$. Per flussi laminari ν contiene solo la viscosità molecolare ed il suo gradiente è nullo. Le condizioni al bordo (3.18) allora si riducono a:

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma} \left(\mathbf{n} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{u} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) + \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u} - q \mathbf{n} + \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial \mathbf{v}} \right) \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Gamma + \\ & - \int_{\Gamma} \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) \delta \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} \, d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (3.21a)$$

$$\int_{\Gamma} \left(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial p} \right) \delta p \, d\Gamma = 0. \quad (3.21b)$$

Si specifica ora, per concludere, l'espressione delle condizioni al contorno da applicare alle variabili aggiunte su Γ_{in} , Γ_{out} e Γ_w , sotto l'ipotesi che $\delta \mathbf{v}$ e δp siano tali che le quantità perturbate $\bar{\mathbf{v}} + \delta \mathbf{v}$ e $\bar{p} + \delta p$ soddisfino le equazioni di Navier–Stokes.

3.3.1 Inlet e parete

Su Γ_{in} e Γ_w la velocità viene solitamente imposta: condizione di non scivolamento alle pareti e velocità assegnata agli inlet. Per questa ragione la perturbazione di velocità in queste regioni di Γ sono nulle e il primo integrale della prima delle equazioni viene meno. Ora, poiché

$$0 = \nabla \delta \mathbf{v} = (\mathbf{n} \cdot \nabla) \delta v_n + \nabla_{\parallel} \cdot \delta \mathbf{v}_t, \quad (3.22)$$

e siccome $\delta \mathbf{v} = 0$ su Γ_{in} e Γ_w - avendo indicato con \mathbf{v}_t e ∇_{\parallel} le componenti planari dei vettori \mathbf{v} e ∇ - si può scrivere che

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \delta v_n = 0, \quad (3.23)$$

da cui

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \delta \mathbf{v} = (\mathbf{n} \cdot \nabla) \delta \mathbf{v}_t. \quad (3.24)$$

Le equazioni (3.21) si riducono a:

$$\int_{\Gamma} \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) \delta \mathbf{v}_t \cdot \mathbf{u}_t \, d\Gamma = 0 \quad (3.25a)$$

$$\int_{\Gamma} \left(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial p} \right) \delta p \, d\Gamma = 0 \quad (3.25b)$$

Si può ora concludere che le condizioni al contorno da applicare a parete ed agli inlet sono:

$$\mathbf{u}_t = 0 \quad (3.26a)$$

$$u_n = -\frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial p}. \quad (3.26b)$$

Si noti che queste condizioni non comprendono relazioni per la pressione aggiunta q , poiché essa entra nelle equazioni aggiunte allo stesso modo in cui la pressione p entra nelle equazioni di Navier–Stokes. Su queste superfici pertanto si impongono, similmente a quanto fatto in precedenza, condizioni di gradiente normale nullo per la pressione, in modo da garantire la buona posizione del problema.

3.3.2 Outlet

Per quel che concerne la velocità diretta le condizioni al contorno da imporre sono le (2.2) e quindi su Γ_{out} vale:

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{v} = 0. \quad (3.27)$$

Delle equazioni (3.21) il secondo integrale della prima equazione si elimina, mentre la seconda equazione è identicamente soddisfatta supponendo che su Γ_{out} δp sia nulla. Il primo termine della prima equazione può essere annullato solo ponendone a zero l'integranda:

$$\mathbf{n}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + \nu(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u} - q\mathbf{n} + \frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}} = 0. \quad (3.28)$$

Scomponendo l'equazione (3.28) nelle sue componenti normali e planari si ottiene:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + u_n v_n + \nu(\mathbf{n} \cdot \nabla) u_n - q + \frac{\partial J_\Gamma}{\partial v_n} = 0 \quad (3.29a)$$

$$v_n \mathbf{u}_t + \nu(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t + \frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}_t} = 0. \quad (3.29b)$$

La componente normale dell'equazione (3.29) può essere soddisfatta scegliendo la pressione aggiunta q nel modo seguente:

$$q = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + u_n v_n + \nu(\mathbf{n} \cdot \nabla) u_n + \frac{\partial J_\Gamma}{\partial v_n} \quad (3.30)$$

mentre la componente tangenziale è utilizzata per ricavare la componente planare della velocità aggiunta \mathbf{u} . Per il gradiente normale della componente u_n la continuità impone che

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) u_n = \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla_{\parallel} \cdot \mathbf{u}_t = -\nabla_{\parallel} \cdot \mathbf{u}_t \quad (3.31)$$

condizione che completa le condizioni al contorno per la velocità aggiunta.

3.3.3 Riassumendo

Riassumendo, per un qualunque problema per cui sia $\Gamma_\Omega = 0$, le equazioni aggiunte si presentano nella forma:

$$-(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla q - \nu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (3.32a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.32b)$$

Le condizioni da imporre su Γ_{in} Γ_w sono:

$$\mathbf{u}_t = 0 \quad (3.33a)$$

$$u_n = -\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p} \quad (3.33b)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla q = 0. \quad (3.33c)$$

Infine, le condizioni per Γ_{out} sono:

$$q = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + u_n v_n + \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) u_n + \frac{\partial J_\Gamma}{\partial v_n} \quad (3.34a)$$

$$0 = v_n \mathbf{u}_t + \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t + \frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}_t}. \quad (3.34b)$$

3.4 Sensitività superficiale

Definite le equazioni aggiunte e ricavatene le opportune condizioni al bordo, che traducono l'obiettivo di minimizzare una data quantità di interesse, è possibile ricavare un campo scalare di grande interesse: la *sensitività superficiale*. Essa rappresenta la sensibilità di J rispetto alla variabile di progetto β . Si supponga di voler ottimizzare la forma del dominio attraverso la sovrapposizione di spostamenti infinitesimi della parete solida rispetto alla geometria di riferimento. Sia dunque β tale campo di spostamenti, assunti positivi se uscenti dal dominio fluido, ossia concordi alla normale ad Ω . Richiamando l'espressione (3.8) vista in precedenza, possiamo scrivere:

$$\delta_\beta L = \delta_\beta J + \delta_\beta \int_\Omega (\mathbf{u}, q) R \, d\Omega. \quad (3.35)$$

Il primo termine rappresenta la dipendenza esplicita di J rispetto a β e non è nullo se la funzione costo contiene valutazioni sulla superficie che deve essere modificata. Tuttavia, nel caso che interessa questa tesi e come spesso accade per flussi interni, J è definita tramite valutazioni sulle sezioni Γ_{in} e Γ_{out} , cosicché il contributo di questo termine svanisce. La valutazione del secondo termine dell'equazione (3.35) è invece più complessa, dal momento che non richiede solamente la soluzione del sistema aggiunto, ma anche informazioni sull'influenza della deformazione superficiale sulle equazioni di Navier–Stokes. Trasformando l'integrale di volume in un integrale di superficie, è possibile ridurre la valutazione di questo termine ad un semplice *post-processing* dei risultati dei sistemi diretto e aggiunto.

Dal momento che ad ogni variazione ammissibile di \mathbf{v} e p corrisponde una variazione di R nulla,

$$\delta R = 0 \iff \delta_\beta R + \delta_{\mathbf{v}} R + \delta_p R = 0 \quad (3.36)$$

è possibile ricavare la sensitività superficiale come:

$$\delta_\beta L = \delta_\beta J - \int_\Omega (\mathbf{u}, q) \delta_{\mathbf{v}} R \, d\Omega - \int_\Omega (\mathbf{u}, q) \delta_p R \, d\Omega. \quad (3.37)$$

Per riformulare i termini di integrale di volume è possibile fare ricorso a quanto già ottenuto nei paragrafi precedenti. Pertanto:

$$\begin{aligned}
\delta_\beta L = & \delta_\beta J - \int_\Gamma \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \delta p \, d\Gamma + \\
& - \int_\Gamma (\mathbf{n}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{u}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) + 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}) - q\mathbf{n}) \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Gamma + \\
& - \int_\Gamma \nu \mathbf{n} \nabla^2 \delta \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} \, d\Gamma + \int_\Omega \nabla \cdot \mathbf{u} \delta p \, d\Omega + \\
& + \int_\Omega (\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla q) \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Omega.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Se la cifra di merito non contiene integrali di volume, ossia se $J_\Omega = 0$ come supposto sinora, allora i termini di volume dell'equazione precedente svaniscono poiché \mathbf{u} e q soddisfano il sistema di equazioni aggiunte. Si perviene quindi alla seguente espressione per la variazione $\delta_\beta L$:

$$\begin{aligned}
\delta_\beta L = & \delta_\beta J - \int_\Gamma \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \delta p \, d\Gamma + \\
& - \int_\Gamma (\mathbf{n}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{u}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) + 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}) - q\mathbf{n}) \cdot \delta \mathbf{v} \, d\Gamma + \\
& + \int_\Gamma 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\delta \mathbf{v}) \cdot \mathbf{u} \, d\Gamma.
\end{aligned} \tag{3.39}$$

A questo punto, poiché $\delta \mathbf{v}$ e δp sono incognite, occorre trovarne un'approssimazione. Si esprimono $\delta \mathbf{v}$ e δp attraverso un'espansione in serie di Taylor troncata al primo ordine, come suggerito per primi da Soto e Löhner in [34]:

$$\delta \mathbf{v} = \beta (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \mathcal{O}(\beta^2) \tag{3.40a}$$

$$\delta p = \beta (\mathbf{n} \cdot \nabla) p + \mathcal{O}(\beta^2). \tag{3.40b}$$

Per flussi interni, l'unica porzione di bordo soggetta a spostamenti β non nulli è chiaramente Γ_w . Parallelamente, le funzioni costo J in genere non comprendono integrazioni su Γ_w così come è già stato osservato. Queste due affermazioni portano a concludere che non esiste esplicita dipendenza di J rispetto a β , $J/\beta = 0$ e che deve essere $\mathbf{u} = 0$ sulle pareti solide. L'espressione (3.39) si riduce a:

$$\delta_\beta L = - \int_{\Gamma_w} (2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}) - q\mathbf{n}) \beta (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{v} \, d\Gamma. \tag{3.41}$$

Per semplificare quest'ultima espressione, si sostituisce il termine $2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u})$ con

$$2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}) = (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}). \tag{3.42}$$

Considerando che $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ in Ω e che $\mathbf{u} = 0$ alle pareti, si deduce che:

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) u_n = 0. \quad (3.43)$$

Usando ancora l'osservazione che $u_n = 0$ alle pareti, si nota che:

$$\nabla (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) = \mathbf{n} (\mathbf{n} \cdot \nabla) u_n + \nabla_{\parallel} u_n = 0. \quad (3.44)$$

Sia quindi

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) = (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t. \quad (3.45)$$

Similmente

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{v} = (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{v}_t \quad (3.46)$$

e poiché

$$\mathbf{n} \cdot ((\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{v}_t) = 0 \quad (3.47)$$

è finalmente possibile scrivere la variazione di L come:

$$\delta_{\beta} L = - \int_{\Gamma_w} \beta \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{v}_t. \quad (3.48)$$

Concludendo, l'espressione della sensitività ad uno spostamento β verso l'esterno del dominio fluido di una porzione di bordo di superficie A è:

$$\frac{\partial L}{\partial \beta} = -A \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{v}_t. \quad (3.49)$$

3.5 Solutore

All'interno della suite di OpenFOAM è disponibile un solutore chiamato *adjointShapeOptimizationFoam*, implementato dagli autori di [27] e [28]. Ispirato dagli articoli da cui è tratto, questo solutore implementa un algoritmo per ottenere l'ottimizzazione topologica della geometria interna di un condotto. Per far ciò esso modifica il canale attraverso un campo di porosità interno che mira a penalizzare le celle ritenute controproducenti alla luce della funzione costo adottata. Il solutore risolve ad ogni iterazione sia il sistema diretto che quello aggiunto, aggiornando il campo di porosità sulle indicazioni dei dati del passo precedente. Siccome l'intento di questo lavoro è diverso si è scelto qui di implementare un nuovo solutore, che risolva il solo sistema aggiunto sulla base di un campo di velocità diretta già noto e senza termini di porosità nell'equazione del momento. Il nuovo solutore, *adjointTChannelFoam*, si basa sullo stesso codice di *adjointShapeOptimizationFoam*, che a sua volta è tratto da *simpleFoam*. Dal momento che le equazioni aggiunte non dipendono

dalla cifra di merito scelta, tale solutore non presenta peculiarità particolari oltre a quelle sopra descritte, ma offre una maggiore semplicità e velocità, essendo specificatamente adattato agli scopi di questo lavoro. Le condizioni al contorno sono invece state implementate ex-novo.

