



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciências
Instituto Politécnico

Gilza Santos Simão Ferreira

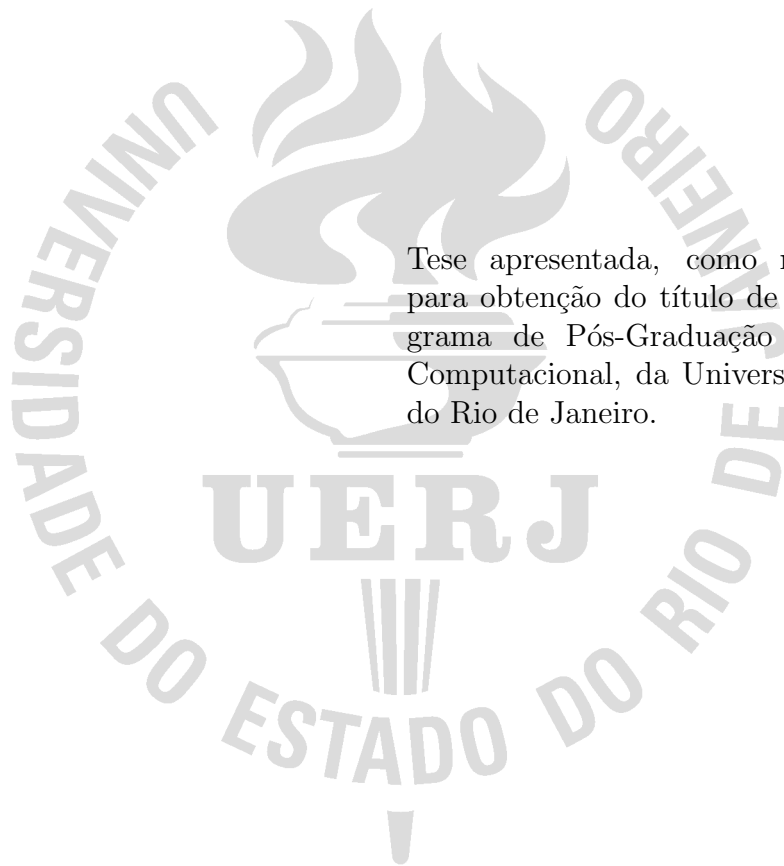
**Simulando escoamentos em um micromisturador: um estudo
numérico no contexto da separação de operadores via o método
do tubo de trajetórias**

Nova Friburgo

2020

Gilza Santos Simão Ferreira

Simulando escoamentos em um micromisturador: um estudo numérico no contexto da separação de operadores via o método do tubo de trajetórias



Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira

Nova Friburgo

2020

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/E

F383 Ferreira, Gilza Santos Simão.
Simulando escoamentos em um micromisturador : um estudo numérico no contexto da separação de operadores via o método do tubo de trajetórias / Gilza Santos Simão Ferreira. - 2020.
79 f. : il.

Orientador: Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira.
Tese (doutorado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Mecânica dos meios contínuos – Métodos de simulação – Teses.
2. Misturas – Modelos matemáticos – Teses. 3. Lagrange, Equações de - Soluções numéricas – Teses. I. Oliveira, Luiz Nélio Henderson Guedes de. II. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. III. Título.

CDU 517.933

Bibliotecária Cleide Sancho CRB7/5843

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Gilza Santos Simão Ferreira

Simulando escoamentos em um micromisturador: um estudo numérico no contexto da separação de operadores via o método do tubo de trajetórias

Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 22 de janeiro de 2020.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira (Orientador)
Instituto Politécnico – UERJ

Daiara Fernandes de Faria
Instituto Politécnico - UERJ

Grazione de Souza
Instituto Politécnico - UERJ

Sanderson Lincohn Gonzaga de Oliveira
Universidade Federal de Lavras - UFLA

Marroni de Sá Rêgo
Instituto Federal do Pará - IFPA

Nova Friburgo

2020

DEDICATÓRIA

À toda minha família, em especial a minha mãe que me deu a vida, amor e a educação como principais heranças, aos amigos pelo companheirismo e contribuições.

AGRADECIMENTOS

A Deus por me ter dado forças, saúde, muita disposição e que continue me iluminando e me guiando para trabalhos futuros.

Em especial aos meus pais, Gerson e Maria de Fátima por todo amor e carinho, pelos conselhos, incentivo e por serem simplesmente maravilhosos estando presentes em todos os momentos da minha vida.

Ao amigo e Professor Nélio, pela dedicação, paciência, conhecimento, experiência, sabedoria, exemplo, pelas conversas constantes e orientações que contribuíram muito para desencadear este trabalho e meu crescimento profissional.

Às minhas irmãs Gisiane, Fani e toda minha família pelo incentivo e motivação depositada em mim.

Agradeço também à todos os meus amigos especiais: aos amigos (Fábio, Breno e Gustavo) pelo companheirismo e ajuda dispensada, as amigas irmãs (Noelle e Adriana) e aos demais amigos do LABMACC.

Aos colegas, professores e servidores da comunidade do Campus Regional Instituto Politécnico da UERJ, por todo apoio.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior- Brasil(CAPES)- Código de Financiamento 001.

Muito Obrigada!

RESUMO

FERREIRA, G. S. S. *Simulando escoamentos em um micromisturador: um estudo numérico no contexto da separação de operadores via o método do tubo de trajetórias*. 2020. 79 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2020.

Nos últimos anos com os avanços na tecnologia microfluídica e *Lab-On-a-Chip*, levaram a um aumento do interesse pela mistura laminar de fluidos. Em diversas áreas do conhecimento, encontram-se situações em que pequenos volumes de produtos precisam ser simulados, dentre os quais se podem citar as análises físicas, químicas, biológicas e médicas. Neste contexto faz-se necessário um maior contato entre a amostra e o reagente utilizado para que se consiga uma homogeneidade da mistura. Frente a este cenário surge a aplicação de micromisturadores, os quais permitem uma mistura rápida e eficiente numa variedade de tarefas, que incluem desde misturas até trocas térmicas. O objetivo deste trabalho é aplicar a técnica de separação de operadores para resolver a equação de convecção-difusão que modela um micromisturador anelar. A abordagem baseia-se na separação dos dois termos que compõem esta equação. O termo convectivo da equação será resolvido usando o método do Tubo de Trajetórias e para resolver o termo difusivo emprega-se o método do Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado (BiCGStab). E, consequentemente, encontrar-se o melhor tempo de mistura para diferentes espessuras do canal e determina a espessura do canal que proporciona o melhor processo de mistura.

Palavras-chave: Tubo de trajetórias. Micromisturadores. Coordenadas polares. Técnica de separação de operadores.

ABSTRACT

FERREIRA, G. S. S. *Simulating flows in a micromisturer: a study numeric in the context of separation of operators via the trajectory pipe pethod.* 2020. 79 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2020.

In recent years with advances in microfluidic technology and Lab-On-a-Chip, have led to an increased interest in laminar fluid mixing. In several areas of knowledge, there are situations in which small volumes of products need to be simulated, among which physical, chemical, biological and medical analyzes can be mentioned. In this context a greater contact is required between the sample and the reagent used in order to achieve a homogeneity of the mixture. In view of this scenario, the application of micromistradores, which allow a fast and efficient mixing in a variety of tasks, ranging from mixtures to thermal exchanges. The objective of this work is to apply the operator separation technique to solve the convection-diffusion equation that models an annular micromixer. The approach is based on the separation of the two terms that compose this equation. The convective term of the equation will be solved using the Trajectory Tube method and the Stabilized Bi-Conjugate Gradient (BiCGStab) method is used to solve the diffusive term. And, consequently, the best mixing time for different channel thicknesses is found and determines the channel thickness which provides the best mixing process.

Keywords: Trajectory tube . Micromixers. Convection-diffusion equations in polar coordinates and operator separation technique.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Micromisturador com canal anelar	16
Figura 2 - Geometria do micromisturador	18
Figura 3 - Duas configurações de um mesmo. corpo	24
Figura 4 - Posições ocupadas pela partícula ζ e o vetor deslocamento	25
Figura 5 - <i>Path line</i> da partícula ζ	26
Figura 6 - Tubo de Trajetórias em um intervalo de tempo	27
Figura 7 - Volume de controle no campo de escoamento	29
Figura 8 - R e suas posições com relação (a) Ω_t e (b) $\Omega_{t+\Delta t}$	30
Figura 9 - Tubo de trajetória no domínio discretizado	33
Figura 10 - Grade de células centradas	35
Figura 11 - O backtracking e a localização do ponto $\hat{\mathbf{x}}$	36
Figura 12 - Exemplos de pontos utilizados na interpolação bidimensional	37
Figura 13 - Enumeração de nós que participam da interpolação	38
Figura 14 - Coordenadas Polares (r, θ) em \mathbb{R}^2	42
Figura 15 - Transformação de um retângulo em um setor anelar	43
Figura 16 - Transformação de uma região anelar sobre uma região retangular e vice-versa	44
Figura 17 - Obtendo condições de contorno para o domínio matemático.	49
Figura 18 - Concentração no tempo adimensional $\omega t = 0$ e com a condição inicial dada pela Eq. (80)	51
Figura 19 - Medida de mistura em regime puramente difusivo	52
Figura 20 - Medida de mistura $m(t)$ em regime dominado pela difusão	53
Figura 21 - Ação de mistura para o tempo adimensional igual 6,99	54
Figura 22 - Ação de mistura para o tempo adimensional igual 24,61	55
Figura 23 - Medida de mistura $m(t)$ no regime convectivo.	56
Figura 24 - Iniciação do processo de mistura com condição inicial dada por $c(r, \theta, 0) = \cos(\theta)$	57
Figura 25 - Ação de mistura para $\omega t = 64,97$	58
Figura 26 - Ação de mistura para $\omega t = 135,15$	59
Figura 27 - Processo de mistura para a condição inicial mostrada na Eq. (82)	60
Figura 28 - Condição Inicial apresentada no domínio matemático.	61
Figura 29 - Imagens caóticas.	62
Figura 30 - Processo de mistura para quatro tempos ωt : a) 0,08 b) 0,18 c) 0,31 d) 0,47	64
Figura 31 - Processo de mistura para quatro tempos ωt : a) 0,63 b) 0,83 c) 1,01 d) 1,28	65
Figura 32 - Níveis de concentração para $\omega t = 3,29$	66
Figura 33 - Representação de diferentes γ	67

Figura 34 - Curva da relação entre o tempo adimensional e número de Péclet para $\gamma = 0,1$. . .	68
Figura 35 - Condição inicial com $\gamma = 0.1$	69
Figura 36 - Perfil de concentração com $\omega t = 0,15$	70
Figura 37 - Níveis de concentração em $\omega t = 3,4$	71
Figura 38 - Curva da relação entre o tempo ωt e Pe para $\gamma = 0,1$	72
Figura 39 - Média de iterações do Gradiente Bi-Conjugado	73

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Parâmetros utilizados no regime difusivo	51
Tabela 2 - Parâmetros utilizados no regime dominado pela convecção	56
Tabela 3 - Parâmetros do regime totalmente convectivo	59
Tabela 4 - Parâmetros utilizados para gerar resultados em condições Não Assintóticas	63
Tabela 5 - Tempo de CPU	74

LISTA DE ALGORITMOS

Algoritmo 1 - Localizando o “pé” da trajetória	46
--	----

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BiCGStab	Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado
DNA	Ácido Desoxirribonucleico
LOC	Lab-On-a-Chip
MHD	Magneto-hidrodinâmico
PCR	Polymerase Chain Reaction
Pe	Péclet
TTC	Método do Tubo de Trajetórias para a equação de Convecção

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	13
1	MODELAGEM DE MICROMISTURADORES ANELARES	16
1.1	Problema Físico	16
1.2	Formulação Matemática	17
1.2.1	<u>Medida de mistura</u>	19
1.2.2	<u>Medida de Mistura Assintótica para números de Péclet pequenos</u>	20
1.2.3	<u>Medida de Mistura Assintótica para $Pe \gg 1$</u>	21
2	O MÉTODO DE TUBO DE TRAJETÓRIAS PARA A EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO	23
2.1	Formulação Integral do Método TTC	27
2.2	Esquema Numérico do método TTC	32
2.3	Etapas de Backtracking e de Integração	34
3	TÉCNICA DE SEPARAÇÃO DE OPERADORES PARA A EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO EM COORDENADAS POLARES	39
3.1	Aspectos Gerais do método	39
3.1.1	<u>Descrição do domínio matemático do problema físico</u>	40
3.1.2	<u>Transformações</u>	40
3.2	Coordenadas polares	41
3.2.1	<u>Coordenadas Polares versus Cartesianas</u>	41
4	VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA	50
4.1	Regime difusivo	50
4.1.1	<u>Regime puramente difusivo</u>	52
4.1.2	<u>Regime dominado pela difusão</u>	53
4.2	Regime Convectivo	55
4.2.1	<u>Regime dominado pela convecção</u>	55
4.2.2	<u>Regime totalmente convectivo</u>	58
5	RESULTADOS EM CONDIÇÕES NÃO ASSINTÓTICAS	63
5.1	1ª Condição	63
5.2	2ª Condição	69
	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	75
	REFERÊNCIAS	77

INTRODUÇÃO

Recentes avanços na tecnologia microfluídica e *Lab-On-a-Chip*, ou LOC levaram a um aumento do interesse pela mistura laminar de fluidos.

Efetivamente, o LOC caracteriza-se pela manipulação de volumes de fluido extremamente baixos, menos de picolitros (10^{-12} de litros). Na química são realizados estudos com a intenção de misturar reagentes e separar partículas sólidas e filtragem. Por diversos motivos, alguns materiais químicos são de difícil aquisição, muitas vezes devido à escassez natural destes ou à dificuldade de produção. Algumas reações químicas talvez nunca tenham sido estudadas devido a esses fatores.

Diante deste contexto surge a utilização dos micromisturadores, que possibilitam uma mistura eficiente e rápida em uma diversidade de tarefas.

De acordo com Haverkamp et al. (1999), os dispositivos utilizados, atualmente, são operados em condições contínuas e (devido às pequenas dimensões dos microcanais) o regime de escoamento resultante é predominantemente laminar. De maneira a misturar efetivamente em um tempo razoável, os fluidos devem ser manipulados de tal modo que a área da superfície interfacial entre eles aumente, com isso, reduzindo a distância difusional, melhorando a difusão molecular para auxiliar no processo de mistura.

São diversificados os mecanismos existentes para possibilitar o contato e a total mistura entre os fluidos, englobando: divisão e recombinação, micromisturadores anelares, multilaminação, enfoque hidrodinâmico, junções -T e -Y (HAVERKAMP et al., 1999).

West et al. (2002) propõem a construção de um micromisturador, Fig. (1), usando uma geometria anelar. Estes dispositivos são utilizados na amplificação do DNA através da reação em cadeia da polimerase ou *Polymerase Chain Reaction-PCR*, como visto em (RAMAKERS et al., 2003), (ZHANG; XING; LI, 2007) e (BHAT et al., 2009). A natureza cíclica do PCR sugere que um canal circular, ou anelar, poderia ser utilizado para conduzir um ciclo térmico a cada revolução. Pois a grande maioria dos métodos de PCR dependem do ciclo térmico, o que envolve a exposição dos reagentes a ciclos de aquecimento e resfriamento repetidos, permitindo diferentes reações dependentes da temperatura - especificamente, a fusão do DNA e a replicação de DNA orientada por enzimas - para prosseguir rapidamente várias vezes em sequência. Esta proposta de um micromisturador anelar é acessível à implementação de um único elemento de detecção, afim de quantificar o rendimento do produto durante todo o curso da reação. A detecção, juntamente com a flexibilidade do número de ciclos, mais uma vez oferecida pela circular geometria do canal, pode ser usado para evitar ciclos de temperaturas térmicas e permite ainda a quantificação do número de cópias do modelo original (SAIKI et al., 1988), (PELT-VERKUIL; BELKUM; HAYS, 2008)

Gelb et al. (2004) propõem a modelagem matemática de um micromisturador ane-

lar idealizado por West et al. (2002). Nesta abordagem resolve-se a equação de convecção-difusão em coordenadas polares, comparando resultados assintóticos e numéricos. São analisados, também, o tempo necessário para a mistura em diferentes número de Péclet e em diferentes regimes. Entretanto, esta análise limita-se a uma estrutura pequena e fixa do canal, decorrente de um parâmetro utilizado na modelagem.

O presente trabalho aplica uma técnica de separação de operadores para resolver a equação de convecção-difusão dada em coordenadas polares. Aqui, particularmente, realiza-se a modelagem domicromisturador anelar apresentado na Fig. (1).

Tal técnica é bem difundida como pode ser visto em (BELL; BINNING, 2004), (KARLSEN et al., 1998), (KHAN; LIU, 1995), (KHAN; LIU, 1998) e (FLORES, 2009). A abordagem baseia-se na separação dos dois termos que compõem a equação de convecção-difusão. O desacoplamento ocorre em um mesmo passo de tempo, de modo que o problema principal é subdividido em dois subproblemas: convectivo e difusivo. A principal vantagem desta metodologia é possibilitar o uso de métodos específicos para solucionar cada um dos subproblemas resultante da separação de operadores.

O termo convectivo da equação será resolvido usando o método do Tubo de Trajetórias. O método do Tubo de Trajetórias é um algoritmo semi-Lagrangiano para equações de advecção, cuja formulação baseia-se nos fundamentos da mecânica dos meios contínuos. Este algoritmo semi-Lagrangiano é basicamente intuitivo e utiliza o chamado teorema do transporte de Reynolds para estabelecer criteriosamente sua principal propriedade, escrita com base em equações integrais conservativas (HENDERSON; SAMPAIO; PENA, 2009), (HENDERSON; SAMPAIO; PENA, 2011) e (HENDERSON; PACHECO; KISCHINHEVSKY, 2017).

Para resolver a parte difusiva emprega-se o método de diferenças finitas centradas e o Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado (BiCGStab). O BiCGStab é usado para resolução de sistemas lineares com matrizes não simétricas (VORST, 1992).

O objetivo geral deste trabalho é simular escoamentos em um micromisturador e realizar um estudo numérico no contexto da separação de operadores, através do método do Tubo de Trajetórias. E como objetivos específicos temos:

- Determinar a espessura do canal que proporciona o melhor processo de mistura.
- Encontrar o melhor tempo de mistura para diferentes espessuras do canal;

Organização do Trabalho

Para apresentar o problema de interesse e as formulações a serem utilizadas, este trabalho está organizado da seguinte forma: no Capítulo 1, realiza-se a formulação matemática do micromisturador anelar. No Capítulo 2, é apresentada a formulação do Tubo de Trajetórias utilizando os aspectos cinemáticos da mecânica dos meios contínuos. O Capítulo 3, é dedicado a técnica de separação de operadores para a equação de convecção-difusão. A validação da metodologia proposta é apresentada no Capítulo 4. Os

resultados são apresentados no Capítulo 5. Logo após são apresentadas as conclusões e perspectivas futuras.

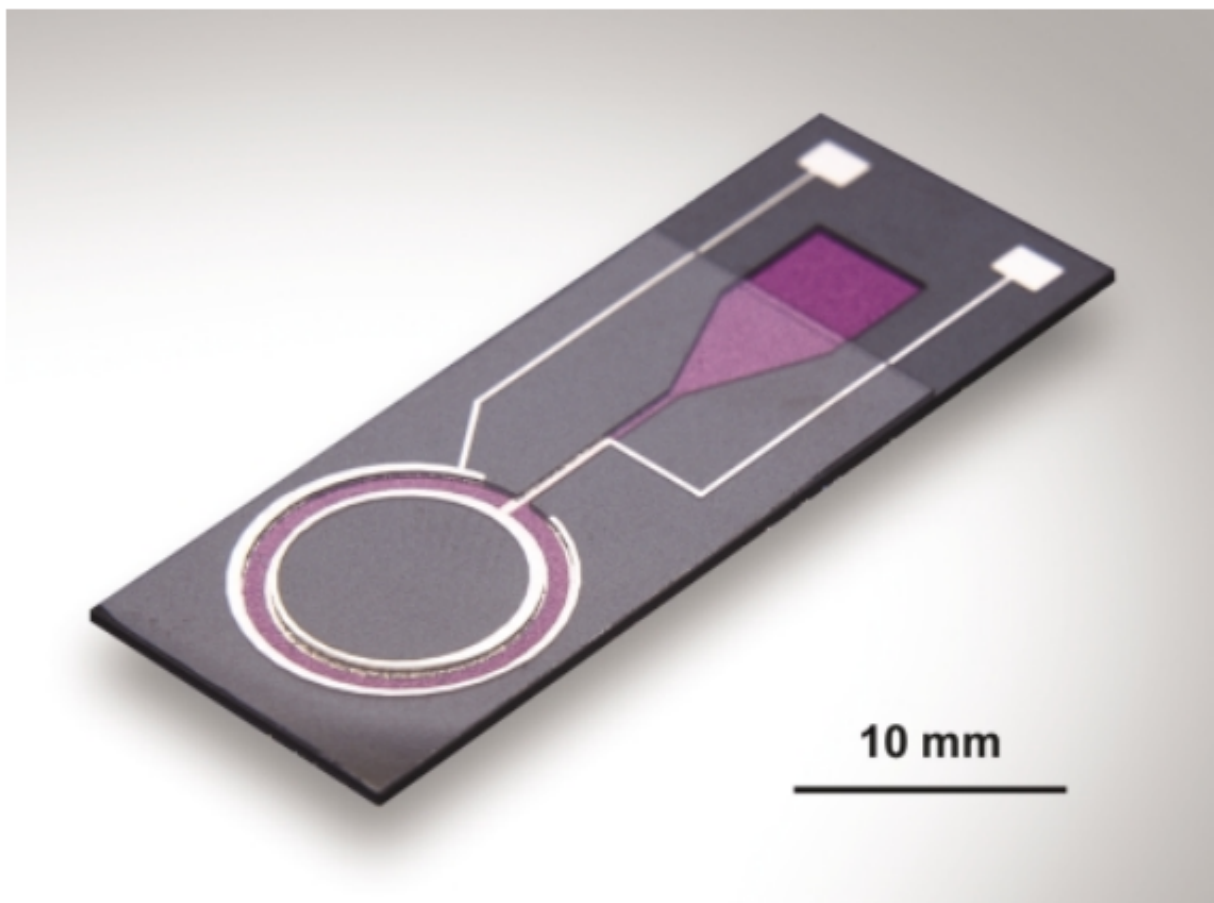
1 MODELAGEM DE MICROMISTURADORES ANELARES

1.1 Problema Físico

Neste trabalho analisa-se o micromisturador anelar magneto-hidrodinâmico (MHD) apresentado na Fig. (1). Como foi dito anteriormente tal micromisturador foi idealizado e proposto em West et al. (2002). O protótipo foi fabricado usando um disco de latão posicionado dentro de um anel de latão (ambos com $500\ \mu\text{m}$ de espessura) e colado em uma placa de policarbonato ($350\ \mu\text{m}$ de espessura) para formar paredes verticais que também servem como eletrodos.

Este modelo de misturador consiste em dois cilindros coaxiais eletricamente condutores, limitado por uma parede inferior isolante e uma superfície superior livre. Os fluidos

Figura 1 - Micromisturador com canal anelar



Fonte: WEST et al.,2002.

condutores a serem misturados são confinados no canal formado entre os dois cilindros. Este canal está alocado sob um campo magnético uniforme paralelo ao eixo do cilindro,

produzido por um imã permanente. Quando uma diferença de potencial elétrico é aplicada entre os cilindros coaxiais, surge uma corrente elétrica radial no fluido. A interação da corrente radial com o campo axial magnético origina uma força azimutal de Lorentz que impulsiona o fluido e a mistura ocorre.

É crescente o uso de dispositivos microfluídicos que utilizam forças eletromagnéticas para controlar e manipular fluidos (BAU et al., 2003) e (QIAN; BAU, 2009).

Ressalta-se que o interesse em fluxos MHD na configuração anelar não se restringe a microfluídica. Na verdade, os fluxos de metais líquidos em dutos anelares também foram estudados para testar a estabilidade do fluxo e o comportamento do fluxo do duto sob campos magnéticos fortes e uniformes, evitando a dificuldade de considerar a região de entrada para o campo magnético que é presente em dutos retilíneos (MORESCO; ALBOUS-SIERE, 2004), (ZHAO; ZIKANOV, 2012), (NIKOL'SKII, 2012) e (PÉREZ-BARRERA; ORTIZ; CUEVAS, 2016).

1.2 Formulação Matemática

A geometria anelar do micromisturador é mostrada na Fig. (2), onde o raio da linha central é R e ρ representa a metade da largura do canal. Portanto a parede interna é dada por $r = R - \rho$ e a parede externa por $r = R + \rho$. Descreve-se a estrutura do micromisturador usando o parâmetro adimensional, γ , dado por:

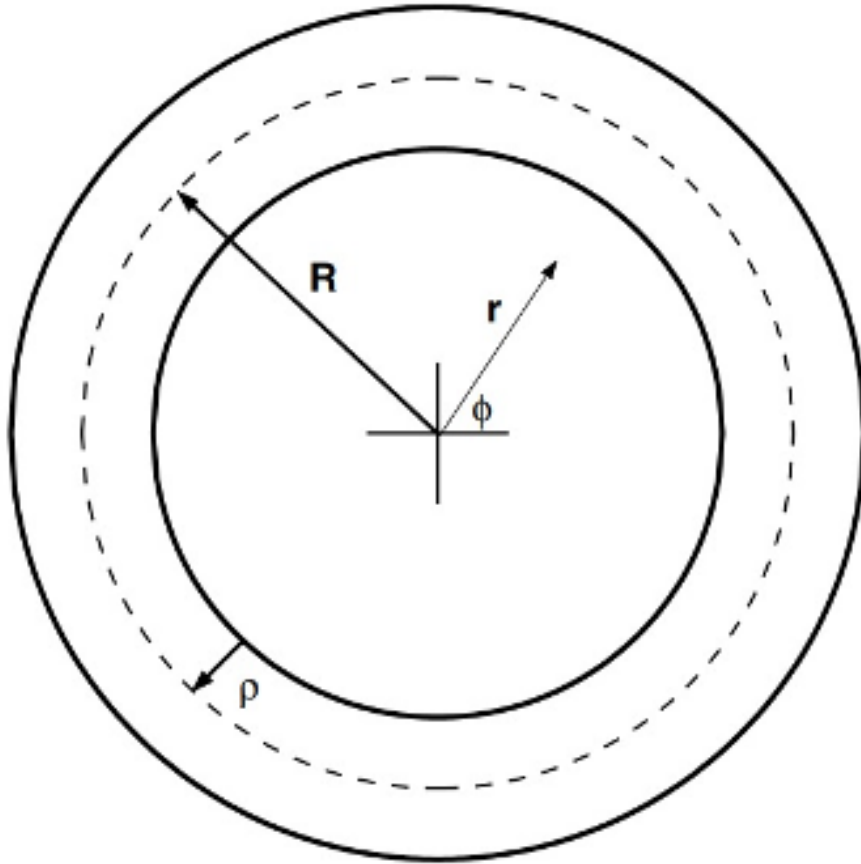
$$\gamma = \frac{\rho}{R}, \quad (1)$$

com $0 < \gamma < 1$. Segue da Eq. (1) que ρ é dado por $\rho = \gamma R$. Com relação ao parâmetro γ , observa-se que o canal será um disco quando $\gamma \rightarrow 0$ e quando este aproxima-se de 1 o anel torna-se uma circunferência. Segundo Gelb et al. (2004), no caso bidimensional considerado aqui, a velocidade é dada nas direções r e θ , $\mathbf{v} = (v_r, v_\theta)$. Na direção r a variação da posição radial em relação ao tempo é dada por $\frac{dr}{dt} = v_r$ e na direção θ temos que $\frac{d\theta}{dt} \equiv v_\theta = v(r)$. A equação para a velocidade azimutal $v(r)$ é obtida pela solução de uma forma simplificada da equação de Navier-Stokes equipada com uma força do corpo apropriado (veja Gelb et al. (2004)):

$$\frac{d^2 v}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} - \frac{v}{r^2} = -\frac{\alpha}{r}, \quad (2)$$

o parâmetro α representa a força de magnetismo hidrodinâmico (Magneto-hidrodinâmico -MHD) em que $\alpha = -BI/4\pi h\eta$ e as constantes I , B , h e η são respectivamente as forças do campo magnético, corrente média, profundidade do canal e a viscosidade do fluido.

