



**Análise da difusão em microdispositivos:
um estudo com fluidodinâmica
computacional**

Rebeca Ventura Neves

Projeto de Final de Curso

Orientadores

Prof. Tânia Suaiden Klein, Ph.D.

Prof. Sávio Souza Venâncio Vianna, Ph.D.

João Victor Melo Amaral, M.Sc.

Agosto de 2022

ANÁLISE DA DIFUSÃO EM MICRODISPOSITIVOS: UM ESTUDO COM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Rebeca Ventura Neves

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Aprovado por:

Fábio Pereira dos Santos, D.Sc.

Maria Fernanda Oliveira, M.Sc.

Orientado por:

Tânia Suaiden Klein, Ph.D.

Sávio Souza Venâncio Vianna, Ph.D.

João Victor Melo Amaral, M.Sc.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Agosto de 2022

Neves, Rebeca Ventura.

Análise da difusão em microdispositivos: um estudo com fluidodinâmica computacional /
Rebeca Ventura Neves. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2022.

x, 86 p.; il.

(Monografia) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2022.

Orientadores: Tânia Suaiden Klein, Sávio Souza Venâncio Vianna e João Victor Melo
Amaral

1. Microdispositivos. 2. Fluidodinâmica Computacional. 3. Eficiência de Mistura. 4.
Monografia. (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Tânia Suaiden Klein. 6. Sávio Souza Venâncio
Vianna. 7. João Victor Melo Amaral. I. Análise da difusão em microdispositivos: um
estudo com fluidodinâmica computacional.

AGRADECIMENTOS

Primeiro, gostaria de agradecer a meus familiares pelo carinho e preocupação constantes. Especialmente aos meus pais, que sempre investiram na minha educação e me deram suporte para correr atrás dos meus sonhos. Cada conquista só foi possível graças a vocês. Agradeço a vocês e à minha irmã por sempre me apoiarem e me incentivarem durante a vida.

Agradeço também a meus amigos, que sempre estiveram presentes para compartilhar a felicidade das vitórias e o peso das derrotas, sempre me acalmando e me incentivando.

Agradeço à minha orientadora, professora Tânia, pela confiança depositada para a realização desse projeto e pela excelente orientação ao longo desses meses. Um agradecimento especial ao meu co-orientador, João Victor, por ser tão solícito e paciente com as minhas dúvidas incessantes. Não posso deixar de agradecer ao Sávio, por disponibilizar os meios para que este trabalho acontecesse.

Meu muito obrigada a todos vocês.

Resumo do Projeto de Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheira Química.

ANÁLISE DA DIFUSÃO EM MICRODISPOSITIVOS: UM ESTUDO COM FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Rebeca Ventura Neves

Agosto, 2022

Orientadores: Prof. Tânia Suaiden Klein, Ph.D.
Prof. Sávio Souza Venâncio Vianna, Ph.D.
João Victor Melo Amaral, M.Sc.

Devido a suas diversas qualidades, os microrreatores vêm apresentando um uso crescente na indústria química. No entanto, a microfluídica enfrenta uma problemática: seus escoamentos tendem a produzir regimes laminares, fazendo com que o fenômeno de transporte dominante seja a difusão, o que limita a mistura obtida nesses microdispositivos. Com isso, muitas pesquisas acadêmicas surgiram buscando alcançar uma mistura mais eficiente neles. Uma opção explorada é utilizar geometrias de microcanais diferenciadas que desviem as linhas de correntes, forçando um maior cruzamento entre elas e promovendo uma recirculação do fluido. Investigou-se no presente trabalho uma geometria diferenciada com zona de entrada cônica, com alimentação lateral e com a presença de *bumps* no microcanal a fim de estabelecer uma interação mais efetiva entre as camadas dos diferentes fluidos em escoamento para intensificar a mistura nesses microdispositivos. Por meio da programação de um código de fluidodinâmica computacional, simulou-se essas geometrias modificadas explorando diferentes características geométricas: variando a posição da entrada lateral e a curvatura dos *bumps*. Avaliou-se também a influência da velocidade na mistura obtida no microdispositivo, variando o número de Reynolds do escoamento. A eficiência de mistura obtida nesses microdispositivos com geometria modificada foi analisada pelo valor do índice de mistura. Outro parâmetro importante monitorado foi o gradiente de pressão ao longo do microdispositivo, visto que ele influencia o custo com bombeamento. Uma melhor mistura foi obtida nesses microdispositivos de geometria diferenciada analisados, devido à maior interação proporcionada entre os fluidos. Observou-se que a geometria com 2 entradas laterais a uma distância $s=100\ \mu\text{m}$ da entrada principal e com curvatura dos *bumps* $a=4$ no microcanal, operando a $Re=30$, demonstrou os melhores resultados. Inclusive vale destacar que, nesse caso, foi calculado um índice de mistura acima de 90%.

Abstract of the Final Project submitted to Escola de Química/UFRJ as a requirement to obtain the degree of Chemical Engineer.

ANALYSIS OF DIFFUSION IN MICRODEVICES: A STUDY USING COMPUTATIONAL FLUIDODYNAMICS

Rebeca Ventura Neves

August, 2022

Supervisors: Prof. Tânia Suaiden Klein, Ph.D.
Prof. Sávio Souza Venâncio Vianna, Ph.D.
João Victor Melo Amaral, M.Sc.

Due to their various qualities, microreactors have been presenting an increasing use in the chemical industry. However, microfluidics faces a problem since it tends to produce laminar flow, which makes diffusion the dominant transport phenomenon, resulting in a more limited mixture in these microdevices. Thus, many academic research projects emerged seeking to achieve a more efficient mixture in them. An option is to apply differentiated microchannel geometries that deflect the streamlines, forcing an enhanced mixing between them and promoting a recirculation of fluid. In the present work, an alternative geometry with conical entrance zone, lateral feeding and presence of bumps in the microchannel was investigated, with the purpose of establishing a more effective interaction between the layers of the different fluids to intensify the mixture in these microdevices. By programming a computational fluid dynamics code, these modified geometries were simulated with different positions of the lateral entrance and different curvatures of the bumps. The influence of velocity on the mixture obtained in the microdevice was also evaluated by varying the Reynolds number of the flow. The mixing efficiency obtained in these microdevices with modified geometry was analyzed through the mixing index. Another important parameter monitored was the pressure drop in the microdevice, because of its influence on the pumping cost. A better mixture was obtained in these analyzed microdevices of differentiated geometry, due to the greater interaction provided between the fluids. The best results were demonstrated by the geometry with 2 lateral feeds at a distance of $s=100\ \mu\text{m}$ from the main entrance and with curvature of bumps $a=4$ in the microchannel, operating at $Re=30$. It is also important to highlight that a mixing index above 90% was achieved in this case.

ÍNDICE

1 Introdução	1
2 Fundamentos	4
2.1 Microfluídica e microrreatores.....	4
2.2 Modelagem matemática.....	9
2.3 Fluidodinâmica computacional.....	11
2.4 Discretização das equações.....	13
2.4.1 Método dos volumes finitos.....	14
2.4.2 Método <i>upwind</i>	21
2.4.3 Método CDS.....	23
2.4.4 Método híbrido.....	26
2.4.5 Acoplamento pressão-velocidade.....	32
2.4.6 Método SIMPLE.....	33
2.5 Revisão bibliográfica.....	42
3 Metodologia	49
3.1 Critérios adotados.....	49
3.2 Geometria e parâmetros adotados.....	50
3.3 Código.....	51
3.3.1 Termos extras.....	52
3.4 Simulações numéricas.....	59
4 Resultados e Discussão	63
3.1 Verificação do código.....	63
3.2 Teste de sensibilidade.....	65
3.3 Teste de malha.....	66
3.4 Simulações numéricas.....	67
3.2.1 Análises com 1 entrada lateral.....	67
3.2.2 Análises com 2 entradas laterais.....	76
5 Conclusão	82
5.1 Trabalhos futuros.....	83
6 Referências	84

LISTA DE SÍMBOLOS

LETRAS LATINAS

Símbolo	Descrição
v	velocidade do fluido
d	diâmetro característico
\vec{v}	vetor velocidade
S_{\emptyset}	termo fonte
\vec{g}	força gravitacional
P	pressão
Y_i	fração mássica da espécie i
J_i	fluxo mássico de difusão da espécie i
R_i	termo fonte devido ao consumo ou geração da espécie química i
S_i	termo fonte devido a outras fontes de espécie química i
n	face norte do volume de controle
e	face leste do volume de controle
s	face sul do volume de controle
w	face oeste do volume de controle
U	componente do vetor velocidade na direção x
V	componente do vetor velocidade na direção y
\vec{n}	vetor unitário normal à superfície
∂S	superfície do volume de controle
$(S_{\emptyset})_P$	valor do termo fonte no ponto central P do volume de controle
S_U	parte do termo fonte independente de \emptyset
S_P	coeficiente que multiplica \emptyset na parte do termo fonte dependente de \emptyset
C_x	fluxo volumétrico por unidade de profundidade na direção x
C_y	fluxo volumétrico por unidade de profundidade na direção y
A_P, A_N, A_E, A_S, A_W	coeficientes da equação de transporte genérica discretizada
a_P, a_N, a_E, a_S, a_W	coeficientes da equação de momento discretizada
P_x	termo fonte da equação de momento na direção x discretizada relativo à pressão
P_y	termo fonte da equação de momento na direção y discretizada relativo à pressão
k	pontos adjacentes ao ponto central P do VC
S_m	termo associado ao desbalanço de massa do sistema

$\alpha_P^P, \alpha_N^P, \alpha_E^P, \alpha_S^P, \alpha_W^P$	coeficientes da equação de correção da pressão
$D_{i,m}$	coeficiente de difusão mássica da espécie i na mistura
\vec{J}_A	fluxo de difusão mássica da espécie A
Y_A	fração mássica da espécie A
D_{AB}	coeficiente de difusão mássica da espécie A na espécie B
$\alpha_{P_m}, \alpha_{N_m}, \alpha_{E_m}, \alpha_{S_m}, \alpha_{W_m}$	coeficientes de transporte de espécie discretizada
N	quantidade de termos somados ao longo do somatório
Y_{A_k}	valores de fração mássica obtidos nos pontos k
$Y_{A_{global}}$	fração mássica global da espécie A
D	diâmetro no ínico da seção cônica
s	posição da entrada lateral
a	curvatura dos <i>bumps</i>
f	largura da entrada lateral
z	comprimento da zona de entrada
L	comprimento total do microdispositivo
NI	número de células da malha na direção x
NJ	número de células da malha na direção y
$N_n^{Y_A}$	fluxo mássico de espécie A na face norte da célula
$N_e^{Y_A}$	fluxo mássico de espécie A na face leste da célula
$N_s^{Y_A}$	fluxo mássico de espécie A na face sul da célula
$N_w^{Y_A}$	fluxo mássico de espécie A na face oeste da célula
$Y_{A_{in}}$	fração mássica da espécie A na alimentação
U_{in}	velocidade de alimentação na entrada principal
V_{in}	velocidade de alimentação na entrada lateral
r	fator de refinamento da malha
h	tamanho de malha representativo
ΔA_i	área de cada célula i da malha
GCI	índice de convergência da malha
$p_s(x)$	posição da parede inferior em função da posição x
$p_n(x)$	posição da parede superior em função da posição x

LETRAS GREGAS

Símbolo	Descrição
ρ	densidade do fluido

μ	viscosidade dinâmica do fluido
\emptyset	propriedade genérica
γ	propriedade difusiva do fluido
Γ	coeficiente de difusão do fluido
θ	ângulo genérico
\emptyset_P^{it}	valor atualizado da variável no ponto P a ser utilizado na iteração seguinte
\emptyset_P^{calc}	valor que acabou de ser calculado naquela iteração para a variável no ponto P
\emptyset_P^{it-1}	valor obtido na iteração anterior para a variável no ponto P
α_\emptyset	fator de relaxação
σ	variância
σ_{max}	variância máxima no intervalo analisado

SOBRESCRITOS

Símbolo	Descrição
*	variáveis corrigidas
'	correção das variáveis

SUBSCRITOS

Símbolo	Descrição
P	variável calculada no ponto P
N	variável calculada no ponto N
E	variável calculada no ponto E
S	variável calculada no ponto S
W	variável calculada no ponto W
n	variável calculada na face n
e	variável calculada na face e
s	variável calculada na face s
w	variável calculada na face w

GRUPOS ADIMENSIONAIS

Símbolo	Nome
Re	número de Reynolds
Pe	número de Peclet

LISTA DE SIGLAS

CFD	Fluidodinâmica Computacional
MVF	Método dos Volumes Finitos
VC	Volume de Controle
CDS	<i>Central Difference Scheme</i>
SIMPLE	<i>Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations</i>
SAR	<i>Split and Recombine</i>
IM	Índice de Mistura
TDMA	<i>Tri-Diagonal Matrix Algorithm</i>
CC	Condições de Contorno

1 Introdução

Recentemente, o uso de microrreatores tanto para estudos no ambiente acadêmico como para aplicações no ambiente industrial tem se intensificado devido aos diversos benefícios que este dispositivo em fluxo contínuo apresenta. Sua ampla gama de aplicações tem impulsionado muitos estudos com foco na miniaturização de sistemas reacionais (MACHADO et al., 2014).

Algumas de suas vantagens em relação aos reatores em batelada tradicionais são: elevado controle da estequiometria e da cinética de reação, eficiente troca térmica, minimização ou eliminação dos problemas inerentes ao procedimento tradicional de aumento da escala, melhor acompanhamento e controle do processo, baixa demanda por espaço físico para sua operação, menores tempos reacionais necessários, menor quantidade de reagentes e solventes exigida, redução de custos, aumento do rendimento reacional e da seletividade do produto, diminuição da geração de resíduos, etc.

Mesmo na escala convencional, o reator em fluxo contínuo por si só já apresenta certas vantagens frente ao reator em batelada. Afinal, correntes contínuas de reagentes são injetadas no reator, onde elas se misturam e reagem, de modo que uma corrente contínua de produto é gerada. Com isso, basta modificar os fluxos volumétricos para regular a estequiometria e o tempo de reação (WEILER e JUNKERS, 2009).

Em geral, muito tempo é gasto com a otimização de uma rota sintética, já que são realizados vários experimentos analisando-se diversos parâmetros reacionais a fim de alcançar melhores resultados e menor custo. Depois de otimizados em escala laboratorial, os processos costumam ser ampliados para uma escala piloto e, posteriormente, para uma escala industrial. Entretanto, sua adaptação a esse aumento de escala impõe desafios (WEILER e JUNKERS, 2009). Por exemplo, assegurar que o nível de agitação e de troca térmica seja mantido. Portanto, garantir a reprodutibilidade dos resultados obtidos em laboratório requer esforços, novas análises e uma demanda de tempo ainda maior. Como é possível observar então, esse aumento de escala tradicional (denominado *scale-up*) traz certas dificuldades (ZHANG, 2016).

Durante o *scale-up* de um reator tradicional, o volume aumenta de forma cúbica, enquanto que a superfície, correspondente à área de troca térmica, cresce de forma quadrática. Consequentemente, essa razão área/volume tende a diminuir à medida que a escala do reator

convencional aumenta (ZHANG, 2016). No entanto, quanto maior for essa razão, mais intensa será a troca térmica entre o meio reacional e o ambiente exterior. Isso proporciona um melhor controle de temperatura do meio reacional, o que é essencial para garantir a qualidade do produto obtido em muitas reações (WEILER e JUNKERS, 2009).

Já os microrreatores possuem uma elevada razão área/volume e não apresentam esse problema com o aumento da escala porque, após a otimização do processo em laboratório, basta multiplicar o número de microdispositivos. Todas as novas unidades dispõem das mesmas dimensões e condições operacionais que aquelas utilizadas na rota sintética otimizada. Tal procedimento é conhecido como *numbering-up*, em oposição ao *scaling-up* tradicional (MACHADO et al., 2014).

Apesar das suas diversas qualidades, a microfluídica enfrenta uma problemática: seus escoamentos tendem a apresentar baixos números de Reynolds, o que geralmente dificulta a obtenção de um regime turbulento, ao contrário do que ocorre em equipamentos na escala macro tradicional. Convencionalmente, regimes turbulentos e agitação mecânica favorecem a mistura (AMARAL et al., 2022).

Devido aos pequenos valores de diâmetro dos microcanais, esses microdispositivos costumam produzir fluxos laminares, fazendo com que o fenômeno de transporte dominante seja o processo difusivo, e não o convectivo, o que limita a mistura nesses equipamentos. Na busca por uma mistura mais eficiente, uma opção é utilizar geometrias de microcanais diferenciadas que desviem as linhas de correntes, forçando um maior cruzamento entre elas e também promovendo uma recirculação do fluido. Tais desvios podem ser provocados por estruturas como *loops*, *bumps*, afunilamentos, obstáculos, etc. Como o aumento da velocidade influencia diretamente o aumento do número de Reynolds, também é uma opção para tentar promover fluxos mais turbulentos (AMARAL et al., 2022).

A microfluídica apresenta uma pluralidade de usos, demonstrando enorme potencial e versatilidade. Por conta disso, há interesse em aperfeiçoar esses microdispositivos visando solucionar o problema exposto. As alternativas apresentadas acima favorecem uma interação mais efetiva entre as camadas dos fluidos, pois proporcionam um maior cruzamento das linhas de corrente e, com isso, geram uma maior área de contato entre os diferentes fluidos (AMARAL et al., 2022).

Ainda há diversas abordagens a serem exploradas. Neste trabalho, a proposta foi investigar geometrias com seção de entrada cônica, com alimentação lateral e com a presença de *bumps* ao longo do microcanal, buscando intensificar a mistura na saída do microdispositivo. Para tais geometrias modificadas, o artigo de Amaral et al. (2022) foi utilizado como referência, assim como a dissertação de Amaral (2021) foi utilizada como base para o código de fluidodinâmica computacional aplicado ao presente trabalho.

A tecnologia dos microrreatores em fluxo contínuo aproxima o desenvolvimento laboratorial de rotas sintéticas da sua implementação industrial, isto é, da obtenção de um processo químico reprodutível e robusto. A seguir, os microrreatores serão explicados em mais detalhes, bem como suas características que o potencializam como ferramenta de inovação.

2 Fundamentos

2.1 Microfluídica e microrreatores

Como o próprio nome indica, a microfluídica é o estudo fluidodinâmico de microsistemas, isto é, sistemas que envolvem volumes na escala de microlitros. Os microdispositivos apresentam reduzido comprimento de escala frente aos sistemas convencionais. De uma forma mais abrangente, a microfluídica pode ser definida como a ciência que estuda o comportamento dos fluidos ao longo de microcanais com dimensões típicas de dezenas a centenas de micrômetros (LO, 2013).

Os microrreatores trabalham em fluxo contínuo e podem ser caracterizados por uma zona de micromistura e uma zona de residência. O desempenho da zona de mistura depende do tipo de junção empregada, sendo as junções Y e T as mais comumente utilizadas. Diferentes regimes podem ser obtidos de acordo com o tamanho e geometria dos microcanais (MACHADO et al., 2014).

Conseqüentemente, o *design* dos microdispositivos influencia diretamente a eficiência obtida nos processos químicos realizados nesses microsistemas, sendo um parâmetro operacional a ser considerado. Além disso, a tecnologia desses microdispositivos permite a manipulação controlada de fluidos.

Com isso, os microrreatores possibilitam um elevado controle reacional, uma vez que a estequiometria e cinética da reação podem ser ajustadas simplesmente variando-se a velocidade de entrada dos reagentes. Dessa forma, a razão entre as concentrações dos reagentes é alterada (MACHADO et al., 2014).

Uma das principais vantagens dos microrreatores é sua eficiente troca térmica. Graças a suas pequenas dimensões, estes microdispositivos apresentam uma razão área/volume maior do que a de reatores convencionais. Assim, ainda que ambos os reatores possuam o mesmo volume, o microrreator dispõe de uma maior superfície de troca térmica. Quanto maior a superfície de contato entre o meio reacional e o sistema de resfriamento ou aquecimento daquele reator, mais intensa será a troca de calor entre eles e, portanto, melhor será o controle de temperatura (MACHADO et al., 2014).

Os reatores tradicionais costumam apresentar um significativo gradiente de temperatura entre sua parede e seu centro devido às grandes dimensões do equipamento. Afinal, o aquecimento ou resfriamento do meio reacional ocorre apenas na superfície de contato entre o meio e o trocador de calor. O mesmo não acontece nos microrreatores, já que estes contam com uma elevada proximidade entre suas paredes e seu eixo central, garantindo gradientes de temperatura bem menores, ou seja, maior homogeneidade térmica (WEILER e JUNKERS, 2009).

Embora haja possibilidade de formação de *hot spots* (pontos quentes) no ponto de encontro dos reagentes injetados, ainda assim a grande capacidade de troca térmica desses microdispositivos promove a eficiente gestão do calor gerado nesse ponto. Dessa forma, o fluxo de entrada volta a ser resfriado logo em seguida para a temperatura controlada do meio reacional (WEILER e JUNKERS, 2009).

O excelente desempenho em trocas térmicas faz com que os microrreatores dissipem melhor o calor de reação e evitem a formação de *hot spots* e de elevados gradientes de temperatura (MACHADO et al., 2014). A presença desses pontos de acúmulo de energia térmica pode favorecer a ocorrência de reações secundárias indesejadas ou até de decomposição química, dependendo do sistema em questão. O melhor controle térmico desses microdispositivos elimina esse problema, evitando que sejam gerados subprodutos indesejados e impurezas no meio reacional. Sendo assim, os microrreatores podem até tornar desnecessárias etapas de purificação posteriores (WEILER e JUNKERS, 2009).

Dessa forma, com a utilização de microrreatores, obtém-se maior seletividade, pureza e rendimento reacional, garantindo também uma maior reprodutibilidade para essa rota sintética.

É difícil obter o produto com elevado grau de pureza ao lidar com reações extremamente exotérmicas, já que, como explicado anteriormente, o aumento de temperatura em certas regiões do reator pode gerar subprodutos e impurezas indesejados devido à presença de reações secundárias. Mesmo com uma adição controlada de reagentes e com um sistema de resfriamento, os reatores convencionais manifestam um aumento de temperatura do meio reacional. Vale lembrar que, quanto mais subprodutos e impurezas presentes, maior o custo e esforço com etapas subsequentes de purificação do produto reacional (WEILER e JUNKERS, 2009).

Os microrreatores representam uma boa opção para essas reações altamente exotérmicas. Devido à sua elevada razão área/volume, eles podem absorver o calor gerado nas reações de maneira mais eficiente. Com isso, esses microdispositivos apresentam um melhor controle térmico, mantendo a temperatura aproximadamente constante na zona de residência. Além disso, os microrreatores proporcionam mais segurança para esse tipo de reação, uma vez que o melhor gerenciamento do calor de reação impede que ocorra um descontrole térmico do meio reacional (*thermal runaway*) – risco existente nos reatores tradicionais (WEILER e JUNKERS, 2009).

Os reatores em fluxo contínuo possibilitam a manipulação com maior segurança de produtos químicos tóxicos, corrosivos e/ou inflamáveis necessários para certas reações. Por exemplo, microrreatores bifásicos gás-líquido permitem trabalhar com um gás tóxico sem que este gás tenha contato com o ambiente externo, pois já é convertido em produto reacional ao longo da zona de residência (WEILER e JUNKERS, 2009).

Outro exemplo que vale destacar são os microrreatores de dois estágios, os quais proporcionam segurança na manipulação de intermediários explosivos. Neles, apesar de tais substâncias explosivas serem produzidas no primeiro estágio, elas são imediatamente consumidas no segundo estágio. Com isso, o tratamento e isolamento do produto explosivo entre os dois estágios é completamente evitado, de modo que seu manuseio é feito em pequenos volumes de retenção e com conversão instantânea. Assim, além de aumentar o nível de segurança desse processo, economiza-se tempo e recursos que seriam gastos nessas etapas intermediárias desnecessárias. Portanto, os microrreatores são uma boa opção para operar essas transformações de maior risco em alta escala produtiva (WEILER e JUNKERS, 2009).

O fácil gerenciamento pelos microrreatores do calor liberado pela reação também viabiliza o uso de meios reacionais mais concentrados, inclusive, de reagentes puros (MACHADO et al., 2014). Isso reduz o volume de solvente empregado e, conseqüentemente, a quantidade de procedimentos posteriores para retirada do solvente e concentração do produto. Dessa forma, o uso de microrreatores nas produções industriais em larga escala se apresenta como uma alternativa mais sustentável para as rotas sintéticas, além de ser mais econômico. Vale ressaltar que tudo isso com um nível de segurança maior e com a necessidade de um resfriamento externo menos extremo (WEILER e JUNKERS, 2009).

Outra característica que torna interessante utilizar microrreatores nas produções industriais é a facilidade de implementação de controles de processo em linha, os quais podem ser instalados em série em diferentes pontos dos microcanais. Isso reduz o tempo exigido para coleta, transporte e análise das amostras, bem como para a obtenção dos resultados, permitindo acompanhar parâmetros operacionais e índices de qualidade dos produtos. Sendo assim, mudanças de temperatura do meio reacional, por exemplo, podem ser rapidamente detectadas e corrigidas. Essa eficiência na captação de informações possibilita controlar melhor o processo e agilizar a tomada de decisão (MACHADO et al., 2014).

A facilidade para o aumento de escala é outra vantagem dos microdispositivos. Como explicado, após a realização de experimentos laboratoriais para otimização de uma rota sintética, o *scale-up* de reatores convencionais simplesmente por meio do incremento do volume reacional impõe desafios, que consistem em garantir a mesma qualidade de agitação e troca térmica (MACHADO et al., 2014). Dessa forma, estudos complementares devem ser executados para buscar os novos parâmetros, configurações e condições operacionais do reator que levam à otimização da reação (ZHANG, 2016).

Já os microrreatores não requerem tais etapas, já que a ampliação da escala ocorre por meio do procedimento *numbering-up*. Com isso, após otimizar a reação em laboratório utilizando um microrreator em fluxo contínuo, basta instalar outras unidades de microestruturas iguais para obtenção do processo em escala industrial (MACHADO et al., 2014). Isto é, para produção em larga escala, vários microrreatores são dispostos em paralelo. Isso simplifica e acelera a fase de industrialização dos resultados alcançados em laboratório (ZHANG, 2016).

A soma dos comprimentos dos microcanais de todas as unidades do dispositivo resulta no comprimento total do microrreator, o qual costuma ser maior do que o de um reator tradicional. Apesar disso, estes microdispositivos ocupam menos espaço no chão de fábrica do que os reatores convencionais, ou seja, há um baixo impacto na demanda por espaço para sua instalação (MACHADO et al., 2014).

Ao investigar o *design* eficiente para um microrreator, uma prototipagem rápida e de baixo custo é extremamente importante para a realização de análises experimentais. Afinal, cada protótipo fabricado será testado para eventualmente, com base nos resultados obtidos, ser modificado e otimizado. Portanto, nesse ponto da pesquisa, técnicas simples e materiais baratos,

como o silicone, devem ser empregadas na fabricação do microrreator (MACHADO et al., 2014).

Além da geometria dos microcanais, o material empregado na construção do microrreator é um parâmetro importante que determina o seu desempenho. Vários são os tipos de materiais, sendo que cada um apresenta suas vantagens e desvantagens em relação ao preço, à compatibilidade com reagentes, à condutividade térmica, etc. Por exemplo, microrreatores de vidro ou de metais apresentam resistência a altas pressões, compatibilidade com solventes orgânicos e com vários reagentes agressivos, além de uma significativa estabilidade superficial. Entretanto, por serem de elevado custo, são materiais normalmente utilizados para a fabricação do microrreator após a otimização do seu *design*. O vidro ainda possui outras características interessantes, como sua transparência e propriedades ópticas (MACHADO et al., 2014).

A variedade de materiais aplicados na construção e as diversas técnicas disponíveis para prototipagem proporcionam a flexibilidade necessária para adequação do microrreator ao seu propósito, bem como às limitações impostas pelas condições de reação (MACHADO et al., 2014).

Com isso, observa-se que a tecnologia dos microrreatores em fluxo contínuo apresenta diversas vantagens em relação ao reator convencional. Como demonstrado anteriormente, o controle preciso de temperatura nos microrreatores promove condições reacionais homogêneas e meticulosamente reguladas, fato que eleva a qualidade do produto ao mesmo tempo que reduz a geração de resíduos (ZHANG, 2016). Dessa forma, o uso desses microdispositivos para a produção industrial se apresenta como uma excelente opção. Vale lembrar que, embora com um volume de microlitros, esses microrreatores conseguem produzir em larga escala, gerando quilogramas do produto químico desejado (WEILER e JUNKERS, 2009).

A dificuldade enfrentada com essa tecnologia dos microrreatores é que os escoamentos nesses microdispositivos costumam manifestar baixos números de Reynolds, de modo que um regime turbulento não é usualmente estabelecido. Entretanto, a presença de regimes turbulentos e de agitação mecânica está comumente associada a uma mistura eficiente. Afinal, o cisalhamento do fluido em volumes menores aumenta a superfície de contato entre diferentes fluidos, provocando uma interação mais efetiva entre eles (AMARAL et al., 2022).

O número de Reynolds é um número adimensional de extrema relevância para a mecânica dos fluidos, sendo definido como a razão entre as forças de inércia e as forças viscosas de um fluido escoando sobre uma superfície. Ele é usado para determinar o tipo de regime de escoamento do fluido, visto que baixos números de Reynolds estão associados a regimes laminares e elevados números de Reynolds estão associados a regimes turbulentos.

O valor do número de Reynolds de um escoamento é obtido por meio da Equação 2.1, em que ρ representa a densidade do fluido, v representa a velocidade média do escoamento, d representa o diâmetro característico do sistema e μ representa a viscosidade dinâmica do fluido. Portanto, observa-se que o aumento da velocidade está diretamente associado ao aumento do número de Reynolds.

$$Re = \frac{\rho v d}{\mu} \quad (2.1)$$

Devido aos pequenos valores de diâmetro dos microcanais, esses microdispositivos tendem a apresentar um baixo valor de Re , mesmo com fluidos de baixa viscosidade (MACHADO et al., 2014). Portanto, as forças de inércia se tornam desprezíveis frente às forças viscosas, de modo que geralmente são obtidos fluxos laminares. Com isso, o fenômeno da difusão, tanto mássica como térmica, prevalece em relação ao fenômeno da convecção (ZHANG, 2016).