Capitolo 4

Risultati

In questo capitolo si definisce una funzione costo ritenuta opportuna per migliorare il mescolamento e si ricavano le condizioni al contorno che ne derivano. Risolto il flusso aggiunto, la sensitività superficiale suggerisce una piccola modifica alla geometria del microcanale, che si mostra determinare un sostanziale cambiamento del campo di moto nel condotto, con miglioramento delle prestazioni.

4.1 Scelta della funzione costo

Di tutto il metodo di ottimizzazione geometrica basato sulle equazioni aggiunte, la definizione della funzione costo J è l'unico passo affidato completamente all'iniziativa del progettista [29]. La definizione (3.1), infatti, impone unicamente che J debba essere funzione di \mathbf{v} , p e della variabile di progetto β , senza alcun'altra restrizione. Per questa stessa ragione, sebbene lo scopo del presente lavoro sia quello di migliorare il rendimento del microcanale in termini di mescolamento, non è possibile introdurre in J una dipendenza esplicita da δ o dalla concentrazione c . La scelta della cifra di merito è quindi del tutto arbitraria e si può basare unicamente sulla conoscenza del fenomeno a cui la procedura si vuole applicare. Una scelta di primo tentativo, che tuttavia non è l'unica possibile e che costituisce il primo passo di una più attenta analisi, può essere la seguente:

$$J \triangleq \int_{\Gamma_{out}} \frac{k}{\|\mathbf{r} \times \mathbf{v}_t\|^2} d\Gamma \quad (4.1)$$

in cui \mathbf{r} è il vettore posizione spiccato dal centro di Γ_{out} e dove si è introdotta la costante $k = 1 \text{ m}^7/\text{s}^5$ per ragioni di consistenza dimensionale. Si noti che la quantità

$$\mathbf{m} = \mathbf{r} \times \mathbf{v}_t \quad (4.2)$$

è il vettore *momento* della velocità planare sulla sezione di uscita. Definire J_Ω come l'inverso del modulo di tale grandezza significa mirare a massimizzarla, conferendo al moto delle particelle fluide nel canale di mescolamento una componente rotatoria attorno all'asse del canale stesso. La scelta di tale espressione per J_Ω deriva dall'osservazione che il mescolamento nel canale aumenta, nel regime *engulfment*, in virtù della capacità delle due correnti fluide di avvolgersi l'una sull'altra.

4.1.1 Derivazione delle condizioni al contorno

Definita J , le derivate necessarie per l'imposizione delle condizioni al contorno, giustificate nei paragrafi precedenti, sono:

$$\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p} = 0 \quad (4.3a)$$

$$\frac{\partial J_\Gamma}{\partial v_n} = 0 \quad (4.3b)$$

$$\frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}_t} = -2 \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{r}}{\|\mathbf{r} \times \mathbf{v}_t\|^3}. \quad (4.3c)$$

Le condizioni al contorno per il sistema aggiunto (3.17), specifiche per la funzione costo adottata, risultano:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= 0 \\ \nabla q \cdot \mathbf{n} &= 0 \end{aligned}$$

sulle sezioni di inlet ed a parete, mentre si impone:

$$\begin{aligned} 0 &= v_n \mathbf{u}_t + \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t - 2 \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{r}}{\|\mathbf{r} \times \mathbf{v}_t\|^3} \\ q &= \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + u_n v_n + \nu (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t \end{aligned}$$

sulla sezione d'uscita.

4.1.2 Aspetti numerici

Ricavate le condizioni al bordo per il problema aggiunto non resta che implementarle numericamente, così da poter risolvere il campo di moto. Per far questo si sfrutta una caratteristica chiave di OpenFOAM, ossia l'accessibilità al codice, dei quali si riportano qui solamente le righe significative. La seconda delle (4.5) è molto semplice ed è esplicitata rispetto alla variabile q su cui imporre la condizione. Per questa ragione la sua implementazione è immediata e risulta:

```
operator == ((Up & Uap) + nuw*snGradUan
+ (phiap/patch().magSf())*(phip/patch().magSf()));
```

In questa riga di codice `Up & Uap` traduce il termine $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$, `nuw*snGradUan` è il termine di gradiente normale ed infine la parte rimanente traduce il termine $u_n v_n$, in cui le velocità normali sono ricavate a partire dai flussi `phiap` e `phip`. Per la seconda delle (4.5), riguardante la velocità aggiunta, è necessario prima discretizzare il termine di gradiente, poiché contiene la stessa variabile su cui imporre la condizione, \mathbf{u} . Si indichi con \mathbf{u}_{t_w} il valore assunto dalla variabile sulla superficie di uscita, mentre sia $\mathbf{u}_{t_{w-1}}$ il suo valore nelle celle adiacenti all'interno del dominio. Il termine $(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t$ si discretizza con uno schema alle differenze del prim'ordine scrivendo:

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u}_t \simeq \frac{\mathbf{u}_{t_w} - \mathbf{u}_{t_{w-1}}}{h}, \quad (4.6)$$

in cui h indica la distanza tra i centroidi di due celle contigue in direzione normale al bordo. Si può quindi riscrivere la seconda delle (4.5) nel modo seguente:

$$\mathbf{u}_{t_w} = \frac{1}{v_n - \nu/h} \left(-\frac{\nu}{h} \mathbf{u}_{t_{w-1}} + 2 \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{r}}{\|\mathbf{r} \times \mathbf{v}_t\|^3} \right). \quad (4.7)$$

Numericamente l'espressione (4.7) si esprime nel modo seguente:

```
vectorField::operator =
((phiap*patch().Sf())/ (sqr(patch().magSf())))
+ (1/(Un + nd))*(nd*Uac_t + 2*(i^r)/((pow((mag(r^Utangente)),3))
+ SMALL)));
```

Si noti che le (4.5) non impongono su Γ_{out} alcuna condizione per u_n , cosicché essa non ha vincoli. Si noti anche che, nel tratto di codice citato, tale condizione è tradotta con $\mathbf{u} = u_n \mathbf{n} + \overline{\mathbf{u}_t}$, ossia imponendo la condizione su \mathbf{u}_t nel modo indicato e scrivendo $u_n = u_n$:

```
(phiap*patch().Sf())/ (sqr(patch().magSf()))
```

per la componente normale alla superficie, così che questa condizione sia identicamente soddisfatta.

4.2 Sensitività superficiale

Si ricordi a questo punto che la sensitività superficiale, espressa dall'equazione (3.49), risulta funzione della velocità \mathbf{v} e della sua omologa aggiunta \mathbf{u} ,

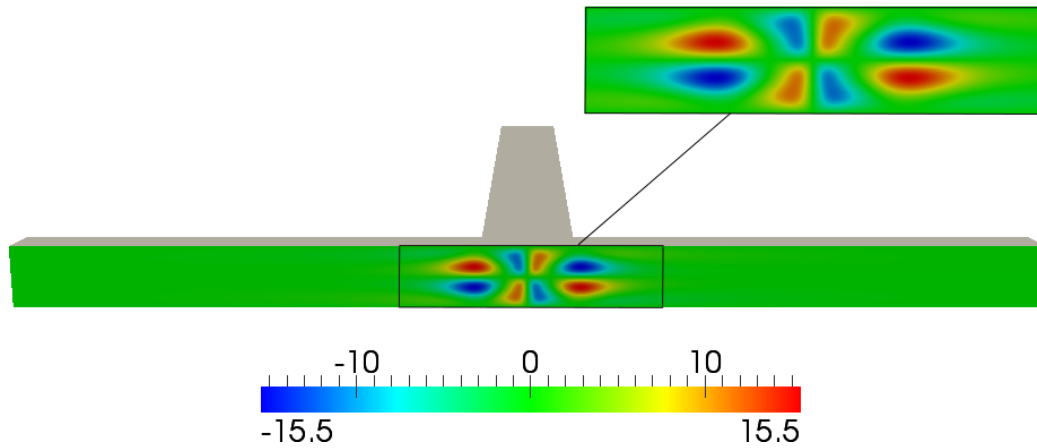


Figura 4.1: Valore di $\partial J/\partial\beta$ per i punti della parete del canale avente normale discorde all'asse x , [m^4s^{-3}].

oltre che di A ed ν che sono parametri scalari costanti. Dunque, fissato un certo valore del numero di Reynolds e note \mathbf{v} ed \mathbf{u} , è possibile ricavare la corrispondente mappa di sensitività definita per ogni punto delle pareti del canale. I valori positivi di tale grandezza indicano che la funzione costo diminuirebbe per spostamenti della parete verso l'interno del dominio, mentre aumenterebbe per spostamenti verso l'esterno. Per le regioni in cui la sensitività assume valori negativi, invece, l'effetto della deformazione è opposto.

4.2.1 $Re = 100$

In figura 4.1 si mostrano i valori di $\partial J/\partial\beta$ sulla parete del canale che ne presenta i valori in modulo maggiori e avente normale discorde all'asse x per il flusso a $Re = 100$. Si può notare come la sensitività presenti dei valori massimi, in modulo, spazialmente circoscritti. Spostamenti della parete solida in tale regione si rifletteranno quindi in maggiori variazioni della funzione costo.

Sulla base delle indicazioni fornite da questo campo di sensitività superficiale è possibile operare una modifica geometrica delle pareti del canale. Nell'ottica di testare a fondo le potenzialità dell'approccio aggiunto si sceglie di applicare una deformazione geometrica molto piccola, in cui lo spostamento del bordo del dominio sia confrontabile con la dimensione delle celle. Si decide, a questo punto, di traslare i nodi delle celle in direzione normale alla parete e proporzionalmente al valore puntuale di L/β . Questo processo è detto *morphing* della mesh e viene realizzato attraverso una funzione

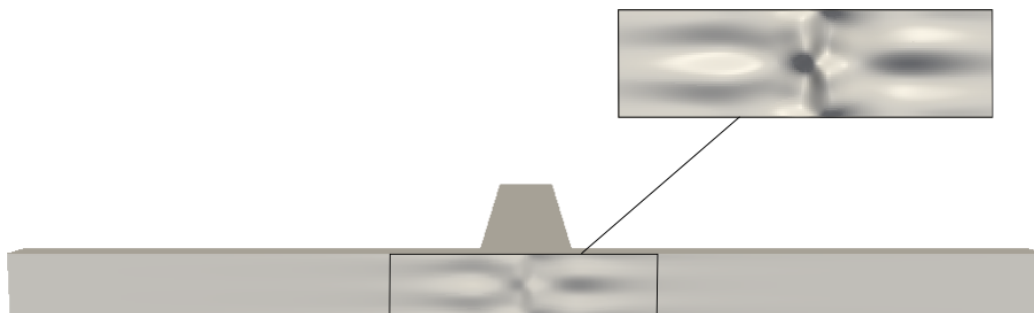


Figura 4.2: Parete del canale avente normale discorde all'asse x deformata; nell'ingrandimento si mostra una defomazione con la medesima forma, ma tripla negli spostamenti dei singoli punti, al fine di renderla più facilmente apprezzabile.

di OpenFOAM chiamata *moveDynamichMesh*, che consente di deformare la griglia semplicemente assegnando lo spostamento dei singoli nodi di bordo. Il valore massimo di tale campo di spostamenti è una scelta progettuale; qui è pari a $8 \mu m$, corrispondente alla dimensione di due celle e a circa $1/20$ del diametro idraulico dei canali di inlet. In figura 4.2 si mostra la parete deformata.