Figura 2 - Geometria do micromisturador



Fonte: GLEESON, 2005.

A profundidade do canal, h , é medida de cima para baixo, ao longo do eixo de um eixo vertical sendo portanto um valor negativo De acordo com Gelb et al. (2004), a solução da Eq. (2) é dada por:

$$v(r) = \frac{\omega}{8R\rho r} \left[\frac{1}{4} - \frac{(R^2 - \rho^2)^2}{16R^2\rho^2} \left(\ln \frac{R-\rho}{R+\rho} \right)^2 \right]^{-1} \times \left[(R^2 - \rho^2)^2 \ln \frac{R-\rho}{R+\rho} + r^2(R - \rho)^2 \ln \frac{r}{R-r} + r^2(R + \rho)^2 \ln \frac{R+\rho}{r} \right]. \quad (3)$$

Na Eq. (3), a velocidade angular média ω é dada por:

$$\omega = \alpha \left[\frac{1}{4} - \frac{(R^2 - \rho^2)^2}{16R^2\rho^2} \left(\ln \frac{R - \rho}{R + \rho} \right)^2 \right]. \quad (4)$$

A Eq. (3) reduz-se ao perfil parabólico de Poiseuille quando $\gamma \rightarrow 0$:

$$v(r) \approx \frac{3\omega R}{2\rho^2}(r - R + \rho)(R + \rho - r), \quad (5)$$

com velocidade máxima ocorrendo em $r = R$, dada por

$$v_{max} = \frac{3}{2}\omega R. \quad (6)$$

Como $v_r = 0$, a equação de convecção-difusão em coordenadas polares, que modela o escoamento no micromisturador anelar, toma a forma particular:

$$\overbrace{\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v(r)}{r} \frac{\partial c}{\partial \phi}}^{\text{termo convectivo}} - \overbrace{\frac{\kappa}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) - \frac{\kappa}{r^2} \frac{\partial^2 c}{\partial \phi^2}}^{\text{termo difusivo}} = 0, \quad (7)$$

em que c representa a concentração do soluto e κ o coeficiente de difusão molecular. A Eq. (7) é equipada com condição inicial:

$$c(r, \phi, 0) = c_0(r, \theta) \quad (8)$$

e com as seguintes condições de contorno:

$$\frac{\partial c}{\partial r}(R - \rho, \phi, t) = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial c}{\partial r}(R + \rho, \phi, t) = 0. \quad (10)$$

1.2.1 Medida de mistura

Para determinar as medidas de mistura analisa-se as soluções da Eq. (7). O parâmetro adimensional usado para comparar a importância do termo convectivo e difu-

sivo da Eq. (7) é o número Péclet, que é definido como:

$$Pe = \frac{\omega R \rho}{\kappa}. \quad (11)$$

Na Eq. (11), ωR é a velocidade linear característica, ρ é a menor dimensão linear no sistema e κ é o coeficiente de difusão molecular.

A concentração média no micromisturador é dada pela equação:

$$\langle \bar{c} \rangle = \frac{1}{4\pi R \rho} \int_{R-\rho}^{R+\rho} \int_0^{2\pi} c(r, \phi, t) r d\phi dr. \quad (12)$$

Observa-se que a concentração média dada pela Eq. (12) é uma constante, ou seja, a quantidade total de soluto não é alterada ao longo do tempo, mas redistribuída uniformemente sobre o anel do micromisturador.

Gelb et al. (2004) definem uma medida de mistura $m(t)$, função positiva no tempo, que caracteriza o desvio da concentração no tempo t do seu estado uniforme $\langle \bar{c} \rangle$. Tal medida de mistura é dada por:

$$m(t) = \frac{\langle (c(r, \phi, t) - \langle \bar{c} \rangle)^2 \rangle}{\langle (c(r, \phi, 0) - \langle \bar{c} \rangle)^2 \rangle}. \quad (13)$$

1.2.2 Medida de Mistura Assintótica para números de Péclet pequenos

Quando o número Péclet dado pela Eq. (11) é suficientemente pequeno, como mostrado em Gelb et al. (2004), os efeitos difusivos dominam completamente o movimento convectivo. Assim, o tempo de mistura para difusão pode ser calculado resolvendo a equação de difusão, como segue:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) - \frac{\kappa}{r^2} \frac{\partial^2 c}{\partial \phi^2} = 0, \quad (14)$$

em que o termo convectivo presente na Eq. (7) não é mais considerado. A solução analítica da Eq. (14) é dada pela série:

$$c = \langle \bar{c} \rangle + \sum_{[n=1]}^{\infty} \sum_{[j=1]}^{\infty} e^{-\kappa \lambda_{nj} t} G_n \left(r \sqrt{\lambda_{nj}} \right) [\alpha_{nj} \cos(n\phi) + \beta_{nj} \sen(n\phi)], \quad (15)$$

onde α_{nj} e β_{nj} são constantes determinadas a partir da condição inicial e λ_{nm} são auto-

valores determinados pelas condições:

$$\frac{dG_n}{dr} = 0, \quad (16)$$

em que $r = R - \rho$ e $r = R + \rho$.

As funções G_n são dadas em termos das funções de Bessel, J_n e Y_n , como segue:

$$G_n(r\sqrt{\lambda}) = J_n(r\sqrt{\lambda}) - Y_n(r\sqrt{\lambda}) \left[\frac{J_{n-1}((R-\rho)\sqrt{\lambda}) - J_{n+1}((R-\rho)\sqrt{\lambda})}{Y_{n-1}((R-\rho)\sqrt{\lambda}) - Y_{n+1}((R-\rho)\sqrt{\lambda})} \right]. \quad (17)$$

Para a condição inicial dada pela Eq. (8), apenas o termo $n = 1$ da soma dupla está presente na Eq. (15). Consequentemente, a medida de mistura dada pela Eq. (13) será reescrita na forma deduzida por Gelb et al. (2004):

$$m(t) = \sum_{[j=1]}^{\infty} e^{-\kappa\lambda_{1j}t} \frac{\overline{G_1(r\sqrt{\lambda_{1j}})^2}}{G_1(r\sqrt{\lambda_{1j}})^2}. \quad (18)$$

A forma de $m(t)$ em grandes tempos t é dominada pelo primeiro termo ($j = 1$) nesta soma. De fato, no limite $\gamma \rightarrow 0$, tem-se:

$$m(t) \sim \exp(-2\kappa\lambda_{11}t) \quad (19)$$

em $t \rightarrow \infty$, com autovalor dado por:

$$\lambda_{11} = \frac{1}{R^2} \left[1 + \frac{1}{3}\gamma^2 + \mathcal{O}(\gamma^4) \right], \quad (20)$$

para $\gamma \ll 1$. Para detalhes da dedução dessa estimativa assintótica para a medida de mistura veja Gelb et al. (2004).

1.2.3 Medida de Mistura Assintótica para $Pe \gg 1$

De acordo com Gleeson (2005), a maioria dos trabalhos sobre a caracterização do decaimento de $m(t)$ em domínios fechados concentra-se no tempo $t \rightarrow \infty$. Nos casos bidimensionais com $Pe \gg 1$ que consideramos aqui, a medida de mistura é encontrada

por meio do decaimento exponencial dado por:

$$m(t) \sim \exp(-\lambda_1 t), \text{ para } t \rightarrow \infty, \quad (21)$$

com taxa de decaimento λ_1 ajustado para um grande número de Péclet como:

$$\lambda_1 \sim Pe^{-\alpha} \text{ para } Pe \rightarrow \infty. \quad (22)$$

Giona, Cerbelli e Vitacolonna (2004) mostraram que para uma ampla classe de fluxos unidirecionais considera-se $\alpha = 1/2$.

2 O MÉTODO DE TUBO DE TRAJETÓRIAS PARA A EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO

Neste capítulo descreveremos a formulação do método do Tubo de Trajetórias para a equação de convecção, intitulado método TTC. A base para a formulação teórica do método TTC advém da mecânica dos meios contínuos, à luz da metodologia Lagrangiana (HENDERSON; SAMPAIO; PENA, 2009) e (HENDERSON; SAMPAIO; PENA, 2011).

Faz-se necessário, inicialmente, a abordagem de alguns conceitos básicos relacionados com aspectos cinemáticos da mecânica do contínuo e da metodologia Lagrangiana.

A metodologia Lagrangiana descreve o movimento de cada partícula, acompanhando-a em sua trajetória. O observador desloca-se simultaneamente como a partícula. As posições das partículas são individualmente observadas como uma função do tempo. Segundo Malvern (1969) na descrição Lagrangeana, o observador é mantido em contato permanente com a partícula ao longo do tempo, isto é, percorre com ela a trajetória descrita naquela região considerada observando cada instante do movimento.

A mecânica do contínuo não apenas unifica as teorias clássicas de mecânica dos sólidos e dos fluidos mas também fornece os elementos necessários para generalização das mesmas. Isso se deve em grande parte aos trabalhos pioneiros de mecanicistas como Truesdell e Toupin (1960), Gurtin (1981), Ottino e Ottino (1989) e Slattery (1999), que transformaram a mecânica do contínuo em um formalismo para obtenção de modelos contínuos em geral.

Na mecânica do contínuo um corpo material é um contínuo, ou seja, é um conjunto de pontos contínuos chamados de pontos materiais. A propriedade básica de um corpo material é descrita pelo fato dele poder ocupar diferentes regiões do espaço Euclidiano de pontos. Tais regiões são chamadas de configurações de corpo, as quais variam, possivelmente, com o passar do tempo. Apesar disso, nenhuma dessas configurações podem ser intrinsecamente associada ao corpo (GURTIN, 1981).

Será considerado neste trabalho, apenas, corpos bidimensionais, ou seja, conjuntos em \mathbb{R}^2 . Portanto, num certo instante $\tilde{t} \in \mathbb{R}$, escolhido arbitrariamente, um corpo bidimensional B ocupa uma região chamada de configuração de referência, a qual corresponde a uma região fechada $\Omega_{\tilde{t}} \subset \mathbb{R}^2$. Logo, em instantes diferentes o corpo apresenta configurações diferentes, por exemplo, nos instantes \tilde{t} e t , o mesmo corpo é representado por duas configurações $\Omega_{\tilde{t}}$ e Ω_t (possivelmente diferentes), como mostra a Fig. (3). O conjunto Ω_t é chamado de configuração atual.

As regiões, supostamente regulares, como na Fig. (3), podem-se distinguir pelas formas geométricas e pelas posições ocupadas em \mathbb{R}^2 .

O movimento do corpo durante o intervalo de tempo I é dado pela função movimento: $\mathbf{x}: \Omega_{\tilde{t}} \times I \rightarrow \mathbb{R}^2$. O vetor posição obtido pela função movimento de uma dada

Figura 3 - Duas configurações de um mesmo. corpo



Fonte: PENA,2006.

configuração de um corpo no instante t , pode ser expresso como:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\zeta, t), \quad (23)$$

onde ζ representa uma partícula genérica do corpo B , tomado na configuração de referência $\Omega_{\tilde{t}}$. Na Fig. (4) tem-se a representação da posição do ponto material arbitrário ζ na configuração atual relacionada com o tempo t .

O vetor deslocamento da partícula ζ entre os instantes \tilde{t} e t será dado por:

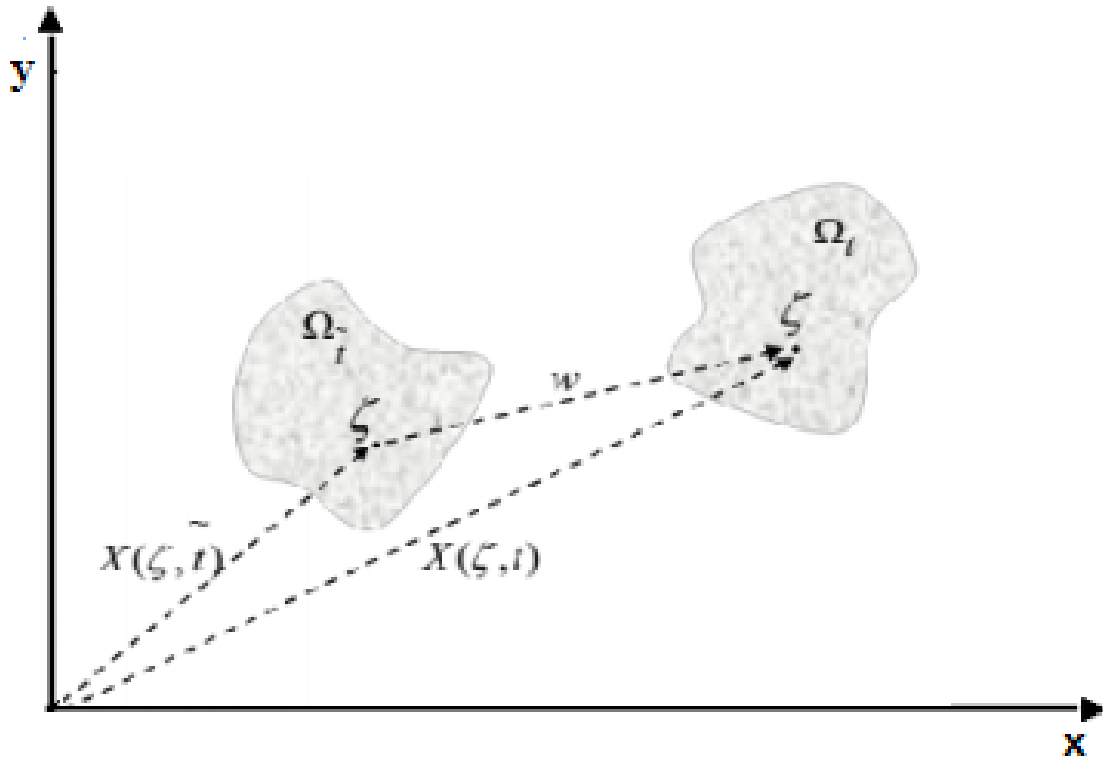
$$W = \mathbf{x}(\zeta, t) - \mathbf{x}(\zeta, \tilde{t}). \quad (24)$$

Por simplicidade usa-se a notação $\mathbf{x} = (x, y)$, em que $x = x(t)$ e $y = y(t)$, são as coordenadas do vetor posição da partícula ζ no instante t em relação ao sistema de eixos cartesianos.

Neste trabalho o domínio do espaço-tempo utilizado é identificado como o produto Cartesiano ($\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$) do espaço Euclidiano \mathbb{R}^2 com o eixo do tempo \mathbb{R} .

O conceito de trajetória de uma partícula material ζ , aqui considerado, é definido como a curva no espaço-tempo ao longo da qual uma partícula material arbitrária se desloca. No entanto, existe outro conceito Euleriano para trajetória em que determina-se a localização da partícula somente no espaço a partir da deformação do corpo. Esse lugar geométrico no espaço, aqui o \mathbb{R}^2 , é denominado na literatura de língua inglesa como *path line*. Vale ressaltar que, neste contexto, existe uma diferença entre trajetória e *path line*. Pois a *path line* define-se como uma curva no espaço (\mathbb{R}^2) parametrizada pelo

Figura 4 - Posições ocupadas pela partícula ζ e o vetor deslocamento



Fonte: HENDERSON; SAMPAIO; PENA, 2011.

tempo e a trajetória encontra-se no espaço-tempo ($\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$).

Assim, de acordo com a definição apresentada por Gurtin (1981), a trajetória de uma partícula ζ , será definida aqui matematicamente como sendo o seguinte subconjunto de $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$,

$$\mathfrak{S}_\zeta = \{(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}; \mathbf{x} = \mathbf{x}(\zeta, t) \in \Omega_t, t \in \mathbb{R}\}. \quad (25)$$

A equação paramétrica da *path line* de uma partícula que se move com velocidade $\mathbf{v} = (u, v)$, em que o tempo t determina a posição ocupadas por ζ , será a solução do seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}. \quad (26)$$

Em termos dos componentes de velocidade, esse sistema pode ser reescrito como:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = u \\ \frac{dy}{dt} = v. \end{cases} \quad (27)$$

Para determinar uma solução particular do sistema de equações diferenciais ordinárias dado na Eq. (26), necessita-se de uma condição adicional obtida pela escolha de uma determinada configuração de referência, na qual informa-se a posição da partícula material ζ em um determinado tempo \tilde{t} ,

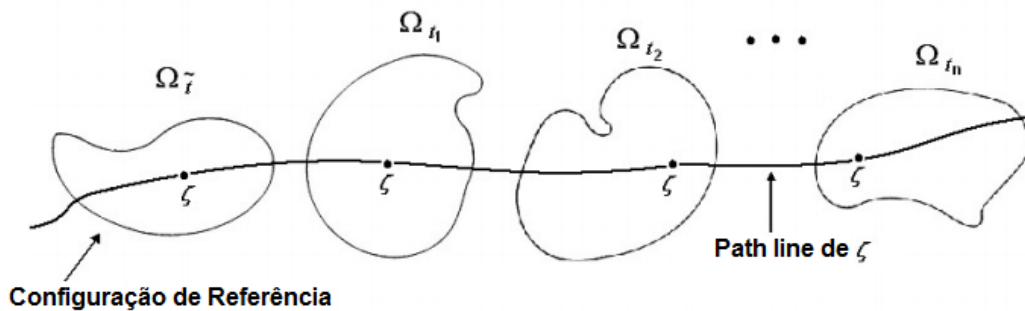
$$\mathbf{x}(\zeta, \tilde{t}) = \tilde{\mathbf{x}}. \quad (28)$$

Em termo de seus componentes, a Eq. (27) toma a seguinte forma:

$$\begin{cases} x(\tilde{t}) = \tilde{x} \\ y(\tilde{t}) = \tilde{y}. \end{cases} \quad (29)$$

Na Fig. (5) é possível observar a configuração de referência da partícula ζ no tempo \tilde{t} e sua *path line*.

Figura 5 - *Path line* da partícula ζ .



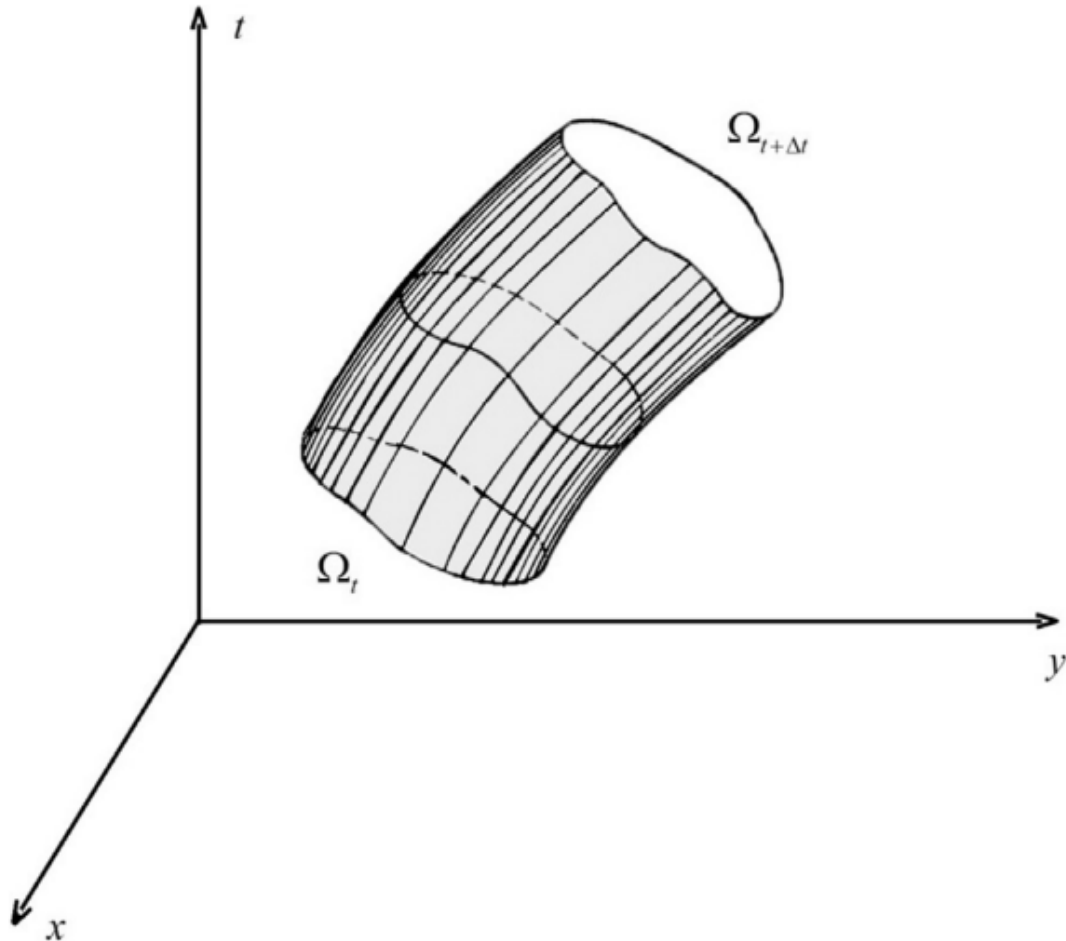
Fonte: PENA,2006.

Ao determinar a *path line* de ζ em um dado intervalo I , para todo $t \in I$, obtemos também a sua trajetória, isto é, os pares ordenados $(\mathbf{x}(\zeta, t), t) \in \mathbb{R}^2 \times I$. Por esta razão algumas vezes chamaremos de trajetória o conjunto solução da Eq. (26) em um certo intervalo I .

O tubo de trajetórias Σ , relacionado ao método TTC, é uma região no espaço-

tempo formada pela união das trajetórias relativas às partículas ζ de um dado corpo material B . A Fig. (6) apresenta um tubo de trajetórias definido em um intervalo $I = [t, t + \Delta t]$.

Figura 6 - Tubo de Trajetórias em um intervalo de tempo



Fonte: HENDERSON; PENA,2017.

Logo, o tubo de trajetória no intervalo $[t, t + \Delta t]$ será descrito como:

$$\Sigma_t = \bigcup_{\zeta \in B} \mathfrak{S}_\zeta. \quad (30)$$

2.1 Formulação Integral do Método TTC

O desenvolvimento do método TTC se faz mediante a integração da equação da convecção, visto que este método resolve a parte convectiva de um determinado problema em que o fenômeno ocorre. Ao integrar a equação da convecção $\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{v}) = 0$, ao

longo do tubo de trajetórias Σ_t apresentado na Fig. (6), encontra-se

$$\int_{\Sigma_t} \left[\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{v}) \right] d\mathbf{x}dt = 0, \quad (31)$$

ou seja,

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{\Omega_t} \left[\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{v}) \right] d\mathbf{x}dt = 0, \quad (32)$$

onde uma representação da configuração do fluido em um dado instante $t \in I$ é dada pelo domínio material Ω_t . É importante ressaltar que o método do Tubo de Trajetórias toma uma forma geral, sem compromisso com um tipo de sistema de coordenadas particular.

Proposição 2.1: (Teorema do transporte de Reynolds).

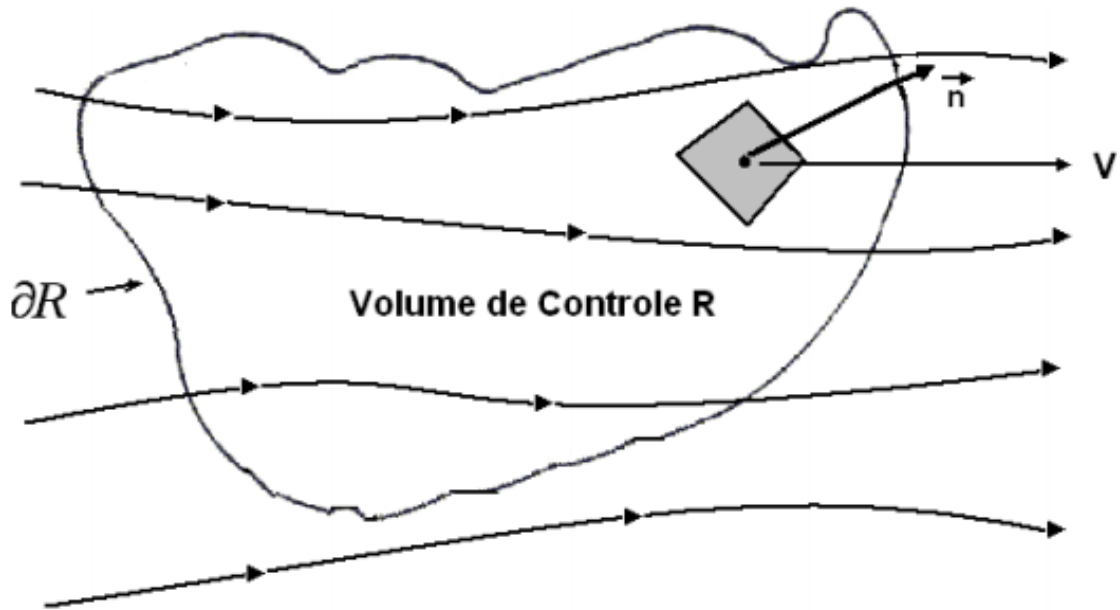
Seja $\Omega_t \subset \mathbb{R}^2$ um conjunto material que representa a configuração de um corpo B (ou parte dele) em um instante de tempo t , o qual se movimenta com velocidade $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$. Se, para todo t , $\varphi = \varphi(\mathbf{x}, t)$ é uma função escalar definida em Ω_t e de classe $C^1(\Omega_t)$, que representa uma propriedade intensiva (propriedade por unidade de volume) de B , então

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \varphi d\mathbf{x} = \int_{\Omega_t} \left[\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi \mathbf{v}) \right] d\mathbf{x}. \quad (33)$$

Prova : Seguindo os passos da prova do teorema apresentada por Pena (2006), utilizaremos o conceito auxiliar de volume de controle. Volume de controle R é definido como uma região regular limitada no espaço Euclidiano que mantém uma posição fixada com relação à origem do sistema de eixo. O volume de controle não sofre alterações em seu formato e também ocupa, sempre, a mesma posição com o passar do tempo, sendo um conceito puramente Euleriano, veja a Fig. (7). Aliás, para que faça sentido físico, observa-se que em um instante de tempo t o volume de controle deve estar contido na configuração do corpo considerado em estudo, isto é $R \subset \Omega_t$. Desse modo, a demonstração a ser desenvolvida pode ser considerada como uma técnica Euleriana-Lagrangiana, ou semi-Lagrangiana.

A integral $Q_{\Omega_t} \equiv \int_{\Omega_t} \varphi d\mathbf{x}$ representa a quantidade total da propriedade φ em Ω_t , calculada em um dado instante t . O que pretende-se, aqui, é determinar a taxa de

Figura 7 - Volume de controle no campo de escoamento



Fonte: PENA,2006.

variação dQ_{Ω_t}/dt , que segundo Luikov (1980) é definida como:

$$\frac{dQ_{\Omega_t}}{dt} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{Q_{\Omega_{t+\Delta t}} - Q_{\Omega_t}}{\Delta t} \right]. \quad (34)$$

Considere R , um volume de controle que no tempo t coincide com o domínio Ω_t , ou seja, $R = \Omega_t$, como mostra a Fig. (8-a). Na Fig. (8-b) é possível identificar três regiões importantes: $\vartheta_I = R - \Omega_{t+\Delta t}$, $\vartheta_{II} = R \cap \Omega_{t+\Delta t}$ e $\vartheta_{III} = \Omega_{t+\Delta t} - R$. Logo, podemos escrever $\Omega_{t+\Delta t} = \vartheta_{II} \cup \vartheta_{III} = (R - \vartheta_I) \cup \vartheta_{III}$.