2.2 Modelagem matemática

É possível representar de uma maneira genérica as equações de transporte por meio da Equação 2.2, em que ϕ representa a propriedade sendo analisada, \vec{v} equivale ao vetor velocidade do fluido e γ corresponde à propriedade difusiva do fluido a depender do fenômeno físico em questão – por exemplo, a viscosidade, a condutividade térmica e o coeficiente de difusão mássico (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\phi) = \nabla \cdot (\gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (2.2)$$

Como pode ser observado, a Equação 2.2 é composta por um termo transiente, um termo convectivo, um termo difusivo e um termo fonte, respectivamente. O termo transiente indica o quanto aquela propriedade varia no tempo, isto é, seu acúmulo no tempo; o termo convectivo representa a taxa líquida de variação daquela propriedade por convecção, isto é, por conta da velocidade de escoamento do fluido; o termo difusivo representa a taxa líquida de variação

daquela propriedade por conta da difusão, isto é, transferência dessa propriedade por conta dos efeitos moleculares; e o termo fonte engloba qualquer outro termo que não se encaixe nesses descritos anteriormente. A partir da Equação 2.2, é possível escrever as equações de balanço específicas.

A equação de conservação de massa, conhecida como equação da continuidade, se reduz ao divergente da velocidade igualado a zero para um fluido newtoniano incompressível em regime estacionário, de modo que seu comportamento é linear na velocidade. Portanto, a Equação 2.3 é obtida para descrever a conservação de massa, representando o fluxo mássico líquido que atravessa as fronteiras do sistema analisado (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.3)$$

Pela Lei de Newton da viscosidade, a relação entre a tensão de cisalhamento e o gradiente local de velocidade é uma relação linear para fluidos incompressíveis, sendo a constante de proporcionalidade a viscosidade do fluido. Dessa forma, a equação de conservação do momento escrita para um fluido newtoniano incompressível resulta nas equações de Navier-Stokes, as quais podem ser representadas pela Equação 2.4. Os termos no lado direito da Equação 2.4 indicam a ação da força gravitacional, os efeitos viscosos e o gradiente de pressão no fluido, respectivamente (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v}) = \rho\vec{g} + \mu\nabla^2\vec{v} - \nabla P \quad (2.4)$$

A equação de conservação de espécie pode ser obtida a partir da Equação 2.2 substituindo-se a propriedade genérica ϕ pela fração mássica da espécie i (Y_i). De modo a tornar a equação de balanço da espécie química mais genérica, pode-se reescrever o termo difusivo como sendo o oposto do divergente do fluxo mássico difusivo da espécie i (J_i), resultando na Equação 2.5. Se o fluxo mássico difusivo for modelado pela Lei de Fick, a Equação 2.2 pode ser diretamente utilizada com $\phi = Y_i$ e $\gamma = D_{i,m}$, sendo $D_{i,m}$ o coeficiente de difusão da espécie i na mistura. O termo R_i no lado direito da Equação 2.5 também é um termo fonte, porém vale ressaltá-lo já que o mesmo se refere ao consumo ou à geração da espécie química i devido a reações que ocorram no sistema (ANSYS Theory Guide).

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (2.5)$$

Essas equações diferenciais, que descrevem a conservação de propriedades do sistema, não

possuem solução analítica. Sendo assim, é necessário utilizar uma solução numérica e, para isso, as equações precisam ser discretizadas. Resolver numericamente um escoamento é justamente sair de um conjunto de equações diferenciais para um sistema de equações algébricas, as quais correspondem à discretização das equações diferenciais iniciais.

Há 3 métodos numéricos clássicos para realizar a discretização de equações diferenciais: método das diferenças finitas, método dos volumes finitos e método dos elementos finitos. Como a fluidodinâmica computacional envolve fluidos em movimento, o Método dos Volumes Finitos (MVF) é o mais utilizado para esse tipo de aplicação. A maior vantagem desse método em relação ao método de diferenças finitas é que ele garante intrinsecamente a conservação da propriedade nos volumes de controle.

2.3 Fluidodinâmica computacional

Fluidodinâmica computacional (CFD, sigla referente ao termo *Computational Fluid Dynamics* em inglês) é o uso de simulações computacionais para estudar os aspectos fluidodinâmicos de um sistema: seu escoamento, troca térmica, mistura, reações química, etc. Utilizando modelos matemáticos numéricos, é possível simular os processos físicos e/ou físico-químicos desses sistemas envolvendo escoamento de fluidos.

A modelagem matemática desses sistemas é baseada nas equações de balanço das propriedades (conservação de massa, espécie, energia, quantidade de movimento, etc.) naquele domínio espacial ao longo do tempo. Possibilitando a predição de variáveis críticas do sistema como velocidade, pressão, concentração, turbulência, temperatura, densidade e outras propriedades.

Essa ferramenta possui um enorme potencial e vem sendo utilizada em diversas áreas, principalmente no ramo industrial. Algumas de suas aplicações são: estudo hidrodinâmico e aerodinâmico de peças, equipamentos e veículos; escoamento e troca de calor em equipamentos e tubulações; análise das condições de operação de misturadores, separadores e outros equipamentos; projetos em geral de engenharia de processos químicos; simulação da distribuição de poluentes, efluentes e outros resíduos tóxicos; etc. (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

A despesa total com essas simulações computacionais não é tão elevada quanto aquela com estudos experimentais. Outras vantagens proporcionadas por CFD são: a redução dos prazos e custos para o *design* de novos projetos; a possibilidade de analisar sistemas cujo estudo experimental seja de difícil controle; a capacidade de estudar sistemas sob condições críticas, além dos seus limites normais de desempenho (realizar análises de segurança para prevenção de acidentes); e a produção em grande quantidade de resultados, sem custo adicional (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Por exemplo, por meio de simulações com CFD, pode ser feita uma otimização do desempenho de um equipamento considerando vários de seus parâmetros operacionais. De modo que a experiência prática já é feita com as condições operacionais otimizadas, ao invés de consumir tempo e recurso testando a variação desses parâmetros com estudos experimentais.

Alguns dos programas comerciais de CFD mais conhecidos são: Ansys CFX, Ansys Fluent, PHOENICS, COMSOL Multiphysics, STAR-CD, OpenFOAM, Stokes, entre outros. A concepção de todos esses softwares de simulação é baseada na modelagem matemática mencionada na seção 2.2, no entanto, eles criam uma interface interativa e de fácil utilização por meio da qual o usuário fornece os parâmetros necessários e analisa os resultados obtidos (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Em geral, os programas são divididos em 3 partes principais: pré-processador, *solver* e pós-processador. No pré-processador, é definida a geometria de interesse, é gerada a malha (dividindo o domínio computacional em várias células), são inseridos os fenômenos físicos e/ou físico-químicos a serem modelados, é realizada a configuração dos parâmetros do sistema e das propriedades dos fluidos e são especificadas as condições de contorno. Em seguida, todas essas informações são convertidas para um formato compatível a fim de permitir a leitura pelo *solver*, o qual resolve as equações algébricas discretizadas por meio de um método numérico (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Por fim, é feita a análise dos resultados no pós-processador, o qual dispõe de ferramentas versáteis para visualização dos dados e de capacidades gráficas avançadas: gráficos de linha e de contorno, gráficos de superfícies 2D e 3D, exibição dos campos vetoriais e das linhas de corrente, entre outros (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Por mais que existam boas práticas que guiem o usuário a operar um código CFD, é necessário também que o mesmo possua uma compreensão da mecânica dos fluidos e dos fundamentos dos algoritmos numéricos envolvidos. Afinal, antes de desempenhar a simulação, é essencial identificar e formular o problema no que se refere aos fenômenos físicos e químicos do escoamento. Isso possibilita avaliar quais simplificações podem ser feitas preservando as características essenciais do sistema. Vale ressaltar que um certo nível de experiência no assunto por parte do usuário auxilia nessa avaliação (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

A fim de diminuir a complexidade do problema em questão, é comum decisões serem tomadas quanto aos efeitos e fenômenos que podem ser desprezados, mas sem que isso prejudique a confiança e a veracidade dos resultados. A determinação de simplificações adequadas influencia diretamente na qualidade das informações geradas pela simulação CFD. Portanto, o usuário deve estar constantemente ciente das suposições feitas.

2.4 Discretização das equações

Neste trabalho, foram considerados fluidos newtonianos incompressíveis e, com o intuito de simplificar o problema avaliado, assumiu-se estado estacionário e o sistema foi considerado bidimensional e isotérmico. Como explicado anteriormente na seção 2.2 de ‘Modelagem matemática’, as equações de transporte que descrevem o comportamento do sistema em escoamento são equações diferenciais que não possuem solução analítica. Portanto, torna-se necessário discretizar essas equações para que um método numérico possa ser implementado.

O primeiro passo foi criar uma discretização bidimensional da malha. Parte desta malha discretizada é retratada na Figura 2.1, na qual o quadrado vermelho indica o volume de controle (VC) que está sendo analisado. O ponto P (ponto central deste VC) é o ponto de interesse para o qual as propriedades desse VC estarão sendo calculadas e armazenadas, simbolizando um nó da malha. Ele possui 4 pontos adjacentes pertencentes às 4 células adjacentes ao VC em questão. As letras maiúsculas representam o ponto central de cada elemento de controle e as letras minúsculas representam as faces do VC de interesse.

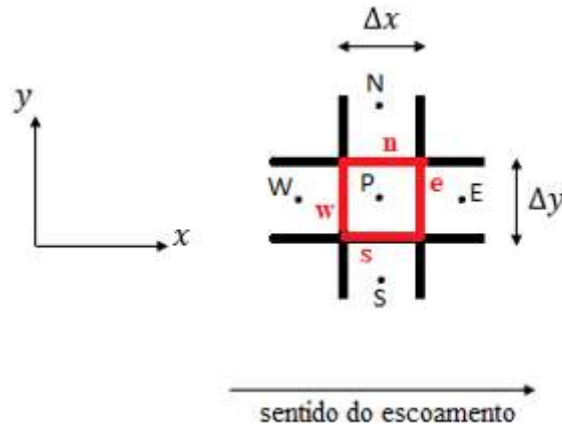


Figura 2.1: Representação do VC de interesse, do seu ponto central P e de seus 4 pontos adjacentes na malha estruturada.

Convencionalmente, utiliza-se a letra ‘n’ para representar a direção norte, ‘e’ para a direção leste, ‘s’ para a direção sul e ‘w’ para a direção oeste, provenientes dos termos em inglês: *north*, *east*, *south* e *west*, respectivamente.

Para a discretização das equações, foi utilizado o MVF. No processo de discretização, cada equação diferencial aplicada ao domínio inteiro se transforma em um grande sistema de equações algébricas, uma para cada nó da malha.

2.4.1 Método dos volumes finitos

Para o MVF, é feita uma integral de volume em cada VC da malha. Para ilustrar o método, a equação de transporte genérica, introduzida na Equação 2.2, foi dividida por ρ em ambos os lados da igualdade (já que se trata de um fluido incompressível), rearranjada e integrada sobre o volume. Levando em consideração as condições estabelecidas para este trabalho, obtém-se a Equação 2.6, em que Γ representa o coeficiente de difusão do fluido, sendo $\Gamma = \gamma/\rho$.

$$\int_{VC} \nabla \cdot (\vec{v}\phi - \Gamma \nabla \phi) dV = \int_{VC} S_\phi dV \quad (2.6)$$

Observa-se que o termo transiente foi descartado no lado esquerdo da igualdade, já que está sendo considerado estado estacionário. Com isso, apenas uma discretização espacial foi realizada. O divergente da Equação 2.6 pode ser especificado para um sistema bidimensional, resultando na Equação 2.7, em que U representa a componente do vetor velocidade na direção x e V representa a componente do vetor velocidade na direção y.

$$\nabla \cdot (\vec{v}\phi - \Gamma \nabla \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(U\phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(V\phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad (2.7)$$

Dando continuidade ao MVF, o teorema da divergência de Gauss é utilizado, o qual afirma que a integral de volume do divergente de uma função é igual à integral ao longo da superfície desse volume do produto escalar entre o argumento desse divergente e o vetor \vec{n} , sendo \vec{n} o vetor unitário normal à superfície (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Portanto, aplicando o teorema da divergência de Gauss ao lado esquerdo da Equação 2.6, transforma-se essa integral de volume ao longo do VC em uma integral de superfície ao longo da superfície ∂S desse VC, resultando na Equação 2.8.

$$\int_{\partial S} (\vec{v}\phi - \Gamma \nabla \phi) \cdot \vec{n} dS = \int_{VC} S_{\phi} dV \quad (2.8)$$

Como o termo fonte é considerado constante no VC analisado, ele pode sair da integral. Com isso, a integral de volume no lado direito da Equação 2.8 pode ser aproximada como sendo o próprio valor do termo fonte avaliado no ponto central P vezes o volume desse VC. Normalmente, esse volume seria igual a $\Delta x \Delta y \Delta z$. Porém, como foi feita a suposição de sistema bidimensional, é executada uma análise por unidade de profundidade, isto é, dividindo por Δz . Portanto, para um sistema bidimensional, o lado direito da Equação 2.8 resulta na Equação 2.9, na qual o índice subscrito 'P' indica que o termo fonte está sendo avaliado no ponto P. A Figura 2.1 fornecida previamente pode auxiliar na visualização.

$$\int_{VC} S_{\phi} dV = (S_{\phi})_P \Delta x \Delta y \quad (2.9)$$

Uma prática comum quando trabalha-se com termo fonte é separá-lo em duas partes: uma que não depende da variável ϕ (denominada S_U) e uma dependente de ϕ , representada pelo coeficiente S_P que multiplica a variável ϕ avaliada no ponto central P (indicada como ϕ_P). Logo, $(S_{\phi})_P$ pode ser reescrito por meio da Equação 2.10, de modo que há 3 possibilidades para o termo fonte: ele pode não envolver ϕ , pode ter uma parte dependente e outra independente de ϕ , ou pode ser completamente dependente de ϕ (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

$$(S_{\phi})_P = S_U + S_P \phi_P \quad (2.10)$$

Seguindo agora para a discretização do lado esquerdo da Equação 2.8, a integral de superfície foi aproximada como sendo o somatório em todas as faces do argumento da integral em cada uma das faces multiplicado pelo $(n\Delta S)$ correspondente àquela face, o que equivale a multiplicar

pela área da seção transversal àquele vetor \vec{n} perpendicular à superfície da face (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Com isso, obtém-se a Equação 2.11, na qual f se refere às faces do VC, representadas como ‘n’, ‘e’, ‘s’ e ‘w’ na Figura 2.1 previamente apresentada.

$$\int_{\partial S} (\vec{v}\phi - \Gamma\nabla\phi) \cdot \vec{n} dS = \sum_f (\vec{v}\phi - \Gamma\nabla\phi)_f (n\Delta S)_f \quad (2.11)$$

Por meio da Equação 2.11, observa-se que a integral de superfície do fluxo líquido total (convectivo + difusivo) da propriedade ϕ no VC é aproximada pelo somatório dos fluxos líquidos em cada face. Assim, a Equação 2.9 e a Equação 2.11 representam a discretização do lado direito e do lado esquerdo da Equação 2.8, respectivamente. Dessa forma, obtém-se a discretização da equação de transporte genérica para uma propriedade ϕ de interesse, ou seja, a migração do domínio contínuo para o domínio discreto, dando origem a um sistema de equações algébricas em que o número de incógnitas é o número de volumes de controle.

Nota-se que a Equação 2.11 agrupa os fluxos difusivos e convectivos da propriedade em cada face. Deseja-se obter uma expressão mais detalhada, separando os termos convectivos e difusivos e indicando as faces envolvidas em cada direção de escoamento, isto é, as faces nas quais cada termo é diferente de zero. Com esse objetivo em mente, o argumento da integral de superfície da Equação 2.11 foi especificado para um sistema bidimensional, resultando na Equação 2.12.

$$\int_{\partial S} (\vec{v}\phi - \Gamma\nabla\phi) \cdot \vec{n} dS = \int_{\partial S} \left(U\phi - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} + V\phi - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) \cdot \vec{n} dS \quad (2.12)$$

O produto escalar entre dois vetores é calculado como o produto dos seus módulos vezes o cosseno do ângulo θ formado entre esses vetores. Vale destacar alguns valores característicos de cosseno: $\cos 0^\circ = 1$, $\cos 90^\circ = 0$ e $\cos 180^\circ = -1$. Ao avaliar o produto escalar entre a componente do vetor velocidade na direção x (U) e o vetor \vec{n} normal à superfície, observa-se que $|n| \cos\theta = 1$ para a face leste, $|n| \cos\theta = 0$ para as faces norte e sul, e $|n| \cos\theta = -1$ para a face oeste. Estas conclusões são obtidas seguindo a suposição de que o escoamento está no sentido positivo do eixo x, como demonstrado na Figura 2.1 fornecida previamente.

Lembrando que o $\vec{n} dS$ corresponde, na equação discretizada, a multiplicar o argumento da integral pela área da seção transversal à direção do fluxo naquela face. Assim, o dS da área perpendicular a essa direção x corresponderá a $dydz$. Porém, como trata-se de um problema

bidimensional, a análise foi feita por unidade de profundidade, isto é, dividindo por dz . Dessa forma, dS fica igual apenas a dy e, como explicado, os únicos produtos escalares não nulos em relação à direção x serão nas faces leste e oeste, tanto para a componente U do vetor velocidade como para o gradiente na direção x .

Analogamente, os produtos escalares não nulos em relação à direção y serão nas faces norte e sul, tanto para a componente V do vetor velocidade como para o gradiente na direção y . Assim como o dS da área perpendicular a essa direção y corresponderá a $dx dz$ que resultará apenas em dx na análise bidimensional. Portanto, a integral de superfície no lado direito da Equação 2.12 pode ser reescrita de acordo com a Equação 2.13, vale ressaltar que a mesma ainda se encontra no domínio contínuo.

$$\left[\int U \phi \, dy \right]_w^e + \left[\int V \phi \, dx \right]_s^n = \left[\int \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \, dy \right]_w^e + \left[\int \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \, dx \right]_s^n \quad (2.13)$$

A seguir, será explicada a discretização para os termos difusivos presentes no lado direito da Equação 2.13 e, em seguida, para os termos convectivos localizados no lado esquerdo da Equação 2.13. Além disso, serão apresentados os métodos necessários para realizar tais aproximações.

➤ Termos difusivos

A discretização dos termos difusivos está representada na Equação 2.14, no entanto, observa-se que ainda há derivadas parciais presentes. Embora essas derivadas estejam sendo avaliadas nas faces do VC, as equações discretizadas são resolvidas para os nós da malha, isto é, as propriedades são calculadas no ponto P de interesse para cada VC. Logo, como essas derivadas da Equação 2.14 são em relação às faces, um esquema de diferenciação é utilizado.

$$\begin{aligned} \left[\int \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \, dy \right]_w^e + \left[\int \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \, dx \right]_s^n &= \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \, \Delta y \right]_w^e + \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \, \Delta x \right]_s^n \\ &= (\Gamma \Delta y)_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - (\Gamma \Delta y)_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w + (\Gamma \Delta x)_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - (\Gamma \Delta x)_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \end{aligned} \quad (2.14)$$

Existem alguns esquemas de diferenciação possíveis para as derivadas que são obtidos a partir da expansão em série de Taylor, a qual permite estimar o valor de uma função num dado ponto x . A fórmula geral para a expansão em série de Taylor da variável independente x em torno de

x_0 pode ser representada pela Equação 2.15 (PATANKAR, 1980).

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n \quad (2.15)$$

$$= f(x_0) + \frac{1}{1!} f'(x_0) (x - x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0) (x - x_0)^2 + \dots$$

Embora a série seja infinita, deve-se definir um valor finito ao usá-la para fazer uma aproximação. Para isso, a série é truncada em um de seus termos, sendo o restante chamado de resíduo. Este resíduo define a ordem do erro, isto é, a ordem da aproximação. A Figura 2.2 auxiliará na explicação dos métodos de diferenciação, na qual estão representados os pontos i , $i + 1$ e $i - 1$ em uma dada direção x , os quais estão localizados nas posições x_i , x_{i+1} e x_{i-1} , respectivamente.



Figura 2.2: Representação dos pontos x_i , x_{i+1} e x_{i-1} na direção x .

Baseando-se nos pontos demonstrados na Figura 2.2, foi obtida a expansão em série de Taylor de $f(x_{i+1})$ em torno de x_i , representada pela Equação 2.16, e a expansão em série de Taylor de $f(x_{i-1})$ em torno de x_i , representada pela Equação 2.17.

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i (x_{i+1} - x_i) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i (x_{i+1} - x_i)^2 + \dots \quad (2.16)$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i (x_{i-1} - x_i) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i (x_{i-1} - x_i)^2 + \dots \quad (2.17)$$

Como o interesse é definir a derivada primeira $\partial f / \partial x$ no ponto i , deve-se isolar este termo. Ao fazer isso para a Equação 2.16, é obtido o esquema de diferenciação pelo método *Forward Difference Scheme*. Já ao fazê-lo para a Equação 2.17, é obtido o esquema de diferenciação pelo método *Backward Difference Scheme* (PATANKAR, 1980).

Em ambos os métodos costuma-se truncar a expressão de $(\partial f / \partial x)_i$ no 1º termo, gerando um erro de 1ª ordem, que é considerado um erro relativamente alto. Assim, seria necessária uma malha mais refinada para reduzi-lo. Seria mais interessante trabalhar com um método de 2ª ordem. Para isso, as duas equações desses métodos serão combinadas.

Ao subtrair a Equação 2.17 da Equação 2.16 e isolar o termo da derivada $\partial f/\partial x$ no ponto i , obtém-se o esquema de diferenciação pelo método *Central Difference Scheme* (CDS), o qual está representado na Equação 2.18 (PATANKAR, 1980). Assim, é definida uma expressão para a derivada de 1ª ordem de uma função f em relação à coordenada x em um ponto i , o qual está localizado entre os pontos $i - 1$ e $i + 1$ nessa direção x .

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{(x_{i+1} - x_{i-1})} \quad (2.18)$$

Obtém-se um método de diferenciação usando o ponto anterior e posterior ao ponto i de interesse. Isto é, para cada ponto i sendo resolvido numa dada direção, serão necessárias as propriedades nos pontos $i + 1$ e $i - 1$ naquela direção. Se estiver utilizando uma malha uniforme, o 1º termo do resíduo dessa aproximação via método CDS se anula, de modo que um erro de 2ª ordem é obtido. Portanto, o método que dá maior precisão, principalmente se tiver um intervalo de discretização uniforme, é o método CDS (PATANKAR, 1980).

O método CDS será mais vantajoso pois, além de ser de 2ª ordem, ele convenientemente avalia o valor da propriedade nos nós da malha, isto é, nos pontos em que as equações discretizadas são efetivamente resolvidas. Sendo assim, o método CDS foi utilizado neste trabalho para substituir as derivadas parciais nas faces do VC presentes nos termos difusivos discretizados, demonstrados na Equação 2.14, pelas respectivas expressões algébricas discretizadas.

Por exemplo, para calcular a derivada parcial na face oeste, a face ‘w’ corresponderá ao ponto i , o ponto W corresponderá ao $i - 1$ e o ponto P corresponderá ao $i + 1$, lembrando que as Figuras 2.1 e 2.2 apresentadas previamente podem auxiliar nessa visualização. Então, com base na Equação 2.18 obtida para o método CDS, o valor de $(\partial\phi/\partial x)_w$ é igual ao valor da propriedade ϕ no ponto P menos o valor da propriedade ϕ no ponto W divididos por Δx , que equivale à distância entre os pontos P e W. Os valores da derivada parcial obtidos pelo método CDS nessa face oeste e nas outras faces do VC foram substituídos na Equação 2.14, resultando na Equação 2.19 para a discretização dos termos difusivos.

$$\left[\int \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} dy \right]_w^e + \left[\int \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} dx \right]_s^n = (\Gamma\Delta y)_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - (\Gamma\Delta y)_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \quad (2.19)$$

$$+ (\Gamma\Delta x)_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y} - (\Gamma\Delta x)_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y}$$

➤ **Termos convectivos**

A discretização dos termos convectivos está representada na Equação 2.20. Como explicado, as equações discretizadas foram resolvidas para os nós da malha, isto é, para os pontos P, N, E, S e W. Porém, ao discretizar os termos convectivos, observa-se que a expressão obtida depende dos valores da propriedade ϕ nas faces do VC. Portanto, um método de interpolação é necessário para determinar o valor das variáveis nas faces em função de seus valores nos pontos.

$$\begin{aligned} \left[\int U\phi \, dy \right]_w^e + \left[\int V\phi \, dx \right]_s^n &= [U\phi\Delta y]_w^e + [V\phi\Delta x]_s^n \\ &= [U\Delta y]_e\phi_e - [U\Delta y]_w\phi_w + [V\Delta x]_n\phi_n - [V\Delta x]_s\phi_s \end{aligned} \quad (2.20)$$

Vale lembrar que a componente do vetor velocidade em uma dada direção multiplicada pela área da face do VC transversal a esse vetor corresponde ao fluxo volumétrico que atravessa tal superfície. Analisando então a Equação 2.20, nota-se que $[U\Delta y]_e$ possui o significado físico de representar o fluxo volumétrico por unidade de profundidade na direção x que cruza a face leste, o qual passa a ser indicado como C_{x_e} . O mesmo se aplica para as faces oeste, norte e sul, como demonstrado na Equação 2.21.

$$\begin{aligned} [U\Delta y]_e &= C_{x_e} & [V\Delta x]_n &= C_{y_n} \\ [U\Delta y]_w &= C_{x_w} & [V\Delta x]_s &= C_{y_s} \end{aligned} \quad (2.21)$$

A aproximação que é feita para o valor da propriedade nas faces em função de seu valor nos pontos influencia tanto a acurácia como a estabilidade da solução numérica. O presente trabalho se baseou em dois métodos de interpolação: o método *upwind* de 1ª ordem e o método CDS, que serão explicados e demonstrados a seguir.

O método *upwind* de 1ª ordem iguala o valor da propriedade na face em análise ao valor da propriedade no ponto nodal a montante, dado o sentido do escoamento. Este é o método mais simples de interpolação e costuma garantir estabilidade. Entretanto, possui baixa acurácia, visto que é um método de 1ª ordem (PATANKAR, 1980).

O método CDS de interpolação consiste em realizar uma interpolação linear, de modo que o valor da propriedade na face sendo analisada é uma média aritmética dos valores da propriedade nos pontos a montante e a jusante. Este é um método de 2ª ordem e, portanto, possui maior precisão. No entanto, apresenta oscilações e pode divergir quando o escoamento do sistema for muito convectivo (PATANKAR, 1980).

2.4.2 Método *upwind*

Baseando-se na Figura 2.1, como o escoamento está no sentido positivo do eixo x , o valor da propriedade na face leste, por exemplo, seria igual ao valor da propriedade no ponto P. Se o escoamento fosse no sentido contrário, o valor de ϕ_e seria igual ao valor da propriedade no ponto E. O sentido do escoamento é indicado pelo sinal do fluxo volumétrico por unidade de profundidade naquela dada direção. A Figura 2.3 simboliza esse exemplo da face leste. Nele, o sentido do escoamento é determinado pelo sinal de C_{x_e} .

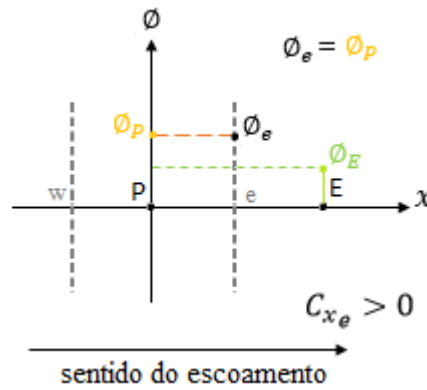


Figura 2.3: Representação do método *upwind*.

Então, o valor da propriedade ϕ em cada face do VC, de acordo com o método *upwind*, é definido na Equação 2.22.

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{se } C_{x_e} > 0 \\ \phi_E & \text{se } C_{x_e} \leq 0 \end{cases} \quad \phi_w = \begin{cases} \phi_W & \text{se } C_{x_w} > 0 \\ \phi_P & \text{se } C_{x_w} \leq 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

$$\phi_n = \begin{cases} \phi_P & \text{se } C_{y_n} > 0 \\ \phi_N & \text{se } C_{y_n} \leq 0 \end{cases} \quad \phi_s = \begin{cases} \phi_S & \text{se } C_{y_s} > 0 \\ \phi_P & \text{se } C_{y_s} \leq 0 \end{cases}$$

Substituindo as definições da Equação 2.22 na Equação 2.20 dos termos convectivos discretizados, obtém-se pelo método *upwind* uma expressão livre de valores de ϕ nas faces e dependente apenas das propriedades nos pontos nodais. Essa expressão e as Equações 2.9 e 2.19 obtidas previamente para o termo fonte e para os termos difusivos, respectivamente, resultam na equação de transporte genérica, na sua forma discretizada, demonstrada na Equação 2.23. Esta representa o sistema discretizado de equações algébricas que será calculado para cada propriedade ϕ de interesse e para cada VC da malha.

$$A_P \phi_P = A_N \phi_N + A_E \phi_E + A_S \phi_S + A_W \phi_W + (S_\phi)_P \Delta x \Delta y \quad (2.23)$$

A_P, A_N, A_E, A_S e A_W são os coeficientes, isto é, os termos que multiplicam a propriedade \emptyset nos pontos P, N, E, S e W, respectivamente. Sendo assim, o coeficiente A_P vezes a propriedade \emptyset no ponto de interesse P é igual à soma dos valores da propriedade \emptyset nos pontos adjacentes multiplicada pelos respectivos coeficientes, mais o termo fonte. Ao transladar para o VC seguinte da malha, há um novo ponto P no qual a Equação 2.23 será aplicada.