Per valutare quanto efficace risulti il processo di morphing, in figura 4.3 si mostra un confronto qualitativo tra il campo di sensitività ed il campo di spostamenti dei nodi di griglia della parete. Si nota la perfetta corrispondenza tra la deformazione desiderata e quella effettivamente ottenuta. A conferma di quanto lieve sia la deformazione introdotta può essere utile calcolare la variazione di volume del dominio. Sia V il volume del canale e sia V_{mod} il volume dopo la deformazione. Definendo $\Delta V = V_{mod} - V$, la variazione risulta, normalizzata rispetto al volume originario del canale:

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{1.94 \times 10^{-18}}{2.79 \times 10^{-10}} = \mathcal{O}(10^{-8}) , \quad (4.8)$$

poiché gli spostamenti verso l'interno e verso l'esterno del dominio tendono a compensarsi quasi totalmente tra loro. Per apprezzare invece lo scostamento geometrico dalla configurazione di riferimento, può essere utile calcolare ΔV considerando il valore assoluto dei spostamenti dei punti della parete. Indicando con ΔV_{abs} tale variazione, si calcola:

$$\frac{\Delta V_{abs}}{V} = \frac{3.91 \times 10^{-13}}{2.79 \times 10^{-10}} = 1.4 \times 10^{-3} , \quad (4.9)$$

in ogni caso nell'ordine dello 0.1% del volume totale e quindi minima.

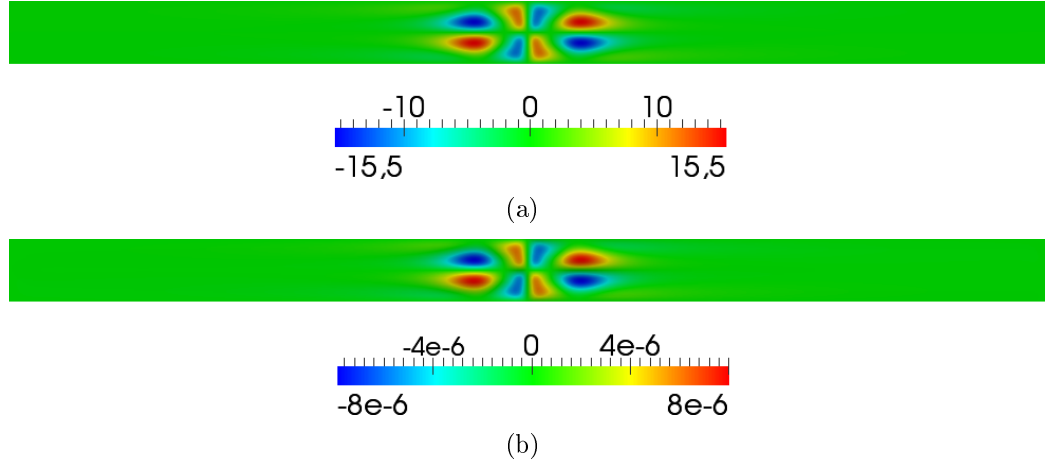


Figura 4.3: Confronto tra il valore di sensitività, $[m^4s^{-3}]$, (a), e lo spostamento dei nodi di griglia rispetto alla condizione indeformata, $[\mu m]$, (b).

4.2.2 $Re = 144$

L'immagine di figura 4.4 mostra invece il campo di $\partial J/\partial\beta$ sulla medesima parete del canale per il flusso a $Re = 144$. Sulla scorta di queste indicazioni si esegue il morphing analogamente a quanto fatto il precedenza. Lo spostamento dei nodi in direzione normale alla parete è, anche in questo caso, pari a circa $1/20$ del diametro idraulico dei canali di inlet nel punto di massima deviazione. Ricalcolando il valore di ΔV , si ottiene:

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{2.9 \times 10^{-17}}{2.79 \times 10^{-10}} = \mathcal{O}(10^{-7}), \quad (4.10)$$

mentre la variazione di volume in modulo risulta:

$$\frac{\Delta V_{abs}}{V} = \frac{7.01 \times 10^{-13}}{2.79 \times 10^{-10}} = 2.25 \times 10^{-3}, \quad (4.11)$$

anche in questo caso minima rispetto al volume totale.

4.3 Campi di moto nel dominio modificato

In questa sezione si mostrano i risultati delle simulazioni all'interno dei due canali deformati, ponendo particolare attenzione alle variazioni dei campi di moto in confronto ai rispettivi omologhi nella geometria di riferimento.

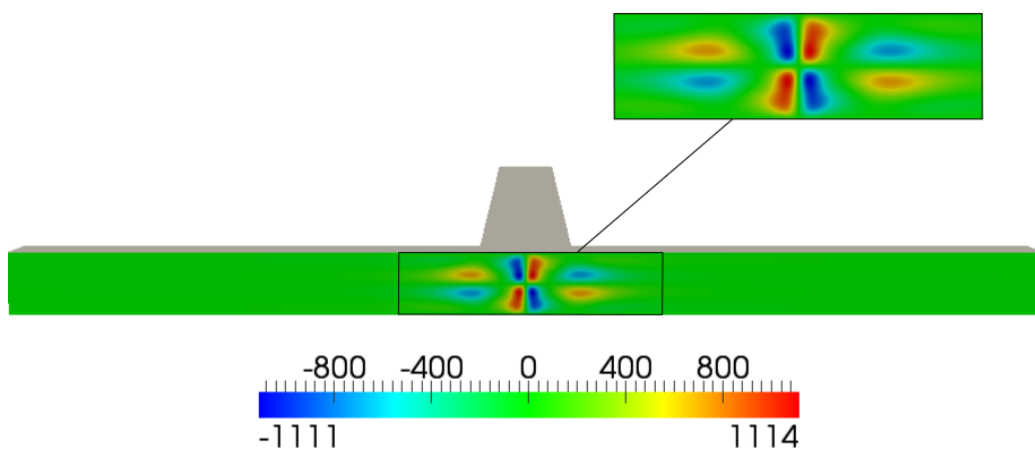


Figura 4.4: Valore di $\partial J/\partial\beta$ per i punti della parete del canale avente normale discorde all'asse x a $Re = 144$, [m^4s^{-3}].

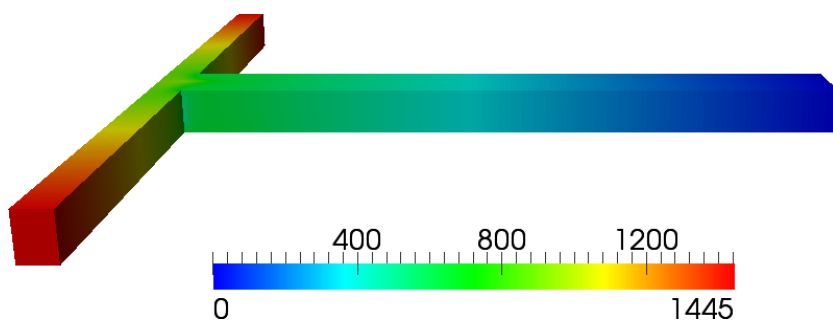


Figura 4.5: Campo di pressione, p , all'interno della geometria deformata per $Re = 100$, [Pa].

4.3.1 $Re = 100$

Come è stato fatto nel Capitolo 1 si comincia la descrizione mostrando il campo di pressione che si instaura nel nuovo microcanale. Si osservi in figura 4.5 il campo di pressione per il micromixer deformato e per un flusso a $Re = 100$. Il valore di perdita di carico in questa nuova geometria, Δp_{mod} , è di $\Delta p_{mod} = 1445 Pa$; ne risulta una potenza dissipata pari a $P_{mod} = 3.64 \times 10^{-5} W$, corrispondente ad una potenza dissipata specifica, ϵ_{mod} , di $130.88 W/Kg$. Data la modesta entità della deformazione geometrica apportata si riscontrano incrementi piccolissimi della perdita di carico. È possibile quantificare tale aumento in questi termini:

$$\frac{\Delta p_{mod} - \Delta p}{\Delta p} = \frac{(1444.8 - 1439.2) Pa}{1439.2 Pa} = \frac{5.6 Pa}{1439.2 Pa} = 0.38\%. \quad (4.12)$$

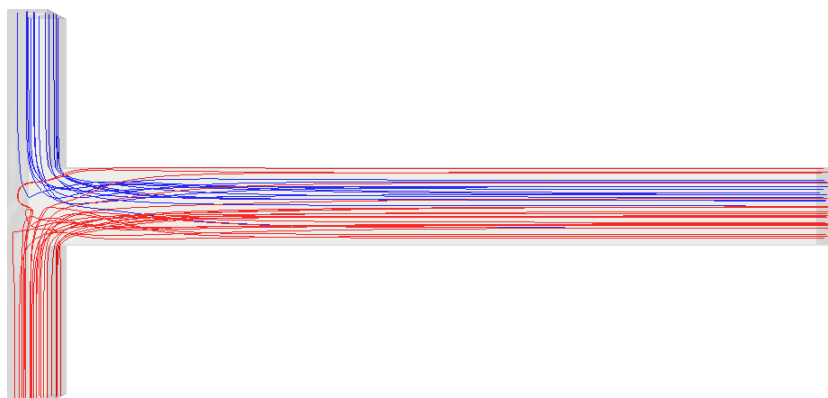


Figura 4.6: Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale modificato per $Re = 100$.

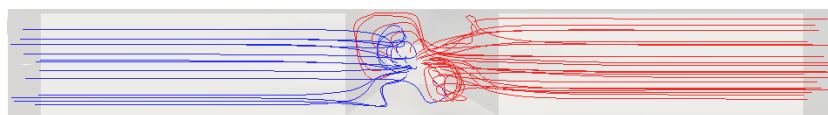


Figura 4.7: Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale modificato per $Re = 100$.

Le immagini 4.6 e 4.7 mostrano, attraverso linee di corrente, il campo di moto risultante dalla deformazione geometrica. Si nota che, a dispetto del numero di Reynolds che porterebbe al campo simmetrico tipico del *vortex regime*, le linee di corrente attraversano il piano medio del canale di mescolamento; ciò indica una profonda variazione del campo di moto, che si rifletterà in un migliorato mescolamento.

Poiché la cifra di merito J_Ω definita nel primo paragrafo è fisicamente connessa al momento della velocità sulla sezione di uscita, è interessante a questo punto calcolarne il valore, così da confrontarlo con l'omologa quantità nella geometria di riferimento. In figura 4.8 si mostra il modulo del vettore velocità giacente nel piano d'uscita. L'integrale di \mathbf{m} su Γ_{out} è il vettore *momento angolare* della velocità sull'uscita rispetto al centro della superficie e lo si indica con \mathbf{M} :

$$\mathbf{M} \triangleq \int_{\Gamma_{out}} \mathbf{m} \, d\Gamma = \int_{\Gamma_{out}} \mathbf{r} \times \mathbf{v}_t \, d\Gamma. \quad (4.13)$$

Il modulo di \mathbf{M} per la geometria modificata, M_{mod} , risulta $M_{mod} = 1.124 \times 10^{-15} \, m^4/s$. Rapportato al valore di M del flusso base si nota un incremento

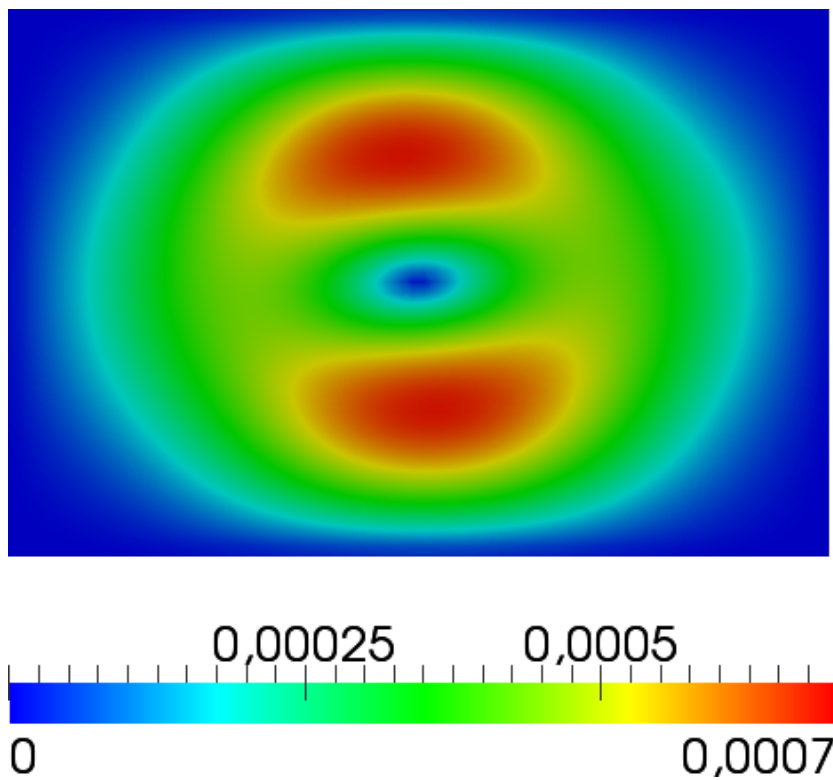


Figura 4.8: Modulo del vettore velocità giacente nella sezione di efflusso per $Re = 100$, [m/s].

