

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação

Estudo numérico de escoamento viscoelástico e eletrosmótico com potenciais dependente do tempo

Wesley de Souza Bezerra

Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional (PPG-CCMC)

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Wesley de Souza Bezerra

Estudo numérico de escoamento viscoelástico e eletroosmótico com potenciais dependente do tempo

Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *EXEMPLAR DE DEFESA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Antonio Castelo Filho

**USP – São Carlos
de 2018**

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados inseridos pelo(a) autor(a)

d278e de Souza Bezerra, Wesley
Estudo numérico de escoamento viscoelástico e
eletroosmótico com potenciais dependente do tempo /
Wesley de Souza Bezerra; orientador Antonio Castelo
Filho. -- São Carlos, 2018.
80 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Ciências de Computação e Matemática Computacional) --
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
Universidade de São Paulo, 2018.

1. Simulações numéricas. 2. Escoamento
eletroosmótico. 3. Modelo de Phan-Thien-Tanner. 4.
Potencial dependente do tempo. I. Castelo Filho,
Antonio, orient. II. Título.

Wesley de Souza Bezerra

**Numerical study of electro-osmotic viscoelastic fluid flow
with time-dependent potentials**

Doctoral dissertation submitted to the Institute of Mathematics and Computer Sciences – ICMC-USP, in partial fulfillment of the requirements for the degree of the Doctorate Program in Computer Science and Computational Mathematics. *EXAMINATION BOARD PRESENTATION COPY*

Concentration Area: Computer Science and Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Antonio Castelo Filho

**USP – São Carlos
2018**

*Este trabalho é dedicado especialmente a minha
família, que nunca deixou de acreditar e me apoiar.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço especialmente aos professores Antonio Castelo e Alexandre M. Afonso, exemplos de profissionais, cujas contribuições para este trabalho são imensuráveis.

Agradeço a minha família pelo carinho nos momentos difíceis e por estarem sempre presentes me apoiando no meu trabalho e na minha vida.

Agradeço a oportunidade dada pelo ICMC-USP e pelo apoio da UFGD.

Agradeço a todas as pessoas direta ou indiretamente envolvidos neste trabalho, possibilitando realização de um sonho de um estudante.

Obrigado, muito obrigado!

*“As invenções são, sobretudo,
o resultado de um trabalho de teimoso.”
(Santos Dumont)*

RESUMO

BEZERRA, W. S. . **Estudo numérico de escoamento viscoelástico e eletrosmótico com potenciais dependente do tempo**. 2018. 80 p. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2018.

Neste trabalho será investigado o comportamento de escoamentos de fluidos newtonianos e não-newtonianos em microcanais. O problema não-newtoniano, consiste em resolver as equações que regem o movimento para o caso de um escoamento de fluidos cujas propriedades reológicas possam ser estudadas pelo modelo constitutivo de Phan-Thien-Tanner, como por exemplo os materiais poliméricos. Uma das características interessantes de alguns destes materiais é que eles podem ser misturados com solventes apropriados, como uma solução eletrolítica, e o resultado é que este fluido como um todo passa a ter propriedades elétricas. Assim, além das propriedades viscoelásticas, será investigada a eletrocinética do escoamento, que é diretamente influenciado pela aplicação de um campo elétrico externo. Em particular o fenômeno de eletrosmose será estudado neste trabalho por meio de simulações numéricas em canais planos e bocais. Escoamentos através de bocais podem ser úteis na realização da mistura de fluidos. Neste trabalho, propomos uma aproximação numérica para a simulação dos vórtices que ocorrem logo após a passagem do fluido pela contração no bocal. Além disso, foram feitas simulações com potenciais dependentes do tempo e as variações nas propriedades do fluido viscoelástico para este tipo de escoamento foram discutidas. O movimento das cargas na solução é descrito pelas equações de Poisson-Nernst-Planck e para resolver numericamente este problema será aplicado o método das diferenças finitas generalizadas. O código para as simulações de escoamentos eletrosmóticos foi implementado como uma parte do sistema chamado HiG-Fow, que é capaz de realizar simulações de outros tipos de escoamentos além dos investigados nesta tese. A modularidade desse sistema possibilita ao usuário a implementação de pacotes de acordo com o tipo de escoamento a ser estudado.

Palavras-chave: HiG-Flow; Viscoelástico; Eletrosmótico; Potencial dependente do tempo.

ABSTRACT

BEZERRA, W. S. . **Numerical study of electro-osmotic viscoelastic fluid flow with time-dependent potentials**. 2018. 80 p. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2018.

In this work the behavior of newtonian and non-Newtonian fluids in microchannels will be investigated. The non-Newtonian problem consists in solving the governing equations of the movement take into account a fluid flow whose rheological properties can be studied by the Phan-Thien-Tanner constitutive model, for example the polymeric materials. One of the interesting features of some of these materials is that they can be mixed with appropriate solvents, such as an electrolyte solution, and the resulting fluid has electrical properties. Thus, besides the viscoelastic properties, the electrokinetics of the flow will be investigated, which is directly influenced by the application of an external electric field. In particular the phenomenon of electro-osmosis will be studied in this work through numerical simulations in flat channels and nozzles. Flows through nozzles may be useful in performing the fluid mixture. In this work, we propose a numerical approximation for the simulation of the vortices that occur soon after the passage of the fluid by the contraction in the nozzle. In addition, simulations were made with time dependent potentials and the variations in viscoelastic fluid properties for this type of flow were discussed. The motion of the charges in the solution is described by the Poisson-Nernst-Planck equations and to solve numerically this problem will be applied the generalized finite difference method. The code for the simulations of electroosmotic flows was implemented as a part of the HiG-Fow system, which is able to perform simulations of other types of flows beyond those investigated in this thesis. The modularity of this system enables the user to implement packages according to the type of flow to be studied.

Keywords: HiG-Flow; Viscoelastic; Electro-osmotic, Time-dependent potential.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	– Ilustração do escoamento eletrosmótico entre duas placas planas paralelas. O fluxo de fluido ocorre entre as duas placas de meia altura igual a H . O comprimento L e largura w são considerados muito maiores que H , mais especificamente para as simulações computacionais $L \approx 20H$	10
Figura 2	– As cargas que inicialmente estavam distribuídas de forma homogênea no fluido, se redistribuem dentro do canal, havendo um acúmulo de íons positivamente carregados próximo as paredes negativamente carregadas. Após a aplicação do potencial externo, essas cargas começam a se movimentar próximo as paredes, arrastando as partículas neutras do fluido. O perfil de velocidade mostrado está totalmente desenvolvido para o escoamento eletrosmótico, considerando o gradiente de pressão nulo.	11
Figura 3	– Ilustração da evolução temporal do perfil de velocidade após a aplicação do gradiente de potencial $\Delta\phi/L$ até atingir o perfil totalmente desenvolvido. Na figura, $t_4 > t_3 > t_2 > t_1$	11
Figura 4	– Efeito do refinamento próximo as paredes do canal.	24
Figura 5	– Malha utilizada nas simulações de escoamento entre placas paralelas.	24
Figura 6	– a) Perfil de velocidade para escoamento newtoniano entre placas paralelas com diferentes valores do parâmetro de Debye κ e em b) a ampliação da região próxima a parede do canal.	25
Figura 7	– a) Concentração iônica n^+ e n^- para escoamento newtoniano entre placas paralelas com diferentes valores do parâmetro de Debye κ e em b) a ampliação da região próxima a parede do canal.	26
Figura 8	– a) Potencial eletrosmótico ψ para escoamento newtoniano entre placas paralelas com diferentes valores do parâmetro de Debye κ e em b) a ampliação da região próxima a parede do canal.	26
Figura 9	– Perfil de velocidade para escoamento viscoelástico entre placas paralelas para $\kappa = 10$, $\varepsilon = \xi = 0,01$	27
Figura 10	– Tensões para o fluido PTT em função do número de Deborah, para $\kappa = 10$ e $\kappa = 100$, $\varepsilon = \xi = 0,01$. a) Tensão T_{xx} e em b) T_{xy}	27
Figura 11	– Perfil de velocidade para escoamento newtoniano entre placas paralelas para $\kappa = 20$. As curvas mostram o efeito do gradiente de pressão aplicado, relacionado com o parâmetro Γ	28

- Figura 12 – Efeito do gradiente de pressão aplicado no escoamento eletroosmótico de fluido viscoelástico entre placas paralelas. Simulações realizadas com $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2,5$ e $\Gamma = -1$, $\Gamma = 2,77$. Em a) velocidade e em b) componentes do tensor polimérico. 29
- Figura 13 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. As curvas mostram o efeito do potencial dependente do tempo aplicado. A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida no estado estacionário, em $t = t_{ss}$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 0.5t_p$, isto é, após meio período de oscilação do potencial. 31
- Figura 14 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida no estado estacionário, em $t = t_{ss}$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 0.5t_p$, isto é, após meio período de oscilação do potencial. 31
- Figura 15 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. O ponto mais alto representado por quadrado cheio corresponde a tensão no estado estacionário, em $t = t_{ss}$. O ponto mais baixo representado por círculo cheio foi obtido em $t = t_{ss} + 0.5t_p$, isto é, após meio período de oscilação do potencial. 32
- Figura 16 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 0.50t_p$. O perfil intermediário mais acima representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 0.92t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 1.00t_p$, isto é, após um período de oscilação do potencial. 33
- Figura 17 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 0.5t_p$. O perfil intermediário mais abaixo representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 0.92t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 1.0t_p$, após um período de oscilação do potencial. 33
- Figura 18 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. O ponto mais alto representado por quadrado cheio foi $t = t_{ss} + 0.5t_p$. O ponto mais baixo representado por losango foi obtido em $t = t_{ss} + 0.92t_p$. e o círculo cheio corresponde a tensão obtida em $t = t_{ss} + 1.0t_p$, após um período de oscilação do potencial. 34

- Figura 19 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. As curvas mostram o efeito do potencial dependente do tempo aplicado. O perfil representado por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.00t_p$. A curva representada por losangos foi obtida no tempo $t = t_{ss} + 10.18t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.50t_p$ 34
- Figura 20 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida no estado estacionário, em $t = t_{ss} + 10.00t_p$. Losangos cheios representam a tensão cisalhante no tempo $t = t_{ss} + 10.18t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.50t_p$ 35
- Figura 21 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio corresponde a tensão normal em $t = t_{ss} + 10.00t_p$. O ponto mais alto, losango cheio, representa a tensão normal no tempo $t = t_{ss} + 10.18t_p$. O ponto mais baixo representado por círculo cheio foi obtido em $t = t_{ss} + 10.50t_p$ 35
- Figura 22 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.50t_p$. O perfil intermediário mais acima representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 10.80t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 11.00t_p$, isto é, após 11 períodos de oscilação do potencial. 36
- Figura 23 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.50t_p$. O perfil intermediário mais abaixo representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 10.80t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 11.00t_p$, após 11 períodos de oscilação do potencial. 37
- Figura 24 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. O ponto mais alto representado por quadrado cheio foi $t = t_{ss} + 10.50t_p$. O ponto mais baixo representado por losango foi obtido em $t = t_{ss} + 10.80t_p$. e o círculo cheio corresponde a tensão obtida em $t = t_{ss} + 11.00t_p$, após 11 períodos de oscilação do potencial. 37
- Figura 25 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. O perfil representado por quadrados cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 30.00t_p$, a curva representada por losangos em $t = t_{ss} + 30.20t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 30.50t_p$. 38

- Figura 26 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida no estado estacionário, em $t = t_{ss} + 30.00t_p$. Losangos cheios representam a tensão cisalhante no tempo $t = t_{ss} + 20.20t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 30.50t_p$ 38
- Figura 27 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio corresponde a tensão normal em $t = t_{ss} + 30.00t_p$. O ponto mais alto, losango cheio, representa a tensão normal no tempo $t = t_{ss} + 30.20t_p$. O ponto mais baixo representado por círculo cheio foi obtido em $t = t_{ss} + 30.50t_p$ 39
- Figura 28 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 30.50t_p$. O perfil intermediário mais acima representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 30.75t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 31.00t_p$, isto é, após 31 períodos de oscilação do potencial. 39
- Figura 29 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 30.50t_p$. O perfil intermediário mais abaixo representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 30.75t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 31.00t_p$, após 31 períodos de oscilação do potencial. 40
- Figura 30 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio representa a tensão em $t = t_{ss} + 30.50t_p$. O ponto mais baixo representado por losango foi obtido em $t = t_{ss} + 30.75t_p$ e o círculo cheio corresponde a tensão obtida em $t = t_{ss} + 31.00t_p$, após 31 períodos de oscilação do potencial. 40
- Figura 31 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. O perfil representado por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.00t_p$. A curva representada por losangos foi obtida no tempo $t = t_{ss} + 109.22t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.50t_p$ 41
- Figura 32 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.00t_p$. Losangos cheios representam a tensão cisalhante no tempo $t = t_{ss} + 109.22t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.50t_p$ 41

- Figura 33 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio corresponde a tensão normal em $t = t_{ss} + 109.00t_p$. O ponto mais alto, losango cheio, representa a tensão normal no tempo $t = t_{ss} + 109.22t_p$. O ponto mais baixo representado por círculo cheio foi obtido em $t = t_{ss} + 109.50t_p$. 42
- Figura 34 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.50t_p$. O perfil intermediário mais acima representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 109.75t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 110.00t_p$, isto é, após 110 períodos de oscilação do potencial. 43
- Figura 35 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.50t_p$. O perfil intermediário mais abaixo representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 109.75t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 110.00t_p$, após 110 períodos de oscilação do potencial. 43
- Figura 36 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio representa a tensão em $t = t_{ss} + 109.50t_p$. O ponto mais baixo representado por losango foi obtido em $t = t_{ss} + 109.75t_p$ e o círculo cheio corresponde a tensão obtida em $t = t_{ss} + 110.00t_p$, após 110 períodos de oscilação do potencial. 44
- Figura 37 – Velocidade máxima em função do tempo para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. Em (a) começando de $t = t_{ss}$ e em (b) a partir de $t = t_{ss} + t_p$ 44
- Figura 38 – (a) Velocidade a partir de $t = t_{ss} + 0.28t_p$ e em (b) começando de $t = t_{ss} + 0.75t_p$. Os principais parâmetros usados são $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$ 45
- Figura 39 – (a) Amplitude máxima da tensão de cisalhamento que ocorre em múltiplos de t_p , mostrada a partir de $t = t_{ss} + t_p$ e em (b), T_{xy} começando de $t = t_{ss} + 0.75t_p$ indo até $t = t_{ss} + 109.75t_p$. Os principais parâmetros usados são $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$ 45
- Figura 40 – (a) Amplitude máxima da tensão normal, mostrada a partir de $t = t_{ss} + 0.5t_p$ e em (b), T_{xx} começando de $t = t_{ss} + 0.75t_p$ indo até $t = t_{ss} + 109.75t_p$. Os principais parâmetros usados são $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$ 46
- Figura 41 – Tensão normal para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva representada por círculos corresponde ao resultado da simulação obtido em $t = t_{ss} + 110t_p$. A linha sólida corresponde a média temporal dada pela expressão (4.15). 47

Figura 42 – Tensão normal para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. As curvas mostram a evolução de T_{xx} a partir da aplicação do potencial oscilante em $t = 0$ com o fluido em repouso. A curva representada por círculos corresponde ao resultado da simulação obtido em $t = 200t_p$ e linha sólida corresponde a média temporal dada pela expressão (4.15).	48
Figura 43 – (a) Velocidade máxima após o equilíbrio em função do número de Deborah (b) Tensão máxima $T_{xy(max)}$ em função do número de Deborah. Parâmetros utilizados: $\kappa = 20$ e $\varepsilon = 0.1$	48
Figura 44 – (a) Tensão T_{xx} após o equilíbrio em função do número de Deborah (b) Imagem de (a) perto da parede do canal. Parâmetros utilizados: $\kappa = 20$ e $\varepsilon = 0.1$	49
Figura 45 – Velocidade em função do tempo dentro da camada de Debye, obtida no ponto $y/H = 0.997$ mostrados nos gráficos a), b) e c) e, em $y/H = 0.961$ correspondente as imagens d), e) e f). Em a) e d) janela de tempo adimensional de 0 à 2, em b) e e) de 0.85 à 0.95 e em c) e f) de 1.600 à 1.625.	50
Figura 46 – Velocidade em função do tempo no centro do canal. Em a) janela de tempo adimensional de 0 à 2, em b) de 0.85 à 0.95 e em c) de 1.600 à 1.625.	51
Figura 47 – Componente viscoelástico T_{xy} em função do tempo dentro da camada de Debye, no ponto $y/H = 0.997$ mostrado pelos gráficos a), b) e c) e, no ponto $y/H = 0.961$ correspondente as imagens d), e) e f). Em a) e d) janela de $t = 0$ à 2, em b) e e) de 0.85 à 0.95 e em c) e f) de 1.600 à 1.625.	52
Figura 48 – Componente viscoelástico T_{xx} em função do tempo dentro da camada de Debye, no ponto $y/H = 0.997$ mostrado pelos gráficos a), b) e c) e, no ponto $y/H = 0.961$ correspondente as imagens d), e) e f). Em a) e d) janela de $t = 0$ à 2, em b) e e) de 0.9 à 2.0 e em c) e f) de 1.600 à 1.625.	53
Figura 49 – Em a) velocidade e, em b) componente viscoelástico T_{xy} em função do tempo perto da parede no ponto $y/H = 0.997$	54
Figura 50 – T_{xx} mostrado na janela de a) $t = 0$ à $t = 2.0$, b) $t = 0.9$ à $t = 0.95$ e em c) de $t = 1.60$ à $t = 1.64$	55
Figura 51 – Perfil de velocidade para escoamento em um canal com contração.	56
Figura 52 – Concentração n^+ . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$	56
Figura 53 – Concentração n^- . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$	57
Figura 54 – Potencial ψ . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$	57
Figura 55 – Pressão p . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$	57
Figura 56 – Velocidade u . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$	58
Figura 57 – Ilustração da proposta de perturbação do potencial ψ através de cargas pontuais próximo as quinas do bocal.	58
Figura 58 – Concentração n^+ . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$	60
Figura 59 – Concentração n^- . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$	60
Figura 60 – Potencial ψ . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$	61

Figura 61 – Pressão p . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$	61
Figura 62 – Velocidade u . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$	61
Figura 63 – Velocidade u . Em a) $\omega^* = 0,016$ e em b) $\omega^* = 0,032$	62
Figura 64 – Figura extraída de (AE; YANG, 2008).	62
Figura 65 –	62
Figura 66 –	63
Figura 67 –	63
Figura 68 –	63
Figura 69 – Uma das propostas para simulações numéricas futuras.	65
Figura 70 – Ilustração das condições de contorno para escoamento de um fluido em um canal.	76

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tabela de conversão das constantes utilizadas nas simulações numéricas. Foi usado $t_{eq} = 10\bar{\lambda}$, $\kappa = 20$ e $u_{sh} = 1$	49
Tabela 2 – Arquivo de entrada dos controladores gerais do escoamento ".load.contr"	74
Tabela 3 – Arquivo de entrada dos controladores para simulação de escoamento eletrosmótico ".load.eocontr"	74
Tabela 4 – Arquivo de entrada dos controladores para simulação de escoamento viscoelástico ".load.viscontr"	75
Tabela 5 – Arquivo de entrada dos parâmetros gerais da simulação ".load.par"	75
Tabela 6 – Arquivo de entrada dos parâmetros eletrosmóticos ".load.eopar"	75
Tabela 7 – Arquivo de entrada dos parâmetros viscoelásticos ".load.viscpar"	76
Tabela 8 – Arquivo de entrada das condições de contorno para pressão e velocidade, ".load.bc"	77
Tabela 9 – Arquivo de entrada das condições de contorno para os potenciais elétrico e concentrações iônicas, ".load.bcelectroosmotic"	77
Tabela 10 – Cada função atribui os valores iniciais e de fronteira a respectiva propriedade no escoamento. O usuário tem a liberdade de escolha para as entradas de cada função.	79
Tabela 11 – Função principal do programa, onde são criados os solvers, domínios, propriedades da simulação. Todas as rotinas abaixo devem ser chamadas pelo usuário na "main"	80

LISTA DE SÍMBOLOS

dm — Decímetro

μm — Micrômetro

L — Litro

nL — Nanolitro

\mathbb{R} — Conjunto dos números reais

\cdot — Produto escalar

t — Tempo

∇ — Operador diferencial. Em coordenadas cartesianas: $\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$

ρ — Densidade de massa do fluido

\mathbf{u} — Campo de velocidade do fluido

u, v, w — Componentes x, y, z da velocidade do fluido

x, y, z — Coordenadas cartesianas

\mathbf{D} — Tensor taxa de deformação

\mathbf{T} — Tensor polimérico (Stress tensor)

\mathbf{S} — Tensor relacionado com viscoelasticidade

\mathbf{I} — Matriz Identidade

p — Pressão hidrodinâmica

η_0 — Viscosidade dinâmica total

η_s — Viscosidade do solvente

η_p — Viscosidade polimérica

\mathbf{F} — Força externa

$Re = \rho UH / \eta_0$ — Número de Reynolds

U — Velocidade de referência do escoamento

H — Tamanho de referência do canal

$De = \lambda U / H$ — Número de Deborah

λ — Tempo de relaxação do fluido
 \mathbf{A} — Tensor de conformação
 ε — Parâmetro do modelo PTT
 ξ — Parâmetro do modelo PTT
 \mathbb{k} — Tensor kernel
 \times — Produto vetorial
 \mathbf{E} — Campo elétrico
 ε_e — Permissividade elétrica do meio material
 ρ_e — Densidade de carga elétrica
 Φ — Potencial elétrico total
 ϕ — Potencial elétrico externo
 ψ — Potencial elétrico induzido
 n^+ — Concentração de íons positivamente carregados
 n^- — Concentração de íons negativamente carregados
 n_0 — Concentração de referência do eletrólito
 C — Coulomb-unidade de carga elétrica
 e — Carga elementar $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C
 z — Número de valência
 k_B — Constante de Boltzmann
 T — Temperatura absoluta
 ζ_0 — Potencial zeta
 $\delta = n_0 e z H^2 / \varepsilon_e \zeta_0$ — Parâmetro adimensional
 $\alpha = e z \zeta_0 / k_B T$ — Parâmetro adimensional
 $Pe = UH/D$ — Número de Peclet
 $\kappa = H/\lambda_D$ — Parâmetro de Debye
 λ_D — Espessura da camada de Debye
 $\psi(t)$ — Potencial dependente do tempo na parede do canal
 $\phi(t)$ — Potencial externo dependente do tempo
 ν — Frequência de oscilação do potencial
 t_{ss} — Tempo estimado para o escoamento atingir o estado estacionário

t_p — Um período de oscilação do potencial

t_{eq} — Tempo estimado para o escoamento atingir o equilíbrio, no sentido de que os perfis das propriedades obtidos dentro dos períodos subsequentes não mudam.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Objetivos	2
1.2	Organização do trabalho	3
2	FORMULAÇÃO DO PROBLEMA	5
2.1	Equações Governantes	5
2.2	Eletrosmose	8
3	MÉTODO NUMÉRICO	15
3.1	Discretização espacial.	15
3.1.1	<i>Termo difusivo</i>	15
3.1.2	<i>Termo convectivo</i>	16
3.1.3	<i>Equação de poisson</i>	17
3.2	Discretização temporal.	18
3.2.1	<i>Equação do movimento</i>	18
3.2.2	<i>Tensor viscoelástico</i>	19
3.2.3	<i>Termo fonte elétrico</i>	20
3.3	Procedimento numérico	21
4	RESULTADOS	23
4.1	Verificação:Escoamento eletrosmótico entre placas paralelas	23
4.1.1	<i>Condições de contorno nas paredes</i>	24
4.1.2	<i>Condições de contorno na entrada e saída</i>	25
4.1.3	<i>Fluido newtoniano</i>	25
4.1.4	<i>Fluido viscoelástico</i>	27
4.1.4.1	<i>Modelo de Phan-Thien/Tanner-PTT</i>	27
4.1.4.2	<i>Modelo de Phan-Thien/Tanner simplificado-sPTT</i>	28
4.2	Potencial dependente do tempo	29
4.2.1	<i>Potencial nas paredes do canal</i>	30
4.2.2	<i>Evolução do escoamento viscoelástico a partir do estado estacionário</i>	31
4.2.3	<i>Dependência com a frequência aplicada</i>	49
4.3	Escoamento eletrosmótico em um bocal	55
4.3.1	<i>Contração</i>	56
4.3.2	<i>Aproximação para os efeitos de quina</i>	57

4.3.3	<i>Resultados para a contração/expansão</i>	59
5	CONCLUSÃO	67
	REFERÊNCIAS	69
	Apêndice	72
A	SIMULAÇÃO COM O HIG-FLOW	73
A.1	Compilação	73
A.2	Dados de entrada	74
A.3	Arquivo principal para a simulação	78

INTRODUÇÃO

Fluidos são caracterizados pela sua facilidade de deformação quando submetidos a ação de forças externas. A forma de um fluido é determinada pelo recipiente no qual ocorre o escoamento e, suas diferentes partes podem ser rearranjadas livremente dentro desse volume, sem afetar as propriedades macroscópicas do mesmo. Assim, a presença de forças de cisalhamento, mesmo que de pequena magnitude, resultará em grandes variações nas posições relativas dos elementos de fluido. Em contraste, as posições relativas dos átomos de um sólido permanecem quase inalteradas, quando este é submetido a ação de qualquer força externa relativamente pequena. Além disso, ao cessar a força externa aplicada, o fluido não necessariamente retornará a sua forma inicial, em contraste com a forma de um sólido, que tende a retornar à sua forma inicial, após a retirada da força externa. Quando pensamos em escoamento de fluidos, é comum imaginarmos algo como a água saindo de uma torneira, o ar gerado por um ventilador ou até mesmo uma bebida sendo absorvida através de um canudo por uma criança. Nessa escala espacial, vários estudos foram e continuam sendo realizados no que diz respeito a escoamento de fluidos. Neste trabalho, nosso desafio é estudar escoamentos de fluidos, no entanto, acontecendo em um espaço físico com dimensões reduzidas, onde escoamentos podem ocorrer através de seções com o diâmetro de um fio de cabelo. Microfluidica é o campo de manipulação de pequenos volumes de fluidos ou de partículas com tamanho da ordem de micrômetros num microcanal ou, em algum lugar do espaço que tenha dimensões suficientemente pequenas, milimétricas ou menor (submilimétricas), para que o escoamento ocorra. De fato, o volume de fluido que escoar, é da ordem de microlitros, e o escoamento ocorre geralmente em microcanais ou até mesmo nanocanais cujas dimensões podem ser micrométricas (equivalente ao diâmetro de um fino fio de cabelo). Entretanto, vale ressaltar que a microfluidica não implica no estudo de partículas atômicas ou moléculas, e sim volumes micrométricos, ou seja, no estudo do escoamento do volume de fluido como um todo. Assim, pequenos volumes de fluido, ou um conjunto de partículas que tem propriedades de um fluido são manipulados, e os dispositivos microfluidicos exigem pequenas quantidades de amostra, possibilitando desta maneira a execução

de determinado processo em um curto período de tempo (BRUUS, 2008). A tecnologia Lab-on-a-chip (PERSAT; SUSS; SANTIAGO, 2009) reduz a configuração experimental em um laboratório por um fator de escala igual a 1000 ou mais, indo de escalas da ordem de 1 dm para uma escala da ordem de 100 μm . Essa redução em uma dimensão equivale a redução por um fator de 10^9 em três dimensões, ou seja, considerando um volume de 1 L, este seria reduzido para 1 nL. Esse cenário é de grande relevância e ampla aplicação em ciência e tecnologia, como por exemplo em medicina, biologia e engenharia (LEE *et al.*, 2010), (MARRE; JENSEN, 2010), (WHITESIDES, 2006), (YAGER *et al.*, 2006). Sistemas miniaturizados para administração de agentes terapêuticos, detecção de drogas ou moléculas de DNA, reatores microquímicos são alguns exemplos de aplicações importantes em microfluídica. Até mesmo um smartphone pode ser usado como detector e controlador de níveis de bactérias, quando combinado com um dispositivo analítico de papel microfluidico e imunoenaios de partículas (NAHAPETIAN, 2015). Assim, vários estudos tem sido realizados na área de microfluidica, e a relevância do tema devido às importantes aplicações atrai cada vez mais pesquisadores.

1.1 Objetivos

Diversas técnicas numéricas têm sido desenvolvidas ao longo dos anos, e o problema de escoamento eletrosmótico em canais planos é bem conhecido pelos pesquisadores da área. O objetivo principal deste trabalho, é estudar o fenômeno de escoamentos eletrosmóticos tanto para fluidos newtonianos quanto para fluidos viscoelásticos e resolver numericamente esse problema. Aqui, estes problemas foram numericamente resolvidos para canais planos e bocais com contração e expansão. Nos canais planos, fora investigado os efeitos da aplicação de um potencial dependente do tempo para um fluido viscoelástico. Na prática, a aplicação de potenciais dependentes do tempo pode ser útil para fazer a mistura de líquidos dentro do microcanal. Para os bocais, uma proposta fora feita para a descrição dos vórtices formados perto das quinas na contração do canal. Uma das finalidades do escoamento em bocais é obter eficiência na mistura de fluidos e isso ocorre após a passagem dos mesmos através de uma contração. Aqui vamos propor uma aproximação numérica para obter os vórtices formados perto das quinas no bocal.

Um dos problemas numéricos que surge quando estudamos escoamentos eletrosmóticos consiste essencialmente em descrever a concentração de cargas em função do tempo, mas especificamente, precisamos obter a densidade de cargas elétricas no fluido. Esta densidade de cargas é dada pela solução da equação de Nernst-Planck, que é uma equação de transporte dos íons. Além disso, esta equação é acoplada ao potencial induzido nas paredes do canal pelo qual ocorre o escoamento. Assim, temos que resolver uma equação de advecção-difusão e, os métodos utilizados para a sua solução serão discutidos. Para resolver este problema numericamente, o domínio computacional do escoamento é dado por uma malha hierarquica gerada através da Hig-tree (CASTELO, 2017), por exemplo, no caso bidimensional é uma quad-tree generalizada (FINKEL; BENTLEY, 1974). Em geral, as malhas hierárquicas impõem dificuldades no esquema

numérico com base em aproximações cartesianas e requer o uso de interpolações espaciais em pontos desconhecidos do estêncil. As interpolações das propriedades no centro das faces e no centro das células são feitas pela técnica de mínimos quadrados móveis, que usa um dado conjunto de pontos onde a propriedade é conhecida para estimar um valor desconhecido em um ponto vizinho. As equações de Navier-Stokes juntamente com o modelo constitutivo de Phan-Thien-Tanner (PTT) são discretizadas pelo método das diferenças finitas generalizadas usando o sistema HiG-Flow (CASTELO; AFONSO; SOUZA, 2018), que permite que "compartimentos de código" viscoelástico, newtoniano, eletrosmótico, sejam criados e depois usados juntos para a simulação numérica. Os sistemas lineares resultantes da discretização são resolvidos por solvers usando a livreria PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) (BALAY *et al.*, 2017).

1.2 Organização do trabalho

Esta tese de doutorado apresenta a seguinte estrutura:

- Capítulo 1 (Introdução): de modo geral, neste capítulo, apresentamos a motivação e o objetivo principal deste trabalho.
- Capítulo 2 (Formulação do problema): aqui é dada a formulação para o problema central deste doutorado.
- Capítulo 3 (Método numérico): neste capítulo é apresentado o método numérico utilizado na solução do problema desta tese.
- Capítulo 4 (Resultados): os métodos apresentados no capítulo 3 são aplicados para resolver os escoamentos propostos no capítulo 2.
- Capítulo 5 (Conclusão): por fim, são apresentadas as conclusões e as perspectivas para futuras pesquisas.
- Apêndice A (Simulação com o HiG-Flow): são abordadas as principais funcionalidades do código usado nas simulações numéricas.

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Neste capítulo serão abordados alguns conceitos em escoamentos de fluidos, visando mostrar as características gerais e leis que regem escoamentos eletrosmóticos, afim de formular o problema proposto. Primeiramente, serão estabelecidas as equações governantes que regem o escoamento, implicando o fenômeno devido ao campo elétrico no termo forçante da equação de movimento, o qual é descrito em seguida, totalizando o conteúdo deste capítulo.

2.1 Equações Governantes

Visto que neste trabalho foram estudados tanto escoamentos de fluidos newtonianos quanto viscoelásticos, iremos apresentar as equações governantes de forma geral para o caso viscoelástico e, veremos que o caso newtoniano é descrito por uma simplificação dessas equações. Além disso, as equações são apresentadas na forma adimensional, pois, o código está implementado desta forma. Neste capítulo, os parâmetros, operadores e propriedades adimensionalizados serão identificados por um superescrito asterisco "*". Para uma revisão mais detalhada sobre as equações de Navier-Stokes e adimensionalização, por favor consulte ([FERZIGER J. H.; PERIC, 1999](#)) e ([FORTUNA, 2012](#)).