Os valores desses coeficientes que multiplicam a propriedade \emptyset no ponto P de interesse e nos seus pontos nodais adjacentes, introduzidos na Equação 2.23, estão especificados na Equação 2.24. Tais coeficientes foram obtidos aplicando-se inicialmente o MVF para discretização da equação de transporte genérica e, posteriormente, o método CDS de diferenciação e o método *upwind* de interpolação.

$$A_N = \left(\frac{\Gamma \Delta x}{\Delta y} \right)_n + \max(-C_{y_n}, 0) \quad (2.24)$$

$$A_E = \left(\frac{\Gamma \Delta y}{\Delta x} \right)_e + \max(-C_{x_e}, 0)$$

$$A_S = \left(\frac{\Gamma \Delta x}{\Delta y} \right)_s + \max(C_{y_s}, 0)$$

$$A_W = \left(\frac{\Gamma \Delta y}{\Delta x} \right)_w + \max(C_{x_w}, 0)$$

$$A_P = A_N + A_E + A_S + A_W + C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w}$$

Assim como $(\Gamma \Delta y / \Delta x)_e$ está multiplicando \emptyset_E na discretização do termo difusivo na Equação 2.19, também está multiplicando \emptyset_P mas com sinal negativo. O mesmo vale para os coeficientes de \emptyset_W, \emptyset_N e \emptyset_S , ou seja, seus termos difusivos também multiplicam \emptyset_P mas com sinal negativo. Ao transferir $A_P \emptyset_P$ para o lado esquerdo da igualdade na Equação 2.23, esses termos negativos que multiplicam \emptyset_P trocam de sinal, de modo que A_P passa a ser positivo.

No coeficiente A_E , por exemplo, a parte $(\Gamma \Delta y / \Delta x)_e$ é proveniente do termo difusivo e a parte $\max(-C_{x_e}, 0)$ seria a contribuição do termo convectivo. Se $C_{x_e} > 0$ (ou seja, $\emptyset_e = \emptyset_P$), o máximo entre $-C_{x_e}$ e 0 será zero, então nada será somado ao coeficiente A_E , o que é coerente porque não haveria $\emptyset_e = \emptyset_E$. Porém, se $C_{x_e} < 0$ (ou seja, $\emptyset_e = \emptyset_E$), o máximo entre $+C_{x_e}$ e 0 será C_{x_e} , então C_{x_e} será somado ao coeficiente A_E para multiplicar \emptyset_E . A mesma lógica é aplicada para os outros coeficientes que multiplicam a propriedade \emptyset no respectivo ponto nodal.

Vale ressaltar que, em dada direção, terá apenas um sentido de escoamento. Sendo assim, os fluxos volumétricos por unidade de profundidade na direção x (C_{x_e} e C_{x_w}) serão ou ambos positivos ou ambos negativos. Portanto, um dos termos $\max(-C_{x_e}, 0)$ ou $\max(C_{x_w}, 0)$ será nulo, ou seja, apenas C_{x_e} ou C_{x_w} aparecerá sendo somado aos coeficientes, nunca ambos. O mesmo raciocínio é empregado para a direção y, de modo que $\max(-C_{y_n}, 0)$ ou $\max(C_{y_s}, 0)$ será nulo. Com isso, apenas C_{y_n} ou C_{y_s} aparecerá sendo somado aos coeficientes, nunca ambos.

A separação do termo fonte $(S_\phi)_P$ em parte dependente e independente de ϕ , representada na Equação 2.10, é um artifício numérico porque, ao reorganizar os coeficientes da equação de transporte discretizada que multiplicam ϕ , o termo S_P (que multiplica ϕ_P) é somado ao coeficiente A_P da matriz. Isso incrementa o coeficiente do termo diagonal da matriz, o que favorece a convergência (PATANKAR, 1980).

2.4.3 Método CDS

O método CDS consiste em fazer uma interpolação linear entre os valores da variável nos nós adjacentes à face naquela direção. O valor da propriedade na face leste, por exemplo, seria igual à média entre o valor da propriedade no ponto P e o valor da propriedade no ponto E. A Figura 2.4 simboliza esse exemplo da face leste.

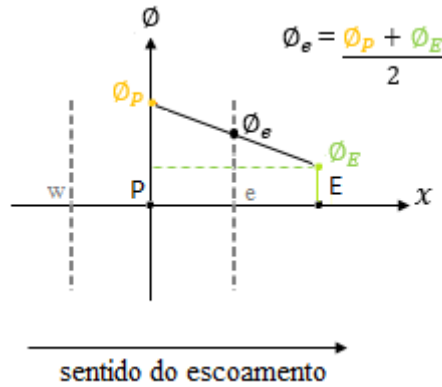


Figura 2.4: Representação do método CDS.

Aplicando a mesma lógica, o valor da propriedade ϕ em cada face do VC é definido na Equação 2.25 por meio do método CDS.

$$\begin{aligned} \phi_e &= \frac{(\phi_P + \phi_E)}{2} & \phi_w &= \frac{(\phi_W + \phi_P)}{2} \\ \phi_n &= \frac{(\phi_P + \phi_N)}{2} & \phi_s &= \frac{(\phi_S + \phi_P)}{2} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Apesar de ser um esquema de 2ª ordem e de fornecer maior acurácia que o método *upwind*, o método CDS pode apresentar oscilações na solução e até vir a divergir se o número de Peclet for maior que 2 (PATANKAR, 1980).

Alguns números adimensionais são comumente utilizados como parâmetros para discutir a estabilidade da solução numérica. O número de Peclet é calculado por meio da Equação 2.26 e corresponde à razão entre o processo convectivo e o processo difusivo. Logo, quanto maior o número de Peclet, mais importante é a convecção frente à difusão no processo de transferência, ou seja, mais convectivo é o problema analisado (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

$$Pe = \frac{U\Delta x}{\Gamma} \quad (2.26)$$

Observa-se que o nº de Peclet está associado à discretização da malha, visto que seu valor é diretamente proporcional ao Δx . Idealmente, ao utilizar o método CDS, trabalha-se com *nº de Peclet* < 2 (PATANKAR, 1980).

Substituindo as definições da Equação 2.25 na Equação 2.20 dos termos convectivos discretizados, obtém-se pelo método CDS uma expressão livre de valores de ϕ nas faces e dependente apenas das propriedades nos pontos nodais. Novamente, a equação de transporte genérica discretizada pode ser representada pela Equação 2.23, obtida previamente. Entretanto, os coeficientes que multiplicam a propriedade ϕ no ponto P de interesse e nos seus pontos nodais adjacentes agora terão valores diferentes, como demonstrado na Equação 2.27. Tais coeficientes foram obtidos aplicando-se inicialmente o MVF para discretização da equação de transporte genérica e, posteriormente, o método CDS de diferenciação e o método CDS de interpolação.

$$A_N = \left(\frac{\Gamma \Delta x}{\Delta y} \right)_n - \frac{C_{y_n}}{2} \quad (2.27)$$

$$A_E = \left(\frac{\Gamma \Delta y}{\Delta x} \right)_e - \frac{C_{x_e}}{2}$$

$$A_S = \left(\frac{\Gamma \Delta x}{\Delta y} \right)_s + \frac{C_{y_s}}{2}$$

$$A_W = \left(\frac{\Gamma \Delta y}{\Delta x} \right)_w + \frac{C_{x_w}}{2}$$

$$A_P = A_N + A_E + A_S + A_W + C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w}$$

Ainda existem outros métodos de interpolação disponíveis, como o método *upwind* de 2ª ordem e o método Quick. O método *upwind* de 2ª ordem é similar ao de 1ª ordem explicado anteriormente, mas ele já utiliza 2 pontos a montante do ponto i de interesse, de modo a traçar uma tendência do comportamento e, por meio de uma extrapolação, determinar o valor da propriedade na face. Já o método Quick faz um ajuste de parábola, sendo necessários 3 pontos: 2 a montante e 1 a jusante do ponto i de interesse, de acordo com o sentido do escoamento. Por meio da expressão obtida para a parábola, define-se o valor da propriedade na face. Logo, este é um método de 3ª ordem (PATANKAR, 1980).

Em geral, ao aplicar um método de ordem mais elevada, é obtida uma maior acurácia para a solução. Entretanto, isso também pode provocar mais oscilações e instabilidades, podendo até ocasionar a divergência da simulação caso haja gradientes acentuados; além também de aumentar o custo computacional. Outro fator que influencia diretamente o grau de precisão obtido é o refinamento da malha. Independente da ordem do método utilizado, uma malha mais refinada gera uma melhor resolução, porém também exige mais tempo para atingir a convergência (PATANKAR, 1980).

Existe um conceito denominado difusão numérica, o qual reduz a precisão dos métodos. Para demonstrá-lo, serão utilizadas novamente as Equações 2.7 e 2.16. Ao fazer a distributiva nos parênteses da Equação 2.7, obtém-se a Equação 2.28, na qual observa-se que o coeficiente de difusão multiplica as derivadas segunda de ϕ .

$$\nabla \cdot (\vec{v}\phi - \Gamma \nabla \phi) = U \frac{\partial \phi}{\partial x} - \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + V \frac{\partial \phi}{\partial y} - \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \quad (2.28)$$

Em paralelo, aplicou-se um esquema de diferenciação para a derivada primeira de ϕ presente no termo convectivo. Para isso, optou-se na explicação pelo método *Forward Difference Scheme*, no qual o termo $(\partial f / \partial x)_i$ é isolado a partir da Equação 2.16 e sua expressão é truncada no 1º termo, gerando um resíduo, que equivale ao erro do método. A aplicação desse método para $f(x) = \phi$ resulta na Equação 2.29 para a derivada parcial de ϕ na direção x , na qual o truncamento foi indicado pela linha vermelha tracejada. Nota-se que o 1º termo desse resíduo obtido é proporcional à derivada segunda da propriedade ϕ .

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{(\Delta x/2)} + \frac{(\Delta x/2)}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i + \dots \quad (2.29)$$

Com isso, já que ambos multiplicam a derivada segunda de ϕ , o coeficiente do erro se soma ao coeficiente efetivamente de difusão. O resultado é a soma da referida difusão numérica à difusão real. Isto é, a solução enxerga uma difusão maior do que a real. Um dos efeitos observados devido ao fenômeno da difusão numérica é a transição mais suave dos valores da propriedade sendo analisada (PATANKAR, 1980).

Vale ressaltar que, como no método CDS o 1º termo do resíduo se anula caso uma malha uniforme seja utilizada, esse termo do erro proporcional à derivada segunda da propriedade ϕ seria eliminado, isto é, tal método de 2ª ordem não introduziria uma difusão numérica. Já os métodos de 1ª ordem tendem a favorecer a presença de difusão numérica, apesar de fornecerem uma maior estabilidade. O coeficiente do erro, que multiplica a derivada segunda de ϕ , presente nesses métodos também é proporcional a Δx . Sendo assim, uma forma de diminuir o efeito da difusão numérica seria reduzir a dimensão desse Δx , ou seja, refinar a malha.

Dessa forma, tanto a utilização de métodos de ordem mais elevada como o refinamento da malha podem atenuar a presença da difusão numérica. Nota-se que esse efeito da difusão numérica surgiu da diferenciação, representada na Equação 2.29, da derivada parcial contida no termo convectivo da Equação 2.28. Então, o coeficiente do erro também é proporcional às componentes do vetor velocidade. Logo, é importante ter em mente que a difusão numérica pode ser mais significativa em escoamentos mais convectivos.

Entre os métodos de interpolação existentes, os métodos *upwind* e CDS foram selecionados como objeto de trabalho. Quando o sistema tiver um $Pe > 2$ ou $Pe < -2$, isto é, quando ele apresentar um escoamento mais convectivo, é utilizado o método *upwind* para garantir a convergência da simulação, uma vez que o método CDS pode gerar mais oscilações e vir a divergir. Quando o sistema exibir um $-2 \leq Pe \leq 2$, é aplicado o método CDS. Essa combinação dos métodos resulta no denominado método híbrido.

2.4.4 Método híbrido

Neste método, a equação de transporte genérica discretizada continua sendo descrita pela Equação 2.23. Entretanto, os valores dos coeficientes que multiplicam a propriedade ϕ , os quais representam essa combinação do método *upwind* com o método CDS, são detalhados na

Equação 2.30. Tais coeficientes que multiplicam a propriedade \emptyset no ponto P de interesse e nos seus pontos nodais adjacentes foram obtidos aplicando-se inicialmente o MVF para discretização da equação de transporte genérica e, posteriormente, o método CDS de diferenciação e o método híbrido de interpolação.

$$\begin{aligned}
 A_N &= \max\left(\left(\frac{\Gamma\Delta x}{\Delta y}\right)_n + \max(-C_{y_n}, 0), \left(\frac{\Gamma\Delta x}{\Delta y}\right)_n - \frac{C_{y_n}}{2}\right) \\
 A_E &= \max\left(\left(\frac{\Gamma\Delta y}{\Delta x}\right)_e + \max(-C_{x_e}, 0), \left(\frac{\Gamma\Delta y}{\Delta x}\right)_e - \frac{C_{x_e}}{2}\right) \\
 A_S &= \max\left(\left(\frac{\Gamma\Delta x}{\Delta y}\right)_s + \max(C_{y_s}, 0), \left(\frac{\Gamma\Delta x}{\Delta y}\right)_s + \frac{C_{y_s}}{2}\right) \\
 A_W &= \max\left(\left(\frac{\Gamma\Delta y}{\Delta x}\right)_w + \max(C_{x_w}, 0), \left(\frac{\Gamma\Delta y}{\Delta x}\right)_w + \frac{C_{x_w}}{2}\right) \\
 A_P &= A_N + A_E + A_S + A_W + C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w}
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

Esse foi o método empregado na dissertação de Amaral (2021), a qual serviu de referência para a pesquisa desenvolvida neste trabalho. Logo, esse método híbrido também foi aplicado no presente trabalho. Vale lembrar que o objetivo da solução numérica é calcular o valor da variável \emptyset de interesse em cada nó da malha, ou seja, resolver a equação de transporte discretizada, representada na Equação 2.23, para cada VC. Para isso, os coeficientes presentes nessa equação, que multiplicam a propriedade \emptyset no ponto P de interesse e nos seus pontos nodais adjacentes, precisam ser calculados, no caso, por meio da Equação 2.30 acima, ou seja, usando o método híbrido.

A seguir, essa discretização demonstrada para a equação de transporte genérica será aplicada à equação da continuidade, à equação de conservação do momento e à equação de transporte de espécies.

▪ EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE

A aplicação do MVF à equação da continuidade para um fluido incompressível, introduzida na Equação 2.3, pode ser resumida na Equação 2.31. Dessa forma, obtém-se a equação da continuidade discretizada para um sistema bidimensional, representada pela Equação 2.32. Nota-se que a discretização da equação de conservação de massa é mais simples, não sendo necessário um método de diferenciação nem um método de interpolação.

$$\int_{\check{v}c} \nabla \cdot (\rho \vec{v}) dV = \int_{\partial S} (\rho \vec{v}) \cdot \vec{n} dS = \sum_f (\rho \vec{v})_f (n \Delta S)_f = 0 \quad (2.31)$$

$$[\rho U \Delta y]_e - [\rho U \Delta y]_w + [\rho V \Delta x]_n - [\rho V \Delta x]_s = 0 \quad (2.32)$$

▪ EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DO MOMENTO

Como explicado anteriormente, a equação de conservação do momento escrita para um fluido newtoniano incompressível resulta na equação de Navier-Stokes, representada pela Equação 2.4. A equação de Navier-Stokes é uma equação vetorial, podendo ser aberta em 3 equações, uma para cada componente do vetor velocidade em cada direção do domínio espacial. No entanto, só serão escritas a seguir as equações de momento para U e V, visto que o sistema em questão é bidimensional. Além disso, não há ação de forças externas de corpo sobre o sistema e o mesmo foi considerado em estado estacionário, de modo que as equações de momento para a componente de \vec{v} na direção x e para a componente de \vec{v} na direção y estão descritas nessa ordem, respectivamente, na Equação 2.33.

$$\rho \left(U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} \right) = - \frac{dP}{dx} + \mu \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) \quad (2.33)$$

$$\rho \left(U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} \right) = - \frac{dP}{dy} + \mu \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right)$$

A aplicação do MVF à equação de Navier-Stokes, seguindo as considerações do sistema em estudo, pode ser resumida na Equação 2.34. O teorema da divergência de Gauss será aplicado ao lado esquerdo da Equação 2.34. Vale ressaltar que a força de pressão contida na equação de Navier-Stokes não pertence nem ao termo difusivo nem ao termo convectivo e, portanto, é tratada como um termo fonte.

$$\int_{\check{v}c} \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v} - \mu \nabla \vec{v}) dV = - \int_{\check{v}c} \nabla P dV \quad (2.34)$$

➤ Componente da velocidade na direção x

O procedimento para discretização da equação de momento na direção x é análogo ao da direção y. Sendo assim, o passo a passo para obtenção da equação de momento discretizada em seu formato de coeficientes, por meio da aplicação do método de diferenciação e do método de interpolação, será demonstrado apenas para a componente U da velocidade. A Equação 2.35

representa a equação de momento discretizada para a componente de \vec{v} na direção x.

$$[\rho UU\Delta y]_e - [\rho UU\Delta y]_w + [\rho VU\Delta x]_n - [\rho VU\Delta x]_s = -\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_p \Delta x \Delta y \quad (2.35)$$

$$+ \left(\left[\mu \Delta y \frac{\partial U}{\partial x} \right]_e - \left[\mu \Delta y \frac{\partial U}{\partial x} \right]_w \right) + \left(\left[\mu \Delta x \frac{\partial U}{\partial y} \right]_n - \left[\mu \Delta x \frac{\partial U}{\partial y} \right]_s \right)$$

Para as derivadas parciais dos termos difusivos presentes no lado direito da Equação 2.35, aplica-se o método CDS de diferenciação, de modo que os termos contidos na Equação 2.36 são obtidos. Vale destacar que uma malha homogênea é utilizada, com isso, o valor de Δx é constante ao longo do comprimento do microdispositivo.

$$\left(\left[\mu \Delta y \frac{\partial U}{\partial x} \right]_e - \left[\mu \Delta y \frac{\partial U}{\partial x} \right]_w \right) + \left(\left[\mu \Delta x \frac{\partial U}{\partial y} \right]_n - \left[\mu \Delta x \frac{\partial U}{\partial y} \right]_s \right) \quad (2.36)$$

$$= \left[\left(\frac{\mu \Delta y}{\Delta x} \right)_e (U_E - U_P) \right] - \left[\left(\frac{\mu \Delta y}{\Delta x} \right)_w (U_P - U_W) \right]$$

$$+ \left[\left(\frac{\mu \Delta x}{\Delta y} \right)_n (U_N - U_P) \right] - \left[\left(\frac{\mu \Delta x}{\Delta y} \right)_s (U_P - U_S) \right]$$

Para a derivada parcial de pressão existente no lado direito da Equação 2.35, também aplica-se o método CDS de diferenciação, de forma que os termos contidos na Equação 2.37 são obtidos. Esse termo fonte da equação de momento na direção x discretizada, relativo à pressão, foi denominado P_x .

$$P_x = -\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_p \Delta x \Delta y = -\frac{(P_e - P_w)}{\Delta x} \Delta x \Delta y = -([P\Delta y]_e - [P\Delta y]_w) \quad (2.37)$$

Para que o termo fonte fique em função de valores de pressão nos pontos nodais ao invés de valores nas faces, aplica-se o método CDS de interpolação, resultando na Equação 2.38.

$$P_x = ([P\Delta y]_w - [P\Delta y]_e) = \Delta y \frac{(P_W + P_P)}{2} - \Delta y \frac{(P_P + P_E)}{2} = \Delta y \frac{(P_W - P_E)}{2} \quad (2.38)$$

Ainda há os valores da componente U avaliada nas faces do VC presentes nos termos convectivos, no lado esquerdo da Equação 2.35. A fim de obter termos convectivos discretizados livres de valores de U nas faces e dependentes apenas da velocidade nos pontos nodais, foram aplicados o método *upwind* e o método CDS de interpolação – correspondentes às Equações 2.22 e 2.25, respectivamente. Vale ressaltar que, nesse caso, $\phi = U$, isto é, a propriedade de interesse sendo analisada é a componente do vetor velocidade na direção x. Posteriormente, é aplicado o método híbrido com combinação de ambos os resultados.

Assim, a equação do momento discretizada para a componente de \vec{v} na direção x, em seu formato de coeficientes, pode ser representada pela Equação 2.39. Os coeficientes são os termos a_P, a_N, a_E, a_S e a_W , que multiplicam a componente U da velocidade nos pontos P, N, E, S e W, respectivamente. Entretanto, os valores desses coeficientes variam de acordo com o método de interpolação aplicado aos termos convectivos da Equação 2.35.

$$a_P U_P = a_N U_N + a_E U_E + a_S U_S + a_W U_W + P_x \quad (2.39)$$

Essa Equação 2.39 foi utilizada para calcular o valor da componente U da velocidade e o valor da pressão em cada VC da malha, o que equivale ao sistema discretizado de equações algébricas a ser resolvido. Os valores dos coeficientes que multiplicam a componente U da velocidade no ponto central P do VC e nos pontos adjacentes a ele são definidos abaixo pelo método *upwind* e pelo método CDS – Equações 2.40 e 2.41, respectivamente. Nelas, o valor de P_x também é evidenciado.

$$a_N = \left(\frac{\mu \Delta x}{\Delta y} \right)_n + \max(-\rho C_{y_n}, 0) \quad (2.40)$$

$$a_E = \left(\frac{\mu \Delta y}{\Delta x} \right)_e + \max(-\rho C_{x_e}, 0)$$

$$a_S = \left(\frac{\mu \Delta x}{\Delta y} \right)_s + \max(\rho C_{y_s}, 0)$$

$$a_W = \left(\frac{\mu \Delta y}{\Delta x} \right)_w + \max(\rho C_{x_w}, 0)$$

$$a_P = a_N + a_E + a_S + a_W + \rho (C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w})$$

$$P_x = \frac{\Delta y (P_W - P_E)}{2}$$

$$a_N = \left(\frac{\mu \Delta x}{\Delta y} \right)_n - \frac{\rho C_{y_n}}{2} \quad (2.41)$$

$$a_E = \left(\frac{\mu \Delta y}{\Delta x} \right)_e - \frac{\rho C_{x_e}}{2}$$

$$a_S = \left(\frac{\mu \Delta x}{\Delta y} \right)_s + \frac{\rho C_{y_s}}{2}$$

$$a_W = \left(\frac{\mu \Delta y}{\Delta x} \right)_w + \frac{\rho C_{x_w}}{2}$$

$$a_P = a_N + a_E + a_S + a_W + \rho (C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w})$$

$$P_x = \frac{\Delta y (P_W - P_E)}{2}$$

Vale destacar que o fluxo volumétrico por unidade de profundidade cruzando a face em análise, que foi definido na Equação 2.21, equivale ao fluxo mássico por unidade de profundidade atravessando aquela mesma face ao ser multiplicado pela densidade do fluido.

Por fim, combinou-se os resultados dos métodos *upwind* e CDS a fim de obter o método híbrido utilizado neste trabalho. Os valores dos coeficientes que multiplicam a componente U da velocidade no ponto central P do VC e nos pontos adjacentes a ele são definidos pelo método híbrido na Equação 2.42. Uma vez definidos, eles serão utilizados na Equação 2.39 acima. Na Equação 2.42, além de se garantir que os coeficientes sejam positivos, foi desprezado o termo difusivo na parte proveniente do método *upwind*, já que este método é aplicado para $|Pe| > 2$, ou seja, para escoamentos mais convectivos.

$$\begin{aligned}
 a_N &= \max\left(-\rho C_{y_n}, \left(\frac{\mu \Delta x}{\Delta y}\right)_n - \frac{\rho C_{y_n}}{2}, 0\right) \\
 a_E &= \max\left(-\rho C_{x_e}, \left(\frac{\mu \Delta y}{\Delta x}\right)_e - \frac{\rho C_{x_e}}{2}, 0\right) \\
 a_S &= \max\left(\rho C_{y_s}, \left(\frac{\mu \Delta x}{\Delta y}\right)_s + \frac{\rho C_{y_s}}{2}, 0\right) \\
 a_W &= \max\left(\rho C_{x_w}, \left(\frac{\mu \Delta y}{\Delta x}\right)_w + \frac{\rho C_{x_w}}{2}, 0\right) \\
 a_P &= a_N + a_E + a_S + a_W + \rho (C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w}) \\
 P_x &= \frac{\Delta y (P_W - P_E)}{2}
 \end{aligned} \tag{2.42}$$

➤ Componente da velocidade na direção y

A equação de momento discretizada para a componente de \vec{v} na direção y, em seu formato de coeficientes, pode ser representada pela Equação 2.43. Observa-se que ela apresenta um perfil semelhante ao da equação de momento discretizada para a componente de \vec{v} na direção x, alterando apenas o termo fonte. O termo fonte da equação de momento na direção y discretizada, relativo à pressão, foi denominado P_y . Os coeficientes a_P, a_N, a_E, a_S e a_W , que multiplicam a componente V da velocidade nos pontos P, N, E, S e W, respectivamente, mantêm os mesmos valores da Equação 2.42. Já o termo fonte P_y é definido na Equação 2.44.

$$a_P V_P = a_N V_N + a_E V_E + a_S V_S + a_W V_W + P_y \tag{2.43}$$

$$P_y = \frac{\Delta x (P_S - P_N)}{2} \quad (2.44)$$

Essas Equações 2.39 e 2.43, em conjunto com a Equação 2.32 e com as definições das Equações 2.42 e 2.44, foram implementadas no código deste trabalho para calcular o valor da velocidade e da pressão em cada VC da malha.

2.4.5 Acoplamento pressão-velocidade

O escoamento analisado é regido pela equação da continuidade e pelas equações de Navier-Stokes. Entretanto, nota-se que a pressão não aparece na equação da continuidade; há apenas o gradiente da pressão presente nas equações de Navier-Stokes. Dessa forma, como não há uma forte dependência diretamente da pressão, diz-se que este é um acoplamento fraco. Essa conexão entre a pressão e as componentes da velocidade é especialmente fraca para fluidos incompressíveis. Já no caso de fluidos compressíveis, a pressão pelo menos influencia indiretamente a equação da continuidade, uma vez que a densidade ρ está relacionada à pressão e à temperatura do sistema por meio de uma equação de estado termodinâmica.

Um fraco acoplamento pode dificultar a convergência. Sendo assim, uma abordagem clássica para tentar aumentar a interação da pressão com as componentes da velocidade é estabelecer um acoplamento pressão-velocidade. Os esquemas de correção de pressão, também denominados algoritmos de acoplamento pressão-velocidade, são utilizados para ajudar a determinar o campo de pressão capaz de gerar um campo de velocidade que satisfaça à equação da continuidade, por meio da aplicação de correções da pressão e da velocidade.

A ideia é introduzir um método que torne o processo mais acoplado, com o intuito de facilitar a convergência desse sistema fracamente ligado. Para isso, correções à pressão e à velocidade são adicionadas, buscando um avanço mais comportado da simulação. Pode-se retratar o conceito dessas correções por meio da Equação 2.45, utilizando o indicador ' sobrescrito para as correções e o indicador * sobrescrito para as quantidades corrigidas.

$$U^* = U + U' \quad (2.45)$$

$$V^* = V + V'$$

$$P^* = P + P'$$

Sendo assim, a proposta é sugerir correções ao valor da variável calculado inicialmente, de modo que o novo valor corrigido atenda à equação da continuidade. As correções em si ainda serão determinadas, pois dependem do método empregado, mas vale destacar que é justamente por meio delas que se intensifica a relação entre a pressão e as componentes da velocidade.

Desses algoritmos de acoplamento pressão-velocidade, o mais comum é o *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations* (SIMPLE). Trata-se de um procedimento do tipo segregado (*segregated*) e foi um dos primeiros métodos estabelecidos, além de ser o mais usado ao se trabalhar com fluidos incompressíveis. Outras opções comuns do tipo *segregated* são os métodos SIMPLER e PISO. Há ainda um tipo de procedimento em que não é utilizada essa abordagem do acoplamento pressão-velocidade, denominado acoplado (COUPLED), mais comumente aplicado para escoamentos compressíveis.

Assim como na dissertação de Amaral (2021), as correções das variáveis serão definidas pelo método SIMPLE neste trabalho, de modo que ele será brevemente explicado a seguir.

2.4.6 Método SIMPLE

A equação de Navier-Stokes discretizada para a componente U da velocidade, definida na Equação 2.39, pode ser reescrita na forma da Equação 2.46. Nela, o índice k representa os pontos adjacentes ao ponto central P do VC e já foi introduzido também o valor do termo P_x , estabelecido na Equação 2.42.

$$a_P U_P = \sum_k a_k U_k + \frac{\Delta y}{2} (P_W - P_E) \quad (2.46)$$

Essa velocidade U_P corresponde ao valor inicialmente calculado usando a equação de momento discretizada, o qual não necessariamente satisfaz à equação da continuidade. A Equação 2.46 também pode ser escrita para os valores corrigidos das variáveis, resultando na Equação 2.47.

$$a_P U_P^* = \sum_k a_k U_k^* + \frac{\Delta y}{2} (P_W^* - P_E^*) \quad (2.47)$$

Ao subtrair a Equação 2.46 da Equação 2.47, obtém-se a expressão para os valores das correções das variáveis, de acordo com as definições da Equação 2.45. O termo U_P' pode ser explicitado, de forma a escrever a equação para a correção da componente U da velocidade no ponto P de interesse, representada pela Equação 2.48. Analogamente, pode-se obter a equação de V_P' , retratada na Equação 2.49.

$$U_P' = \sum_k \frac{a_k U_k'}{a_P} + \frac{\Delta y}{2a_P} (P'_W - P'_E) \quad (2.48)$$

$$V_P' = \sum_k \frac{a_k V_k'}{a_P} + \frac{\Delta x}{2a_P} (P'_S - P'_N) \quad (2.49)$$

O método SIMPLE propõe ignorar os termos referentes à velocidade em qualquer ponto diferente do ponto central do VC, com isso, o somatório em k é eliminado nas Equações 2.48 e 2.49. Portanto, as correções da velocidade no ponto P de interesse formuladas pelo método SIMPLE passam a ser expressas pela Equação 2.50.

$$U_P' = \frac{\Delta y}{2a_P} (P'_W - P'_E) \quad (2.50)$$

$$V_P' = \frac{\Delta x}{2a_P} (P'_S - P'_N)$$

Vale ressaltar que a velocidade e a pressão estão diretamente relacionadas por meio dessa equação. Como explicado, as correções são aplicadas de modo que o valor corrigido da velocidade satisfaça à equação da continuidade. Diante disso, a equação da continuidade discretizada, representada na Equação 2.32, pode ser escrita para as velocidades corrigidas, resultando na Equação 2.51.

$$[\rho U^* \Delta y]_e - [\rho U^* \Delta y]_w + [\rho V^* \Delta x]_n - [\rho V^* \Delta x]_s = 0 \quad (2.51)$$

Observa-se que são necessários os valores das velocidades corrigidas nas faces, e não nos pontos nodais. No entanto, a Equação 2.50 definiu as expressões das correções das velocidades pelo método SIMPLE para o ponto P de interesse. Portanto, o raciocínio análogo é implementado para obter a correção da velocidade na face de interesse.