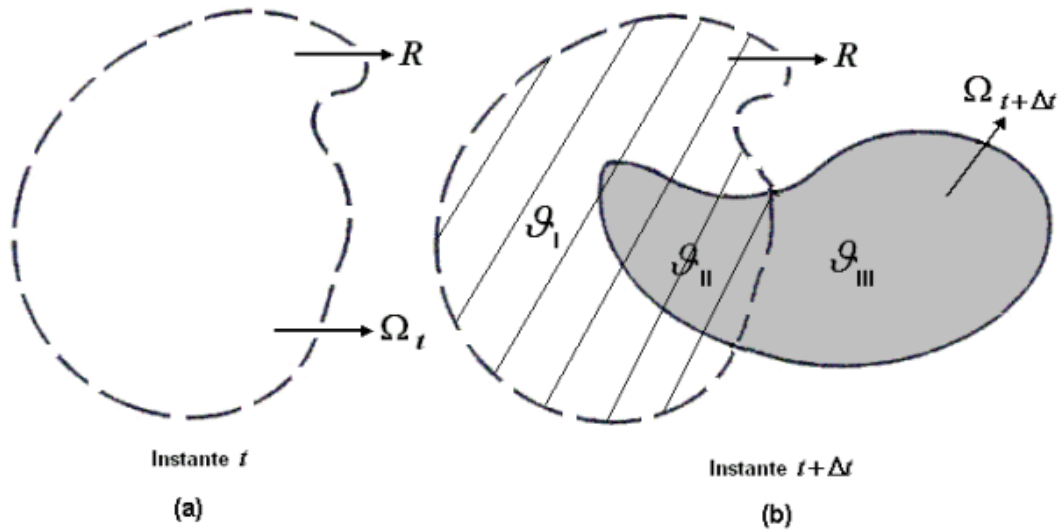
Logo, a Eq. (34) pode ser expressa como:

$$\frac{dQ_{\Omega_t}}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{(R-\vartheta_I) \cup \vartheta_{III}} \varphi d\mathbf{x} - \int_R \varphi d\mathbf{x} \right], \quad (35)$$

ou seja,

$$\frac{dQ_{\Omega_t}}{dt} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{\int_R \varphi d\mathbf{x} |_{t+\Delta t} - \int_R \varphi d\mathbf{x} |_t}{\Delta t} \right] - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\vartheta_I} \varphi d\mathbf{x} + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\vartheta_{III}} \varphi d\mathbf{x}. \quad (36)$$

Figura 8 - R e suas posições com relação (a) Ω_t e (b) $\Omega_{t+\Delta t}$.



Fonte: PENA,2006.

O primeiro termo do lado direito da Eq. (36) pode ser escrito como:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{\int_R \varphi d\mathbf{x} |_{t+\Delta t} - \int_R \varphi d\mathbf{x} |_t}{\Delta t} \right] = \frac{d}{dt} \int_R \varphi d\mathbf{x}. \quad (37)$$

Esse termo, portanto, representa a taxa de variação da propriedade φ no interior do volume de controle R . Na Eq. (36) a integral que aparece no terceiro termo do lado direito representa a quantidade da propriedade φ que deixou o volume de controle R , entre os instantes t e $t + \Delta t$. Logo, $\frac{1}{\Delta t} \int_{\vartheta_{III}} \varphi d\mathbf{x}$ representa uma média no tempo dessa quantidade.

Conseqüentemente, a taxa instantânea da propriedade φ que deixou o volume de controle será dada por $\dot{Q}_{out} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\vartheta_{III}} \varphi d\mathbf{x}$. De maneira inteiramente análoga, o segundo termo do lado direito de Eq. (36), agora denotado por $\dot{Q}_{int} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\vartheta_I} \varphi d\mathbf{x}$, representa a taxa da propriedade φ que entrou no volume de controle R no instante t . Com isso, a relação em Eq. (36) pode ser reescrita como segue:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \varphi d\mathbf{x} = \frac{d}{dt} \int_R \varphi d\mathbf{x} + \dot{Q}_{out} - \dot{Q}_{in}. \quad (38)$$

Como R não depende do tempo, a Eq. (38) será escrita como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \varphi d\mathbf{x} = \int_R \frac{\partial \varphi}{\partial t} d\mathbf{x} + \dot{Q}, \quad (39)$$

onde a taxa $\dot{Q} \equiv \dot{Q}_{out} - \dot{Q}_{in}$ é o fluxo líquido de φ que atravessa a superfície do volume de controle no instante t , devido ao campo de velocidade V . Denominando por ∂R a superfície que compreende o volume R , esse fluxo será determinado pela $\int_{\partial R} \varphi V \cdot \vec{n} ds$, onde \vec{n} é o vetor unitário normal exterior à superfície ∂R . Assim, da Eq. (39) segue que

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \varphi d\mathbf{x} = \int_R \frac{\partial \varphi}{\partial t} d\mathbf{x} + \int_{\partial R} \varphi V \cdot \vec{n} ds. \quad (40)$$

Aplicando o teorema da divergência no último termo do lado direito de Eq. (40), chegamos finalmente à forma particularmente procurada:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \varphi d\mathbf{x} = \int_{\Omega_t} \left[\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi \mathbf{v}) \right] d\mathbf{x}.$$

Observa-se que a existência de todas essas integrais acima e o emprego do teorema da divergência estão garantidos pela hipótese de que φ é uma função continuamente diferenciável, em ambas variáveis \mathbf{x} e t . Portanto conclui-se a prova do teorema do transporte de Reynolds.

Utilizando a Eq. (33) fornecida pelo teorema do transporte de Reynolds, obtemos uma nova expressão para a Eq. (32) dada por:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} c d\mathbf{x} \right) dt = 0. \quad (41)$$

Como por definição

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} c d\mathbf{x} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{\int_{t+\Delta t} c d\mathbf{x} - \int_t c d\mathbf{x}}{\Delta t} \right], \quad (42)$$

logo, pelo teorema fundamental do cálculo, obtemos

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} c d\mathbf{x} \right) dt = \int_{\Omega_{t+\Delta t}} c d\mathbf{x} - \int_{\Omega_t} c d\mathbf{x} = 0. \quad (43)$$

Como consequência da Eq. (43), pode-se reformular a Eq. (41). Assim, a mesma será reescrita por:

$$\int_{\Omega_{t+\Delta t}} c(\mathbf{x}, t + \Delta t) d\mathbf{x} = \int_{\Omega_t} c(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}. \quad (44)$$

A Eq. (44) demonstra que a massa é conservada ao longo do tubo de trajetórias Σ_t .

2.2 Esquema Numérico do método TTC

Com o objetivo de obter um esquema de discretização a partir da Eq. (44), considera-se uma malha no tempo $t + \Delta t$, tomada sobre o domínio físico.

Em comparação a ilustração apresentada na Fig. (9), $\Omega_{t+\Delta t}$ representará um elemento arbitrário da malha, sendo sua imagem mapeada para o instante anterior. Esse mapeamento é feito seguindo-se as trajetórias do soluto no sentido reverso do tempo. Assim, o elemento de área D_t encontra-se, possivelmente, deformado com relação à $\Omega_{t+\Delta t}$.

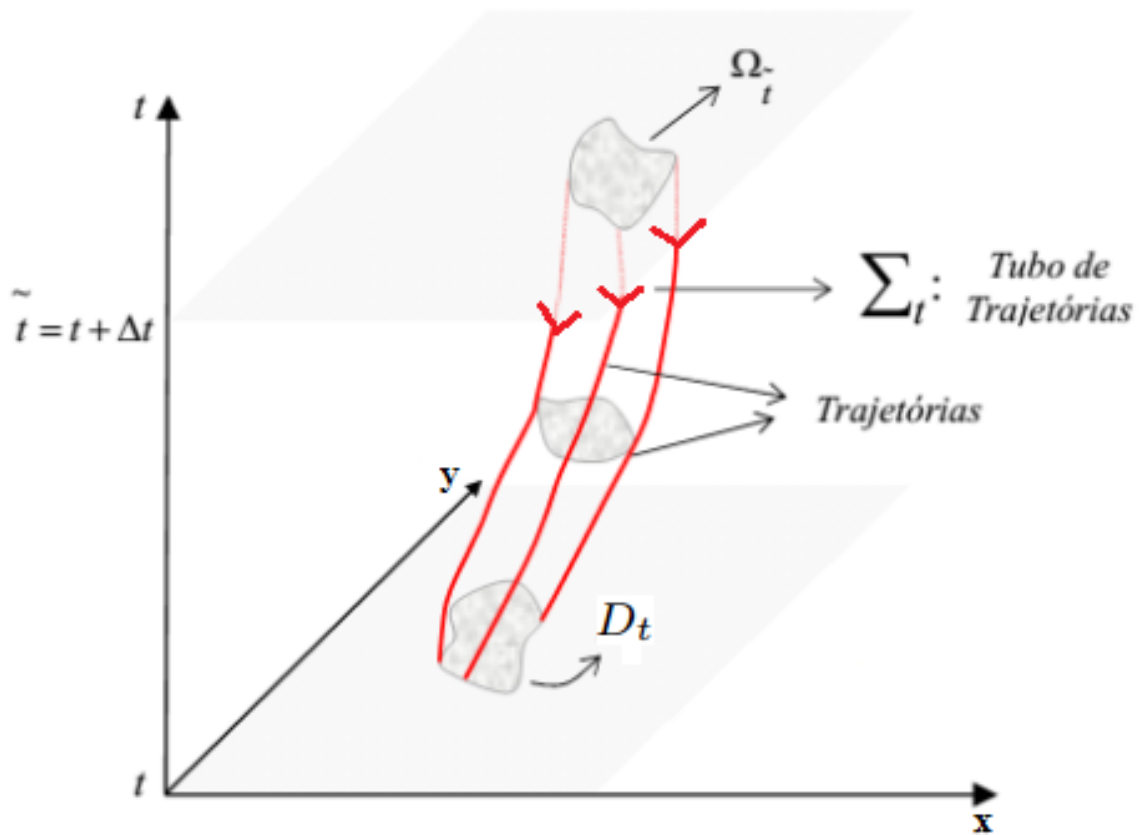
O mapeamento reverso de cada célula da grade ao longo das trajetórias e os processos de discretização determinam tubos de trajetórias, como mostrado na Fig. (9). Logo é possível escrever a formulação Lagrangiana apresentada na Eq. (44), para cada um desses tubos, como segue,

$$\int_{\Omega_{t+\Delta t}} c(\mathbf{x}, t + \Delta t) d\mathbf{x} = \int_{D_t} c(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}. \quad (45)$$

O valor médio da concentração c , em uma célula arbitrária $\Omega_{t+\Delta t}$, será dado por $c^{(n+1)}$ e definido como:

$$c^{(n+1)} = \frac{1}{|\Omega_{t+\Delta t}|} \int_{\Omega_{t+\Delta t}} c(\mathbf{x}, t + \Delta t) d\mathbf{x}, \quad (46)$$

Figura 9 - Tubo de trajetória no domínio discretizado



Fonte: FERREIRA, 2017.

onde $|\Omega_{t+\Delta t}| \equiv \int_{\Omega_{t+\Delta t}} d\mathbf{x}$ indica a área de $\Omega_{t+\Delta t}$. Associando as Eqs. (45) e (46), obtém-se uma nova equação para o valor médio da concentração, dada por:

$$c^{(n+1)} = \frac{1}{|\Omega_{t+\Delta t}|} \int_{D_t} c(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}. \quad (47)$$

A Eq. (47) representa a forma totalmente explícita do método TTC para a equação de convecção. Desta forma, pode-se determinar os valores médios de concentração no nível de tempo $t + \Delta t$, em função de valores de c definidos no nível de tempo anterior, t . Observe que a Eq. (47) é semi-Lagrangeana localmente conservativa, pois a conservação de massa é garantida apenas localmente em cada célula. Note ainda que para determinar o valor

de c no tempo $t + \Delta t$ é necessário calcular o valor da integral.

$$\int_{D_t} c(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (48)$$

2.3 Etapas de Backtracking e de Integração

Na “etapa de backtracking”, considerada a primeira etapa do procedimento para determinar a integral Eq. (47), realiza-se um processo retroativo no tempo ao longo das trajetórias, veja a Fig. (11). Durante esse procedimento, os nós de cada célula da grade de discretização do domínio da equação de convecção são retroagidos no tempo. Isso é feito através da resolução do sistema de equações diferenciais ordinárias representado pela Eq. (26), equipado com a condição adicional. Em seguida usando uma estratégia de integração apropriada, calcula-se a integral mostrada na Eq. (48). Essa segunda etapa será, então, denominada de “etapa de integração”. Nos procedimentos numéricos das etapas 1 e 2 são usadas uma grade de células centradas dispoendo de $n_x \times n_y$ blocos de tamanhos uniformes, com espaçamentos $\Delta x = L_x/n_x$ e $\Delta y = L_y/n_y$, em que L_x e L_y representam as dimensões de um domínio retangular nas direções x e y , respectivamente, como mostra a Fig. (10).

Assim, em cada instante $t + \Delta t$, o valor médio de c na célula $\Omega_{t+\Delta t}^{(i,j)} \equiv [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{i-1/2}, y_{i+1/2}]$ será representado por $c_{(i,j)}^{(n+1)}$. Desse modo estará determinado o valor médio da concentração no centro desta célula .

Como descrito anteriormente, na etapa de backtracking do nó (x_i, y_j) , o sistema de equações diferenciais indicado em Eq. (26) estará sujeito às condições dadas por $x(t + \Delta t) = x_i$ e $y(t + \Delta t) = y_j$.

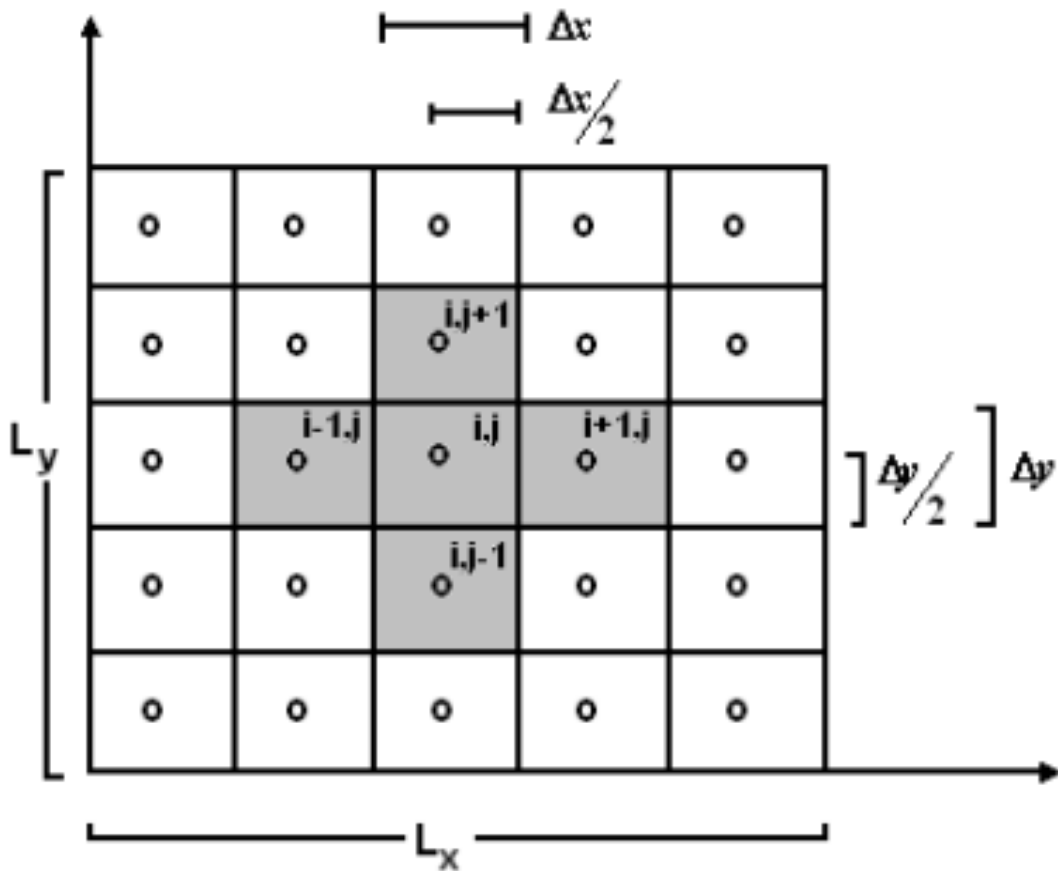
Com o intuito de garantir a eficiência e clareza do esquema desenvolvido neste trabalho, na etapa de integração, a integração dupla da função $c(\mathbf{x}, t)$ sobre o domínio D_t será calculada de forma aproximada, conforme a equação

$$c_{(i,j)}^{(n+1)} = \frac{1}{|\Omega_{t+\Delta t}^{(i,j)}|} \int_{D_t} c(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \approx \frac{1}{|\Omega_{t+\Delta t}^{(i,j)}|} c(\widehat{\mathbf{x}}, t) \int_{D_t} d\mathbf{x} = \frac{|D_t|}{|\Omega_{t+\Delta t}^{(i,j)}|} c(\widehat{\mathbf{x}}, t), \quad (49)$$

onde $\widehat{\mathbf{x}}$ é o ponto em D_t encontrado na etapa backtracking do centro da célula $\Omega_{t+\Delta t}^{(i,j)}$. Como o escoamento é incompressível, de acordo com Pena (2006) pode-se ver que $|D_t| = |\Omega_{t+\Delta t}^{(i,j)}|$. Logo, obtemos o seguinte esquema simplificado:

$$c_{(i,j)}^{(n+1)} \approx c(\widehat{\mathbf{x}}, t). \quad (50)$$

Figura 10 - Grade de células centradas



Fonte: PENA,2006.

Obtido o ponto $\hat{\mathbf{x}}$ o cálculo de $\hat{c} = c(\hat{\mathbf{x}}, t)$ será realizado por meio de uma interpolação bidimensional. Isso porque, como mostra a Fig. (11), esse ponto, obtido no tempo atrasado t , não se encontra necessariamente no centro de uma célula da grade referente ao instante t .

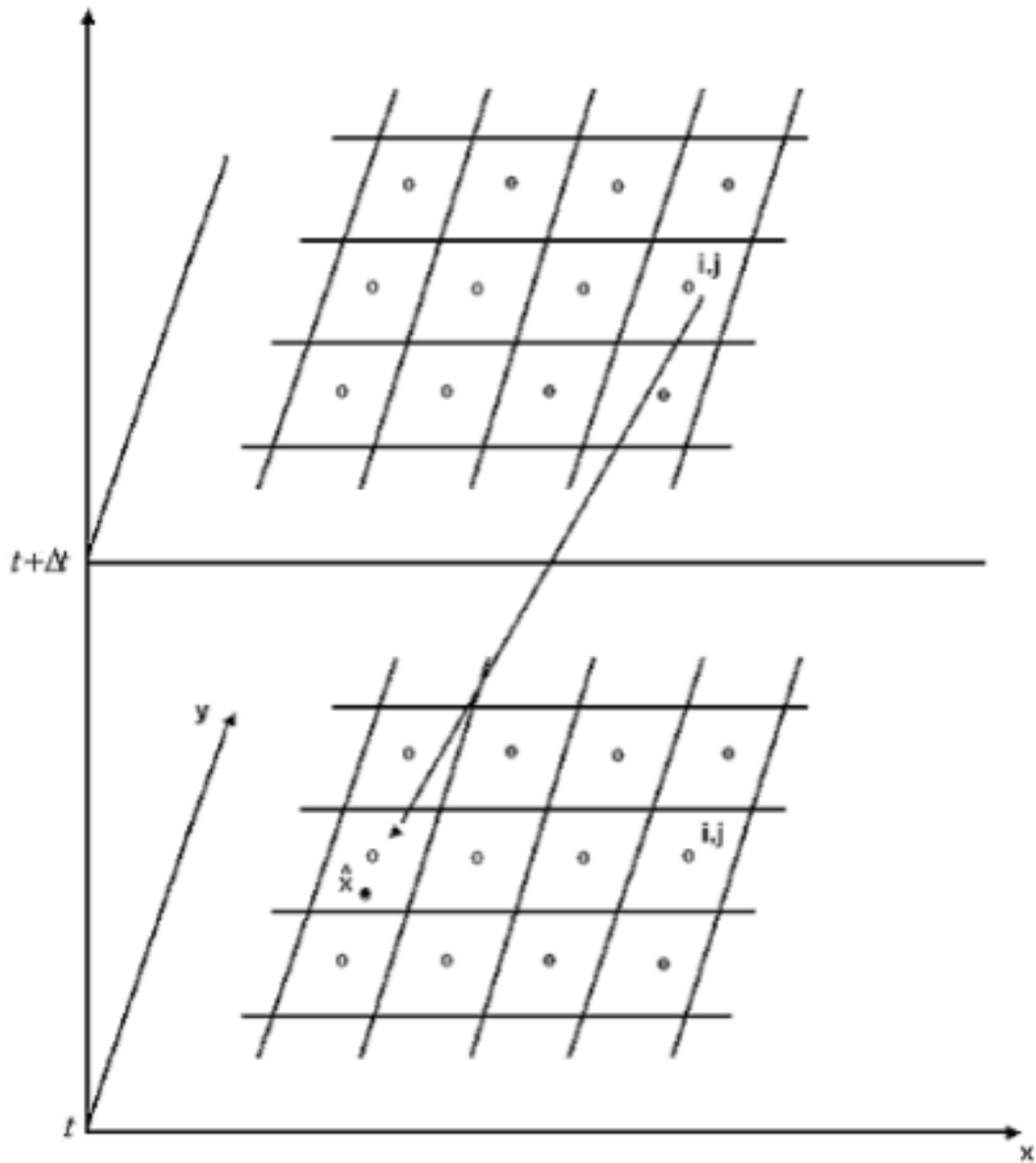
Neste trabalho utiliza-se uma interpolação bidimensional com pesos. Assim, para realizar a interpolação utiliza-se o valor da concentração definido no centro da célula que contém o ponto $\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}, \hat{y})$ e os valores definidos em cada célula vizinha ao bloco no qual encontra-se este ponto, como mostra a Fig. (12).

Suponha que $\hat{\mathbf{x}}$ encontra-se na célula mostrada na Fig. (13), essa, fórmula de interpolação pode ser escrita como:

$$c(\hat{\mathbf{x}}) = \delta_{k,l}c_{k,l} + \delta_{k-1,l}c_{k-1,l} + \delta_{k+1,l}c_{k+1,l} + \delta_{k,l-1}c_{k,l-1} + \delta_{k,l+1}c_{k,l+1}, \quad (51)$$

onde os pesos $\delta_{k,l}$, $\delta_{k-1,l}$, $\delta_{k+1,l}$, $\delta_{k,l-1}$ e $\delta_{k,l+1}$ são números positivos e menores que 1,

Figura 11 - O backtracking e a localização do ponto \hat{x} .



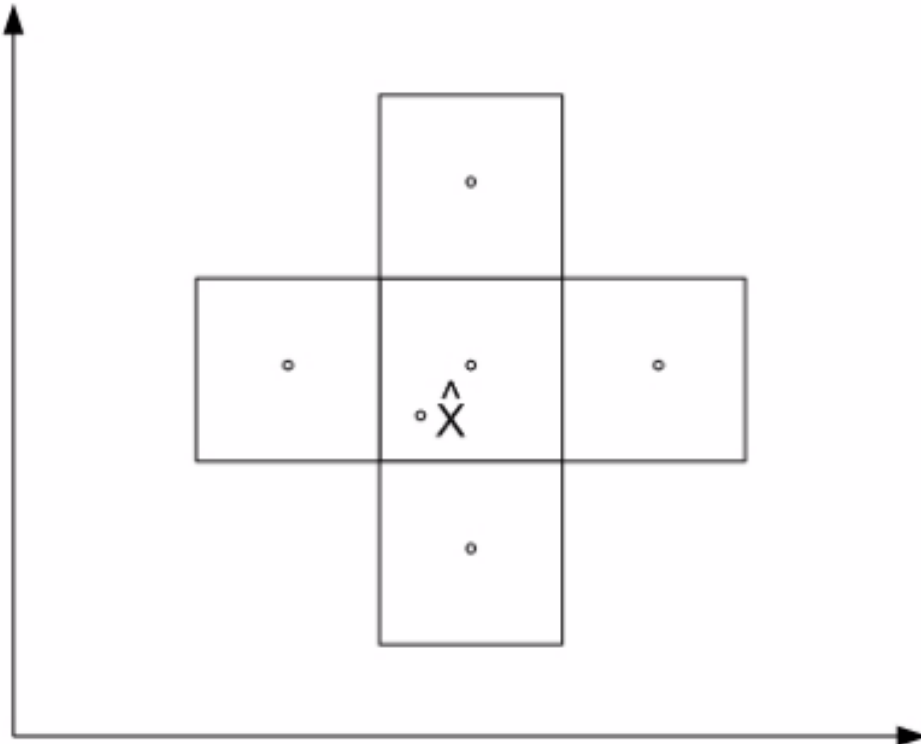
Fonte: PENA,2006.

definidos como:

$$\delta_{k,l} = \frac{1}{1 + \frac{d_{k,l}}{d_{k-1,l}} + \frac{d_{k,l}}{d_{k+1,l}} + \frac{d_{k,l}}{d_{k,l-1}} + \frac{d_{k,l}}{d_{k,l+1}}}, \quad (52)$$

$$\delta_{k-1,l} = \frac{1}{1 + \frac{d_{k-1,l}}{d_{k,l}} + \frac{d_{k-1,l}}{d_{k+1,l}} + \frac{d_{k-1,l}}{d_{k,l-1}} + \frac{d_{k-1,l}}{d_{k,l+1}}}, \quad (53)$$

Figura 12 - Exemplos de pontos utilizados na interpolação bidimensional



Fonte: PENA,2006.

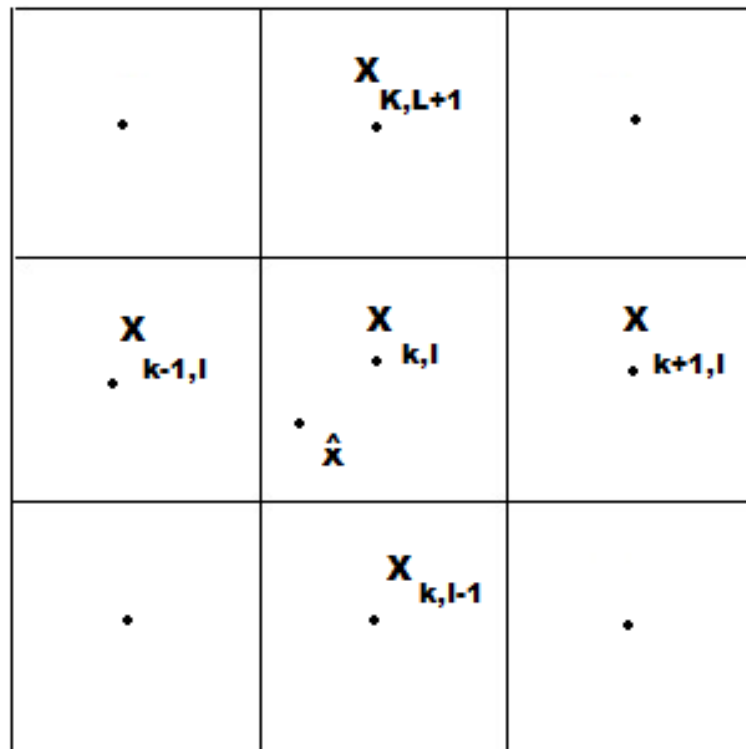
$$\delta_{k+1,l} = \frac{1}{1 + \frac{d_{k+1,l}}{d_{k,l}} + \frac{d_{k+1,l}}{d_{k-1,l}} + \frac{d_{k+1,l}}{d_{k,l-1}} + \frac{d_{k+1,l}}{d_{k,l+1}}}, \quad (54)$$

$$\delta_{k,l-1} = \frac{1}{1 + \frac{d_{k,l-1}}{d_{k,l}} + \frac{d_{k,l-1}}{d_{k-1,l}} + \frac{d_{k,l-1}}{d_{k+1,l}} + \frac{d_{k,l-1}}{d_{k,l+1}}}, \quad (55)$$

$$\delta_{k,l+1} = \frac{1}{1 + \frac{d_{k,l+1}}{d_{k,l}} + \frac{d_{k,l+1}}{d_{k-1,l}} + \frac{d_{k,l+1}}{d_{k+1,l}} + \frac{d_{k,l+1}}{d_{k,l-1}}}. \quad (56)$$

Observando que $\delta_{k,l} + \delta_{k-1,l} + \delta_{k+1,l} + \delta_{k,l-1} + \delta_{k,l+1} = 1$.