O estudo do movimento do fluido consiste de três princípios físicos básicos: conservação de massa, conservação de momento e conservação de energia. Além disso, consideramos que o escoamento é incompressível, laminar e isotérmico. Em particular, escoamentos em microfluidica tem baixas velocidades, isto é, bem menores que a velocidade do som, por isso é comum considerá-lo como sendo incompressível e laminar, sem comprometer a acurácia do método de solução. Assim, as equações que regem o escoamento são:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{2.1}$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{S} + \mathbf{F}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{T} = 2\eta_p \mathbf{D} + \mathbf{S}, \quad (2.3)$$

e na forma adimensional,

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* = -\nabla^* p^* + \frac{1}{Re} \nabla^{*2} \mathbf{u}^* + \nabla^* \cdot \mathbf{S}^* + \mathbf{F}^*, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{T}^* = \frac{2(1-\beta)}{Re} \mathbf{D}^* + \mathbf{S}^*, \quad (2.6)$$

onde \mathbf{u} é o campo vetorial de velocidade, t é o tempo, p é a pressão hidrodinâmica, $Re = \rho UH/\eta_0$ é o número de Reynolds, U é a velocidade característica do fluxo, H é a largura característica do canal por onde ocorre o escoamento, ρ a densidade de massa e η_0 denota a viscosidade dinâmica total $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$. A proporção de solvete é dada por $\beta = \frac{\eta_s}{\eta_0}$. O tensor taxa de deformação é denotado por $\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$, \mathbf{T} o tensor das tensões elástica, também chamado neste texto de tensor polimérico e \mathbf{F} é o termo relativo as forças externas aplicadas ao fluido, o qual pode depender do campo gravitacional, de um campo elétrico ou outros campos de forças. A equação de movimento (2.5) é um balanço de forças que agem sobre o fluido. A evolução no tempo do tensor polimérico é dada por:

$$\frac{\partial^* \mathbf{T}^*}{\partial t^*} + (\mathbf{u}^* \cdot \nabla^*) \mathbf{T}^* - \left[(\nabla^* \mathbf{u}^*)^T \cdot \mathbf{T}^* + \mathbf{T}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* \right] = \frac{1}{De} \mathbf{M}^*(\mathbf{T}^*), \quad (2.7)$$

onde $De = \lambda U/H$ é o número de Deborah e λ é o tempo de relaxação do fluido. Para resolver a equação do tensor polimérico (2.7) usaremos o tensor de conformação \mathbf{A} , (FATTAL; KUPFERMAN, 2004), (FATTAL; KUPFERMAN, 2005), (AFONSO; PINHO; ALVES, 2012). Este tensor é simétrico e positivo definido, sendo estas importantes propriedades matemática para a construção de matrizes de transformação ou decomposições. Em geral, a equação para \mathbf{A}^* é escrita como

$$\frac{\partial \mathbf{A}^*}{\partial t^*} + (\mathbf{u}^* \cdot \nabla^*) \mathbf{A}^* - \left[\mathbf{A}^* \nabla^* \mathbf{u}^* + \nabla^* \mathbf{u}^{*T} \mathbf{A}^* \right] = \frac{1}{De} \mathcal{M}^*(\mathbf{A}^*), \quad (2.8)$$

onde $\mathcal{M}(\mathbf{A})$ é definida de acordo com o modelo viscoelástico. As variações nas propriedades reológicas do fluido, como a tensão e viscosidade, são importantes no que diz respeito à escoamentos viscoelásticos. Existem alguns modelos constitutivos que em geral relacionam essas propriedades com o movimento, os quais permitem o estudo do escoamento desses tipos de fluidos. Assim, um modelo constitutivo deve ser usado para descrever o tensor das tensões no escoamento. A tarefa de identificar uma equação reológica adequada para o estudo do escoamento

em questão pode não ser tão simples. O comportamento do fluido deve ser expresso por uma equação constitutiva para a tensão \mathbf{T} . Uma das maiores dificuldades no estudo da mecânica dos fluidos não Newtonianos está na escolha de um modelo que possa descrever corretamente essas propriedades reológicas. Existem vários modelos constitutivos para este estudo. Neste trabalho, utilizamos o modelo linear de Phan-Thien-Tanner (PTT) (THIEN; TANNER, 1977) para resolver o problema de escoamento eletrosmótico em um microcanal, cujo fenômeno devido a ele será descrito na próxima seção. O modelo PTT é descrito por:

$$f(\text{tr}(\mathbf{T}))\mathbf{T} + \lambda \bar{\mathbf{T}} = 2\eta_p \mathbf{D}, \quad (2.9)$$

onde $\bar{\mathbf{T}}$ e a função f são dados por:

$$\bar{\mathbf{T}} = \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{T} - [(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{u}] + \xi (\mathbf{T} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{T}), \quad (2.10)$$

$$f(\text{tr}(\mathbf{T})) = 1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta_p} \text{tr}(\mathbf{T}). \quad (2.11)$$

Portanto, para o modelo PTT, o lado direito da equação (2.7) pode ser escrito como:

$$\mathbf{M}^*(\mathbf{T}^*) = \frac{2(1-\beta)}{Re} \mathbf{D}^* - \left(1 + \frac{\varepsilon Re De}{1-\beta} \text{tr}(\mathbf{T}^*)\right) \mathbf{T}^* - \xi De (\mathbf{T}^* \cdot \mathbf{D}^* + \mathbf{D}^* \cdot \mathbf{T}^*). \quad (2.12)$$

No modelo PTT, a tensão depende do traço de \mathbf{T} , e do parâmetro dimensional ε , o qual é relacionado com a viscosidade elongacional para escoamentos desenvolvidos. Outro parâmetro que aparece neste modelo, ξ , essencialmente diz respeito ao movimento não afim entre as moléculas de polímero e o meio contínuo. As cadeias de polímero, dentro do meio, podem se movimentar relativamente à deformação do meio macroscópico, assim cada porção microscópica do polímero pode transmitir apenas uma fração da sua tensão para o meio contínuo ao seu redor. Se $\xi = 0$, não existe deslizamento significando que o movimento é afim. Desta maneira, ξ é o parâmetro responsável pela segunda diferença de tensão de cisalhamento ser não nula, levando a fluxos secundários quando o escoamento ocorre em dutos com seção transversal não circular (PHAN-THIEN, 1978). O lado direito da equação do tensor de conformação é dado por:

$$\mathcal{M}^*(\mathbf{A}^*) = \left(1 + \frac{\varepsilon Re De}{1-\beta} \text{tr}(\mathbf{S}^*)\right) (\mathbf{I} - \mathbf{A}^*) - 2\xi De (\mathbf{B}^* - \mathbf{B}^* \mathbf{A}^*). \quad (2.13)$$

onde \mathbf{B}^* é resultante da decomposição do gradiente da velocidade conforme proposto por Fattal and Kupferman (FATTAL; KUPFERMAN, 2004). Neste sentido, as equações de movimento são resolvidas para o escoamento regido pelo modelo PTT.

Um grande desafio para pesquisadores da área de computação, especificamente tratando-se de reologia, é resolver a equação (2.7) - ou (2.8) - para altas viscoelasticidades, ou seja,

quanto maior o número de Deborah, maior a dificuldade de o método numérico obter uma solução estável. Com o intuito de suprimir essa instabilidade numérica, Fattal and Kupferman (FATTAL; KUPFERMAN, 2004) propõem a reformulação da equação diferencial constitutiva para o logaritmo do tensor de conformação. Numa extensão dessas idéias propostas por Fattal and Kupferman (FATTAL; KUPFERMAN, 2004; FATTAL; KUPFERMAN, 2005), Afonso et al. (AFONSO; PINHO; ALVES, 2012) apresentaram uma transformação do tensor de forma genérica, denominada *kernel-conformation*, que permite aplicar diferentes funções *kernel* para a matriz de transformação, na qual a evolução da equação para $\mathbb{k}^*(\mathbf{A}^*)$, pode ser expressada na formulação tensorial como:

$$\frac{\partial \mathbb{k}^*(\mathbf{A}^*)}{\partial t^*} + (\mathbf{u}^* \cdot \nabla^*) \mathbb{k}^*(\mathbf{A}^*) = \Omega^* \mathbb{k}^*(\mathbf{A}^*) - \mathbb{k}^*(\mathbf{A}^*) \Omega^* + 2\mathbb{B}^* + \frac{1}{De} \mathbb{M}^*, \quad (2.14)$$

onde \mathbb{B} and \mathbb{M} são tensores simétricos construídos pela ortogonalização dos tensores diagonais enquanto que Ω^* é um tensor antissimétrico. Assim, a solução numérica pode ser feita através da equação (2.14) ao invés de usar a expressão (2.7). Para maiores detalhes sobre a obtenção da equação (2.14) usando o *kernel-conformation*, por favor ver (CASTELO; AFONSO; SOUZA, 2018). Se consideramos o escoamento newtoniano, o tensor \mathbf{S}^* na equação de movimento (2.5) é nulo e apenas a velocidade e a pressão são atualizados a cada passo no tempo. Detalhes dos métodos numéricos utilizados serão abordados no capítulo 3. Para completar as equações governantes, fica faltando o termo fonte elétrico, que força o fluido a escoar conforme as propriedades elétricas impostas, totalizando assim o fenômeno que é objeto de estudo desta tese. A descrição desse fenômeno é dada na próxima seção.

2.2 Eletroosmose

Nesta seção vamos completar a descrição do problema central deste trabalho, essencialmente incluindo o termo forçante elétrico na equação de movimento (2.5).

Há mais de 200 anos, é conhecido que determinadas soluções líquidas podem escoar através de um pequeno canal pela aplicação de uma diferença de potencial elétrico nas duas extremidades do microcanal. Esta área de estudo, ou técnica de manipulação do fluido, isto é, o transporte de partículas através aplicação de um campo elétrico externo é chamada Eletrocinética. Neste âmbito, existe várias aplicações em áreas de pesquisa como química, engenharia e biomédica (DOHERTY *et al.*, 2003), (CHABINYC *et al.*, 2001). A superfície em contacto com uma solução eletrolítica desempenha um papel importante na eletrocinética de dispositivos microfluidicos. Vórtices formam-se em torno de uma superfície condutora que está em contato com a solução aquosa quando um campo elétrico externo é aplicado. Estes vórtices causam perturbações do fluxo no microcanal, alterando assim o campo de velocidades do fluido. A eletrohidrodinâmica é a conexão entre as teorias de eletromagnetismo e hidrodinâmica. Assim, a dinâmica de fluidos, eletrocinética e eletroquímica formam a base para o estudo da eletrohidrodinâmica. Na teoria eletromagnética, as equações de Maxwell são bem conhecidas. Uma revisão

geral e maior detalhes sobre princípios físicos dos efeitos eletrocinéticos pode ser encontrada em (BRUUS, 2008).

O fenômeno de eletroosmose foi primeiramente demonstrado por Reuss em 1809 (REUSS, 1809). Reuss demonstrou que o fluxo de fluido polar é conduzido pelo campo elétrico externo aplicado entre a entrada e saída de um canal. Ele também notou que o campo elétrico agia diretamente sobre os íons existentes próximo as paredes do canal. Posteriormente Burgreen e Nakache (BURGREEN; NAKACHE, 1964) realizaram estudos em capilares ultrafinos, observando o efeito do potencial de superfície sobre o escoamento. Um ano depois, em 1965 Rice e Whitehead publicaram o artigo (RICE; WHITEHEAD, 1965) sobre os mesmos estudos, agora em capilares cilíndricos. Em 1879, Helmholtz (HELMHOLTZ, 1879) relatou os parâmetros elétricos e do escoamento para o transporte eletrocinético e deu o nome de teoria da dupla camada elétrica (Electrical Double layer-EDL). Posteriormente, Gouy (GOUY, 1910) e Chapman (CHAPMAN, 1913) contribuíram nos estudos da distribuição de cargas no fluido próximo as paredes do capilar. Em 1918 von Smoluchowski (SMOLUCHOWSKI, 1918) realizou estudos em capilares, generalizando a teoria proposta por Helmholtz. Outra grande contribuição foi dada por Debye e Hückel em 1923 (DEBYE; HÜCKEL, 1923). Eles determinaram a concentração iônica na solução por meio da linearização da distribuição de Boltzmann para a energia. Posteriormente varios estudos relacionados a efeitos eletrocinéticos em fluidos newtonianos foram realizados. Burgreen e Nakache (BURGREEN; NAKACHE, 1964) realizaram estudos em capilares ultrafinos, observando o efeito do potencial de superfície sobre o escoamento. Um ano depois, em 1965 Rice e Whitehead publicaram o artigo (RICE; WHITEHEAD, 1965) sobre os mesmos estudos, agora em capilares cilíndricos. Análises e simulações numéricas de escoamentos eletrosmóticos começaram a ser publicadas por Yang e Li (YANG; LI, 1998) e Patankar e Hu (PATANKAR; HU, 1998). O método de diferenças finitas foi aplicado por Ermakov et al. para resolver escoamentos eletrosmóticos em duas dimensões para fluidos newtonianos. No ano de 2000, Bianchi et al (BIANCHI; FERRIGNO; GIRAULT, 2000) resolveram o problema de escoamento eletrosmótico em uma junção-T usando o método de elementos finitos. Soluções analíticas para escoamentos newtonianos em canais foram demonstradas por Dutta e Beskok (DUTTA; BESKOK, 2001). Em 2002 Lin et al. (LIN; FU; YANG, 2002) resolveram numericamente a equação de Nernst-Planck para o transporte iônico junto as equações de Navier-Stokes para fluidos newtonianos. O estudo de escoamento eletrosmótico para fluidos não-newtonianos é mais recente, devido a dificuldade imposta dependendo do modelo constituiu a ser utilizado. Em 2008 Park e Lee (PARK; LEE, 2008) determinaram a velocidade eletrosmótica para escoamentos viscoelásticos enquanto Zhao et al. (ZHAO *et al.*, 2008) realizavam estudos de escoamentos eletrosmóticos de fluidos modelados pela lei de potência. Tang et al. (TANG *et al.*, 2009) também realizaram estudo numérico de fluidos não-newtonianos em escoamentos eletrosmóticos. Afonso et al. (AFONSO; ALVES; PINHO, 2009) demonstraram a solução analítica para escoamentos viscoelásticos em um canal de seção circular, levando em conta um gradiente de pressão não nulo e o efeito eletrocinético, onde um dos modelos constitutivo usado foi o de Phan-Thien/Thanner simplificado, sPTT. Em

2015, Peng et al. (PENG; LI, 2015) estudaram os efeitos de um gradiente de concentração dentro de um canal, levando em conta uma mistura de diferentes soluções eletrolíticas. Recentemente, Song et al. (SONG *et al.*, 2017) realizaram estudos de instabilidades numéricas em mistura de uma solução ferrosa com água em um canal plano. Em janeiro de 2018 foi publicado o estudo de Arcos et al. (ARCOS *et al.*, 2018), onde foi analisada o comportamento de um fluido tipo sPTT quando aplicado potenciais zeta dependente do tempo. Além destes citados, mais estudos relacionados com o tema eletrocinética podem ser encontrados na literatura. Neste último parágrafo, foram citados artigos de interesse para a presente tese, relacionados com escoamentos viscoelásticos e eletroosmóticos.

Para descrever o fenômeno de eletroosmose, vamos considerar um canal plano conforme mostra a figura 1, e que inicialmente o fluido está em repouso dentro do canal. Cargas positivas se acumulam próximo as paredes negativamente carregadas, como mostra a figura 2 e isso faz com que surja um potencial induzido ψ , dando origem a uma fina camada eletricamente carregada, chamada camada de Debye. Em $t = 0$ um gradiente de potencial elétrico $\nabla\phi$ é aplicado entre as extremidades de entrada e saída de fluido no canal. Assim, ocorre a movimentação dos íons dentro da fina camada perto das paredes do canal, fazendo com que as partículas neutras sejam arrastadas pela força viscosa, colocando o fluido em movimento. Essencialmente esse é o fenômeno de eletroosmose. A figura 2 mostra o perfil de velocidade eletroosmótico totalmente desenvolvido. O perfil transiente é mostrado na figura 3.

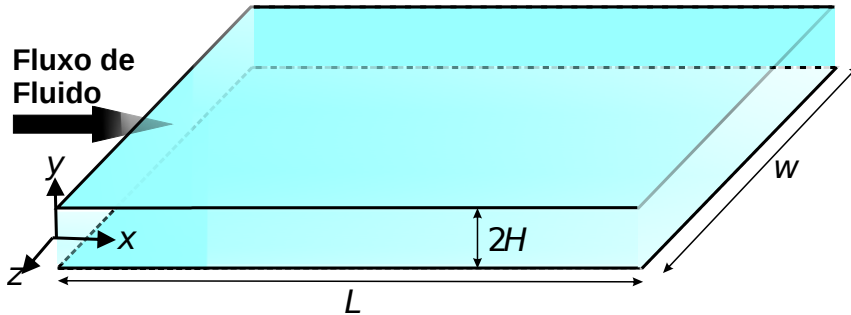


Figura 1 – Ilustração do escoamento eletroosmótico entre duas placas planas paralelas. O fluxo de fluido ocorre entre as duas placas de meia altura igual a H . O comprimento L e largura w são considerados muito maiores que H , mais especificamente para as simulações computacionais $L \approx 20H$.

Voltando ao objetivo de resolver a equação do movimento (2.2), para a descrição completa do problema temos que incluir o termo forçante elétrico que é dado pela força elétrica

$$\mathbf{F} = \rho_e \mathbf{E}, \quad (2.15)$$

onde \mathbf{E} é campo elétrico e ρ_e a densidade de carga elétrica. A descrição matemática do fenômeno eletrocinético surge através das equações de Maxwell do eletromagnetismo. Na ausência de

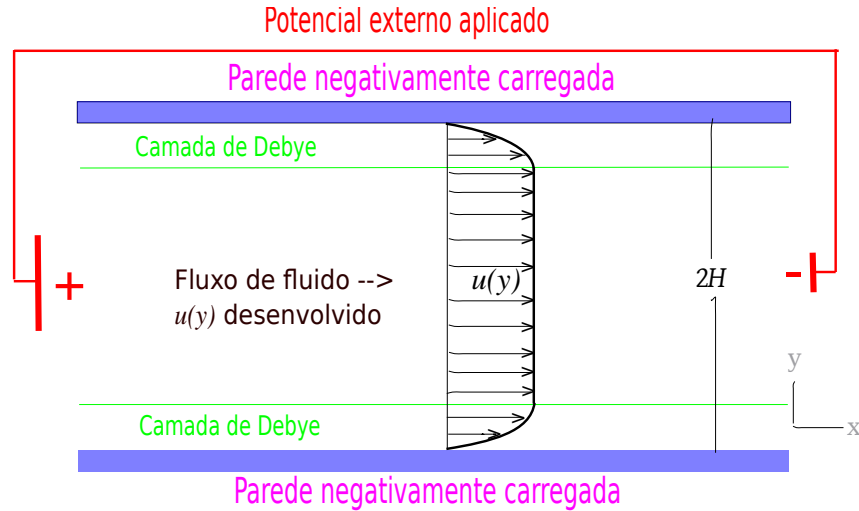


Figura 2 – As cargas que inicialmente estavam distribuídas de forma homogênea no fluido, se redistribuem dentro do canal, havendo um acúmulo de íons positivamente carregados próximo às paredes negativamente carregadas. Após a aplicação do potencial externo, essas cargas começam a se movimentar próximo às paredes, arrastando as partículas neutras do fluido. O perfil de velocidade mostrado está totalmente desenvolvido para o escoamento eletroosmótico, considerando o gradiente de pressão nulo.

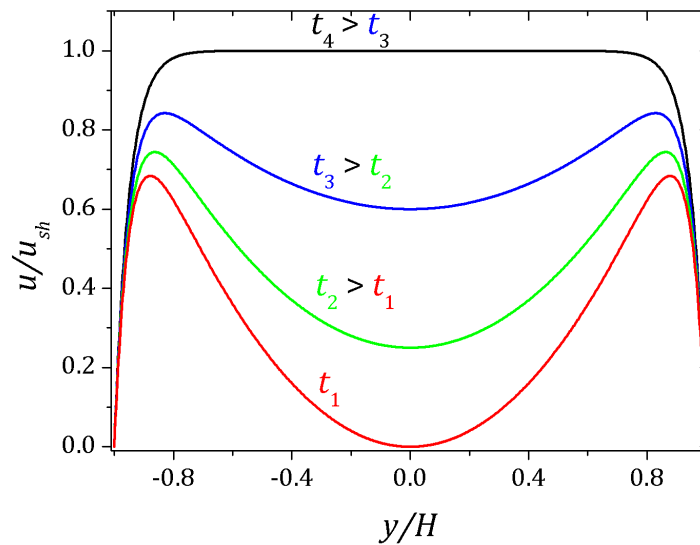


Figura 3 – Ilustração da evolução temporal do perfil de velocidade após a aplicação do gradiente de potencial $\Delta\phi/L$ até atingir o perfil totalmente desenvolvido. Na figura, $t_4 > t_3 > t_2 > t_1$.

campos magnéticos, as equações de Maxwell se tornam:

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (2.16)$$

$$\epsilon_e \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho_e, \quad (2.17)$$

onde ϵ_e é a permissividade elétrica do meio em questão.

Da equação 2.16, podemos escrever $\nabla \times \mathbf{E} = \nabla \times (-\nabla\Phi) = 0$, e portanto, usando as expressões 2.16 e 2.17 temos:

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi, \quad (2.18)$$

$$\nabla \cdot \epsilon_e \nabla \Phi = -\rho_e, \quad (2.19)$$

onde o potencial elétrico total Φ e a densidade de carga elétrica ρ_e são funções escalares que em geral dependem das coordenadas espaciais. Note que o potencial Φ é a contribuição total devido as cargas no fluido distribuídas próximo as paredes do canal, o qual chamamos de ψ , e devido ao potencial externo aplicado, que denotaremos por ϕ , ou seja, $\Phi = \phi + \psi$. Assim, resolvendo a equação (2.19) para o potencial Φ , o campo elétrico \mathbf{E} é determinado pela expressão (2.18), e pode ser usado juntamente com a densidade de carga ρ_e para obter o termo fonte da equação de movimento. Portanto além do campo elétrico, devemos determinar ρ_e que é relacionada com a concentração iônica de acordo com a expressão:

$$\rho_e = ez(n^+ - n^-), \quad (2.20)$$

onde e é a constante de carga elementar, $z = z^+ = z^-$ é o número de valência da solução eletrolítica considerando um eletrólito simétrico, e n^+ e n^- são as concentrações de íons positivos e negativos respectivamente. Neste sentido, para determinar a densidade de carga ρ_e , é necessário saber as concentrações n^+ e n^- , que são obtidas através da equação de Nernst-Planck, que é dada por:

$$\frac{\partial n^\pm}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D^\pm \nabla n^\pm - \mathbf{u} n^\pm \pm D^\pm n^\pm \frac{ez}{k_B T} \nabla \Phi \right), \quad (2.21)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura absoluta, D^+ e D^- são os coeficientes de difusão dos íons positivos e negativos respectivamente. Considerando por enquanto um fluido com permissividade ϵ_e uniforme e coeficientes de difusão $D^+ = D^- = D$ constantes e, reescrevendo o conjunto de equações (2.19)-(2.21) na forma adimensional, temos:

$$\nabla^{*2} \Phi^* = -\rho_e^* \quad (2.22)$$

$$\rho_e^* = \delta(n^{*+} - n^{*-}), \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial n^{*\pm}}{\partial t^*} = -\mathbf{u}^* \cdot \nabla^* n^{*\pm} + \frac{1}{Pe} \nabla^{*2} n^{*\pm} \pm \frac{1}{Pe} \alpha \nabla^* \cdot (n^{*\pm} \nabla^* \Phi^*), \quad (2.24)$$

onde $n = n_0 n^*$ e n_0 a concentração de referência da solução, $\psi = \zeta_0 \psi^*$ com ζ_0 o potencial na parede do canal, $\delta = n_0 e z H^2 / \epsilon_e \zeta_0$ um parâmetro adimensional para a simulação, $Pe = UH/D$ o número de Peclet e $\alpha = ez\zeta_0/k_B T$ é a razão entre a energia potencial e a energia térmica. O conjunto de equações de Poisson-Nernst-Planck adimensionalizadas (2.22) - (2.24), que vamos denotar por PNP, são resolvidas numericamente para obtenção do termo fonte $\mathbf{F}^* = -\rho_e^* \nabla^* \Phi^*$ da equação de movimento (2.5).

Podemos simplificar o tratamento das equações PNP, (2.22) - (2.24), com o objetivo de obter expressões analíticas para as propriedades do escoamento eletroosmótico n , ψ e ρ_e . Em

geral simplificações das equações levam a perda do transiente e é o que ocorre com a equação de transporte iônico (2.24) quando consideramos que a concentração é dada pela distribuição de Boltzmann (FIXMAN, 1979), ou seja, a solução estacionária da equação (2.24) é dada por:

$$n^{*\pm} = \exp(\mp \alpha \psi^*), \quad (2.25)$$

e substituindo $n^{*\pm}$ na equação (2.23), temos

$$\rho_e^* = -2\delta \sinh(\alpha \psi^*), \quad (2.26)$$

e para pequenos valores de α , ou seja, energia térmica muito maior que a energia potencial, a equação (2.26) pode ser linearizada, resultando na chamada aproximação de Debye-Hückel (DH):

$$\rho_e^* = -2\alpha\delta\psi^*, \quad (2.27)$$

onde é definido o parâmetro adimensional de Debye $\kappa = \sqrt{2\alpha\delta} = H/\lambda_D$, com λ_D a largura da camada de Debye. Este método para solução do escoamento eletrosmótico também foi implementado como uma simplificação do PNP. Na verdade, primeiramente foi implementado o método de DH que é mais simples e depois o PNP no qual temos que resolver equações diferenciais acopladas. No capítulo 3 será mostrado o procedimento numérico utilizado para obter solução do escoamento, tanto para o PNP quanto para a aproximação DH. As condições de contorno serão tratadas de acordo com a geometria utilizada e apresentadas juntamente com os resultados.

A análise matemática dada neste capítulo possibilita resolver as equações de movimento para um fluido viscoelástico com um termo forçante que é obtido pela solução das equações PNP. No próximo capítulo será descrito o método numérico utilizado.

MÉTODO NUMÉRICO

Neste capítulo vamos abordar de forma direta o procedimento para a integração temporal das equações de Navier-Stokes para o escoamento eletrosmótico. O sistema computacional HiG-Flow é o resolvidor do problema.

3.1 Discretização espacial.

Para a discretização espacial, foi usado o método de diferenças finitas generalizadas de segunda ordem em uma malha hierárquica. As interpolações das propriedades do escoamento são feitas através do método dos mínimos quadrados móveis. Aqui serão abordados as técnicas utilizadas para a discretização de cada termo da equação de movimento. Para uma abordagem mais detalhada sobre o método de interpolações, favor consultar (CASTELO, 2017).

As subseções a seguir mostram as discretizações usadas para cada termo da equação do movimento (2.5).

3.1.1 Termo difusivo

Para o termo difusivo é usada a discretização de segunda ordem por diferenças centrais. Nestes cálculos as velocidade são avaliadas no centro das faces. Na direção x ,

$$\nabla^2 u = \frac{u_{i+3/2,j} - 2u_{i+1/2,j} + u_{i-1/2,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i+1/2,j+1} - 2u_{i+1/2,j} + u_{i+1/2,j-1}}{\Delta y^2}, \quad (3.1)$$

e na direção y temos

$$\nabla^2 v = \frac{v_{i+1,j+1/2} - 2v_{i,j+1/2} + v_{i-1,j+1/2}}{\Delta x^2} + \frac{v_{i,j+3/2} - 2v_{i,j+1/2} + v_{i,j-1/2}}{\Delta y^2}. \quad (3.2)$$

Se considerarmos as interpolações no centro das células, temos:

$$\nabla^2 u = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2}, \quad (3.3)$$

$$\nabla^2 v = \frac{v_{i+1,j} - 2v_{i,j} + v_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{v_{i,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i,j-1}}{\Delta y^2}. \quad (3.4)$$

3.1.2 Termo convectivo

Para a discretização do termo convectivo é usado o método CUBISTA. Para uma abordagem mais detalhada do método, favor consultar (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003). Considere o termo $\partial(vu)/\partial y$ da equação de movimento na direção x . Este termo pode ser discretizado da seguinte maneira:

$$\frac{\partial(vu)}{\partial y} \approx \frac{(vu)_{i+1/2,j+1/2} - (vu)_{i+1/2,j-1/2}}{\Delta y}. \quad (3.5)$$

Tanto u quanto v não estão definidos em $(i + 1/2, j + 1/2)$ e $(i + 1/2, j - 1/2)$. A velocidade v pode ser aproximada pela média dos valores nas faces vizinhas,

$$v_{i+1/2,j+1/2} = \frac{1}{2}(v_{i,j+1/2} + v_{i+1,j+1/2}), \quad (3.6)$$

$$v_{i+1/2,j-1/2} = \frac{1}{2}(v_{i,j-1/2} + v_{i+1,j-1/2}). \quad (3.7)$$

De acordo com a direção da velocidade v , a velocidade transportada u é aproximada.

Para $v_{i+1/2,j+1/2} > 0$ temos as seguintes aproximações para $u_{i+1/2,j+1/2}$:

$$u_{i+1/2,j} \quad \text{se } \Upsilon_{i+1/2,j} < 0 \text{ ou } \Upsilon_{i+1/2,j} > 1, \quad (3.8)$$

$$\frac{7}{4}u_{i+1/2,j} - \frac{3}{4}u_{i+1/2,j-1} \quad \text{se } 0 < \Upsilon_{i+1/2,j} < \frac{3}{8}, \quad (3.9)$$

$$\frac{3}{8}u_{i+1/2,j+1} + \frac{3}{4}u_{i+1/2,j} - \frac{1}{8}u_{i+1/2,j-1} \quad \text{se } \frac{3}{8} \leq \Upsilon_{i+1/2,j} \leq \frac{3}{4}, \quad (3.10)$$

$$\frac{3}{4}u_{i+1/2,j+1} + \frac{1}{4}u_{i+1/2,j} \quad \text{se } \frac{3}{4} < \Upsilon_{i+1/2,j} < 1, \quad (3.11)$$

$$\text{onde } \Upsilon_{i+1/2,j} = \frac{u_{i+1/2,j} - u_{i+1/2,j-1}}{u_{i+1/2,j+1} - u_{i+1/2,j-1}}.$$

Para $v_{i+1/2,j+1/2} < 0$ temos as seguintes aproximações para $u_{i+1/2,j+1/2}$:

$$u_{i+1/2,j+1} \quad \text{se } \Upsilon_{i+1/2,j+1} < 0 \text{ ou } \Upsilon_{i+1/2,j+1} > 1, \quad (3.12)$$

$$\frac{7}{4}u_{i+1/2,j+1} - \frac{3}{4}u_{i+1/2,j+2} \quad \text{se } 0 < \Upsilon_{i+1/2,j+1} < \frac{3}{8}, \quad (3.13)$$

$$\frac{3}{8}u_{i+1/2,j} + \frac{3}{4}u_{i+1/2,j+1} - \frac{1}{8}u_{i+1/2,j+2} \quad \text{se } \frac{3}{8} \leq \Upsilon_{i+1/2,j+1} \leq \frac{3}{4}, \quad (3.14)$$

$$\frac{3}{4}u_{i+1/2,j} + \frac{1}{4}u_{i+1/2,j+1} \quad \text{se } \frac{3}{4} < \Upsilon_{i+1/2,j+1} < 1, \quad (3.15)$$

$$\text{onde } \Upsilon_{i+1/2,j+1} = \frac{u_{i+1/2,j+1} - u_{i+1/2,j+2}}{u_{i+1/2,j} - u_{i+1/2,j+2}}.$$

Para $v_{i+1/2,j-1/2} > 0$ temos as seguintes aproximações para $u_{i+1/2,j-1/2}$:

$$u_{i+1/2,j-1} \quad \text{se } \Upsilon_{i+1/2,j-1} < 0 \text{ ou } \Upsilon_{i+1/2,j-1} > 1, \quad (3.16)$$

$$\frac{7}{4}u_{i+1/2,j-1} - \frac{3}{4}u_{i+1/2,j-2} \quad \text{se } 0 < \Upsilon_{i+1/2,j-1} < \frac{3}{8}, \quad (3.17)$$

$$\frac{3}{8}u_{i+1/2,j} + \frac{3}{4}u_{i+1/2,j-1} - \frac{1}{8}u_{i+1/2,j-2} \quad \text{se } \frac{3}{8} \leq \Upsilon_{i+1/2,j-1} \leq \frac{3}{4}, \quad (3.18)$$

$$\frac{3}{4}u_{i+1/2,j} + \frac{1}{4}u_{i+1/2,j-1} \quad \text{se } \frac{3}{4} < \Upsilon_{i+1/2,j-1} < 1, \quad (3.19)$$

$$\text{onde } \Upsilon_{i+1/2,j-1} = \frac{u_{i+1/2,j-1} - u_{i+1/2,j-2}}{u_{i+1/2,j} - u_{i+1/2,j-2}}.$$

Para $v_{i+1/2,j-1/2} < 0$ temos as seguintes aproximações para $u_{i+1/2,j-1/2}$:

$$u_{i+1/2,j} \quad \text{se } \Upsilon_{i+1/2,j} < 0 \text{ ou } \Upsilon_{i+1/2,j} > 1, \quad (3.20)$$

$$\frac{7}{4}u_{i+1/2,j} - \frac{3}{4}u_{i+1/2,j+1} \quad \text{se } 0 < \Upsilon_{i+1/2,j} < \frac{3}{8}, \quad (3.21)$$

$$\frac{3}{8}u_{i+1/2,j-1} + \frac{3}{4}u_{i+1/2,j} - \frac{1}{8}u_{i+1/2,j+1} \quad \text{se } \frac{3}{8} \leq \Upsilon_{i+1/2,j} \leq \frac{3}{4}, \quad (3.22)$$

$$\frac{3}{4}u_{i+1/2,j-1} + \frac{1}{4}u_{i+1/2,j} \quad \text{se } \frac{3}{4} < \Upsilon_{i+1/2,j} < 1, \quad (3.23)$$

$$\text{onde } \Upsilon_{i+1/2,j} = \frac{u_{i+1/2,j} - u_{i+1/2,j+1}}{u_{i+1/2,j-1} - u_{i+1/2,j+1}}.$$

Este método de discretização também é usado para os termos convectivos existentes na equação do tensor viscoelástico e do termo fonte elétrico.

3.1.3 Equação de poisson

A equação de poisson aparece naturalmente quando tentamos resolver o acoplamento pressão-velocidade na equação de movimento usando o método da projeção, seja este incremental ou não incremental. Em todo passo no tempo este tipo de equação precisa ser resolvida. Além disso, a equação de poisson também deve ser resolvida para os potenciais elétricos e também para a concentração iônica nas equações de Poisson-Nernst-Planck. Ao todo são 4 equações de

poisson a serem resolvidas. De forma geral, a equação de poisson para uma propriedade escalar P é dada por $\nabla^2 P = f$, onde f é alguma função que em geral depende das coordenadas espaciais. Usando a discretização de segunda ordem, a equação de poisson é dada pelo laplaciano de 5 pontos:

$$\frac{P_{i+1,j} - 2P_{i,j} + P_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{P_{i,j+1} - 2P_{i,j} + P_{i,j-1}}{\Delta y^2} = f_{i,j}. \quad (3.24)$$

A expressão (3.24) junto com as condições de contorno apropriadas podem ser resolvidas como sendo um sistema de equações:

$$\mathbb{L}\mathbf{P} = \mathbf{f}, \quad (3.25)$$

onde \mathbb{L} é a matriz do sistema $\mathbf{f} = (f_{1,1}, f_{1,2}, \dots)$ e o vetor solução é dado por $\mathbf{P} = (P_{1,1}, P_{1,2}, \dots)$. Em geral, devido ao grande número de pontos da malha utilizada, é conveniente usar algum método iterativo para a solução deste sistema. A biblioteca PETSc foi utilizada para realizar esta tarefa.

3.2 Discretização temporal.

Nesta seção serão detalhados como foram discretizadas as equações para a marcha no tempo da equação de movimento, levando em conta o problema proposto no capítulo 2. Posteriormente será abordado o procedimento para obter a solução numérica. O sistema HiG-flow possui algumas técnicas implementadas, no que diz respeito ao cálculo dos termos da equação do movimento e integração temporal. Aqui vamos abordar somente as técnicas que foram utilizados neste trabalho.

3.2.1 Equação do movimento

Para resolver as equações governantes, usamos o método da projeção para o acoplamento pressão-velocidade, mais especificamente o método da projeção não-incremental (QUARTE-[RONI](#); [SALERI](#); [VENEZIANI](#), 2000). Apesar de a HiG-Flow possibilitar o uso do método incremental, este método de projeção fora escolhido para evitar que oscilações no transiente ocorram durante as simulações ([SOUSA](#); [OISHI](#); [BUSCAGLIA](#), 2015). Isto não significa problemas quanto a demora na marcha no tempo, pois a própria solução das equações PNP exigem que menores Δt sejam adotados. Além disso o método utilizado neste trabalho para a integração temporal é de primeira ordem. Usualmente n denota o passo de tempo, mas denotaremos pelo superescrito s , para não confundir com a concentração iônica já definida anteriormente como n . Considere a equação do movimento adimensionalizada (2.5) e, para simplificar a notação, *a partir daqui omitiremos o superescrito asterisco, pois só vamos tratar as equações adimensi-*

analizadas. A discretização dessa equação, separando-a nos dois passos devido ao método da projeção é

$$\frac{\mathbf{u}^{s+\tau} - \mathbf{u}^s}{\Delta t} = -\mathbf{u}^s \cdot \nabla \mathbf{u}^s + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^{s+\tau} + \nabla \cdot \mathbf{S}^s + \mathbf{F}^s, \quad (3.26)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{s+1} - \mathbf{u}^{s+\tau}}{\Delta t} = -\nabla p^{s+1}, \quad (3.27)$$

onde $s + \tau$ é um tempo intermediário entre os passos s e $s + 1$. Aplicando o operador ∇ na equação (3.27) e levando em conta a equação da continuidade,

$$\nabla^2 p^{s+1} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^{s+\tau}, \quad (3.28)$$

Assim, a quantidade p^{s+1} é calculada pela solução da equação de poisson como mostrado na seção (3.1.3) e, conseqüentemente a velocidade no passo $s + 1$ é determinada pela substituição de p^{s+1} na equação (3.27). Essencialmente este é o método da projeção não-incremental utilizado. O grande trabalho a ser feito é calcular todos os termos envolvidos na equação (3.26), ou seja, ainda temos que calcular o termo convectivo $-\mathbf{u}^s \cdot \nabla \mathbf{u}^s$, o termo do tensor viscoelástico $\nabla \cdot \mathbf{S}^s$ e o termo forçante elétrico $\mathbf{F}^s = \rho_e^s \nabla \Phi^s$. Como termo difusivo $\frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^{s+\tau}$ é discretizado no passo $s + \tau$, podemos reescrever a equação (3.26) como sendo

$$u_{i,j}^{s+\tau} + \frac{\Delta t}{Re} \left[\frac{2u_{i,j}^{s+\tau} - u_{i+1,j}^{s+\tau} - u_{i-1,j}^{s+\tau}}{\Delta x^2} + \frac{2u_{i,j}^{s+\tau} - u_{i,j+1}^{s+\tau} - u_{i,j-1}^{s+\tau}}{\Delta y^2} \right] = u_{i,j}^s + \Delta t \cdot R(\mathbf{u}^s, \mathbf{S}^s, p^s, \mathbf{F}^s). \quad (3.29)$$

onde $R(\mathbf{u}^s, \mathbf{S}^s, p^s, \mathbf{F}^s)$ é a soma dos termos de pressão, convectivo, tensão viscoelástica e força elétrica. A equação (3.29) foi escrita para o componente u do vetor velocidade $\mathbf{u} = (u, v)$ em duas dimensões. Uma expressão análoga para o componente v é resolvida no mesmo "laço for" que percorre todas as células do domínio. Apesar de ter outros métodos já implementados na HiG-Flow, como por exemplo euler explícito, runge-kutta e BDF2, foi escolhido o método de euler semi-implícito de integração temporal, equação (3.29). Esse método tem a vantagem de ser mais rápido que o BDF2 e mais estável que o euler explícito. Assim, determinando a função $R(\mathbf{u}^s, \mathbf{S}^s, p^s, \mathbf{F}^s)$, o sistema de equações lineares pode ser resolvido numericamente. O termo correspondente a pressão é atualizado de acordo de forma que $p^{s+1} = p^s + dp$, com dp calculado na equação (3.28). A discretização dos outros termos são dadas a seguir.