A relação entre a correção da pressão e a correção da componente U da velocidade na face w e na face e, assim como a relação entre a correção da pressão e a correção da componente V da velocidade na face s e na face n, são expressas nessa ordem na Equação 2.52.

$$U_w' = \frac{\Delta y}{a_w} (P'_W - P'_P) \quad (2.52)$$

$$U_e' = \frac{\Delta y}{a_e} (P'_P - P'_E)$$

$$V_s' = \frac{\Delta x}{a_s} (P'_S - P'_P)$$

$$V_n' = \frac{\Delta x}{a_n} (P'_P - P'_N)$$

Entretanto, esses coeficientes nas faces são desconhecidos. Na dissertação de Amaral (2021), utilizada como base para este trabalho, foi feita uma interpolação, ponderada pela distância, entre os inversos dos valores dos coeficientes nos pontos nodais vizinhos à face naquela direção a fim de obter o inverso do coeficiente na face. Tal aproximação pode ser ilustrada pela Equação 2.53, na qual é calculado, por exemplo, o inverso do coeficiente a_w .

$$\frac{1}{a_w} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{a_w} + \frac{1}{a_p} \right) \quad (2.53)$$

Tais interpolações foram aplicadas à Equação 2.52, de modo que novas expressões para correção das velocidades nas faces do VC foram obtidas, representadas respectivamente na Equação 2.54.

$$\begin{aligned} U_w' &= \frac{\Delta y}{2} \left(\frac{1}{a_w} + \frac{1}{a_p} \right) (P'_w - P'_p) \\ U_e' &= \frac{\Delta y}{2} \left(\frac{1}{a_p} + \frac{1}{a_e} \right) (P'_p - P'_e) \\ V_s' &= \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{1}{a_s} + \frac{1}{a_p} \right) (P'_s - P'_p) \\ V_n' &= \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{1}{a_p} + \frac{1}{a_n} \right) (P'_p - P'_n) \end{aligned} \quad (2.54)$$

Substituindo-se as expressões das velocidades corrigidas da Equação 2.45 na Equação 2.51, obtém-se a Equação 2.55. Nela, o termo S_m corresponde à equação da continuidade discretizada escrita para os valores de velocidade atribuídos inicialmente. Quando a simulação atinge convergência, o parâmetro S_m tende a um valor próximo de zero, o que significa que as correções aplicadas à velocidade estão satisfazendo à equação da continuidade. Logo, quanto menor for esse valor de S_m , mais favorecida é a equação de balanço de massa. Portanto, o termo S_m está associado ao desbalanço de massa do sistema (*mass imbalance*).

$$[\rho U' \Delta y]_e - [\rho U' \Delta y]_w + [\rho V' \Delta x]_n - [\rho V' \Delta x]_s + S_m = 0 \quad (2.55)$$

$$S_m = [\rho U \Delta y]_e - [\rho U \Delta y]_w + [\rho V \Delta x]_n - [\rho V \Delta x]_s$$

Ao substituir nessa Equação 2.55 as expressões de correção das velocidades nas faces do VC definidas na Equação 2.54, obtém-se a equação de correção da pressão discretizada, representada pela Equação 2.56. Nota-se que o termo fonte corresponde ao próprio valor S_m . Os coeficientes são os termos a_p^p , a_n^p , a_e^p , a_s^p e a_w^p , que multiplicam a correção da pressão nos pontos P, N, E, S e W, respectivamente, e cujos valores também são definidos na Equação 2.56.

$$a_P^P P'_P = a_N^P P'_N + a_E^P P'_E + a_S^P P'_S + a_W^P P'_W - S_m \quad (2.56)$$

$$a_N^P = \frac{\rho \Delta x^2}{2} \left(\frac{1}{a_P} + \frac{1}{a_N} \right)$$

$$a_E^P = \frac{\rho \Delta y^2}{2} \left(\frac{1}{a_P} + \frac{1}{a_E} \right)$$

$$a_S^P = \frac{\rho \Delta x^2}{2} \left(\frac{1}{a_S} + \frac{1}{a_P} \right)$$

$$a_W^P = \frac{\rho \Delta y^2}{2} \left(\frac{1}{a_W} + \frac{1}{a_P} \right)$$

$$a_P^P = a_N^P + a_E^P + a_S^P + a_W^P$$

Para calcular a correção da pressão, é preciso primeiro resolver a equação de momento discretizada para as componentes U e V da velocidade – Equações 2.39 e 2.43, respectivamente – e, para isso, é preciso calcular seus coeficientes (a_P, a_N, a_E, a_S e a_W) e termos fontes. Com os valores desses coeficientes, calcula-se também os coeficientes $a_P^P, a_N^P, a_E^P, a_S^P$ e a_W^P da Equação 2.56 a fim de resolver essa equação de correção da pressão discretizada. Com as correções de pressão obtidas, calcula-se as correções de velocidade nas faces, por meio da Equação 2.54, a serem somadas aos valores de velocidade previamente calculados, resultando nos valores de velocidade corrigidos.

Vale lembrar que as velocidades nas faces são calculadas a partir das velocidades nos pontos nodais simplesmente por meio da aplicação do método de interpolação: pela Equação 2.22 se método *upwind* ou pela Equação 2.25 se método CDS – em ambas, $\phi = U$ ou $\phi = V$, nesse caso da equação de momento. Como está sendo empregado o método híbrido neste trabalho, a interpolação pode ser feita pelo método *upwind* ou pelo método CDS dependendo do número de Peclet no VC analisado naquele momento da simulação.

Foi construída a Figura 2.5, a qual ilustra um esquema que resume o procedimento visto até agora para solução do escoamento. Os valores de velocidade calculados no início de uma dada iteração podem não satisfazer à equação da continuidade. A cada iteração, eles já são corrigidos, graças ao acoplamento pressão-velocidade, e o *solver* calcula os resíduos das equações para esses valores. O objetivo de recalculer os valores das variáveis ao longo das iterações é que, no

final, todas as equações de transporte do sistema sejam satisfeitas. Portanto, retorna-se ao início do *loop* demonstrado na Figura 2.5 – ou seja, é feita uma nova iteração – até que a convergência seja atingida. O intuito desses algoritmos de acoplamento pressão-velocidade é justamente fazer a simulação convergir mais rapidamente.

Esquema de resolução com acoplamento pressão-velocidade

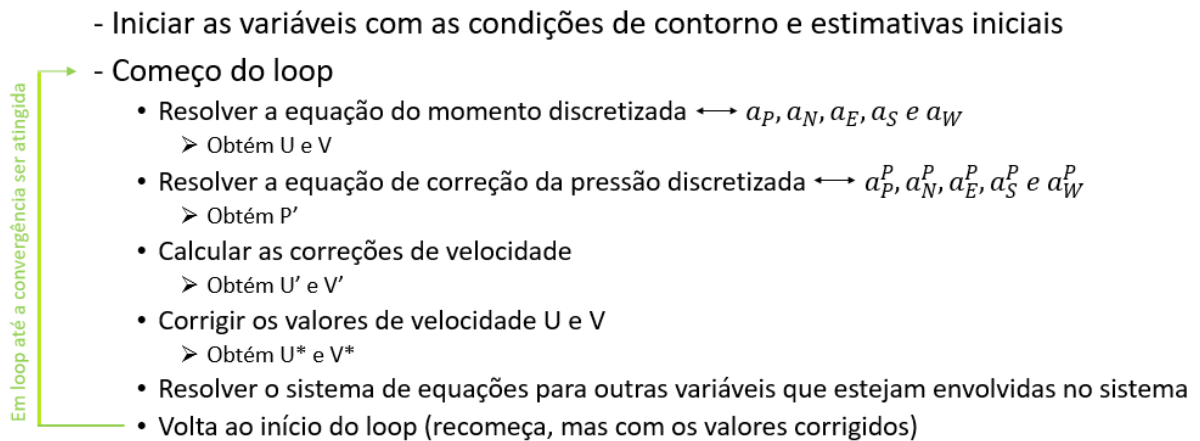


Figura 2.5: Esquema do procedimento de resolução de escoamentos com acoplamento pressão-velocidade.

Com base nos conceitos apresentados na seção 2.2 de ‘Modelagem matemática’ e nesta seção 2.4 de ‘Discretização das equações’, já é possível calcular as velocidades e a pressão do sistema. As equações de momento discretizadas, o método SIMPLE de acoplamento pressão-velocidade e a equação da continuidade discretizada foram utilizados no código da dissertação de Amaral (2021).

Além dessas equações, deve-se introduzir ainda no código do presente trabalho a equação de transporte de espécie discretizada, já que se deseja analisar a mistura de diferentes fluidos alcançada nos microdispositivos de geometria modificada. Então, o cálculo da fração mássica entraria na etapa do *loop* da Figura 2.5 em que outras variáveis envolvidas no sistema são resolvidas. Assim como, se houvesse troca de calor no sistema estudado, seria nesse ponto também que seria inserida a equação de conservação de energia discretizada; o mesmo raciocínio é implementado para outras propriedades variando no domínio analisado. Nota-se que o sistema de equações algébricas se torna cada vez mais complexo à medida que mais equações de transporte vão sendo incorporadas, já que cada equação será resolvida para todos os nós da malha a cada iteração.

▪ EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE ESPÉCIES

A equação de transporte de espécie foi introduzida na Equação 2.5. Como considerou-se estado estacionário para o problema em questão, o termo transiente dessa equação torna-se nulo. Além disso, o sistema em estudo envolve a mistura de duas espécies, mas sem reação entre elas, fazendo com que o termo R_i seja zerado. O termo S_i também é eliminado, já que não há outras fontes de entrada ou geração de espécie i . Todas essas considerações aplicadas à Equação 2.5 resultam na Equação 2.57.

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i \quad (2.57)$$

Pela Lei de Fick, o fluxo mássico de difusão da espécie i está diretamente associado ao gradiente da fração mássica dessa espécie i , como demonstrado na Equação 2.58, na qual $D_{i,m}$ representa o coeficiente de difusão mássica da espécie i na mistura.

$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \quad (2.58)$$

O escoamento analisado é composto por duas espécies: A e B. Analisando a equação de transporte de espécie para $i = A$ e escrevendo o fluxo de difusão mássica da espécie A (\vec{J}_A) por meio da Lei de Fick, obtém-se a Equação 2.59, de modo que D_{AB} corresponde ao coeficiente de difusão mássica da espécie A na espécie B. Nota-se que, com isso, tanto o termo convectivo como o termo difusivo são escritos em função da fração mássica da espécie A (Y_A).

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_A) = -\nabla \cdot (-\rho D_{AB} \nabla Y_A) \quad (2.59)$$

Como o fluido em análise é incompressível, sua densidade é constante, permitindo que ambos os lados da Equação 2.59 sejam divididos pela densidade da mistura. Assim, ao escrever a Equação 2.59 para um sistema bidimensional, obtém-se a Equação 2.60.

$$U \frac{\partial Y_A}{\partial x} + V \frac{\partial Y_A}{\partial y} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 Y_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_A}{\partial y^2} \right) \quad (2.60)$$

A aplicação do MVF à Equação 2.59 resulta na Equação 2.61, escrita para o sistema bidimensional em questão.

$$\int_{VC} \nabla \cdot (\vec{v} Y_A - D_{AB} \nabla Y_A) dV = \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x} \left(U Y_A - D_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(V Y_A - D_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial y} \right) dV = 0 \quad (2.61)$$

A aplicação do teorema da divergência de Gauss à Equação 2.61 origina a Equação 2.62. Para a discretização da equação, a integral de superfície é aproximada como sendo o somatório em

todas as faces do argumento da integral em cada uma das faces multiplicado pelo $(n\Delta S)$ correspondente àquela face, como também demonstrado na Equação 2.62.

$$\int_{\partial S} (\vec{v}Y_A - D_{AB} \nabla Y_A) \cdot \vec{n} dS = \sum_f (\vec{v}Y_A - D_{AB} \nabla Y_A)_f (n \Delta S)_f = 0 \quad (2.62)$$

Escrevendo explicitamente os termos do somatório da Equação 2.62 para cada face do VC, obtém-se a Equação 2.63.

$$\begin{aligned} & (U_e \Delta y Y_{A_e} - U_w \Delta y Y_{A_w}) + (V_n \Delta x Y_{A_n} - V_s \Delta x Y_{A_s}) \\ & - D_{AB} \Delta y \left(\left. \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right|_e - \left. \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right|_w \right) - D_{AB} \Delta x \left(\left. \frac{\partial Y_A}{\partial y} \right|_n - \left. \frac{\partial Y_A}{\partial y} \right|_s \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.63)$$

Observa-se na Equação 2.63 que ainda há derivadas parciais da fração mássica, avaliadas nas faces do VC, presentes. Sendo assim, foi aplicado o método CDS de diferenciação, de modo que essas derivadas parciais nos termos difusivos da Equação 2.63 foram substituídas pelas respectivas expressões algébricas.

Nota-se também que são necessários os valores de fração mássica nas faces do VC nos termos convectivos da Equação 2.63. Para encontrar tais valores, são aplicados os métodos de interpolação *upwind* e CDS, cuja combinação resulta no método híbrido empregado neste trabalho. Além disso, os termos de fluxo volumétrico por unidade de profundidade cruzando a face em análise, definidos na Equação 2.21, são novamente utilizados.

A aplicação dessas aproximações para as derivadas parciais e para as frações mássicas nas faces resulta em uma expressão com valores da variável avaliada apenas nos pontos nodais, não mais dependendo de seus valores nas faces do VC. Dessa forma, a equação de transporte de espécie discretizada é obtida, representada pela Equação 2.64.

$$a_{P_m} Y_{AP} = a_{N_m} Y_{AN} + a_{E_m} Y_{AE} + a_{S_m} Y_{AS} + a_{W_m} Y_{AW} \quad (2.64)$$

$a_{P_m}, a_{N_m}, a_{E_m}, a_{S_m}$ e a_{W_m} são seus coeficientes, isto é, os termos que multiplicam a fração mássica da espécie A nos pontos P, N, E, S e W, respectivamente. Os valores de tais coeficientes dependem do método de interpolação aplicado. Sendo assim, eles foram definidos abaixo pelo método *upwind* e pelo método CDS – Equações 2.65 e 2.66, respectivamente.

$$a_{N_m} = \frac{D_{AB} \Delta x}{\Delta y} + \max(-C_{y_n}, 0) \quad (2.65)$$

$$a_{E_m} = \frac{D_{AB} \Delta y}{\Delta x} + \max(-C_{x_e}, 0)$$

$$a_{S_m} = \frac{D_{AB} \Delta x}{\Delta y} + \max(C_{y_s}, 0)$$

$$a_{W_m} = \frac{D_{AB} \Delta y}{\Delta x} + \max(C_{x_w}, 0)$$

$$a_{P_m} = a_{N_m} + a_{E_m} + a_{S_m} + a_{W_m} + C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w}$$

$$a_{N_m} = \frac{D_{AB} \Delta x}{\Delta y} - \frac{C_{y_n}}{2} \quad (2.66)$$

$$a_{E_m} = \frac{D_{AB} \Delta y}{\Delta x} - \frac{C_{x_e}}{2}$$

$$a_{S_m} = \frac{D_{AB} \Delta x}{\Delta y} + \frac{C_{y_s}}{2}$$

$$a_{W_m} = \frac{D_{AB} \Delta y}{\Delta x} + \frac{C_{x_w}}{2}$$

$$a_{P_m} = a_{N_m} + a_{E_m} + a_{S_m} + a_{W_m} + C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w}$$

Por fim, combinou-se os resultados dos métodos *upwind* e CDS a fim de obter o método híbrido. Os valores dos coeficientes, que multiplicam a fração mássica da espécie A no ponto central P do VC e nos pontos adjacentes a ele, são definidos pelo método híbrido na Equação 2.67.

$$a_{N_m} = \max\left(\frac{D_{AB} \Delta x}{\Delta y} + \max(-C_{y_n}, 0), \frac{D_{AB} \Delta x}{\Delta y} - \frac{C_{y_n}}{2}\right) \quad (2.67)$$

$$a_{E_m} = \max\left(\frac{D_{AB} \Delta y}{\Delta x} + \max(-C_{x_e}, 0), \frac{D_{AB} \Delta y}{\Delta x} - \frac{C_{x_e}}{2}\right)$$

$$a_{S_m} = \max\left(\frac{D_{AB} \Delta x}{\Delta y} + \max(C_{y_s}, 0), \frac{D_{AB} \Delta x}{\Delta y} + \frac{C_{y_s}}{2}\right)$$

$$a_{W_m} = \max\left(\frac{D_{AB} \Delta y}{\Delta x} + \max(C_{x_w}, 0), \frac{D_{AB} \Delta y}{\Delta x} + \frac{C_{x_w}}{2}\right)$$

$$a_{P_m} = a_{N_m} + a_{E_m} + a_{S_m} + a_{W_m} + C_{y_n} - C_{y_s} + C_{x_e} - C_{x_w}$$

A Equação 2.64, juntamente com as definições da Equação 2.67, é utilizada para calcular o valor da fração mássica da espécie A em cada VC da malha.

Ao realizar uma simulação CFD, deve ser dada uma estimativa inicial para todas as variáveis em todos os pontos da malha, o que corresponde à inicialização do domínio. A partir disso, começa o processo iterativo da solução numérica. O valor da variável ao final do *loop* pode ou não atender ao critério de convergência. Se estiver dentro da tolerância especificada, o método numérico chega ao fim, de modo que aquele valor obtido é o seu resultado final. Porém, se o critério ainda não foi cumprido, deve-se retornar ao início do *loop* demonstrado na Figura 2.5 usando aquele valor encontrado. Assim, a cada iteração, os valores das variáveis vão sendo atualizados e continuam sendo recalculados até que a convergência seja atingida.

O procedimento de utilizar o próprio valor alcançado ao final daquela iteração para começar a iteração seguinte pode levar a simulação a divergir. Para evitar que uma simulação que poderia convergir acabe divergindo, são aplicados fatores de relaxação. A relaxação (*under-relaxation*) está associada a atualizar apenas parcialmente o valor da variável com o valor recém-calculado naquela iteração. Dessa forma, o valor atualizado da variável a ser utilizado na iteração seguinte (ϕ_P^{it}) é uma ponderação entre o valor que acabou de ser calculado naquela iteração (ϕ_P^{calc}) e o valor obtido na iteração anterior (ϕ_P^{it-1}), sendo ponderado justamente pelo fator de relaxação (α_ϕ). Essa ponderação é representada na Equação 2.68.

$$\phi_P^{it} = \phi_P^{calc} \alpha_\phi + \phi_P^{it-1} (1 - \alpha_\phi) \quad (2.68)$$

Nota-se que $\alpha_\phi = 1$ corresponde ao procedimento de usar totalmente o valor recém-calculado da variável, o qual, apesar de proporcionar um avanço mais rápido da simulação, poderia levar à divergência. Se $\alpha_\phi = 0$, a simulação não avançaria, ficaria estagnada no mesmo valor da variável. Então, o fator de relaxação aplicado para cada variável precisa estar nesse intervalo entre 0 e 1, devendo ser especificado um valor que gere um passo razoável. Quanto maior for o α_ϕ , mais instável se torna a simulação e, quanto menor for o α_ϕ , mais iterações serão necessárias, ou seja, mais lenta será a evolução da simulação.

Ao utilizar uma solução numérica, também são necessárias condições de contorno (CC) para conseguir fechar o sistema algébrico, visto que o valor em algum ponto deve ser conhecido para dar início à resolução do restante da malha. Costuma-se especificar os valores das variáveis nas

fronteiras do sistema. Sendo assim, termos extras devem ser adicionados aos coeficientes e aos termos fontes das equações de transporte discretizadas para as células adjacentes às CC.

Como mencionado, o objetivo ao longo da evolução das iterações é, ao final, satisfazer a todas as equações de transporte do sistema, de modo que o *solver* calcula os resíduos das equações a cada iteração e deve ser adotado um critério para analisar a convergência da simulação. No presente trabalho, o desbalanço de massa (*mass imbalance*) é calculado para cada célula e seus valores são somados ao longo de toda a malha para cada iteração. Já para a equação de transporte de espécie, calcula-se a diferença entre o valor de Y_A recém-calculado e o valor de Y_A obtido na iteração anterior e, novamente, esses valores são somados ao longo de toda a malha para cada iteração. Um gráfico é traçado com os valores dessas somas a cada iteração. Assim, é possível acompanhar a variação dos resíduos. Determinou-se que a simulação rodaria até atingir um valor mínimo e constante de resíduo, de modo que a solução poderia ser considerada convergida, não tendo mais variação no valor das variáveis calculadas. Para esse valor mínimo do resíduo, adotou-se um critério igual a 10^{-6} .

Vale ressaltar que não há um valor fixo de resíduo abaixo do qual é possível afirmar que a solução está convergida, dependerá de cada sistema. Deve-se avaliar o quanto os resultados variam à medida que o resíduo diminui. Recomenda-se fazer o monitoramento de uma variável crítica traçando o gráfico dessa propriedade no *solver* a fim de acompanhar seu valor ao longo das iterações. Observa-se que, a partir de um dado número de iterações, o valor da variável se estabiliza mesmo que o resíduo continue caindo, o que corresponde à convergência da solução.

2.5 Revisão bibliográfica

Como mencionado, os microrreatores despertaram recentemente um grande interesse na comunidade científica e já possuem, inclusive, muitas aplicações industriais. Tal movimento se deu graças às diversas vantagens que estes microdispositivos em fluxo contínuo apresentam em relação aos reatores convencionais. Algumas pesquisas envolvendo tais microdispositivos serão destacadas a seguir, sendo que muitas utilizam a fluidodinâmica computacional como ferramenta para estudá-los e aprimorá-los.

A transesterificação de óleos vegetais com álcoois é o método mais utilizado na síntese de biodiesel, mas geralmente esses processos ocorrem em batelada. Devido aos curtos tempos de

residência e altas conversões obtidas com microrreatores, essa produção vem sendo explorada com a utilização de tais microdispositivos. Schwarz et al. (2013) investigaram uma etanólise catalítica alcalina do óleo de soja em fluxo contínuo em sete microrreatores para produzir biodiesel. Eles concluíram que o micromisturador com uma junção Y na entrada e com a subsequente presença de cruzamentos periódicos entre as correntes de fluido ao longo do seu comprimento proporciona melhores rendimentos a temperaturas mais baixas com menores tempos de residência quando comparado com um macrorreator em batelada.

Santana et al. (2016) fizeram um estudo experimental e numérico da síntese de biodiesel em um microdispositivo a partir de óleo de girassol e etanol utilizando hidróxido de sódio como catalisador, analisando a influência da temperatura, da proporção etanol/óleo e da concentração de catalisador. Este artigo também compara o desempenho reacional de um reator em batelada com um microrreator. O interessante é que a simulação e intensificação do processo de transesterificação pode ser realizada numericamente, avaliando-se o rendimento da reação e os parâmetros de seletividade alcançados ao modificar as variáveis operacionais.

Além de reações de transesterificação, também há pesquisas explorando a utilização de microrreatores para reações de oxidação (REGATTE e KAISARE, 2011), de hidrogenação (FAZELI e BEHNAM, 2010) e de decomposição (AN et al., 2012), para reações fotoquímicas (RÜDIGER, 2020), entre outras.

Regatte e Kaisare (2011) compararam duas geometrias para a oxidação catalítica de propano: um microrreator com múltiplos canais catalíticos e outro com múltiplas estruturas estáticas com inserção de catalisador distribuídos ao longo de um canal único. Simulações da reação foram conduzidas e observou-se que, para catalisadores com baixa condutividade térmica, as conversões em ambos os reatores foram próximas.

Fazeli e Behnam (2010) modelaram a produção de hidrogênio (H_2) por meio da reforma de metanol pelo vapor d'água em microrreatores para aplicação em células de combustível, ou seja, para produção *in-situ* de hidrogênio. Duas geometrias foram consideradas: canais lineares e canais em formato de zig-zag. Nas simulações, foram inseridas as reações de oxidação de metanol, reforma a vapor do metanol, a reação de mudança do vapor de água (*water-gas shift reaction*) e decomposição do metanol. Os autores demonstraram que a geometria em zig zag promove maior produção de H_2 e com menor quantidade de monóxido de carbono residual.

Isto é decorrência dos fluxos secundários formados nas junções dos canais em zig-zag, que auxiliam a homogeneizar a temperatura neste *design*.

An et al. (2012) investigaram oito configurações diferentes de microcanais com seção quadrada para verificar qual a mais apropriada para a decomposição catalítica de metano, sendo que a reação ocorre nas paredes dos microcanais. As geometrias testadas foram divididas em dois grupos: canais em trecho únicos e canais segmentados. O modelo numérico revelou que o formato *pinhole* representa a melhor geometria para a situação proposta.

Efluentes industriais, se não forem tratados, causam um grande impacto ambiental, sendo que corantes sintéticos, em particular, possuem uma difícil degradação. Rüdiger (2020) analisou a fotodegradação do poluente orgânico azul de metileno utilizando um chip microfluídico exposto à luz UV. Para isso, desenvolveu um modelo matemático simulando tal degradação do poluente, que foi validado por meio de resultados experimentais no microrreator. Dessa forma, avaliou-se o efeito da variação da intensidade luminosa (usando lâmpadas UV-LED e UV-convencional) sobre a cinética de degradação, além da influência da concentração inicial de poluente e do tempo de residência sobre os resultados. O modelo desenvolvido e validado nessa tese pode, inclusive, ser aplicado em outros estudos.

Além da utilização e otimização de microrreatores, outros estudos focavam em aprimorar a mistura nos microdispositivos por meio da investigação com CFD de geometrias diferenciadas, assim como o presente estudo. Alguns exemplos foram destacados a seguir.

Peres (2018) simulou um conjunto de dois canais, uma junção em T, 30 canais em formato de serpentina e um microchip completo utilizando fluidodinâmica computacional, com o objetivo de investigar o campo de velocidades e os fenômenos de mistura presentes no microrreator. Em paralelo, foram feitos ensaios experimentais e registradas imagens desses escoamentos. A mistura foi avaliada pela injeção de traçadores não-reativos e distribuição das respectivas frações mássicas. A distribuição experimental de tais traçadores evidenciou a importância da presença de fluxos secundários para propiciar mistura na direção ortogonal ao escoamento principal. A força centrífuga nas regiões curvas, em conjunto com as forças viscosas na parede, proporciona esses fluxos secundários no escoamento. Assim, o estudo realizado nessa tese evidencia o emprego da fluidodinâmica computacional como ferramenta para melhor compreensão da fluidodinâmica, auxiliando no *design* de microdispositivos.

Kanaris e Mouza (2011) também analisaram *designs* de microdispositivos buscando otimizar a geometria de um micromisturador do tipo *split and recombine* (SAR), no qual o fluxo é dividido e depois recombinado em outro ponto. As várias configurações foram estudadas por meio de simulações CFD. A intensidade da mistura é examinada por meio da distribuição de tempo de residência (RTD, do inglês *Residence Time Distribution*) de um traçador introduzido no escoamento. Estudou-se o efeito de Re e da curvatura dos canais na eficiência de mistura, pela observação das curvas RTD, e na queda de pressão.

Shamloo et al. (2016) investigaram micromisturadores com alimentação em Y e com microcanal segmentado. Os autores verificaram a qualidade de mistura em função do ângulo entre os canais de entrada, do formato da seção transversal e do número de segmentos do microcanal de mistura, por meio da realização de simulações. Houve melhora da mistura ao reduzir o comprimento do canal de junção entre dois segmentos paralelos, já que o número de Peclet aumenta devido aos fluxos secundários. A melhor mistura foi obtida para a seção transversal triangular, seguida da seção quadrada.

Yang et al. (2015) elaboraram um *design* de micromisturador com estruturas Tesla. Realizando simulações CFD, os autores analisaram a mistura induzida no microdispositivo de um traçador inerte para Re entre 0,1 e 100. Um ponto crítico do projeto era a abertura do canal entre uma unidade e outra do micromisturador. Observou-se que aberturas menores promoveram menor mistura devido à redução do efeito de estiramento e dobramento (*stretching and folding*) das camadas de fluido, fazendo com que os fluidos escoassem de forma paralela ao longo de um comprimento maior. Comparando imagens do escoamento com resultados das simulações, concluiu-se que a separação da corrente principal em duas e a posterior recombinação elevam a área de contato das camadas de fluido e, com isso, aumentam a qualidade da mistura.

Gidde (2020) investigou uma geometria de micromisturador de tipo T com câmara de pré-mistura, câmaras de formato hexagonal e obstáculos ao longo do microcanal. Simulações foram conduzidas para duas formas de obstáculo – retangular e triangular – com Re na faixa de 0,1 a 75. Analisou-se o efeito da forma do obstáculo, da sua proporção largura-altura e da sua posição no índice de mistura e na queda de pressão. Os dois tipos de micromisturador apresentam diferentes mecanismos de mistura, como fluxo transversal e vórtices, além de advecção caótica devido à ação de divisão e recombinação das linhas de corrente ao atingirem os obstáculos.

Devido ao interesse em intensificar o cruzamento das linhas de corrente nos microdispositivos, muitas pesquisas foram realizadas nas últimas décadas investigando geometrias diferenciadas para os microcanais, ou até inserindo obstáculos internos ao longo deles para forçar o desvio do escoamento. Entretanto, a maioria desses estudos utiliza entradas em forma de Y ou em forma de T. Sendo assim, outras configurações alternativas ainda podem ser exploradas buscando potencializar a mistura nos microrreatores.