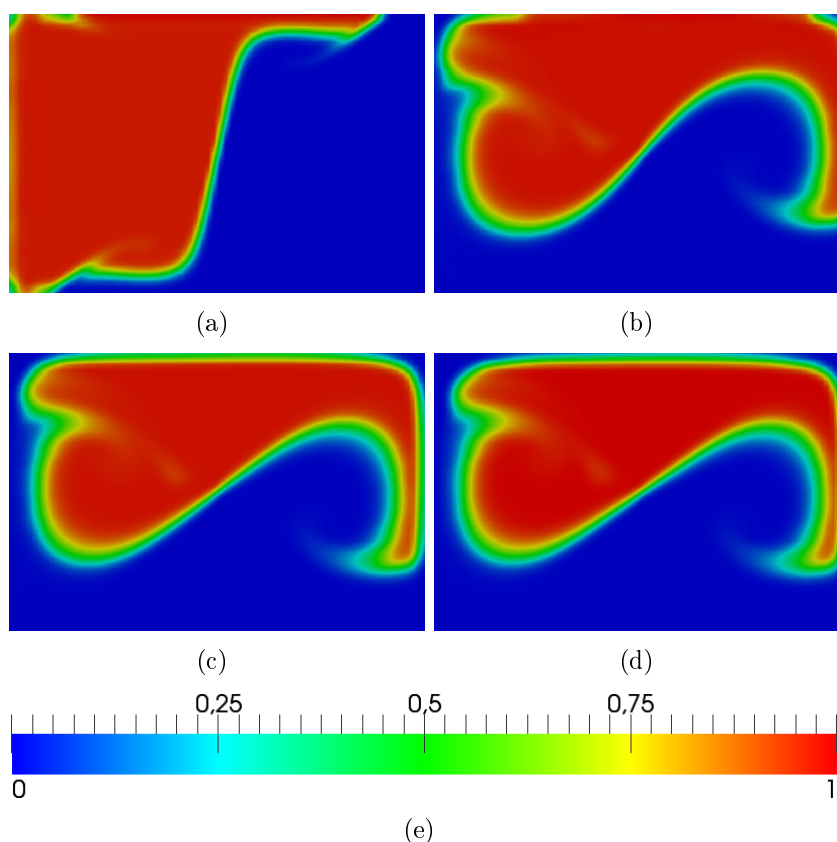


Figura 4.9: Campo di concentrazione, c , dello scalare passivo nel canale modificato per $Re = 100$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$.

molto significativo, infatti:

$$\frac{M_{mod}}{M} = \frac{1.124 \times 10^{-15} m^4/s}{4.01 \times 10^{-18} m^4/s} \simeq 2.8 \times 10^2. \quad (4.14)$$

L'obiettivo di migliorare l'efficienza del microcanale in termini di mescolamento si è stata riflessa in questo capitolo nella volontà di rompere la simmetria del flusso, attraverso la formazione di una cella di rotazione sull'uscita. Dal momento che tale struttura è compiutamente quantificata dalla grandezza M , un suo aumento tanto marcato permette già di per sé di giudicare positivamente l'efficacia del metodo aggiunto.

Per osservare come la variazione della corrente nel canale influenzi il campo dello scalare passivo, in figura 4.3.1 si mostra il campo di concentrazione in varie sezioni del canale di mescolamento. Tale campo di concentrazione naturalmente si riflette sul grado di mescolamento δ , il cui andamento lungo

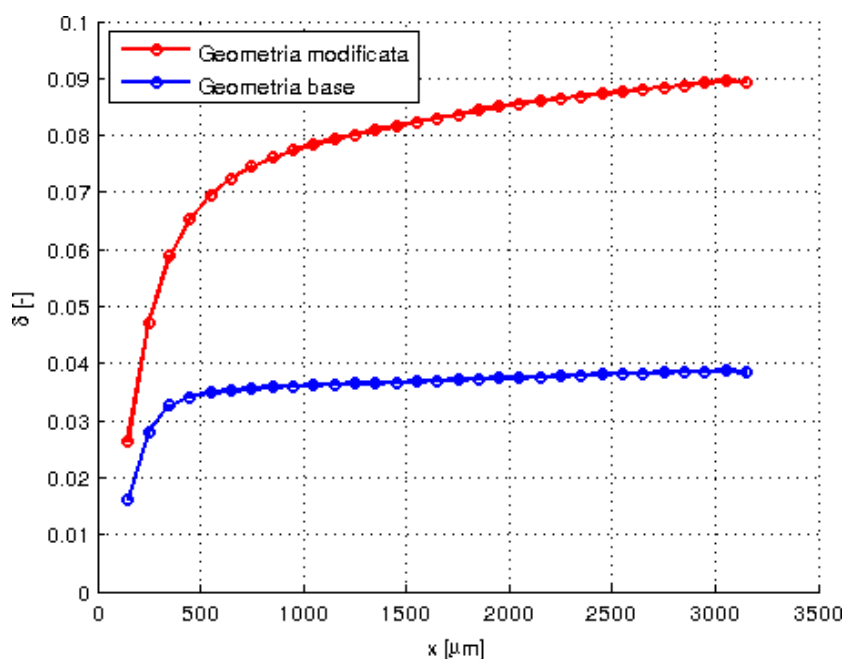


Figura 4.10: Confronto tra il livello di mescolamento, δ , nel canale di efflusso per le geometria di riferimento e deformata a $Re = 100$.

il canale di mescolamento è riportato in figura 4.10. Tale parametro assume sulla sezione di uscita il valore di $\delta_{max_{mod}} = 0.089$, risultando in un incremento, rispetto al microcanale in configurazione di riferimento, di:

$$\frac{\delta_{max_{mod}}}{\delta_{max}} = \frac{0.0894}{0.0384} \simeq 2.33. \quad (4.15)$$

Fin qui si sono confrontati i dispositivi, base e modificato, a parità di lunghezza del canale di mescolamento. Tuttavia è possibile seguire un ragionamento duale, che prevede di usare la procedura basata sull'aggiunto per minimizzare l'ingombro spaziale del dispositivo a parità di δ_{max} prodotto. Osservando le curve di figura 4.10 si intuisce immediatamente che il canale di mescolamento può essere reso molto più corto. In particolare, il canale ottimizzato produce il valore $\delta_{max} = 0.0384$ nella sezione di ascissa $x = 205\mu m$, consentendo di ridurre la lunghezza del canale di mescolamento a soli $55\mu m$, ossia circa il 98% in meno rispetto alla lunghezza originale. In figura 4.11 si mostrano, a supporto della comprensione dell'entità della riduzione di lunghezza, il canale di mescolamento base e la sua riduzione appena descritta. Oltre ad un ingombro minore, caratteristica molto utile in tutti quei contesti in cui più micromixer vengono utilizzati in serie, la riduzione della



Figura 4.11: Confronto tra le dimensioni del canale in geometria di riferimento e il canale ottimizzato che produce in uscita lo stesso grado di mescolamento in corrispondenza di $x = 205 \mu m$.

lunghezza del canale di mescolamento si ripercuote sulla perdita di carico del canale. Nel caso esso venga accorciato tale che risulti $L_{out} = 55 \mu m$, la perdita di carico che ne risulterebbe, $\Delta p'_{mod}$, è

$$\Delta p'_{mod} = 410.6 Pa. \quad (4.16)$$

Rispetto al valore di Δp della geometria base, esso garantisce una riduzione di circa il 72%.

4.3.2 $Re = 144$

L'immagine 4.12 mostra il campo di pressione nel canale modificato per $Re = 144$. Il valore di perdita di carico in questa nuova geometria, Δp_{mod} , risulta $\Delta p_{mod} = 2246 Pa$; ne corrisponde una potenza dissipata $P_{mod} = 8.12 \times 10^{-5} W$ ed una potenza dissipata specifica, ϵ_{mod} , di $291 W/Kg$. Anche in questo caso si rilevano minimi incrementi nel valore di perdita di carico, difatti si calcola:

$$\frac{\Delta p_{mod} - \Delta p}{\Delta p} = \frac{(2246.3 - 2212.3) Pa}{2212.3 Pa} = \frac{34 Pa}{2212.3 Pa} = 1.53\%. \quad (4.17)$$

Le immagini 4.13 e 4.14 mostrano il campo di moto attraverso visualizzazioni con linee di corrente. Anche in questo caso è evidente la rottura della simmetria del campo e l'avvenuta transizione all'*engulfment regime*.

La figura 4.15 mostra il modulo di \mathbf{v}_t sulla sezione di uscita e permette di intuire, anche per questo numero di Reynolds, un aumento del modulo del

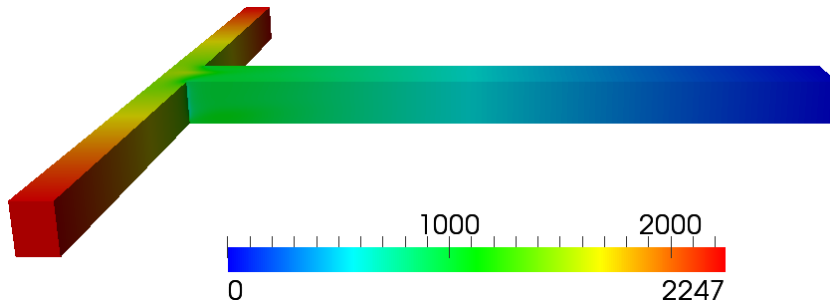


Figura 4.12: Campo di pressione, p , all'interno della geometria deformata per $Re = 144$, [Pa].

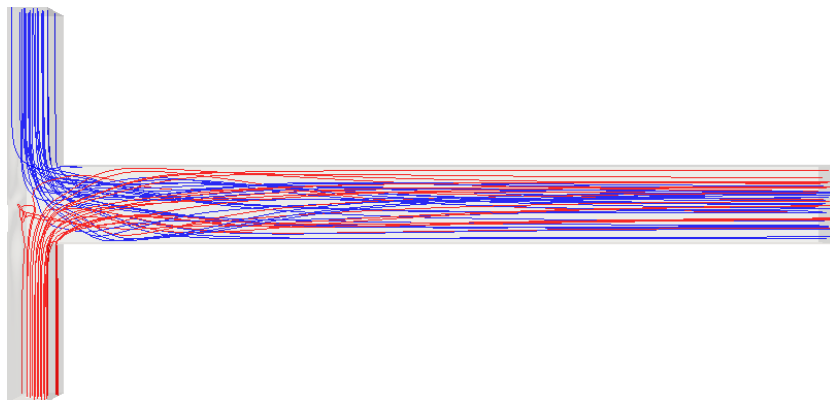


Figura 4.13: Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale modificato per $Re = 144$.

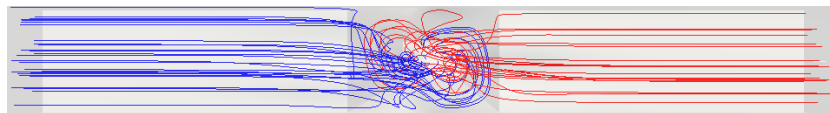


Figura 4.14: Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale modificato per $Re = 144$.