3.2.2 Tensor viscoelástico

Como descrito no capítulo 2, ao invés de resolver diretamente a equação do tensor viscoelástico \mathbf{T} , foi usado o *kernel-conformation*. Assim, daremos ênfase na discretização da

expressão para o tensor \mathbb{k} , equação (2.14). Existem alguns passos antes de chegar a esta equação, como mostrado no capítulo 2. Essencialmente, a HiG-Flow possui uma rotina pra calcular o tensor kernel \mathbb{k} , uma rotina para marchar esse tensor kernel no tempo e por fim uma rotina para fazer a transformação do kernel atualizado para obter o tensor polimérico \mathbf{T} e o tensor \mathbf{S} que deve ser usado na equação de movimento. A discretização para a marcha no tempo do tensor kernel é feita de forma explícita, ou seja,

$$\mathbb{k}^{s+1} = \mathbb{k}^s + \Delta t \left[-(\mathbf{u}^s \cdot \nabla) \mathbb{k}^s + \Omega^s \mathbb{k}^s - \mathbb{k}^s \Omega^s + 2\mathbb{B}^s + \frac{1}{De} \mathbb{M}^s \right], \quad (3.30)$$

Uma rotina é utilizada para calcular o termo $\Omega^s \mathbb{k}^s - \mathbb{k}^s \Omega^s$ e outra para obter $2\mathbb{B}^s + \frac{1}{De} \mathbb{M}^s$. Resta o termo convectivo, $(\mathbf{u}^s \cdot \nabla) \mathbb{k}^s$ que é calculado usando o método CUBISTA. Este método garante maior estabilidade a solução numérica quando por exemplo comparado ao método *upwind* de diferenças centrais.

Analogamente, o termo convectivo que transporta a velocidade na equação de movimento é calculado usando o método CUBISTA. No caso do transporte do tensor, o trecho do código acima deve ser aplicado para cada entrada $[i][j]$ do kernel e para cada dimensão $[dim]$.

3.2.3 Termo fonte elétrico

A existência do termo fonte elétrico, impõe um perfil de velocidade característico, além das tensões viscoelásticas do modelo PTT que também alteram a sua forma. A discretização dos termos eletrocinéticos foi realizada para que o código funcione na HiG-Flow tanto para o fenômeno físico completo descrito pelo conjunto de equações de Poisson-Nernst-Planck (PNP), quanto para a aproximação de Debye-Hückel (DH). Vamos começar com a equação de transporte iônico (2.24). Omitindo o superescrito \pm , a equação para as concentrações pode ser reescrita como sendo:

$$\frac{n^{s+1} - n^s}{\Delta t} = -\mathbf{u}^s \cdot \nabla n^s + \frac{1}{Pe} \nabla^2 n^{s+1} \pm \frac{1}{Pe} \alpha \nabla \cdot (n^s \nabla \Phi^s). \quad (3.31)$$

Assim como na equação (3.26), o termo difusivo é calculado implicitamente. Desta forma,

$$n_{i,j}^{s+1} + \frac{\Delta t}{Pe} \left(\frac{2n_{i,j}^{s+1} - n_{i-1,j}^{s+1} - n_{i+1,j}^{s+1}}{\Delta x^2} + \frac{2n_{i,j}^{s+1} - n_{i,j-1}^{s+1} - n_{i,j+1}^{s+1}}{\Delta y^2} \right) = n^s + \Delta t N(n^s, \mathbf{u}^s, \Phi^s), \quad (3.32)$$

onde

$$N(n^s, \mathbf{u}^s, \Phi^s) = -\mathbf{u}^s \cdot \nabla n^s \pm \frac{1}{Pe} \alpha \nabla \cdot (n^s \nabla \Phi^s). \quad (3.33)$$

O termo convectivo, primeiro a direita da igualdade (3.33), é obtido a cada passo no tempo pelo método CUBISTA conforme descrito para o tensor na seção 3.2.2. Já o termo potencial restante

é discretizado por diferenças centrais. Lembrando que $\Phi = \phi + \psi$ é a contribuição devida ao potencial externo aplicado ϕ , e ao potencial induzido ψ devido distribuição de íons próximo as paredes, temos a seguinte expressão:

$$\frac{1}{Pe} \alpha \nabla \cdot (n^s \nabla \Phi^s) = \frac{1}{Pe} \alpha [\nabla n^s \cdot \nabla \Phi^s + n^s \nabla^2 \Phi^s]. \quad (3.34)$$

Substituindo $\Phi = \phi + \psi$, e, $\nabla^2 \Phi = \delta(n^+ - n^-)$, temos:

$$\begin{aligned} \pm \frac{1}{Pe} \alpha \nabla \cdot (n^s \nabla \Phi^s) &\approx \pm \frac{1}{Pe} \alpha \frac{(n_{i+1,j}^s - n_{i-1,j}^s)(\phi_{i+1,j}^s - \phi_{i-1,j}^s + \psi_{i+1,j}^s - \psi_{i-1,j}^s)}{2\Delta x} \\ &\pm \frac{1}{Pe} \alpha \frac{(n_{i,j+1}^s - n_{i,j-1}^s)(\phi_{i,j+1}^s - \phi_{i,j-1}^s + \psi_{i,j+1}^s - \psi_{i,j-1}^s)}{2\Delta y} \\ &\pm \frac{1}{Pe} \alpha \delta n_{i,j}^s (n_{i,j}^{s+} - n_{i,j}^{s-}). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Assim, n^\pm são determinados pela substituição de $N(n^s, \mathbf{u}^s, \Phi^s)$ em na equação (3.32). Em seguida, o potencial ψ precisa ser atualizado pela equação de poisson

$$\frac{\psi_{i-1,j}^{s+1} - 2\psi_{i,j}^{s+1} + \psi_{i+1,j}^{s+1}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{i,j-1}^{s+1} - 2\psi_{i,j}^{s+1} + \psi_{i,j+1}^{s+1}}{\Delta y^2} = -\delta(n^{(s+1)+} - n^{(s+1)-}), \quad (3.36)$$

a cada passo de tempo, visto que ele está diretamente acoplado com a concentração iônica. Com o valor de n^\pm e o valor de $\nabla \Phi$ calculados, o termo fonte elétrico é determinado por $\mathbf{F} = -\rho_e \nabla \Phi$, que pode ser escrito como:

$$\mathbf{F} = -\delta(n_{i,j}^{s+} - n_{i,j}^{s-}) \begin{bmatrix} \frac{(\phi_{i+1,j}^s - \phi_{i-1,j}^s + \psi_{i+1,j}^s - \psi_{i-1,j}^s)}{2\Delta x} \\ \frac{(\phi_{i,j+1}^s - \phi_{i,j-1}^s + \psi_{i,j+1}^s - \psi_{i,j-1}^s)}{2\Delta y} \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

Depois de realizada a discretização dos termos forçante elétrico e de tensão viscoelástica, basta fazer a substituição na equação (3.26) para obter a velocidade intermediária. O procedimento numérico para obter a solução completa é dada na próxima seção.

3.3 Procedimento numérico

A sequência correta de cálculos para obter a solução deve estar corretamente implementada. Será listado o procedimento realizado em cada passo de tempo s pelo código. Para $s = 0$, temos:

passo 1: impor as condições de contorno adequadas para a geometria utilizada.

passo 2: calcular a velocidade intermediária \mathbf{u}^τ usando a equação (3.29). Note que todas as propriedades, p^0 , \mathbf{u}^0 , \mathbf{S}^0 , ψ^0 , ϕ^0 , $n^{0(\pm)}$ devem ser inicializadas no volume, de acordo com o condição inicial desejada. Por exemplo, para o escoamento entre placas paralelas $p^0 = 0$, $\mathbf{u}^0 = \mathbf{0}$, $\mathbf{S}^0 = \mathbf{0}$, $\psi^0 = 0$, $\phi^0 = 0$, $n^{0(\pm)} = 1$.

passo 3: calcular o termo de pressão, p^1 resolvendo a equação de poisson (3.28).

passo 4: calcular a velocidade atualizada \mathbf{u}^1 usando a equação (3.27).

passo 5: calcular \mathbb{k}^1 usando a equação (3.30) e realizar a transformação para obter $\nabla \cdot \mathbf{S}^1$.

passo 6: resolver a equação de transporte iônica (3.32) para obter $n^{1(\pm)}$.

passo 7: calcular o potencial ψ^1 resolvendo a equação de poisson (3.36).

passo 8: calcular o potencial ϕ^1 resolvendo a equação de poisson $\nabla^2 \phi = 0$.

passo 9: calcular o termo fonte elétrico \mathbf{F}^1 , dado por (3.37).

O procedimento acima deve ser repetido para cada passo de tempo até atingir a solução estacionária, se existir. Para o caso da aproximação de Debye-Hückel, o passo 6 não é executado. A HiG-Flow possui uma rotina chamada "step" para fazer os procedimentos listados nos passos 1 a 9. No capítulo A será dada a descrição das funcionalidades da HiG-Flow usadas nas simulações.

RESULTADOS

Os resultados obtidos neste trabalho serão apresentados neste capítulo e estão essencialmente divididos em duas partes no que diz respeito a geometria do canal: escoamento entre placas paralelas e escoamento em um bocal. Os resultados para o canal de placas paralelas foram obtidos para fluidos newtoniano e viscoelástico e, um estudo detalhado para este último, com potencial dependente do tempo será apresentado. As simulações no bocal também foram realizadas para fluidos newtoniano e viscoelástico, com o intuito de descrever os efeitos elétricos devido as quinas na região onde o canal tem uma contração. Propomos uma aproximação para descrever o comportamento do escoamento nesta geometria.

4.1 Verificação: Escoamento eletrosmótico entre placas paralelas

Um dos pontos que vale ressaltar quando queremos simular escoamentos eletrosmóticos é o refinamento da malha perto das paredes do canal. Se a malha for muito grossa naquela região, informações podem ser perdidas e o resultado final deve ser afetado. O efeito do refinamento da malha é mostrado na figura 4. Note que para uma distância mínima entre pontos de $2,5 \times 10^{-2}$ os dois últimos pontos tem um grande erro relativo a curva analítica. Para a malha um pouco mais refinada, $\Delta y/H = 3,125 \times 10^{-3}$, a curva se aproxima do resultado analítico, assim como para a malha mais refinada com $\Delta y/H = 7,8215 \times 10^{-4}$. Para as simulações com valores altos do parâmetro de Debye, $\kappa > 100$ esse nível de refinamento é necessário para que se obtenha um número razoável de pontos próximo as paredes. A figura 5 ilustra a malha utilizada nas simulações que exigem grande refinamento perto das paredes, onde ocorrem variações significativas das propriedades do escoamento. Esta malha possui 7 níveis de refinamento com $\Delta y_{min}/H = 7,8215 \times 10^{-4}$.

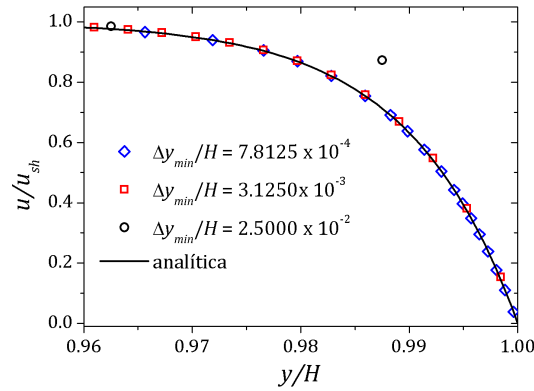


Figura 4 – Efeito do refinamento próximo às paredes do canal.

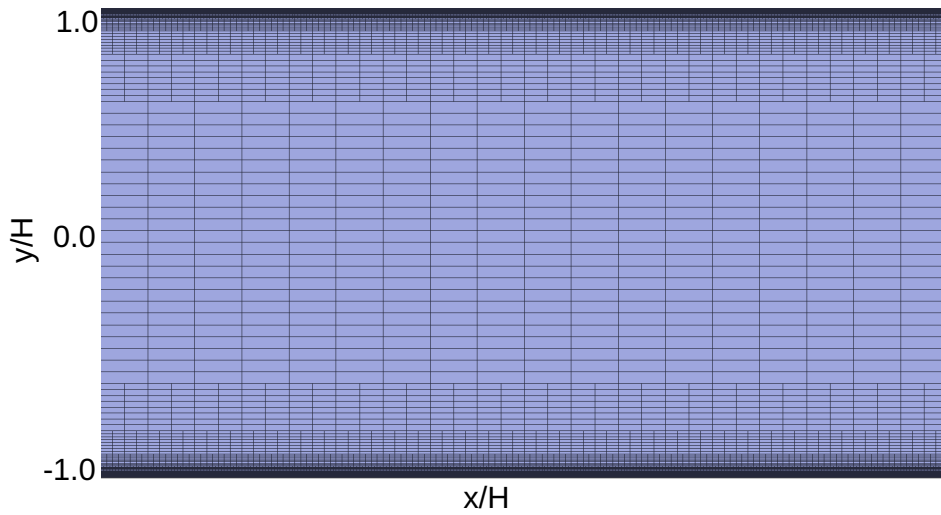


Figura 5 – Malha utilizada nas simulações de escoamento entre placas paralelas.

4.1.1 Condições de contorno nas paredes

Nas paredes do canal, condições de Neumann são aplicadas para a pressão p e para o potencial eletrostático ϕ enquanto que ψ assume o valor potencial de referência ζ_0 . As concentrações nas paredes são dadas pela distribuição de Boltzmann (4.4) e para a velocidade é imposta a condição de não deslizamento.

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla p = 0, \quad (4.1)$$

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \phi = 0, \quad (4.2)$$

$$\psi = \zeta_0, \quad (4.3)$$

$$n^\pm = n_0 \exp(\mp \alpha \zeta_0), \quad (4.4)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad (4.5)$$

4.1.2 Condições de contorno na entrada e saída

Para a pressão, condições de Dirichlet são aplicadas, assim a entrada e saída do canal tem exatamente a mesma pressão, resultando em um escoamento eletrosmótico puro, isto é, com p_{in} igual a p_{out} . Para o potencial eletrostático ϕ também impomos os valores na entrada e saída do canal, com $\phi_{in} \neq \phi_{out}$ obtendo assim um $\nabla\phi \neq 0$. A concentração assume o valor de referência n_0 na entrada do canal enquanto que na saída a condição de Neumann $\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla n^\pm = 0$ é imposta para que o escoamento seja totalmente desenvolvido. Impomos condição de Neumann para a velocidade tanto na entrada como na saída do canal, para que o escoamento seja desenvolvido apenas sob a ação da força elétrica.

4.1.3 Fluido newtoniano

No caso de um fluido newtoniano, o efeito da força elétrica torna o perfil de velocidade dependente da distância até a parede do canal e da espessura da camada de Debye, isto é, do parâmetro κ . Quanto menor a espessura da camada de Debye, maior é a concentração de cargas perto das paredes, onde fortes variações do perfil de velocidade devem acontecer.

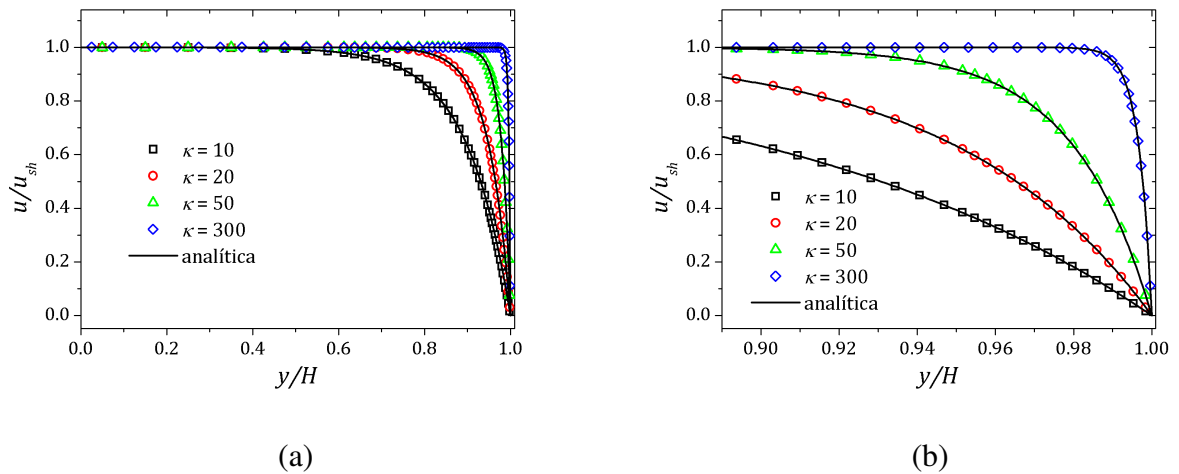


Figura 6 – a) Perfil de velocidade para escoamento newtoniano entre placas paralelas com diferentes valores do parâmetro de Debye κ e em b) a ampliação da região próxima a parede do canal.

A figura 6(a) mostra o perfil de velocidade para diferentes espessuras da camada de Debye, e a figura 6(b) amplia a imagem próximo a parede do canal. A medida que diminui a espessura da camada de Debye, ou seja, aumentando o parâmetro κ , ocorrem variações mais acentuadas no perfil de velocidade perto das paredes. As curvas estão normalizadas pela velocidade de Helmholtz-Smoluchowski, $u_{sh} = -\epsilon_e \zeta_0 E_x / \eta$. Para estas simulações, $Re = 0,001$, $Pe = 1,0$. As concentrações iônicas n^\pm são mostradas na figura ??, e na ampliação da região próxima a parede do canal, figura ??, nota-se perfeitamente a maior concentração de cargas perto da parede a medida que o parâmetro de Debye cresce de $\kappa = 10$ a 300. O acúmulo de cargas perto da parede faz com que o potencial ψ varie nesta região. Para $\kappa = 10$ mudanças

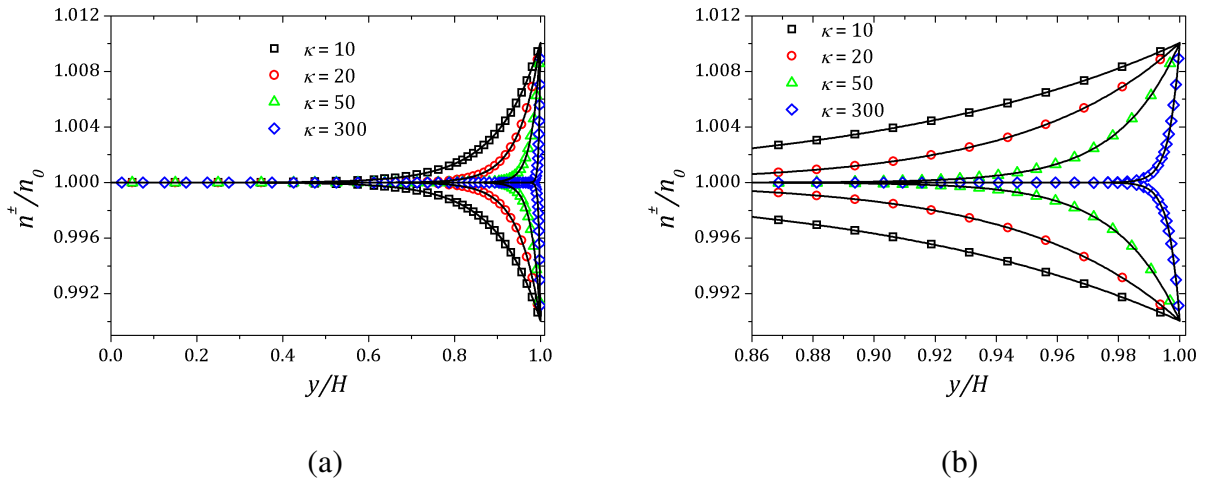


Figura 7 – a) Concentração iônica n^+ e n^- para escoamento newtoniano entre placas paralelas com diferentes valores do parâmetro de Debye κ e em b) a ampliação da região próxima a parede do canal.

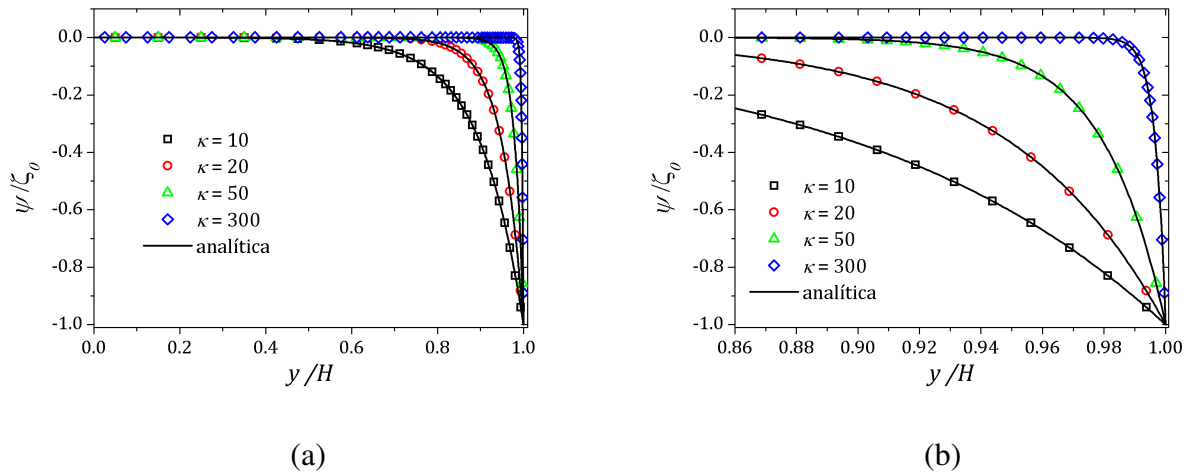


Figura 8 – a) Potencial eletrosmótico ψ para escoamento newtoniano entre placas paralelas com diferentes valores do parâmetro de Debye κ e em b) a ampliação da região próxima a parede do canal.

no potencial são sentidas a maiores distâncias da parede quando comparada a curva mostrada para $\kappa = 20$. A medida que a camada de Debye se torna mais fina, $\kappa = 50$, o potencial varia rapidamente perto das paredes do canal e conseqüentemente a concentração de cargas tende a ficar cada vez maior naquela região como mostrado para $\kappa = 300$, figuras 8 e 7.

Os resultados obtidos para o fluido newtoniano mostram-se coerentes com os resultados esperados. Os resultados para o fluido viscoelástico são mostrados a seguir.

4.1.4 Fluido viscoelástico

O modelo PTT foi usado para resolver este problema. Primeiramente apresentamos os resultados para o model PTT completo e depois para o modelo simplificado sPTT.

4.1.4.1 Modelo de Phan-Thien/Tanner-PTT

O perfil de velocidade depende da distância à parede, y , do parâmetro de Debye κ e também do tempo de relaxação do fluido que é relacionado com o número de Deborah $De_\kappa = \lambda \kappa u_{sh}$, como mostrado na figura 9. As simulações foram realizadas para $Re = 0,001$ e $Pe = 1,0$.

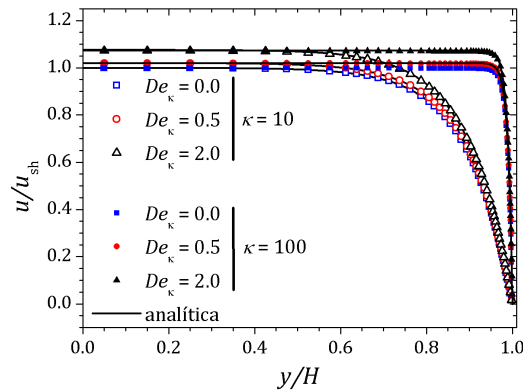


Figura 9 – Perfil de velocidade para escoamento viscoelástico entre placas paralelas para $\kappa = 10$, $\varepsilon = \xi = 0,01$.

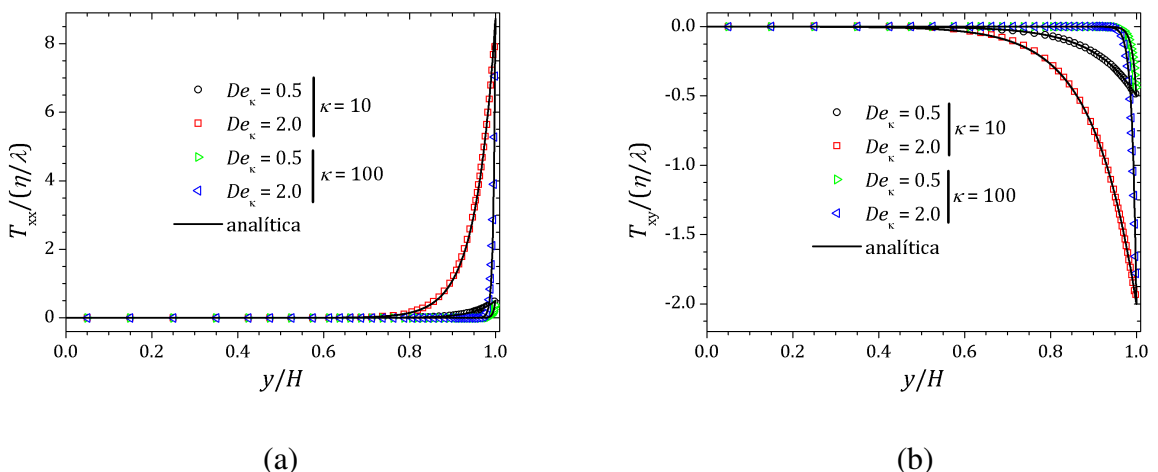


Figura 10 – Tensões para o fluido PTT em função do número de Deborah, para $\kappa = 10$ e $\kappa = 100$, $\varepsilon = \xi = 0,01$. a) Tensão T_{xx} e em b) T_{xy} .

Para $De_\kappa = 0,5$, o comportamento do fluxo se aproxima ao de um escoamento newtoniano. Se $De_\kappa = 2,0$ nota-se que o perfil de velocidade sofre maiores alterações em relação ao perfil newtoniano, e isso ocorre devido a baixas viscosidades perto das paredes do canal,

influenciados pelo aparecimento de tensões cisalhantes do modelo PTT. As tensões normais e cisalhantes são mostradas na figura 10(a) e 10(b) respectivamente. Os resultados são similares aos encontrados na literatura. Para detalhes sobre a solução analítica para o estado estacionário, favor consultar (DHINAKARAN *et al.*, 2010).

4.1.4.2 Modelo de Phan-Thien/Tanner simplificado-sPTT

Nesse modelo o parâmetro $\xi = 0$ na expressão (2.13). Além disso, ao invés de considerarmos o escoamento eletrosmótico puro, vamos impor um gradiente de pressão não nulo no canal. Neste sentido, as soluções para a velocidade e o tensor viscoelástico no estado estacionário para o modelo sPTT dependem do parâmetro Γ definido como:

$$\Gamma = \frac{H^2}{\epsilon_e \zeta_0} \frac{dp}{dx}. \quad (4.6)$$

Assim, para um gradiente de pressão maior que zero, $dp/dx > 0$, o fluido é "empurrado" no sentido contrário ao escoamento conforme mostra a figura 11 para $\Gamma = 1,0$, $\Gamma = 2,0$ e $\Gamma = 2,778$, representados triângulos apontando para baixo, losangos e triângulos apontando para esquerda respectivamente. Por outro lado, se $dp/dx < 0$, o fluido é empurrado no sentido do escoamento, resultando nos perfis mostrados na figura 11 para $\Gamma = -0,5$ e $\Gamma = -1,778$, representados por círculos e quadrados respectivamente. Para detalhes sobre a solução analítica para o estado estacionário deste problema, favor consultar (AFONSO; ALVES; PINHO, 2009).

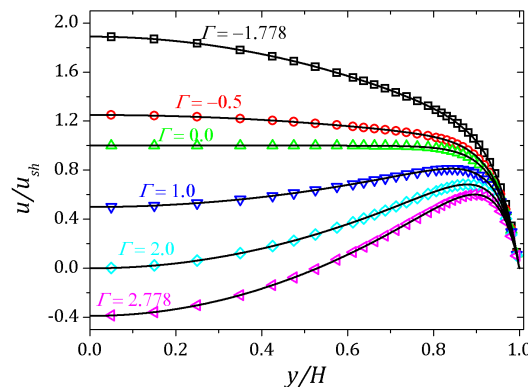


Figura 11 – Perfil de velocidade para escoamento newtoniano entre placas paralelas para $\kappa = 20$. As curvas mostram o efeito do gradiente de pressão aplicado, relacionado com o parâmetro Γ .

A figura 12(a) mostra o perfil de velocidade para o escoamento eletrosmótico do fluido sPTT para $\Gamma = -1,0$ com triângulos apontando para direita e $\Gamma = 2,77$ com triângulos apontando para a esquerda. Nota-se que assim como no caso do fluido PTT, o perfil de velocidade no modelo sPTT é influenciado pelo número de Deborah, que nestas simulações é $De_\kappa = 2,5$. Este efeito é melhor visualizado para as curvas mostradas quando $\Gamma = 0$ na figura 12(a), representadas pelas linhas sólidas para $De_\kappa = 0$ e para $De_\kappa = 2,5$, onde nota-se claramente a mudança relativa ao

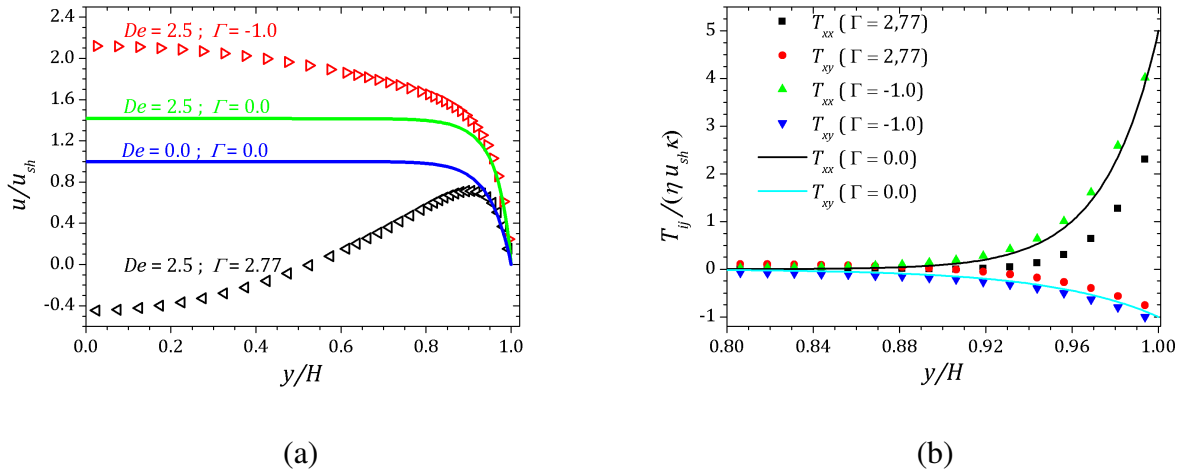


Figura 12 – Efeito do gradiente de pressão aplicado no escoamento eletroosmótico de fluido viscoelástico entre placas paralelas. Simulações realizadas com $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2,5$ e $\Gamma = -1, \Gamma = 2,77$. Em a) velocidade e em b) componentes do tensor polimérico.

perfil newtoniano. As tensões normais e de cisalhamento sofrem um deslocamento em relação àquelas que correspondem ao escoamento eletroosmótico puro, no qual $\Gamma = 0$ representado pelas linhas sólidas, como indica a figura 12(b). Para o componente normal T_{xx} , as curvas indicam uma diminuição da tensão perto da parede do canal quando o gradiente de pressão aplicado é positivo, $\Gamma = 2,77$, representado por triângulos apontando para cima. Por outro lado, se o gradiente de pressão for negativo, $\Gamma = -1,0$, então T_{xx} aumenta discretamente perto das paredes do canal, como mostra a curva representada por triângulos apontando para baixo. Comportamento similar é observado para a magnitude da tensão de cisalhamento T_{xy} .

4.2 Potencial dependente do tempo

Em certas aplicações é desejável fazer a mistura de uma determinada solução dentro de um microcanal. A aplicação de potenciais dependente do tempo contribui para a mistura do fluido, a qual teoricamente deve ser mais eficiente se houver variações na velocidade do escoamento. Nesta seção, iremos aplicar um potencial dependente do tempo nas paredes do canal plano, e vamos considerar a aproximação de Debye-Hückel para realizar as simulações, levando em conta o modelo constitutivo sPTT. O potencial dependente do tempo é aplicado quando o escoamento encontra-se no estado estacionário. Os resultados indicam que os perfis de velocidade e a tensão de cisalhamento variam em sincronismo com as mudanças no potencial, no entanto, o perfil de velocidade perde sua amplitude com o passar do tempo até estabilizar em um determinado valor, enquanto que a amplitude máxima da tensão de cisalhamento continua inalterada e de fato foi observado que esta tensão varia periodicamente desde a aplicação do potencial oscilante. Também foi observado que há uma certa "inércia" no componente normal da tensão viscoelástica, a qual tende sempre a perder a amplitude até estabilizar em um determinado valor. Por outro

lado, aplicando o potencial $\psi(t)$ em $t = 0$ com o fluido em repouso, o componente normal da tensão cresce até chegar ao mesmo valor obtido anteriormente. Além disso, pode ser constatado que o efeito da aplicação de um potencial externo $\phi(t)$ dependente do tempo é exatamente igual a aplicação de um potencial nas paredes $\psi(t)$ também dependente do tempo.