Amaral et al. (2022) analisaram um conjunto de geometrias para o microdispositivo com alimentação lateral na zona de entrada e com a presença de *bumps* ao longo do microcanal, avaliando o efeito dessas alterações na vorticidade e na recirculação a fim de futuramente aprimorar a mistura nesses microdispositivos. Averiguou-se a influência de uma geometria cônica na zona de entrada, da posição da alimentação lateral, da curvatura dos *bumps* e do diâmetro do microcanal nas linhas de corrente do escoamento, assim como na vorticidade e na queda de pressão desses microdispositivos.

Os autores investigaram a formação de vórtices no escoamento por meio da modelagem CFD ao variar tais características geométricas. Assim, o estudo visa avaliar a fluidodinâmica em todo o microdispositivo, observando o aumento da magnitude da vorticidade, bem como o desempenho da queda de pressão – sem analisar nesse estágio da pesquisa a eficiência de mistura em si (AMARAL et al., 2022).

A presença de *bumps* convexos provoca uma mudança de direção do escoamento. A curvatura desses *bumps* favorece o descolamento da camada limite, resultando em um contrafluxo dentro dos microcanais, de modo que pode afetar a função corrente (*stream function*). O estreitamento ao longo da zona de entrada cônica gera um aumento da velocidade do fluxo à medida que a área da seção transversal diminui. Em um processo convencional em macroescala, uma alimentação lateral em conjunto com essa redução da área da seção transversal leva a um escoamento em espiral, já que provoca um aumento do momento angular. Assim, é esperado que a alimentação lateral no microdispositivo intensifique o movimento rotacional na zona de entrada cônica, contribuindo para uma nova estratégia de pré-mistura (AMARAL et al., 2022).

A geometria modificada desse projeto de Amaral et al. (2022) é retratada na Figura 2.6, onde z é o comprimento da zona de entrada, L é o comprimento total do microdispositivo, s é a distância da alimentação lateral em relação à extremidade esquerda da geometria, f é a largura

da entrada lateral, d é o diâmetro característico dos microcanais (que equivale ao diâmetro no final da seção cônica) e D é o diâmetro no início da seção cônica. A curvatura dos *bumps* do microcanal é indicada pela variável a , sendo que há 5 *bumps* na parede superior e na parede inferior do microcanal.

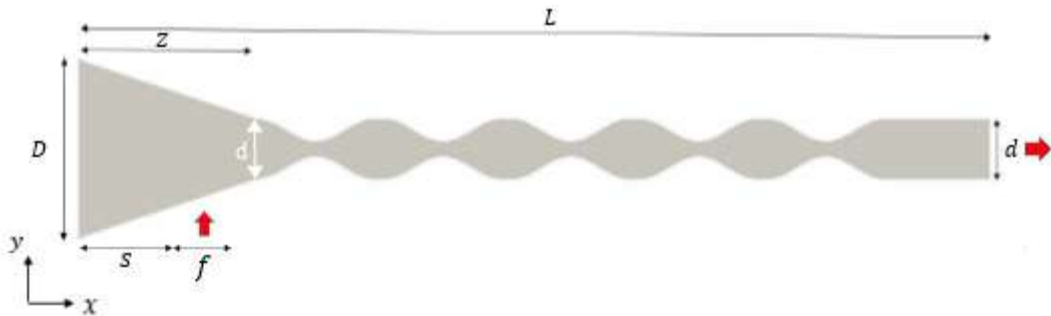


Figura 2.6: Geometria proposta de microdispositivo com alimentação lateral na zona de entrada e *bumps* ao longo do microcanal, que foi objeto de estudo no artigo de Amaral et al. (2022).

Na geometria de Amaral et al. (2022), algumas dimensões são fixas: $z = 600 \mu\text{m}$, $L = 3000 \mu\text{m}$ e $f = 200 \mu\text{m}$. O código CFD foi utilizado para investigar a variação dos outros parâmetros: d ($200 \mu\text{m}$ ou $250 \mu\text{m}$), D ($600 \mu\text{m}$ ou $200 \mu\text{m}$), s ($0 \mu\text{m}$, $100 \mu\text{m}$ ou $300 \mu\text{m}$), a ($a=1$, $a=2$ ou $a=4$). Para a análise da geometria da zona de entrada, a configuração $D=600 \mu\text{m}$ e $d=200 \mu\text{m}$ representa a zona de entrada cônica, enquanto que $D=d=200 \mu\text{m}$ representa uma entrada convencional com área da seção transversal constante. Para a avaliação da posição da alimentação lateral, nota-se que deixa de existir uma entrada lateral no caso $s=0 \mu\text{m}$; ao invés disso, há uma entrada alinhada através da face esquerda da geometria, com largura $D=600 \mu\text{m}$ (AMARAL et al., 2022).

Os resultados numéricos revelaram que o desempenho da alimentação lateral supera o da entrada alinhada e que, de fato, a zona de entrada cônica favorece maior vorticidade e recirculação quando comparada àquela com área da seção transversal constante. Dessa forma, a utilização de uma zona de entrada cônica com alimentação lateral aumentou a vorticidade e criou zonas de recirculação no microdispositivo. Entre as geometrias de zona de entrada testadas, a cônica com $D=600 \mu\text{m}$ e $s=100 \mu\text{m}$ foi a que mais aprimorou a recirculação de fluido (AMARAL et al., 2022).

Quanto à curvatura dos *bumps*, o resultado numérico para $a=1$ demonstrou elevados gradientes de velocidade, alcançando melhor movimento de rotação para o fluido. Menores valores do parâmetro a proporcionaram ainda campos de vorticidade mais elevados, porém geraram

também maiores gradientes de pressão. À medida que o parâmetro a aumenta, são obtidas vorticidades menores, apesar de serem formados gradientes menores de pressão e de haver maior recirculação de fluido. O microdispositivo também foi analisado sem a presença de *bumps* no microcanal e, como esperado, a magnitude da vorticidade para essa condição é bem inferior àquela obtida com *bumps* presentes, independente de com qual curvatura esteja sendo comparada. Sendo assim, a presença de *bumps* provoca a formação de vórtices nas cavidades do microcanal (AMARAL et al., 2022).

O estreitamento do microcanal aplicando $d=200 \mu\text{m}$ ao invés de $d=250 \mu\text{m}$ contribuiu consideravelmente para a criação de vórtices, ou seja, para a intensificação da vorticidade. A área transversal mais estreita ao longo do microcanal resultou no aumento da velocidade do fluido, porém também provocou um gradiente de pressão mais elevado. O número de Reynolds também influencia diretamente na vorticidade média e na queda de pressão do microdispositivo.

Conclui-se que a melhor opção para o *design* do microdispositivo, entre as modificações de parâmetros propostas nesse projeto, é a geometria com: diâmetro característico mais estreito ($d=200 \mu\text{m}$) para o microcanal, curvatura dos *bumps* $a=2$, zona de entrada cônica e alimentação lateral na posição $s=100 \mu\text{m}$, operando a $Re=40$. Isso porque se acreditava que uma maior vorticidade levaria a uma mistura mais eficiente nos microdispositivos (AMARAL et al., 2022).

Essas geometrias modificadas apresentadas no artigo de Amaral et al. (2022) foram exploradas neste trabalho, o qual focará em favorecer a mistura nesses microdispositivos. O projeto desenvolvido na dissertação de Amaral (2021) também servirá de base para o presente trabalho.

3 Metodologia

Este capítulo indica os critérios adotados para análise dos resultados e as considerações e parâmetros implementados na simulação. Também visa explicitar as condições de contorno aplicadas e sua influência no código. Por último, são apresentadas as simulações numéricas realizadas.

3.1 Critérios adotados

Além de avaliar a eficiência da mistura para definir o *design* do microdispositivo, outro parâmetro importante é o gradiente de pressão (ΔP), pois influencia diretamente no cálculo do custo de bombeamento. Assim, quanto maior a queda de pressão ao longo do microdispositivo, maior a capacidade necessária da bomba para fornecer a vazão de alimentação. Dessa forma, deseja-se aprimorar a mistura, mas com o menor ΔP possível. Além do fator econômico, um baixo ΔP também é importante para evitar sobrepressão no microdispositivo. Vale lembrar que o aumento de Re influencia diretamente a queda de pressão.

Para analisar a eficiência de mistura, é utilizado o critério do Índice de Mistura (IM), que é calculado de acordo com a Equação 3.1, na qual σ representa a variância.

$$IM = 1 - \sqrt{\frac{\sigma^2}{\sigma_{max}^2}} \quad (3.1)$$

Assim, para calcular o IM em certa posição x do microcanal, é necessário o valor de σ naquela posição e o valor de σ_{max} , que corresponde à variância máxima ao longo de todo o comprimento do microdispositivo. A variância σ é calculada por meio da Equação 3.2, na qual Y_{A_k} são os valores de fração mássica da espécie A obtidos nos pontos k ao longo do eixo y na linha traçada para aquela posição x analisada. Dessa forma, o somatório da diferença entre Y_{A_k} e $Y_{A_{global}}$ elevada ao quadrado é feito para os N pontos coletados naquela linha traçada, sendo $Y_{A_{global}}$ correspondente à fração mássica global de etanol. Logo, $Y_{A_{global}}$ é calculado como fluxo mássico da espécie A sobre fluxo mássico total, ou seja, considerando a proporção das correntes de entrada. Assim, o valor de Y_A na saída do microdispositivo seria igual a $Y_{A_{global}}$ se houvesse mistura completa.

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum (Y_{A_k} - Y_{A_{global}})^2} \quad (3.2)$$

Assim, desenvolveu-se um código em linguagem de programação Fortran para varrer todo o comprimento do microdispositivo e calcular a variância em cada uma dessas posições x ao longo do comprimento para que seus respectivos IM fossem calculados. Porém, o IM obtido ao final do microdispositivo é que foi utilizado como critério principal para análise da eficiência de mistura em cada geometria.

3.2 Geometria e parâmetros adotados

Observa-se no artigo de Amaral et al. (2022) que o afunilamento ao longo da zona de entrada cônica é utilizado como estratégia para acelerar o fluido e que a presença de *bumps* no microcanal é utilizada como uma forma de desviar o escoamento. Todas as modificações de geometria analisadas no projeto buscavam intensificar o cruzamento das linhas de corrente e, conseqüentemente, a interação entre os fluidos. A geometria com zona de entrada cônica ($D=600 \mu\text{m}$ e $d=200 \mu\text{m}$), com alimentação lateral na posição $s=100 \mu\text{m}$ e com *bumps* de curvatura $a=2$ ao longo do microcanal foi avaliada no artigo como sendo a melhor opção para o *design* do microdispositivo e, portanto, servirá como geometria de referência neste trabalho.

No presente trabalho, o objetivo é analisar a mistura de dois fluidos nessas geometrias de microdispositivo apresentadas no artigo Amaral et al. (2022). Para que haja mistura de dois diferentes fluidos, é preciso existir ao menos duas entradas, uma para cada um dos fluidos. Sendo assim, duas entradas diferentes foram estabelecidas: a entrada lateral já existente e uma entrada principal pela face na extremidade esquerda da geometria, como demonstrado na Figura 3.1. Então, essa face oeste da geometria, que no artigo era uma parede, se torna uma entrada alinhada de fluido neste trabalho.

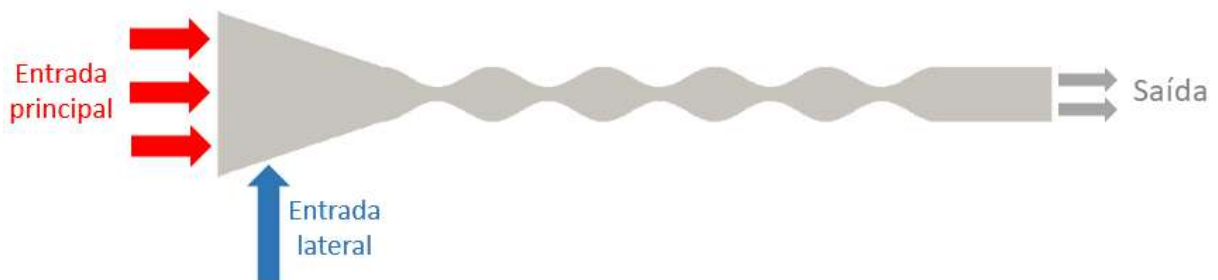


Figura 3.1: Entradas principal e lateral na geometria modificada utilizada para análise de mistura de fluidos no presente trabalho.

A entrada lateral continua com largura $f = 200 \mu\text{m}$ e a entrada principal terá largura $D=600 \mu\text{m}$. O escoamento analisado é composto por duas espécies: A e B. Definiu-se para o projeto a mistura de etanol (espécie A), que é alimentado pela entrada principal, e água (espécie B), que é introduzida pela entrada lateral. Na Tabela 3.1, são apresentadas a viscosidade dinâmica e a densidade de ambos os fluidos a 25°C , que é a temperatura considerada para o sistema isotérmico em questão.

Tabela 3.1 – Propriedades físicas dos fluidos em escoamento (CRC *Handbook of Chemistry and Physics*, 2014).

Fluido	Viscosidade Dinâmica (Pa s)	Densidade (kg/m³)
Etanol (A)	$1,040 \times 10^{-3}$	784,9
Água (B)	$8,935 \times 10^{-4}$	997

3.3 Código

A dissertação de Amaral (2021), cujo código serviu de base para este trabalho, já tinha considerado a equação de conservação do momento e equação da continuidade discretizadas, aplicando o método híbrido para obtenção dos coeficientes e o método SIMPLE de acoplamento pressão-velocidade. No presente trabalho, a fim de investigar a mistura de espécies, foi introduzida no código a equação de transporte de espécie discretizada – também utilizando o método híbrido para obtenção dos coeficientes – e as suas condições de contorno. Este código CFD foi escrito na linguagem de programação Fortran.

De acordo com os conceitos apresentados no capítulo 2 de ‘Fundamentos’, as equações de transporte foram modeladas considerando-se um sistema bidimensional, isotérmico, em regime estacionário e com fluidos incompressíveis. Para a solução numérica do escoamento, elas foram discretizadas por meio do MVF utilizando uma malha estruturada. Optou-se por resolver as equações de transporte discretizadas pelo método da matriz tridiagonal (TDMA, do inglês *Tri-Diagonal Matrix Algorithm*), logo, o mesmo foi implementado no *solver* do código CFD utilizado. Como mencionado na seção 2.4 de ‘Discretização das equações’, adotou-se uma tolerância para o resíduo igual a 10^{-6} .

As condições de contorno (CC) consideradas para a simulação foram: condição de aderência nas paredes, velocidade de entrada uniforme tanto na alimentação principal como na alimentação lateral, e pressão constante na saída.

O usuário define o número de células da malha na direção x (NI) e na direção y (NJ), a densidade e a viscosidade dinâmica das espécies envolvidas no escoamento, as velocidades de entrada, o coeficiente D_{AB} , a pressão estática de saída, os fatores de relaxação e o número total de iterações. Neste trabalho, a pressão manométrica constante de saída foi definida sendo igual a zero, a fração mássica da espécie A foi ajustada como $Y_A = 1$ na entrada principal (alimentação de etanol) e como $Y_A = 0$ na entrada lateral (alimentação de água). Além disso, definiu-se um intervalo no número de iterações para o qual um arquivo de saída fica sendo gerado a fim de acompanhar qualitativamente os resultados.

Sendo assim, os valores de velocidade são conhecidos nas entradas (definido pelo usuário) e nas paredes (velocidade nula devido à condição de aderência); já na saída calcula-se a velocidade por meio de uma extrapolação levando em consideração os valores nos dois pontos nodais precedentes. A pressão, tanto nas paredes como nas entradas, também foi calculada por meio de uma extrapolação utilizando os valores nos dois pontos nodais vizinhos; já o valor da pressão na saída é conhecido (definido pelo usuário). A fração mássica é conhecida apenas nas entradas, sendo seu valor nas paredes e na saída considerado igual ao valor do ponto nodal anterior naquela dada direção (gradiente nulo de Y_A).

3.3.1 Termos extras

Devido às informações adicionais proporcionadas pelas CC, termos extras deverão ser adicionados aos coeficientes e termos fontes das células adjacentes às entradas, às paredes e à saída para cada equação de transporte discretizada. Eles já foram definidos para a equação de momento discretizada na dissertação de Amaral (2021) e inseridos no código. O mesmo procedimento para obtenção de tais termos extras será realizado a seguir para a equação de transporte de espécie discretizada. A análise foi dividida em: parede superior, parede inferior, entrada principal, entrada lateral e saída.

➤ Parede superior

Os termos relativos à face norte presentes na Equação 2.63 estão destacados na Equação 3.3, correspondente ao fluxo mássico de espécie A na face norte da célula (N_n^{YA}).

$$N_n^{YA} = V_n \Delta x Y_{A_n} - D_{AB} \Delta x \left(\frac{\partial Y_A}{\partial y} \Big|_n \right) \quad (3.3)$$

Entretanto, ao analisar essa equação para a parede superior da geometria, $V_n = 0$ devido à condição de aderência nas paredes, resultando em um termo convectivo nulo. Com isso, o fluxo mássico de A na face norte dessas células da CC terá apenas a contribuição do termo difusivo.

Para obter a derivada parcial de Y_A na direção y avaliada na face norte, deve-se primeiro realizar a expansão em série de Taylor de 2ª ordem para $\phi = Y_A$ nos dois pontos nodais anteriores à face norte (pontos P e S), como demonstrado nas Equações 3.4 e 3.5, respectivamente.

$$Y_{AP} = Y_{An} - \frac{\Delta y}{2} \left(\frac{\partial Y_A}{\partial y} \Big|_n \right) \quad (3.4)$$

$$Y_{AS} = Y_{An} - \frac{3\Delta y}{2} \left(\frac{\partial Y_A}{\partial y} \Big|_n \right) \quad (3.5)$$

A fim de obter a derivada parcial de Y_A , é realizada uma manipulação algébrica conforme a dissertação de Amaral (2021), multiplicando a Equação 3.4 por 9 e, em seguida, subtraindo dela a Equação 3.5. Com isso, obtém-se a Equação 3.6 para a derivada parcial de Y_A na direção y avaliada na face norte.

$$\left(\frac{\partial Y_A}{\partial y} \Big|_n \right) = \frac{8 Y_{An} + Y_{AS} - 9 Y_{AP}}{3\Delta y} \quad (3.6)$$

A substituição da Equação 3.6 no termo difusivo da Equação 3.3 resulta na Equação 3.7 do fluxo mássico de espécie A na face norte para a CC da parede superior.

$$N_n^{YA} = -D_{AB} \frac{8\Delta x}{3\Delta y} Y_{An} - D_{AB} \frac{\Delta x}{3\Delta y} Y_{AS} + D_{AB} \frac{3\Delta x}{\Delta y} Y_{AP} \quad (3.7)$$

Porém, a fração mássica da espécie A na parede superior é desconhecida, ou seja, Y_A na face norte é desconhecida para essas células da CC. Considera-se o valor de Y_A na parede superior igual ao valor de Y_A no ponto nodal precedente. Com isso, substitui-se $Y_{An} = Y_{AP}$ na Equação 3.7, de modo que a Equação 3.8 é obtida para o fluxo mássico de espécie A na face norte dessas células da CC.

$$N_n^{YA} = D_{AB} \left(\frac{\Delta x}{3\Delta y} \right) Y_{AP} - D_{AB} \left(\frac{\Delta x}{3\Delta y} \right) Y_{AS} \quad (3.8)$$

Portanto, para as células adjacentes à parede superior, esses termos extras que multiplicam Y_{AP} e Y_{AS} na Equação 3.8 deverão ser adicionados, respectivamente, ao coeficiente a_{Pm} e ao coeficiente a_{Sm} da equação de transporte de espécie discretizada, como demonstrado abaixo

nas Equações 3.9 e 3.10. Vale lembrar que, ao escrever a equação de transporte de espécie discretizada, o coeficiente a_{P_m} fica de um lado da igualdade e o coeficiente a_{S_m} fica do outro. Sendo assim, é necessário inverter o sinal do termo extra que multiplica Y_{A_S} na Equação 3.8.

$$a_{P_m} = a_{P_m} + \left(\frac{D_{AB} \Delta x}{3\Delta y} \right) \quad (3.9)$$

$$a_{S_m} = a_{S_m} + \left(\frac{D_{AB} \Delta x}{3\Delta y} \right) \quad (3.10)$$

➤ Parede inferior

Os termos relativos à face sul presentes na Equação 2.63 estão destacados na Equação 3.11, correspondente ao fluxo mássico de espécie A na face sul da célula ($N_s^{Y_A}$).

$$N_s^{Y_A} = -V_s \Delta x Y_{A_S} + D_{AB} \Delta x \left(\frac{\partial Y_A}{\partial y} \Big|_s \right) \quad (3.11)$$

Entretanto, ao analisar essa equação para a parede inferior da geometria, $V_s = 0$ devido à condição de aderência nas paredes, resultando em um termo convectivo nulo. Com isso, o fluxo mássico de A na face sul dessas células da CC terá apenas a contribuição do termo difusivo.

De forma análoga à parede superior, realiza-se a expansão em série de Taylor de 2ª ordem para $\phi = Y_A$ nos dois pontos nodais vizinhos à face sul (pontos P e N). Ao multiplicar por 9 a expressão de Y_{A_P} e subtrair dela a expressão de Y_{A_N} , obtém-se a Equação 3.12 para a derivada parcial de Y_A na direção y avaliada na face sul.

$$\left(\frac{\partial Y_A}{\partial y} \Big|_s \right) = \frac{9 Y_{A_P} - 8 Y_{A_S} - Y_{A_N}}{3\Delta y} \quad (3.12)$$

A substituição da Equação 3.12 no termo difusivo da Equação 3.11 resulta na Equação 3.13 do fluxo mássico de espécie A na face sul para a CC da parede inferior.

$$N_s^{Y_A} = D_{AB} \frac{3\Delta x}{\Delta y} Y_{A_P} - D_{AB} \frac{8\Delta x}{3\Delta y} Y_{A_S} - D_{AB} \frac{\Delta x}{3\Delta y} Y_{A_N} \quad (3.13)$$

Porém, a fração mássica da espécie A na parede inferior é desconhecida, ou seja, Y_A na face sul é desconhecida para essas células da CC. Considera-se o valor de Y_A na parede inferior igual ao valor de Y_A no ponto nodal precedente. Com isso, substitui-se $Y_{A_S} = Y_{A_P}$ na Equação 3.13, de

modo que a Equação 3.14 é obtida para o fluxo mássico de espécie A na face sul dessas células da CC.

$$N_s^{Y_A} = \left(\frac{D_{AB} \Delta x}{3\Delta y} \right) Y_{AP} - \left(\frac{D_{AB} \Delta x}{3\Delta y} \right) Y_{AN} \quad (3.14)$$

Portanto, para as células adjacentes à parede inferior, esses termos extras que multiplicam Y_{AP} e Y_{AN} na Equação 3.14 deverão ser adicionados, respectivamente, ao coeficiente a_{P_m} e ao coeficiente a_{N_m} da equação de transporte de espécie discretizada, como demonstrado abaixo nas Equações 3.15 e 3.16. Vale lembrar que, ao escrever a equação de transporte de espécie discretizada, o coeficiente a_{P_m} fica de um lado da igualdade e o coeficiente a_{N_m} fica do outro. Sendo assim, é necessário inverter o sinal do termo extra que multiplica Y_{AN} na Equação 3.14.

$$a_{P_m} = a_{P_m} + \left(\frac{D_{AB} \Delta x}{3\Delta y} \right) \quad (3.15)$$

$$a_{N_m} = a_{N_m} - \left(\frac{D_{AB} \Delta x}{3\Delta y} \right) \quad (3.16)$$

➤ Entrada principal

Os termos relativos à face oeste presentes na Equação 2.63 estão destacados na Equação 3.17, correspondente ao fluxo mássico de espécie A na face oeste da célula ($N_w^{Y_A}$).

$$N_w^{Y_A} = -U_w \Delta y Y_{Aw} + D_{AB} \Delta y \left(\frac{\partial Y_A}{\partial x} \Big|_w \right) \quad (3.17)$$

Entretanto, ao analisar essa equação para a entrada principal, a velocidade na face oeste é igual à velocidade de entrada do fluido ($U_w = U_{in}$) e a fração mássica na face oeste é igual à fração mássica da entrada principal ($Y_{Aw} = Y_{Ain}$). Com isso, o fluxo mássico de A na face oeste dessas células da CC pode ser definido por meio da Equação 3.18.

$$N_w^{Y_A} = -U_{in} \Delta y Y_{Ain} + D_{AB} \Delta y \left(\frac{\partial Y_A}{\partial x} \Big|_w \right) \quad (3.18)$$

De forma análoga às paredes, realiza-se a expansão em série de Taylor de 2ª ordem para $\phi = Y_A$ nos dois pontos nodais vizinhos à face oeste (pontos P e E). Ao multiplicar por 9 a expressão de Y_{AP} e subtrair dela a expressão de Y_{AE} , obtém-se a Equação 3.19 para a derivada parcial de Y_A na direção x avaliada na face oeste, sendo que $Y_{Aw} = Y_{Ain}$.

$$\left(\frac{\partial Y_A}{\partial x}\right)_w = \frac{9 Y_{AP} - 8 Y_{Aw} - Y_{AE}}{3\Delta x} = \frac{9 Y_{AP} - 8 Y_{Ain} - Y_{AE}}{3\Delta x} \quad (3.19)$$

A substituição da Equação 3.19 no termo difusivo da Equação 3.18 resulta na Equação 3.20 do fluxo mássico de espécie A na face oeste para a CC da entrada principal.

$$N_w^{Y_A} = -U_{in} \Delta y Y_{Ain} - D_{AB} \frac{8\Delta y}{3\Delta x} Y_{Ain} - D_{AB} \frac{\Delta y}{3\Delta x} Y_{AE} + D_{AB} \frac{3\Delta y}{\Delta x} Y_{AP} \quad (3.20)$$

Portanto, para as células adjacentes à entrada principal, esses termos extras que multiplicam Y_{AP} e Y_{AE} na Equação 3.20 deverão ser adicionados, respectivamente, ao coeficiente a_{P_m} e ao coeficiente a_{E_m} da equação de transporte de espécie discretizada, como demonstrado abaixo nas Equações 3.21 e 3.22. Também haverá um termo fonte S_U sendo somado à equação, definido na Equação 3.23, já que partes da Equação 3.20 não dependem da variável Y_A , visto que Y_{Ain} apresenta um valor constante.

Vale lembrar que, ao escrever a equação de transporte de espécie discretizada, o coeficiente a_{P_m} fica de um lado da igualdade enquanto que o coeficiente a_{E_m} e o termo fonte S_U ficam do outro. Sendo assim, é necessário inverter o sinal do termo extra que multiplica Y_{AE} e dos termos extras independentes de Y_A na Equação 3.20.

$$a_{P_m} = a_{P_m} + D_{AB} \left(\frac{3\Delta y}{\Delta x}\right) \quad (3.21)$$

$$a_{E_m} = a_{E_m} + \left(\frac{D_{AB} \Delta y}{3\Delta x}\right) \quad (3.22)$$

$$S_U = U_{in} \Delta y Y_{Ain} + D_{AB} \left(\frac{8\Delta y}{3\Delta x}\right) Y_{Ain} \quad (3.23)$$

Como neste trabalho optou-se por uma alimentação de etanol através da entrada principal, o valor $Y_{Ain} = 1$ pode ser substituído na Equação 3.23 acima.

➤ **Entrada lateral**

Os termos relativos à face sul presentes na Equação 2.63 já foram destacados na Equação 3.11. Entretanto, ao analisar essa equação para a entrada lateral, a velocidade na face sul é igual à velocidade de entrada do fluido ($V_s = V_{in}$) e a fração mássica na face sul é igual à fração mássica da entrada lateral ($Y_{As} = Y_{Ain}$). Com isso, o fluxo mássico de A na face sul dessas células da CC pode ser definido por meio da Equação 3.24.

$$N_s^{Y_A} = -V_{in} \Delta x Y_{A_{in}} + D_{AB} \Delta x \left(\frac{\partial Y_A}{\partial y} \Big|_s \right) \quad (3.24)$$

A derivada parcial de Y_A na direção y avaliada na face sul já foi obtida na Equação 3.12, sendo que agora $Y_{A_s} = Y_{A_{in}}$. A substituição dessa equação no termo difusivo da Equação 3.24 resulta na Equação 3.25 do fluxo mássico de espécie A na face sul para a CC da entrada lateral.

$$N_s^{Y_A} = -V_{in} \Delta x Y_{A_{in}} - D_{AB} \frac{8\Delta x}{3\Delta y} Y_{A_{in}} - D_{AB} \frac{\Delta x}{3\Delta y} Y_{A_N} + D_{AB} \frac{3\Delta x}{\Delta y} Y_{A_P} \quad (3.25)$$

Portanto, para as células adjacentes à entrada lateral, esses termos extras que multiplicam Y_{A_P} e Y_{A_N} na Equação 3.25 deverão ser adicionados, respectivamente, ao coeficiente a_{P_m} e ao coeficiente a_{N_m} da equação de transporte de espécie discretizada, como demonstrado abaixo nas Equações 3.26 e 3.27. Assim como no caso da entrada principal, haverá um termo fonte S_U sendo somado à equação, definido na Equação 3.28, já que partes da Equação 3.25 não dependem da variável Y_A , visto que $Y_{A_{in}}$ apresenta um valor constante.

Vale lembrar que, ao escrever a equação de transporte de espécie discretizada, o coeficiente a_{P_m} fica de um lado da igualdade enquanto que o coeficiente a_{N_m} e o termo fonte S_U ficam do outro. Sendo assim, é necessário inverter o sinal do termo extra que multiplica Y_{A_N} e dos termos extras independentes de Y_A na Equação 3.25.

$$a_{P_m} = a_{P_m} + D_{AB} \left(\frac{3\Delta x}{\Delta y} \right) \quad (3.26)$$

$$a_{N_m} = a_{N_m} + \frac{D_{AB} \Delta x}{3\Delta y} \quad (3.27)$$

$$S_U = V_{in} \Delta x Y_{A_{in}} + D_{AB} \left(\frac{8\Delta x}{3\Delta y} \right) Y_{A_{in}} \quad (3.28)$$

Como neste trabalho optou-se por uma alimentação de água através da entrada lateral, o valor $Y_{A_{in}} = 0$ pode ser substituído na Equação 3.28 acima, de modo que o termo fonte S_U seria nulo.