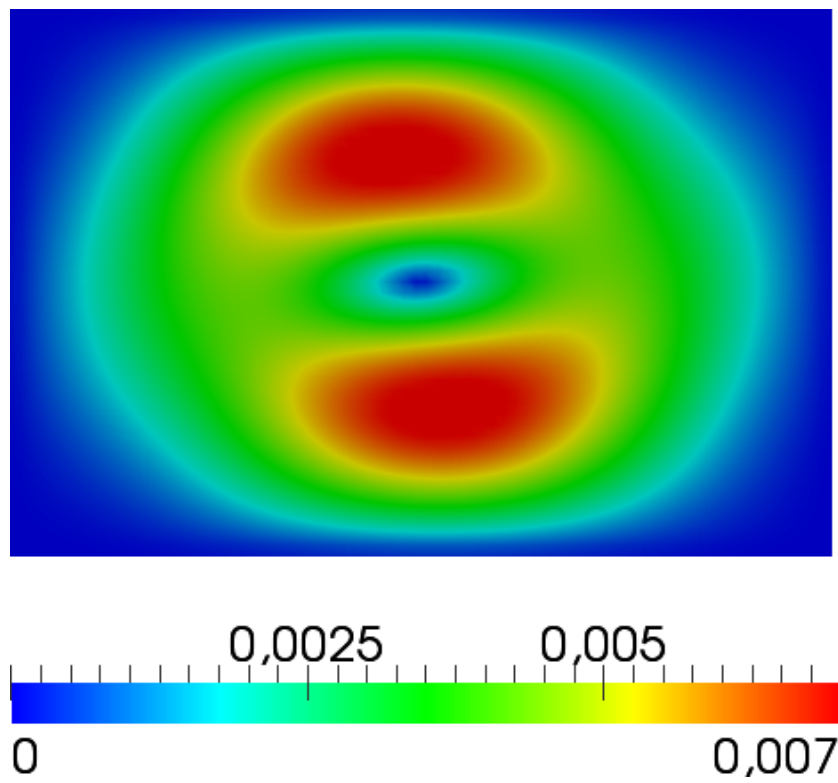


Figura 4.15: Modulo del vettore velocità giacente nella sezione di efflusso per $Re = 144$.

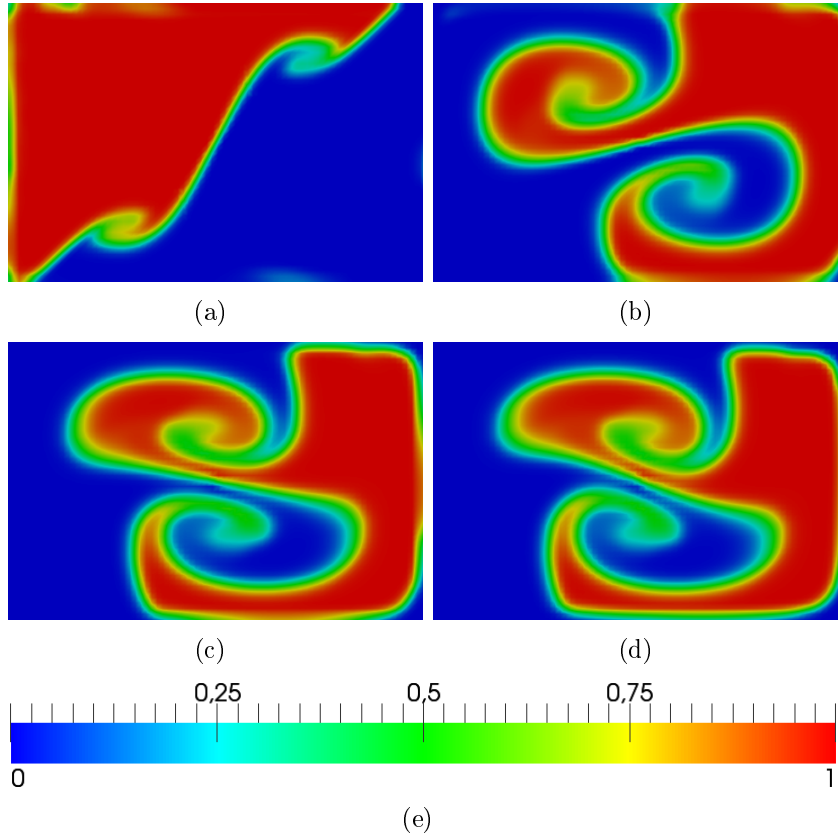


Figura 4.16: Campo di concentrazione, c , dello scalare passivo nel canale modificato per $Re = 144$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$.

momento angolare della velocità. Il valore di M per la geometria modificata, M_{mod} , risulta $M_{mod} = 1.173 \times 10^{-14} m^4/s$. Rapportato al valore di M del flusso base si nota un incremento molto significativo, infatti:

$$\frac{M_{mod}}{M} = \frac{1.173 \times 10^{-14} m^4/s}{3.293 \times 10^{-17} m^4/s} \simeq 3.6 \times 10^2. \quad (4.18)$$

In figura 4.3.2 si mostra il campo di concentrazione dovuto al nuovo campo di moto. Il valore del livello di mescolamento assume, sulla sezione di uscita, il valore di $\delta_{max_{mod}} = 0.218$, risultando in un incremento rispetto al microcanale in configurazione di riferimento di:

$$\frac{\delta_{max_{mod}}}{\delta_{max}} = \frac{0.2178}{0.0455} \simeq 5.1. \quad (4.19)$$

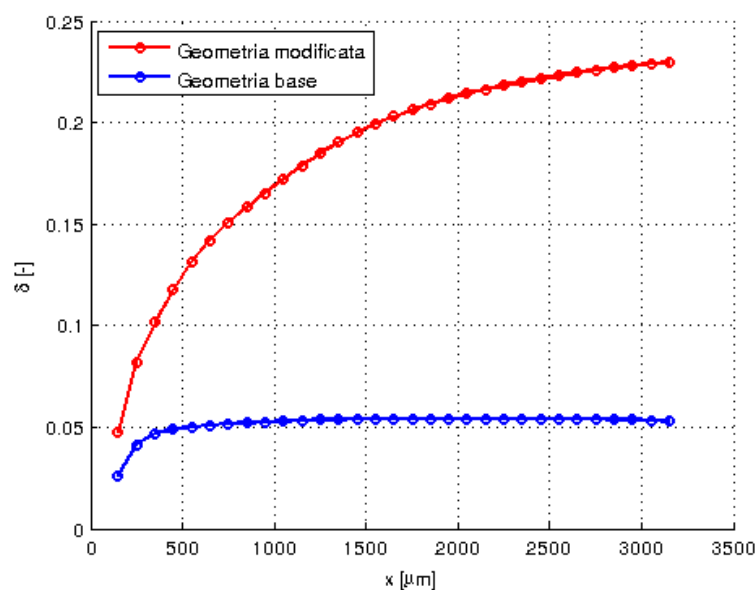


Figura 4.17: Confronto tra il livello di mescolamento, δ , nel canale di efflusso per le geometria di riferimento e doformata a $Re = 144$.

La figura 4.17 mostra, in ultimo, l'andamento di δ lungo il canale di mescolamento per $Re = 144$ nella geometria di riferimento e in quella deformata.

Come per il caso precedente, è possibile considerare la minima lunghezza del canale di mescolamento che produce lo stesso valore di δ_{max} del canale in geometria standard. In questo caso si può ridurre la lunghezza del canale del 99.5%, risultando in una lunghezza di soli $13 \mu m$. La caduta di pressione a cavallo del canale risulta:

$$\Delta p'_{mod} = 1124.5 Pa, \quad (4.20)$$

ossia minore di circa il 50% rispetto alla geometria base allo stesso regime di moto.

4.4 Discussione

La sensitività superficiale fornisce indicazioni preziose per ottimizzare la geometria di condotti e il metodo basato sulle equazioni aggiunte vanta una grande flessibilità applicativa. I risultati ottenuti sono estremamente interessanti, in particolar modo se confrontati con le prestazioni del dispositivo

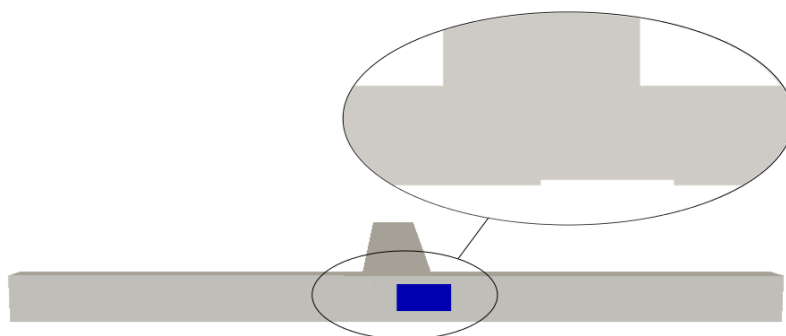


Figura 4.18: Microcanale con deformazione casuale, ma di dimensioni confrontabili con le deformazioni imposte sull'analisi della sensitività. Nell'ingrandimento si mostra una sezione normale all'asse z della regione contornata.

nella sua configurazione base. Si è dato risalto all'aumento del livello di mescolamento, ottenuto tramite una piccolissima deformazione geometrica e comportando un incremento minimo della perdita di carico nel microcanale. Per tutte le applicazioni in cui più T-mixer vengono posti in sequenza, così da formare un sistema più complesso, si sono mostrati i risultati a parità di mescolamento, mirando invece a ridurre l'ingombro geometrico e la potenza dissipata dal flusso.

Nel commentare questi risultati nasce spontanea una riflessione, concernente la ragione che ha portato a miglioramenti tanto significativi. Si potrebbe pensare che una qualunque perturbazione del campo di moto della geometria standard porti alla nascita del vortice del canale di mescolamento, che è la causa prima di un aumento così marcato del livello di δ . Per confutare tale teoria si è effettuata una simulazione a $Re = 144$ introducendo nel dominio una modifica casuale, non simmetrica, e di dimensioni paragonabili alle deformazioni imposte in precedenza; come mostra la figura 4.18 tale deformazione è costituita da una rientranza a gradino di dimensioni $2 \times 25 \times 50$ celle, posta nella regione del microcanale in cui la sensitività presenta i valori maggiori.

Da questa deformazione risulta un cambiamento minimo del campo di moto; la potenza dissipata è $P = 7.99 \times 10^{-5} W$, corrispondente ad un valore di ϵ di $286.8 W/Kg$ e di circa lo 0.13% maggiore rispetto alla geometria standard. Le immagini di figure 4.19 e 4.20 mostrano alcune linee di corrente del campo di moto. In entrambe si osserva che la deformazione casuale non produce gli stessi effetti di quelle guidate dalla sensitività ed in particolare non conduce alla transizione anticipata tra *vortex* ed *engulfment regime*.

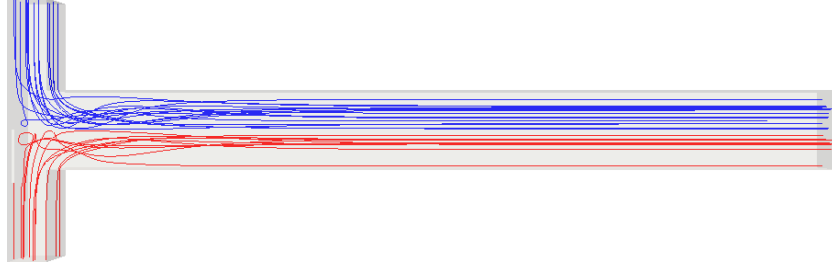


Figura 4.19: Vista, dall'asse z positivo, delle linee di corrente all'interno del microcanale con modifica casuale per $Re = 144$.

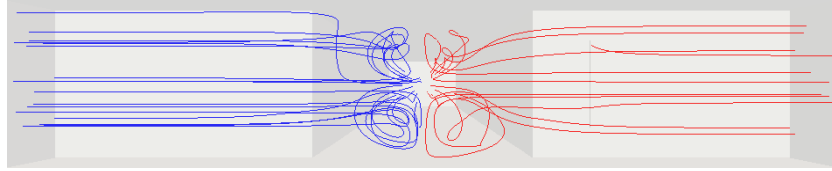


Figura 4.20: Vista, dall'asse x negativo, delle linee di corrente all'interno del microcanale con modifica casuale per $Re = 144$.