4.2.1 Potencial nas paredes do canal

A expressão para o potencial $\psi(t)$ utilizado na parede do canal é dada por:

$$\psi(t) = \frac{\Psi_0}{2} + \frac{\Psi_0}{2} \cos(2\pi vt) \quad (4.7)$$

onde v é a frequência de oscilação do potencial e t é o tempo. Para um potencial oscilante como o da expressão (4.7), uma solução analítica para a velocidade do escoamento é dada por (YANG *et al.*, 2004). Nosso objetivo é analisar o comportamento das tensões viscoelásticas no fluido após a aplicação do potencial oscilante, momento no qual o escoamento está no estado estacionário. Aqui, vamos levar em conta o transiente causado pelo potencial oscilante a partir da solução analítica no estado estacionário com o potencial constante nas paredes. Isso é perfeitamente válido até o momento imediatamente antes da aplicação de $\psi(t)$. Após a aplicação do potencial oscilante, uma aproximação para a solução analítica pode ser feita levando apenas em conta que a velocidade de Helmholtz-Smoluchowski agora depende do tempo. Assim,

$$u_{sh}(t) = \frac{-\varepsilon_e E_{0x} \Psi_0}{\eta} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(2\pi vt) \right) = u_{sh} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(2\pi vt) \right), \quad (4.8)$$

$$De_{\kappa}(t) = -\frac{\lambda \kappa \varepsilon_e E_{0x} \Psi_0}{\eta} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(2\pi vt) \right) = De_{\kappa} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(2\pi vt) \right). \quad (4.9)$$

Com estas considerações, é fácil ver que as mudanças nas propriedades u, T_{xx}, T_{xy} do escoamento é a mesma quanto à aplicação de um campo elétrico na direção x , dado por $E_x(t) = \nabla\phi(t) = 0.5E_{0x} + 0.5E_{0x} \cos(2\pi vt)$ ao invés de $\psi(t)$. Isso fica explícito quando colocamos a variação temporal na soluções dessas propriedades para o escoamento em estado estacionário (AFONSO; ALVES; PINHO, 2009), nas equações:

$$u(t) = u_{sh}(t) \left\{ \left[1 - 2 \frac{\varepsilon De_{\kappa}^2(t)}{\cosh^2(\kappa)} \right] \left[1 - \frac{\cosh(\kappa y)}{\cosh(\kappa)} \right] + \frac{2}{3} \varepsilon De_{\kappa}^2(t) \left[1 - \frac{\cosh^3(\kappa y)}{\cosh^3(\kappa)} \right] \right\}, \quad (4.10)$$

$$T_{xx}(t) = 2\eta \kappa u_{sh}(t) De_{\kappa}(t) \frac{\sinh^2(\kappa y)}{\cosh^2(\kappa)}, \quad (4.11)$$

$$T_{xy}(t) = \eta \kappa u_{sh}(t) \frac{\sinh(\kappa y)}{\cosh(\kappa)}. \quad (4.12)$$

Nas expressões (4.8) e (4.9), a velocidade de Helmholtz-Smoluchowski e o número de Deborah são dados por

$$u_{sh} = \frac{-\varepsilon_e E_{0x} \Psi_0}{\eta}, \quad (4.13)$$

$$De_\kappa = \lambda \kappa u_{sh}. \quad (4.14)$$

4.2.2 Evolução do escoamento viscoelástico a partir do estado estacionário

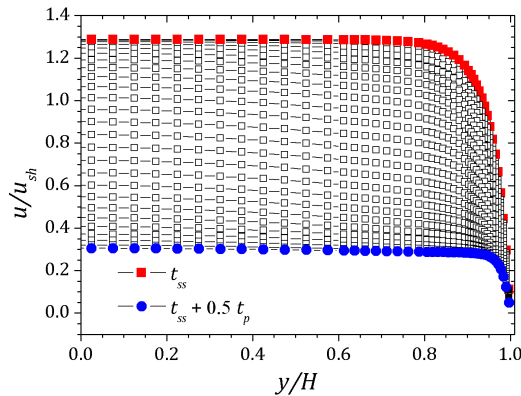


Figura 13 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. As curvas mostram o efeito do potencial dependente do tempo aplicado. A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida no estado estacionário, em $t = t_{ss}$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 0.5 t_p$, isto é, após meio período de oscilação do potencial.

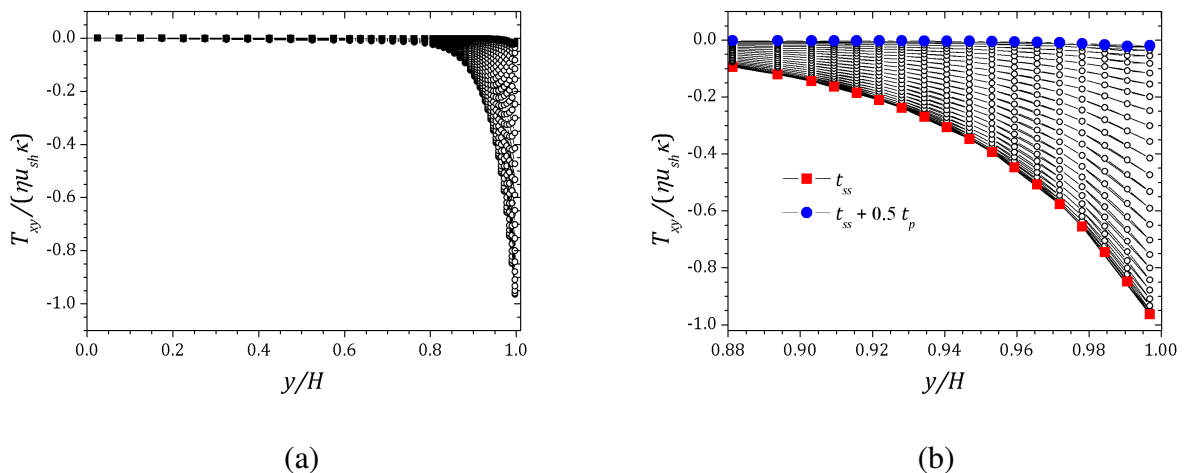


Figura 14 – (a) Tensão de cilhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida no estado estacionário, em $t = t_{ss}$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 0.5 t_p$, isto é, após meio período de oscilação do potencial.

A figura 13 mostra a evolução temporal do perfil de velocidade para o escoamento entre placas paralelas com o potencial na parede dependente do tempo. O potencial dependente do

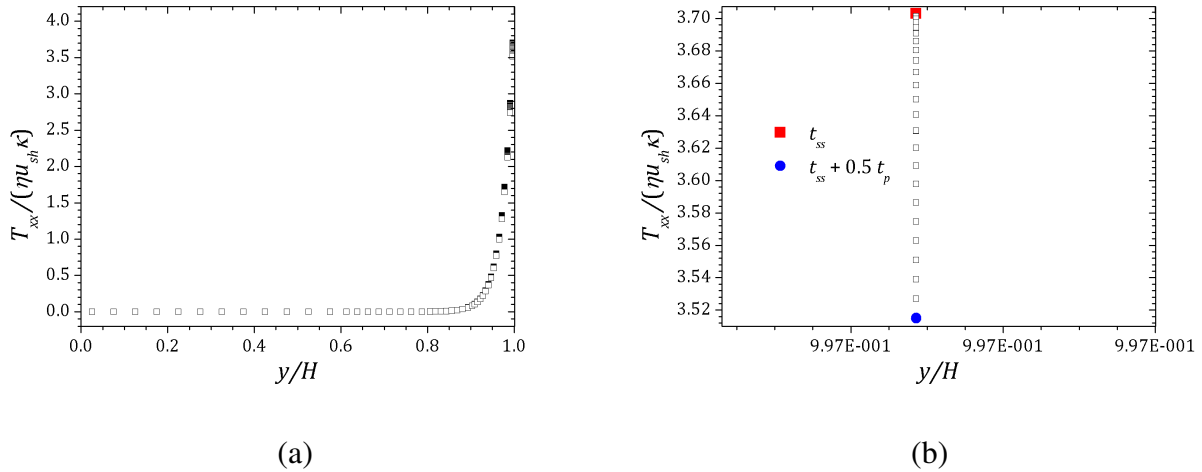


Figura 15 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. O ponto mais alto representado por quadrado cheio corresponde a tensão no estado estacionário, em $t = t_{ss}$. O ponto mais baixo representado por círculo cheio foi obtido em $t = t_{ss} + 0.5t_p$, isto é, após meio período de oscilação do potencial.

tempo é aplicado quando o escoamento atinge o estado estacionário, em $t = t_{ss}$. A frequência de oscilação do potencial utilizada aqui é $\nu = 100$. Também foram utilizados $De_\kappa = 2.0$, $\varepsilon = 0.1$ e $\kappa = 20$. O perfil mais alto representado por quadrados cheios corresponde a velocidade no estado estacionário no tempo $t = t_{ss}$. Com a diminuição da amplitude do potencial, o escoamento diminui a velocidade até chegar em um perfil mínimo, representado por círculos cheios, que ocorre após meio período da aplicação de $\psi(t)$, isto é, em $t = t_{ss} + 0.5t_p$, onde t_p corresponde a um período de oscilação de $\psi(t)$. A figura 14(a) mostra o componente T_{xy} do tensor polimérico. Na figura 14(b) é mostrado o comportamento de T_{xy} mais próximo a parede do canal. Em $t = t_{ss}$, curva representada por quadrados cheios, T_{xy} está no estado estacionário. Com a evolução temporal do potencial, a magnitude de T_{xy} diminui e tende a se anular na parede do canal após meio período de oscilação de $\psi(t)$ em $t = t_{ss} + 0.5t_p$, correspondente a curva representada por círculos cheios. As variações observadas no componente normal T_{xx} são mais discretas, conforme mostrado na figura 15(a), e isto é perceptível perto da parede do canal conforme mostra a figura 15(b), onde quadrado cheio representa o escoamento em $t = t_{ss}$ e o círculo cheio corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 0.5t_p$.

A figura 16 mostra a evolução temporal do perfil de velocidade a partir de meio período de evolução de $\psi(t)$. Em $t = t_{ss} + 0.5t_p$ o platô é o mais baixo possível, representado por quadrados cheios. Com o passar do tempo, a magnitude da velocidade tende a aumentar próximo ao centro do canal até chegar em um platô máximo para um período de oscilação do potencial, em $t = t_{ss} + t_p$. Com o intuito de observar o não-sincronismo de T_{xx} , pontos intermediários serão mostrados nos gráficos da velocidade e da tensão cisalhante, neste caso, em $t = t_{ss} + 0.92t_p$, representado por losangos cheios. A figura 17(a) mostra o componente T_{xy} do tensor polimérico. Na figura 17(b) é mostrado o comportamento de T_{xy} mais próximo a parede do canal. Em

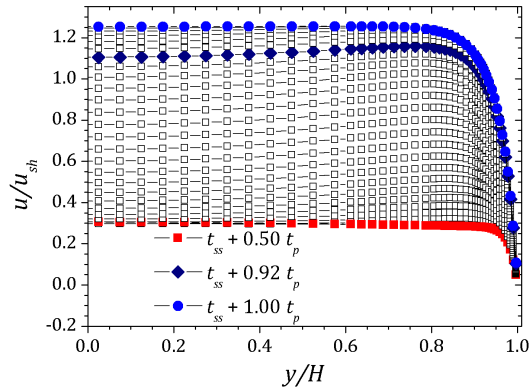


Figura 16 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 0.50t_p$. O perfil intermediário mais acima representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 0.92t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 1.00t_p$, isto é, após um período de oscilação do potencial.

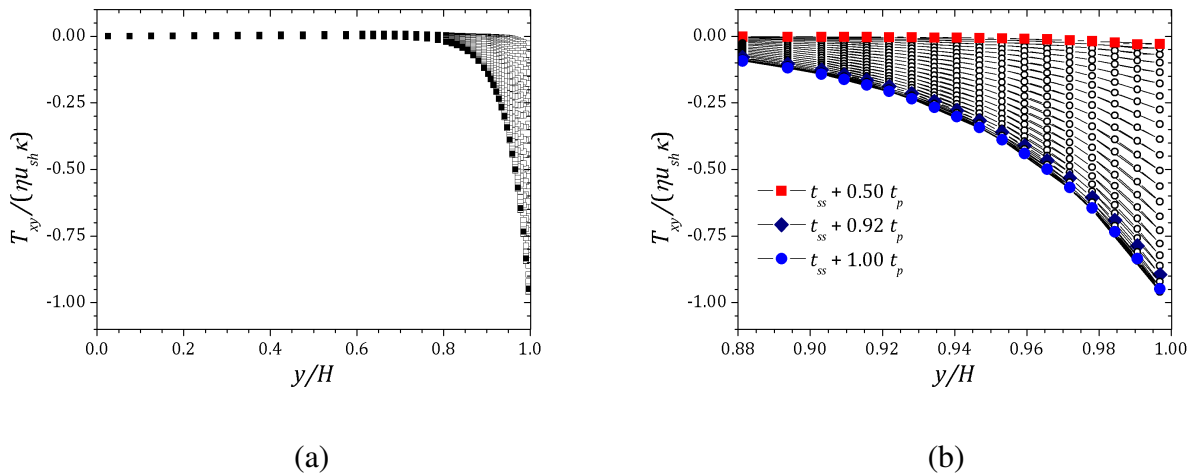


Figura 17 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 0.50t_p$. O perfil intermediário mais abaixo representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 0.92t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 1.00t_p$, após um período de oscilação do potencial.

$t = t_{ss} + 0.50t_p$, curva representada por quadrados cheios, T_{xy} tem sua amplitude tendendo a zero próximo a parede do canal. Com a evolução temporal do potencial, a magnitude de T_{xy} aumenta e seu perfil é semelhante ao de estado estacionário após um período de oscilação de $\psi(t)$ em $t = t_{ss} + t_p$, correspondente a curva representada por círculos cheios. Losangos representam T_{xy} em $t = t_{ss} + 0.92t_p$. Novamente as variações observadas no componente normal T_{xx} são discretas, conforme mostrado na figura 18(a) e as maiores mudanças na amplitude de T_{xx} são observadas perto da parede do canal, conforme mostra a figura 18(b). O quadrado cheio representa o escoamento em $t = t_{ss} + 0.50t_p$, losango em $t = t_{ss} + 0.92t_p$ e o círculo cheio corresponde ao tempo $t = t_{ss} + t_p$. Note que de $t = t_{ss} + 0.50t_p$ até $t = t_{ss} + t_p$ o potencial é crescente, mas observa-se

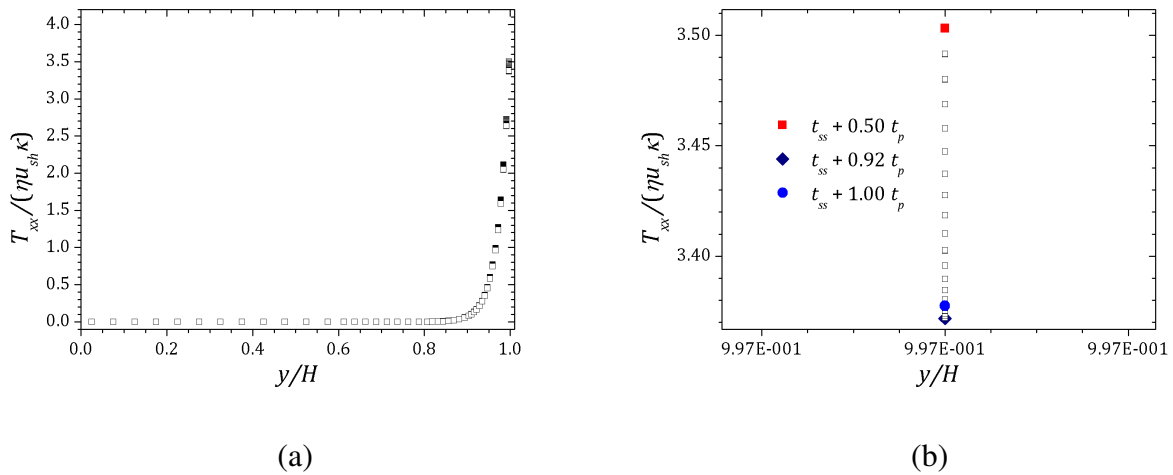


Figura 18 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. O ponto mais alto representado por quadrado cheio foi $t = t_{ss} + 0.5t_p$. O ponto mais baixo representado por losango foi obtido em $t = t_{ss} + 0.92t_p$, e o círculo cheio corresponde a tensão obtida em $t = t_{ss} + 1.0t_p$, após um período de oscilação do potencial.

que ao invés de crescer, T_{xx} diminui sua amplitude até chegar ao mínimo em $t = t_{ss} + 0.92t_p$, e a partir daí T_{xx} começa a aumentar perto da parede do canal, indicando que existe uma certa inércia no componente normal da tensão, isto é, uma resistência a mudanças abruptas na velocidade do escoamento. Portanto, no primeiro período de oscilação do potencial $\psi(t)$, os resultados indicam que a velocidade do fluido, bem como o componente T_{xy} do tensor polimérico, variam em sincronismo com a variação de $\psi(t)$, com perda de amplitude na velocidade e, periodicidade para T_{xy} . Para o componente normal T_{xx} observa-se a perda de amplitude e discreta variação da amplitude perto da parede do canal.

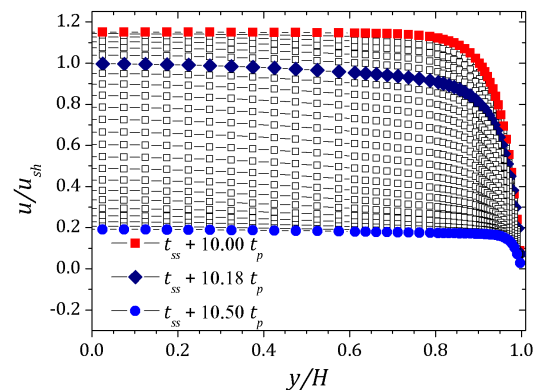


Figura 19 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. As curvas mostram o efeito do potencial dependente do tempo aplicado. O perfil representado por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.00t_p$. A curva representada por losangos foi obtida no tempo $t = t_{ss} + 10.18t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.50t_p$.

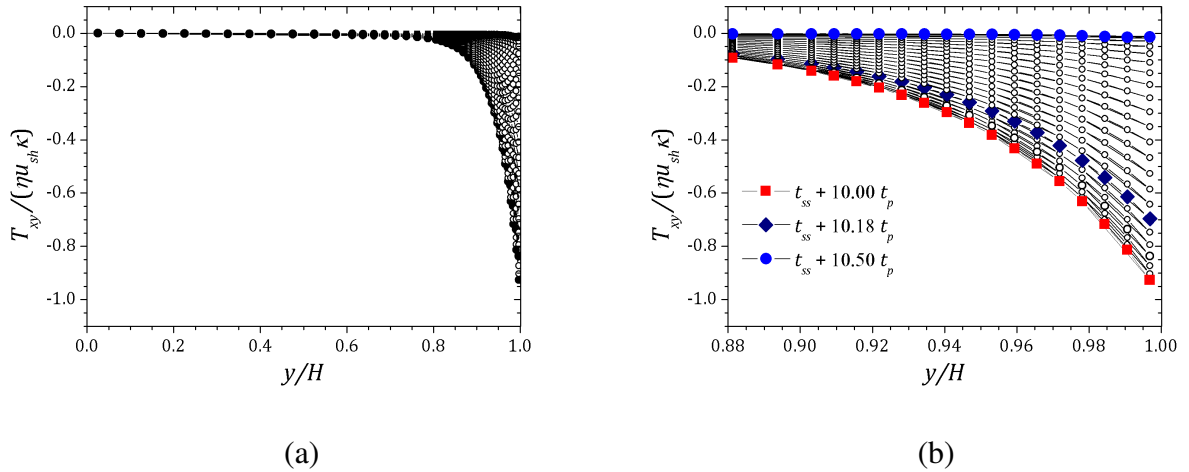


Figura 20 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida no estado estacionário, em $t = t_{ss} + 10.00t_p$. Losangos cheios representam a tensão cisalhante no tempo $t = t_{ss} + 10.18t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.50t_p$.

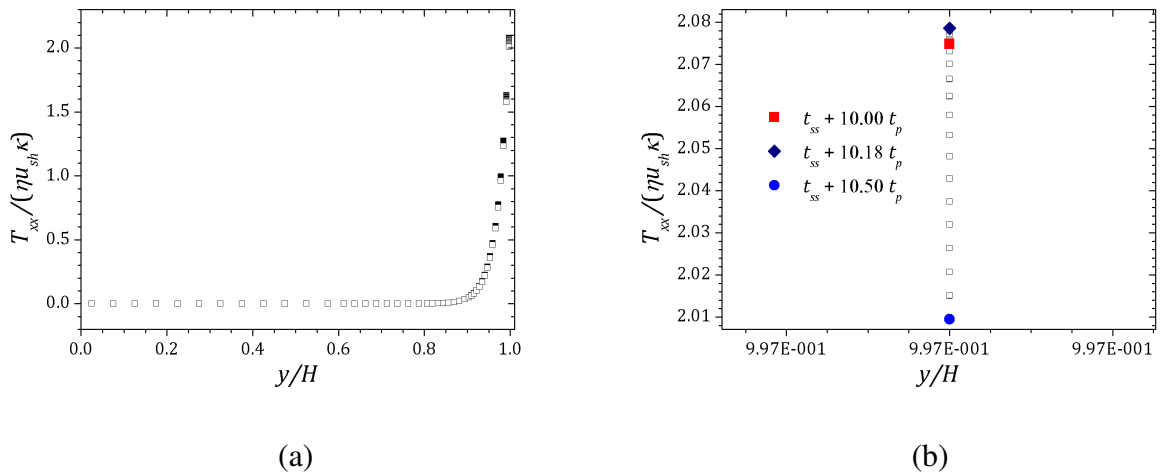


Figura 21 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio corresponde a tensão normal em $t = t_{ss} + 10.00t_p$. O ponto mais alto, losango cheio, representa a tensão normal no tempo $t = t_{ss} + 10.18t_p$. O ponto mais baixo representado por círculo cheio foi obtido em $t = t_{ss} + 10.50t_p$.

A figura 19 mostra a evolução do perfil de velocidade de $t = t_{ss} + 10t_p$ até $t = t_{ss} + 10.5t_p$. O perfil mais alto representado por quadrados cheios corresponde a velocidade no tempo $t = t_{ss} + 10t_p$, onde nota-se uma diminuição na magnitude do platô comparado ao anterior mostrado na figura 13. Com a diminuição da amplitude do potencial, o escoamento diminui a velocidade até chegar em um perfil mínimo, representado por círculos cheios, que ocorre em $t = t_{ss} + 10.5t_p$. O perfil intermediário em $t = t_{ss} + 10.18t_p$ é representado por losangos. A figura 20(a) mostra o componente T_{xy} do tensor polimérico. Na figura 20(b) é mostrado o

comportamento de T_{xy} mais próximo a parede do canal. Em $t = t_{ss} + t_p$, curva representada por quadrados cheios, T_{xy} tem amplitude máxima. Em $t = t_{ss} + 10.5t_p$ a magnitude de T_{xy} tende a se anular na parede do canal correspondente a curva representada por círculos cheios. Novamente, as variações observadas no componente normal T_{xx} são mais discretas, conforme mostrado na figura 21(a), as quais são mais perceptíveis perto da parede do canal, conforme mostra a figura 21(b), onde quadrado cheio representa o escoamento em $t = t_{ss} + 10t_p$, losango corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 10.18t_p$ e o círculo cheio corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 0.5t_p$. Nesta metade de período, de $t = t_{ss} + 10t_p$ até $t = t_{ss} + 10.5t_p$, o potencial é uma função decrescente. Os resultados indicam que o componente normal T_{xx} cresce de $t = t_{ss} + 10t_p$ até $t = t_{ss} + 10.18t_p$, e decresce de $t = t_{ss} + 10.18t_p$ até $t = t_{ss} + 10.5t_p$.

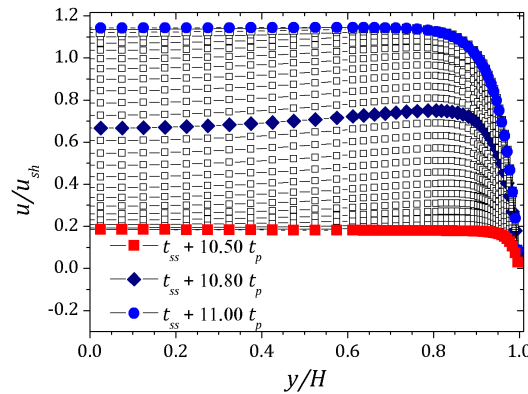


Figura 22 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.50t_p$. O perfil intermediário mais acima representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 10.80t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 11.00t_p$, isto é, após 11 períodos de oscilação do potencial.

Quando o tempo varia de $t = t_{ss} + 10.5t_p$ até $t = t_{ss} + 11t_p$, o potencial $\psi(t)$ é uma função crescente, partindo de um valor mínimo em $t = t_{ss} + 10.5t_p$ até chegar ao máximo em $t = t_{ss} + 11t_p$. A evolução do perfil de velocidades é mostrado na figura 22. Em $t = t_{ss} + 10.5t_p$ o platô é o mais baixo possível, representado por quadrados cheios. Com o passar do tempo, a magnitude da velocidade tende a aumentar próximo ao centro do canal até chegar em um platô máximo, em $t = t_{ss} + 11t_p$. O perfil intermediário em $t = t_{ss} + 10.8t_p$ é representado por losangos cheios. A figura 23(a) mostra o componente T_{xy} do tensor polimérico. Na figura 23(b) é mostrado o comportamento de T_{xy} mais próximo a parede do canal. Em $t = t_{ss} + 10.5t_p$, curva representada por quadrados cheios, T_{xy} tem sua amplitude tendendo a zero próximo a parede do canal. Com a evolução temporal do potencial, a magnitude de T_{xy} aumenta e seu perfil é semelhante ao de estado estacionário em $t = t_{ss} + 11t_p$, correspondente a curva representada por círculos cheios. Losangos representam T_{xy} em $t = t_{ss} + 10.8t_p$. O componente normal do tensor polimérico, T_{xx} , é mostrado na figura 24(a), e as variações podem ser observadas próximo as paredes do canal, conforme mostra a figura 24(b), onde o quadrado cheio representa o escoamento em $t = t_{ss} + 10.5t_p$, losango

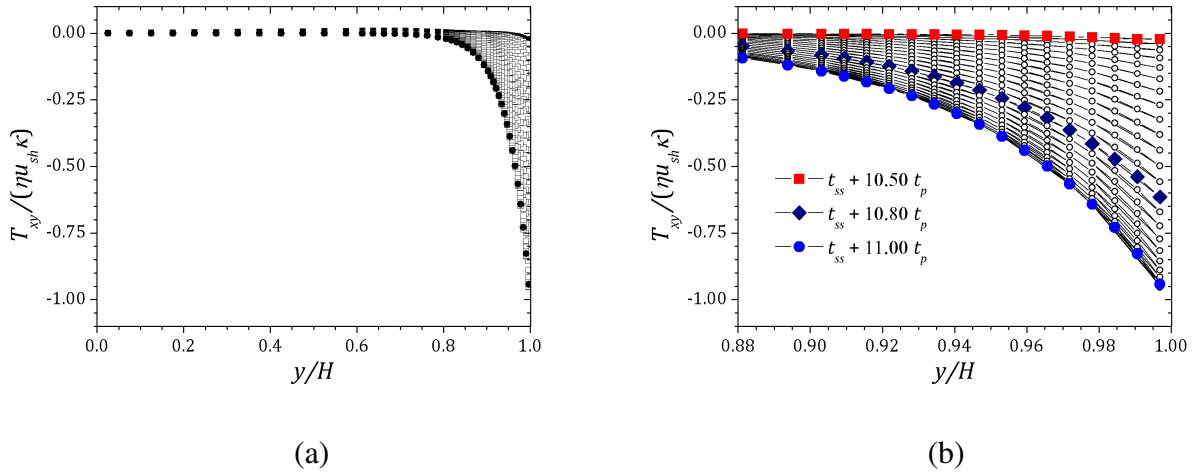


Figura 23 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 10.50 t_p$. O perfil intermediário mais abaixo representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 10.80 t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 11.00 t_p$, após 11 períodos de oscilação do potencial.

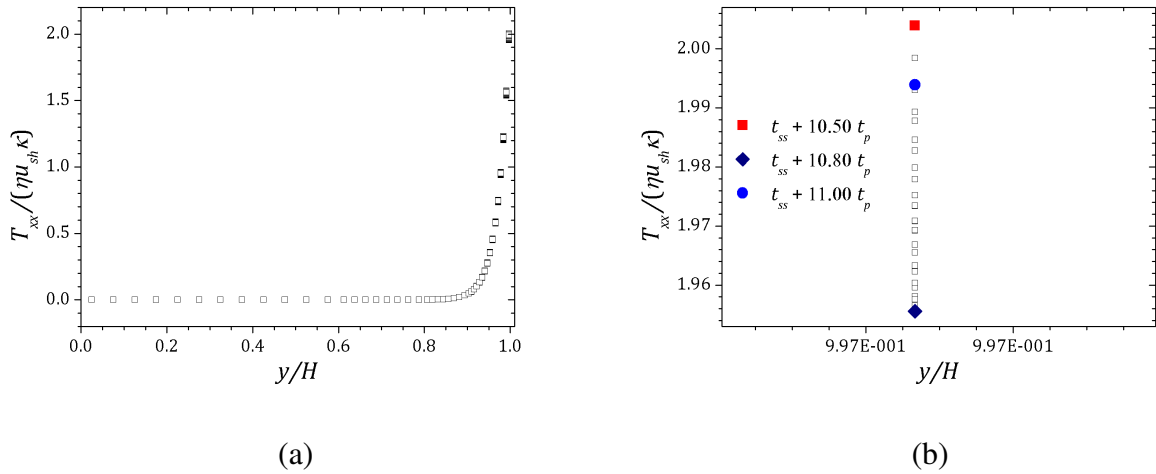


Figura 24 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. O ponto mais alto representado por quadrado cheio foi $t = t_{ss} + 10.50 t_p$. O ponto mais baixo representado por losango foi obtido em $t = t_{ss} + 10.80 t_p$, e o círculo cheio corresponde a tensão obtida em $t = t_{ss} + 11.00 t_p$, após 11 períodos de oscilação do potencial.

em $t = t_{ss} + 10.8 t_p$ e o círculo cheio corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 11 t_p$. Os resultados indicam que de $t = t_{ss} + 10.5 t_p$ até $t = t_{ss} + 10.8 t_p$, T_{xx} é decrescente, e de $t = t_{ss} + 10.8 t_p$ até $t = t_{ss} + 11 t_p$, T_{xx} é crescente, enquanto que o potencial $\psi(t)$ é crescente de $t = t_{ss} + 10.5 t_p$ até $t = t_{ss} + 11 t_p$. Além disso, observa-se um decaimento da amplitude de T_{xx} perto da parede, em relação a tempos menores que $t = t_{ss} + 10.5 t_p$.

A figura 25 mostra a evolução do perfil de velocidade de $t = t_{ss} + 30 t_p$ até $t = t_{ss} + 30.5 t_p$, período para o qual o potencial $\psi(t)$ é uma função decrescente. O perfil mais alto representado

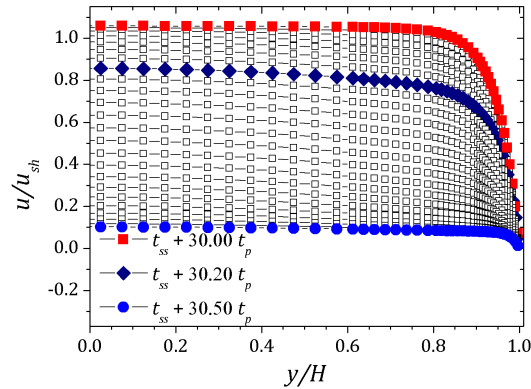


Figura 25 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. O perfil representado por quadrados cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 30.00t_p$, a curva representada por losangos em $t = t_{ss} + 30.20t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 30.50t_p$.

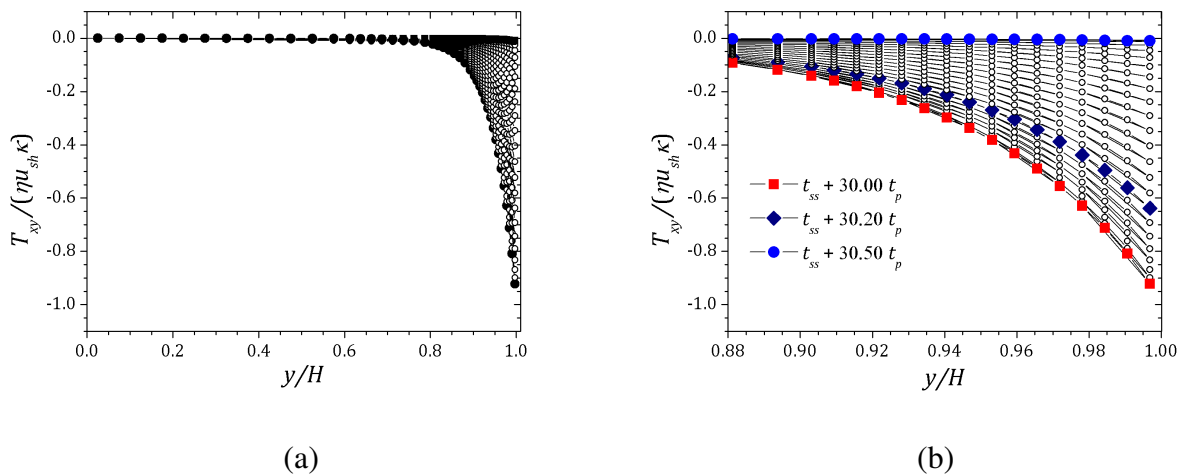


Figura 26 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida no estado estacionário, em $t = t_{ss} + 30.00t_p$. Losangos cheios representam a tensão cisalhante no tempo $t = t_{ss} + 20.20t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 30.50t_p$.

por quadrados cheios corresponde a velocidade no tempo $t = t_{ss} + 10t_p$, no qual observa-se uma diminuição ainda mais acentuada no platô, comparado ao resultado para $t = t_{ss} + 10t_p$ até $t = t_{ss} + 10.5t_p$ mostrado na figura 19. Com a diminuição da amplitude do potencial, o escoamento diminui a velocidade até chegar em um perfil mínimo, representado por círculos cheios, que ocorre em $t = t_{ss} + 30.5t_p$. O perfil intermediário em $t = t_{ss} + 30.2t_p$ é representado por losangos. A figura 26(a) mostra o componente T_{xy} do tensor polimérico. Na figura 26(b) é mostrado o comportamento de T_{xy} mais próximo a parede do canal. Em $t = t_{ss} + 30.5t_p$, curva representada por quadrados cheios, T_{xy} tem amplitude máxima. Em $t = t_{ss} + 30.5t_p$ a magnitude de T_{xy} tende a se anular na parede do canal correspondente a curva representada por círculos cheios. A variação

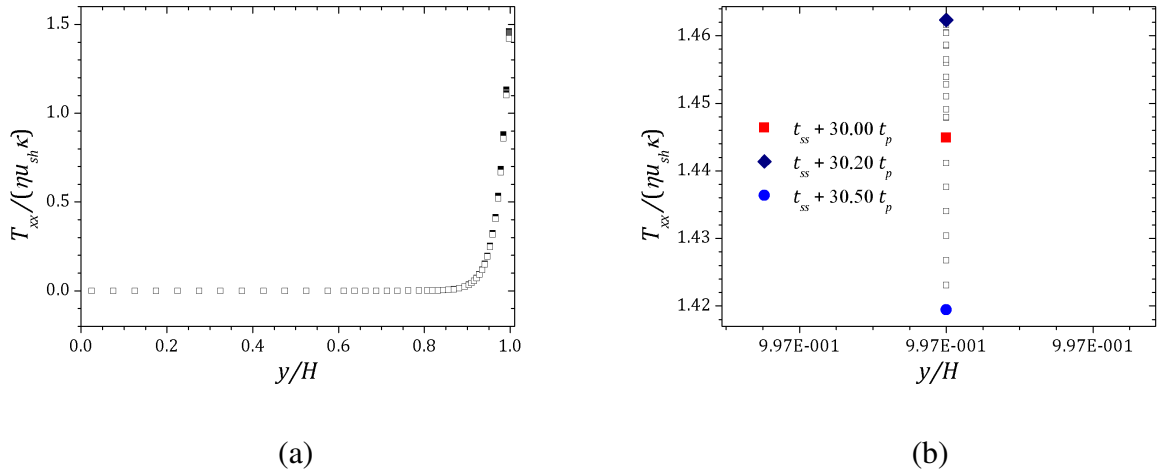


Figura 27 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio corresponde a tensão normal em $t = t_{ss} + 30.00 t_p$. O ponto mais alto, losango cheio, representa a tensão normal no tempo $t = t_{ss} + 30.20 t_p$. O ponto mais baixo representado por círculo cheio foi obtido em $t = t_{ss} + 30.50 t_p$.

observada no componente normal T_{xx} é mostrada na figura 27(a), as quais são mais perceptíveis perto da parede do canal, conforme mostra a figura 27(b), onde quadrado cheio representa o escoamento em $t = t_{ss} + 30 t_p$, losango corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 10.18 t_p$ e o círculo cheio corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 30.5 t_p$. Os resultados indicam que o componente normal T_{xx} cresce de $t = t_{ss} + 30 t_p$ até $t = t_{ss} + 30.2 t_p$, e decresce de $t = t_{ss} + 30.2 t_p$ até $t = t_{ss} + 30.5 t_p$. Além disso, as simulações indicam que a amplitude de T_{xx} perto da parede é ainda menor que anteriormente.