➤ Saída

Os termos relativos à face leste presentes na Equação 2.63 estão destacados na Equação 3.29, correspondente ao fluxo mássico de espécie A na face leste da célula ($N_e^{Y_A}$).

$$N_e^{Y_A} = U_e \Delta y Y_{A_e} - D_{AB} \Delta y \left(\frac{\partial Y_A}{\partial x} \Big|_e \right) \quad (3.29)$$

Entretanto, a velocidade e a fração mássica da espécie A na saída são desconhecidas, ou seja, a velocidade na face leste e a fração mássica da espécie A na face leste são desconhecidas para essas células da CC. Para a formulação dos termos adicionais da equação de transporte de espécie discretizada para essas células vizinhas à saída, considera-se o valor de U na saída igual ao valor de U no ponto nodal precedente, assim como o valor de Y_A na saída igual ao valor de Y_A no ponto nodal precedente. Com isso, substitui-se $U_e = U_P$ e $Y_{Ae} = Y_{AP}$ na Equação 3.29, de modo que a Equação 3.30 é obtida para o fluxo mássico de espécie A na face leste dessas células da CC.

$$N_e^{YA} = U_P \Delta y Y_{AP} - D_{AB} \Delta y \left(\frac{\partial Y_A}{\partial x} \Big|_e \right) \quad (3.30)$$

De forma análoga às paredes, realiza-se a expansão em série de Taylor de 2ª ordem para $\phi = Y_A$ nos dois pontos nodais vizinhos à face leste (pontos P e W). Ao multiplicar por 9 a expressão de Y_{AP} e subtrair dela a expressão de Y_{AW} , obtém-se a Equação 3.31 para a derivada parcial de Y_A na direção x avaliada na face leste, sendo que $Y_{Ae} = Y_{AP}$.

$$\left(\frac{\partial Y_A}{\partial x} \Big|_e \right) = \frac{8 Y_{Ae} + Y_{AW} - 9 Y_{AP}}{3 \Delta x} = \frac{Y_{AW} - Y_{AP}}{3 \Delta x} \quad (3.31)$$

A substituição da Equação 3.31 no termo difusivo da Equação 3.30 resulta na Equação 3.32 do fluxo mássico de espécie A na face leste para a CC da saída.

$$N_e^{YA} = \left(U_P \Delta y + \frac{D_{AB} \Delta y}{3 \Delta x} \right) Y_{AP} - \left(\frac{D_{AB} \Delta y}{3 \Delta x} \right) Y_{AW} \quad (3.32)$$

Portanto, para as células adjacentes à saída, esses termos extras que multiplicam Y_{AP} e Y_{AW} na Equação 3.32 deverão ser adicionados, respectivamente, ao coeficiente a_{Pm} e ao coeficiente a_{Wm} da equação de transporte de espécie discretizada, como demonstrado abaixo nas Equações 3.33 e 3.34. Vale lembrar que, ao escrever a equação de transporte de espécie discretizada, o coeficiente a_{Pm} fica de um lado da igualdade e o coeficiente a_{Wm} fica do outro. Sendo assim, é necessário inverter o sinal do termo extra que multiplica Y_{AW} na Equação 3.32.

$$a_{Pm} = a_{Pm} + U_P \Delta y + \frac{D_{AB} \Delta y}{3 \Delta x} \quad (3.33)$$

$$a_{Wm} = a_{Wm} - \frac{D_{AB} \Delta y}{3 \Delta x} \quad (3.34)$$

Além da equação de transporte de espécie discretizada e de suas condições de contorno, outras equações adicionais precisarão ser introduzidas no código, agora que há mistura de fluidos no sistema. Por exemplo, as equações de transporte deverão considerar a densidade e a viscosidade dinâmica da mistura em escoamento, as quais são calculadas por meio das Equações 3.35 e 3.36, respectivamente, sendo ponderadas pela fração mássica da espécie A (Y_A).

$$\rho = \rho_A Y_A + \rho_B(1 - Y_A) \quad (3.35)$$

$$\mu = \mu_A Y_A + \mu_B(1 - Y_A) \quad (3.36)$$

As densidades da mistura, da espécie A e da espécie B são representadas por ρ , ρ_A e ρ_B , respectivamente. As viscosidades dinâmicas da mistura, da espécie A e da espécie B são representadas por μ , μ_A e μ_B , respectivamente. Vale lembrar que os valores de ρ_A , ρ_B , μ_A e μ_B são definidos pelo usuário. Como a fração mássica Y_A varia ao longo da malha, densidades e viscosidades dinâmicas locais para cada célula deverão ser calculadas. Vale lembrar que a soma das frações mássicas de todas as espécies deve ser igual a 1. Como há apenas dois fluidos no sistema analisado, a fração mássica da espécie B é obtida simplesmente pela diferença.

3.4 Simulações numéricas

Após realizadas as modificações necessárias no código para incluir a equação de transporte de espécie e considerar a mistura de dois fluidos distintos, foi realizada uma simulação utilizando uma geometria retangular simples para o microdispositivo. Em paralelo, foi feita uma simulação aplicando as mesmas condições, parâmetros e geometria no programa comercial Ansys CFX (versão Ansys 2022 R1) com o objetivo de realizar uma verificação do código modificado.

Com a introdução da equação de transporte de espécie discretizada (seus coeficientes, termos fontes e condições de contorno), outro parâmetro importante que deve ser definido pelo usuário é o coeficiente de difusão mássica de A em B. Diferentes valores foram encontrados na literatura para o coeficiente de difusão do etanol em água, além de diversas expressões para o seu cálculo. Sendo assim, um teste de sensibilidade foi realizado a fim de avaliar o nível de influência desse parâmetro no resultado. No fim, para o restante das simulações, adotou-se um valor de coeficiente de difusão de etanol em água a 25 °C igual a $1,2 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ (INCROPERA et al., 2008).

Embora o número de células da malha na direção x e na direção y seja definido pelo usuário, observou-se uma limitação no código em relação ao aumento do número de células. Logo, para as simulações deste trabalho, adotou-se uma malha homogênea 180x40. Porém, a fim de averiguar a incerteza da malha aplicada, um teste de malha foi realizado, no qual compara-se os resultados obtidos para uma variável crítica ao utilizar diferentes malhas na simulação.

Para esse teste de malha, aplicou-se o procedimento recomendado para estimativa e divulgação da incerteza devido à discretização em aplicações CFD (CELIK et al., 2008), por meio do qual o índice de convergência da malha (GCI) é calculado. Para isso, utiliza-se o fator de refinamento da malha (r) e, conseqüentemente, é necessário um tamanho de malha representativo (h), calculado para cada malha por meio da Equação 3.37. Nela, o termo ΔA_i representa a área de cada célula i da malha, de modo que o somatório das áreas é feito para as N células da malha.

$$h = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta A_i)} \quad (3.37)$$

A abordagem inicial do presente trabalho é baseada na geometria de referência, mas com a zona de entrada cônica sendo adaptada para a situação de duas entradas. Para diferenciá-la da geometria do artigo de Amaral et al. (2022), em que havia apenas uma entrada, a geometria com duas entradas passou a ser referenciada como geometria A (com distância $s=100 \mu\text{m}$ da entrada lateral em relação à entrada principal e com curvatura dos *bumps* $a=2$). O mesmo será feito para referenciar as outras geometrias, como demonstrado na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Nomenclatura para referenciar cada geometria e sua respectiva característica geométrica.

Nomenclatura	Características geométricas
Geometria A	$s=100 \mu\text{m}$ e $a=2$
Geometria B	$s=300 \mu\text{m}$ e $a=2$
Geometria C	$s=100 \mu\text{m}$ e $a=1$
Geometria D	$s=100 \mu\text{m}$ e $a=4$

A metodologia aplicada às simulações deste trabalho foi investigar inicialmente a mistura obtida com a geometria A, operando a $Re=30$. Em seguida, analisar o resultado obtido a $Re=30$ utilizando as outras geometrias B, C e D, ou seja, variando a posição da entrada lateral ($s=100 \mu\text{m}$ ou $s=300 \mu\text{m}$) e variando a curvatura dos *bumps* ($a=2$, $a=1$ e $a=4$). Todas as

geometrias analisadas possuem largura $D=600 \mu\text{m}$ para a entrada principal, largura $f=200 \mu\text{m}$ para a entrada lateral e diâmetro característico $d=200 \mu\text{m}$ ao final da seção cônica (equivalente ao diâmetro do microcanal).

Em seguida, avaliou-se a influência da velocidade na mistura obtida, ou seja, variando número de Reynolds ($Re=10$, $Re=30$ e $Re=40$). Assim, as velocidades de entrada dos fluidos (velocidade U do etanol na entrada principal e velocidade V da água na entrada lateral) foram definidas de modo a obter aquele Re especificado. Estes valores de velocidade utilizados são apresentados na Tabela 3.3.

Tabela 3.3 – Velocidades de entrada do etanol e da água para o caso de uma entrada lateral no microdispositivo em função do valor de Re desejado.

Re	U_{in} etanol (mm/s)	V_{in} água (mm/s)
10	4,099	36,893
30	12,056	108,508
40	15,914	143,231

Todos os valores de Re nas diferentes simulações foram calculados no mesmo ponto de referência – no caso, ao final da seção cônica ($x=600 \mu\text{m}$). Para isso, utilizou-se o diâmetro característico nessa posição ($d=200 \mu\text{m}$), a velocidade média do fluido nessa posição obtida por meio da simulação e os valores de densidade e viscosidade dinâmica da mistura calculados de acordo com as Equações 3.35 e 3.36, respectivamente, ponderados pelo $Y_{A_{global}}$.

As funções utilizadas para definir a região da geometria com *bumps* são apresentadas na Equação 3.38, na qual a expressão de $p_s(x)$ é aplicada para o cálculo das posições da parede inferior (*south wall*) em função do comprimento x e a expressão $p_n(x)$ é implementada para o cálculo das posições da parede superior (*north wall*) em função do comprimento x . Nota-se que, para modificar a curvatura dos *bumps* no microcanal, basta modificar o valor de a nessas expressões que descrevem a região de *bumps* da geometria.

$$p_s(x) = \frac{D-d}{2} + \left[0,125 D \left(\sin \left(\frac{3\pi}{2} \left(\frac{x}{D} - 1 \right) \right) \right)^a \right] \quad (3.38)$$

$$p_n(x) = \frac{D+d}{2} - \left[0,125 D \left(\sin \left(\frac{3\pi}{2} \left(\frac{x}{D} - 1 \right) \right) \right)^a \right]$$

Posteriormente, analisou-se a mistura obtida no microdispositivo ao utilizar uma geometria com duas entradas laterais de água (uma superior e outra inferior), estando ambas localizadas a uma distância $s=100\ \mu\text{m}$ da entrada principal de etanol. Essa segunda entrada lateral também terá largura $f=200\ \mu\text{m}$. As velocidades de entrada dos fluidos (velocidade U do etanol na entrada principal e velocidade V da água nas entradas laterais) utilizadas nessas simulações são apresentadas na Tabela 3.4 para cada valor de Re investigado. Vale ressaltar que a mesma velocidade de entrada é aplicada para a alimentação lateral superior e para a alimentação lateral inferior.

Tabela 3.4 – Velocidades de entrada do etanol e da água para o caso de duas entradas laterais no microdispositivo em função do valor de Re desejado.

Re	U_{in} etanol (mm/s)	V_{in} água (mm/s)
10	4,099	18,446
30	12,056	54,254
40	15,914	71,615

4 Resultados e Discussão

4.1 Verificação do código

Para realizar a verificação do código modificado, utilizando uma geometria retangular simples para o microdispositivo, foram conduzidas duas simulações em paralelo com as mesmas condições e parâmetros: uma aplicando o código em questão e outra por meio do programa Ansys CFX. Os resultados obtidos para ambas as simulações foram analisados e comparados.

Sabendo que o etanol é alimentado pela entrada principal e que a água é alimentada pela entrada lateral, os valores de fração mássica da espécie A no plano XY e do campo de velocidade obtidos utilizando o código deste trabalho e utilizando o programa Ansys CFX são apresentados na Figura 4.1 e na Figura 4.2, respectivamente.

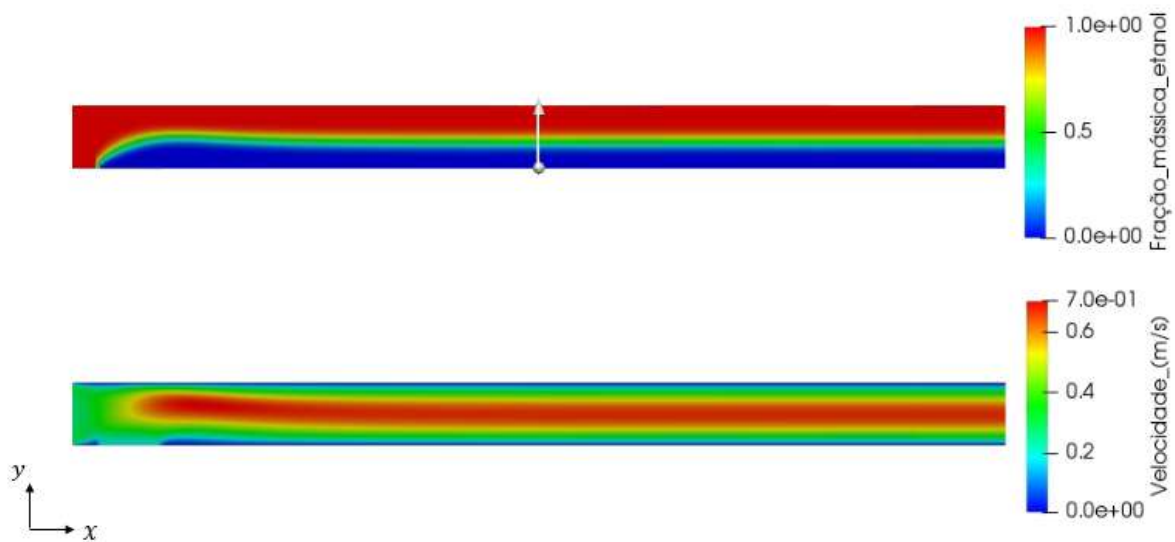


Figura 4.1: Perfis de fração mássica e velocidade em um microdispositivo de geometria retangular simples obtidos por meio do código aplicado no presente trabalho.

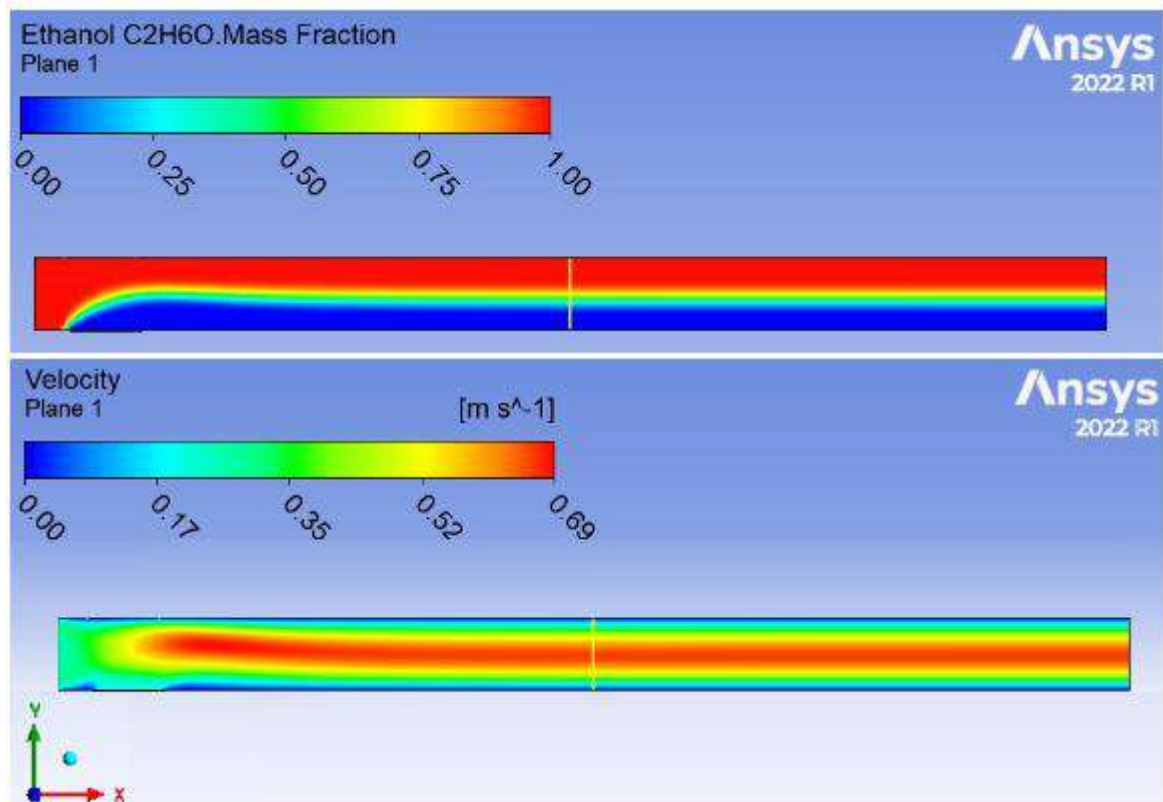


Figura 4.2: Perfis de fração mássica e velocidade em um microdispositivo de geometria retangular simples obtidos por meio do programa Ansys CFX.

Observa-se nas Figuras 4.1 e 4.2 que, de fato, ao utilizar uma geometria retangular simples para o microcanal, o fenômeno de transporte preponderante é o da difusão. Este fenômeno é mais lento, pois depende dos efeitos moleculares para a transferência da propriedade ao longo do fluido. Assim, nota-se que 3 mm de comprimento para o microcanal não seriam suficientes para alcançar uma mistura eficiente. Inclusive, calculou-se o IM para essa geometria e foi encontrado um valor pequeno, inferior a 50%.

Para verificação do código modificado com a equação de transporte de espécie introduzida, comparou-se diretamente os valores de fração mássica da espécie A obtidos ao longo do eixo y na posição $x=1,5$ mm para as duas simulações, como demonstrado na Figura 4.3. Como ambas as curvas apresentam resultados de Y_A muito próximos, considerou-se o código verificado, de modo que o mesmo foi utilizado para todas as simulações seguintes deste trabalho, cujos resultados são apresentados a seguir. Vale destacar que tal posição x avaliada na Figura 4.3 é indicada pela seta branca na Figura 4.1 e pela linha amarela na Figura 4.2.

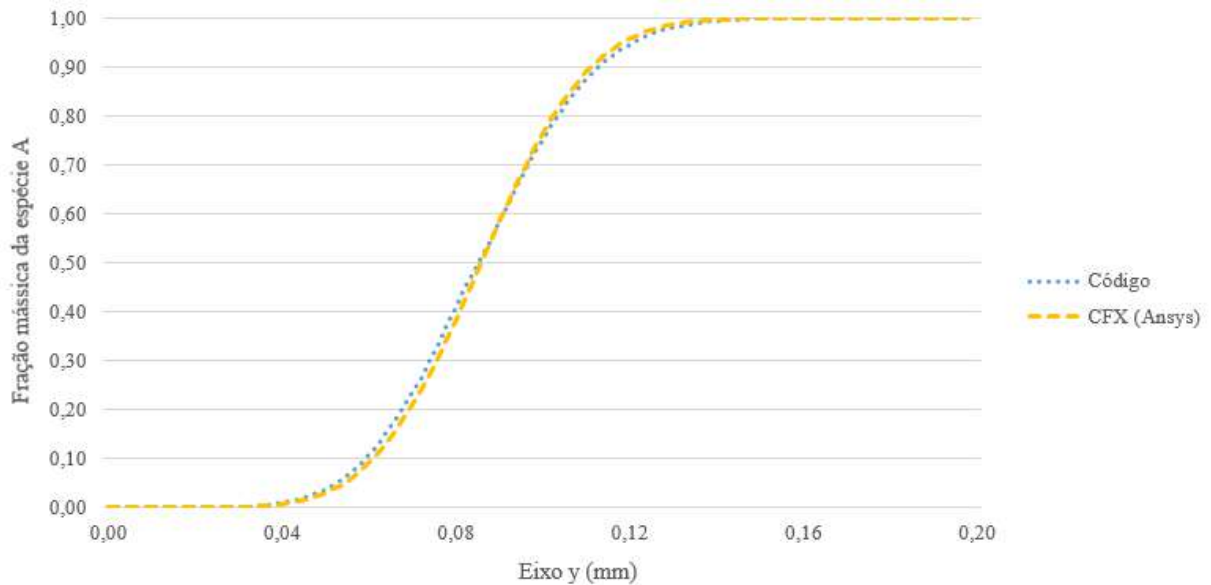


Figura 4.3: Comparação dos perfis de fração mássica da espécie A ao longo do eixo y na posição $x=1,5$ mm, obtidos com o código modificado (em azul) e pelo programa Ansys CFX (em amarelo).

4.2 Teste de sensibilidade

Como mencionado, diversos valores foram encontrados na literatura para o coeficiente D_{AB} de difusão do etanol em água. Havia uma preocupação quanto ao nível de influência desse parâmetro no resultado, logo, realizou-se um teste de sensibilidade para tal parâmetro, no qual conduziu-se uma simulação com o seu menor valor ($D_{AB} = 0,84 \times 10^{-3} \text{ mm}^2/\text{s}$) e uma com o seu maior valor ($D_{AB} = 3,1 \times 10^{-3} \text{ mm}^2/\text{s}$) encontrado. Avaliou-se o quanto a variável de interesse – no caso, a fração mássica da espécie A – muda com a variação de D_{AB} .

Novamente, a comparação foi feita entre os valores de fração mássica da espécie A obtidos ao longo do eixo y na posição $x=1,5$ mm para cada simulação, como demonstrado na Figura 4.4. Repara-se que quase não houve diferença no resultado ao aplicar o D_{AB} mínimo ou o D_{AB} máximo. Para tornar evidente que esse parâmetro estava sendo levado em consideração pelo código, realizou-se uma nova simulação mudando sua ordem de grandeza ($D_{AB}=0,031 \text{ mm}^2/\text{s}$). Observa-se que, diante disso, uma variação é constatada nos resultados de fração mássica da espécie A, como também demonstrado na Figura 4.4.

Sendo assim, pode-se afirmar que, no caso do intervalo encontrado para o coeficiente de difusão do etanol em água, o valor especificado para D_{AB} realmente não terá influência significativa no resultado.

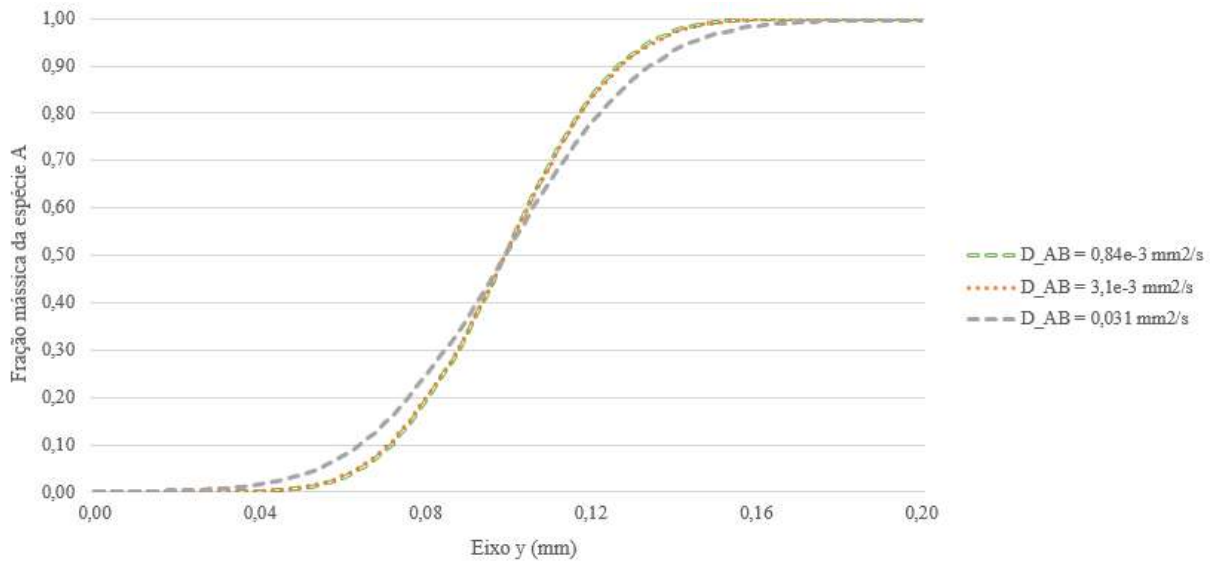


Figura 4.4: Comparação dos perfis de fração mássica da espécie A ao longo do eixo y na posição $x=1,5$ mm obtidos ao aplicar o menor valor D_{AB} encontrado na pesquisa bibliográfica (em verde), o maior valor D_{AB} encontrado na pesquisa bibliográfica (em laranja) e o valor D_{AB} com uma ordem de grandeza maior (em cinza).

4.3 Teste de malha

O código demonstrou conter um limite para o número de células da malha aplicada, isto é, uma limitação é imposta ao refinamento da malha. Nas simulações deste trabalho, foi utilizada uma malha homogênea com $N_I=180$ e $N_J=40$, equivalente ao refinamento máximo alcançado. Sendo assim, um teste de malha foi realizado a fim de analisar se a malha estava suficientemente refinada e averiguar a confiabilidade dos resultados obtidos ao utilizá-la.

Para o teste de malha, aplicou-se o procedimento recomendado para estimativa e divulgação da incerteza devido à discretização em aplicações CFD (CELIK et al., 2008), comparando os resultados obtidos para uma variável crítica ϕ ao aplicar 3 malhas: a refinada (180x40), uma intermediária (150x40) e uma grosseira (120x40). Como o objetivo deste trabalho é analisar a mistura obtida ao final dos microdispositivos investigados, adotou-se $\phi=IM$ calculado na saída do microdispositivo para o teste de malha. Afinal, este é o ponto de interesse, cujo IM foi utilizado como critério de avaliação da eficiência de mistura para os resultados das diferentes simulações. Os resultados são apresentados na Tabela 4.1, sendo h condizente a um tamanho de malha representativo calculado por meio da Equação 3.37, r correspondente ao fator de refinamento da malha ($r_{21} = h_2/h_1$ e $r_{32} = h_3/h_2$) e GCI equivalente ao índice de convergência da malha ao analisar o IM.

Tabela 4.1 – Resultados do índice de convergência da malha ao analisar o IM na saída do microdispositivo aplicando o procedimento de CELIK et al. (2008).

Malha	n° células	h	r	GCI do IM
(1) refinada	180x40	0,008897	-	9,20%
(2) intermediária	150x40	0,009746	$r_{21} = 1,095329$	-
(3) grosseira	120x40	0,010897	$r_{32} = 1,118158$	-

O procedimento de CELIK et al. (2008) recomenda o uso de $r > 1,3$ baseado em experiência prévia. No entanto, não foi possível obter um fator de refinamento da malha acima de tal valor para a malha do presente trabalho devido à limitação observada no código para o aumento do número de células. O procedimento também afirma que o refinamento da malha deve ser feito sistematicamente, ou seja, o refinamento em si deve ser estruturado. Observa-se que, de fato, o fator de refinamento da malha foi mantido aproximadamente constante.

Avaliando a malha aplicada neste trabalho, obteve-se um índice de convergência da malha fina $GCI_{fine} = 9,20\%$ para o IM ao final do microdispositivo. Como a incerteza desse parâmetro está abaixo de 10% e tendo em vista as limitações impostas para aumento do número de células neste trabalho, considerou-se a malha suficientemente refinada para um resultado constante do parâmetro. Entretanto, para comparação e avaliação de outras variáveis do sistema, seria importante refinar e investigar mais essa malha.

4.4 Simulações numéricas

Como o objetivo principal deste trabalho é analisar a mistura obtida no microdispositivo, foram feitas simulações com as geometrias e condições operacionais investigadas, utilizando o código modificado e verificado com a equação de transporte de espécie discretizada incluída.

4.4.1 Análises com 1 entrada lateral

Inicialmente, analisou-se os resultados obtidos utilizando a geometria A, a qual é baseada na geometria de referência. A Figura 4.5 retrata os valores de fração mássica da espécie A no plano XY e o campo de velocidade obtidos para tal geometria A, operando a um $Re=30$ e com fração mássica global da espécie A ($Y_{A_{global}}$) igual a 0,208. Lembrando que esse valor equivale à

fração mássica de etanol na corrente total considerando a proporção das correntes de entrada, de modo que seu valor é calculado como fluxo mássico da espécie A sobre fluxo mássico total.

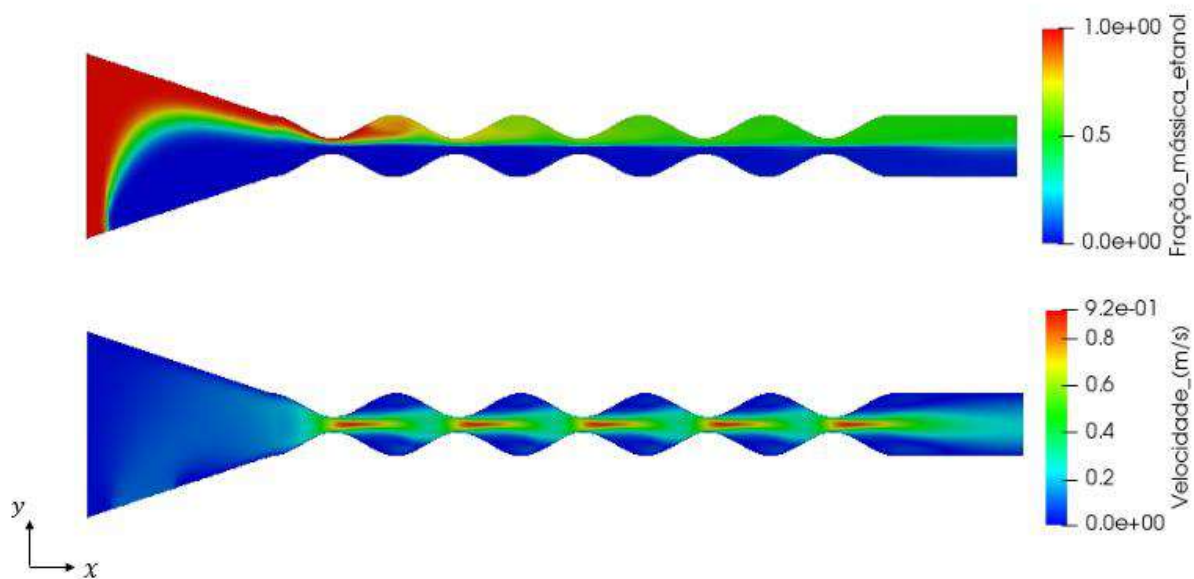


Figura 4.5: Perfis de fração mássica da espécie A e de velocidade obtidos com a Geometria A, $Re=30$ e $Y_{A_{global}}=0,208$.