Figura 13 - Enumeração de nós que participam da interpolação



Fonte: PENA,2006.

3 TÉCNICA DE SEPARAÇÃO DE OPERADORES PARA A EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO EM COORDENADAS POLARES

3.1 Aspectos Gerais do método

Nesta seção apresentamos uma técnica de separação de operadores para a equação de convecção-difusão. Para isso, desacoplamos a parte convectiva, do operador de convecção-difusão, da parte difusiva. Em seguida, utilizamos o esquema semi-Lagrangiano TTC para resolver a equação diferencial, que modela o fenômeno de convecção e empregamos o método do Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado para resolver a parte difusiva.

Para maiores informações relacionadas às técnicas de separação de operadores para a equação de convecção-difusão, nós recomendamos as seguintes referências: (BELL; BINNING, 2004), (KARLSEN et al., 1998), (KHAN; LIU, 1995), (KHAN; LIU, 1998) e (LEVEQUE et al., 2002).

Aplicamos a técnica de separação de operadores para a equação de convecção-difusão em coordenadas polares como apresentada no Capítulo 2 e resumida por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}c) - \kappa \nabla^2 c = 0, \quad (57)$$

onde $\mathbf{v}(r, \theta, t)$ é o vetor de velocidade do fluido, $c(r, \theta, t)$ é a concentração do soluto, e κ é o coeficiente de difusão molecular, com a condição inicial

$$c(r, \theta, 0) = c_0(r, \theta), \quad (58)$$

para todo $(r, \theta) \in \Omega = (R - \rho, R + \rho) \times (0, 2\pi)$, e com as seguintes condições de contorno,

$$\frac{\partial c(R - \rho, \theta, t)}{\partial r} = \frac{\partial c(R + \rho, \theta, t)}{\partial r} = 0. \quad (59)$$

Deve-se observar que na Eq. (57) os operadores divergente e laplacianos são supostamente dados em coordenadas polares.

A técnica de separação de operadores adotada aqui usa, em cada passo de tempo, um procedimento constituído de duas etapas. Na primeira etapa, resolve-se a equação de convecção em coordenadas polares:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}c) = 0, \quad (60)$$

com condições iniciais que indicam os valores de c nos nós da grade no instante t . Em

seguida, na segunda etapa desse processo de separação de operadores, resolve-se a equação de difusão em coordenadas polares:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \kappa \nabla^2 c = 0. \quad (61)$$

A condição inicial para a Eq. (61) é exatamente a solução da Eq. (60). Ao final desse processo (realizado em duas etapas) obtemos os valores de c nos nós da grade no instante futuro $t + \Delta t$, em coordenadas polares.

3.1.1 Descrição do domínio matemático do problema físico

Esta seção aborda a conversão das coordenadas polares em coordenadas cartesianas e vice-versa. Segundo Lima (1992), há certas figuras (particularmente aquelas construídas a partir de circunferências) cujo estudo fica facilitado com o uso de coordenadas polares. Por esse motivo, as coordenadas polares são usadas em problemas de Cálculo, especialmente na avaliação de certas integrais duplas. A seguir faz-se uma breve revisão de alguns conceitos necessários para entendimento da relação entre o domínio físico e matemático.

3.1.2 Transformações

Sejam E e D subconjunto de R^n . Uma transformação T de E sobre D é uma função cujo domínio é E e cuja imagem está contida em D .

Se $E, D \subset R^2$ e $T : E \rightarrow D$ é uma transformação então dados $P = (x, y) \in E$ e $Q = (u, v) \in D$ com $T(P) = Q$ podemos expressar a transformação T por meio de duas funções coordenadas dadas por:

$$T : \begin{cases} u = u(x, y) \\ v = v(x, y) \end{cases}, \quad (62)$$

$\forall (x, y) \in E$ ou ainda $T(x, y) = (u(x, y), v(x, y))$.

Consideremos a transformação mostrada na Eq. (62) do plano xy no plano uv . Se T é inversível a Eq. (62) define x e y como funções de u e v , ou seja,

$$T^{-1} : \begin{cases} x = x(u, v) \\ y = y(u, v) \end{cases}. \quad (63)$$

Caso a Eq. (62) possua derivadas parciais de 1ª ordem, em u e v , definimos o Jacobiano de T , como segue:

$$J_T = \frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \begin{vmatrix} u_x & u_y \\ v_x & v_y \end{vmatrix} = u_x v_y - u_y v_x \quad (64)$$

Proposição 3.1.1: Teorema da Transformação Inversa

Considere a Transformação mostrada na Eq. (62) tal que u e $v \in C^1(\Omega)$, com $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ aberto e $P_0 = (x_0, y_0) \in \Omega$. Se $J_T(P_0) \neq 0$, então fica determinada de modo único a transformação inversa indicada na Eq. (63), que está definida em uma bola aberta B com centro $Q_0 = T(P_0) = (u(P_0), v(P_0)) = (u_0, v_0)$, tal que:

- $T^{-1}(Q_0) = T^{-1}(u_0, v_0) = (x(u_0, v_0), y(u_0, v_0)) = P_0$;
- $ToT^{-1}(u, v) = I_B(u, v) = (u, v), \forall (u, v) \in B$;
- As funções $x(u, v)$ e $y(u, v)$ possuem derivadas parciais de 1ª ordem dadas por:

$$x_u = \frac{v_y}{J_T}, y_u = \frac{-v_x}{J_T}, x_v = \frac{-u_y}{J_T} \text{ e } y_v = \frac{u_x}{J_T}.$$

Nas condições da Proposição 3.1.1, diz-se que a transformação T é (localmente) uma mudança de coordenadas.

3.2 Coordenadas polares

As coordenadas polares (r, θ) são definidas por:

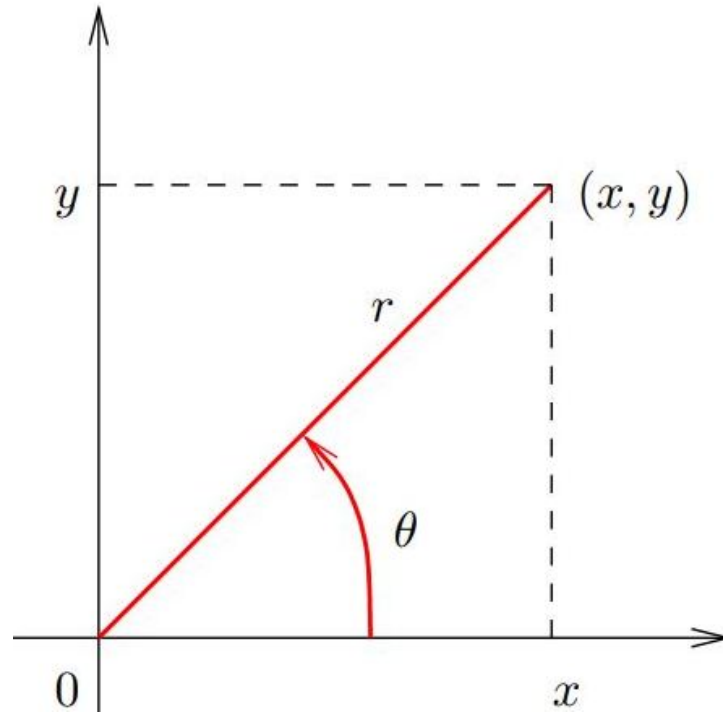
$$\begin{aligned} x &= r \cos(\theta) \\ y &= r \sen(\theta). \end{aligned} \quad (65)$$

De acordo com a Fig. (14), $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ determina a distância de cada ponto (x, y) à origem e θ é o ângulo formado entre o semi-eixo positivo das abcissas e o vetor (x, y) .

Para evitar ambiguidade considera-se a variação do ângulo θ no intervalo de $[0, 2\pi)$.

3.2.1 Coordenadas Polares versus Cartesianas

Seja $g(r, \theta) = (r \cos(\theta), r \sen(\theta)) = (x, y)$. Então, g é de classe C^1 em \mathbb{R}^2 e é uma mudança de coordenadas definida em $\mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\}$. De fato, note que para esse domínio

Figura 14 - Coordenadas Polares (r, θ) em \mathbb{R}^2 

Fonte: O autor, 2019.

tem-se:

$$J_g = \begin{vmatrix} \cos(\theta) & -r\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & r\cos(\theta) \end{vmatrix} = r(\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta)) = r \neq 0. \quad (66)$$

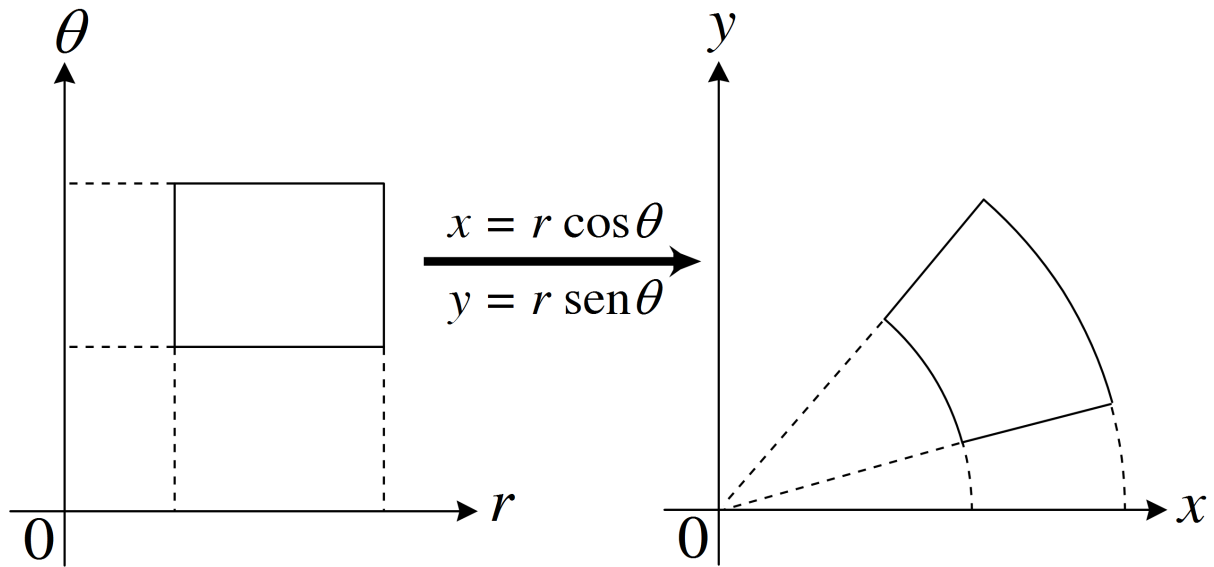
A expressão da inversa g^{-1} é dada por:

$$g^{-1} = \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \theta = \arctg\left(\frac{y}{x}\right). \end{cases} \quad (67)$$

Como mostrado na Fig. (15), a mudança de coordenadas definidas por $g(r, \theta) = (r\cos(\theta), r\sin(\theta))$ mapeia uma região retangular, que se encontra no plano determinado pelo sistema de coordenadas retangulares $r\theta$, chamado de sistema de coordenadas polares generalizadas, sobre um setor anelar localizado no plano determinado pelo sistema de coordenadas retangulares xy . Reciprocamente, a inversa $g^{-1} = (\sqrt{x^2 + y^2}, \arctg(\frac{y}{x}))$ transforma esse setor anelar de volta sobre a referida região retangular.

Note que a fórmula $\theta = \arctan(y/x)$, usada para definir o segundo componente da função inversa g^{-1} , apresenta duas propriedades muitas vezes indesejáveis: (i) não está

Figura 15 - Transformação de um retângulo em um setor anelar



Fonte: O Autor, 2019.

definida para $x = 0$ e (ii) restringe θ ao intervalo aberto $(-\pi/2, \pi/2)$. Para definir g^{-1} em pares (x, y) com $x = 0$ e permitir θ variar entre 0 e 2π , no que segue tomaremos a inversa de g como sendo da forma $g^{-1}(x, y) = (\sqrt{(x^2 + y^2)}, \theta)$, onde θ é a função de x e y dada por:

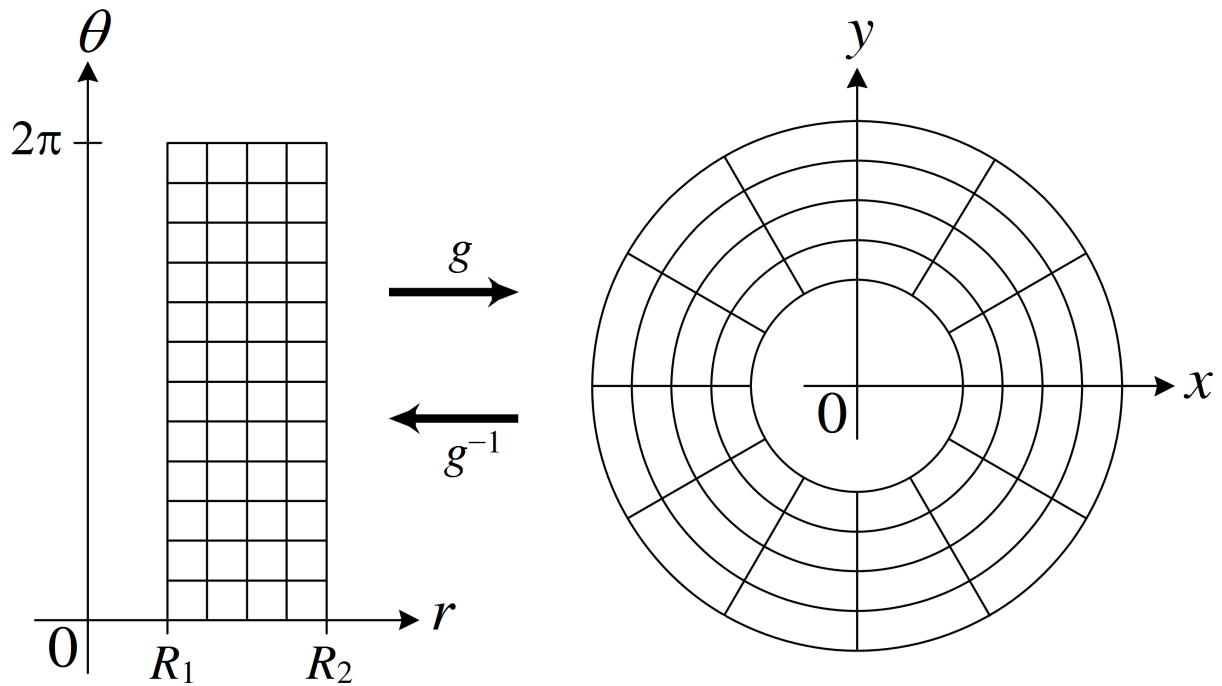
$$\theta = \begin{cases} \arctan(y/x), & \text{se } x > 0 \text{ e } y \geq 0 \\ \arctan(y/x) + \pi, & \text{se } x < 0 \text{ e } y \geq 0 \\ \arctan(y/x) + 2\pi, & \text{se } x > 0 \text{ e } y < 0 \\ \pi/2, & \text{se } x = 0 \text{ e } y > 0 \\ 3\pi/2, & \text{se } x = 0 \text{ e } y < 0. \end{cases} \quad (68)$$

Dessa forma, uma região, uma região anelar no plano xy definida por dois círculos concêntricos de raios R_1 e R_2 com $R_1 \geq R_2$, cujos centros estão na origem do sistema de coordenadas, é mapeado pela aplicação g^{-1} sobre uma região retangular do plano $r\theta$ mostrada na Fig. (16). De forma recíproca, a função g mapeia essa região retangular sobre a dada região anelar.

Como ilustrado na Fig. (16), uma grade tomada sobre a região do plano $r\theta$ delimitada por um retângulo define, mediante a transformação $g(r, \theta) = (r \cos(\theta), r \sin(\theta))$, uma grade circular sobre a região do plano xy delimitada por um anel circular.

Usando estes fatos geométricos, no presente trabalho a equação de convecção-difusão em coordenadas polares (Eq. (7)) será resolvida numericamente na região retangular do plano $r\theta$ dada por $\Omega = (R - \rho, R + \rho) \times (0, 2\pi)$, denominado de domínio

Figura 16 - Transformação de uma região anelar sobre uma região retangular e vice-versa



Fonte: O Autor, 2019.

matemático do problema considerado. Esse domínio matemático é a imagem, pela transformação inversa $g^{-1} = (\sqrt{x^2 + y^2}, \theta)$, da região anelar do plano xy mostrada na Fig. (16), a qual é o domínio físico de interesse neste trabalho.

Assim, os métodos numéricos serão efetivamente empregados sobre o domínio matemático. Como o domínio matemático é retangular, a aplicação da metodologia numérica pretendida se tornará substancialmente mais simples.

Após à resolução numérica, a solução obtida em cada nó da grade do domínio matemático será mapeada sobre o domínio físico pela transformação $g(r, \theta) = (r \cos(\theta), r \sin(\theta))$. Isso permitirá visualizar a solução do problema sobre o domínio de interesse do problema físico, associado com a geometria do micromisturador.

Como antes, será considerado uma discretização temporal com passos de tempo uniformes iguais a Δt . Além disso, o domínio matemático será discretizado usando-se uma grade de blocos centrados uniformes, como mostra a Fig. (10).

Na primeira etapa da metodologia de separação de operadores, a equação de convecção é resolvida pelo método de Tubo de Trajetórias. Como a forma desse método semi-Lagrangeano é independente da escolha do sistema de coordenadas, nessa etapa determina-se:

$$c_{i,j}^{(n+1)*} = c(\hat{r}, \hat{\theta}). \quad (69)$$

Onde, o par $(\hat{r}, \hat{\theta})$ que representa o “pé” da trajetória (no nível de tempo n), a qual parte do nó (r_i, θ_j) no nível de tempo $n + 1$, é determinado por backtracking, resolvendo-se o sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} &= 0 \\ \frac{d\theta}{dt} &= v(r). \end{aligned} \quad (70)$$

Esse sistema, além de autônomo (as funções que aparecem nos lados direito não dependem do tempo), apresenta equações onde as variáveis podem se separadas. Logo é facilmente integrável. Lembrando que no tempo futuro $t + \Delta t$ tem-se como solução $r = r_i$ e $\theta = \theta_j$, e no tempo passado t tem-se $r = \hat{r}$ e $\theta = \hat{\theta}$, pode-se integrar este sistema de maneira analítica, obtendo-se a solução $(\hat{r}, \hat{\theta})$, dada por

$$\hat{r} = r_i \quad (71)$$

$$\hat{\theta} = \theta_j - \frac{v(r)}{r} \Delta t. \quad (72)$$

Em vista da natureza do campo de velocidade considerado aqui, a Eq. (71) mostra que o raio da posição de uma dada partícula de fluido não muda com o passar do tempo. A Eq. (72) indica que uma escolha de Δt suficientemente grande pode fazer $\hat{\theta}$ assumir valores negativos, que não se encontram no domínio matemático. No entanto, isso não é uma restrição para o tamanho do passo de tempo usado no método do Tubo de Trajetórias. Para entender esse fato, note que, durante seu movimento no micromisturador, uma partícula que realiza vários giros em um dado intervalo de tempo Δt suficientemente grande se mantém no domínio físico, devido à periodicidade desse movimento, apesar do “pé” da trajetória dessa partícula recair fora do domínio matemático. Assim, quando a Eq. (72) fornecer um valor $\hat{\theta} < 0$, deve-se recalcular a localização dessa coordenada angular, usando-se a periodicidade do movimento, de modo que sempre se tenha o par $(\hat{r}, \hat{\theta})$ no domínio matemático. Um conjunto de procedimentos possíveis para se atingir esse fim, que utiliza (essencialmente) as operações de soma e divisão, é mostrado no Algoritmo (1).

Feito isso e levando-se em consideração que o método do Tubo de Trajetória é incondicionalmente estável (Henderson e Pena, 2017), então não há restrições com relação a escolha do tamanho do passo, para a aplicação desse método semi-Lagrangeano à equação de convecção do presente problema. Isso representa uma vantagem significativa, pois muitos métodos numéricos usados para resolver essa mesma equação impõem significativas

Algoritmo 1 - Localizando o “pé” da trajetória

- Passo 1.** Faça $r = r_i$ e $\theta = \theta_j - \frac{v(r)}{r}\Delta t$.
Passo 2. Se $\theta \geq 0$, vá para o Passo 6. Se não, vá para o Passo 3.
Passo 3. Faça $\theta = \theta/2\pi$
Passo 4. Faça $\varphi = \text{int}(\theta)$, onde $\text{int}(\theta)$ denota a parte inteira do número real θ .
Passo 5. Faça $\theta = \theta - \varphi$
Passo 6. Faça $\hat{r} = r, \hat{\theta} = \theta$ e pare.

restrições ao tamanho de Δt empregado na discretização temporal, (THOMAS, 1999).

A velocidade azimutal $v(r)$ que aparece na Eq. (70) é mostrada em detalhes na Eq. (3). Em seguida, o valor $c(\hat{r}, \hat{\theta})$ é estimado usando-se a interpolação com pesos descrita no Capítulo 2.

Na segunda etapa da técnica de separação de operadores, resolve-se a equação de difusão em coordenadas polares,

$$\frac{\partial c^{(n+1)}}{\partial t} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c^{(n+1)}}{\partial r} \right) - \frac{\kappa}{r^2} \frac{\partial^2 c^{(n+1)}}{\partial \theta^2} = 0, \quad (73)$$

com condição inicial referente ao nível de tempo n dada (em cada nó da grade) por $c_{i,j}^{(n+1)*}$. Note que esse valor é a solução da equação de convecção obtida na primeira etapa, o qual é calculado usando-se a equação Eq. (69). Além disso, para resolver a Eq. (73), emprega-se a condição de contorno

$$\frac{\partial c^{(n+1)}(R - \rho, \theta)}{\partial r} = \frac{\partial c^{(n+1)}(R + \rho, \theta)}{\partial r} = 0. \quad (74)$$

Aqui, a Eq. (74) é discretizada usando-se diferenças finitas centradas para as derivadas parciais referentes as variáveis r e θ . Por outro lado, tendo em consideração que os dados iniciais para a Eq. (74) são aqueles valores descritos na Eq. (69), então será usado para a derivada temporal a seguinte aproximação $\partial c^{(n+1)}/\partial t \approx (c^{(n+1)} - c^{(n+1)*})/\Delta t$. Assim, adotando um esquema totalmente implícito, para cada nó (i, j) da grade sobre o domínio matemático, a Eq. (73) toma a seguinte forma:

$$c_{i,j}^{(n+1)} - \frac{\kappa \Delta t}{\Delta r^2} \left(c_{i+1,j}^{(n+1)} - 2c_{i,j}^{(n+1)} + c_{i,j-1}^{(n+1)} \right) - \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta r r_i} \left(c_{i+1,j}^{(n+1)} - c_{i-1,j}^{(n+1)} \right) - \frac{\kappa \Delta t}{\Delta \theta^2 r_i^2} \left(c_{i,j+1}^{(n+1)} - 2c_{i,j}^{(n+1)} + c_{i,j-1}^{(n+1)} \right) = c_{i,j}^{(n+1)*}. \quad (75)$$

Supondo que existem n_r células de discretização ao longo do eixo r e n_θ células ao longo do eixo θ , então a Eq. (75) ocorre para todo $i = 1, \dots, n_r$ e $j = 1, \dots, n_\theta$. Desse modo tem-se um sistema de $n_r \times n_\theta$ equações e $n_r \times n_\theta$ variáveis, que são os valores de $c_{i,j}^{n+1}$ em cada célula da grade que discretiza esse domínio matemático. Este sistema de equações lineares será resolvido pelo método do Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado (BiCGStab).

Esse método é usado para resolução de sistemas lineares com matrizes não simétricas.

Como o domínio matemático é um retângulo (Fig. (16)), para proceder com o tratamento das condições de contorno, considere uma célula que seja adjacente à fronteira vertical esquerda desse retângulo. O nó de uma tal célula é da forma (r_1, θ_j) . Ao se expressar a Eq. (75) para esse nó, se faz necessário o valor $c_{0,j}^{(n+1)}$, onde (r_0, θ_j) é o nó de uma célula auxiliar que se encontra fora do domínio matemático. Aqui, esse valor será determinado por

$$c_{0,j}^{n+1} = c_{1,j}^{n+1}. \quad (76)$$

A Eq. (76) é obtida usando-se um procedimento clássico, onde aproxima-se a condição de contorno $\partial[c^{(n+1)}(R - \rho, \theta)]/\partial r = 0$ por diferença finita centrada.

De forma semelhante, o cálculo de $c^{(n+1)}$ em um nó do tipo (r_{n_r}, θ_j) , pertencente a uma célula adjacente à fronteira vertical direita do domínio matemático retangular, exige o valor $c_{n_r+1,j}$ que, a partir da discretização da condição de contorno $\partial[c^{(n+1)}(R + \rho, \theta)]/\partial r = 0$ por diferença finita centrada, é determinado por

$$c_{n_r+1,j}^{n+1} = c_{n_r,j}^{n+1}. \quad (77)$$

Em seguida, observa-se que para se calcular $c_{i,1}^{(n+1)}$ e $c_{i,n_\theta}^{(n+1)}$ (valores de $c^{(n+1)}$ associados com as células adjacentes, respectivamente, às fronteiras inferior e superior do domínio matemático) são necessários $c_{i,0}^{(n+1)}$ e $c_{i,n_\theta+1}^{(n+1)}$. Dessa vez, não pode-se usar o mesmo procedimento empregado para as fronteiras verticais, pois não existem condições de contorno explícitas (como aquelas mostradas na Eq. (76)) para as fronteiras superior e inferior de tal domínio matemático.

Para superar esse aparente problema, observe a Fig. (17), que na parte esquerda ilustra o domínio físico e na direita destaca o respectivo domínio matemático, resultante do mapeamento realizado pela aplicação inversa g^{-1} . Ambos os domínios apresentam grades de discretização. Partindo-se do ponto a da Fig. (17), que denota a interseção do eixo x com a circunferência interna de menor raio, onde a coordenada θ tem o valor zero, percorre-se essa circunferência interna no sentido contrário dos ponteiros do relógio até se encontrar o ponto b sobre o eixo x , onde a coordenada θ assume o valor 2π . Depois, desloca-se ao longo do eixo x , de b até se atingir o ponto c , que denota a interseção desse eixo com a circunferência externa, aquela de maior raio. Para o problema do micro misturador, o raio da primeira circunferência considerada neste deslocamento é $R_1 = R - \rho$ e o raio da circunferência externa é $R_2 = R + \rho$. Assim, a distância percorrida entre os pontos b e c é igual a 2ρ . Continuando esse trajeto, a seguir percorre-se a circunferência externa no sentido dos ponteiros dos ponteiros do relógio, partindo-se do ponto c , onde $\theta = 0$, até se encontrar o ponto d sobre o eixo x , onde $\theta = 2\pi$. Finalmente, partindo-se do

ponto d , retorna-se ao ponto inicial a , viajando-se novamente sobre o eixo x , mas agora no sentido contrário da sua orientação positiva.

Este caminho percorrido sobre o domínio físico determina um caminho correspondente que se encontra associado com o domínio matemático retangular mostrado na Fig. (17 b). De fato, tal caminho, que se encontra sobre a fronteira desse retângulo, inicia no respectivo ponto a da Fig. (17 b), o vértice do referido retângulo que possui coordenadas $r = R - \rho$ e $\theta = 0$. A primeira etapa desse percurso termina no correspondente vértice b , onde tem-se $r = R - \rho$ e $\theta = 2\pi$, percorrendo-se assim uma distância igual a 2π . Em seguida, sobre a fronteira do domínio matemático, desloca-se uma distância igual a 2ρ paralelamente ao eixo r , de b até o vértice c . Depois, viaja-se ao longo da fronteira vertical direita do domínio matemático, do ponto c até se atingir o vértice d , onde θ assume novamente o valor zero mas r torna-se $R + \rho$. Finalmente, partindo-se de d , retorna-se ao vértice inicial a .