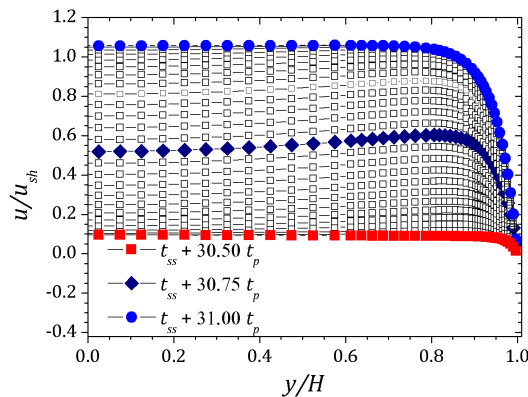


Figura 28 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 30.50 t_p$. O perfil intermediário mais acima representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 30.75 t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 31.00 t_p$, isto é, após 31 períodos de oscilação do potencial.

Quando o tempo varia de $t = t_{ss} + 30.5 t_p$ até $t = t_{ss} + 31 t_p$, o potencial $\psi(t)$ é uma

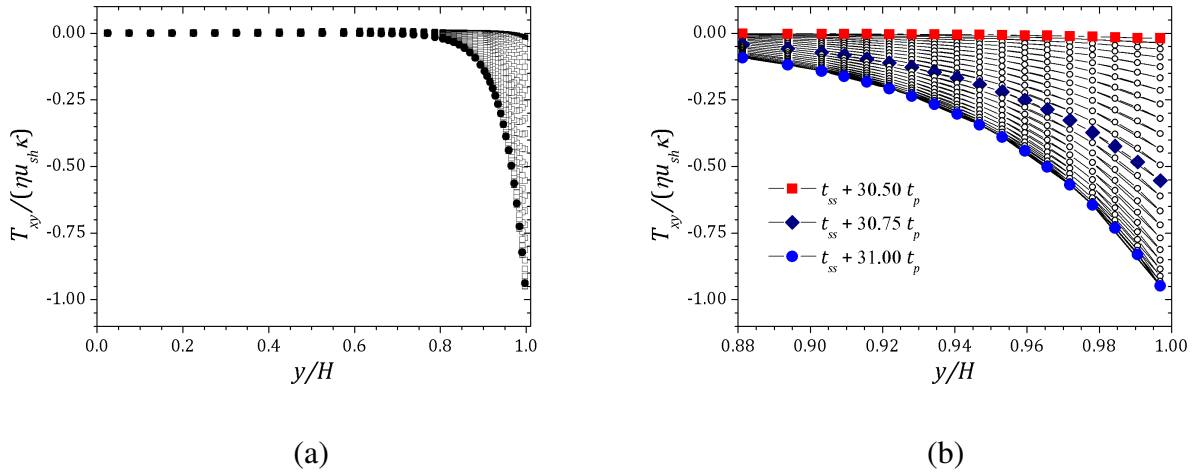


Figura 29 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 30.50 t_p$. O perfil intermediário mais abaixo representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 30.75 t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 31.00 t_p$, após 31 períodos de oscilação do potencial.

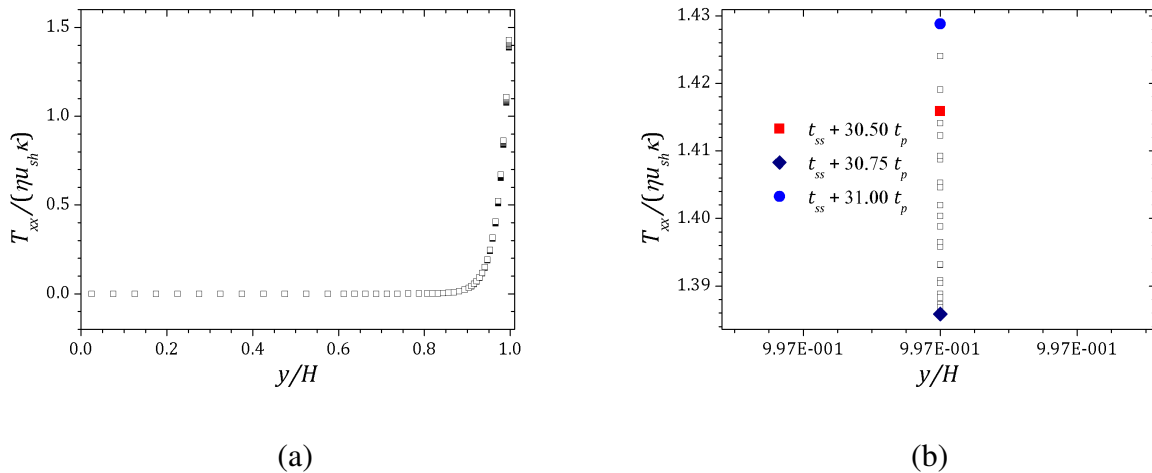


Figura 30 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio representa a tensão em $t = t_{ss} + 30.50 t_p$. O ponto mais baixo representado por losango foi obtido em $t = t_{ss} + 30.75 t_p$ e o círculo cheio corresponde a tensão obtida em $t = t_{ss} + 31.00 t_p$, após 31 períodos de oscilação do potencial.

função crescente, partindo de um valor mínimo em $t = t_{ss} + 30.5 t_p$ até chegar ao máximo em $t = t_{ss} + 31 t_p$. A evolução do perfil de velocidades é mostrado na figura 28. Em $t = t_{ss} + 30.5 t_p$ o platô é o mais baixo possível, representado por quadrados cheios. A magnitude da velocidade tende aumentar próximo ao centro do canal até chegar em um platô máximo, em $t = t_{ss} + 31 t_p$. O perfil intermediário em $t = t_{ss} + 30.75 t_p$ é representado por losangos cheios. A figura 29(a) mostra o componente T_{xy} do tensor polimérico. Na figura 29(b) é mostrado o comportamento de T_{xy} mais próximo a parede do canal. Em $t = t_{ss} + 30.5 t_p$, curva representada por quadrados

cheios, T_{xy} tem sua amplitude tendendo a zero próximo a parede do canal. A magnitude de T_{xy} aumenta e sua amplitude é máxima em $t = t_{ss} + 31t_p$, correspondente a curva representada por círculos cheios. Losangos representam T_{xy} em $t = t_{ss} + 30.75t_p$. O componente normal do tensor polimérico, T_{xx} , é mostrado na figura 30(a), e as variações podem ser observadas próximo as paredes do canal, conforme mostra a figura 30(b), onde o quadrado cheio representa o escoamento em $t = t_{ss} + 30.5t_p$, losango em $t = t_{ss} + 30.75t_p$ e o círculo cheio corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 31t_p$. Os resultados indicam que de $t = t_{ss} + 30.5t_p$ até $t = t_{ss} + 30.75t_p$, T_{xx} é decrescente, e de $t = t_{ss} + 30.75t_p$ até $t = t_{ss} + 31t_p$, T_{xx} é crescente, enquanto que o potencial $\psi(t)$ é crescente de $t = t_{ss} + 30.5t_p$ até $t = t_{ss} + 31t_p$.

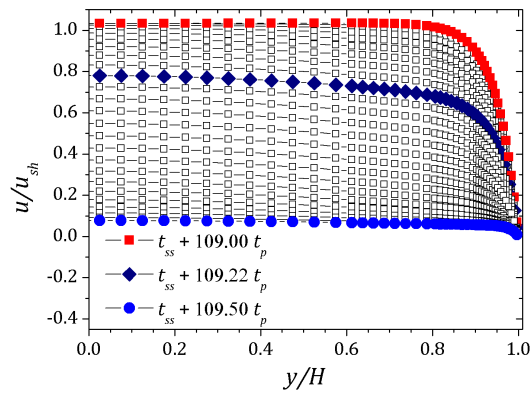


Figura 31 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. O perfil representado por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.00t_p$. A curva representada por losangos foi obtida no tempo $t = t_{ss} + 109.22t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.50t_p$.

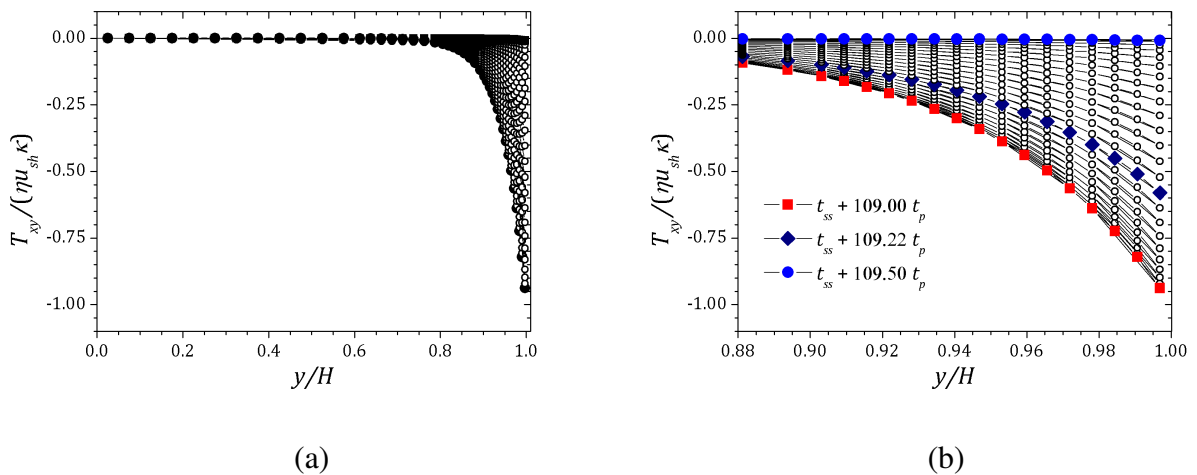


Figura 32 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.00t_p$. Losangos cheios representam a tensão cisalhante no tempo $t = t_{ss} + 109.22t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.50t_p$.

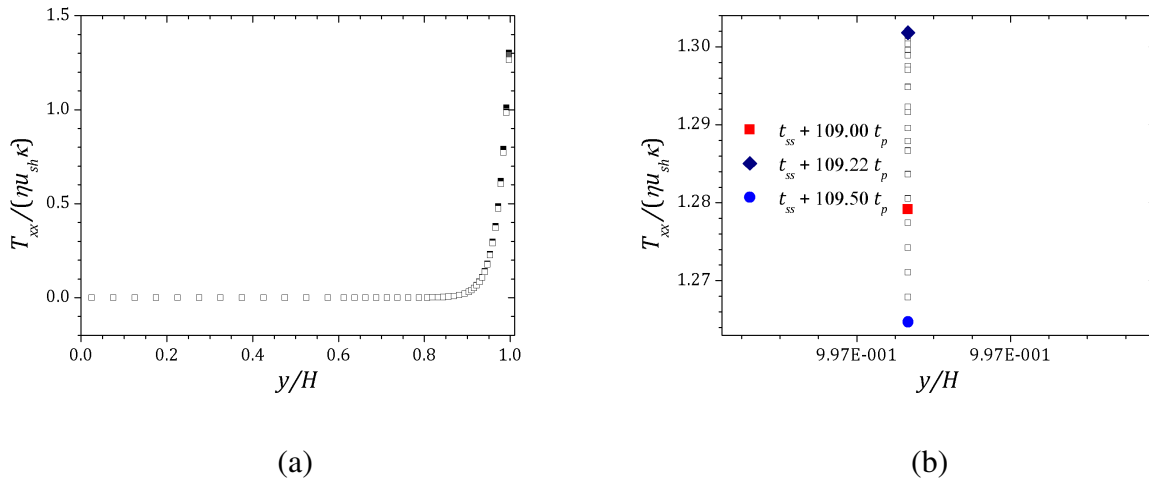


Figura 33 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio corresponde a tensão normal em $t = t_{ss} + 109.00t_p$. O ponto mais alto, losango cheio, representa a tensão normal no tempo $t = t_{ss} + 109.22t_p$. O ponto mais baixo representado por círculo cheio foi obtido em $t = t_{ss} + 109.50t_p$.

As simulações foram realizadas até as propriedades do escoamento atingirem um "estado de equilíbrio" entre aspas, pois o potencial continua variando com o tempo e conseqüentemente as propriedades também continuam variando com o tempo. Quando digo "estado de equilíbrio", quero dizer que a partir de $t = t_{ss} + t_{eq}$, as propriedades passam a ter variações periódicas iguais para todo período de oscilação do potencial $\psi(t)$, isto é, a velocidade e as tensões são iguais para todo tempo $t = t_{ss} + t_{eq} + mt_p$, onde m é um número inteiro positivo. A figura 31 mostra a evolução do perfil de velocidade de $t = t_{ss} + 109t_p$ até $t = t_{ss} + 109.5t_p$, período para o qual o potencial $\psi(t)$ é uma função decrescente. O perfil mais alto representado por quadrados cheios corresponde a velocidade no tempo $t = t_{ss} + 109t_p$. O platô da velocidade diminui até chegar em um perfil mínimo, representado por círculos cheios, que ocorre em $t = t_{ss} + 109.5t_p$. O perfil intermediário em $t = t_{ss} + 109.22t_p$ é representado por losangos. A figura 32(a) mostra o componente T_{xy} do tensor polimérico. Na figura 32(b) é mostrado o comportamento de T_{xy} mais próximo a parede do canal. Em $t = t_{ss} + 109.0t_p$, curva representada por quadrados cheios, T_{xy} tem amplitude máxima. Em $t = t_{ss} + 109.5t_p$ a magnitude de T_{xy} tende a se anular na parede do canal correspondente a curva representada por círculos cheios. A variação observada no componente normal T_{xx} é mostrada na figura 33(a), e perto da parede do canal, conforme mostra a figura 33(b), onde quadrado cheio representa o escoamento em $t = t_{ss} + 109t_p$, losango corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 109.22t_p$ e o círculo cheio corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 109.5t_p$. Os resultados indicam que o componente normal T_{xx} cresce de $t = t_{ss} + 109t_p$ até $t = t_{ss} + 109.22t_p$, e decresce de $t = t_{ss} + 109.22t_p$ até $t = t_{ss} + 109.5t_p$.

Para t variando de $t = t_{ss} + 109.5t_p$ até $t = t_{ss} + 110t_p$, o potencial $\psi(t)$ é uma função crescente, partindo de um valor mínimo em $t = t_{ss} + 109.5t_p$ até chegar ao máximo em $t = t_{ss} + 110t_p$. O perfil de velocidades é mostrado na figura 34. Em $t = t_{ss} + 109.5t_p$ o platô é

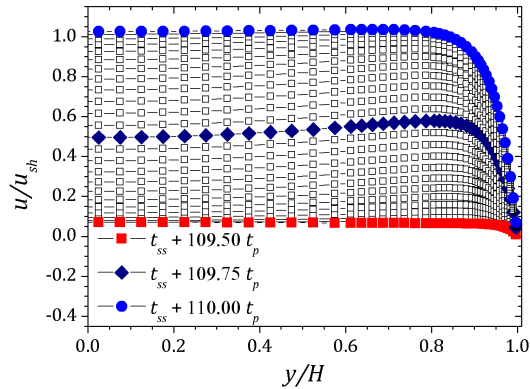


Figura 34 – Perfil de velocidade para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva mais baixa representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.50t_p$. O perfil intermediário mais acima representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 109.75t_p$. A curva mais alta representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 110.00t_p$, isto é, após 110 períodos de oscilação do potencial.

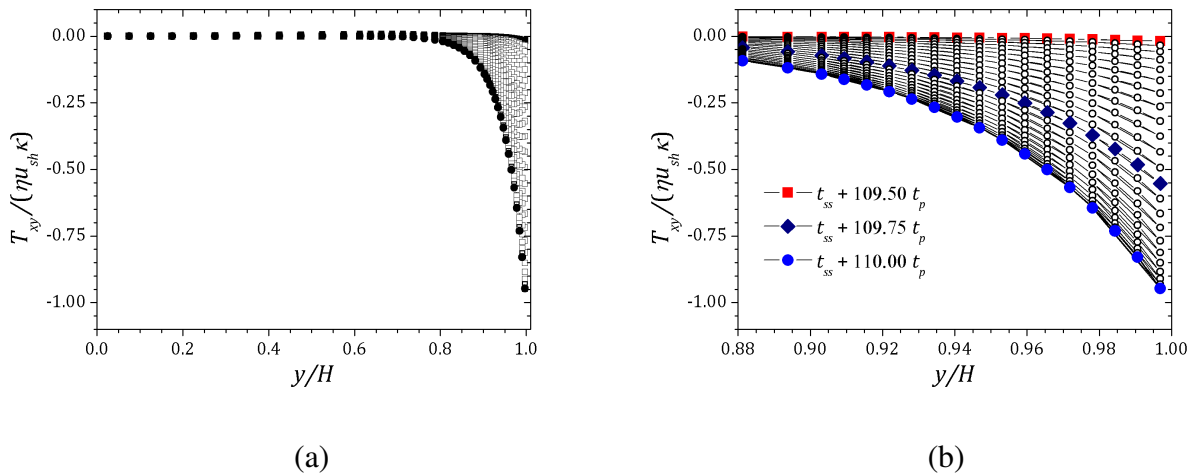


Figura 35 – (a) Tensão de cisalhamento para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a). A curva mais alta representada por quadrados cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 109.50t_p$. O perfil intermediário mais abaixo representado por losangos cheios foi obtido em $t = t_{ss} + 109.75t_p$. A curva mais baixa representada por círculos cheios foi obtida em $t = t_{ss} + 110.00t_p$, após 110 períodos de oscilação do potencial.

o mais baixo possível, representado por quadrados cheios. A magnitude da velocidade tende a aumentar próximo ao centro do canal até chegar em um platô máximo, em $t = t_{ss} + 110t_p$. O perfil intermediário em $t = t_{ss} + 109.75t_p$ é representado por losangos cheios. O componente T_{xy} é mostrado na figura 35(a) e na figura 35(b) é mostrado o comportamento de T_{xy} mais próximo a parede do canal. Em $t = t_{ss} + 109.5t_p$, curva representada por quadrados cheios, T_{xy} tem sua amplitude tendendo a zero próximo a parede do canal. A magnitude de T_{xy} aumenta perto da parede do canal e retorna a amplitude máxima em $t = t_{ss} + 110t_p$, correspondente a curva representada por círculos cheios. Losangos representam T_{xy} em $t = t_{ss} + 109.75t_p$. O componente T_{xx} é mostrado na figura 36(a), e as variações podem ser observadas próximo as

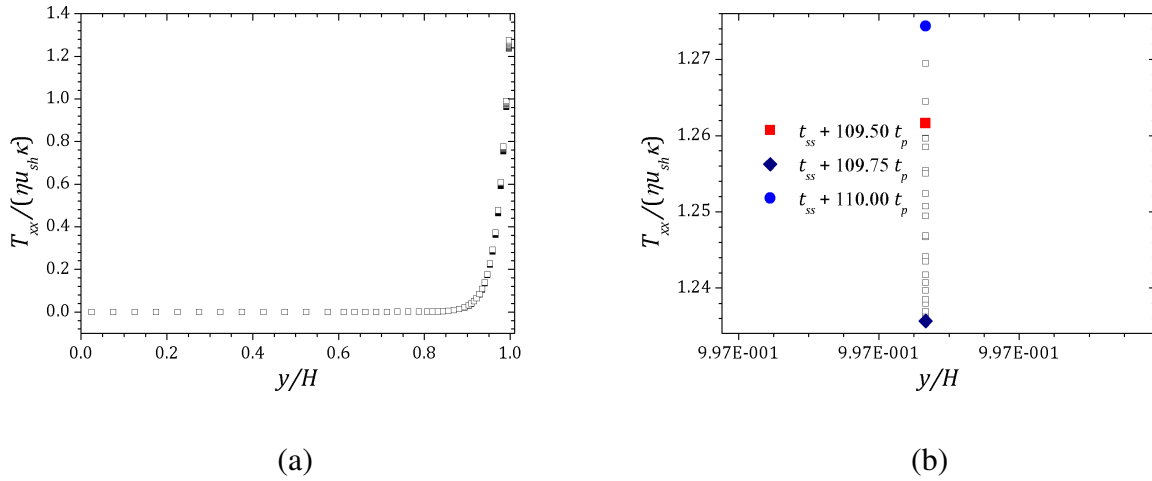


Figura 36 – (a) Tensão normal para escoamento entre placas paralelas para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. (b) Ampliação de (a) perto da parede do canal. Quadrado cheio representa a tensão em $t = t_{ss} + 109.50 t_p$. O ponto mais baixo representado por losango foi obtido em $t = t_{ss} + 109.75 t_p$ e o círculo cheio corresponde a tensão obtida em $t = t_{ss} + 110.00 t_p$, após 110 períodos de oscilação do potencial.

paredes do canal, conforme mostra a figura 36(b), onde o quadrado cheio representa o escoamento em $t = t_{ss} + 109.5 t_p$, losango em $t = t_{ss} + 109.75 t_p$ e o círculo cheio corresponde ao tempo $t = t_{ss} + 110 t_p$. Assim como mostra a figura 30(b), os resultados indicam que de $t = t_{ss} + 109.5 t_p$ até $t = t_{ss} + 109.75 t_p$, T_{xx} é decrescente, e de $t = t_{ss} + 109.75 t_p$ até $t = t_{ss} + 110 t_p$, T_{xx} é crescente, enquanto que o potencial $\psi(t)$ é crescente de $t = t_{ss} + 109.5 t_p$ até $t = t_{ss} + 110 t_p$.

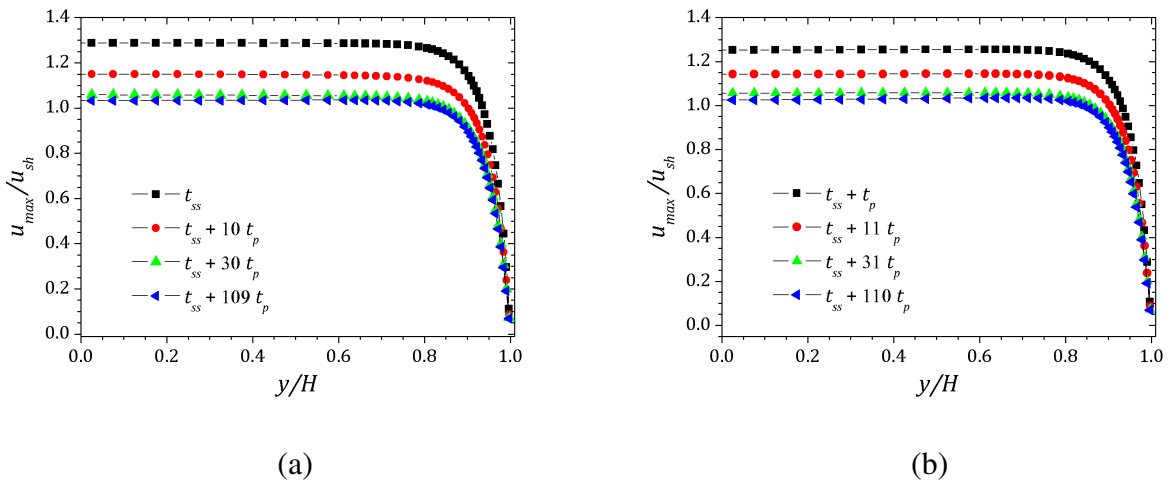


Figura 37 – Velocidade máxima em função do tempo para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. Em (a) começando de $t = t_{ss}$ e em (b) a partir de $t = t_{ss} + t_p$.

Com o passar do tempo, as mudanças no perfil de velocidade ficam mais evidentes quando tomamos a velocidade máxima ou a velocidade em um tempo $t + m t_p$, com $m = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$. A figura 37(a) mostra a variação da velocidade máxima u_{max} a partir da aplicação do potencial oscilante em $t = t_{ss}$, enquanto que a figura 37(b) mostra também esta variação a partir de

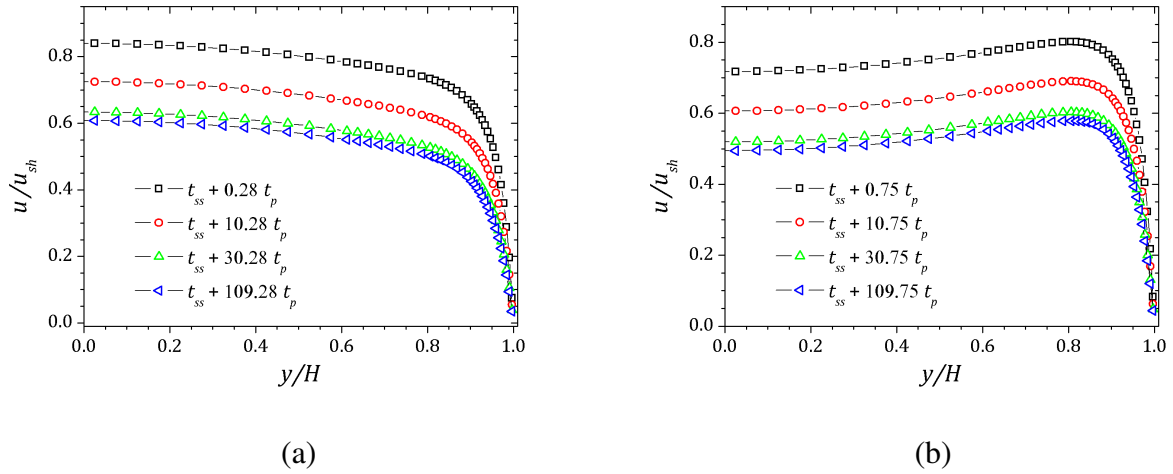


Figura 38 – (a) Velocidade a partir de $t = t_{ss} + 0.28t_p$ e em (b) começando de $t = t_{ss} + 0.75t_p$. Os principais parâmetros usados são $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$.

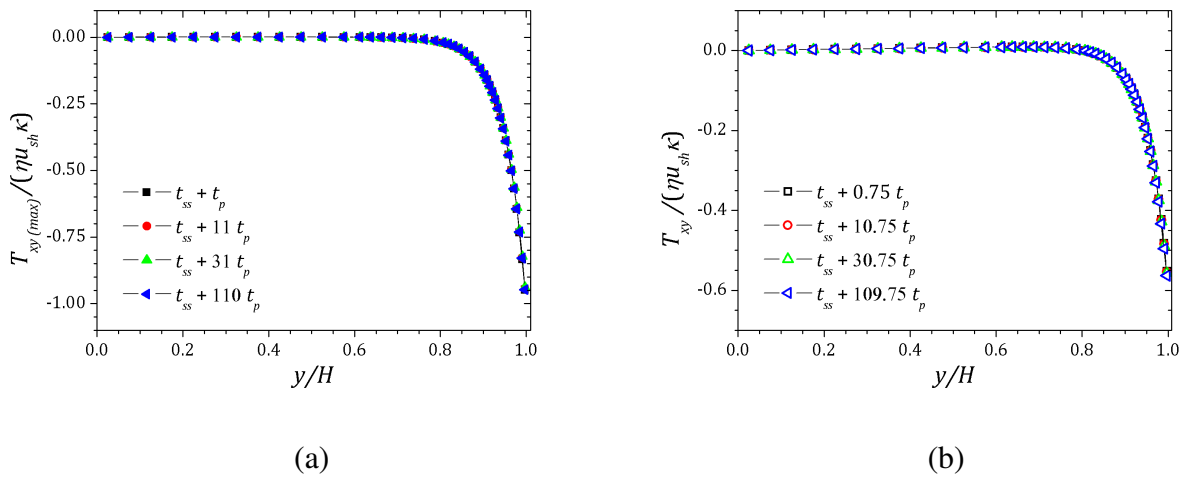


Figura 39 – (a) Amplitude máxima da tensão de cisamento que ocorre em múltiplos de t_p , mostrada a partir de $t = t_{ss} + t_p$ e em (b), T_{xy} começando de $t = t_{ss} + 0.75t_p$ indo até $t = t_{ss} + 109.75t_p$. Os principais parâmetros usados são $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$.

$t = t_{ss} + t_p$. A velocidade é máxima em $t = t_{ss}$ e $t = t_{ss} + t_p$ representada por quadrados, e vai diminuindo com o passar do tempo até atingir um perfil mínimo em $t = t_{ss} + 109t_p$ e $t = t_{ss} + 110t_p$. Comportamento similar para o perfil de velocidade é mostrado na figura 38. Na figura 38(a) o perfil é mostrado para $t = t_{ss} + 0.28t_p$ até $t = t_{ss} + 109.28t_p$, no qual o potencial é decrescente, tendo a ação de freiar o fluxo. Em 38(b) os perfis são mostrados de $t = t_{ss} + 0.75t_p$ até $t = t_{ss} + 109.75t_p$, onde o potencial é uma função crescente, empurrando o fluido no sentido do escoamento. O comportamento do componente da tensão T_{xy} é mostrado na figura 39. Em 39(a), é mostrado a amplitude máxima $T_{xy(max)}$ em função do tempo e em 39(b), uma amplitude menor é mostrada de $t = t_{ss} + 0.75t_p$ até $t = t_{ss} + 109.75t_p$. Os resultados indicam que o perfil de T_{xy} mantém-se em equilíbrio, com variações periódicas com o passar do tempo, desde a aplicação do potencial oscilante, ou seja, $T_{xy}(t) = T_{xy}(t + mt_p)$, fato que não ocorre com a velocidade antes

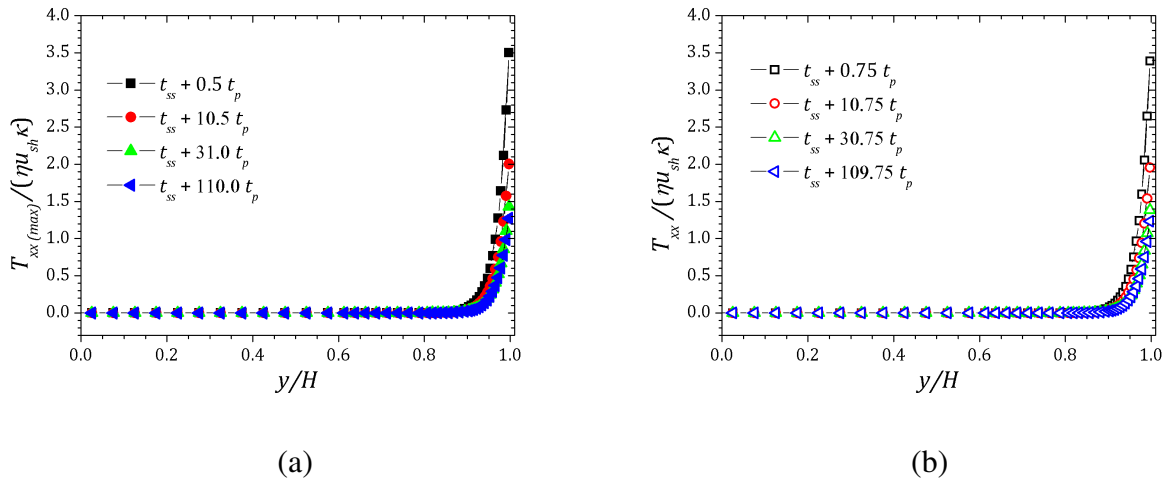


Figura 40 – (a) Amplitude máxima da tensão normal, mostrada a partir de $t = t_{ss} + 0.5t_p$ e em (b), T_{xx} começando de $t = t_{ss} + 0.75t_p$ indo até $t = t_{ss} + 109.75t_p$. Os principais parâmetros usados são $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$.

dela atingir o tempo $t_{ss} + t_{eq}$, nem com o componente normal T_{xx} , o qual é mostrado na figura 40. Na figura 40(a) é mostrada a variação da amplitude máxima do componente normal da tensão, $T_{xx(max)}$, e em 40(b) T_{xx} para múltiplos de t_p . Os resultados mostram que assim como observado anteriormente, a amplitude decai perto da parede do canal e poucas variações ocorrem dentro de um período de oscilação do potencial.

Lembrando que o experimento descrito nesta seção foi realizado aplicando o potencial dependente do tempo em $t = t_{ss}$ quando o escoamento atingiu o estado estacionário. Vale ressaltar que o mesmo resultado obtido aqui para $t = t_{ss} + t_{eq}$ pode ser obtido aplicando o campo oscilante a partir de $t = 0$ com o fluido em repouso.

No experimento mostrado aqui, três fatos relacionados a cada uma das propriedades u , T_{xy} e T_{xx} são notáveis. A magnitude da velocidade diminuiu, o perfil do componente cisalhante T_{xy} varia periodicamente desde a aplicação do potencial oscilante e por fim, o componente normal T_{xx} perde amplitude perto da parede. Além disso, observa-se que u varia periodicamente após um certo tempo, resultado que indica para o sincronismo de u , T_{xy} e do potencial, enquanto que T_{xx} apresenta uma certa inércia, ou seja, uma resistência as mudanças causadas à velocidade do fluido devido a oscilação do potencial. De fato, **com as devidas considerações feitas inicialmente**, o componente T_{xx} convergiu para sua a média temporal. Neste sentido, levando em conta a expressão (4.11), podemos calcular a sua média como sendo:

$$\begin{aligned}
\langle T_{xx} \rangle &= \frac{1}{t_p} \int_0^{t_p} T_{xx}(t) dt \\
&= 2\eta \kappa \frac{\sinh^2(\kappa y)}{\cosh^2(\kappa)} \frac{1}{t_p} \int_0^{t_p} u_{sh}(t) De_{\kappa}(t) dt \\
&= 2\eta \kappa u_{sh} De_{\kappa} \frac{\sinh^2(\kappa y)}{\cosh^2(\kappa)} \frac{1}{t_p} \int_0^{t_p} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(2\pi v t) \right)^2 dt \\
&= T_{xx}^{ss} \frac{3}{8},
\end{aligned} \tag{4.15}$$

onde T_{xx}^{ss} é o componente normal da tensão no estado estacionário. Portanto, em $t = t_{ss} + t_{eq}$, o comportamento da tensão normal tende a média temporal de T_{xx} , que é igual a 3/8 do valor da tensão em $t = t_{ss}$. A figura 41 mostra o tensor T_{xx} junto com a expressão analítica (4.15) para a média temporal, conforme considerações feitas anteriormente.

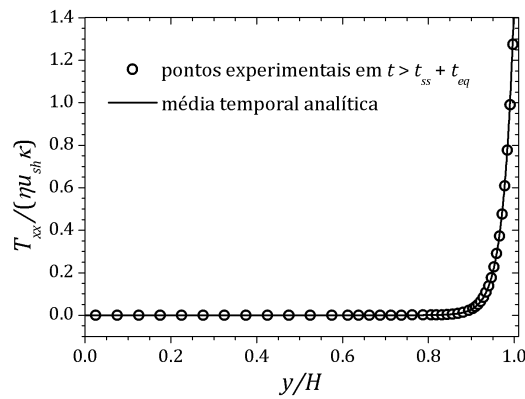


Figura 41 – Tensão normal para $\kappa = 20$, $De_{\kappa} = 2.0$ e $\varepsilon = 0.1$. A curva representada por círculos corresponde ao resultado da simulação obtido em $t = t_{ss} + 110t_p$. A linha sólida corresponde a média temporal dada pela expressão (4.15).