La figura 4.21 mostra il modulo di \mathbf{v}_t sulla sezione di uscita e permette di intuire che questa geometria non è in grado di produrre il vortice in rotazione all'interno del canale di mescolamento. Il valore di M alla sezione di uscita di questo dominio, M_{mod} , risulta $M_{mod} = 3.72 \times 10^{-17} \text{ m}^4/\text{s}$. Rapportandolo al valore di M del flusso base si nota un incremento molto piccolo, infatti:

$$\frac{M_{mod}}{M} = \frac{3.72 \times 10^{-17} \text{ m}^4/\text{s}}{3.293 \times 10^{-17} \text{ m}^4/\text{s}} \simeq 1.03, \quad (4.21)$$

ed è minore di due ordini di grandezza rispetto al valore di M_{mod} ottenuto con il microcanale deformato tramite la sensibilità. Si mostra, nelle immagini di figura 4.4, il campo di concentrazione dovuto al nuovo campo di moto. L'andamento del grado di mescolamento con x è illustrato in figura 4.23, in cui viene paragonato all'evoluzione dello stesso parametro per la geometria base e per quella modificata secondo le indicazioni della sensibilità. Nel caso specifico della deformazione a gradino si osserva un livello di δ all'uscita $\delta_{max} = 0.042$, minore sia del valore omologo nel T-mixer di riferimento, $\delta_{max} = 0.0455$, sia di quanto prodotto dalla geometria illustrata nei paragrafi precedenti, $\delta_{max_{mod}} = 0.2178$.

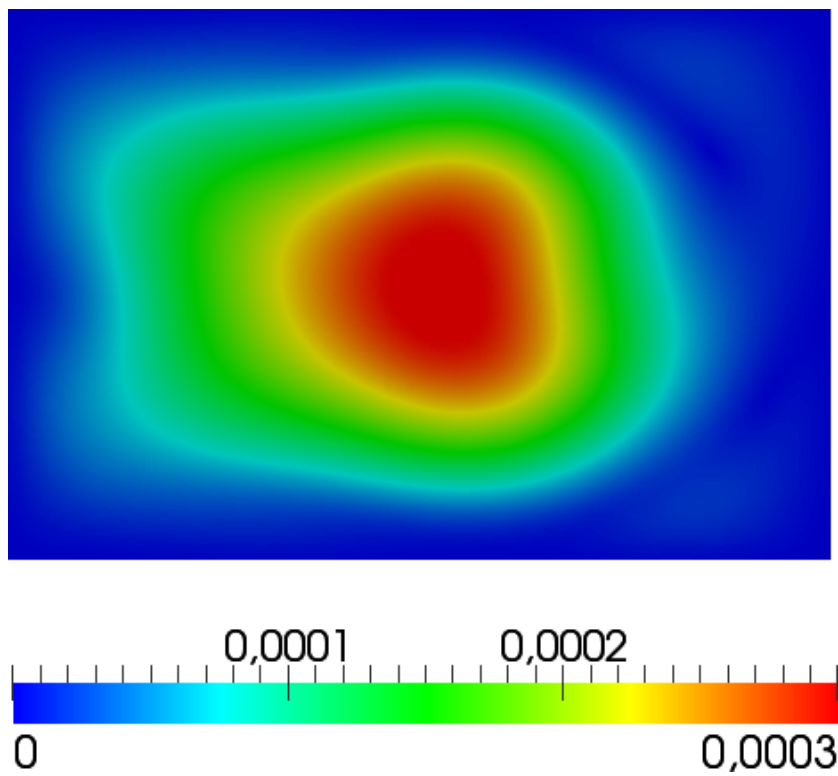


Figura 4.21: Modulo del vettore velocità giacente nella sezione di efflusso per $Re = 144$, [m/s].

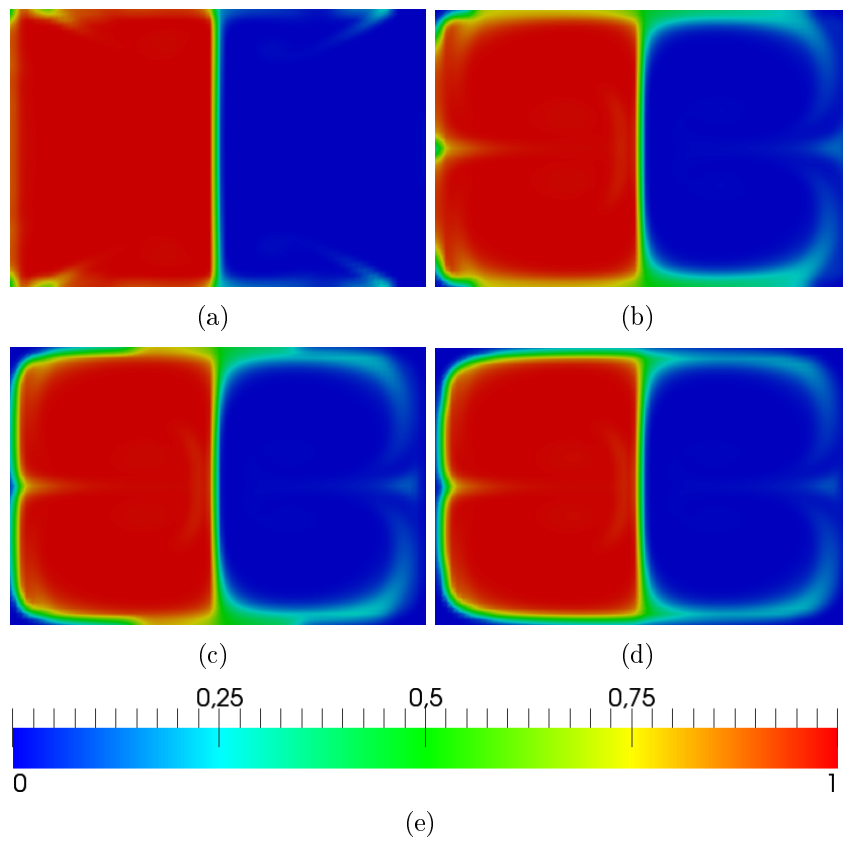


Figura 4.22: Campo di concentrazione, c , dello scalare passivo nel canale con modifica a gradino per $Re = 144$, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 1150 \mu m$; (c) $x = 2150 \mu m$; (d) $x = 3150 \mu m$.

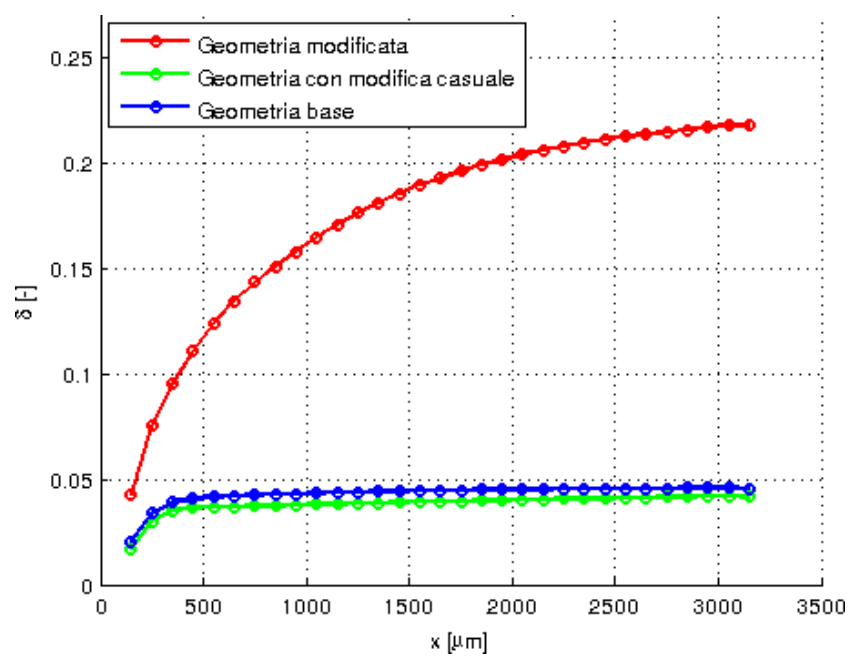


Figura 4.23: Modulo del vettore velocità giacente nella sezione di efflusso per $Re = 144$.

Conclusioni

Valutare le potenzialità del metodo di ottimizzazione geometrica basato sulle equazioni aggiunte è stato lo scopo principale di questo lavoro di tesi. Tale obiettivo è stato raggiunto utilizzando in tutte le fasi del lavoro software *open-source*.

In una prima fase di questo lavoro è stato studiato il comportamento di un tipico microcanale a T per diversi valori del numero di Reynolds. Per $Re < 200$ si è riscontrato perfetto accordo dei risultati con quanto prodotto da Galletti et al. in [13]. Per valori superiori di tale parametro si è invece osservato un comportamento instazionario della corrente, in parziale disaccordo con il lavoro degli stessi autori. Poiché funzionamenti di questa natura sono poco documentati in letteratura, si ritiene che siano necessari studi più approfonditi per fare chiarezza su questo tipo di comportamento.

Successivamente, all'interno dell'intervallo di funzionamento certamente stazionario del microcanale in esame e più precisamente per $Re = 100$ e $Re = 144$, è stato usato il metodo di ottimizzazione geometrica basato sulle equazioni aggiunte. È stata proposta e giustificata una cifra di merito e si è ricavata e poi implementata l'opportuna formulazione con le condizioni al contorno necessarie perché il problema risultasse ben posto. Si è affrontata poi la soluzione delle equazioni aggiunte e si è ricavato il campo di sensitività superficiale definito nel Capitolo 3. Si sono operate deformazioni della griglia di calcolo, suggerendo quindi una nuova geometria per il microcanale, e si sono infine eseguite analisi sul funzionamento del dispositivo modificato. I risultati del Capitolo 4 mostrano come tali deformazioni siano state estremamente efficaci: per $Re = 100$ la nuova geometria ha permesso di duplicare il valore di δ all'efflusso e per $Re = 144$ tale parametro è stato più che quintuplicato. Oltre alla massimizzazione del mescolamento sono stati presi in considerazione altri criteri per confrontare tra loro le geometrie; anche in termini di ingombro spaziale necessario per ottenere uno specifico grado di mescolamento e di perdita di carico i risultati sono estremamente positivi.

Benché questa tesi presenti un'insieme di risultati nel complesso assai interessanti, molto resta ancora da fare. Occorre innanzitutto compiere studi

più dettagliati riguardo ai regimi di moto dei microcanali a T ed in particolare restano da identificare le cause delle instabilità che portano alla transizione tra un regime ed il successivo. Bisogna inoltre individuare la ragione per cui codici a volumi finiti diversi conducano a risultati talvolta molto diversi tra loro, di modo da capire più approfonditamente peculiarità e limiti di ciascuno anche in ottica di simulazioni su problemi differenti. A questo proposito occorre inoltre effettuare un attento studio sulla trattazione numerica del problema, in termini sia di sensibilità dei risultati alla mesh sia di schemi di discretizzazione delle equazioni di Navier–Stokes.

Per quanto riguarda il metodo aggiunto si è già detto che la scelta della cifra di merito adottata in questo lavoro è arbitraria e lasciata all'intuizione fisica del ricercatore; per questa ragione restano da studiare diverse scelte di J , auspicabilmente più legate alla natura fisica ed ai meccanismi di instabilità del problema in esame. Resta in ultimo aperta la possibilità di estendere il ciclo di ottimizzazione a microcanali differenti da quello a T, per valutare l'efficacia del metodo aggiunto anche in geometrie più complesse.