Nessas mesmas condições e aplicando o código em questão, foi conduzida uma simulação para a geometria retangular simples, a qual apresenta a difusão do etanol em água como fenômeno de transporte dominante. Calculou-se o IM na saída do microdispositivo e a queda de pressão ao longo do microdispositivo para ambas as geometrias simuladas. Estes valores são apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 – IM na saída e queda de pressão ao longo do microdispositivo obtidos para a geometria A e para a geometria retangular simples, ambas operando a $Re=30$ e com $Y_{A_{global}}=0,208$.

Geometria do microdispositivo	IM na saída	ΔP (kPa)
Geometria retangular simples	0,475	0,180
Geometria A	0,721	2,781

Nota-se já um ganho de mistura utilizando a geometria proposta (com zona de entrada cônica, com uma entrada lateral e com a presença de *bumps* no microcanal) em relação à geometria não modificada (microcanal retangular convencional).

Em seguida, a fim de verificar se a variação da curvatura dos *bumps* ou da posição da entrada lateral influenciam a eficiência de mistura, foram conduzidas simulações para as outras geometrias investigadas (geometrias B, C e D) aplicando as mesmas condições de $Re=30$ e

$Y_{A_{global}}=0,208$. Os valores de Y_A no plano XY obtidos para essas geometrias e para a geometria A estão apresentados lado a lado na Figura 4.6.

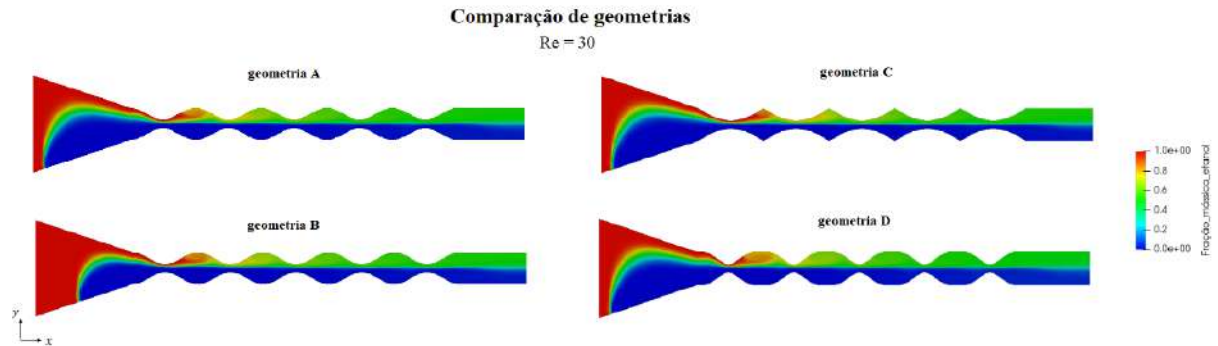


Figura 4.6: Perfis de fração mássica da espécie A no plano XY obtidos para as geometrias A, B, C e D simuladas a $Re=30$ e com $Y_{A_{global}}=0,208$.

Comparou-se diretamente os valores de fração mássica da espécie A obtidos ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm (ou seja, na saída do microdispositivo) para essas geometrias simuladas, como demonstrado na Figura 4.7.

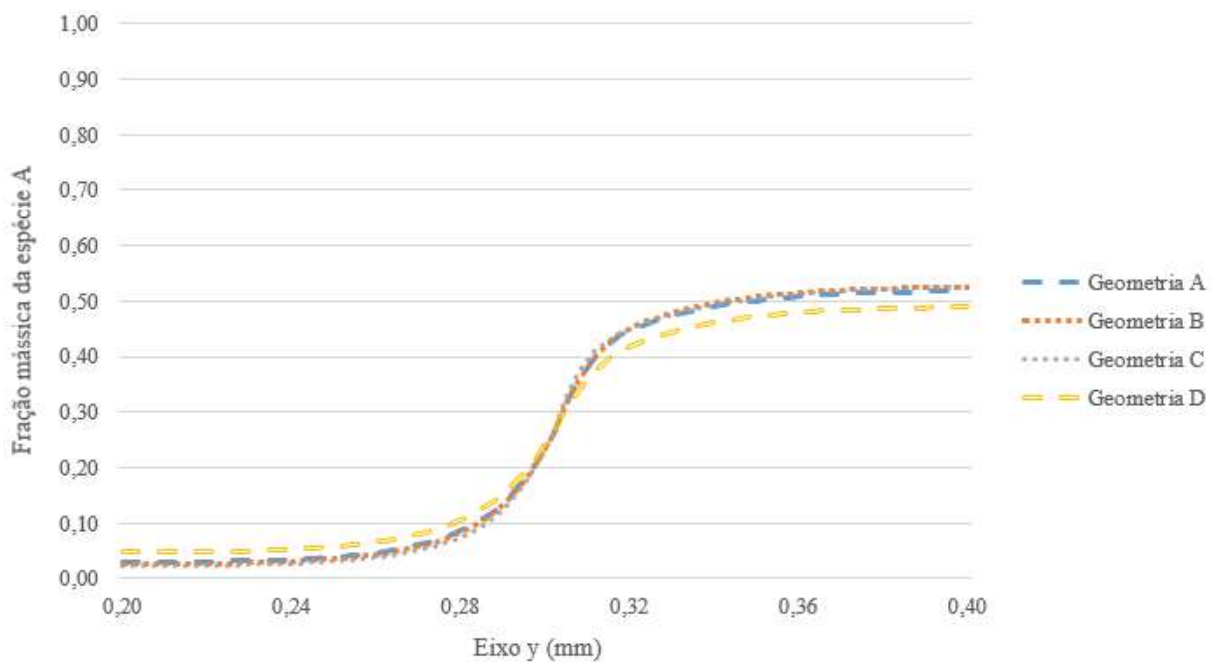


Figura 4.7: Comparação dos perfis de Y_A ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm obtidos para as geometrias A (em azul), B (em laranja), C (em cinza) e D (em amarelo) simuladas a $Re=30$ e com $Y_{A_{global}}=0,208$.

Como o objetivo é analisar a mistura obtida ao final do microdispositivo, o IM na saída foi calculado para cada uma dessas geometrias. A queda de pressão ao longo do microdispositivo também foi calculada para essas geometrias, já que ela é uma variável importante a ser

considerada devido ao seu impacto no custo. Ambos os parâmetros estão apresentados na Tabela 4.3, obtidos para as geometrias a $Re=30$ e $Y_{A_{global}}=0,208$.

Tabela 4.3 – Valores de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo para as geometrias A, B, C e D, simuladas a $Re=30$ e $Y_{A_{global}}=0,208$.

Geometria	IM na saída	ΔP (kPa)
Geometria A	0,721	2,781
Geometria B	0,715	2,780
Geometria C	0,713	3,119
Geometria D	0,749	2,582

Comparando os resultados obtidos, nota-se que a Geometria D (curvatura dos *bumps* $a=4$) se destaca ligeiramente, uma vez que apresenta um IM um pouco mais elevado e uma queda de pressão levemente menor. No artigo de Amaral et al. (2022), em que havia a presença de apenas uma entrada, a geometria com curvatura dos *bumps* $a=2$ apresentou uma maior vorticidade do que a geometria com curvatura dos *bumps* $a=4$. Sendo assim, a expectativa inicial era que a geometria com $a=2$ levasse à melhor mistura. Já neste trabalho, observou-se que o melhor resultado de IM foi obtido utilizando a geometria com curvatura dos *bumps* $a=4$.

A Figura 4.8 apresenta as linhas de corrente obtidas nas simulações para as geometrias com curvatura dos *bumps* $a=2$ e $a=4$ (geometrias A e D, respectivamente), permitindo visualizar o comportamento do fluido no interior do microdispositivo, bem como os vórtices formados.

Como mencionado, para analisar a mistura em um microdispositivo, deve haver ao menos duas entradas, uma para cada componente (etanol e água). Logo, neste trabalho, foi analisado um sistema multicomponente, enquanto que, no artigo de Amaral et al. (2022), analisou-se um sistema monocomponente (apenas água). Com isso, os dois sistemas não possuem as mesmas propriedades físicas globais, de modo que podem apresentar hidrodinâmicas diferentes e mudança na caracterização da vorticidade. Portanto, não pode ser feita uma comparação direta entre seus resultados.

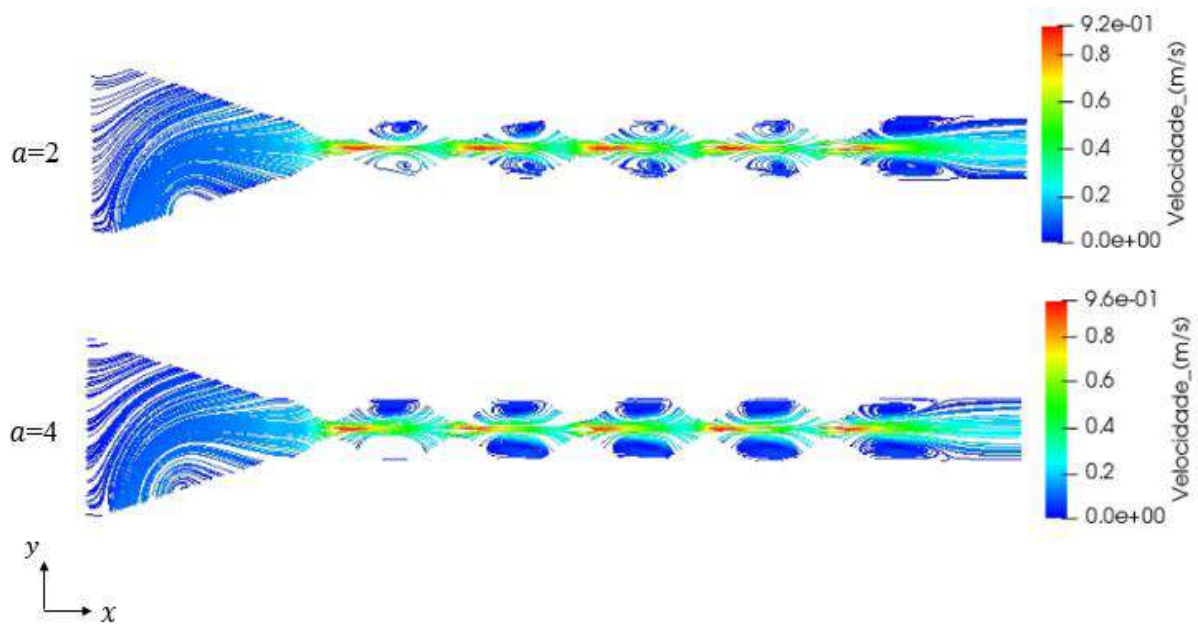


Figura 4.8: Representação das linhas de corrente para os microdispositivos com curvatura dos bumps $a=2$ (Geometria A) e $a=4$ (Geometria D), operando a $Re=30$ e com $Y_{A_{global}}=0,208$.

Para analisar essa hidrodinâmica do sistema multicomponente, deveria ter sido calculada a vorticidade para os estudos de caso do presente trabalho. Pode ser que a geometria com curvatura dos bumps $a=2$ (geometria A) continue apresentando uma vorticidade mais elevada do que a geometria com curvatura dos bumps $a=4$ (geometria D), de forma que a vorticidade do microdispositivo não seria o parâmetro determinante para a eficiência de mistura. Outra hipótese é que, devido a uma mudança de hidrodinâmica, a geometria com $a=4$ passe a apresentar uma vorticidade maior do que a geometria com $a=2$, de modo que a expectativa inicial da vorticidade estar associada à melhor mistura seria válida.

Sendo assim, há duas possibilidades de conclusões importantes, mas para afirmar qualquer uma delas é necessário calcular a vorticidade. Porém, o cálculo da vorticidade não estava incluído no escopo inicial deste trabalho, de modo que sua realização ficou para trabalhos futuros.

Posteriormente, avaliou-se o efeito do aumento da velocidade na mistura obtida, simulando essas mesmas geometrias a $Re=40$ e mantendo $Y_{A_{global}}=0,208$. Os valores de Y_A no plano XY obtidos para essas geometrias nessas condições estão apresentados lado a lado na Figura 4.9.

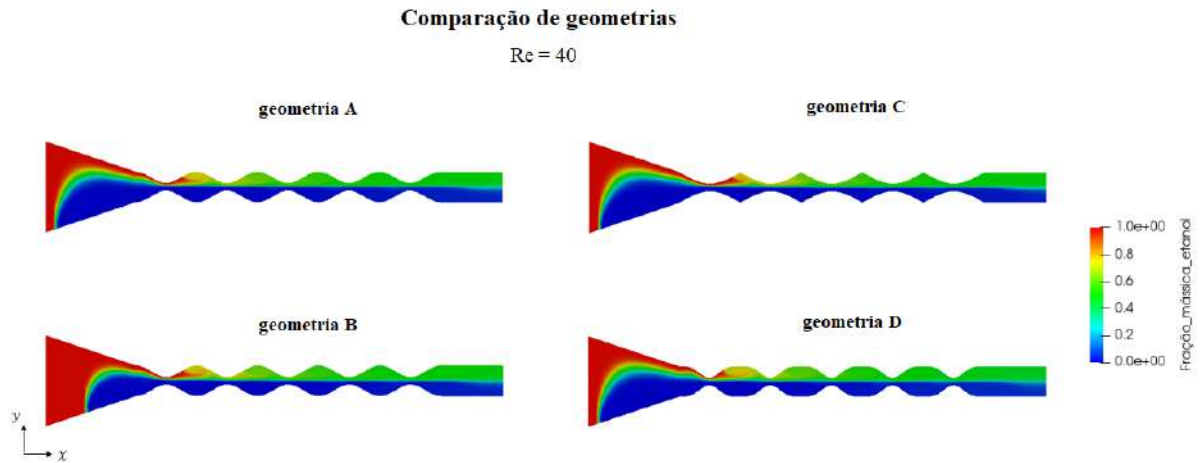


Figura 4.9: Perfis de fração mássica da espécie A no plano XY obtidos para as geometrias A, B, C e D simuladas a $Re=40$ e com $Y_{A_{global}}=0,208$.

Comparou-se diretamente os valores de fração mássica da espécie A obtidos ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm para essas geometrias simuladas, como demonstrado na Figura 4.10.

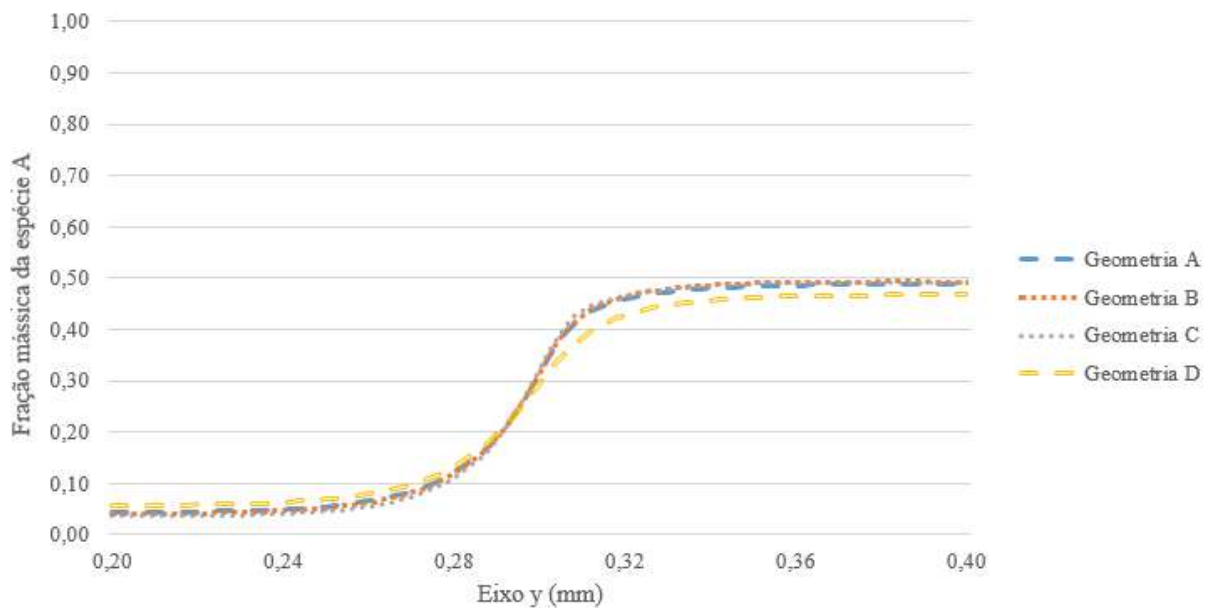


Figura 4.10: Comparação dos perfis de Y_A ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm obtidos para as geometrias A (em azul), B (em laranja), C (em cinza) e D (em amarelo) simuladas a $Re=40$ e com $Y_{A_{global}}=0,208$.

Novamente, o IM na saída do microdispositivo foi calculado para cada uma dessas geometrias. A queda de pressão ao longo do microdispositivo também foi calculada para essas geometrias simuladas a $Re=40$ e $Y_{A_{global}}=0,208$. Ambos os parâmetros estão apresentados na Tabela 4.4 para cada geometria.

Tabela 4.4 – Valores de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo para as geometrias A, B, C e D, simuladas a $Re=40$ e $Y_{Aglobal}=0,208$.

Geometria	IM na saída	ΔP (kPa)
Geometria A	0,731	4,294
Geometria B	0,725	4,293
Geometria C	0,720	4,700
Geometria D	0,758	4,058

Comparando os resultados obtidos a $Re=40$ (Tabela 4.4) com aqueles a $Re=30$ (Tabela 4.3), nota-se que o aumento do valor do IM em cada geometria foi extremamente pequeno, enquanto que a queda de pressão aumentou significativamente ao elevar o número de Reynolds. Tais resultados provocaram o questionamento do nível de influência da velocidade na mistura. Com isso, as geometrias foram simuladas a $Re=10$ e mantendo $Y_{Aglobal}=0,208$. Comparou-se diretamente os valores de fração mássica da espécie A obtidos ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm para essas geometrias simuladas, como demonstrado na Figura 4.11.

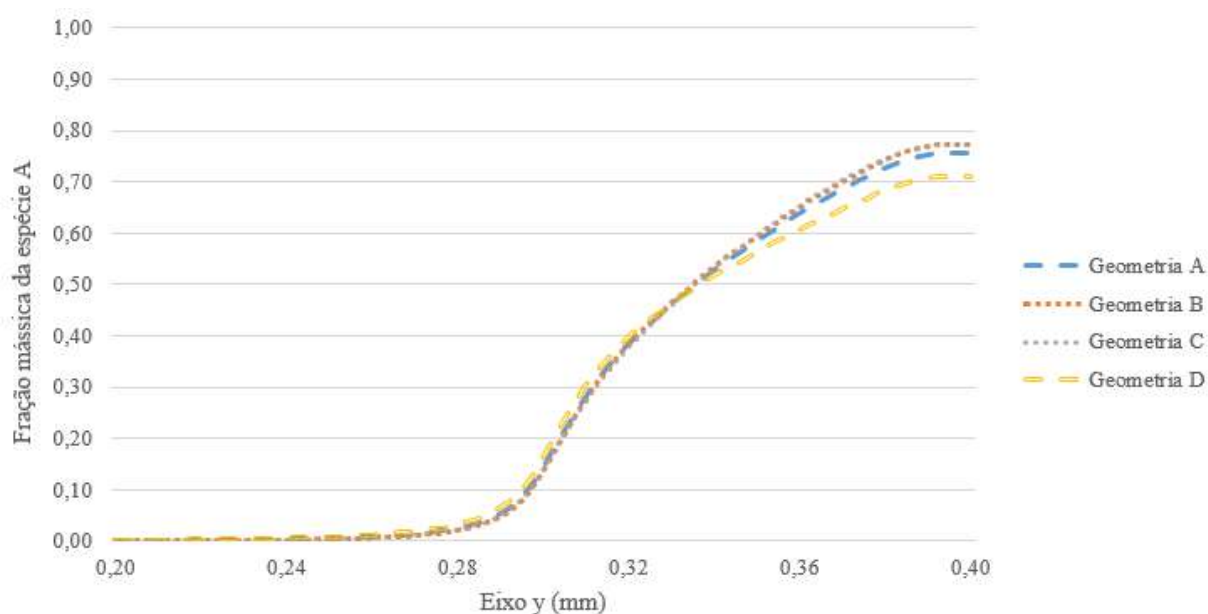


Figura 4.11: Comparação dos perfis de Y_A ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm obtidos para as geometrias A (em azul), B (em laranja), C (em cinza) e D (em amarelo) simuladas a $Re=10$ e com $Y_{Aglobal}=0,208$.

Como o objetivo é avaliar o efeito da redução da velocidade na mistura obtida ao final do microdispositivo, o IM na saída foi calculado para cada uma dessas geometrias. A queda de pressão ao longo do microdispositivo também foi calculada para essas geometrias simuladas a $Re=10$ e $Y_{Aglobal}=0,208$. Ambos os parâmetros estão apresentados na Tabela 4.5 para cada geometria.

Tabela 4.5 – Valores de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo para as geometrias A, B, C e D, simuladas a $Re=10$ e $Y_{A,global}=0,208$.

Geometria	IM na saída	ΔP (kPa)
Geometria A	0,610	0,628
Geometria B	0,601	0,628
Geometria C	0,601	0,787
Geometria D	0,633	0,523

Comparando os resultados obtidos a $Re=10$ (Tabela 4.5) com aqueles a $Re=30$ (Tabela 4.3) e a $Re=40$ (Tabela 4.4), conclui-se que a velocidade influencia, sim, a mistura obtida. Analisando os resultados obtidos para $Re=10$, observa-se que, apesar dos valores de queda de pressão ao longo do microdispositivo caírem significativamente, o IM também diminui bastante.

Com o intuito de comparar diretamente os resultados obtidos para diferentes números de Reynolds, a Figura 4.12 apresenta os perfis de fração mássica da espécie A obtidos previamente ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm para $Re=10$, $Re=30$ e $Re=40$ ao utilizar a geometria D na simulação, já que a mesma havia se destacado um pouco frente às outras.

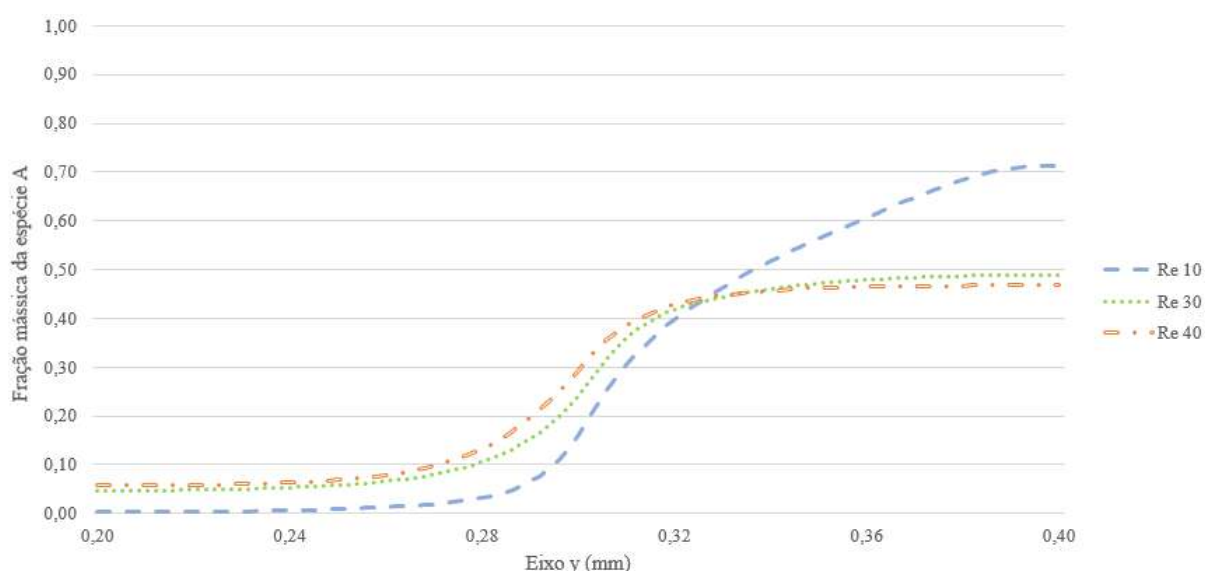


Figura 4.12: Comparação dos perfis de Y_A ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm obtidos previamente para a geometria D simulada a $Re=10$ (em azul), a $Re=30$ (em verde) e a $Re=40$ (em laranja).

A fim de avaliar o efeito da variação de Re , comparou-se na Tabela 4.6 os valores previamente obtidos de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo para a geometria D simulada a $Re=10$, $Re=30$ e $Re=40$.

Tabela 4.6 – Valores de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo previamente obtidos para a geometria D simulada a $Re=10$, a $Re=30$ e a $Re=40$.

Re	Geometria	IM na saída	ΔP (kPa)
10	Geometria D	0,633	0,523
30	Geometria D	0,749	2,582
40	Geometria D	0,758	4,058

Comparando os resultados obtidos a $Re=10$, a $Re=30$ e a $Re=40$, nota-se que um certo limite é atingido para o aumento do IM, isto é, esse parâmetro tende a estagnar mesmo com o incremento de velocidade. Ao elevar o número de Reynolds, observa-se que o gradiente de pressão cresce demasiadamente, não parecendo compensar o leve aumento obtido para o IM na saída do microdispositivo.

A mesma comparação entre resultados para diferentes números de Reynolds foi feita para os valores previamente obtidos com a geometria A. Em paralelo, a fim de coletar mais informações sobre o resultado intermediário existente entre $Re=10$ e $Re=30$, a geometria A foi simulada a $Re=20$ e $Y_{Aglobal} = 0,208$, de modo que esse resultado também foi incluído.

Comparou-se diretamente os valores encontrados anteriormente de fração mássica da espécie A ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm para a geometria A simulada a $Re=10$, $Re=20$, $Re=30$ e $Re=40$, como demonstrado na Figura 4.13.

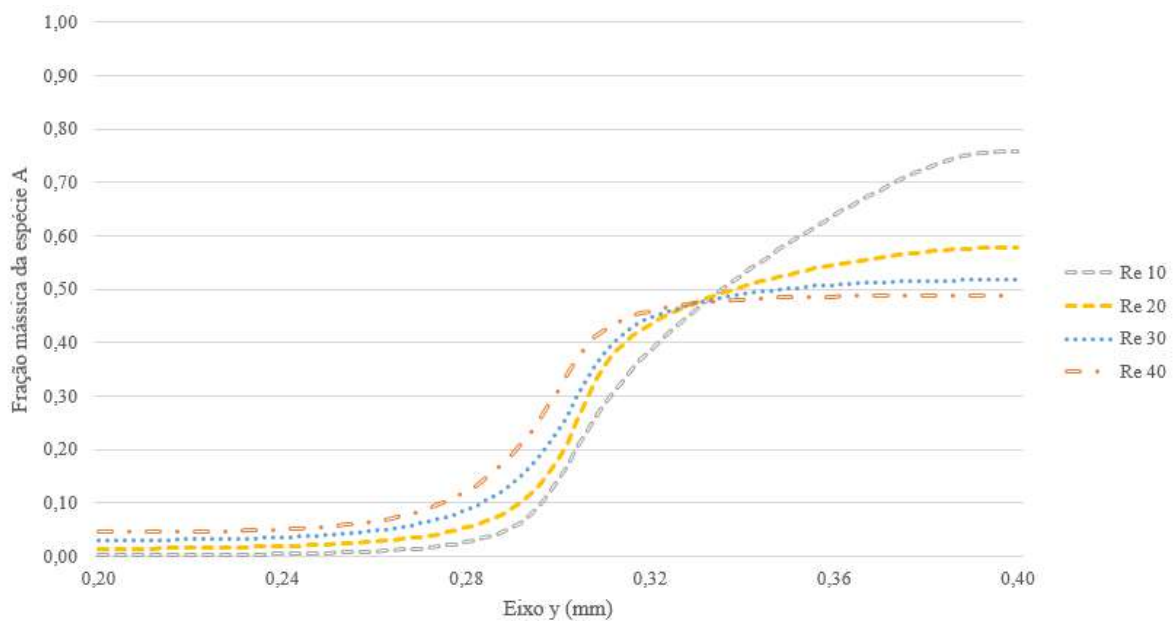


Figura 4.13: Comparação dos perfis de Y_A ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm obtidos previamente para a geometria A simulada a $Re=10$ (em cinza), a $Re=20$ (em amarelo), a $Re=30$ (em azul) e a $Re=40$ (em laranja).

Como o objetivo é avaliar o efeito da variação de Re na mistura, comparou-se na Tabela 4.7 os valores obtidos de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo para a geometria A simulada a $Re=10$, $Re=20$, $Re=30$ e $Re=40$.

Tabela 4.7 – Valores de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo previamente obtidos para a geometria A simulada a $Re=10$, a $Re=20$, a $Re=30$ e a $Re=40$.

Re	Geometria	IM na saída	ΔP (kPa)
10	Geometria A	0,610	0,628
20	Geometria A	0,688	1,565
30	Geometria A	0,721	2,781
40	Geometria A	0,731	4,294

Novamente observa-se, ao comparar esses resultados obtidos para os diferentes números de Reynolds, que um certo limite é atingido para o valor do IM nessas geometrias com uma entrada lateral. Em cada geometria investigada, à medida que a velocidade de escoamento é intensificada, nota-se um aumento cada vez menor do IM, enquanto que o gradiente de pressão continua crescendo significativamente.