Até o presente momento, todos os resultados mostrados foram obtidos com o potencial dependente do tempo aplicado em $t = t_{ss}$, isto é, com o escoamento em estado estacionário e, observamos a evolução do sistema até chegar a situação de equilíbrio na qual as variações das propriedades não se alteram dentro de um período de oscilação de $\psi(t)$. Por outro lado, quando se aplica o potencial dependente do tempo a partir de $t = 0$ com o fluido em repouso, o sistema evolui para a mesma situação de equilíbrio encontrada no caso anterior. A figura 42 mostra esse comportamento para o componente viscoelástico T_{xx} . O perfil representado por losangos corresponde ao fluido em repouso em $t = 0$, onde T_{xx} é nulo. Após um período de oscilação de $\psi(t)$, curva representada por quadrados em $t = t_p$, observa-se um crescimento da tensão perto da parede do canal, e com o passar do tempo tende a aumentar a amplitude como mostrado em $t = 8t_p$ e $t = 64t_p$ pelos perfis representados por triângulos para cima e para baixo respectivamente. A situação de equilíbrio é mostrada para $t = 200t_p$, representado por círculos e a média temporal pela linha sólida. Comportamento similar das propriedades u , T_{xx}

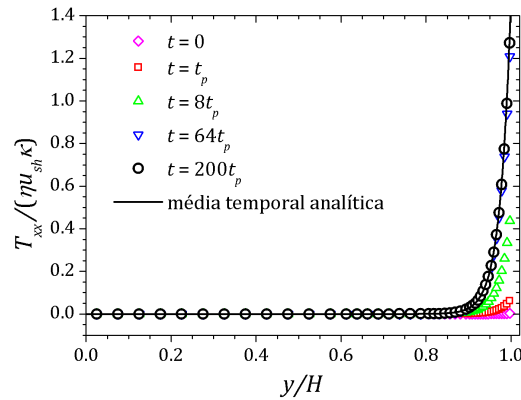


Figura 42 – Tensão normal para $\kappa = 20$, $De_\kappa = 2.0$ e $\epsilon = 0.1$. As curvas mostram a evolução de T_{xx} a partir da aplicação do potencial oscilante em $t = 0$ com o fluido em repouso. A curva representada por círculos corresponde ao resultado da simulação obtido em $t = 200t_p$ e linha sólida corresponde a média temporal dada pela expressão (4.15).

e T_{xy} é observado para diferentes viscoelasticidades do fluido. A figura 43 mostra os perfis de velocidade máxima e tensão cisalhante para diferentes números de Deborah, já na condição de equilíbrio, isto é, para $t = t_{ss} + 100t_p$. Na figura 43(a), quadrados representam a velocidade para $De_\kappa = 2.0$, círculos para $De_\kappa = 1.5$, triângulos para cima corresponde a $De_\kappa = 1.0$ e triângulos para esquerda $De_\kappa = 0.5$.

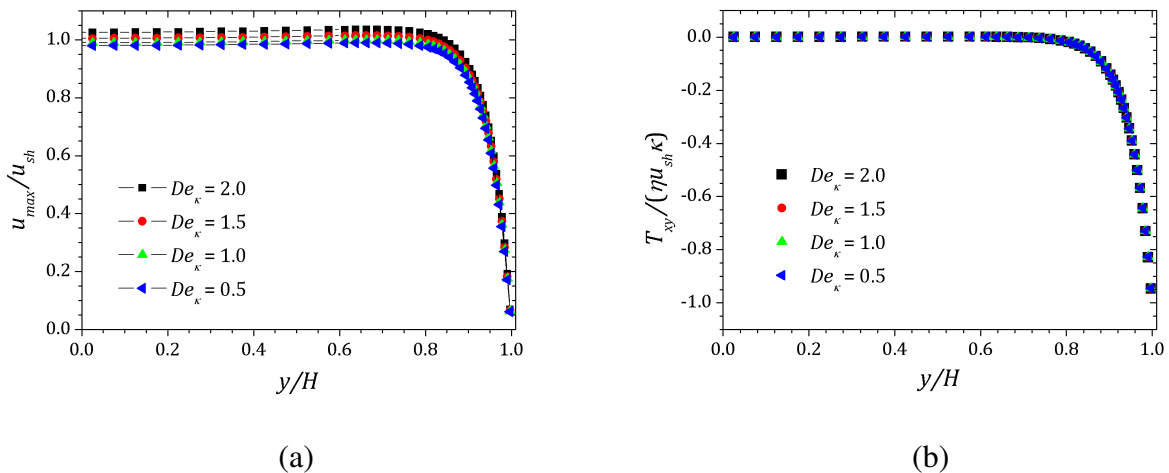


Figura 43 – (a) Velocidade máxima após o equilíbrio em função do número de Deborah (b) Tensão máxima $T_{xy(max)}$ em função do número de Deborah. Parâmetros utilizados: $\kappa = 20$ e $\epsilon = 0.1$.

Na figura 43(b), é mostrado a amplitude máxima do componente T_{xy} , e o resultado indica a coincidência dos perfis, independente do número de Deborah. Já o componente T_{xx} depende do número de Deborah, como mostra a figura 44(a) e a ampliação desse resultado perto da parede do canal pode ser observada no gráfico 44(b). Quadrados representam a a tensão normal para $De_\kappa = 2.0$, círculos para $De_\kappa = 1.5$, triângulos para cima corresponde a $De_\kappa = 1.0$ e triângulos para esquerda $De_\kappa = 0.5$. Os resultados indicam que na situação de equilíbrio, a tensão normal

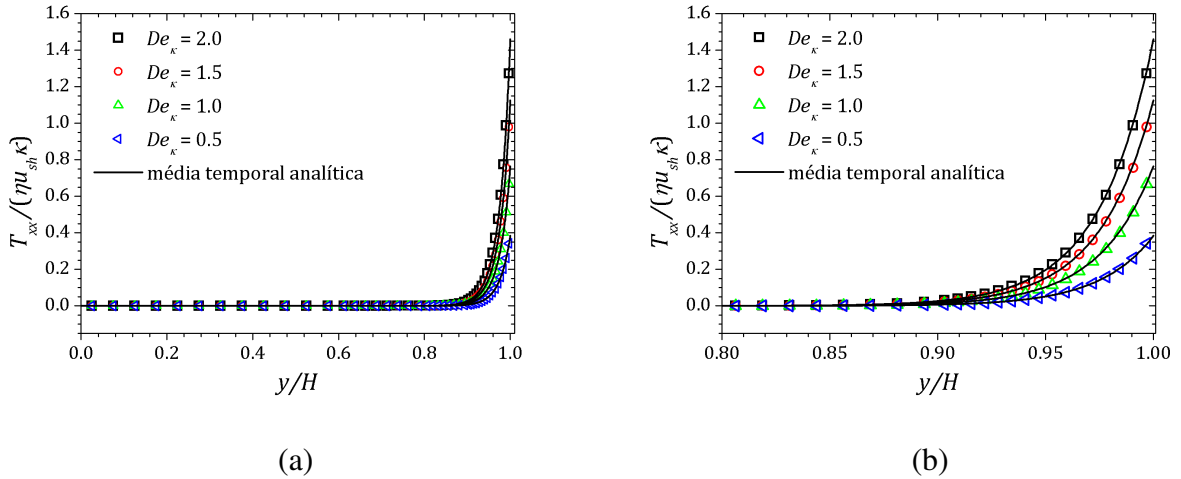


Figura 44 – (a) Tensão T_{xx} após o equilíbrio em função do número de Deborah (b) Imagem de (a) perto da parede do canal. Parâmetros utilizados: $\kappa = 20$ e $\varepsilon = 0.1$.

converge para a média dada pela expressão (4.15) representada pela linha sólida de acordo com o respectivo número de Deborah.

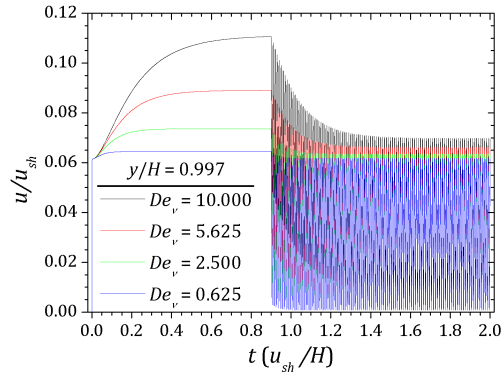
A imposição do transiente oscilatório afeta diretamente as propriedades do escoamento levando-o aos resultados mostrados nesta seção depois de um longo período de tempo após a aplicação do potencial oscilante, o tempo de equilíbrio t_{eq} . Na próxima seção, o tempo de equilíbrio será definido quantitativamente e os resultados para diferentes frequências de oscilação serão apresentados.

4.2.3 Dependência com a frequência aplicada

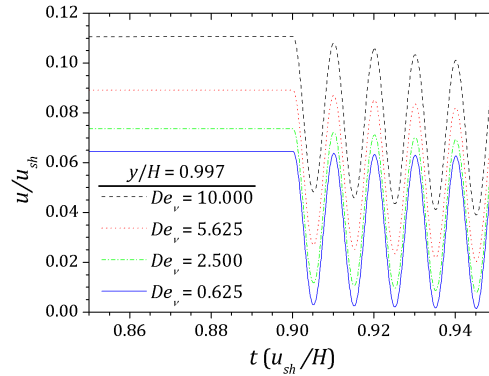
Tabela 1 – Tabela de conversão das constantes utilizadas nas simulações numéricas. Foi usado $t_{eq} = 10\bar{\lambda}$, $\kappa = 20$ e $u_{sh} = 1$.

$De_\kappa = \kappa u_{sh} \bar{\lambda}$	ν	$\bar{\nu} = t_{eq} \nu$	$De_\nu = \bar{\nu} \bar{\lambda}$
2.0	20	20	2.000
1.5	20	15	1.125
1.0	20	10	0.500
0.5	20	5	0.125
2.0	100	100	10.000
1.5	100	75	5.625
1.0	100	50	2.500
0.5	100	25	0.625
2.0	500	500	50.000
1.5	500	375	28.125
1.0	500	250	12.500
0.5	500	125	3.125

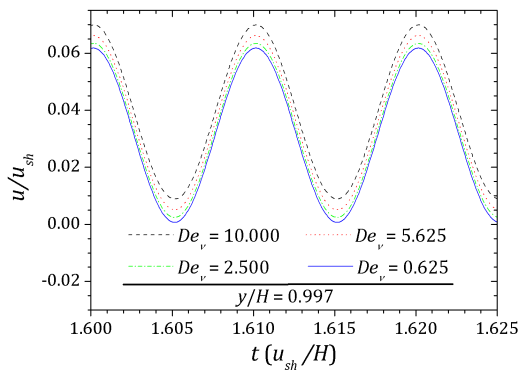
Nesta seção, iremos olhar para o transiente oscilatório da velocidade e tensão viscoelástica, tomando apenas um ponto dentro do canal, mas especificamente dentro da camada de Debye e, possibilitando assim uma melhor visualização da evolução temporal das oscilações das propriedades do fluido e, conseqüentemente maior compreensão do efeito observado.



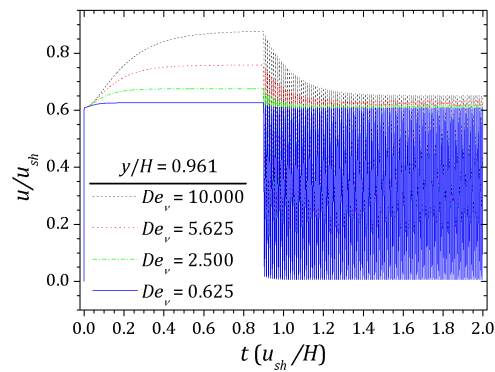
(a)



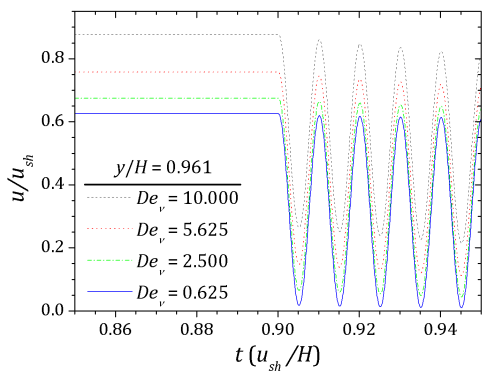
(b)



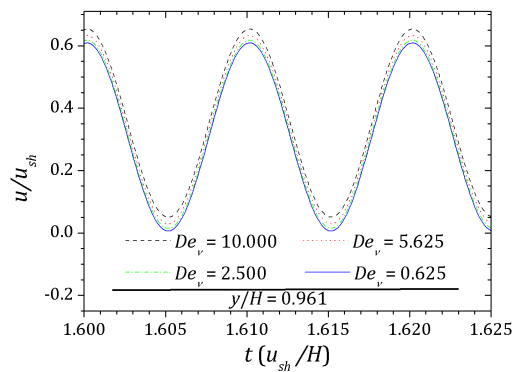
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 45 – Velocidade em função do tempo dentro da camada de Debye, obtida no ponto $y/H = 0.997$ mostrados nos gráficos a), b) e c) e, em $y/H = 0.961$ correspondente as imagens d), e) e f). Em a) e d) janela de tempo adimensional de 0 à 2, em b) e e) de 0.85 à 0.95 e em c) e f) de 1.600 à 1.625.

Primeiramente, vamos definir o tempo de equilíbrio em função do tempo de relaxação do fluido. Para garantir que as oscilações das propriedades permaneçam com amplitude de oscilação fixada, ou seja, o decaimento transiente pode ser desprezado a partir de $t = t_{eq}$. Assim, se tomarmos $t_{eq} = 10\bar{\lambda}$, onde $\bar{\lambda} = \lambda/s$, garantimos que essa condição seja satisfeita. A tabela 1 mostra a conversão do número de Deborah $De_{\kappa} = \kappa u_{sh} \bar{\lambda}$ para $De_v = \bar{v} \bar{\lambda}$, onde $\bar{v} = t_{eq} v$ é a frequência de referência proporcional ao tempo de equilíbrio e, v é a frequência adimensional aplicada.

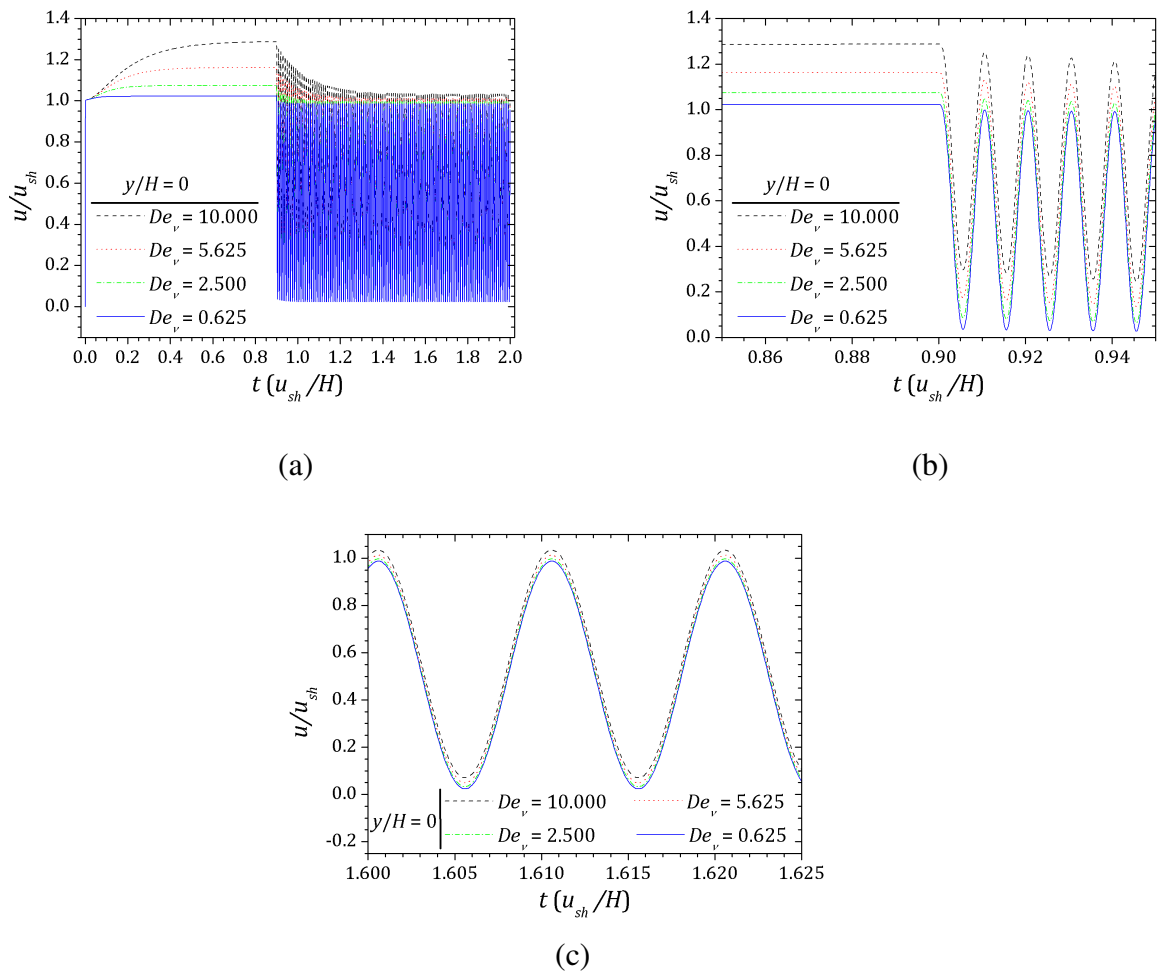
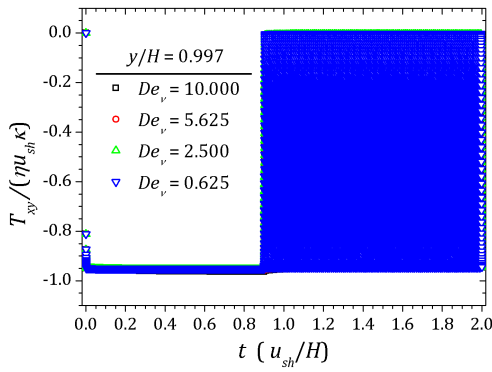
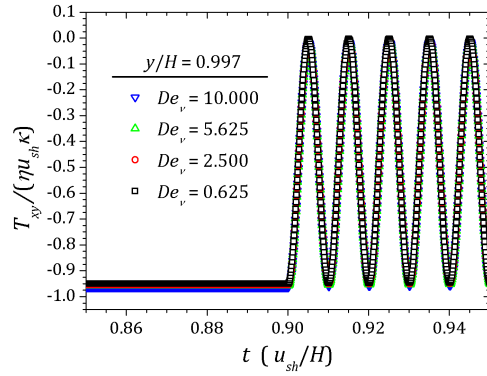


Figura 46 – Velocidade em função do tempo no centro do canal. Em a) janela de tempo adimensional de 0 à 2, em b) de 0.85 à 0.95 e em c) de 1.600 à 1.625.

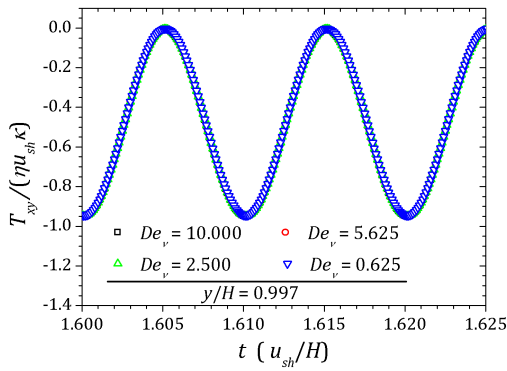
As figuras 45 e 46 mostram a dependência da velocidade com o tempo. Os gráficos mostrados em 45(a), 45(b) e 45(c) correspondem a observação pontual em $y/H = 0.997$. As curvas mostradas por 45(d), 45(e) e 45(f) correspondem ao ponto $y/H = 0.961$ e os resultados da figura 46 foram obtidos para $y/H = 0$, ou seja no centro do canal. A diferença entre esses três conjuntos de curvas está na amplitude da velocidade conforme características conhecidas do escoamento eletroosmótico, isto é, tende a zero próximo da parede do canal, é maior no ponto $y/H = 0.961$, o qual está mais próximo do platô formado no perfil de u , onde a amplitude é máxima. Todas as simulações foram realizadas com o tempo indo de $t = 0$ até $t = 2.0$. Com



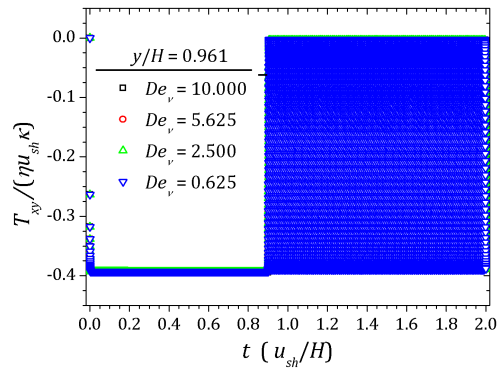
(a)



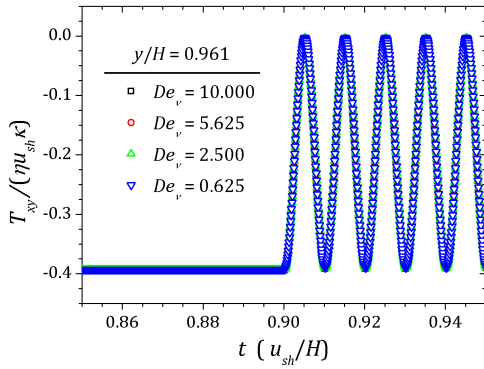
(b)



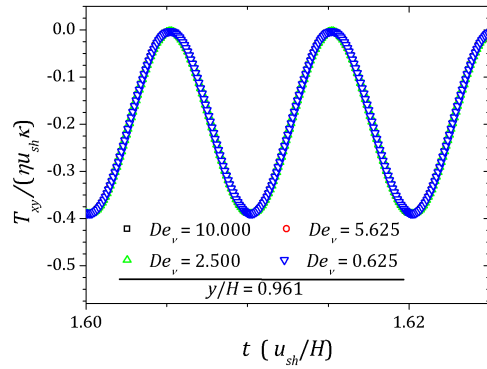
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 47 – Componente viscoelástico T_{xy} em função do tempo dentro da camada de Debye, no ponto $y/H = 0.997$ mostrado pelos gráficos a), b) e c) e, no ponto $y/H = 0.961$ correspondente as imagens d), e) e f). Em a) e d) janela de $t = 0$ à 2 , em b) e e) de 0.85 à 0.95 e em c) e f) de 1.600 à 1.625 .

o potencial oscilante desligado, de $t = 0$ à $t = t_{ss} = 0.9$ considera-se que o fluido encontra-se em seu estado estacionário e $\psi(t)$ é imediatamente ligado. A velocidade começa a oscilar e sua amplitude decai, como observado nas figuras 45(a), 45(b), 45(d), 45(e), 46(a) e 46(b). O decaimento da amplitude tende a se estabilizar conforme o tempo de simulação se aproxima do

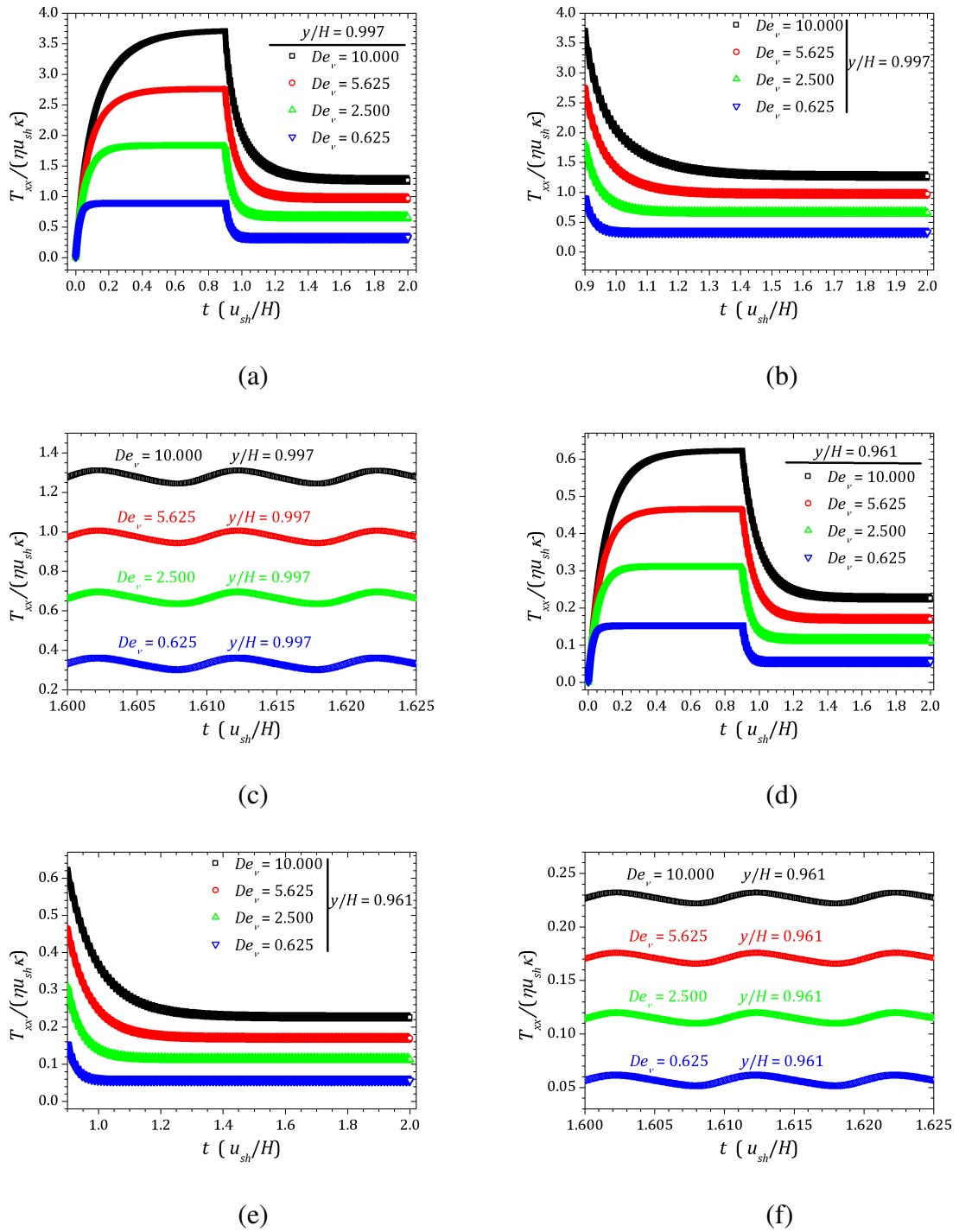


Figura 48 – Componente viscoelástico T_{xx} em função do tempo dentro da camada de Debye, no ponto $y/H = 0.997$ mostrado pelos gráficos a), b) e c) e, no ponto $y/H = 0.961$ correspondente as imagens d), e) e f). Em a) e d) janela de $t = 0$ à 2, em b) e e) de 0.9 à 2.0 e em c) e f) de 1.600 à 1.625.

tempo de equilíbrio, como mostram as figuras 45(c), 45(f) e 46(c).

Os resultados obtidos para o componente viscoelástico T_{xy} no ponto $y/H = 0.997$ são mostrados nas figuras 47(a), 47(b) e 47(c), e nas 47(d), 47(e) e 47(f) para o ponto $y/H = 0.961$. Ao contrário do perfil de velocidades, T_{xy} não depende do número de Deborah, resultando em

perfis iguais para diferentes De_v .

A figura 48 mostra o comportamento do componente viscoelástico T_{xx} nos pontos $y/H = 0.997$ e $y/H = 0.961$. Assim como foi observado para u e T_{xy} , o comportamento de T_{xx} difere pela amplitude nos dois pontos observados. No entanto, assim como u , a tensão normal depende do número de Deborah, levando a observação de diferentes amplitudes para De_v distintos. Além disso, a amplitude de oscilação decai até $t = t_{eq}$, e para $t > t_{eq}$ mantém-se fixada. Esse efeito pode ser observado na figura 48(b). Por exemplo, para a curva mais alta representada por quadrados, $De_v = 10.0$, o tempo de equilíbrio é $t_{eq} = 1$ e, portanto, como o potencial oscilante foi aplicado em $t = 0.9$, a partir de $t = 0.9 + 1.0 = 1.9$ o decaimento da amplitude de T_{xx} é desprezível. Neste sentido, para a curva representada por círculos, $De_v = 5.625$, temos que $t_{eq} = 0.75$, podendo ser desprezado o decaimento da amplitude de T_{xx} a partir de $t = 1.65$. Para as curvas com $De_v = 2.5$ e $De_v = 0.625$, esse decaimento pode ser desprezado a partir de $t = 1.4$ e $t = 1.15$ respectivamente.

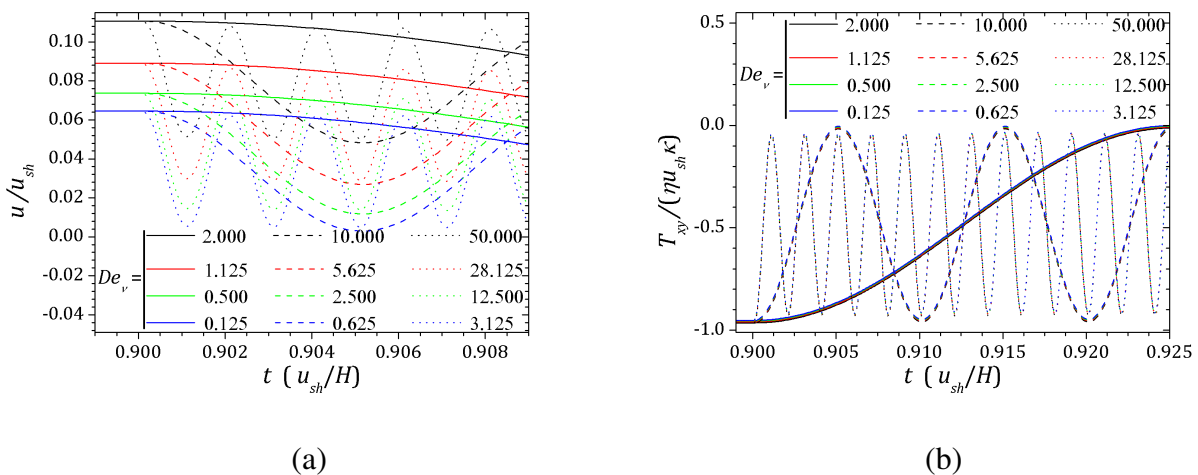


Figura 49 – Em a) velocidade e, em b) componente viscoelástico T_{xy} em função do tempo perto da parede no ponto $y/H = 0.997$.

O efeito da aplicação do potencial oscilante $\psi(t)$ com três frequências distintas é mostrado nas figuras 49 e 50. A figura 49(a) mostra a variação da velocidade com o tempo no ponto $y/H = 0.997$ para diferentes número de Deborah. Na janela de tempo mostrada é observado o instante em que o potencial oscilante é ligado e a amplitude da velocidade começa a decair. As oscilações mais rápidas, linhas pontilhadas, correspondem a frequência do potencial $\nu = 500$, a intermediária representada por linhas tracejadas a $\nu = 100$ e a mais lenta, linhas sólidas a $\nu = 20$. Todos esses mesmos parâmetros foram usados na obtenção dos componentes viscoelásticos T_{xx} e T_{xy} . O gráfico 49(b) mostra as oscilações com amplitude constante do componente T_{xy} , pois como visto anteriormente, T_{xy} não depende do número de Deborah. A figura 50(a) mostra o componente normal da tensão T_{xx} . A linha sólida possui a frequência mais baixa, $\nu = 20$, a linha tracejada corresponde a $\nu = 100$ e a linha pontilhada a $\nu = 500$. Olhando para a janela de $t = 0.90$ a $t = 0.95$ mostrada na figura 50(b), nota-se o início do decaimento da amplitude após

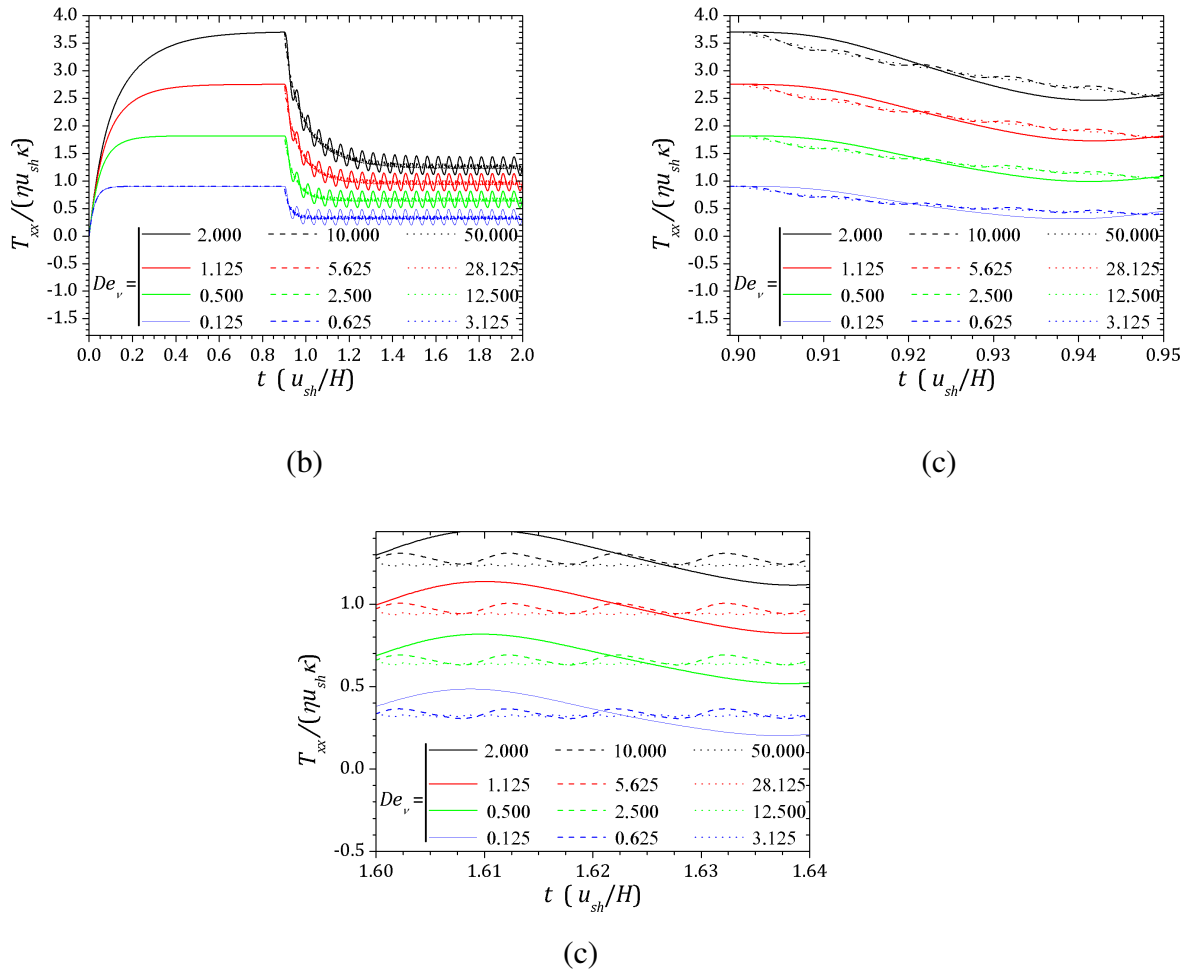


Figura 50 – T_{xx} mostrado na janela de a) $t = 0$ à $t = 2.0$, b) $t = 0.9$ à $t = 0.95$ e em c) de $t = 1.60$ à $t = 1.64$

a aplicação do potencial oscilante. É notável a dependência da amplitude de oscilação com a frequência aplicada, melhor visualizada na figura 50(c). As curvas pontilhadas indicam que para frequências muito altas, a amplitude de T_{xx} tende a ficar constante, isto é, as oscilações são tão rápidas que não dá tempo para que haja a resposta do fluido viscoelástico, ou seja, aparentemente existe uma inércia viscoelástica que não permite variações rápidas na tensão. No entanto, se a frequência de oscilação é baixa, as oscilações tornam-se observáveis, isto é, a amplitude de T_{xx} deve decair lentamente como indicam as linhas sólidas na figura 50(b) logo após a aplicação de $\psi(t)$ em $t = 0.9$, ou seja, no limite em que $\nu \rightarrow 0$, T_{xx} tende a permanecer no estado estacionário.