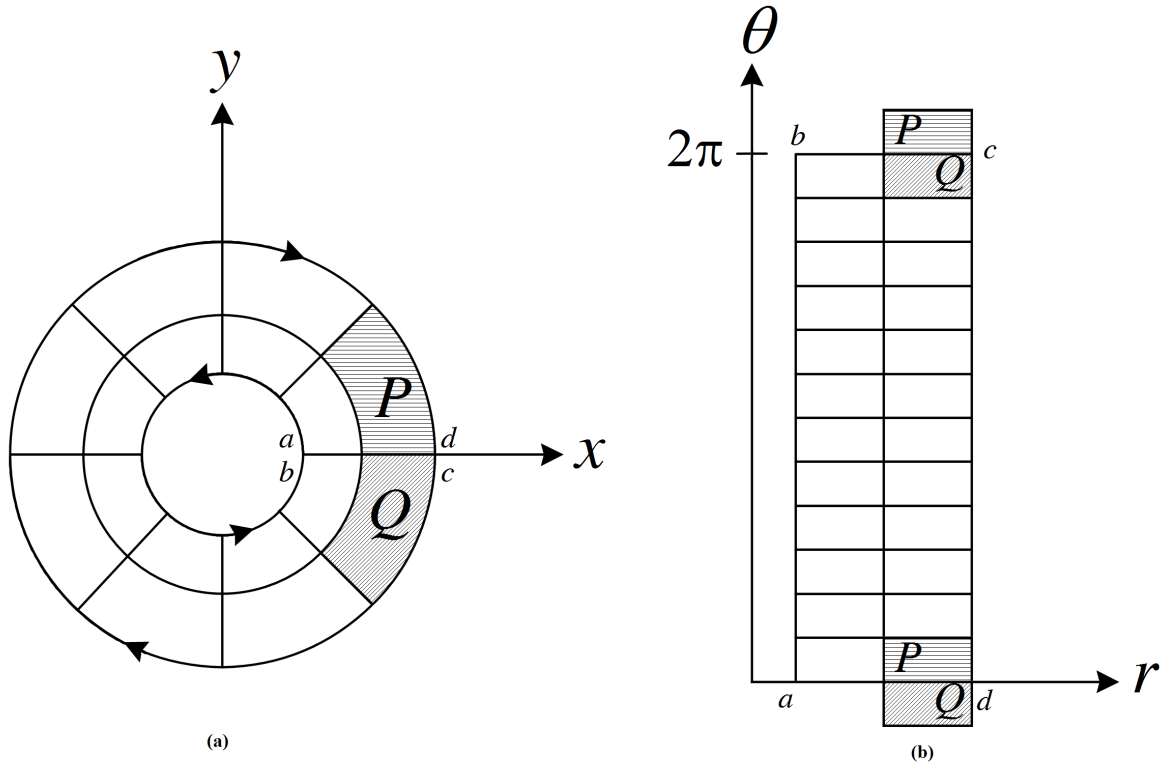
Note que essa análise geométrica mostra que o efeito da transformação inversa $g^{-1} = (\sqrt{x^2 + y^2}, \theta)$ sobre o domínio físico é equivalente, de um ponto de vista mecânico, a se cortar inicialmente a região anelar ao longo de uma parte do eixo x , de modo a se separar somente o segmento (\overline{ad}) do segmento (\overline{bc}) . Em seguida, essa transformação inversa deforma a região anelar cortada até que ela obtenha a forma retangular mostrada na Fig. (17 b).

Um observador que se desloca ao longo do eixo x do domínio físico, do ponto b até o ponto c , pode observar que a célula P mostrada na Fig. (17 a) se manterá a sua esquerda, enquanto a célula Q se mantém a sua direita. Por outro lado, se esse mesmo observador realizar o percurso equivalente entre os vértices b e c do domínio matemático, mostrado na Fig. (17 b), ele obrigatoriamente verá a correspondente célula P a sua esquerda, enquanto a correspondente célula Q se manterá a sua direita, como mostrado no topo da Fig. (17 b). De volta, ao percorrer o trecho entre os ponto d e a do domínio físico, tal observador notará que agora a célula P se estará a sua direita, enquanto a célula Q se ficará a sua esquerda. Um fato equivalente ocorre ao se percorrer o trecho entre os vértices d e a do domínio matemático, como mostrado na base da Fig. (17 b).

De acordo com uns dos fatos verificados por esse observador, a célula denotada por P que se encontra no topo da Fig. (17 b), a qual é exterior ao domínio matemático, e a célula P que se encontra na base dessa mesma figura, a qual é interior ao domínio matemático e é adjacente a sua fronteira inferior, correspondem a mesma célula P (com geometria circular) mostrada no domínio físico da Fig. (17 b). Isso nós permite definir os valores procurados para $c_{i,n\theta}^{(n+1)}$ como:

$$c_{i,n\theta+1}^{(n+1)} = c_{i,1}^{(n+1)}. \quad (78)$$

Figura 17 - Obtendo condições de contorno para o domínio matemático.



Fonte: O Autor, 2019.

De forma semelhante, as células denotadas por Q mostradas na grade do domínio matemático, Fig. (17 b), correspondem à mesma célula denotada por Q que aparece na grade do domínio físico, Fig. (17 a). Dai, podemos inferir a seguinte condição para o valor procurado $c_{i,0}^{(n+1)}$:

$$c_{i,0}^{(n+1)} = c_{i,n_\theta}^{(n+1)}. \quad (79)$$

Finalmente, note que a fórmula de interpolação empregada no método do Tubo de Trajetória exige os valores da concentração de soluto em quatro células vizinhas àquela onde se encontra o “pé” da trajetória. Assim, se célula onde está o “pé” da trajetória for uma célula (interna) adjacente a fronteira do domínio matemático, então, pelo menos, uma das células vizinhas são células exteriores à esse domínio, mas adjacentes a ele. Nestas condições, usa-se também no método do Tubo de Trajetórias as condições de fronteira resumidas nas Eqs. (78) e (79), além é claro das aproximações mostradas nas Eqs. (76) e (77).

4 VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA

A implementação computacional foi feita em linguagem de programação Fortran, devido a sua robustez e velocidade de processamento. Os gráficos foram gerados utilizando o programa LibreOffice e Matlab.

A configuração completa de hardware da máquina em que foram feitos os experimentos é:

- 2 Processadores Intel Xeon E5-2420 Hexa Core 1.9GHz/10MB (LGA2011) (total de 12 núcleos reais + 12 núcleos hyper threading).
- Placa mãe Intel Server Board S2400SC2 (Dual LGA1356).
- 2 Coolers para CPU Master X6 Elite.
- 2 Memórias para servidor DDR3 1333 MHz Kingston ECC Unbuffered 4GB com sensor de temperatura.
- 1 Gabinete Cooler Master HAF 922 XM.
- 1 Placa de Vídeo nVidia GeForce GT 610 1GB DDR3 Zotac PCI-E.
- 1 Fonte 750W Corsair Professional Series Gold / Modular / 80+ Gold / ATX 2.31 EPS 2.92.
- 1 Hard Disk 1TB SATA III 64MB Barracuda 7200.14 Seagate.

Esta seção objetiva apresentar e validar a metodologia de separação de operadores aplicada a simulação de escoamento em um micromisturador. Este processo é realizado em duas etapas, em que são considerados diferentes intervalos para o número de Péclet.

4.1 Regime difusivo

O regime difusivo é caracterizado pelo número de Péclet suficientemente pequeno. No entanto, verifica-se que o mesmo poderá ser: puramente difusivo ou dominado pela difusão. No caso do regime puramente difusivo não existe processo convectivo, ou seja, o termo convectivo na Eq. (7) é desconsiderado. Já no regime dominado pela difusão, os efeitos convectivos estão atuando, no entanto, são mínimos. Os valores dos parâmetros do modelo que descreve o escoamento no micromisturador e o passo de tempo usado nesta seção são apresentados na Tab. (1).

A Fig. (18) mostra a concentração mássica do soluto para condição inicial dada pela equação

$$c(r, \theta) = 1 + \cos(\theta). \quad (80)$$

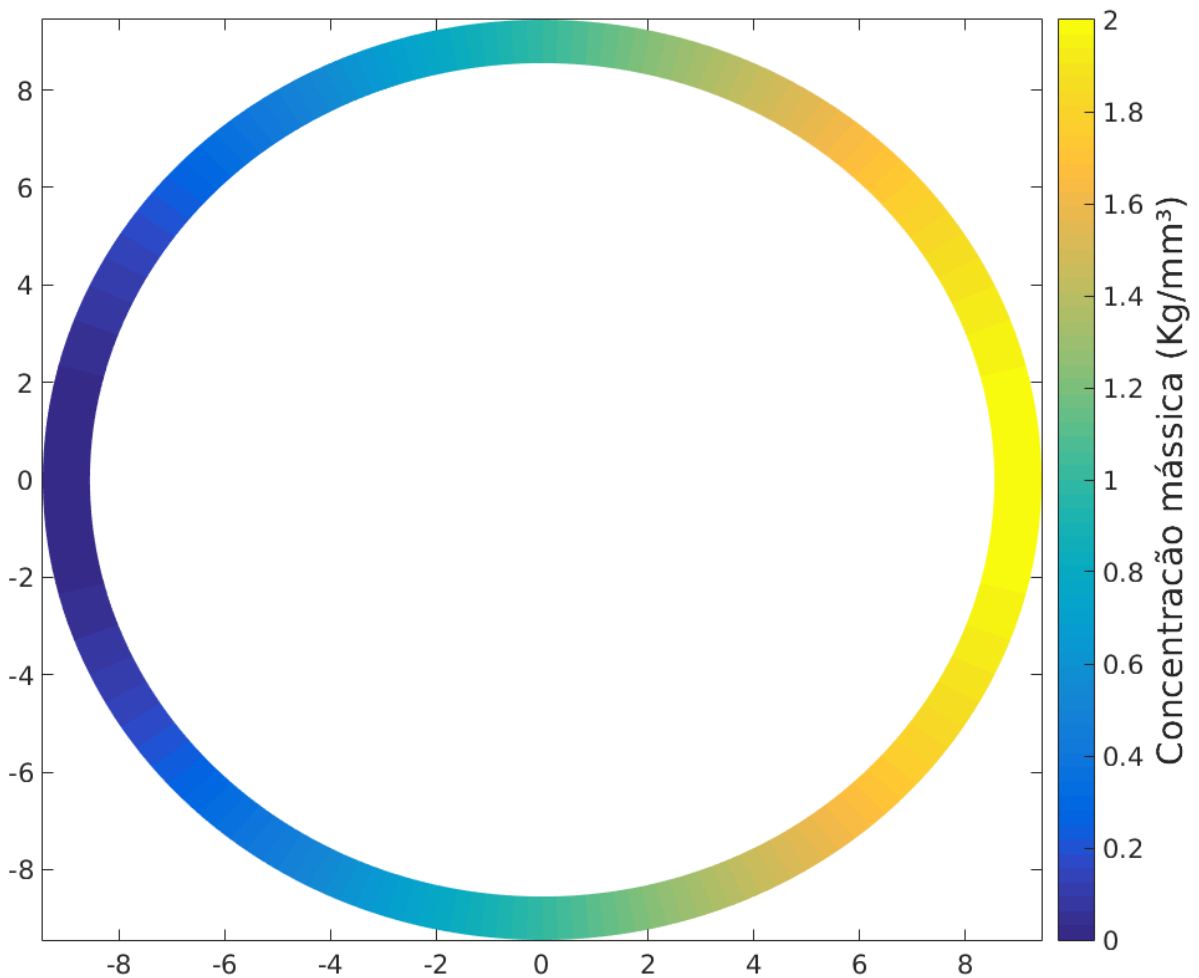
Essa condição inicial será utilizada para gerar os resultados desta seção.

Tabela 1 - Parâmetros utilizados no regime difusivo

Parâmetros	Valores
γ	0,05
$R(mm)$	9
$\Delta t(s)$	0,001
$\alpha(s^{-1})$	312

Fonte: O autor, 2019.

Figura 18 - Concentração no tempo adimensional $\omega t = 0$ e com a condição inicial dada pela Eq. (80)



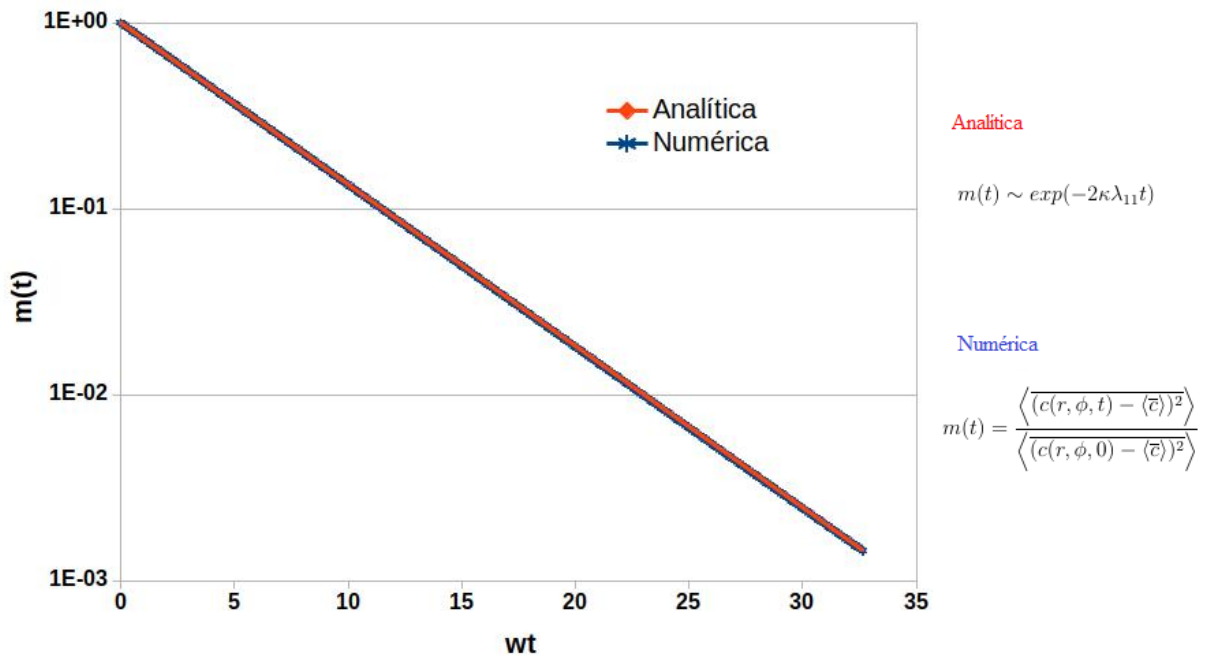
Fonte: O autor, 2019.

Observando a Fig. (18) verificamos que o processo de mistura está em seu estágio inicial e os níveis de concentração estão entre 0 Kg/mm^3 e 2 Kg/mm^3 , e assim, as cores predominantes são azul e amarelo. O tempo considerado é adimensional, dado por ωt .

4.1.1 Regime puramente difusivo

Na Fig. (19) são mostrados, em escala logarítmica, os valores da medida de mistura $m(t)$ simulados para o número de Péclet de 0.01, onde o termo convectivo (mostrado na Eq. (7)) não é considerado. Ao comparar esses resultados numéricos com os valores analíticos obtidos da Eq. (19) notamos que a medida de mistura obtida pela solução numérica é praticamente coincidente com a solução analítica; apresentando um erro percentual médio de apenas 0.75 %. Além disso, observa-se que com o avanço do tempo adimensional ωt os valores de medida de mistura $m(t)$ decrescem de forma linear quando plotados em escala logarítmica.

Figura 19 - Medida de mistura em regime puramente difusivo

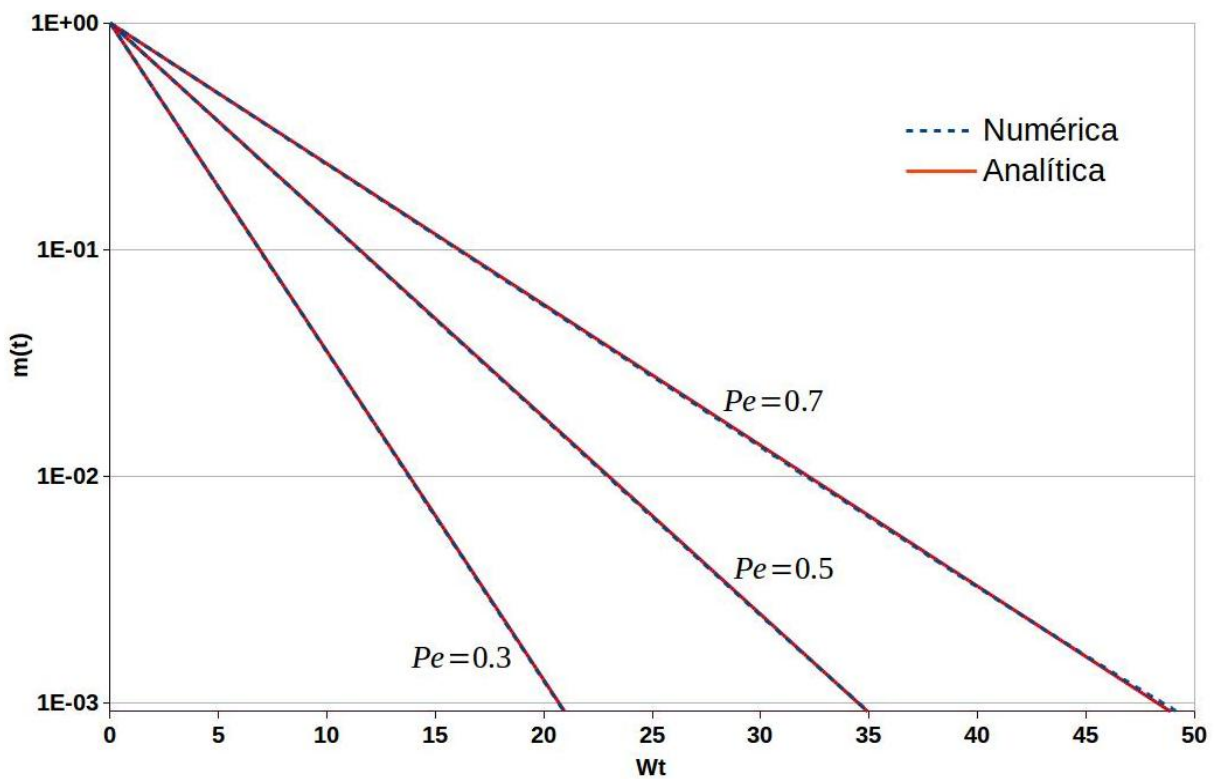


Fonte: O autor, 2019.

4.1.2 Regime dominado pela difusão

O gráfico, em escala logarítmica, de $m(t)$ em função do tempo adimensional ωt para diferentes números de Péclet são mostrados na Fig. (20). Para efeitos de comparação, são apresentadas graficamente as formas assintóticas de medida de mistura resumidas na Eq. (19) para três números de Péclet. Os erros percentuais médios para Péclet de 0,3; 0,5 e 0,7 são, respectivamente, dados por 0,54%, 0,72% e 1%. Esses resultados comprovam que as medidas de mistura simuladas são muito próximas. Ressalta-se que mesmo o fenômeno da difusão sendo dominante, a parte convectiva está presente na resolução da Eq. (7).

Figura 20 - Medida de mistura $m(t)$ em regime dominado pela difusão

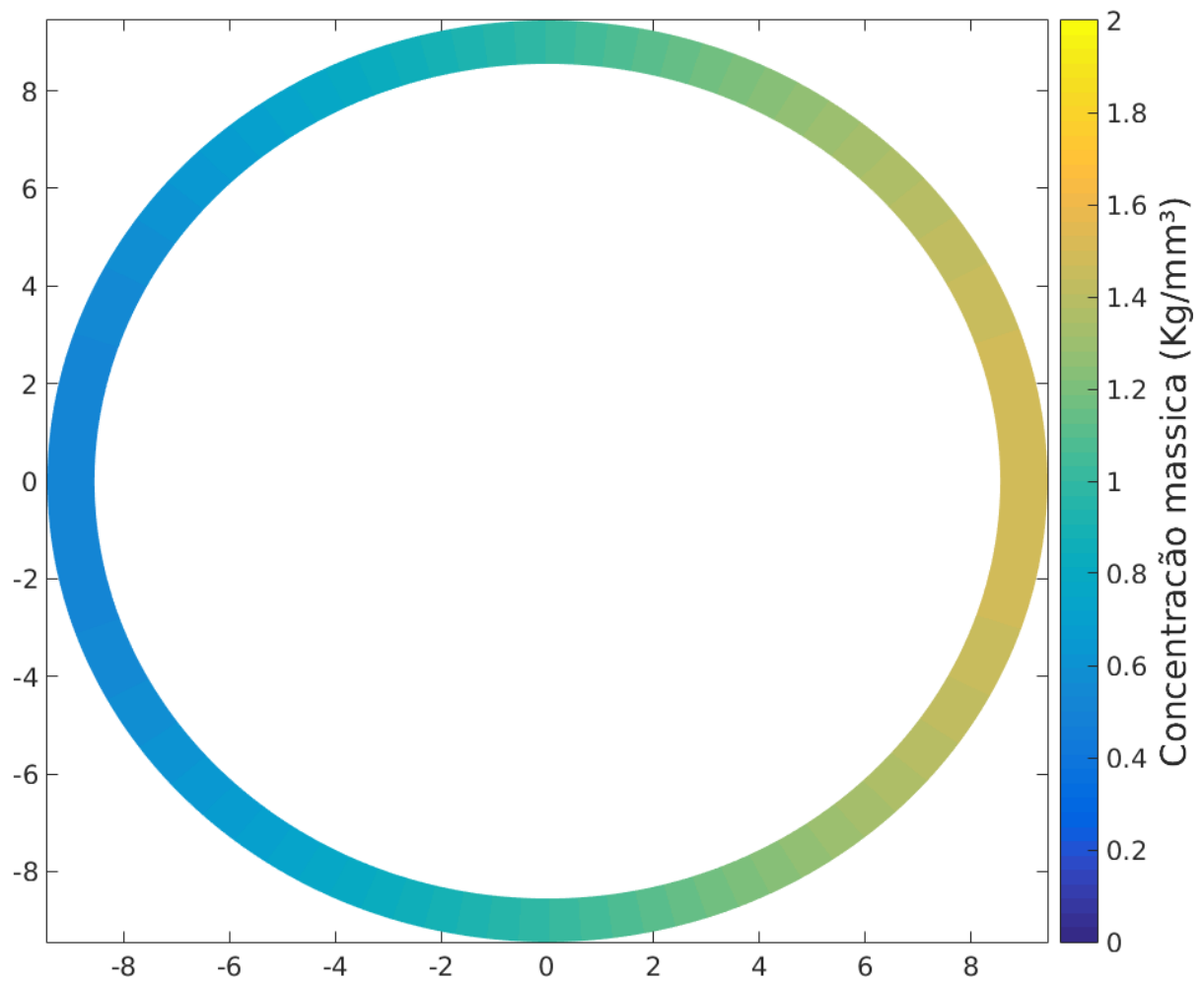


Fonte: O autor, 2019.

Os resultados para a mistura idealizada com a condição inicial indicada na Eq. (80), para o número de Péclet igual a 0,5 e para os tempos adimensionais iguais a $\omega t = 0$, $\omega t = 6,99$ e $\omega t = 24,61$, podem ser observados, respectivamente, nas Figs. (18), (21) e (22).

O processo inicia-se com os níveis de concentração entre de 0 Kg/mm^3 e 2 Kg/mm^3 como mostrado na Fig. (18), ou seja, o processo de mistura está iniciando. Já para o tempo adimensional de 6,99, Fig. (21), a concentração do soluto varia entre $0,50 \text{ Kg/mm}^3$ e $1,49 \text{ Kg/mm}^3$, evidenciando o processo de mistura.

Figura 21 - Ação de mistura para o tempo adimensional igual 6,99

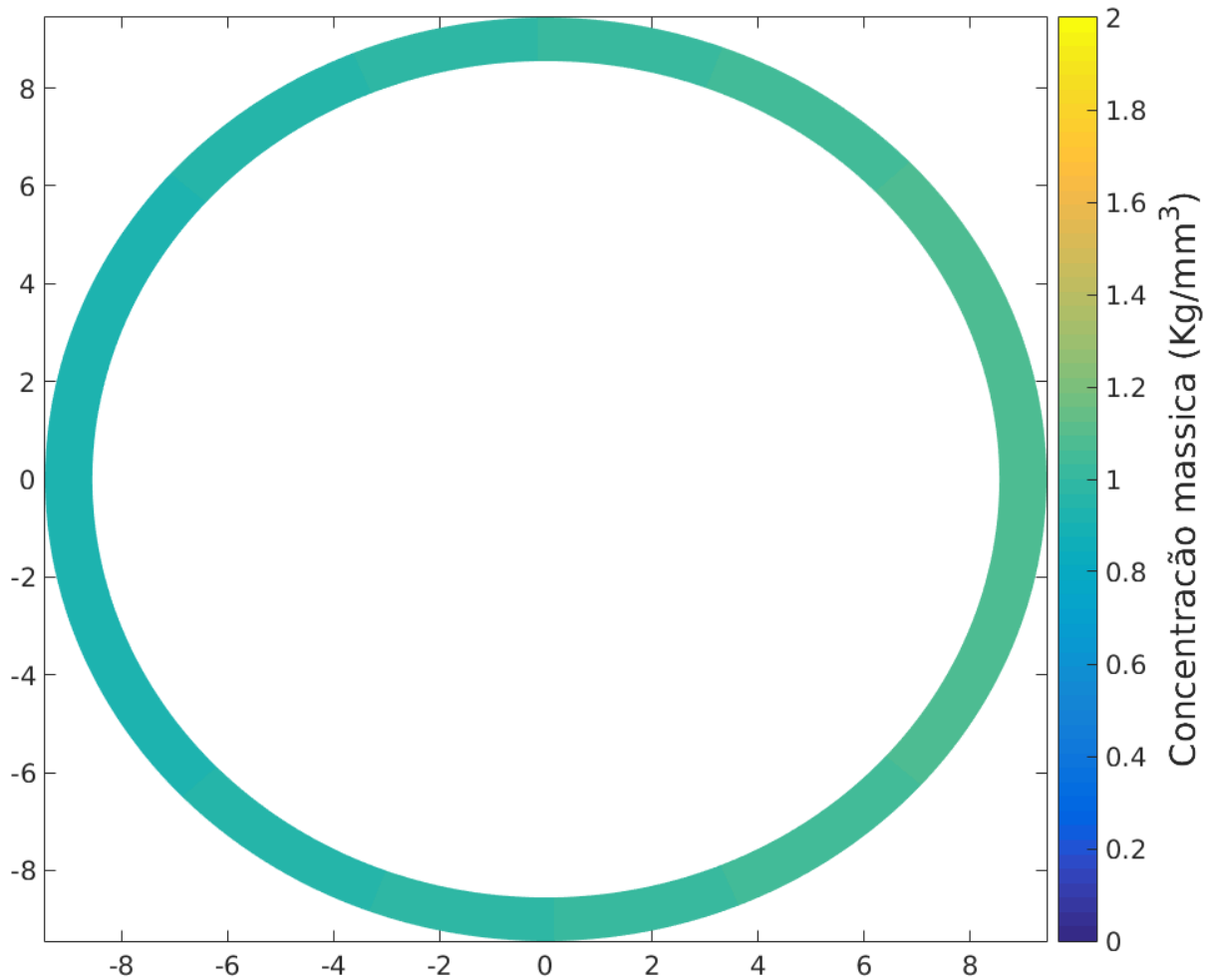


Fonte: O autor, 2019.