Appendice A

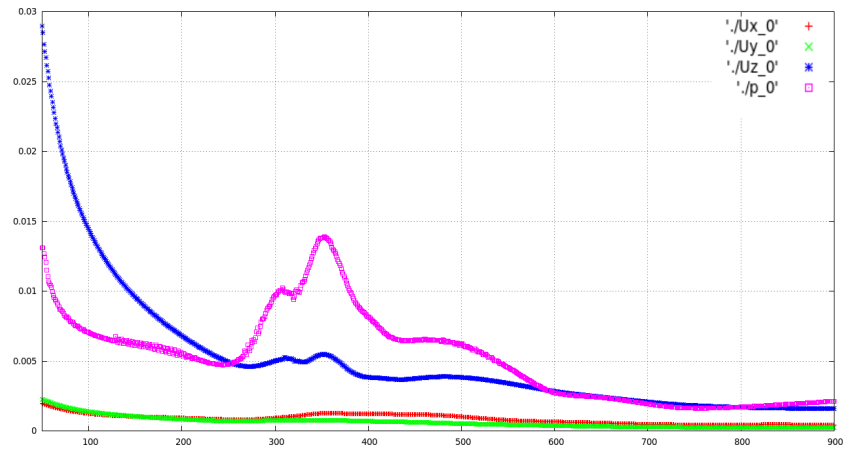
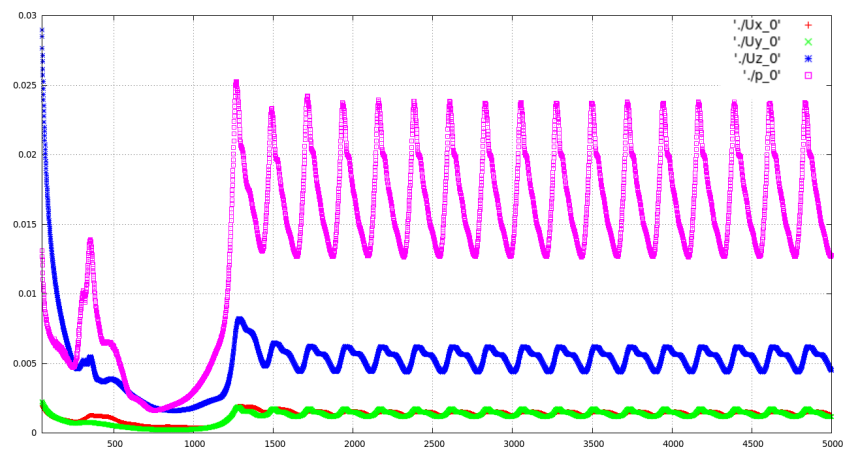
$Re = 527$

Come è stato accennato nel Capitolo 2, le simulazioni condotte ad alti numeri di Reynolds, in questo caso $Re = 527$, presentano delle peculiarità. In una prima fase del lavoro, infatti, si è dato per assodato che tali regimi fossero stazionari e con tale presupposto in mente è stato eseguito il ciclo di ottimizzazione al pari di quanto svolto per i numeri di Reynolds 100 e 144. Si scrive questa appendice per illustrare tale lavoro, premettendo però che i risultati sono da ritenersi del tutto inattendibili; le simulazioni infatti, sia dirette che aggiunte, sono state svolte per le versioni stazionarie delle equazioni di Navier–Stokes e delle equazioni aggiunte e pertanto non catturano l’essenza fisica dei fenomeni in esame.

In figura A.1 si mostra l’andamento dei residui delle grandezze velocità e pressione in funzione del numero di iterazioni del solutore. Si osservi che una simulazione stazionaria si definisce a convergenza solo in funzione del criterio d’arresto deciso sui residui, scelta che tuttavia è lasciata libera all’utente. Inizialmente tale soglia era stata posta a $toll = 1 \times 10^{-4}$, conducendo apparentemente ad una buona convergenza. Se tuttavia si diminuisce la soglia minima sotto la quale è chiesto che i residui scendano, ossia se si diminuisce la tolleranza sull’errore, si osserva l’andamento di figura A.2. Dopo una prima fase in cui i residui decrescono, essi tornano a salire ed assumono infine un comportamento oscillante periodico. Vien da sé che una simulazione che presenta questo comportamento non può essere ritenuta convergente, ragion per cui successivamente si è passati a simulazioni instazionarie.

Prima che questo fenomeno ci fosse noto, come detto, è stato eseguito sul canale l’intero ciclo di ottimizzazione e nelle immagini che seguono si mostrano i risultati più significativi. In figura A.3 si mostra il campo di concentrazione ricavato nella geometria standard. Il grado di mescolamento che risulta all’uscita è $\delta_{max} = 0.13$.

Percorrendo lo stesso procedimento adottato nei casi descritti in prece-

Figura A.1: Andamento iniziale dei residui per $Re = 527$.Figura A.2: Andamento dei residui per $Re = 527$.

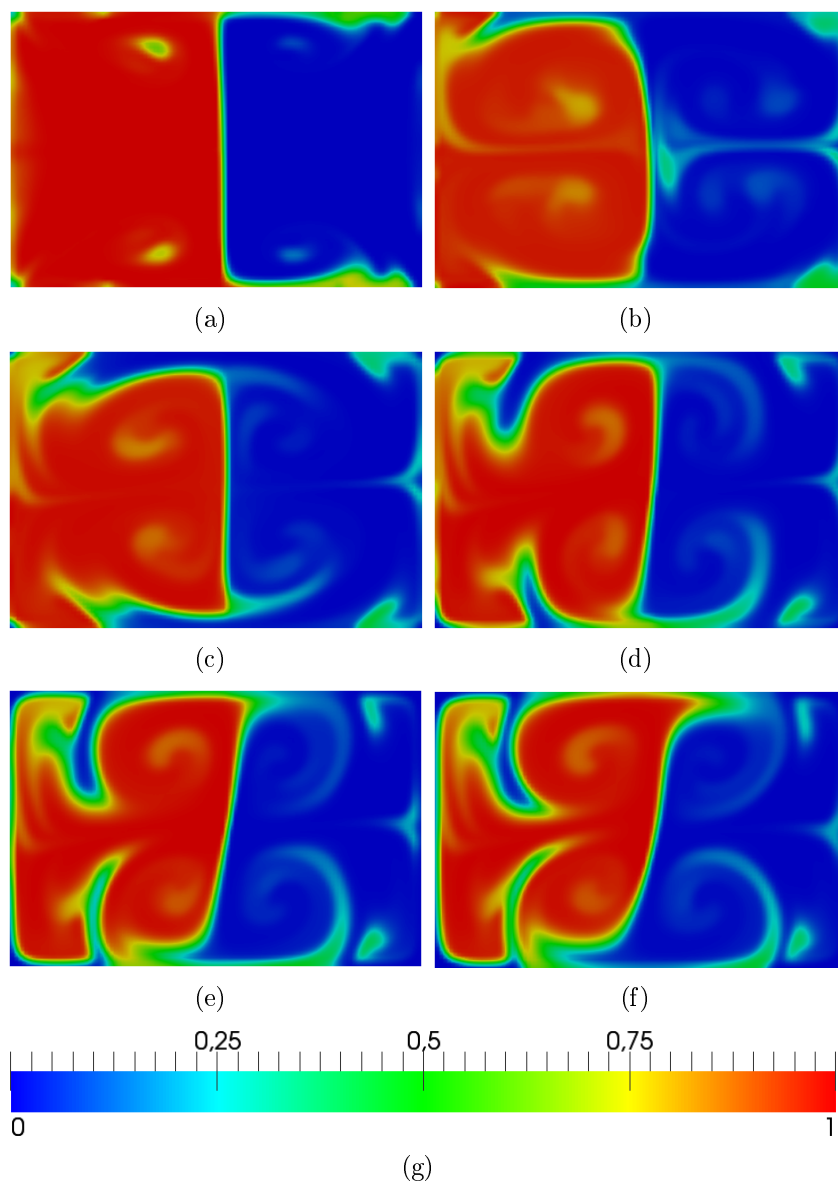


Figura A.3: Campo di concentrazione dello scalare passivo per $Re = 527$ nella geometria di riferimento, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 650 \mu m$; (c) $x = 1150 \mu m$; (d) $x = 1650 \mu m$; (e) $x = 2150 \mu m$; (f) $x = 2650 \mu m$.

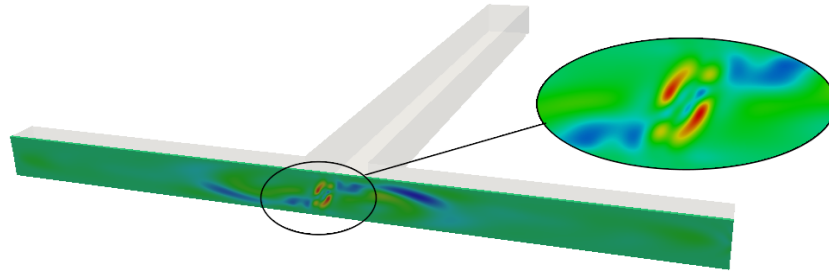


Figura A.4: Campo di sensitività superficiale sulla parete avente normale discorde all'asse x per il microcanale a $Re = 527$.

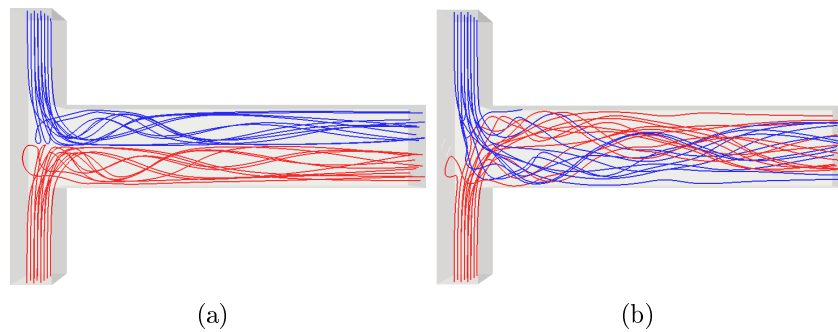


Figura A.5: Linee di corrente per il microcanale a $Re = 527$; (a) geometria standard; (b) geometria modificata.

denza è stato risolto il campo aggiunto ed è stata ricavata la mappa di sensitività superficiale, riportata in figura A.4. A questo punto si è imposta una modifica geometrica in maniera analoga a quanto mostrato nel Capitolo 2. Tuttavia, poiché non si era ancora sviluppato lo strumento per ottenere il morphing della mesh, invece di deformare la griglia si sono eliminate le celle in corrispondenza dei valori massimi di $\partial J/\partial\beta$, così da ottenere una rientranza della profondità di una cella all'interno del canale. In questa geometria modificata si è ripetuta la simulazione delle Navier–Stokes e si è ottenuto un nuovo campo di moto. La figura A.5 riporta alcune linee di corrente nei due casi, così da rendere evidente la differenza. Il flusso che si sviluppa nel microcanale modificato produce un campo di concentrazione descritto dalle immagini di figura A.6. Il valore di delta all'efflusso in questo secondo caso risulta $\delta_{max} = 0.69$. Nell'immagine A.7 si mostrano le sezioni di uscita del canale nelle configurazioni standard e modificata, così da apprezzare il cambiamento del campo di concentrazione. In ultimo si mostra in figura A.8 un grafico comparativo tra l'andamento di δ nelle due versioni del canale.