4.3 Escoamento eletrosmótico em um bocal

Canais com contrações e expansões geralmente são usados quando se tem interesse em realizar a mistura de uma determinada solução em um microcanal. A idéia aqui, é tentar simular o comportamento do fluido para essa geometria, principalmente no que diz respeito aos efeitos elétricos nas quinas. Ao invés de mostrarmos diretamente esses efeitos no canal com bocal,

primeiramente iremos esboçar o escoamento em uma contração simples, à título de ilustração do problema. Quando digo bocal, entenda-se um canal constituído de duas placas planas paralelas, com uma contração/expansão no meio dele.

4.3.1 Contração

O perfil de velocidade para o escoamento antes e logo após a contração, desconsiderando os efeitos elétricos nas quinas é mostrado na figura 51. Se houvesse uma expansão depois da contração (formando um bocal), a velocidade deveria ter o perfil idêntico ao anterior a contração. Simulações dos efeitos da quina na contração são mostrados nas figuras 52, 53, 54, 55 e 56, as quais dizem respeito a n^+ , n^- , ψ , p e u respectivamente. Estamos assumindo aqui, que perto das quinas uma perturbação deve ocorrer no escoamento eletroosmótico, e esta perturbação deve alterar o perfil de velocidade logo depois da contração. Para as concentrações, figuras 52 e 53, espera-se que ocorra uma diminuição das cargas devido a depleção delas nas quinas, fazendo com que ocorra um aumento do potencial ψ mostrado na figura 54, acarretando em alterações no gradiente de pressão e na velocidade, conforme figuras 55 e 56.

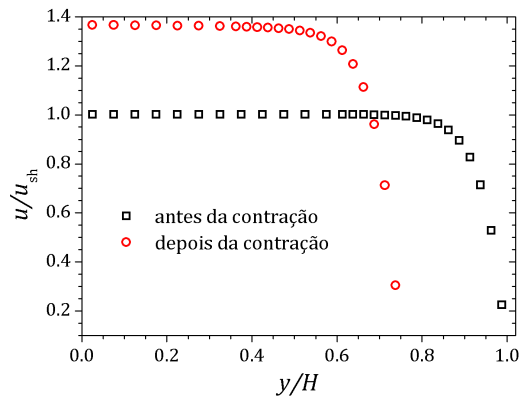
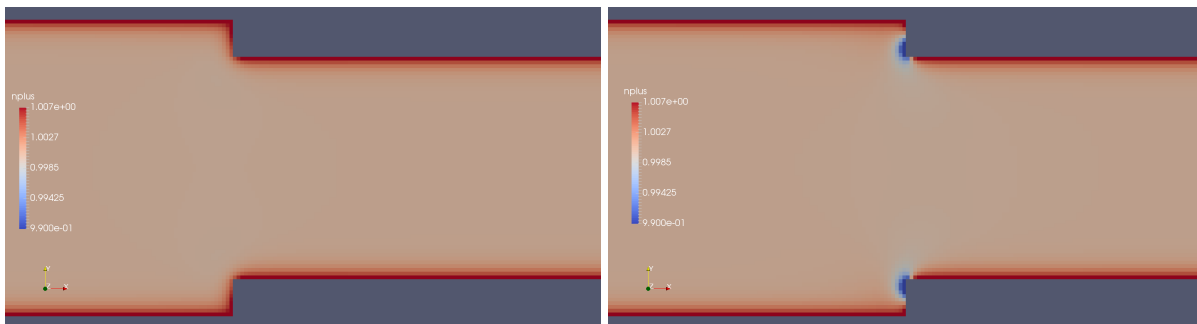


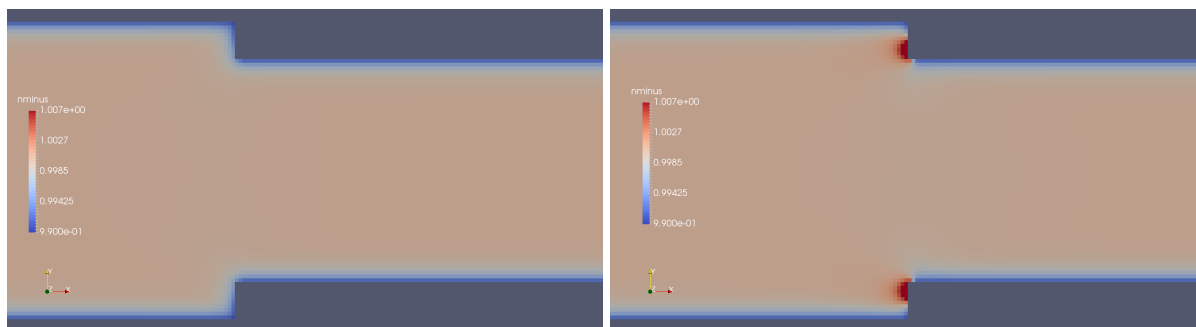
Figura 51 – Perfil de velocidade para escoamento em um canal com contração.



(a)

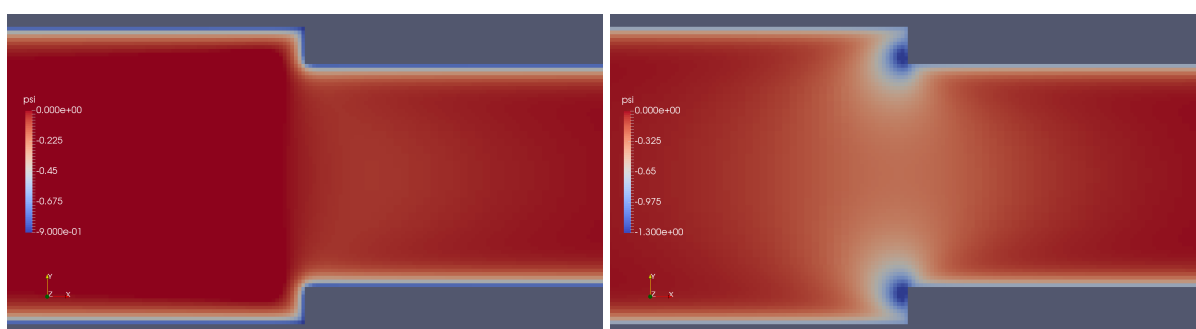
(b)

Figura 52 – Concentração n^+ . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$.



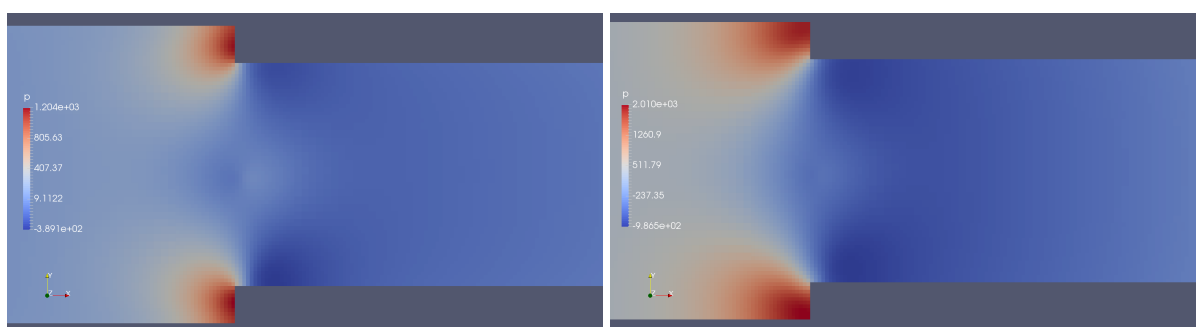
(a)

(b)

Figura 53 – Concentração n^- . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$.

(a)

(b)

Figura 54 – Potencial ψ . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$.

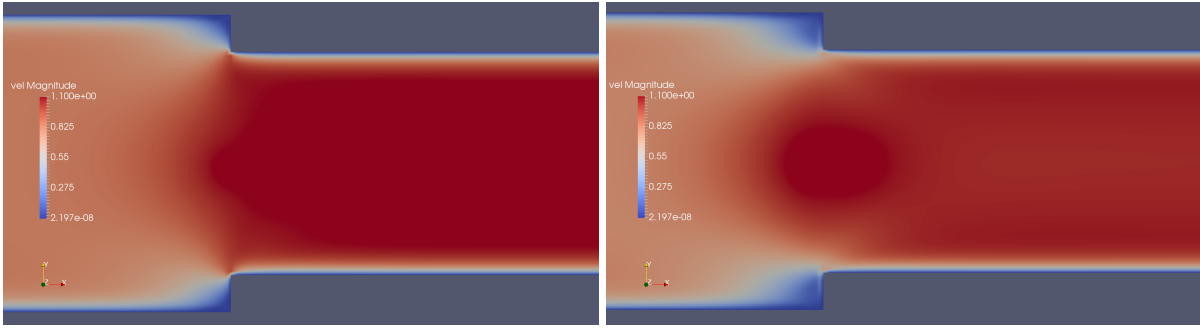
(a)

(b)

Figura 55 – Pressão p . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$.

4.3.2 Aproximação para os efeitos de quina

A descrição física desses efeitos que dizem respeito a movimentação das cargas perto das quinas é muito complexa, mas podemos tentar de alguma forma encontrar uma aproximação coerente com o fenômeno. Como constatado experimentalmente por (AE; YANG, 2008), perto das quinas há uma variação no potencial zeta nas paredes, ocasionando uma alteração na velocidade resultante naquela região. Aqui, inicialmente a proposta é causar uma perturbação externa no potencial, a qual vamos considerar que se deve a cargas pontuais situadas na região



(a) (b)
 Figura 56 – Velocidade u . Em a) $\omega = 0,002$ e em b) $\omega = 0,008$.

do bocal próximo às quinas, conforme figura 57. Vamos considerar que as cargas estão muito distantes uma da outra, ou seja desprezaremos a interação isolada entre as mesmas. Além disso consideramos que a interação das cargas com a parte do canal antes do bocal é desprezível, supondo assim que a concentração de íons neste local permanece estável, ou seja, as depleções começam a ocorrer quando o fluido chega dentro do bocal, na região com gradiente vermelho intenso na figura 57. Sabe-se da teoria do eletromagnetismo que o potencial $\varphi(x,y)$ devido a uma carga pontual elementar é dado por:

$$\varphi(x,y) = \frac{Ke}{\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}}, \quad (4.16)$$

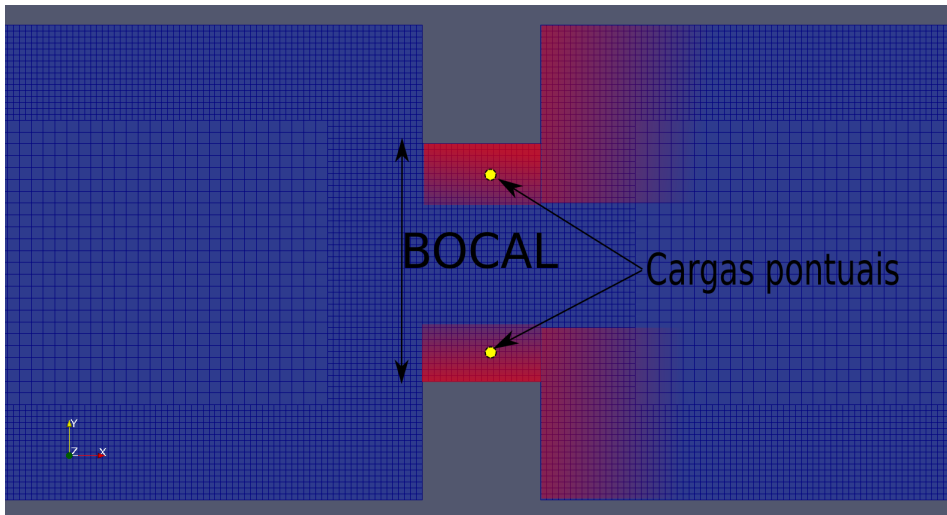


Figura 57 – Ilustração da proposta de perturbação do potencial ψ através de cargas pontuais próximo às quinas do bocal.

onde $P(x_0, y_0)$ é o ponto onde a carga está situada, K é a constante dielétrica do meio e e a carga elementar. Neste sentido, o potencial ψ_p nas paredes na região perto do bocal é a soma do potencial zeta de referência com o potencial devido a carga pontual, $\psi_p = \zeta_0 + \varphi$, e pode ser

escrito como:

$$\psi_p = \zeta_0 \left[1 + \frac{\omega}{\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}} \right], \quad (4.17)$$

onde definimos $\omega = KeH\nabla\phi/\zeta_0^2$ como sendo uma constante que depende também do gradiente de potencial externo $\nabla\phi$, ou seja, quanto maior $\nabla\phi$, maior é a velocidade eletrosmótica e conseqüentemente serão sentidos efeitos mais acentuados no potencial ψ_p perto do bocal. Por outro lado, a medida que a distância da carga aumenta em relação a parede do canal, o potencial devido a ela diminui e $\psi_p \rightarrow \zeta_0$ na expressão (4.17). Fazendo $\psi_p = \psi_p^* \zeta_0$, $x = x^*H$ e $\omega = \omega^*H$, na forma adimensional, temos:

$$\psi_p^* = 1 + \frac{\omega^*}{\sqrt{(x^* - x_0^*)^2 + (y^* - y_0^*)^2}}. \quad (4.18)$$

De acordo com (PROBSTEIN, 2005), o potencial nas quinas perto da parede do bocal tem uma dependência com o inverso da raiz quadrada da concentração, $\psi_p \sim n^{-1/2}$. Neste sentido, podemos dizer que a concentração depende do inverso do quadrado do potencial, o que nos leva a escrever a seguinte relação:

$$n_p = n_{bc} \frac{\zeta_0^2}{\psi_p^2}, \quad (4.19)$$

onde denotamos por n_{bc} o valor da concentração na parede do canal sem considerar os efeitos de quina. Quando ψ_p tende ao potencial zeta da parede, os efeitos de quina são desprezíveis e a distribuição da concentração iônica é dada por $n_p = n_{bc}$. Por outro lado, se ψ_p aumenta devido aos efeitos de quina, a concentração iônica diminui, representando assim a depleção das cargas naquela região. Explicitando ψ_p e escrevendo a expressão (4.19) na forma adimensional, temos:

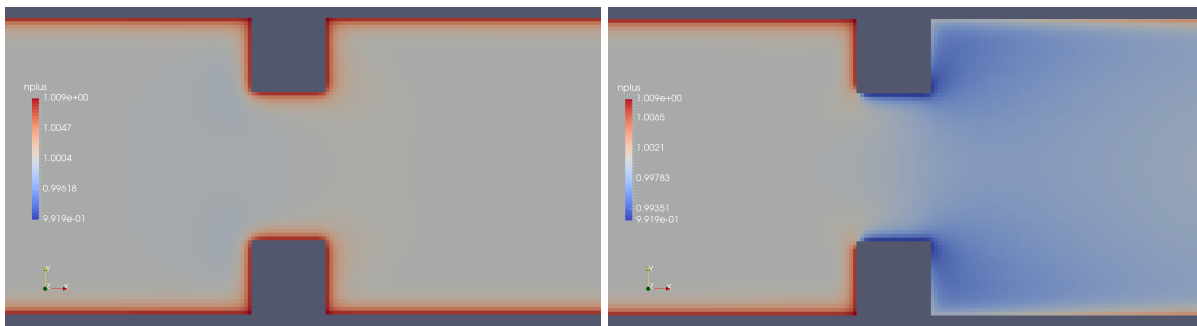
$$n_p^* = \frac{n_{bc}^*}{\left(1 + \frac{\omega^*}{\sqrt{(x^* - x_0^*)^2 + (y^* - y_0^*)^2}} \right)^2}. \quad (4.20)$$

Com esta proposta, as equações (4.18) e (4.20) foram implementadas nos contornos perto das paredes do bocal. O restante das condições de contorno para as paredes, entrada e saída, são idênticas as usadas no canal de placas planas paralelas mostradas nas seções 4.1.1 e 4.1.2.

4.3.3 Resultados para a contração/expansão

Os resultados do efeito da perturbação causada pela imposição dessa carga pontual no centro do bocal em um ponto fixo, são mostrados nas figuras 58-63. As figuras 58 e 59 mostram

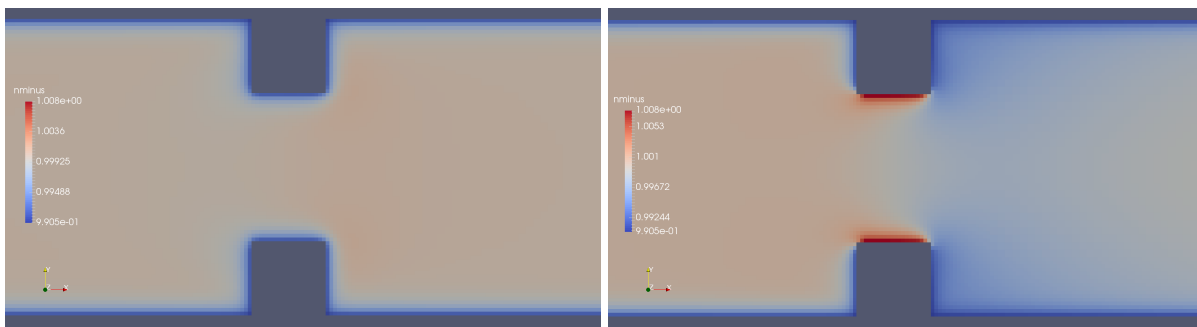
as distribuições das concentrações iônicas n^+ e n^- respectivamente, em (a) para $\omega^* = 0,002$ onde quase não se nota os efeitos elétricos de quina e em (b) para $\omega^* = 0,008$ onde nota-se variação acentuada das concentrações próximo ao bocal. Essas alterações estão diretamente ligadas ao gradiente de potencial, que aumenta conforme o valor ω^* cresce, como mostrado na figura 60. Finalmente os efeitos elétricos nas quinas causam alteração pressão e na velocidade perto do bocal conforme figuras 61 e 62 . Aumentado a velocidade eletrosmótica, ou seja, o gradiente de potencial externo, o fluxo de fluido tende a ficar mais próximo do centro do canal, como mostra a figura 63, contribuindo por exemplo no caso da mistura de fluidos, para que isso ocorra de forma mais eficiente, conforme mostra a figura 64.



(a)

(b)

Figura 58 – Concentração n^+ . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$.

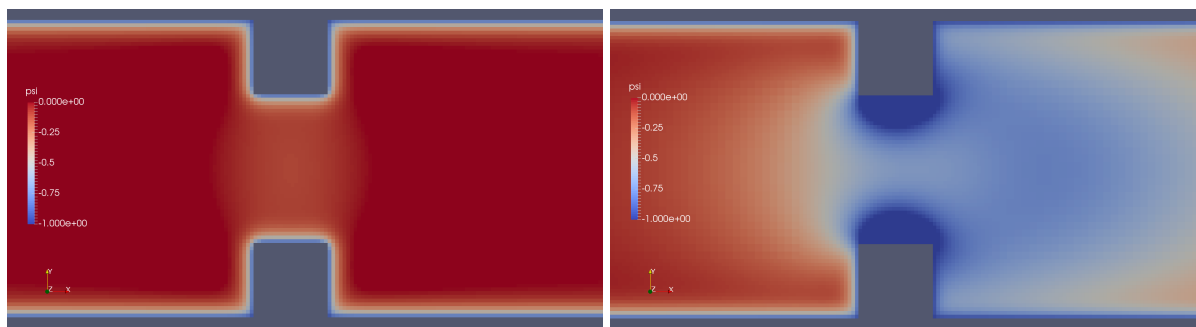


(a)

(b)

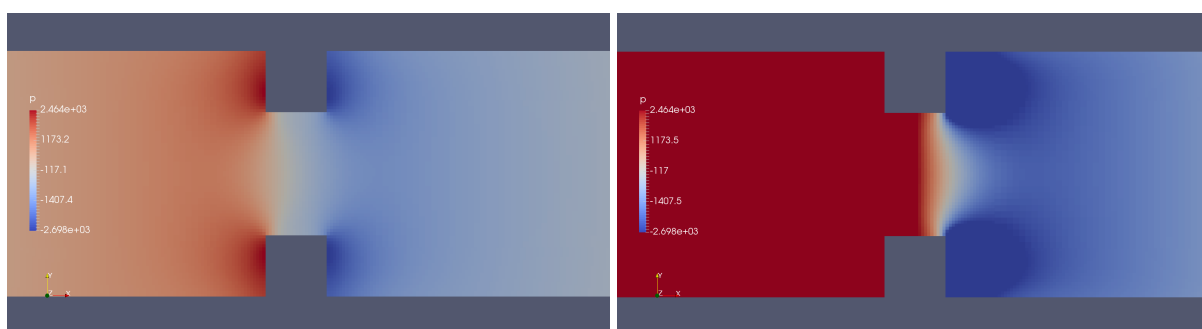
Figura 59 – Concentração n^- . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$.

A figura 65 mostra as curvas do potencial ψ em função da perturbação aplicada. Para $\omega^* = 0$, não existe perturbação e as curvas do potencial representadas por quadrados é similar a curva obtida para o canal de placas paralelas. Impondo $\omega^* = 0.001$, curvas representadas por círculos, nota-se um aumento no valor absoluto de ψ no centro do bocal e logo após a expansão ψ se aproxima de zero novamente, indicando a diminuição do efeito da perturbação fora do bocal. Aumentando o parâmetro de perturbação, $\omega^* = 0.003$, curvas representadas por triângulos apontando para cima, nota-se um aumento ainda mais acentuado no potencial dentro da contração e depois da expansão do canal. Para $\omega^* = 0.006$, curvas representadas por triângulos apontando para baixo, o efeito da perturbação faz com que o potencial tenha aproximadamente o mesmo



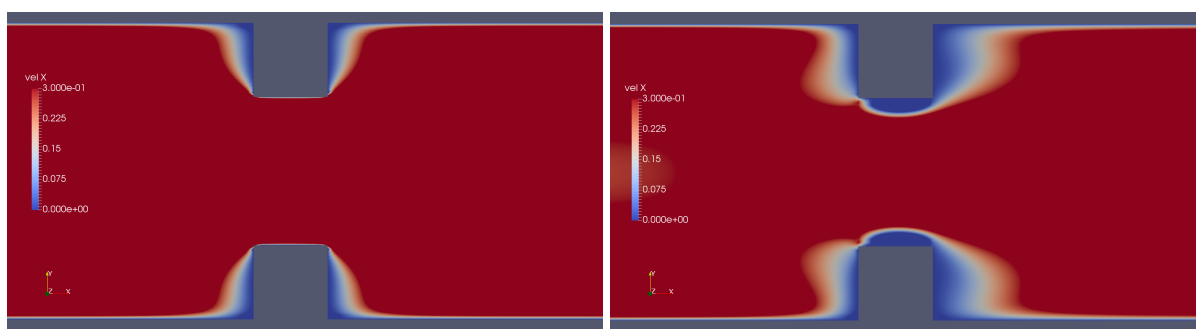
(a)

(b)

Figura 60 – Potencial ψ . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$.

(a)

(b)

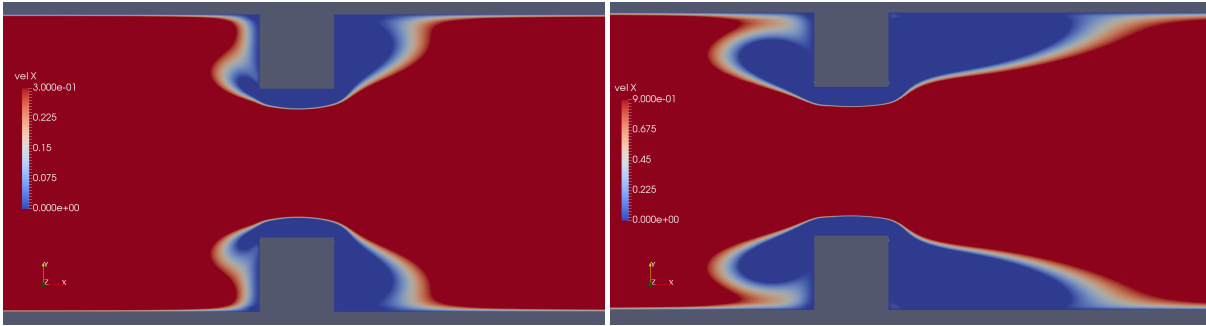
Figura 61 – Pressão p . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$.

(a)

(b)

Figura 62 – Velocidade u . Em a) $\omega^* = 0,002$ e em b) $\omega^* = 0,008$.

valor no platô dentro e depois da contração. O comportamento das curvas de concentração iônica é mostrado na figura 66(a). Para $\omega^* = 0$, curvas representadas por quadrados, o comportamento é similar ao obtido no canal de placas paralelas. Se $\omega^* = 0.001$, curvas representadas por círculos, observa-se uma diminuição na concentração n^+ e um aumento de n^- dentro da contração e, esse efeito é menor após a expansão do canal. Quando $\omega^* = 0.003$ a concentração n^+ diminui enquanto que n^- aumenta ainda mais e as curvas invertem de posição em relação a concentração de referência n_0 , como mostra a figura 66(b). Esse efeito é ainda mais acentuado para $\omega^* = 0.006$. Desta forma, o acoplamento entre o potencial e as concentrações é relacionado nas figuras 65



(a)

(b)

Figura 63 – Velocidade u . Em a) $\omega^* = 0,016$ e em b) $\omega^* = 0,032$.

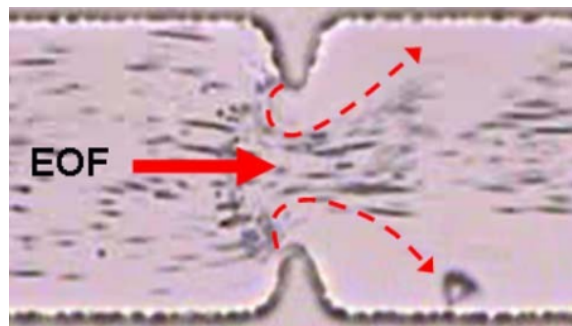


Figura 64 – Figura extraída de (AE; YANG, 2008).

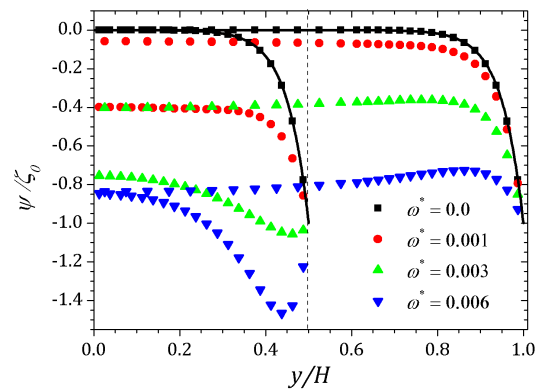


Figura 65

e 66, indicando que a variação da concentração afetada pelo aumento do potencial devido a perturbação. É natural esperar que a perturbação imposta no bocal cause instabilidades numéricas na concentração iônica e no potencial ψ , pois estamos forçando uma distribuição de cargas que não satisfazem as condições problema inicial, mas se a perturbação for pequena o suficiente, o método numérico é estável. Os perfis de velocidade são afetados tanto pela perturbação quanto pela variação da pressão na contração dentro do bocal. As curvas foram obtidas no centro da contração e a Fig. 67 mostra os perfis newtoniano e viscoelástico. As curvas representadas por quadrados correspondem a $\omega^* = 0$, ou seja, variações do perfil ocorrem devido a variação

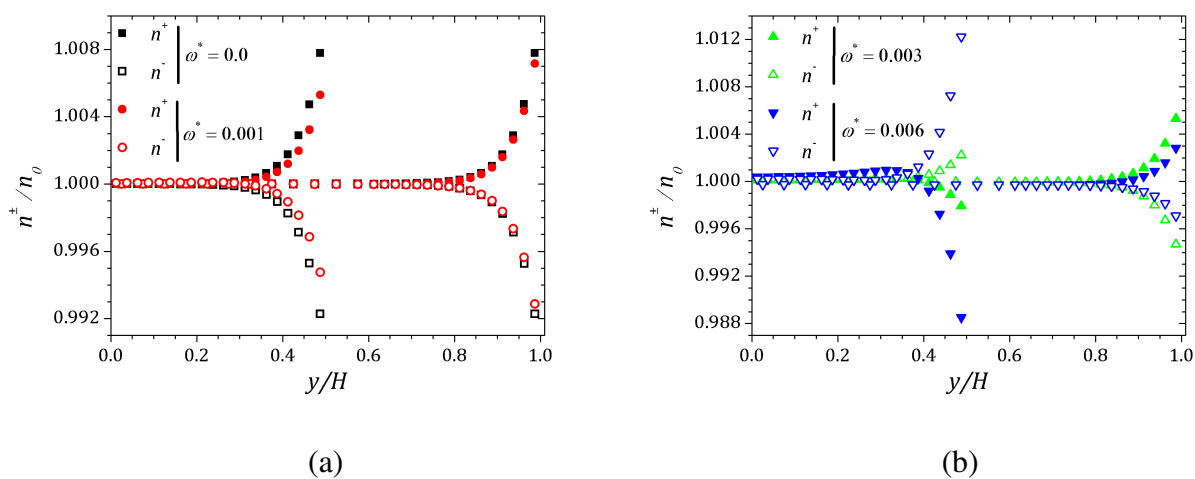


Figura 66

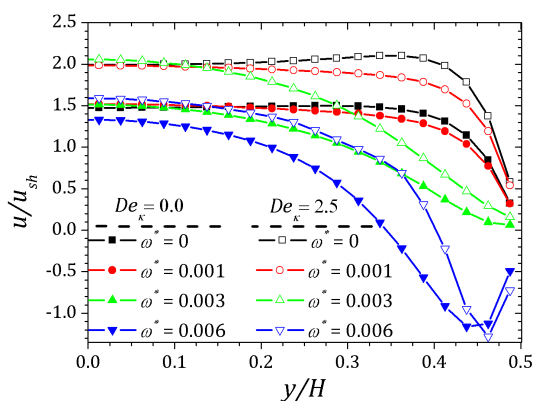


Figura 67

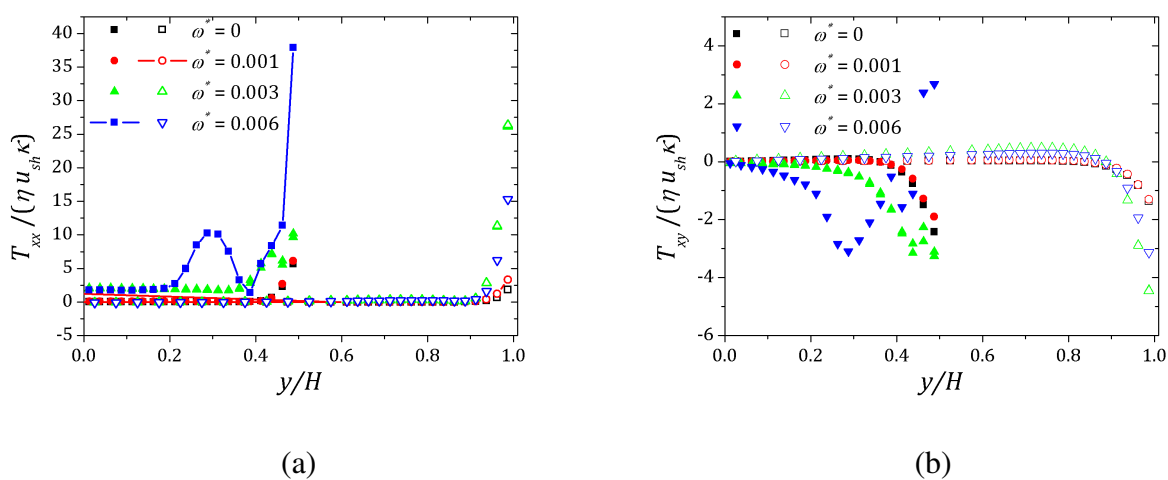


Figura 68

da pressão na contração, e tende a formar uma crista antes da velocidade cair e ser nula na

parede, onde os quadrados cheios correspondem a velocidade para o fluido newtoniano. Esse efeito é mais acentuado para o fluido viscoelástico, representado com pode ser visto na curva representada por quadrados vazios. Aumentando o efeito da perturbação, $\omega^* = 0.001$, as cristas são suprimidas como mostra as curvas representadas por círculos cheios e vazios correspondentes ao fluido newtoniano e viscoelástico respectivamente. Se $\omega^* = 0.003$ o perfil forma uma crista no centro do canal e a medida que aumenta a distância do centro a velocidade tende a zero rapidamente, como mostra as curvas com triângulos apontando para cima. Esse efeito é similar ao da aplicação de um gradiente de pressão no canal, como visto na seção 4.1.4.2. Finalmente, se $\omega^* = 0.006$, nota-se a existência de velocidades negativas perto da parede, curvas com triângulos apontando para baixo. O comportamento do tensor polimérico, figura 68, corrobora com os resultados obtidos na seção 4.1.4.2 no sentido de mostrarem sofrer o efeito similar ao de aplicar um gradiente de pressão negativo assim que o fluido entra na contração, representado pelos pontos cheios e um gradiente de pressão positivo após a expansão do canal representados pelos pontos vazios.

É notável que a imposição da perturbação causa instabilidades na solução, como pode ser visto nas curvas de concentrações e de potencial obtidas. Até que é esperado, pois estamos impondo condições desconhecidas para o escoamento. Uma das propostas para estudos futuros é fazer simulações com um bocal em formato triangular conforme mostra malha da figura 69 gerada usando a HiG-Flow. Além disso, variações da proposta feita aqui podem ser realizadas, como por exemplo, ao invés de considerar uma carga pontual pode-se levar em conta uma superfície carregada, ou mesmo uma nova distribuição de cargas no bocal. Também deve-se implementar outras condições de contorno para a concentração iônica nas paredes, tudo isso afim de tentar melhorar os resultados obtidos, bem como a conexão numérica-teórica-experimental.