Conclui-se que intensificar o número de Reynolds não é a melhor estratégia para incrementar a eficiência da mistura. De fato, o crescimento do gradiente de pressão com Re não compensa o leve aumento do IM obtido, ou seja, a melhoria observada no IM não é suficiente frente ao custo de bombeamento que teria para fornecer o gradiente de pressão exigido. Sendo assim, testou-se outro arranjo de geometria, de modo que a estratégia explorada foi a introdução de uma segunda entrada lateral, isto é, água sendo injetada através de uma entrada lateral inferior e uma entrada lateral superior.

4.4.2 Análises com 2 entradas laterais

A modificação da geometria foi feita com o intuito de forçar um maior cruzamento das linhas de corrente na região superior do microdispositivo. Para isso, utilizou-se a geometria A, mas agora adicionando nela uma entrada lateral superior. Como essa nova geometria é baseada nas características geométricas da geometria A ($s=100 \mu\text{m}$ e $a=2$), porém com a presença de duas entradas laterais, ela foi referenciada como ‘geometria A2’. Vale ressaltar que tanto a entrada lateral inferior como a superior estarão a uma distância $s=100 \mu\text{m}$ da entrada principal.

Novamente, simulações foram feitas para $Re=10$, $Re=30$ e $Re=40$ com $Y_{A_{global}}=0,208$, no entanto, utilizando agora essa geometria A2 a fim de avaliar o impacto de duas entradas laterais na mistura obtida nesses microdispositivos. Os valores de Y_A obtidos no plano XY para cada Re estão dispostos na Figura 4.14.

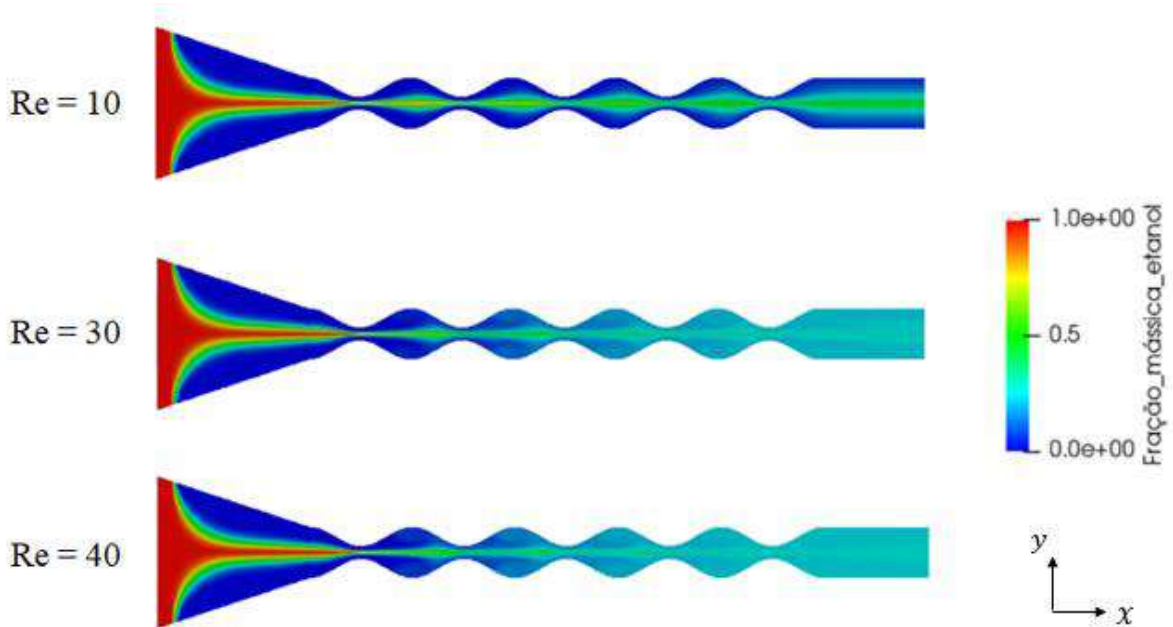


Figura 4.14: Perfis de fração mássica da espécie A no plano XY obtidos para a geometria A2 simulada a $Re=10$, a $Re=30$ e a $Re=40$ (com $Y_{A_{global}}=0,208$).

Comparou-se diretamente os perfis de fração mássica da espécie A obtidos ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm para a geometria A2 simulada a $Re=10$, $Re=30$ e $Re=40$, como demonstrado na Figura 4.15.

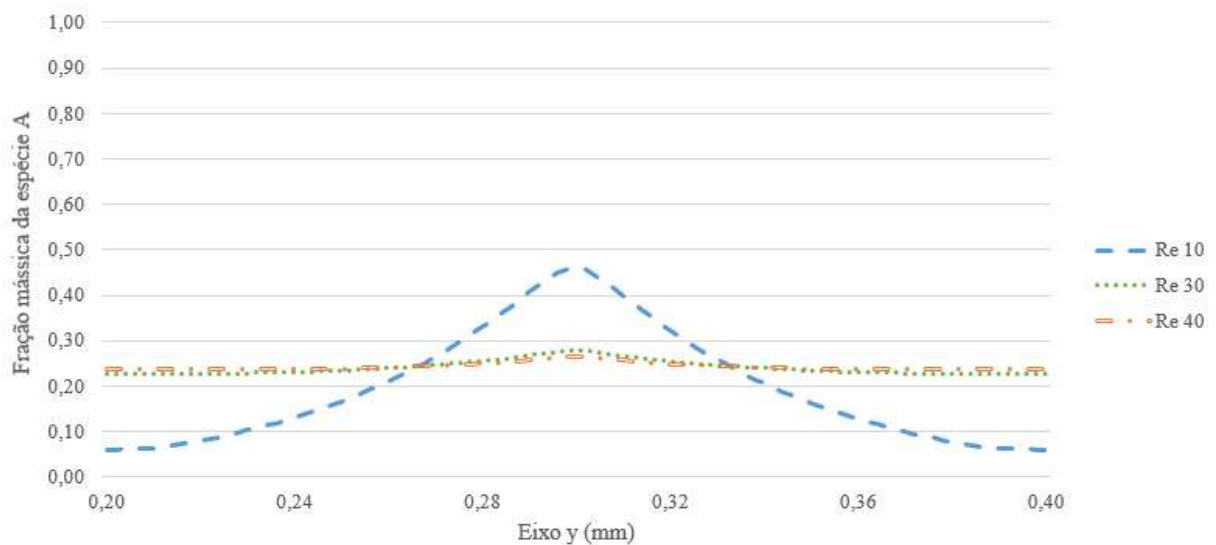


Figura 4.15: Comparação dos perfis de Y_A ao longo do eixo y na posição $x=2,9$ mm obtidos para a geometria A2 simulada a $Re=10$ (em azul), a $Re=30$ (em verde) e a $Re=40$ (em laranja).

Para analisar a mistura obtida ao final do microdispositivo, o IM na saída foi calculado para cada um desses Re . A queda de pressão ao longo do microdispositivo também foi calculada para essa geometria A2 simulada para esses números de Reynolds e com $Y_{A_{global}}=0,208$. Ambos os parâmetros estão apresentados na Tabela 4.8 para cada Re .

Tabela 4.8 – Valores de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo obtidos para a geometria A2 simulada a $Re=10$, a $Re=30$ e a $Re=40$ (com $Y_{A_{global}}=0,208$).

Re	Geometria	IM na saída	ΔP (kPa)
10	Geometria A2	0,842	0,625
30	Geometria A2	0,954	2,786
40	Geometria A2	0,952	4,309

Ao analisar os resultados obtidos para a simulação utilizando a geometria com duas entradas laterais, observa-se que uma mistura muito mais eficiente é obtida em relação à geometria com uma entrada lateral. Inclusive, vale ressaltar que foi possível alcançar valores de IM maiores que 90% (para $Re=30$ e $Re=40$). Além disso, nota-se que os resultados são obtidos sem produzir um incremento no valor do gradiente de pressão, em comparação à geometria com uma entrada lateral. Conclui-se então que a presença da segunda entrada lateral possui um papel significativo na obtenção de uma elevada eficiência de mistura.

Comparando os resultados a $Re=10$, a $Re=30$ e a $Re=40$ para a geometria com duas entradas laterais, demonstrados na Tabela 4.8, nota-se novamente que um certo limite é atingido para o valor do IM obtido, isto é, esse parâmetro tende a estagnar mesmo com o incremento de velocidade. Ao elevar o número de Reynolds de $Re=30$ para $Re=40$, observa-se que o gradiente de pressão cresce demasiadamente, enquanto que a variação do valor de IM na saída do microdispositivo é ínfima. Sendo assim, devido ao custo com bombeamento associado à queda de pressão ao longo do microdispositivo, não compensaria trabalhar a $Re=40$. Portanto, a melhor opção dentre as condições operacionais analisadas seria $Re=30$, utilizando a geometria com duas entradas laterais.

Para analisar a mistura ao longo do comprimento da geometria A2 operando a $Re=30$ e com $Y_{A_{global}}=0,208$, calculou-se o IM ao longo do eixo x , cujos valores foram comparados com os resultados de IM obtidos ao longo do comprimento da geometria A, como demonstrado na Figura 4.16.

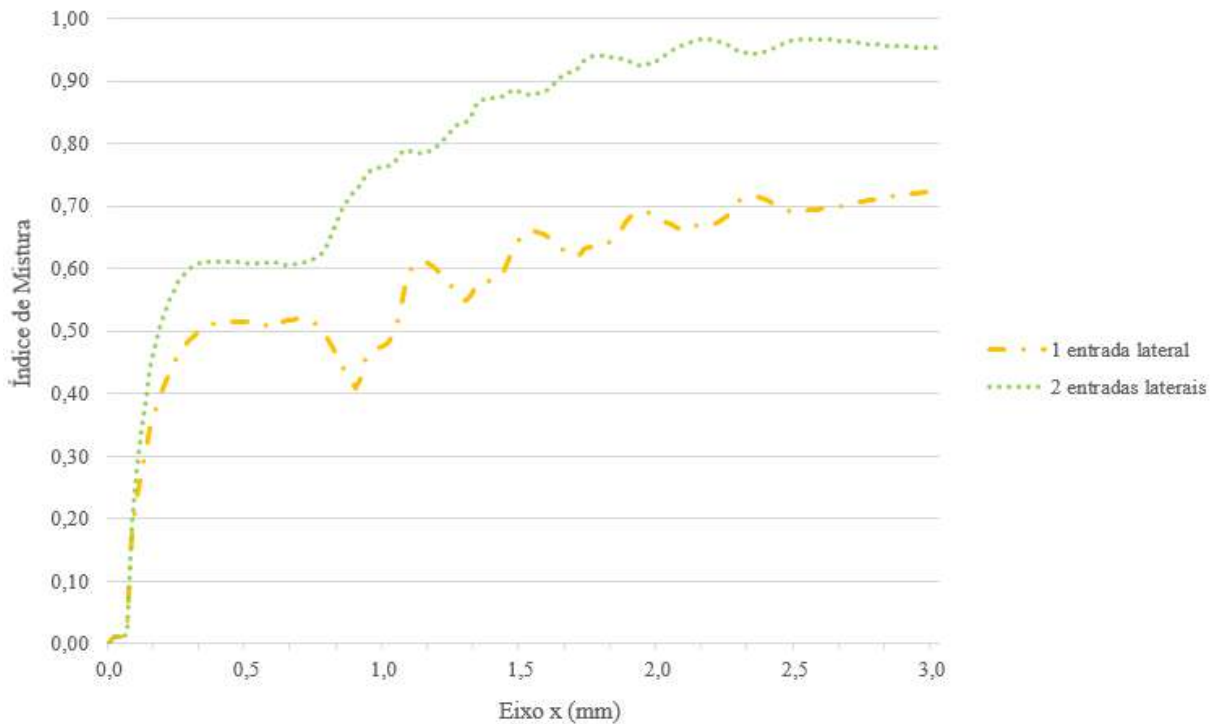


Figura 4.16: Valores de IM calculados ao longo do comprimento para o caso de uma entrada lateral (em amarelo) e de duas entradas laterais (em verde), ambos operando a $Re=30$ e com $Y_{A_{global}}=0,208$.

Nota-se, na Figura 4.16, que o IM ao longo do comprimento do microdispositivo é bem maior no caso de duas entradas laterais a partir do momento em que há efetivamente mistura. Embora sejam observadas oscilações no parâmetro na região dos bumps, há um aumento global do IM ao longo do comprimento do microdispositivo. Ainda é possível destacar que essa oscilação diminuiu consideravelmente do caso de uma entrada lateral para o de duas entradas laterais.

Como a geometria D (com curvatura dos *bumps* $\alpha=4$) se destacava ligeiramente em relação às outras geometrias com uma entrada lateral, ela também foi testada com duas entradas laterais (uma inferior e outra superior) a uma distância $s=100 \mu\text{m}$ da entrada principal, referenciada como ‘geometria D2’. Assim, a fim de verificar se um resultado melhor seria obtido, foi conduzida uma simulação a $Re=30$ e mantendo $Y_{A_{global}}=0,208$ utilizando agora essa geometria D2. Os valores de Y_A obtidos no plano XY para essa geometria estão dispostos na Figura 4.17.

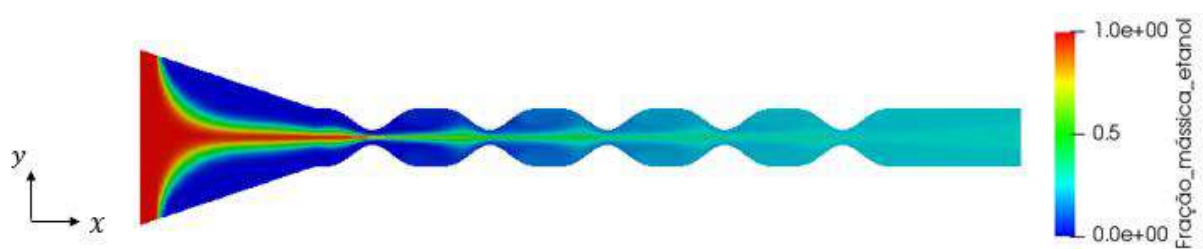


Figura 4.17: Perfil de fração mássica da espécie A no plano XY obtidos para a geometria D2 simulada a $Re=30$ com $Y_{A_{global}}=0,208$.

Como o objetivo é analisar a mistura obtida ao final do microdispositivo, o IM na saída foi calculado para essa geometria D2 simulada a $Re=30$ e $Y_{A_{global}}=0,208$, de modo que um valor de $IM=0,954$ foi encontrado. A queda de pressão ao longo do microdispositivo também foi calculada, obtendo-se um valor de $\Delta P=2,589$ kPa, ou seja, novamente não houve incremento no ΔP ao longo do microdispositivo em relação à geometria com uma entrada lateral.

Ao analisar os resultados obtidos, nota-se que praticamente o mesmo IM é adquirido utilizando a geometria A2 ou a geometria D2. Isto é, ambas as geometrias alcançaram uma eficiente mistura na saída, de forma que ambas se apresentam como boas opções para o *design* do microdispositivo. Do ponto de vista da queda de pressão, a geometria D2 pode ser mais vantajosa, já que possui um gradiente de pressão levemente inferior ao da geometria A2.

Posteriormente, a fim de investigar mais variações de parâmetros operacionais, avaliou-se os resultados obtidos para diferentes valores de $Y_{A_{global}}$. Para isso, foram conduzidas simulações a $Re=30$ utilizando a geometria A2, mas agora variando o valor da fração mássica global de espécie A ($Y_{A_{global}}=0,208$, $Y_{A_{global}}=0,503$ e $Y_{A_{global}}=0,755$). As velocidades de entrada foram recalculadas para cada caso, de modo a obter a fração mássica desejada mantendo $Re=30$.

Estes valores da velocidade U de entrada do etanol e das velocidades V de entrada da água utilizados em função da fração mássica global de espécie A são apresentados na Tabela 4.9. Assim, diferentes valores de fração mássica global de espécie A podem ser obtidos, basta ajustar a velocidade de entrada do etanol na entrada principal e da água nas entradas laterais.

Tabela 4.9 – Velocidades de entrada do etanol e da água em função do valor de $Y_{A_{global}}$ para o caso da geometria com duas entradas laterais operando a $Re=30$.

Re	$Y_{A_{global}}$	U_{in} etanol (mm/s)	V_{in} água (mm/s)
30	0,208	12,056	54,254
30	0,503	30,500	35,600
30	0,755	47,500	18,250

Os valores de Y_A no plano XY obtidos nas simulações para cada valor de $Y_{A_{global}}$ estão apresentados na Figura 4.18. Novamente, o IM na saída foi calculado para cada um desses valores de $Y_{A_{global}}$. A queda de pressão ao longo do microdispositivo também foi calculada

para essa geometria A2 simulada a $Re=30$ para cada um desses $Y_{A_{global}}$. Ambos os parâmetros estão apresentados na Tabela 4.10 em função do valor de fração mássica global de etanol.

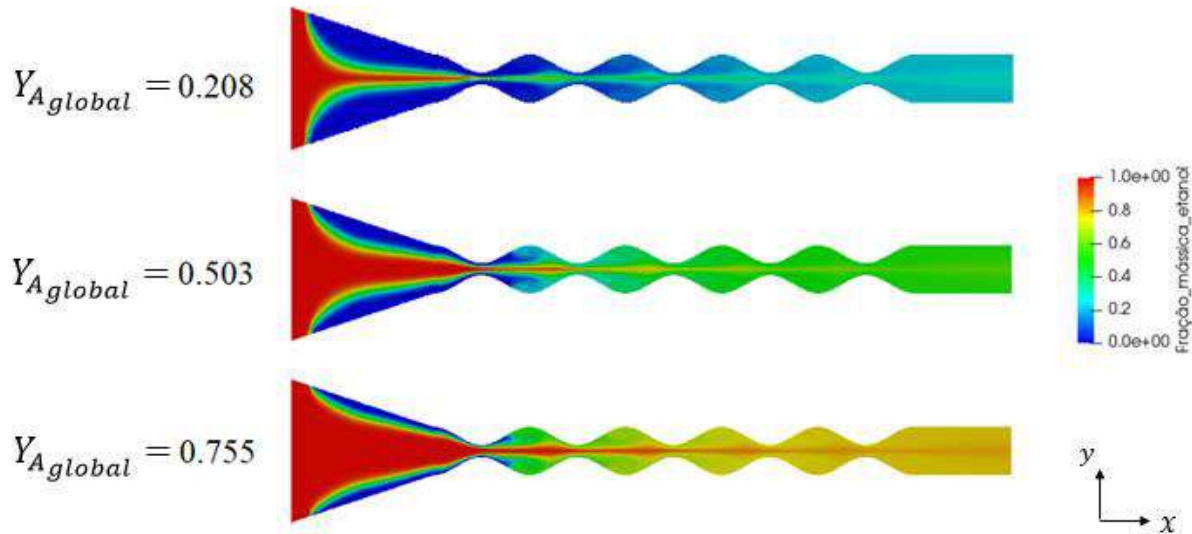


Figura 4.18: Perfis de fração mássica da espécie A no plano XY obtidos para a geometria A2 simulada a $Re=30$ com $Y_{A_{global}}=0,208$, $Y_{A_{global}}=0,503$ e $Y_{A_{global}}=0,755$.

Tabela 4.10 – Valores de IM na saída e de queda de pressão ao longo do microdispositivo obtidos para a geometria A2 simulada a $Re=30$ com $Y_{A_{global}}=0,208$, $Y_{A_{global}}=0,503$ e $Y_{A_{global}}=0,755$.

Re	Geometria	$Y_{A_{global}}$	IM na saída	ΔP (kPa)
30	Geometria A2	0,208	0,954	2,786
30	Geometria A2	0,503	0,899	3,265
30	Geometria A2	0,755	0,935	3,727

Como é analisada a queda de pressão ao longo do microdispositivo, o gradiente de pressão é calculado entre a pressão na entrada principal (entrada de etanol) e a pressão na saída do microdispositivo. Sendo assim, o aumento da vazão de etanol na entrada principal para aumentar $Y_{A_{global}}$ provoca, naturalmente, um aumento do gradiente de pressão.

Entretanto, esperava-se que o mesmo IM fosse obtido para os 3 casos. Embora não seja uma variação significativa (apenas 6,1% entre o maior e o menor valor), ela pode decorrer de imprecisões no cálculo do IM ou de incertezas associadas à malha utilizada. Portanto, maiores investigações são necessárias para avaliar se há de fato uma variação do IM devido à variação do $Y_{A_{global}}$ ou se o IM se mantém inalterado como esperado.

5 Conclusão

Este trabalho analisou o grau de mistura obtido em microdispositivos em função da geometria e condições operacionais investigadas. Graças ao maior cruzamento das linhas de corrente e à maior recirculação de fluido provocados, é possível intensificar a mistura nos microdispositivos de geometria diferenciada analisados com zona de entrada cônica, com alimentação lateral e com presença de *bumps* no microcanal.

Já houve um ganho na eficiência da mistura ao utilizar a geometria proposta com a presença de uma entrada lateral em relação à geometria não modificada, a qual possui um microcanal retangular convencional. Diferentes características geométricas foram investigadas para a geometria modificada com uma entrada lateral, porém não se verificou uma diferença significativa no valor de índice de mistura entre elas. O resultado ao utilizar uma curvatura dos *bumps* $\alpha=4$ se destacou ligeiramente devido ao índice de mistura um pouco maior e à queda de pressão um pouco menor ao longo do microdispositivo. Entretanto, sem o cálculo da vorticidade, não foi possível concluir se uma maior vorticidade implica ou não em um maior índice de mistura, isto é, em uma mistura mais eficiente.

Também foram conduzidas simulações para diferentes valores de número de Reynolds nessas geometrias com uma entrada lateral. Nota-se que um certo limite é atingido para o aumento do índice de mistura, isto é, esse parâmetro tende a estagnar mesmo com o incremento de velocidade. Além disso, foi constatado que o gradiente de pressão cresce intensamente com o aumento do número de Reynolds.

Comparando os resultados obtidos a $Re=40$ com aqueles a $Re=30$, nota-se que o aumento do valor do índice de mistura foi extremamente pequeno, enquanto que a queda de pressão aumentou consideravelmente. Ao reduzir para $Re=10$, observa-se que, apesar dos valores de gradiente de pressão ao longo do microdispositivo caírem significativamente, o índice de mistura também diminui bastante.

Assim, o crescimento do gradiente de pressão com Re não compensa o leve aumento do índice de mistura obtido. Como há uma limitação para o valor do índice de mistura atingido nessas geometrias com uma entrada lateral, conclui-se que intensificar o número de Reynolds não é a melhor estratégia para incrementar a eficiência da mistura.

A nova abordagem explorada foi utilizar uma geometria modificada com duas entradas laterais. Novamente, foram conduzidas simulações para diferentes valores de número de Reynolds. Ao analisar os resultados de simulação para essa geometria com duas entradas laterais, observa-se que uma mistura muito mais eficiente é obtida em comparação à geometria com uma entrada lateral. Inclusive, índices de mistura maiores que 90% foram alcançados para $Re=30$ e $Re=40$.

Comparando os resultados a $Re=10$, a $Re=30$ e a $Re=40$, nota-se novamente que um certo limite é atingido para o valor do índice de mistura. Ao elevar o número de Reynolds de $Re=30$ para $Re=40$, observa-se que o gradiente de pressão cresce demasiadamente, enquanto que a variação no valor do índice de mistura obtido na saída do microdispositivo é ínfima. Sendo assim, não compensaria trabalhar a $Re=40$, já que a melhoria observada no índice de mistura não é suficiente frente ao custo de bombeamento que teria para fornecer o gradiente de pressão exigido. Portanto, a melhor opção dentre as condições operacionais analisadas seria trabalhar a $Re=30$, utilizando a geometria com duas entradas laterais. Tanto a geometria com $a=2$ como a geometria com $a=4$ se apresentam como boas opções para o *design* do microdispositivo.

Conclui-se que a presença da segunda entrada lateral tem um papel significativo na obtenção de elevadas eficiências de mistura no microdispositivo. A geometria com curvatura dos *bumps* $a=4$ parece ser um pouco mais vantajosa graças à queda de pressão levemente inferior obtida.

5.1 Trabalhos futuros

A primeira ação para a continuidade deste trabalho será o cálculo da vorticidade para o sistema multicomponente estudado, de modo a permitir uma conclusão sobre a relação da vorticidade com o índice de mistura. Recomenda-se também modelar o índice de mistura e o gradiente de pressão em função do número de Reynolds a fim de determinar a condição operacional otimizada para o microdispositivo. Com isso, poderia ser obtido o número de Reynolds que gera o índice de mistura elevado desejado requerendo a mínima potência de bomba possível.

Os próximos passos para a pesquisa desenvolvida no presente trabalho são a introdução da equação de conservação da energia discretizada ao código, a fim de avaliar a difusão térmica desses microdispositivos caso fluidos sejam inseridos a diferentes temperaturas, e o acréscimo de uma reação ao sistema analisado. Inclusive, seria possível estudar reações exotérmicas ou endotérmicas para averiguar a eficiência térmica dos microrreatores.

6 Referências

AMARAL, J. V. M. **Análise dos efeitos geométricos em microdispositivos na geração de vórtices usando fluidodinâmica computacional**. 2021. Dissertação de Mestrado (Mestrado em Engenharia Química) - UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, [S. l.], 2021.

AMARAL, J. V. M.; DE LA TORRE, L. G.; VIANNA, S. S. V. Enhancement of the vorticity based on side feeding in a microdevice. **Microfluidics and Nanofluidics, Springer**, [S. l.], p. 26 - 35, 9 abr. 2022.

AN, H.; LI, A.; SASMITO, A.P.; KURNIA, J.C.; JANGAM, S.; MUJUMDAR, A.S. Computational fluid dynamics (CFD) analysis of micro-reactor performance: Effect of various configurations. **Chemical Engineering Science**, v. 75,p. 85–95, 2012.

ANSYS. Species Transport Equations. *In*: ANSYS. **ANSYS Theory Guide**. [S. l.], 23 jan. 2009. Disponível em: <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/node128.htm#eq-spec-mix-conserv>. Acesso em: 25 abr. 2022.

CELIK, I. B.; GHIA, U.; ROACHE, P. J.; FREITAS, C. J. Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. **Journal of Fluids Engineering**, [S. l.], 2008, p. 078001, 22 jul. 2008. DOI 10.1115/1.2960953. Disponível em: <https://doi.org/10.1115/1.2960953>. Acesso em: 11 jul. 2022.

CRC Handbook of Chemistry and Physics (CRC handbook) 95th edition. Edited by R.C. WEST, M.J. ASTLE, W.H. BEYER. CRC Press, Inc. 2014.

FAZELI, A.; BEHNAM, M. Hydrogen production in a zigzag and straight catalyticwall coated micro channel reactor by CFD modeling. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 35, n. 17, p. 9496–9503, 2010.

GIDDE, R. R. On effects of shape, aspect ratio and position of obstacle on the mixing enhancement in micromixer with hexagonal-shaped chambers. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, [S. l.], 2020, v. 18, n. 10-11, p. 20200054, 22 out. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1515/ijcre-2020-0054>. Acesso em: 4 jul. 2022.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P.; BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. S. Tabela A.8. *In: Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*. [S. l.: s. n.], 2008. cap. Apêndice A.

KANARIS, A. G.; MOUZA, A. A. Numerical investigation of the effect of geometrical parameters on the performance of a micro-reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 66, p. 5366–5373, 2011.

LO, R. C. Application of microfluidics in chemical engineering. **SciMed Central, Chemical Engineering & Process Techniques**, [S. l.], p. 1000 - 1002, 9 ago. 2013.

MACHADO, A. H. L.; PANDOLI, O.; MIRANDA, L. S. M.; DE SOUZA, R. O. M. A. Micro reatores: Novas oportunidades em síntese química. **Revista Virtual de Química**, [S. l.], p. 1076-1085, 12 jun. 2014. DOI 10.5935/1984-6835.20140068. Disponível em: <http://www.uff.br/rvq>. Acesso em: 16 mar. 2022.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. [S. l.]: CRC Press, Taylor & Francis Group, 1980.

PERES, J. C. G.. **Análise de microrreatores usando a fluidodinâmica computacional**. 2018. Dissertação de Doutorado (Doutorado em Ciências) - ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, [S. l.], 2018.

REGATTE, V. R.; KAISARE, N. S. Propane combustion in non-adiabatic microreactors: 1. Comparison of channel and posted catalytic inserts. **Chemical Engineering Science**, v. 66, n. 6, p. 1123–1131, 2011.

RÜDIGER, K. K. **Fotodegradação de poluente orgânico em reator microfluídico**. 2020. Trabalho de Conclusão do Curso (Graduação em Engenharia de Alimentos) - UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA, [S. l.], 2020.

SANTANA, H. S.; TORTOLA, D. S.; REIS, E. M.; SILVA, J. L.; TARANTO, O. P. Transesterification reaction of sunflower oil and ethanol for biodiesel synthesis in microchannel

reactor: Experimental and simulation studies. **Chemical Engineering Journal**, [S. l.], p. 752-762, 15 out. 2016.

SCHWARZ, S.; BOROVINSKAYA, E. S.; RESCHETILOWSKI, W. Base catalyzed ethanolysis of soybean oil in microreactors: Experiments and kinetic modeling. **Chemical Engineering Science, Elsevier**, [S. l.], p. 610 - 618, 18 dez. 2013.

SHAMLOO, A.; MADADELAHI, M.; AKBARI, A. Numerical simulation of centrifugal serpentine micromixers and analyzing mixing quality parameters. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 104, p. 243–252, 2016.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**. [S. l.: s. n.], 1995.

WEILER, A.; JUNKERS, M. Using microreactors in chemical synthesis: Batch process versus continuous flow. *In*: PHARMTECH. **PharmTech's supplement: API Synthesis and Formulation 2009**. [S. l.], 1 set. 2009. Disponível em: <https://www.pharmtech.com/view/using-microreactors-chemical-synthesis-batch-process-versus-continuous-flow>. Acesso em: 11 abr. 2022.

YANG, A. S.; CHUANG, F. C.; CHEN, C. K.; LEE, M. H.; CHEN, S. W.; SU, T. L.; YANG, Y. C. A high-performance micromixer using three-dimensional Tesla structures for bio-applications. **Chemical Engineering Journal**, v. 263, p. 444–451, 2015.

ZHANG, M. **Développement d'un microreacteur plasma pour la synthèse chimique**. 2016. Thèse de Doctorat (Génie des Procédés) - UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE, [S. l.], 2016.