Na Fig. (22) o processo de mistura encontra-se em estágio final. Nesta etapa, de acordo com a condição inicial, espera-se que o nível de concentração das substâncias simuladas estejam próximos de $1,0 \text{ Kg/mm}^3$, ou seja, o fluido apresenta cor homogênea.

O resultado obtido para os níveis de concentração neste tempo final, $\omega t = 24,61$, estão entre $0,91 \text{ Kg/mm}^3$ e $1,08 \text{ Kg/mm}^3$ como era esperado.

Figura 22 - Ação de mistura para o tempo adimensional igual 24, 61



Fonte: O autor, 2019.

4.2 Regime Convectivo

4.2.1 Regime dominado pela convecção

Nesta seção as ações de convecção e difusão são consideradas simultaneamente. No entanto, se o número de Péclet é suficientemente grande a parte convectiva domina o processo.

Para fins de comparação e validação da metodologia proposta, considera-se a condição inicial dada pela equação

$$c(r, \theta) = \cos(\theta). \quad (81)$$

Os parâmetros utilizados para gerar os resultados apresentados nesta seção são mostrados na Tab. (2).

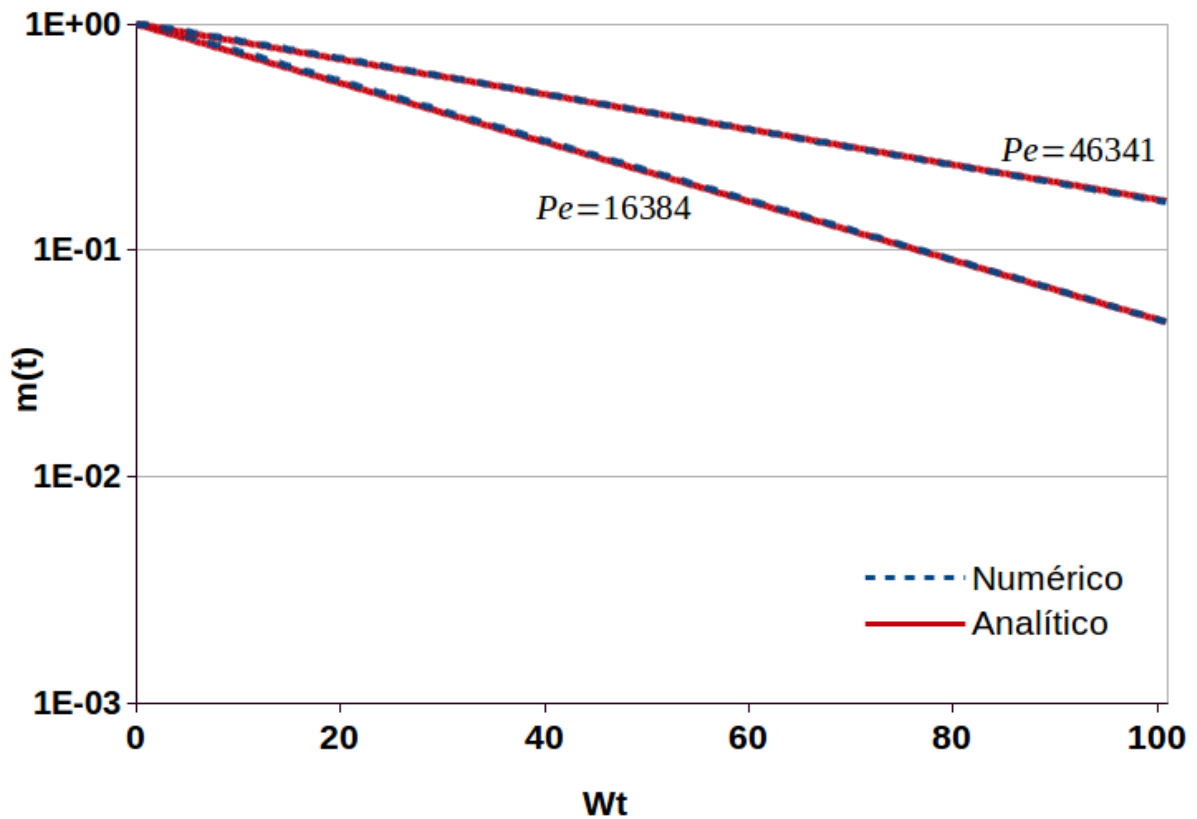
Tabela 2 - Parâmetros utilizados no regime dominado pela convecção

Parâmetros	Valores
γ	0,05
$R(mm)$	1,51
$\Delta t(s)$	0,001
$\alpha(s^{-1})$	312

Fonte: O autor, 2019.

A Fig. (23) mostra o gráfico logarítmico de $m(t)$ em função do tempo adimensional ωt para dois números de Péclet. Esses valores são retirados do trabalho de Gleeson (2005). Neste gráfico são comparadas as medida de mistura, $m(t)$, analítica e numérica, sendo a analítica dada pela Eq. (21), válida em condições assintóticas. Para esses valores de

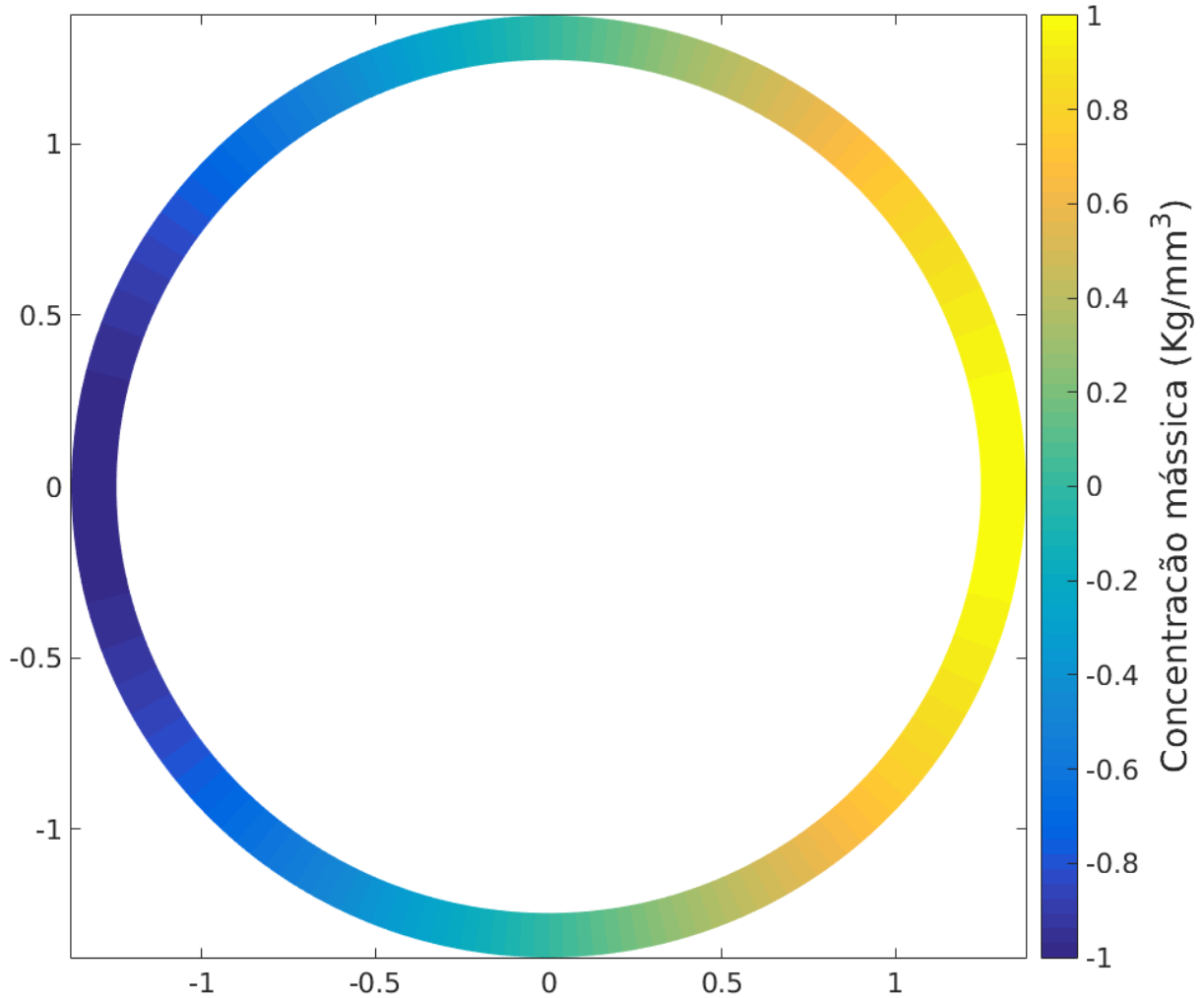
Figura 23 - Medida de mistura $m(t)$ no regime convectivo.



Fonte: O autor, 2019.

Péclet, o fenômeno é dominado pela convecção, no entanto, o termo difusivo está presente, porém seu efeito é mínimo. Os erros percentuais médios para Péclet igual a 16384 e 46341, são respectivamente 1,53% e 0,63%. Ambos os resultados são bons, como mostra os erros percentuais médios.

Figura 24 - Iniciação do processo de mistura com condição inicial dada por $c(r, \theta, 0) = \cos(\theta)$

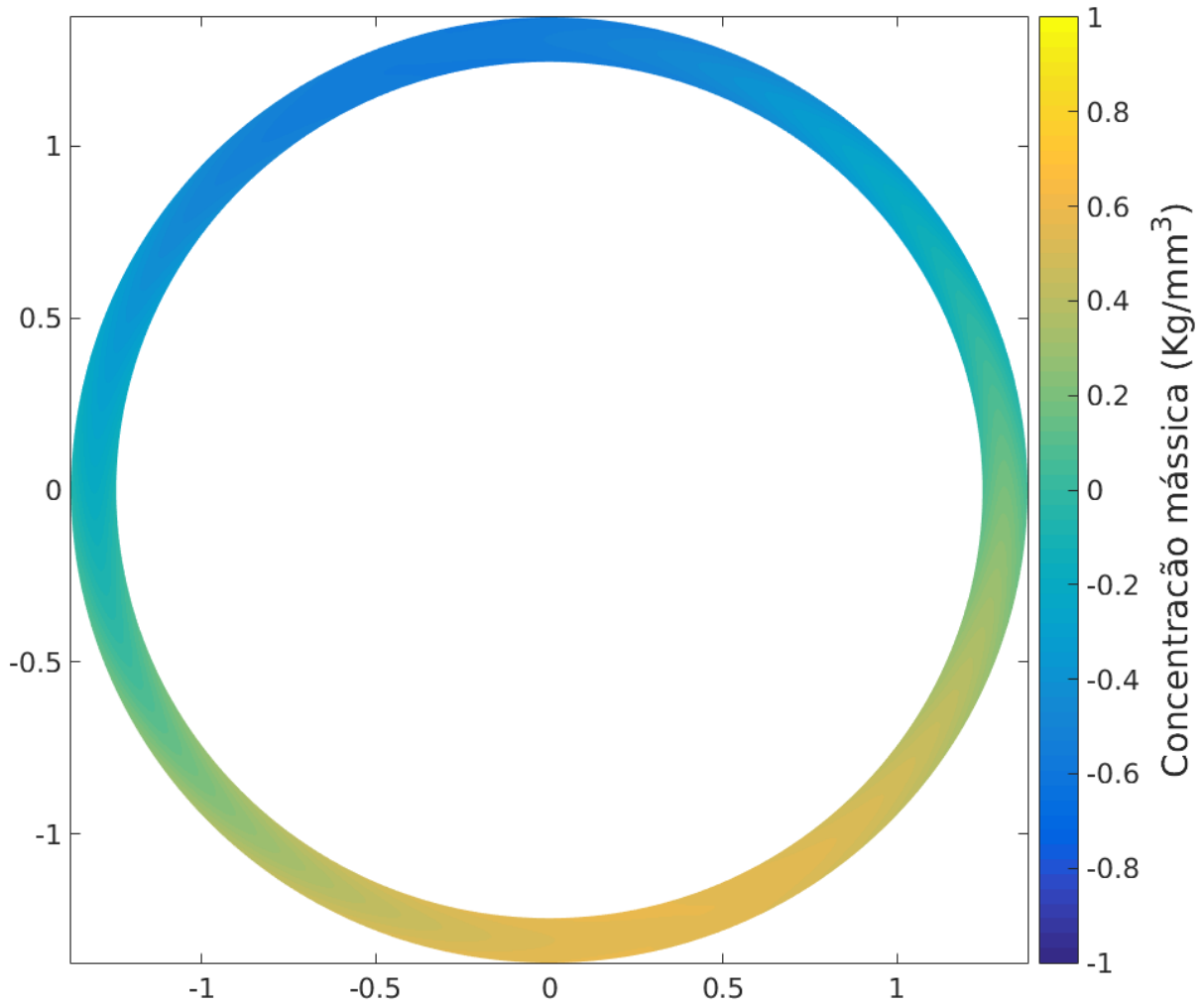


Fonte: O Autor, 2019.

Na Fig. (24) tem-se o estágio inicial do processo de mistura para $Pe = 46341$ em que a condição inicial é dada pela Eq. (81). Observa-se que as substâncias concentram-se em torno das tonalidades em azul e amarelo.

As Figs. (25) e (26) demonstram o processo de mistura para os tempos adimensionais de 64, 97 e 135, 15. Verifica-se na Fig. (25) que nível de concentração mássica é de $0,56 \text{ Kg/mm}^3$, na condição inicial o mesmo era de $1,00 \text{ Kg/mm}^3$ (máximo). O mesmo ocorre para o valor mínimo que na condição inicial era de $-1,00 \text{ Kg/mm}^3$ e aumentou para $-0,56 \text{ Kg/mm}^3$. Observa-se, portanto, que os níveis de concentração estão aproximando-se de zero, tornando a mistura homogênea. A Fig. (26) mostra a etapa final do processo de mistura, com níveis de concentração próximos de 0 Kg/mm^3 . Neste instante a concentração varia entre $-0,14 \text{ Kg/mm}^3$ e $0,14 \text{ Kg/mm}^3$.

Figura 25 - Ação de mistura para $\omega t = 64,97$



Fonte: O autor, 2019.

4.2.2 Regime totalmente convectivo

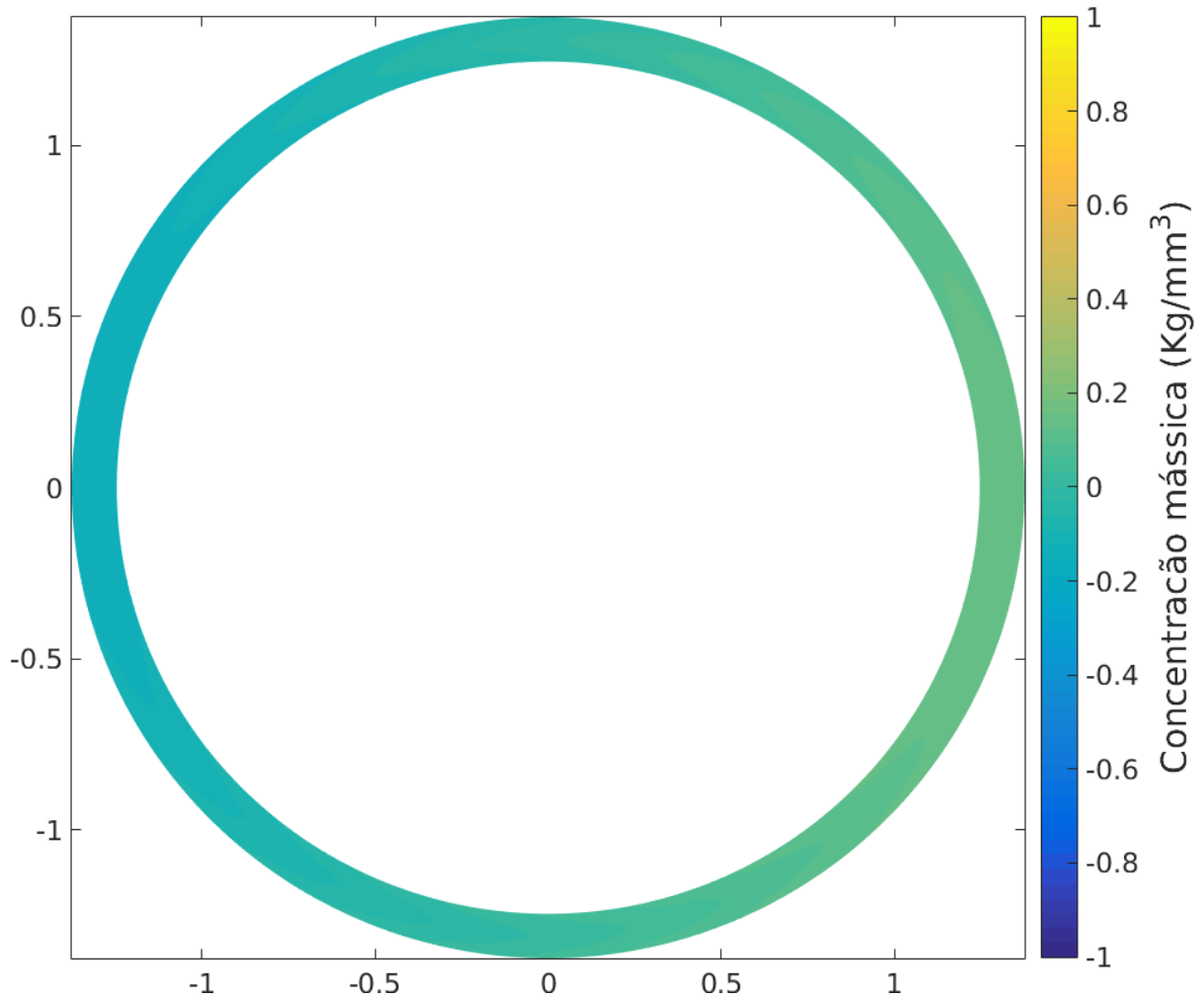
No regime totalmente convectivo a Eq. (7) é resolvida considerando apenas sua parte convectiva, ou seja, $\kappa = 0$.

A Fig. (27) mostra quatro estágios do processo de mistura no micromisturador com condição inicial dada pela equação:

$$c(r, \theta, 0) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0 \leq \theta < \pi \\ 0 & \text{se } \pi \leq \theta < 2\pi. \end{cases} \quad (82)$$

Nesse teste foram empregados os parâmetros apresentados na Tab. (3).

A condição inicial mostrada na Eq. (82) retrata duas substâncias teóricas com diferentes concentrações separadas inicialmente, Fig. (27-a). Na ausência de difusão

Figura 26 - Ação de mistura para $\omega t = 135,15$ 

Fonte: O autor, 2019.

Tabela 3 - Parâmetros do regime totalmente convectivo

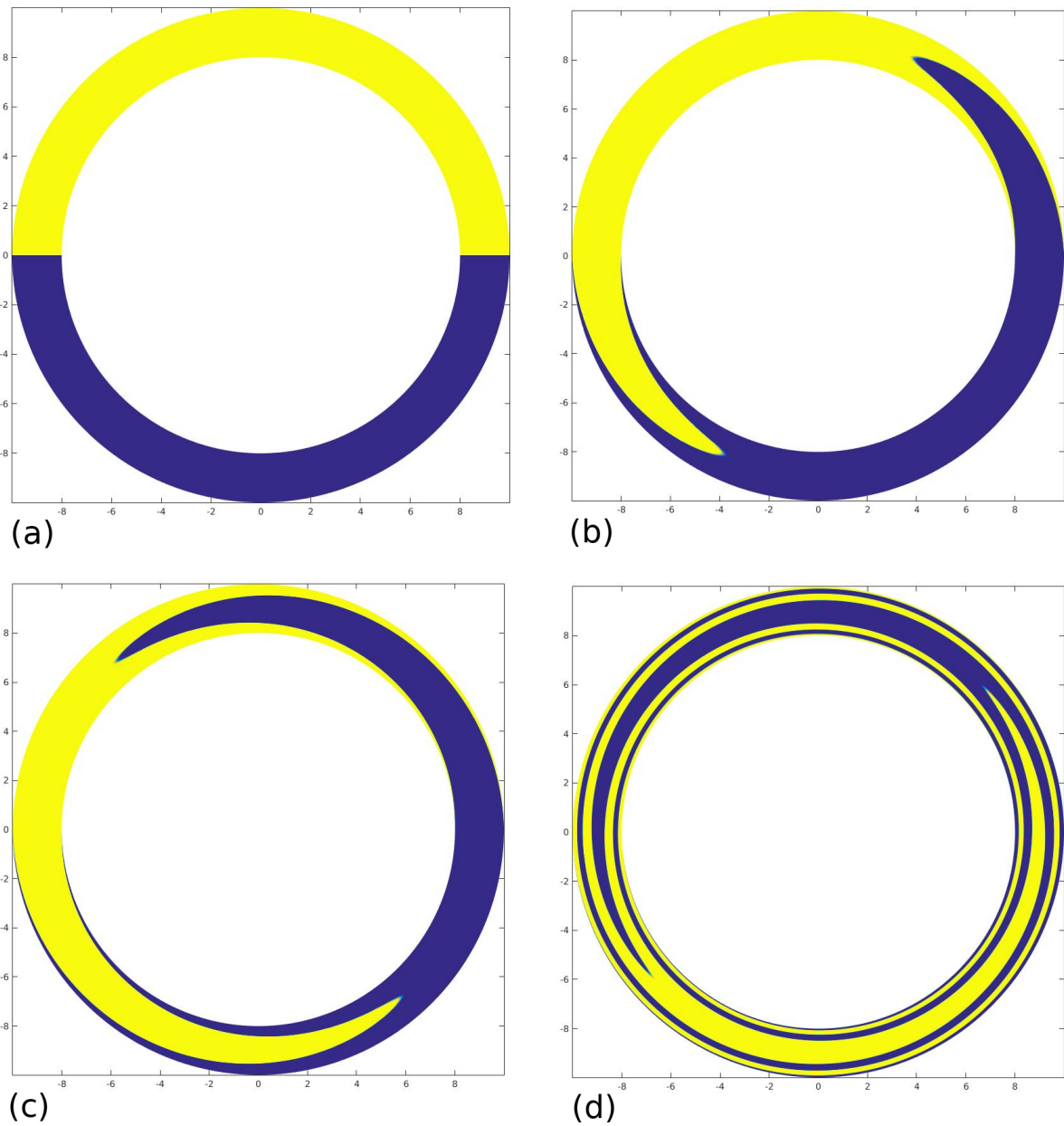
Parâmetros	Valores
R (mm)	9
Δt (s)	0,0075
α (s^{-1})	312

Fonte: O autor, 2019.

molecular o processo é totalmente regido pelo transporte. Ao decorrer do tempo, uma substância tende a ocupar o lugar da outra, formando uma frente convectiva, como mostrado nas Figs. (27-b), (27-c) e (27-d). Desse modo, não há mistura.

Outra forma de visualizar o escoamento puramente convectivo é observando a mistura no domínio matemático em que os valores da concentração inicial são mostrados na Fig. (28). Quando o processo ocorre, as Figs. (29-a), (29-b), (29-c) e (29-d) evidenciam

Figura 27 - Processo de mistura para a condição inicial mostrada na Eq. (82)

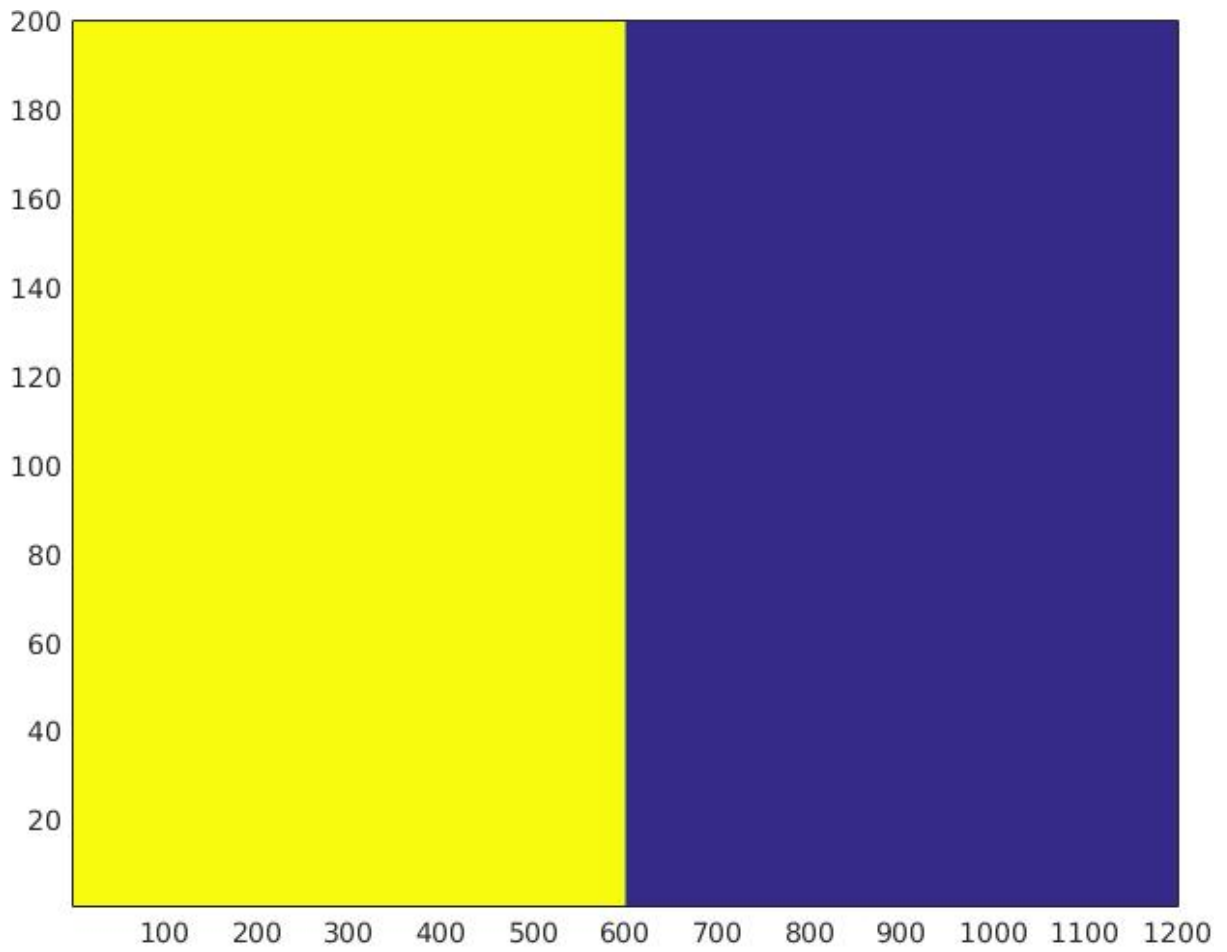


Fonte: O autor, 2019.

que para tempos extremamente elevados não há mistura. Por menor que sejam as espessuras entre as faixas laterais, não há difusão entre as substâncias. Na parte central formam-se “ilhas” entre as substâncias, típicas de um processo caótico.