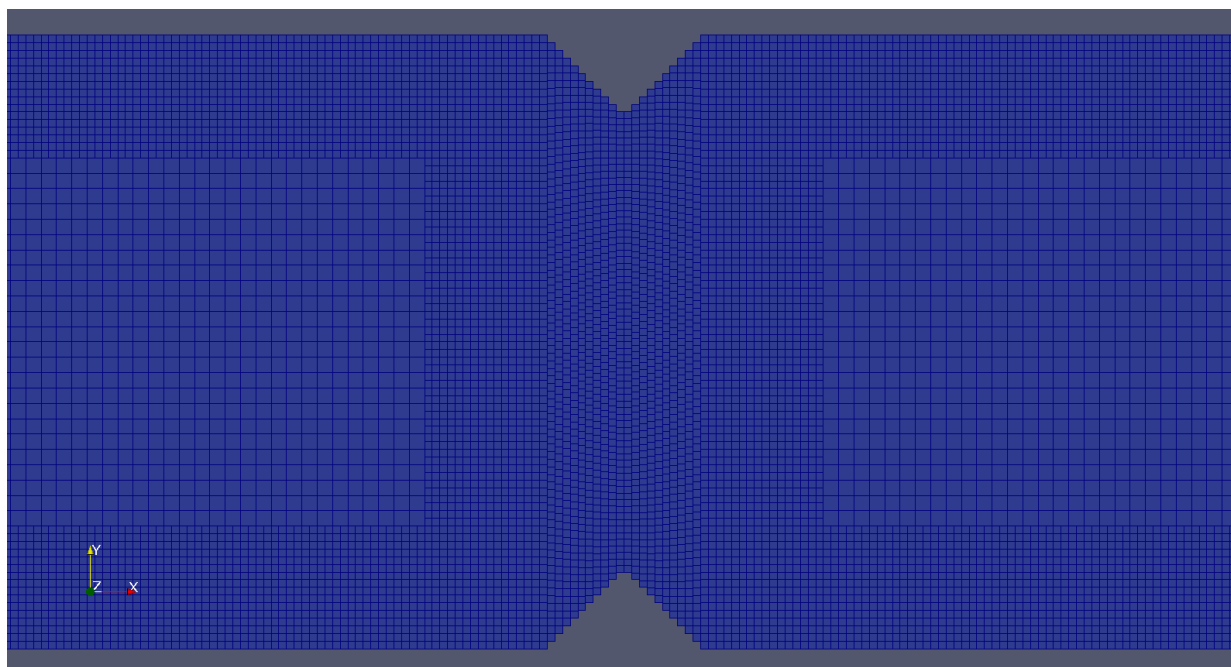


Figura 69 – Uma das propostas para simulações numéricas futuras.

CONCLUSÃO

Foram estudados escoamentos eletrosmóticos entre placas planas e em um bocal. Foram utilizados os modelos de Poisson-Nernst-Planck e de Debye-Hückel. No que diz respeito as simulações nos canais de placas planas paralelas, este foi o início da resolução dos problemas eletrosmóticos que podem ser feitas com a HiG-Flow. Como o código ainda está sendo desenvolvido, fizemos todas as verificações dos resultados obtidos. Além dos escoamentos newtonianos, o modelo viscoelástico de PTT fora estudado e, existe com certeza a possibilidade do estudo de vários outros modelos e, espera-se que a partir destes estudos, novas fronteiras sejam rompidas no que diz respeito aos escoamentos eletrosmóticos. Para as simulações realizadas com o potencial dependente do tempo, foi verificado que o efeito de $\phi(t)$ é o mesmo causado por $\psi(t)$. Além disso, os resultados mostraram que a velocidade e a tensão de cisalhamento evoluem em sincronismo com a oscilação do potencial após um certo período de sua aplicação, enquanto que a tensão normal mostra um atraso na resposta às oscilações de $\psi(t)$, e a magnitude deste componente diminui até chegar a um valor de equilíbrio que é igual a sua média temporal **calculada levando em conta apenas a variação do potencial oscilante.**

Nas simulações realizados no bocal, tentamos reproduzir os vórtices formados próximos as quinas na contração. Entendemos que para tanto, a proposta feita é apenas uma idéia para tentar descrever o problema. Esperamos que a proposta da aproximação numérica no bocal abra uma gama de possibilidades de novas idéias para tentar melhorar as simulações desses escoamentos, atraindo e integrando diversos pesquisadores de maneira a contribuir no aperfeiçoamento das técnicas numéricas para a descrição do fenômeno físico.

REFERÊNCIAS

- AE, C.; YANG, R.-J. Vortex generation in electroosmotic flow passing through sharp corners. *v. 5*, 12 2008. Citado nas páginas 21, 57 e 62.
- AFONSO, A.; ALVES, M.; PINHO, F. Analytical solution of mixed electro-osmotic/pressure driven flows of viscoelastic fluids in microchannels. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, *v. 159*, n. 1-3, p. 50–63, 2009. Citado nas páginas 9, 28 e 30.
- AFONSO, A.; PINHO, F.; ALVES, M. The kernel-conformation constitutive laws. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, *v. 167*, p. 30–37, 2012. Citado nas páginas 6 e 8.
- ALVES, M.; OLIVEIRA, P.; PINHO, F. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. **International journal for numerical methods in fluids**, Wiley Online Library, *v. 41*, n. 1, p. 47–75, 2003. Citado na página 16.
- ARCOS, J.; MÉNDEZ, F.; BAUTISTA, E.; BAUTISTA, O. Dispersion coefficient in an electroosmotic flow of a viscoelastic fluid through a microchannel with a slowly varying wall zeta potential. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, *v. 839*, p. 348–386, 2018. Citado na página 10.
- BALAY, S.; ABHYANKAR, S.; ADAMS, M. F.; BROWN, J.; BRUNE, P.; BUSCHELMAN, K.; DALCIN, L.; EIJKHOUT, V.; GROPP, W. D.; KAUSHIK, D.; KNEPLEY, M. G.; MCINNES, L. C.; RUPP, K.; SMITH, B. F.; ZAMPINI, S.; ZHANG, H.; ZHANG, H. **PETSc Web page**. 2017. Disponível em: <<http://www.mcs.anl.gov/petsc>>. Citado na página 3.
- BIANCHI, F.; FERRIGNO, R.; GIRAULT, H. Finite element simulation of an electroosmotic-driven flow division at a t-junction of microscale dimensions. **Analytical Chemistry**, ACS Publications, *v. 72*, n. 9, p. 1987–1993, 2000. Citado na página 9.
- BRUUS, H. **Theoretical microfluidics. Oxford master series in condensed matter physics**. [S.l.]: Oxford University Press Oxford, UK, 2008. Citado nas páginas 2 e 9.
- BURGREEN, D.; NAKACHE, F. Electrokinetic flow in ultrafine capillary slits1. **The Journal of Physical Chemistry**, ACS Publications, *v. 68*, n. 5, p. 1084–1091, 1964. Citado na página 9.
- CASTELO, A.; AFONSO, A.; SOUZA, W. A finite difference method in hierarquical grids for viscoelastic fluid flow simulations. **In preparation**, 2018. Citado nas páginas 3 e 8.
- CASTELO, A. a. Hig-tree. **Journal of**, publis, vol, p. page, 2017. Citado nas páginas 2 e 15.
- CHABINYC, M. L.; CHIU, D. T.; MCDONALD, J. C.; STROOCK, A. D.; CHRISTIAN, J. F.; KARGER, A. M.; WHITESIDES, G. M. An integrated fluorescence detection system in poly (dimethylsiloxane) for microfluidic applications. **Analytical Chemistry**, ACS Publications, *v. 73*, n. 18, p. 4491–4498, 2001. Citado na página 8.
- CHAPMAN, D. L. Li. a contribution to the theory of electrocapillarity. **The London, Edinburgh, and Dublin philosophical magazine and journal of science**, Taylor & Francis, *v. 25*, n. 148, p. 475–481, 1913. Citado na página 9.

- DEBYE, P.; HÜCKEL, E. De la theorie des electrolytes. i. abaissement du point de congelation et phenomenes associes. **Physikalische Zeitschrift**, v. 24, n. 9, p. 185–206, 1923. Citado na página 9.
- DHINAKARAN, S.; AFONSO, A.; ALVES, M.; PINHO, F. Steady viscoelastic fluid flow between parallel plates under electro-osmotic forces: Phan-thien–tanner model. **Journal of colloid and interface science**, Elsevier, v. 344, n. 2, p. 513–520, 2010. Citado na página 28.
- DOHERTY, E. A.; MEAGHER, R. J.; ALBARGHOUTH, M. N.; BARRON, A. E. Microchannel wall coatings for protein separations by capillary and chip electrophoresis. **Electrophoresis**, Wiley Online Library, v. 24, n. 1-2, p. 34–54, 2003. Citado na página 8.
- DUTTA, P.; BESKOK, A. Analytical solution of combined electroosmotic/pressure driven flows in two-dimensional straight channels: finite debye layer effects. **Analytical chemistry**, ACS Publications, v. 73, n. 9, p. 1979–1986, 2001. Citado na página 9.
- FATTAL, R.; KUPFERMAN, R. Constitutive laws for the matrix-logarithm of the conformation tensor. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 123, n. 2, p. 281–285, 2004. Citado nas páginas 6, 7 e 8.
- _____. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high weissenberg number using the log-conformation representation. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 126, n. 1, p. 23–37, 2005. Citado nas páginas 6 e 8.
- FERZIGER J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. Second. [S.l.]: Springer, 1999. Citado na página 5.
- FINKEL, R. A.; BENTLEY, J. L. Quad trees a data structure for retrieval on composite keys. **Acta informatica**, Springer, v. 4, n. 1, p. 1–9, 1974. Citado na página 2.
- FIXMAN, M. The poisson–boltzmann equation and its application to polyelectrolytes. **The Journal of Chemical Physics**, AIP, v. 70, n. 11, p. 4995–5005, 1979. Citado na página 13.
- FORTUNA, A. d. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos**. Second. [S.l.]: Edusp, 2012. Citado na página 5.
- GOUY, M. Sur la constitution de la charge électrique à la surface d’un électrolyte. **J. Phys. Theor. Appl.**, v. 9, n. 1, p. 457–468, 1910. Citado na página 9.
- HELMHOLTZ, H. V. Studien über electriche grenzsichten. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 243, n. 7, p. 337–382, 1879. Citado na página 9.
- LEE, W. G.; KIM, Y.-G.; CHUNG, B. G.; DEMIRCI, U.; KHADEMHOSEINI, A. Nano/microfluidics for diagnosis of infectious diseases in developing countries. **Advanced Drug Delivery Reviews**, v. 62, n. 4?5, p. 449 – 457, 2010. ISSN 0169-409X. Nanotechnology Solutions for Infectious Diseases in Developing Nations. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169409X09003573>>. Citado na página 2.
- LIN, J.; FU, L.-M.; YANG, R.-J. Numerical simulation of electrokinetic focusing in microfluidic chips. **Journal of Micromechanics and Microengineering**, IOP Publishing, v. 12, n. 6, p. 955, 2002. Citado na página 9.

MARRE, S.; JENSEN, K. F. Synthesis of micro and nanostructures in microfluidic systems. **Chem. Soc. Rev.**, The Royal Society of Chemistry, v. 39, p. 1183–1202, 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/B821324K>>. Citado na página 2.

NAHAPETIAN, T. G. **Characterization and Optimization of the Smartphone Response to Paper Microfluidic Biosensor Assay Under UV Light Source**. Dissertação (Mestrado), 2015. Citado na página 2.

PARK, H.; LEE, W. Helmholtz–smoluchowski velocity for viscoelastic electroosmotic flows. **Journal of colloid and interface science**, Elsevier, v. 317, n. 2, p. 631–636, 2008. Citado na página 9.

PATANKAR, N. A.; HU, H. H. Numerical simulation of electroosmotic flow. **Analytical Chemistry**, ACS Publications, v. 70, n. 9, p. 1870–1881, 1998. Citado na página 9.

PENG, R.; LI, D. Effects of ionic concentration gradient on electroosmotic flow mixing in a microchannel. **Journal of colloid and interface science**, Elsevier, v. 440, p. 126–132, 2015. Citado na página 10.

PERSAT, A.; SUSS, M. E.; SANTIAGO, J. G. Basic principles of electrolyte chemistry for microfluidic electrokinetics. part ii: Coupling between ion mobility, electrolysis, and acid-base equilibria. **Lab Chip**, The Royal Society of Chemistry, v. 9, p. 2454–2469, 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/B906468K>>. Citado na página 2.

PHAN-THIEN, N. A nonlinear network viscoelastic model. **Journal of Rheology**, SOR, v. 22, n. 3, p. 259–283, 1978. Citado na página 7.

PROBSTEIN, R. F. **Physicochemical hydrodynamics: an introduction**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2005. Citado na página 59.

QUARTERONI, A.; SALERI, F.; VENEZIANI, A. Factorization methods for the numerical approximation of navier–stokes equations. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 188, n. 1-3, p. 505–526, 2000. Citado na página 18.

REUSS, F. F. Sur un nouvel effet de l'électricité galvanique. **Mem. Soc. Imp. Natur. Moscou**, v. 2, p. 327–337, 1809. Citado na página 9.

RICE, C.; WHITEHEAD, R. Electrokinetic flow in a narrow cylindrical capillary. **The Journal of Physical Chemistry**, ACS Publications, v. 69, n. 11, p. 4017–4024, 1965. Citado na página 9.

SMOLUCHOWSKI, M. v. Versuch einer mathematischen theorie der koagulationskinetik kolloider lösungen. **Zeitschrift für physikalische Chemie**, De Gruyter Oldenbourg, v. 92, n. 1, p. 129–168, 1918. Citado na página 9.

SONG, L.; YU, L.; ZHOU, Y.; ANTAO, A. R.; PRABHAKARAN, R. A.; XUAN, X. Electrokinetic instability in microchannel ferrofluid/water co-flows. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 7, p. 46510, 2017. Citado na página 10.

SOUSA, F. S.; OISHI, C. M.; BUSCAGLIA, G. C. Spurious transients of projection methods in microflow simulations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 285, p. 659–693, 2015. Citado na página 18.

TANG, G.; LI, X.; HE, Y.; TAO, W. Electroosmotic flow of non-newtonian fluid in microchannels. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 157, n. 1-2, p. 133–137, 2009. Citado na página 9.

THIEN, N. P.; TANNER, R. I. A new constitutive equation derived from network theory. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 2, n. 4, p. 353–365, 1977. Citado na página 7.

WHITESIDES, G. M. The origins and the future of microfluidics. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 442, n. 7101, p. 368–373, 2006. Citado na página 2.

YAGER, P.; EDWARDS, T.; FU, E.; ; HELTON, K.; NELSON, K.; TAM, M. R.; WEIGL, B. H. Microfluidic diagnostic technologies for global public health. **Nature**, 2006. Citado na página 2.

YANG, C.; LI, D. Analysis of electrokinetic effects on the liquid flow in rectangular microchannels. **Colloids and surfaces A: physicochemical and engineering aspects**, Elsevier, v. 143, n. 2-3, p. 339–353, 1998. Citado na página 9.

YANG, C.; WONG, T. N.; OOI, K. T. *et al.* Dynamic aspects of electroosmotic flow in rectangular microchannels. **International Journal of Engineering Science**, Elsevier, v. 42, n. 13-14, p. 1459–1481, 2004. Citado na página 30.

ZHAO, C.; ZHOLKOVSKIJ, E.; MASLIYAH, J. H.; YANG, C. Analysis of electroosmotic flow of power-law fluids in a slit microchannel. **Journal of colloid and interface science**, Elsevier, v. 326, n. 2, p. 503–510, 2008. Citado na página 9.

SIMULAÇÃO COM O HiG-FLOW

Todos os resultados foram obtidos através do sistema HiG-Flow, que foi desenvolvido pelo pesquisador da universidade de São Paulo, o professor Antônio Castelo Filho. Esse sistema é compartimentado e possui diferentes módulos de solução para escoamentos de fluidos, permitindo assim a implementação de diferentes técnicas para a solução do problema desejado. Já existem módulos que resolve a equação de movimento newtoniano e não-newtoniano com alguns modelos constitutivos, como o Oldroyd-B, Giesekus e PTT. Além disso, a HiG-Flow permite realizar simulações em qualquer dimensão, onde o usuário faz a escolha em tempo de compilação. Os arquivos de entrada permite ao usuário escolher entre as técnicas numéricas implementadas, além de entrar com os parâmetros necessários para a simulação. Para os estudos realizados neste trabalho, foi desenvolvido o módulo que diz respeito à escoamentos eletrosmóticos e, é claro, com relevante colaborações do professor Castelo e também do professor Alexandre M. Afonso da universidade do Porto.

As opções disponíveis atualmente na HiG-Flow que possibilita a simulação do escoamento eletrosmótico serão abordadas neste apêndice.

A.1 Compilação

Primeiramente, deve-se escolher a dimensão e os módulos a serem usados na simulação, isso em tempo de compilação. As escolhas dos módulos a serem compiladas pode ser feita no arquivo "Makefile". Para simulação de escoamentos eletrosmóticos de fluidos viscoelásticos, deve-se compilar o módulo *newtoniano* que é base para todos os tipos de problemas e o módulo *eletrosmótico viscoelástico*. A dimensão desejada para a simulação é escolhida diretamente no terminal de comando em tempo de compilação. Por exemplo, para simulações bidimensionais, basta realizar o comando "make DIM=2" e todos os módulos incluídos pelo usuário serão compilados.

A.2 Dados de entrada

Realizada a compilação da HiG-Flow, o usuário deve escolher a técnica numérica através dos arquivos de entrada. Arquivos:

".load.contr" - este arquivo tem 7 entradas e tem que ser lido para todos os tipos de escoamentos que se deseja simular. Para explicar o conteúdo de cada entrada, a primeira coluna da tabela 2 dá a descrição do controle e a segunda coluna lista as escolhas disponíveis:

Tabela 2 – Arquivo de entrada dos controladores gerais do escoamento ".load.contr" .

Nome do controlador-Descrição	valor de entrada = Descrição
"projtype"-Método da projeção:	0 = não incremental, 1 = incremental.
"flowtype"-Escoamento:	0 = newtoniano, 1 = newtoniano generalizado, 3 = viscoelástico.
"modelflowtype"-"Tipo de Força":	0 = não eletrosmótico, 1 = eletrosmótico.
"tempdiscrtype"-Discretização temporal:	0 = euler explícito, 1 = RK2, 2 = RK3, 3 = euler semi-implícito, 4 = crank-nicolson, 5 = BDF2.
"spatialdiscrtype"-Discretização espacial:	0 = segunda ordem.
"convecdiscrtype"-Termo convectivo ($\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$):	0 = diferenças centrais, 1 = upwind de primeira ordem, 2 = upwind de ordem maior ou igual a 2.
"secondconvecdiscrtype"-Upwind de ordem ≥ 2 :	0 = coeficiente modificado, 1 = CUBISTA, 2 = QUICK.

onde RK2 e RK3 são os métodos explícito de runge-kutta de segunda e terceira ordem respectivamente.

".load.eocontr" - este arquivo de controle é exclusivo para escoamentos eletrosmóticos e tem apenas duas entradas pra leitura. A primeira coluna da tabela 3 descreve o controle e a segunda mostra as opções disponíveis.

Tabela 3 – Arquivo de entrada dos controladores para simulação de escoamento eletrosmótico ".load.eocontr" .

Nome do controlador-Descrição	valor de entrada = Descrição
"eomodel"-Modelo eletrosmótico:	0 = PNP, 1 = DH.
"convecdiscrtype"-Termo convectivo ($\mathbf{u} \cdot \nabla n^{\pm}$):	0 = diferenças centrais, 1 = CUBISTA,

".load.viscontr" - este arquivo tem 3 entradas e é exclusivo para escoamentos viscoelásticos. A primeira coluna da tabela 4 descreve o controle e a segunda mostra as opções disponíveis.

Tabela 4 – Arquivo de entrada dos controladores para simulação de escoamento viscoelástico ".load.viscontr" .

Nome do controlador-Descrição	valor de entrada = Descrição
"model"-Modelo constitutivo:	0 = Oldroyd-B, 1 = Giesekus, 2 = PTT.
"disctype"-Discretização temporal do kernel	0 = explícita, 1 = semi-implícita.
"convecdisctype"-Termo convectivo ($\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{k}$):	0 = diferenças centrais, 1 = CUBISTA.

".load.par" - este arquivo tem 10 entradas e tem que ser lido para todos os tipos de escoamentos. A tabela 5 dá a descrição dos parâmetros a serem lidos.

Tabela 5 – Arquivo de entrada do parâmetros gerais da simulação ".load.par" .

Nome do parâmetro	Descrição
"step"	passo de tempo inicial
"finalstep"	passo de tempo final
"t"	tempo $t = s\Delta t$
"dt"	marcha no tempo
"Re"	número de Reynolds
"dts"	intervalo de tempo para salvar arquivos de dados
"dtp"	intervalo de tempo para imprimir arquivos de dados
"frame"	número do arquivo de saída de dados
"ts"	tempo final para salvar
"tp"	tempo final para imprimir

".load.eopar" - O usuário deve entrar com 3 parâmetros necessários para escoamentos eletrosmóticos. A tabela 6 mostra os parâmetros a serem lidos.

Tabela 6 – Arquivo de entrada dos parâmetros eletrosmóticos ".load.eopar" .

Nome do parâmetro	Descrição
"alpha"	Parâmetro adimensional $\alpha = ez\zeta_0/k_B T$
"delta"	Parâmetro adimensional $\delta = n_0 ez H^2 / \epsilon \zeta_0$
"Pe"	Número de Peclet $Pe = UH/D$

".load.viscpar" - O usuário deve entrar com 6 parâmetros necessários para escoamentos viscoelásticos. A tabela 7 mostra os parâmetros a serem lidos.

Note que os parâmetros "alpha" para escoamento viscoelástico e "alpha" para escoamentos eletrosmóticos são distintos apesar de ter o mesmo nome. Restam três arquivos para serem lidos, a saber, ".load.domain" que carrega as informações sobre a geometria do domínio a ser utilizado

Tabela 7 – Arquivo de entrada dos parâmetros viscoelásticos ".load.viscpar".

Nome do parâmetro	Descrição
"De"	Número de Debra De
"beta"	Coefficiente de viscosidade $\beta = \eta_s/\eta_0$
"epsilon"	Parâmetro ε do modelo PTT
"xi"	Parâmetro ξ do modelo PTT
"alpha"	Parâmetro α do modelo Giesekus
"kerneltol "	Tolerância para o estabilizador do kernel

na simulação, e os arquivos ".load.bc" e ".load.bcelectroosmotic" para a leitura dos dados de fronteira.

".load.domain" - simplesmente lê o número de partições do domínio e carrega o respectivo arquivo para a simulação.

".load.bc" e ".load.bcelectroosmotic" - carrega o identificador da fronteira, o respectivo arquivo a ser utilizado na simulação e a condição de contorno a ser imposta, sendo que o arquivo ".load.bcelectroosmotic" é usado somente para as propriedades do escoamento eletroosmótico. Atualmente a HiG-Flow possibilita escolher as condições de contorno do tipo Dirichlet e Neumann. Para exemplificar a leitura do arquivo ".load.bc", vamos considerar um canal retangular em duas dimensões, conforme mostra a figura 70, com entrada e saída de um fluido newtoniano.

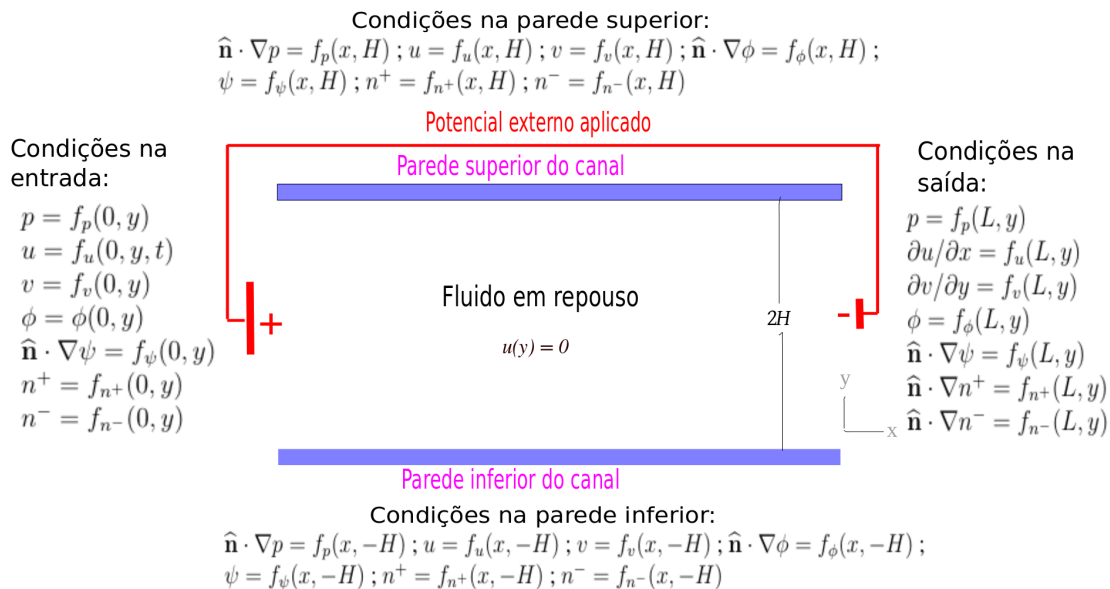


Figura 70 – Ilustração das condições de contorno para escoamento de um fluido em um canal.

Para este problema ilustrado na figura 70, o arquivo ".load.bc" é exatamente como mostrado na primeira coluna da tabela 8.

A segunda coluna da tabela 8 descreve linha por linha cada comando lido no arquivo, onde quando denotamos "D" significa que a condição de contorno é de Dirichlet e "N" igual a de

Tabela 8 – Arquivo de entrada dos condições de contorno para pressão e velocidade, ".load.bc" .

arquivo ".load.bc"	Descrição
4	Quantidade de fronteiras
0	Identificador: fronteira "0"
diretório/arquivo-bc-0	Arquivo com os pontos da fronteira "0"
0 0 0 4 0 0	$D, p = f_p(0, y), D, u = f_u(0, y, t), D, v = f_v(0, y)$
1	Identificador: fronteira "1"
diretório/arquivo-bc-1	Arquivo com os pontos da fronteira "1"
1 0 0 0 0 0	$N, \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla p = f_p(x, H), D, u = f_u(x, H), D, v = f_v(x, H)$
2	Identificador: fronteira "2"
diretório/arquivo-bc-2	Arquivo com os pontos da fronteira "2"
0 0 1 0 1 0	$D, p = f_p(L, y), N, \partial u / \partial x = f_u(L, y), N, \partial v / \partial y = f_v(L, y)$
3	Identificador: fronteira "3"
diretório/arquivo-bc-3	Arquivo com os pontos da fronteira "3"
1 0 0 0 0 0	$N, \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla p = f_p(x, -H), D, u = f_u(x, -H), D, v = f_v(x, -H)$

Neumann. Os valores no contorno, dado pelo usuário, são representados pela função f_j , onde o subscrito representa a propriedade daquela fronteira, $j = \{p, u, v, \phi, \psi, n^+, n^-\}$. Na primeira linha da tabela 8, o valor "4" é a quantidade de fronteiras existentes no domínio. Na segunda linha, "0" é o valor usado para identificar a primeira fronteira, neste caso a entrada do canal. Na terceira linha, "diretório/arquivo" é dado o caminho do arquivo com a respectiva fronteira. Na quinta linha, "0 0 0 4 0 0" são escolhidas as condições de contorno a serem utilizadas para aquela fronteira. Essa sequência de 6 valores definem as condições de contorno a serem impostas, sendo os dois primeiros para a pressão, os dois seguintes para a velocidade u e os dois últimos à velocidade v e caso a simulação for em 3 dimensões, tem que haver mais duas entradas para

Tabela 9 – Arquivo de entrada dos condições de contorno para os potenciais elétrico e concentrações iônicas, ".load.bcelectroosmotic" .

".load.bcelectroosmotic"	Descrição
4	
0	
diretório/arquivo-bc-0	$D, \phi = \phi(0, y), N, \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \psi = f_\psi(0, y),$
0 0 1 0 0 0 0 0	$D, n^+ = f_{n^+}(0, y), D, n^- = f_{n^-}(0, y)$
1	
diretório/arquivo-bc-1	$N, \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \phi = f_\phi(x, H), D, \psi = f_\psi(x, H),$
1 0 0 0 0 0 0 0	$D, n^+ = f_{n^+}(x, H), D, n^- = f_{n^-}(x, H)$
2	
diretório/arquivo-bc-2	$D, \phi = f_\phi(L, y), N, \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \psi = f_\psi(L, y),$
0 0 1 0 1 0 1 0	$N, \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla n^+ = f_{n^+}(L, y), N, \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla n^- = f_{n^-}(L, y)$
3	
diretório/arquivo-bc-3	$N, \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \phi = f_\phi(x, -H), D, \psi = f_\psi(x, -H),$
1 0 0 0 0 0 0 0	$D, n^+ = f_{n^+}(x, -H), D, n^- = f_{n^-}(x, -H)$

a velocidade w . Neste exemplo bidimensional, figura 70, a condição de entrada para pressão e velocidade, do canal fica da seguinte forma, conforme tabela 8:

Para a pressão: "0 0", onde o primeiro zero significa condição de Dirichlet, denotado neste texto por "D" na segunda coluna da tabela (se 0 = Dirichlet; se 1 = Neumann), e na segunda entrada, zero significa que o usuário deve fornecer um valor fixo $f_p(0,y)$ para essa fronteira (se 0 = valor fixo; se 4 = dependente do tempo).

Para a velocidade u : "0 4". Primeiro valor de entrada para a velocidade, "0", assim como para a pressão significa condição de Dirichlet. A segunda entrada, "4", significa que pode ser aplicado um valor que varie com o tempo, ou seja, essa fronteira vai ser atualizada a cada passo de acordo com $f_u(0,y,t)$ dado pelo usuário.

Para a velocidade v : "0 0", onde o primeiro zero significa condição de Dirichlet, D, e o segundo zero significa que o usuário deve entrar com um valor fixo $f_v(0,y)$ para essa fronteira. Analogamente, as condições para as outras fronteiras do canal são impostas pela respectiva sequência de entrada. Note que na saída do canal, para a pressão ("0 0") é imposta a condição Dirichlet, "0", com valor fixo, "0", dado pelo usuário. Neumann, "1", com valor fixo, "0", para as velocidades u ("1 0") e v ("1 0"). As funções f_j com os valores de cada fronteira são fornecidas pelo usuário no arquivo principal para a simulação, que será descrito na seção A.3.

No caso do arquivo ".load.bcelectroosmotic" mostrado na primeira coluna da tabela 9, a leitura dos dados é análoga. Agora, na quarta, sétima, décima primeira e décima quinta linha da tabela 9, os quatro primeiros valores impostos para condições de fronteira diz respeito as propriedades ϕ e ψ respectivamente. As quatro últimas condições a serem lidas são para as concentrações n^+ e n^- respectivamente. Os identificadores e arquivos com as fronteiras devem ser os mesmos utilizados para a pressão e velocidade, por isso são omitidas as descrições dos mesmos na tabela 9.

Com essa descrição, todos os arquivos de entrada necessários para a simulação foram abordados. Para ter êxito na solução, deve-se entrar com todos estes dados de acordo com o escoamento em estudo. A chamada de leitura desses arquivos é feita na função principal "main" do problema, que deve ser fornecida adequadamente pelo usuário.

A.3 Arquivo principal para a simulação

Este arquivo, dá a liberdade de escolha dos valores de entrada para as propriedades do escoamento, e deve conter todas as informações necessárias para inicializar a simulação. Neste arquivo, estão as funções de atribuição do domínio e da fronteira de todas as propriedades que serão usadas na simulação, cuja as rotinas para inicialização são chamadas na "main". Para o escoamento eletrosmótico de fluido viscoelástico, a tabela 10 lista as funções necessárias para inicialização. As funções atribuem valores a cada ponto do domínio de acordo com o

que foi estabelecido pelo usuário. Estes valores podem até variar a cada passo, desde que os controles sejam corretamente definidos para isso. Na função "main" é feita toda a inicialização da HiG-Flow, das propriedades necessárias para a simulação, e a marcha no tempo para a solução das equações de Navier-Stokes. A tabela 11 mostra a rotina principal "main".

Tabela 10 – Cada função atribui os valores iniciais e de fronteira a respectiva propriedade no escoamento. O usuário tem a liberdade de escolha para as entradas de cada função.

Nome da função	Descrição
<code>get_tensor(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o tensor \mathbf{S} no domínio.
<code>get_boundary_tensor(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o tensor \mathbf{S} nas fronteiras.
<code>get_kernel(λ, tol)</code>	Retorna o tensor \mathbb{k} .
<code>get_kernel_jacobian(λ, tol)</code>	Retorna o jacobiano do tensor \mathbb{k} .
<code>get_kernel_inverse(λ, tol)</code>	Retorna a transformação inversa do tensor. \mathbb{k}
<code>get_pressure(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna a pressão p no domínio.
<code>get_boundary_pressure(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna a pressão p nas fronteiras.
<code>get_velocity(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna a velocidade \mathbf{u} no domínio.
<code>get_boundary_velocity(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna a velocidade \mathbf{u} na fronteira.
<code>get_electroosmotic_phi(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o potencial ϕ no domínio.
<code>get_boundary_electroosmotic_phi(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o potencial ϕ na fronteira.
<code>get_electroosmotic_psi(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o potencial ψ no domínio.
<code>get_boundary_electroosmotic_psi(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o potencial ψ na fronteira.
<code>get_electroosmotic_nplus(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o potencial n^+ no domínio.
<code>get_boundary_electroosmotic_nplus(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o potencial n^+ na fronteira.
<code>get_electroosmotic_nminus(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o potencial n^- no domínio.
<code>get_boundary_electroosmotic_nminus(\mathbf{x}, t)</code>	Retorna o potencial n^- na fronteira.

Para finalizar, um looping com a função `highflow_solver_step_electroosmotic_viscoelastic(ns)` é realizado para que a equação do movimento seja resolvida para cada passo de tempo. Essa função efetua exatamente o procedimento descrito na seção 3.3. Isso é tudo que o usuário precisa para realizar a simulação de um escoamento eletrosmótico não newtoniano.

Tabela 11 – Função principal do programa, onde são criados os solvers, domínios, propriedades da simulação. Todas as rotinas abaixo devem ser chamadas pelo usuário na "main"

programa principal "main"	Descrição
<code>higflow_initialize(argc, argv, myrank, ntasks);</code>	Inicializa o resolvedor
<code>higflow_solver * ns = higflow_create();</code>	Cria o resolvedor para as equações de NS
<code>higflow_load_data_files(argc, argv, ns);</code>	Carrega os arquivos de entrada
<code>higflow_load_parameters(ns);</code>	Carrega os parâmetros da simulação.
<code>higflow_load_controllers(ns);</code>	Carrega os controles da simulação.
<code>higflow_set_external_functions(ns);</code>	Estabelece as funções para o usuário inicializar o domínio.
<code>higflow_load_electroosmotic_controllers(ns);</code>	Carrega os controladores eletrosmóticos.
<code>higflow_load_electroosmotic_parameters(ns);</code>	Carrega os parâmetros eletrosmóticos.
<code>higflow_create_domain(ns, cache, order);</code>	Cria o domínio de propriedades newtoniana.
<code>higflow_create_domain_electroosmotic(ns);</code>	Cria o domínio de propriedades eletrosmótica.
<code>higflow_create_domain_viscoelastic(ns);</code>	Cria o domínio de propriedades viscoelástica.
<code>higflow_initialize_domain(ns, ntasks, myrank, order);</code>	Inicializa o domínio da simulação.
<code>higflow_load_viscoelastic_controllers(ns);</code>	Carrega os controladores viscoelástico
<code>higflow_load_viscoelastic_parameters(ns);</code>	Carrega os parâmetros viscoelástico.
<code>higflow_initialize_boundaries(ns);</code>	Inicializa as fronteiras.
<code>higflow_create_distributed_properties(ns);</code>	Cria as propriedades newtonianas.
<code>higflow_create_distributed_properties_electroosmotic(ns);</code>	Cria as propriedades eletrosmótica.
<code>higflow_create_distributed_properties_viscoelastic(ns);</code>	Cria as propriedades viscoelástica.
<code>higflow_initialize_distributed_properties(ns);</code>	Inicializa as propriedades da simulação.
<code>higflow_create_solver(ns);</code>	Cria o resolvedor de sistemas lineares.
<code>higflow_load_properties(ns);</code>	Carrega as propriedades da simulação.