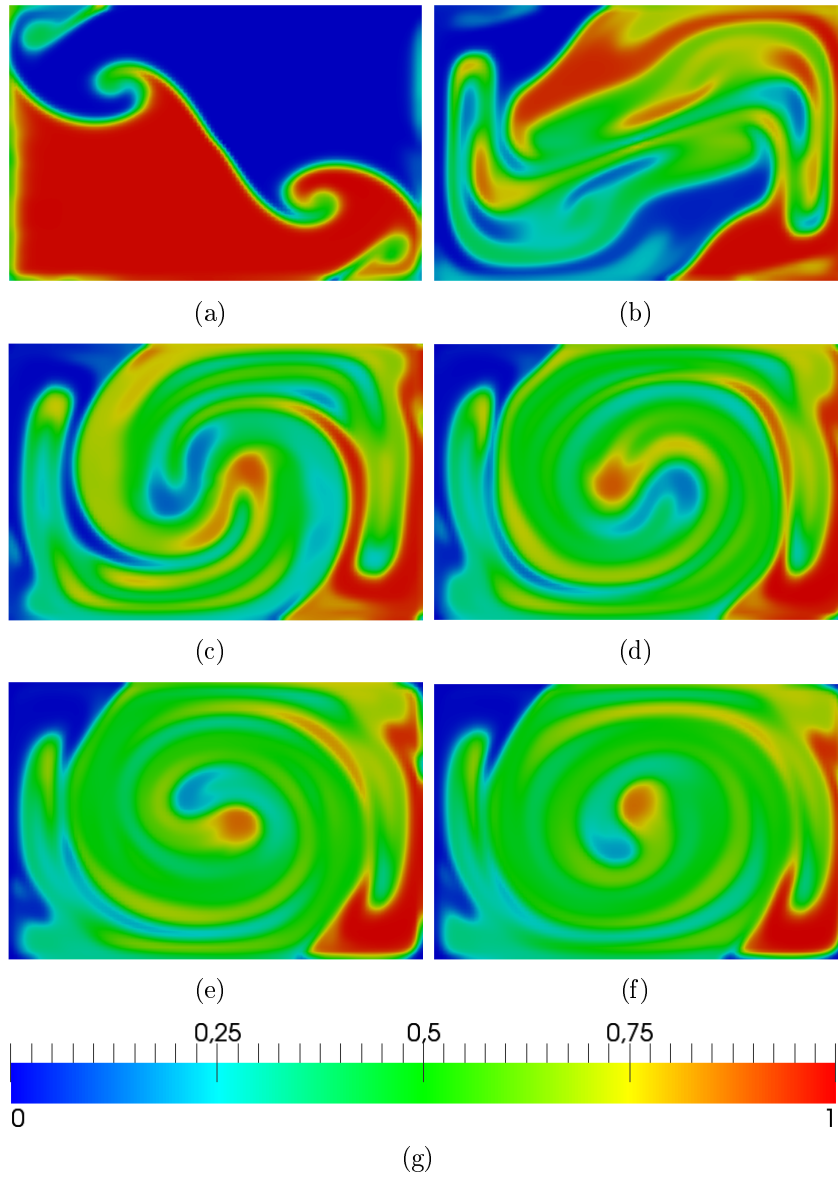


Figura A.6: Campo di concentrazione dello scalare passivo per $Re = 527$ nella geometria modificata, [-]; (a) $x = 150 \mu m$; (b) $x = 650 \mu m$; (c) $x = 1150 \mu m$; (d) $x = 1650 \mu m$; (e) $x = 2150 \mu m$; (f) $x = 2650 \mu m$.

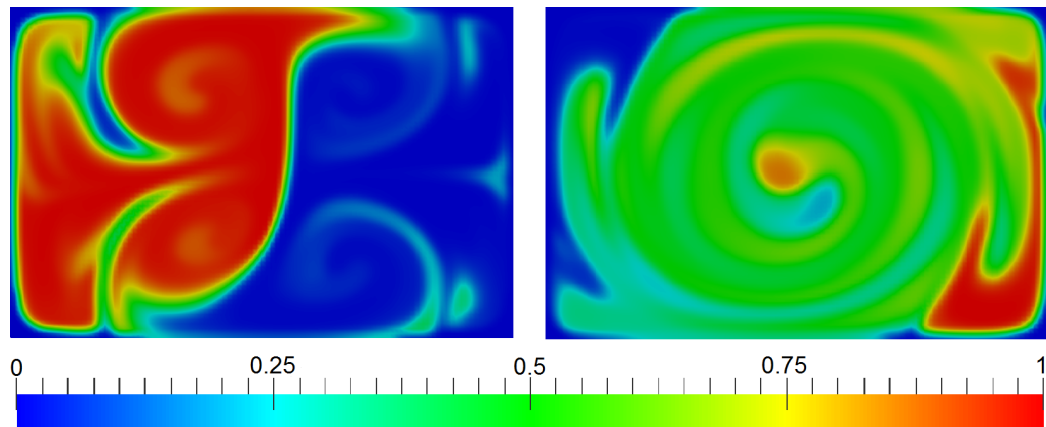


Figura A.7: Confronto tra i campi di concentrazione sulla superficie di uscita nella geometria di riferimento ed in quella modificata a $Re = 527$.

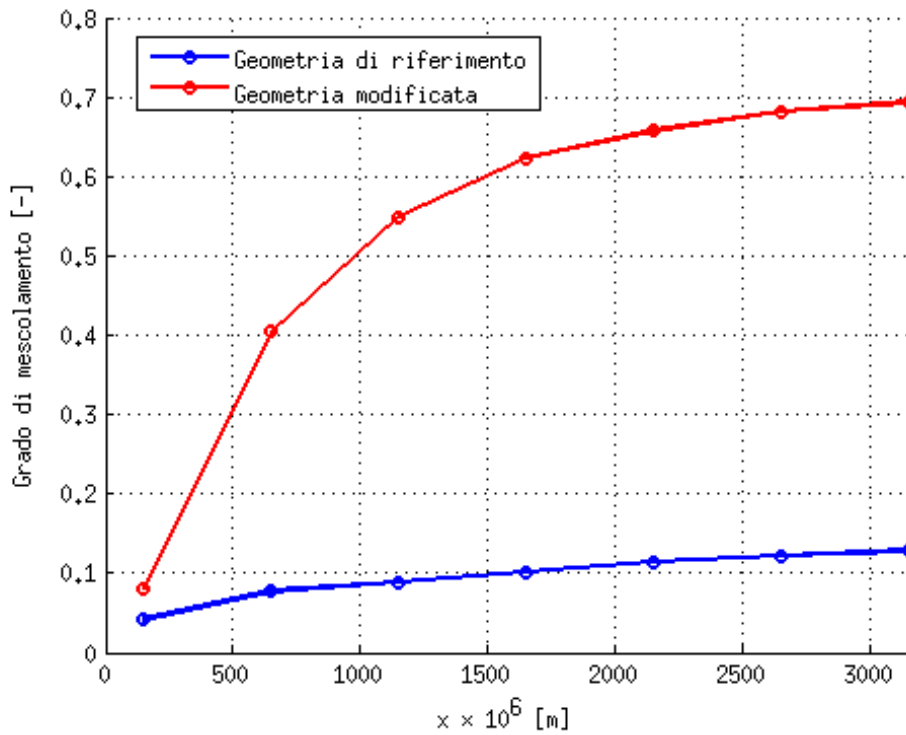


Figura A.8: Confronto tra l'andamento del grado di mescolamento nella geometria di riferimento ed in quella modificata a $Re = 527$.

Bibliografia

- [1] M. M. Ait, D. Malsch, A. Montillet, C. Sollicec, and T. Henkel. Numerical and experimental investigations of mixing in T-shaped and cross-shaped micromixers. *Chem. Eng. Sci.*, 68(1):278–289, 2012.
- [2] R. W. Barber and D. R. Emerson. The influence of Knudsen number on the hydrodynamic development length within parallel plate microchannels. *Adv. Fluid Mech.*, 32:207–216, 2002.
- [3] J. Blazek. *Computational fluid dynamics: principles and applications*. 2001.
- [4] D. Bothe, C. Stemich, and H.-J. Warnecke. Fluid mixing in a T-shaped micro-mixer. *Chem. Eng. Sci.*, 61(9):2950–2958, 2006.
- [5] D. Bothe, C. Stemich, and H.-J. Warnecke. Computation of scales and quality of mixing in a T-shaped microreactor. *Comput. Chem. Eng.*, 32(1):108–114, 2008.
- [6] N. Dombrowski, E. A. Foumeny, S. Ookawara, and A. Riza. The influence of Reynolds number on the entry length and pressure drop for laminar pipe flow. *Can. J. Chem. Eng.*, 71(3):472–476, 1993.
- [7] S. Dreher, N. Kockmann, and P. Woias. Characterization of laminar transient flow regimes and mixing in T-shaped micromixers. *Heat Transfer Eng.*, 30(1-2):91–100, 2009.
- [8] R. P. Dwight and J. Brezillon. Effect of approximations of the discrete adjoint on gradient-based optimization. *AIAA Journal*, 44(12):3022–3031, 2006.
- [9] M. Engler, N. Kockmann, T. Kiefer, and P. Woias. Numerical and experimental investigations on liquid mixing in static micromixers. *Chem. Eng. J.*, 101(1):315–322, 2004.

- [10] L. Falk and J.-M. Commenge. Performance comparison of micromixers. *Chem. Eng. Sci.*, 65(1):405–411, 2010.
- [11] A. Fani, S. Camarri, and M. V. Salvetti. Investigation of the steady engulfment regime in a three-dimensional T-mixer. *Phys. Fluids*, 25:064102, 2013.
- [12] M. Gad-el Hak. The Fluid Mechanics of Microdevices-The Freeman Scholar Lecture. *J. Fluids Eng.*, 121:5–33, 1999.
- [13] C. Galletti, M. Roudgar, E. Brunazzi, and R. Mauri. Effect of inlet conditions on the engulfment pattern in a T-shaped micro-mixer. *Chem. Eng. J.*, 2012.
- [14] Z.-Y. Guo and Z.-X. Li. Size effect on microscale single-phase flow and heat transfer. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 46(1):149–159, 2003.
- [15] Z.-Y. Guo and Z.-X. Li. Size effect on single-phase channel flow and heat transfer at microscale. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 24(3):284–298, 2003.
- [16] H. Herwig. Flow and heat transfer in micro systems: Is everything different or just smaller? *J. Appl. Math. Mech. /Z. Angew. Math. Mech.*, 82(9):579–586, 2002.
- [17] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows*. 1989.
- [18] S.-S. Hsieh, J.-W. Lin, and J.-H. Chen. Mixing efficiency of Y-type micromixers with different angles. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 2013.
- [19] N. Kockmann, T. Kiefer, M. Engler, and P. Woias. Convective mixing and chemical reactions in microchannels with high flow rates. *Sens. Actuators, B*, 117(2):495–508, 2006.
- [20] J. Koo and C. Kleinstreuer. Liquid flow in microchannels: experimental observations and computational analyses of microfluidics effects. *J. Micromech. Microeng.*, 13(5):568, 2003.
- [21] J. Koo and C. Kleinstreuer. Viscous dissipation effects in microtubes and microchannels. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 47(14):3159–3169, 2004.
- [22] V. Kumar, M. Paraschivoiu, and K. D. P. Nigam. Single-phase fluid flow and mixing in microchannels. *Chem. Eng. Sci.*, 66(7):1329–1373, 2011.
- [23] P.-S. Lee, S. V. Garimella, and D. Liu. Investigation of heat transfer in rectangular microchannels. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 48(9):1688–1704, 2005.

- [24] S Márquez Damián and N Nigro. Comparison of single phase laminar and large eddy simulation (les) solvers using the openfoam suite. *Mecánica Computacional*, 29:3721–3740, 2010.
- [25] G. L. Morini. Viscous heating in liquid flows in micro-channels. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 48(17):3637–3647, 2005.
- [26] N.-T. Nguyen and Z. Wu. Micromixers—a review. *J. Micromech. Microeng.*, 15(2):R1, 2005.
- [27] C. Othmer. A continuous adjoint formulation for the computation of topological and surface sensitivities of ducted flows. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 58(8):861–877, 2008.
- [28] C. Othmer, E. de Villiers, and H. G. Weller. Implementation of a continuous adjoint for topology optimization of ducted flows. In *18th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, 2007.
- [29] C. Othmer, T. Kaminski, and R. Giering. Computation of topological sensitivities in fluid dynamics: cost function versatility. In *ECCOMAS CFD*, pages 5–8. Citeseer, 2006.
- [30] J.M. Ottino, W. E. Ranz, and C. W. Macosko. A lamellar model for analysis of liquid-liquid mixing. *Chem. Eng. Sci.*, 34(6):877–890, 1979.
- [31] M. Roudgar, E. Brunazzi, C. Galletti, and R. Mauri. Numerical study of split t-micromixers. *Chem. Eng. Technol.*, 35(7):1291–1299, 2012.
- [32] A. Soleymani, E. Kolehmainen, and I. Turunen. Numerical and experimental investigations of liquid mixing in T-type micromixers. *Chem. Eng. J.*, 135:S219–S228, 2008.
- [33] A. Soleymani, H. Yousefi, and I. Turunen. Dimensionless number for identification of flow patterns inside a T-micromixer. *Chem. Eng. Sci.*, 63(21):5291–5297, 2008.
- [34] O. Soto and R. Löhner. On the computation of flow sensitivities from boundary integrals. *AIAA Paper*, 112:2004, 2004.
- [35] H. A. Stone and S. Kim. Microfluidics: Basic Issues, Applications, and Challenges. *AIChE J.*, 47(6):1250–1254, 2004.