Esse resultado mostra a eficiência do método Tubo de Trajetória em resolver esse problema. Além disso, a condição inicial da Eq. (82) é descontínua e representa valores que são 0 ou 1, dessa forma, durante todo o processo, para uma partícula do fluido esses valores devem manter-se constantes, uma vez que os pontos de concentração estão apenas “viajando” no espaço. Esse tipo de comportamento é difícil de ser capturado por outros

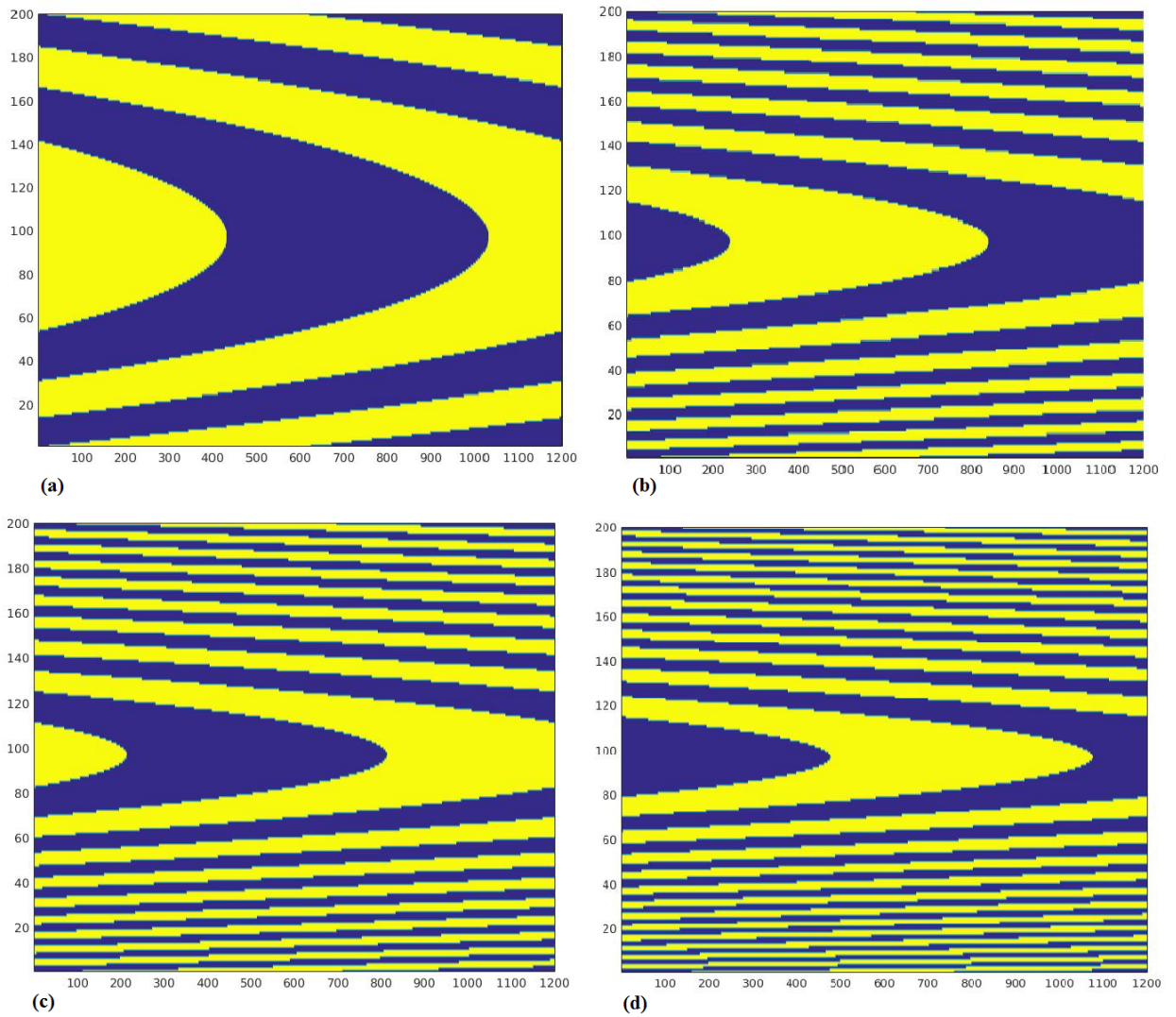
Figura 28 - Condição Inicial apresentada no domínio matemático.



Fonte: O autor, 2019.

métodos numéricos por conta dessa forte descontinuidade.

Figura 29 - Imagens caóticas.



Fonte: O autor, 2019.

5 RESULTADOS EM CONDIÇÕES NÃO ASSINTÓTICAS

O capítulo anterior serviu para validar a técnica de separação de operadores aplicado na simulação de um micromisturador. As simulações concentraram-se em dois níveis para o número de Pe . Esse parâmetro especifica o grau de interferência do componente convectivo ou difusivo em relação ao processo de mistura.

Nos trabalhos de Gelb et al. (2004) e Gleeson (2005) reportam quais número de Péclet tornam o processo de mistura mais eficiente. Os valores ótimos de Péclet são aqueles em que a medida de mistura ($m(t)$) tende para 0 no menor tempo adimensional (ωt). Essa análise foi feita com uma espessura de canal fina, dada por um valor de $\gamma = 0.05$ e $\gamma = 0.2$, uma vez que os resultados desses valores são válidos apenas em condições assintóticas, onde $\gamma \rightarrow 0$ e $t \rightarrow \infty$.

Nesta seção, será apresentada uma análise dos números de Péclet em relação a diferentes espessuras do canal (valores de γ), ainda não estudados na literatura. Serão consideradas duas condições iniciais. Em termos numéricos utilizou-se uma malha retangular de 200 nós ao longo do eixo r e 1200 na direção no eixo θ . Para gerar os resultados apresentados neste capítulo utiliza-se os parâmetros mostrados na Tab. (4).

Tabela 4 - Parâmetros utilizados para gerar resultados em condições Não Assintóticas

Parâmetros	Valores
R (mm)	5,05
Δt (s)	0,0075
α (s^{-1})	312

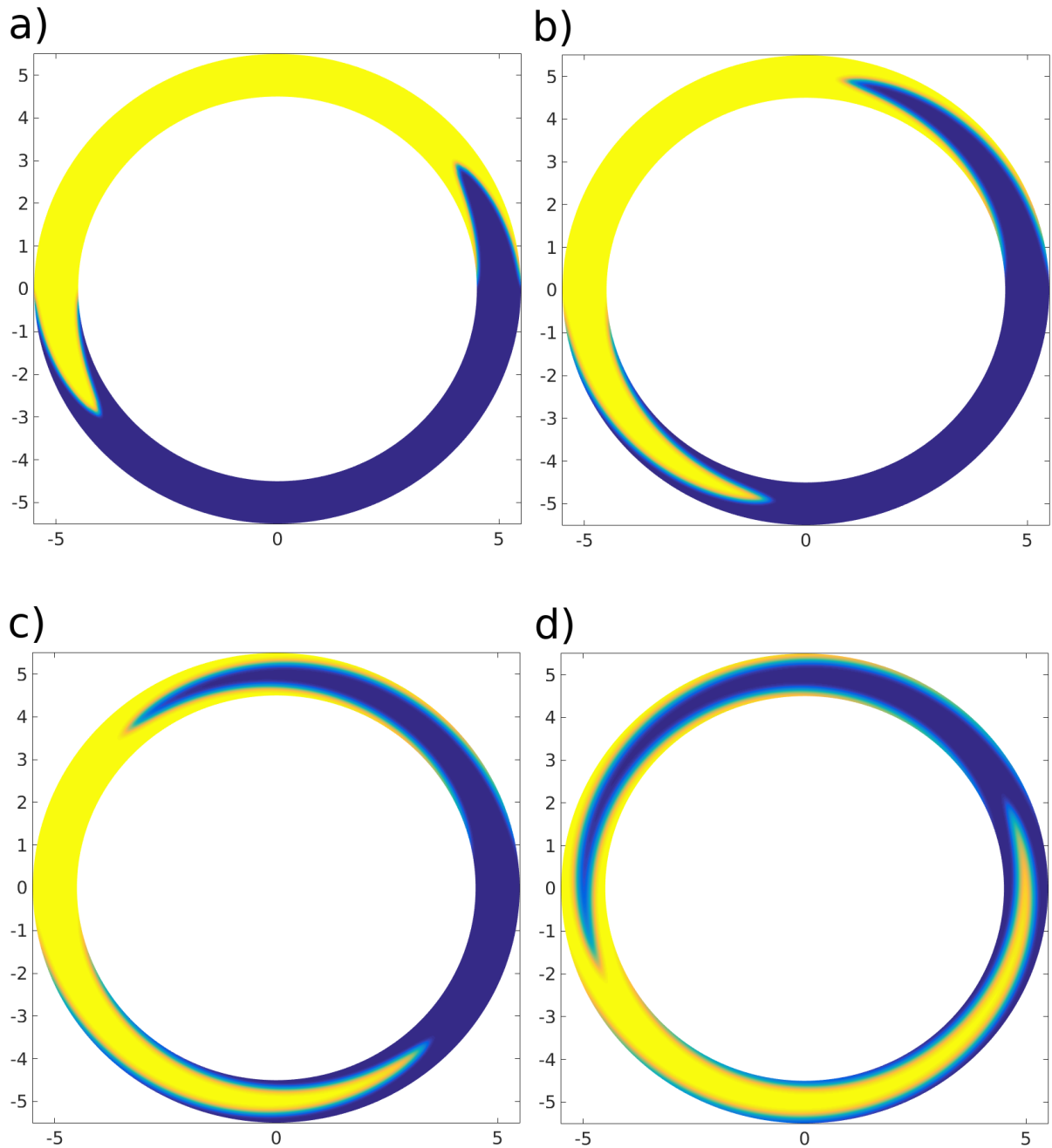
Fonte: O autor, 2019.

5.1 1ª Condição

A condição inicial utilizada nesta seção é dada pela Eq. (82). Esta condição é importante pois exibe dois patamares com valores diferentes de concentração, ilustrando duas substâncias que inicialmente não estão misturadas Fig. (30-a). Do ponto de vista numérico essa condição inicial apresenta o desafio de ser descontínua, com valores 0 ou 1. Como foi mostrado no capítulo de validação, para o caso totalmente convectivo não há mistura, somente transporte (Fig. (27)).

A Fig. 30 mostra o processo de mistura em quatro tempos adimensionais, utilizando a condição inicial dada pela Eq. (82) com $Pe = 100$. Essa figura mostra que inicialmente o fenômeno é dominado quase exclusivamente pelo transporte, evidenciado

Figura 30 - Processo de mistura para quatro tempos ωt : a) 0,08 b) 0,18 c) 0,31 d) 0,47

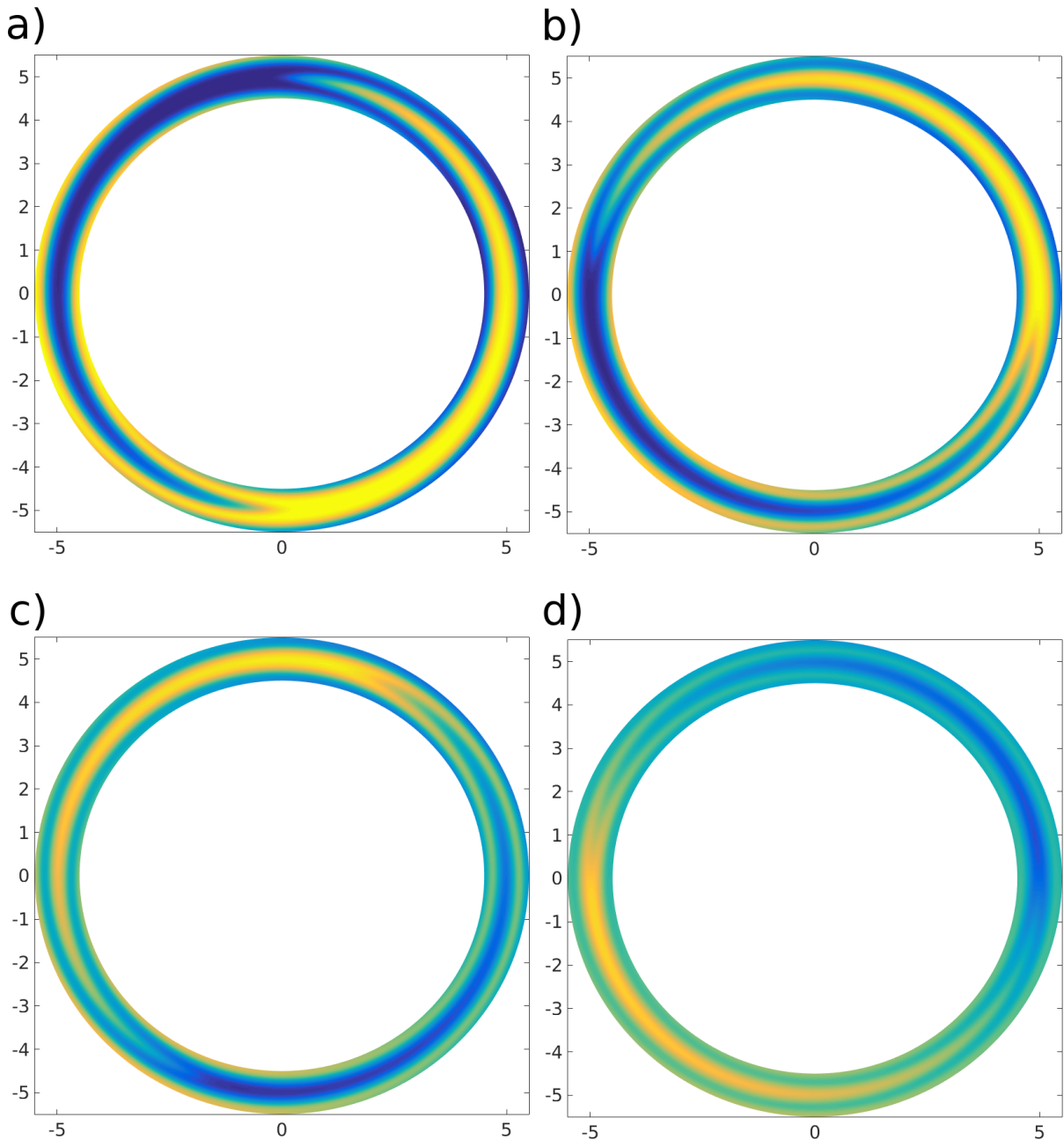


Fonte: O autor, 2019.

pelo formato de frentes de ambas as substâncias. Porém, nota-se a presença da difusão molecular responsável pelos valores de concentração mássica diferentes dos extremos 0 e 1.

Numericamente, os resultados mostrados pela Figs. (30) e (31) evidenciam a robustez da metodologia empregada para resolver a Eq. (7). O método Tubo de Trajetória consegue resolver a parte convectiva, ou seja, mesmo sendo esta uma função descontínua o método

Figura 31 - Processo de mistura para quatro tempos ωt : a) 0,63 b) 0,83 c) 1,01 d) 1,28



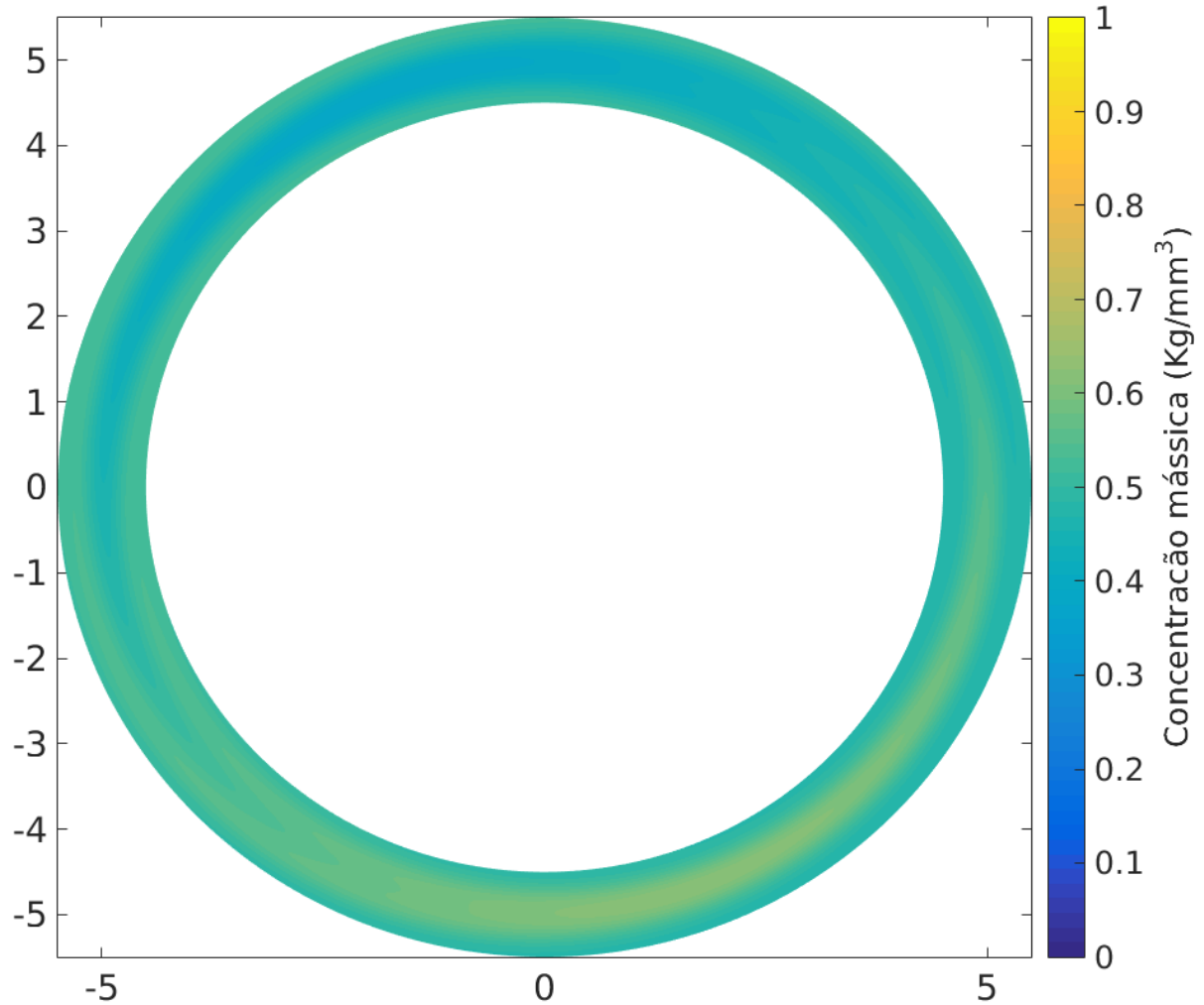
Fonte: O autor, 2019.

TTC captura o fenômeno. Por sua vez, a parte difusiva, mesmo que discreta visualmente (inicialmente, Figs. (30) a) e (30) b), são importantes para ocorrência do processo de mistura. A Fig. (31) expõe resultados do processo para tempos grandes. Na Fig. (31) d) os valores extremos (0 e 1) já não são verificados, e as cores destas figuras estão mais homogêneas.

Na Fig. (32), plotada no tempo adimensional igual a 3,29, os valores de concentração das substâncias estão bem mais uniformes. Os níveis variam no intervalo de

$[0, 37; 0, 62]$ com uma diferença máxima de $0, 24 \text{ kg/mm}^3$. Para esse tempo, a medida de mistura é igual a $0, 00997241$.

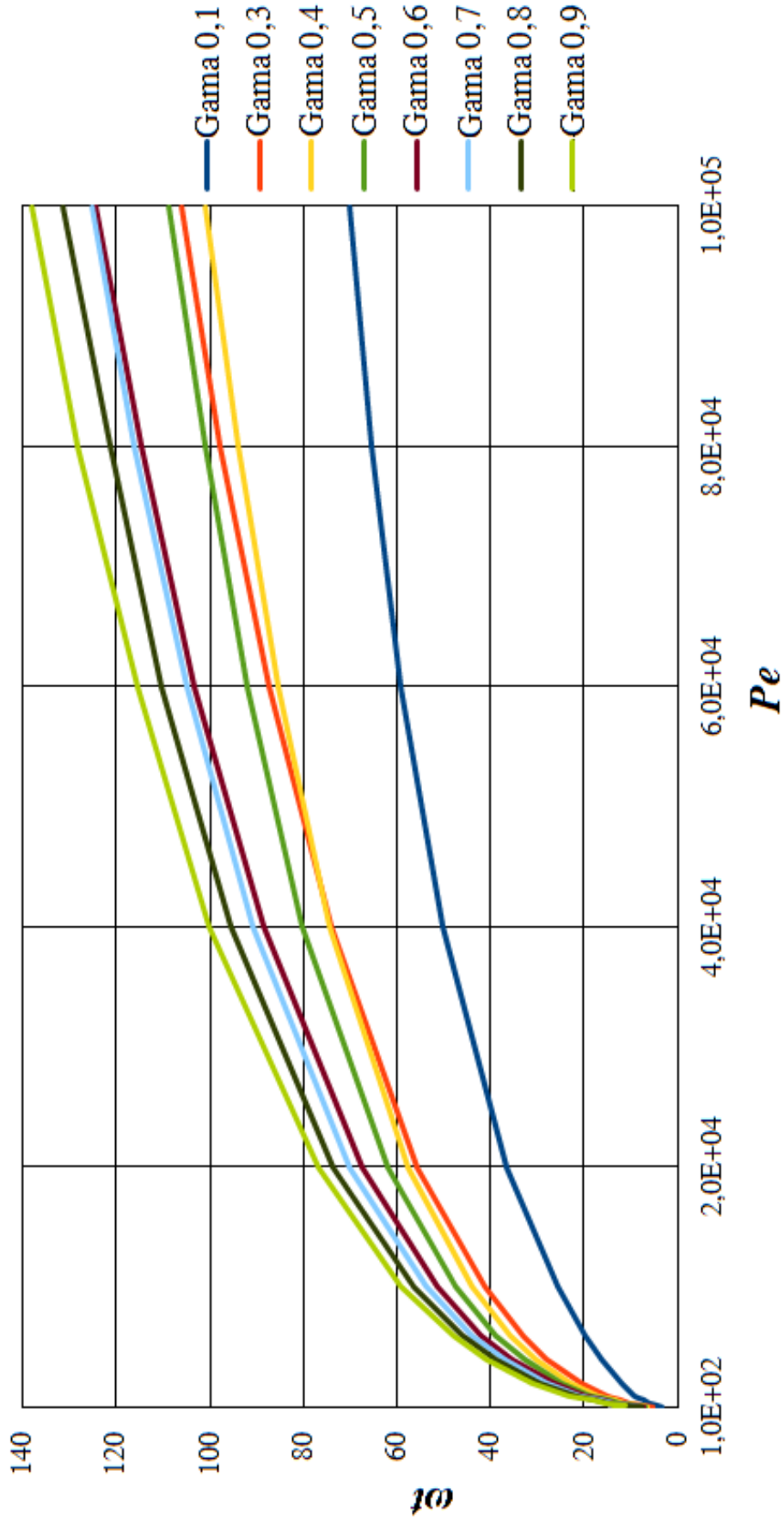
Figura 32 - Níveis de concentração para $\omega t = 3, 29$



Fonte: O autor, 2019.

Na Fig. (33) são apresentadas diferentes curvas da variação do tempo adimensional ωt em relação ao número de Péclet considerando diferentes valores de γ , valores estes não analisados na literatura. Observando o gráfico mostrado na Fig. (33), pode-se verificar que o processo da mistura é mais eficiente quando $\gamma = 0, 1$, pois é o menor tempo encontrado para a relação $\omega t \times Pe$.

Figura 33 - Representação de diferentes γ

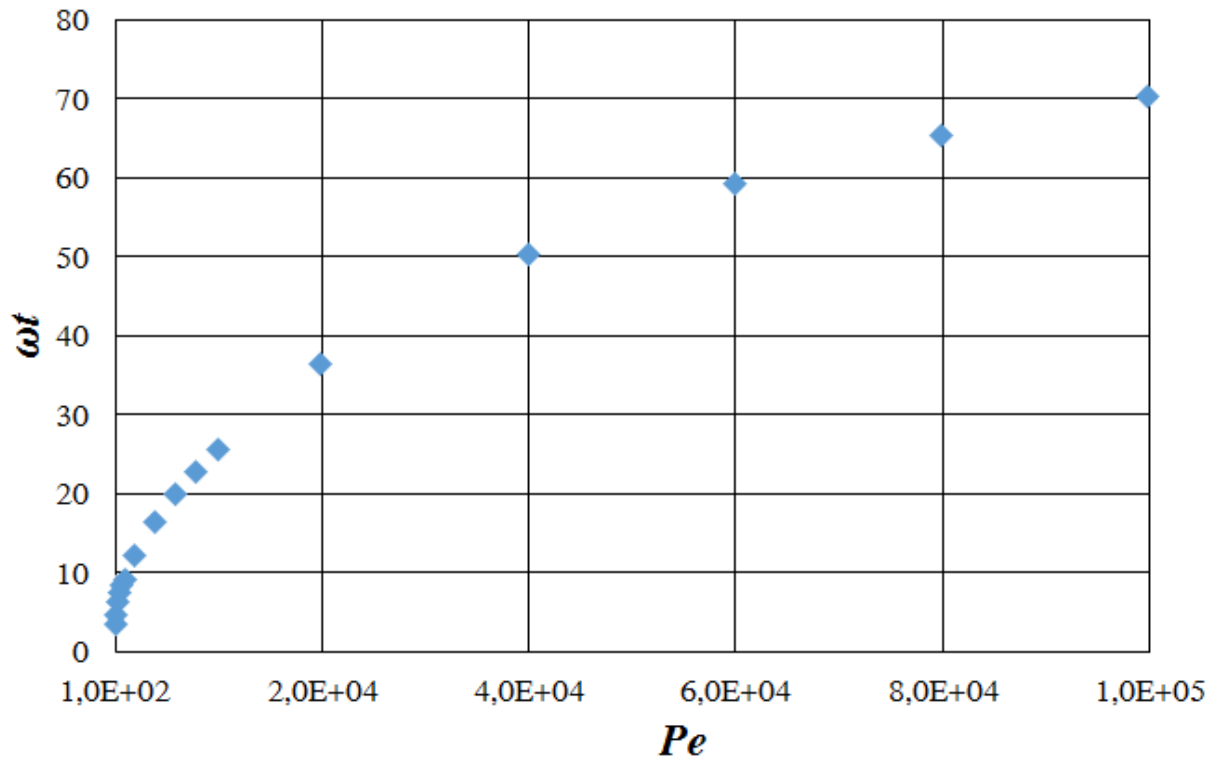


Fonte: O autor, 2019.

Observando a Fig. (34) em que são plotadas as variações do número de Péclet, Pe , em relação ao tempo adimensional, ωt , com a condição inicial dada pela Eq. (8) e utilizando $\gamma = 0,1$. Verifica-se que o melhor tempo de mistura nessas condições simuladas ocorre para $Pe = 100$.

Analisando ainda a Fig. (34), nota-se que o número de Péclet e o tempo adimensional possuem uma relação não linear.

Figura 34 - Curva da relação entre o tempo adimensional e número de Péclet para $\gamma = 0,1$



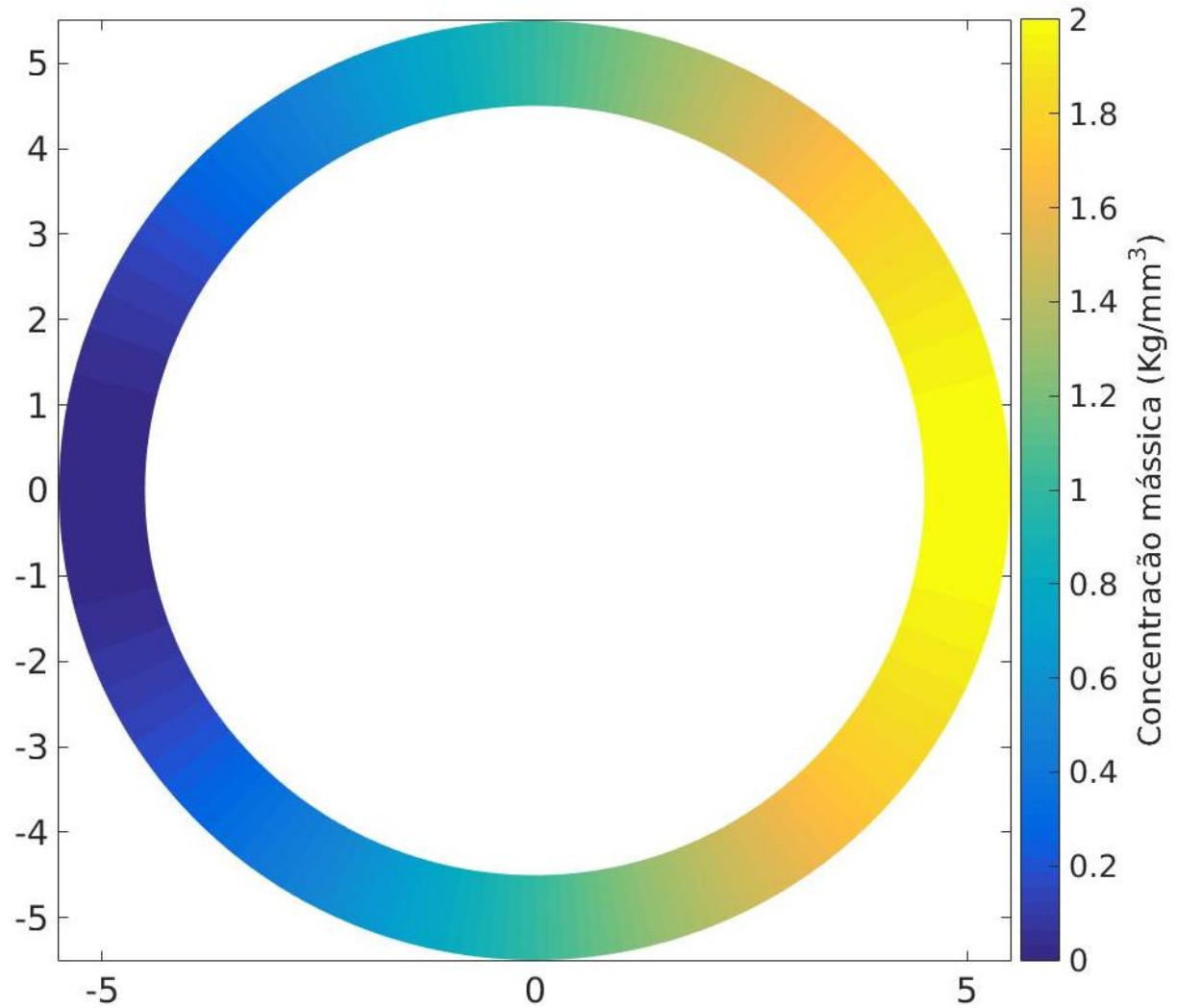
Fonte: O autor, 2019.

5.2 2ª Condição

Os resultados que serão apresentados nesta seção utilizam como condição inicial a Eq. (80) e os parâmetros apresentados na Tab. (4).

A Fig. (35) mostra que os valores de concentração mássica (Kg/mm^3) variam entre 0 e 2.

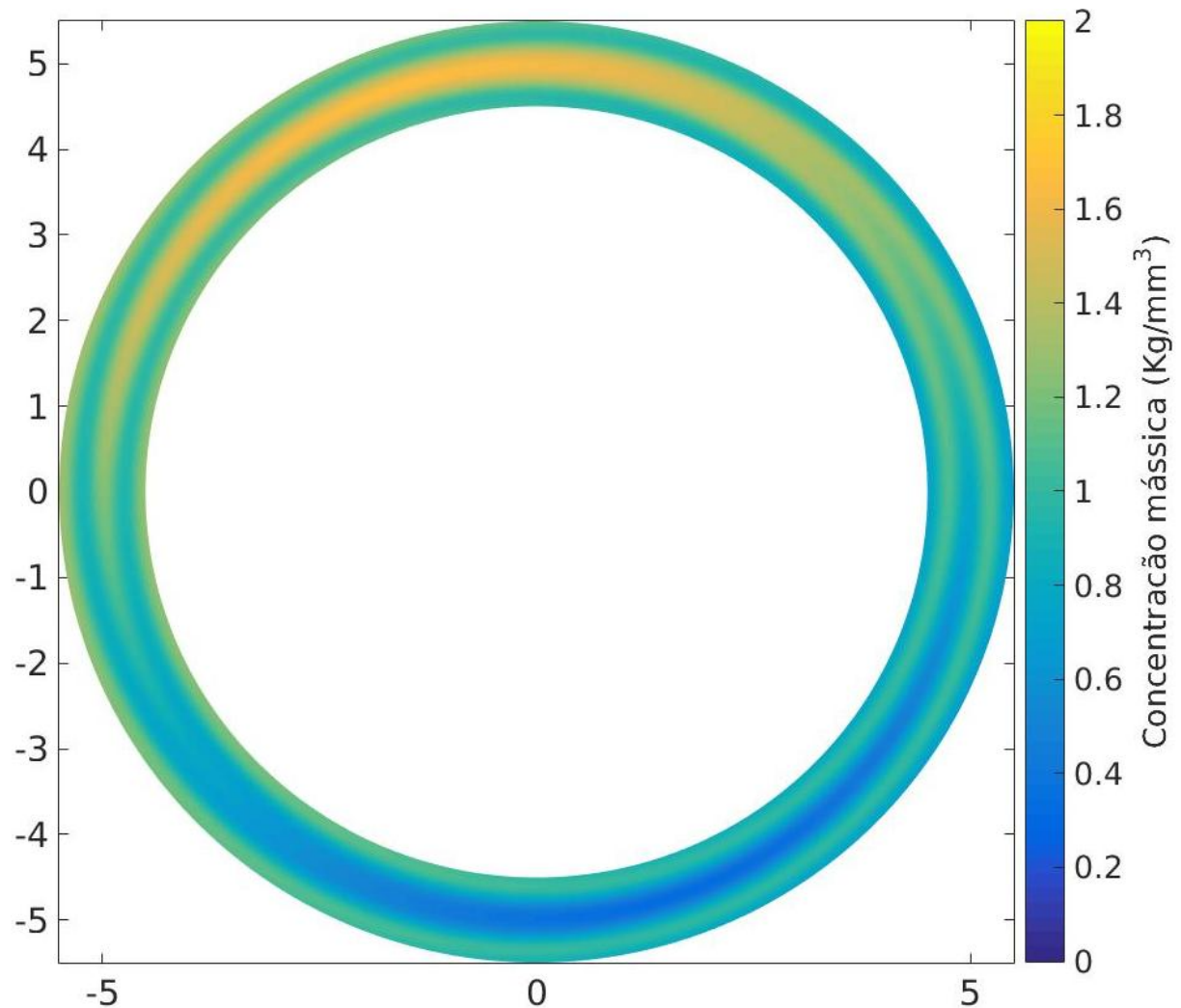
Figura 35 - Condição inicial com $\gamma = 0.1$



Fonte: O autor, 2019.

Com essa malha extremamente fina, é possível capturar os efeitos da convecção e difusão molecular. A Fig. (36) mostra os níveis de concentração mássica no tempo adimensional, $\omega t = 0,15$ e com $Pe = 100$. O transporte é observado na forma de uma frente em que uma substância avança sobre o espaço ocupado pela outra, típico de convecção. Por sua vez a difusão é notada pelas diferentes e contínuas tonalidades.

Figura 36 - Perfil de concentração com $\omega t = 0,15$

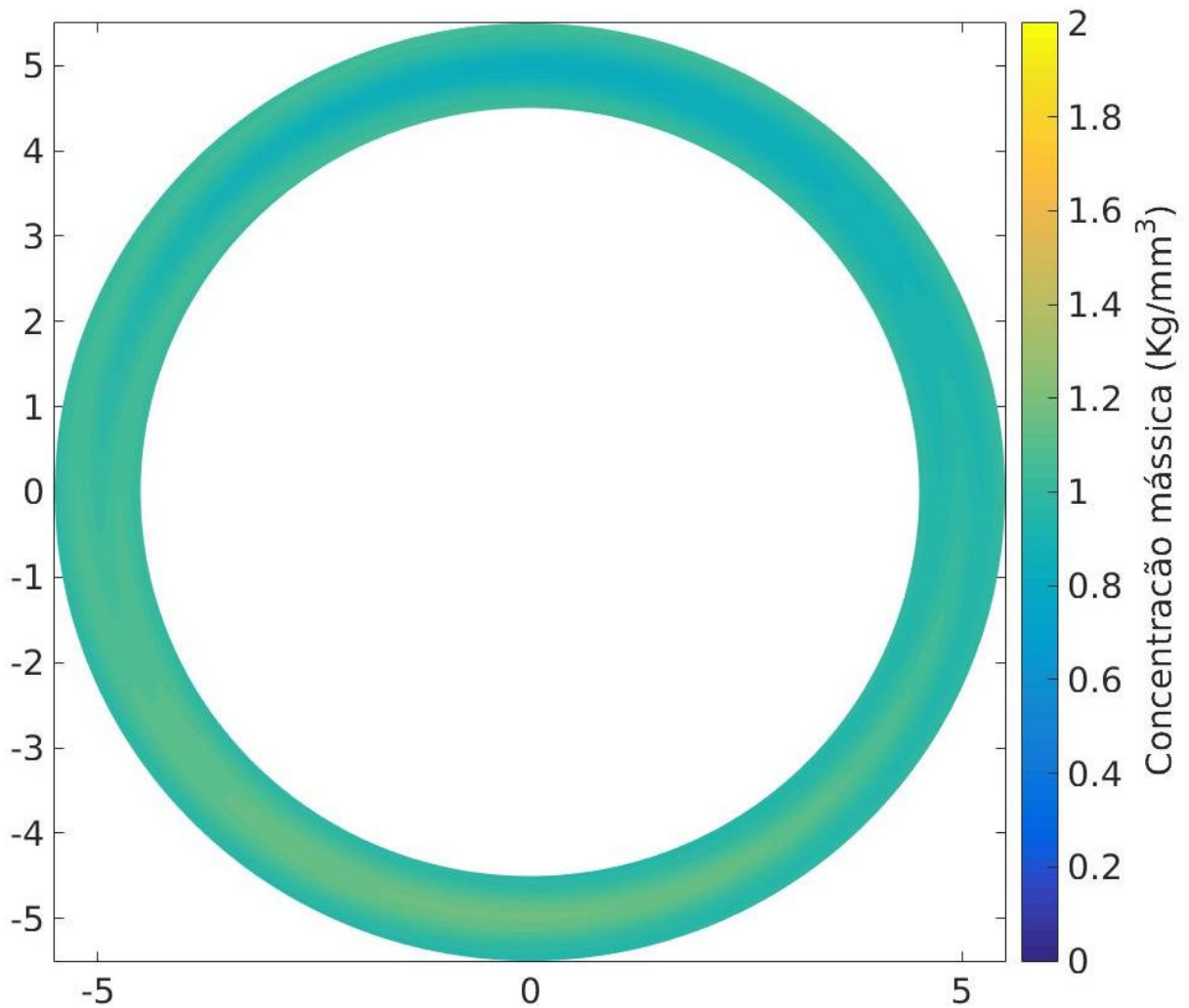


Fonte: O autor, 2019.

No nível de tempo $\omega t = 0,15$, a concentração mássica varia no intervalo $[0,333713; 0,666285]$, com uma concentração média igual a $1,332571 \text{ Kg/mm}^3$. Evidenciando o corrente processo de mistura.

A Fig. (37) exibe o perfil de concentração em um tempo $\omega t = 3,4$. O valor da concentração nesse tempo pertencem ao intervalo $[0,837709; 1,162288]$. A diferença entre os valores extremos é de $0,32\text{Kg/mm}^3$, o qual tende para zero no final do processo de mistura. Graficamente nota-se uma harmonização das cores próximas ao valor de 1kg/mm^3 .

Figura 37 - Níveis de concentração em $\omega t = 3,4$

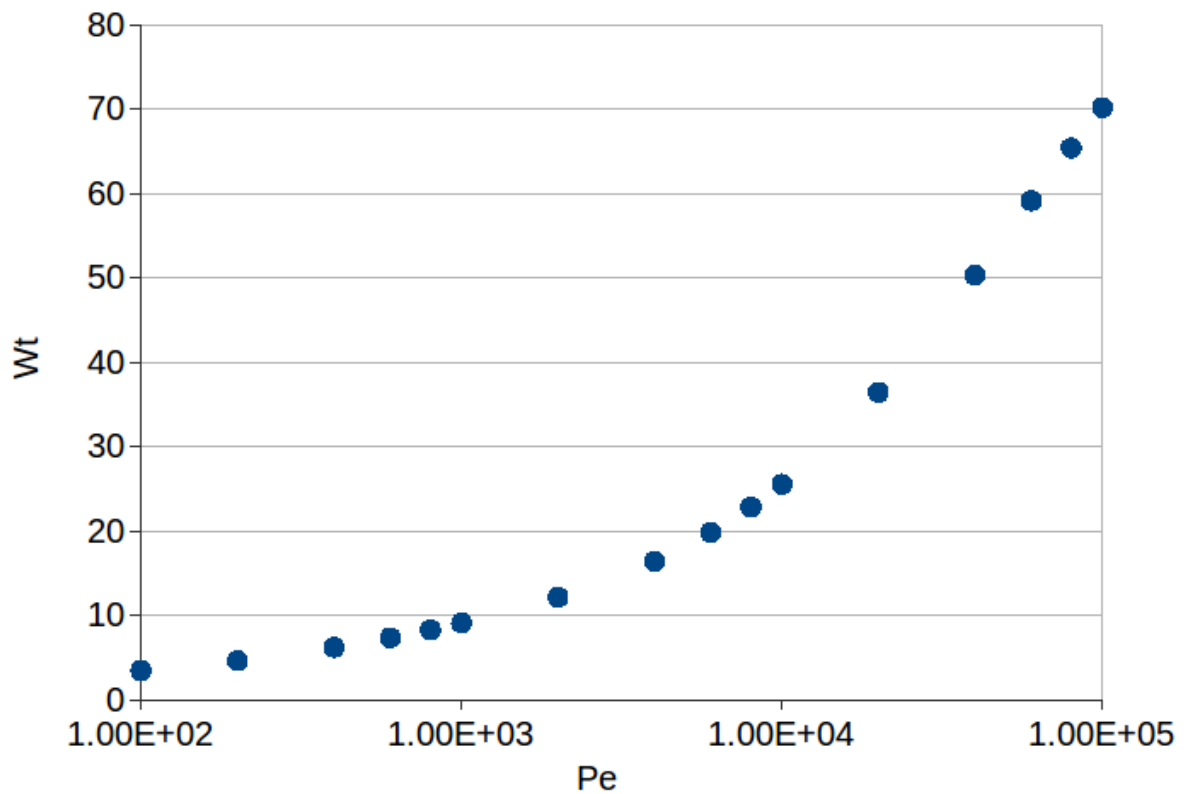


Fonte: O autor, 2019.

Nesta etapa o processo de mistura já está em estágio final, com um valor de $m(t) = 0,010038$.

Os resultados mostrados nas Figs. (36) e (37) foram obtidos levando-se em consideração o parâmetro $Pe = 100$. A Fig. (38) mostra o gráfico da relação entre os diferentes valores para Pe e os tempos ωt . Cada valor de ωt descreve o tempo adimensional decorrido para que a medida de mistura, $m(t)$, atinja um valor inferior a 0,01.

Figura 38 - Curva da relação entre o tempo ωt e Pe para $\gamma = 0,1$

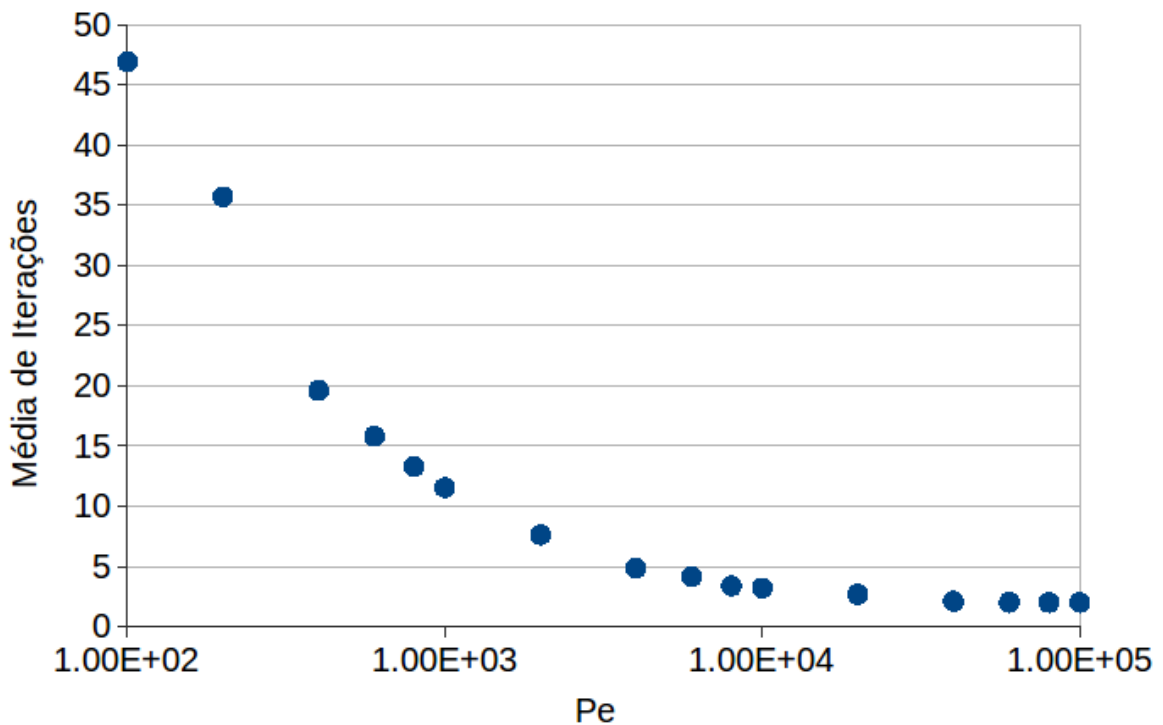


Fonte: O autor, 2019.

Nota-se na Fig. (38) a influência do número de Péclet no processo de mistura. Valores muito elevados tendem a retardar o processo. Dessa forma o melhor valor encontrado para o $\gamma = 0,1$ foi de $Pe = 100$.

Quando o valor do número de Pe cresce a influência do componente convectivo na Eq. (7) aumenta. Isso se reflete nos resultados numéricos do fenômeno físico modelado. Além disso, como usa-se a técnica de separação de operadores tal mudança em Pe reflete numericamente nos métodos numéricos destinados a resolver cada termo. A Fig. (39) mostra a quantidade de iterações (em média) que o método Gradiente Bi-conjugado utilizada para resolver o sistema linear resultante da discretização da parte difusiva. Com o aumento de Pe o número de iterações desse método diminui.

Figura 39 - Média de iterações do Gradiente Bi-Conjugado



Fonte: O autor, 2019.

Os resultados apresentados na Tab. (5) indicam o tempo de CPU para gama de 0,1 em diferentes números de Péclet. Observamos que o tempo de CPU diminui a medida que o número de Péclet aumenta, ou seja, o tempo que o CPU consome computando o processo de mistura é menor no regime convectivo.

Tabela 5 - Tempo de CPU

Pe	Tempos (s)
100	7.8814496994018555
200	6.5789126419802810
500	4.7163658142089844
700	3.4517369270324707
900	3.0774188041687012
2000	2.9253399372100830
3000	1.8084489107131958
4000	1.5731399059295654
5000	1.5334939956665039
6000	1.4151320457458496
7000	1.3539400100708008
8000	1.2295049428939819
9000	1.1290169954299927
10000	1.1780680418014500
20000	1.1582319736480713
40000	1.6335520744323730
60000	1.2103785672409864
80000	0.93805897235870361
100000	0.69379204511642456

Fonte: O autor, 2019.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste trabalho, usamos a técnica de separação de operadores para resolver a equação de convecção-difusão dada em coordenadas polares de um micromisturador anelar como mostrado na Fig. (1). Este protótipo foi proposto por West et al. (2002).

Essa técnica consiste em separar a equação de convecção-difusão em dois termos: um convectivo e outro difusivo. A principal vantagem dessa técnica é possibilitar o uso de métodos específicos para resolver as equações resultantes da separação dos termos da equação. No presente trabalho, utilizamos o método do Tubo de Trajetórias, para resolver a parte convectiva da equação, e foi utilizado para resolver a parte difusiva o método de diferenças finitas centradas e o Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado.

Para a validação da metodologia, as medidas de mistura $m(t)$, foram analisadas e comparadas em regimes difusivo e convectivo com os valores encontrados na literatura de medidas de mistura e atestaram um bom desempenho desta técnica para resolver a equação de convecção-difusão em coordenadas polares. No regime puramente difusivo, por exemplo, as medidas de mistura obtidas pela solução numérica para o número de Péclet de 0.01 são praticamente coincidentes com a solução analítica apresentando um erro percentual médio de apenas 0.75%, como mostrado na Fig. (19). Já no regime dominado pela convecção, o termo difusivo está presente, porém seu efeito é mínimo. Os erros percentuais médios para número de Péclet igual a 16384 e 46341, são respectivamente 1.53% e 0.63%, como mostrado na Fig. (23) e evidenciando os bons resultados neste regime.

O esquema composto analisado, exibiu boa habilidade para resolver problema totalmente convectivo ($\kappa = 0$ na Eq. (7)), mesmo que as condições iniciais sejam descontínuas, como no caso apresentado para a condição inicial dada pela Eq. (82). Esse resultado evidencia a eficiência do método Tubo de Trajetória em resolver problemas que apresentam descontinuidade. Como essa condição inicial representa valores que são 0 ou 1, consequentemente, para uma partícula do fluido esses valores serão constantes durante todo o processo, uma vez que os pontos de concentração estão apenas “viajando” no espaço. Por conta dessa forte descontinuidade, os outros métodos numéricos apresentam dificuldades em capturar esse comportamento.

Foram analisados, neste trabalho, oito diferentes valores da espessura do canal γ , valores esses ainda não estudados na literatura. Foi verificado que o processo de mistura é mais eficiente para $\gamma = 0.1$ entre os gamas analisados, como mostrado na Fig. (33).

Em relação ao tempo de mistura, Gelb et al. (2004) e Gleeson (2005) alertam que os valores ótimos de Péclet são aqueles em que a medida de mistura $m(t)$ tende para 0 no menor tempo adimensional (ωt). Logo, o melhor tempo de mistura ocorre para o número de Péclet igual a 100.

Perspectivas Futuras

Em continuação desta Tese, recomenda-se para trabalhos futuros a extensão do método do Tubo de Trajetórias para resolução de problemas tridimensionais.

REFERÊNCIAS

- BAU, H. H. et al. A magneto-hydrodynamically controlled fluidic network. *Sensors and actuators B: Chemical*, Elsevier, v. 88, n. 2, p. 205–216, 2003.
- BELL, L.; BINNING, P. J. A split operator approach to reactive transport with the forward particle tracking eulerian lagrangian localized adjoint method. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 27, n. 4, p. 323–334, 2004.
- BHAT, S. et al. Single molecule detection in nanofluidic digital array enables accurate measurement of dna copy number. *Analytical and bioanalytical chemistry*, Springer, v. 394, n. 2, p. 457–467, 2009.
- FERREIRA, F. P. *Aplicação do método do Tubo de Trajet[orias à solução Numérica das equações de Navier-Stokes*. Tese (Doutorado).
- FLORES, E. V. *Uma Abordagem Semi-Lagrangeana para a Quebra do Operador de Convecção-Difusão: Um Estudo de Casos e Comparações com um Esquema Totalmente Implícito*. Tese (Doutorado) — Tese de Doutorado, IPRJ-UERJ, 2009.
- GELB, A. et al. Modelling annular micromixers. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, SIAM, v. 64, n. 4, p. 1294–1310, 2004.
- GIONA, M.; CERBELLI, S.; VITACOLONNA, V. Universality and imaginary potentials in advection–diffusion equations in closed flows. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 513, p. 221–237, 2004.
- GLEESON, J. P. Transient micromixing: examples of laminar and chaotic stirring. *Physics of Fluids*, AIP, v. 17, n. 10, p. 100614, 2005.
- GURTIN, M. E. *Topics in finite elasticity*. [S.l.]: SIAM, 1981. v. 35.
- HAVERKAMP, V. et al. The potential of micromixers for contacting of disperse liquid phases. *Fresenius' journal of analytical chemistry*, Springer, v. 364, n. 7, p. 617–624, 1999.
- HENDERSON, N.; PACHECO, F.; KISCHINHEVSKY, M. Numerical solution of the navier-stokes equations using the path tubes method. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 172, p. 585–602, 2017.
- HENDERSON, N.; PENA, L. The inverse distance weighted interpolation applied to a particular form of the path tubes method: Theory and computation for advection in incompressible flow. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 304, p. 114–135, 2017.
- HENDERSON, N.; SAMPAIO, M.; PENA, L. Path tubes method: A semi-lagrangian approach for linear advection equations. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 64, n. 13, p. 3138–3146, 2009.
- _____. Developing new approaches for the path tubes method. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 35, n. 1, p. 285–302, 2011.

- KARLSEN, K. H. et al. The corrected operator splitting approach applied to a nonlinear advection-diffusion problem. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 167, n. 3-4, p. 239–260, 1998.
- KHAN, L. A.; LIU, P. L.-F. Intermediate dirichlet boundary conditions for operator splitting algorithms for the advection-diffusion equation. *Computers & fluids*, Elsevier, v. 24, n. 4, p. 447–458, 1995.
- _____. Numerical analyses of operator-splitting algorithms for the two-dimensional advection-diffusion equation. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 152, n. 3-4, p. 337–359, 1998.
- LEVEQUE, R. J. et al. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. [S.l.]: Cambridge university press, 2002. v. 31.
- LIMA, E. L. *Coordenadas no plano*. [S.l.]: IMPA/VITAE, 1992.
- LUIKOV, A. *Fundamentals of Heat Transfer, Moscú*. [S.l.]: Editorial Mir Publishers, 1980.
- MALVERN, L. E. *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. [S.l.: s.n.], 1969.
- MORESCO, P.; ALBOUSSIÈRE, T. Experimental study of the instability of the hartmann layer. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 504, p. 167–181, 2004.
- NIKOL'SKII, S. M. *Approximation of functions of several variables and imbedding theorems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 205.
- OTTINO, J. M.; OTTINO, J. *The kinematics of mixing: stretching, chaos, and transport*. [S.l.]: Cambridge university press, 1989. v. 3.
- PELT-VERKUIL, E. van; BELKUM, A. V.; HAYS, J. P. *Principles and technical aspects of PCR amplification*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008.
- PENA, L. *Análise de um Método para a Equação de Convecção Formulada à Luz da Mecânica dos Meios Contínuos com Aplicações a Advecção de Anomalias Oceânicas e Meteorológicas*. Tese (Doutorado) — Tese de Doutorado, IPRJ-UERJ, 2006.
- PÉREZ-BARRERA, J.; ORTIZ, A.; CUEVAS, S. Analysis of an annular mhd stirrer for microfluidic applications. In: *Recent Advances in Fluid Dynamics with Environmental Applications*. [S.l.]: Springer, 2016. p. 275–288.
- QIAN, S.; BAU, H. H. Magneto-hydrodynamics based microfluidics. *Mechanics research communications*, Elsevier, v. 36, n. 1, p. 10–21, 2009.
- RAMAKERS, C. et al. Assumption-free analysis of quantitative real-time polymerase chain reaction (pcr) data. *Neuroscience letters*, Elsevier, v. 339, n. 1, p. 62–66, 2003.
- SAIKI, R. K. et al. Primer-directed enzymatic amplification of dna with a thermostable dna polymerase. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 239, n. 4839, p. 487–491, 1988.

- SLATTERY, J. C. *Advanced transport phenomena*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999.
- THOMAS, J. W. *Numerical partial differential equations: finite difference methods*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 1999. v. 22.
- TRUESDELL, C.; TOUPIN, R. The classical field theories. In: *Principles of classical mechanics and field theory/Prinzipien der Klassischen Mechanik und Feldtheorie*. [S.l.]: Springer, 1960. p. 226–858.
- VORST, H. V. D. a fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems *siam j. sci. Stat. Comput*, v. 13, p. 631–644, 1992.
- WEST, J. et al. Application of magnetohydrodynamic actuation to continuous flow chemistry. *Lab on a Chip*, v. 2, n. 4, p. 224–230, 2002.
- ZHANG, C.; XING, D.; LI, Y. Micropumps, microvalves, and micromixers within pcr microfluidic chips: Advances and trends. *Biotechnology advances*, Elsevier, v. 25, n. 5, p. 483–514, 2007.
- ZHAO, Y.; ZIKANOV, O. Instabilities and turbulence in magnetohydrodynamic flow in a toroidal duct prior to transition in hartmann layers. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 692, p. 288–316, 2012.