

Efeito da assimetria do potencial zeta sobre o comportamento de fluidos viscoelásticos homogêneos em electrohidrodinâmica

Autor: Silvino Martins Moreira Machado

TESE

**Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica
Energia Térmica**

Orientador: Professor Fernando Manuel Coutinho Tavares de Pinho



FEUP

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Setembro 2009

À minha esposa e ao meu filho...

Resumo

Neste trabalho são apresentados as soluções analíticas para escoamento desenvolvido e homogéneo de fluidos viscoelásticos em microcanais que no caso vertente se limita ao escoamento entre placas paralelas sobre a acção combinada de electro-osmose e forças de pressão, considerando a aproximação de Debye-Hückel. Sendo as paredes feitas de materiais diferente daí resulta uma assimetria no potencial zeta.

Em relação aos modelos constitutivos reológicos, os fluidos viscoelásticos utilizados são descritos pelo modelo de Phan-Thien-Tanner (PTT), numa situação de corte puro em que só temos tensões normais segundo a direcção do escoamento. São discutidos modelos para fluidos viscoelásticos.

A solução é não-linear, com um contributo significativo resultante da combinação de electro-osmose e gradiente de pressão em condições favoráveis e ou desfavoráveis em relação à electro-osmose. Como caso limite são abordados, para escoamentos de fluidos newtonianos, os efeitos da espessura da camada limite dupla e das forças neste escoamento de Poiseulle em que é ainda analisado o caso limite de escoamento electro-osmótico puro.

Para os fluidos newtonianos são abordados os efeitos combinados da reologia de fluidos, electro-osmose e gradiente de pressão e as respectivas influências no perfil de velocidade bem como o efeito da assimetria do potencial das paredes no potencial induzido de onde podem resultar distorções nos perfis de velocidade, de tensões e de viscosidade.

A b s t r a c t

This paper presents analytical solutions for fully-developed flow of homogeneous viscoelastic fluids in micro-channels that in this case are limited to flow between parallel plates facing the combined electro-osmosis and pressure gradient forces, with the Debye-Hückel approximate invoked. The present different materials at the walls results in asymmetric zeta potentials.

The viscoelastic fluids used are described by the Phan-Thien-Tanner (PTT) model and other models for viscoelastic fluids are also discussed.

The analytical solution is non-linear, with a significant contribution from the combined act of electro-osmosis and pressure gradient, witch can be favorable or not, relative to the electro-osmosis.

In this thesis results are first presented for Newtonian flows, investigating the effect of the electrical layers thin cares in combination with the effect of the pressure forces on this Poiseulle flow. The study of pure electro-osmosis is another investigated case. Finally the thesis studies in detail the combined effects of rheology fluid, electro-osmosis and pressure gradient on the velocity profile and in the asymmetric zeta potentials where the induced potential can lead to distortions in the velocity, stress and viscosity profiles.

Índice	Pagina
Resumo	3
Nomenclatura	8
1 – Introdução	
1.1 – Enquadramento	11
1.2 - A microfluídica	12
1.3 - Electro-osmose	14
1.4 - A reologia	17
1.5 – Objectivo	20
2 – Equações governativas	
2.1 – Equações da quantidade de movimento	21
2.2 - Análise do modelo PTT	22
2.3 – Análise do modelo FENE-P	24
2.4 - Equações de Poisson-Boltzmann	25
2.5 - Potencial eléctrico através do canal	26
3 - Solução da equação de quantidade de movimento	27
4 - Discussão dos resultados	33
4.1 - Fluidos newtonianos	34
4.1.1 - Influência das condições de assimetria das paredes e da razão de altura do microcanal	36
4.1.2 - Influência das forças de pressão	39
4.2 - Escoamento com fluidos viscoelásticos com electro-osmose pura	40
4.3 - Escoamento de fluidos visco elásticos na presença combinada de electro-osmose e forças de pressão	43
5 – Conclusões	50
6 - Anexo 1 – Fórmulas de compactação e simplificações	51
Anexo 2 - Velocidade nula, velocidade máxima e mínima.	52
Anexo 3 - Resolução da equação do caudal volumétrico e determinação das situações em que resulta um caudal nulo (estagnação)	54
Anexo 4 - Resolução de equações cúbicas	56
Glossário	57
Lista de Referências	58

Índice de figuras

	Página
Figura 1- Dupla camada eléctrica (EDL) e electro-osmose pura	15
Figura 2- Actuação das tensões tangenciais e a deformação $\gamma = \delta / L$	18
Figura 3- Actuação das tensões normais e a deformação $\varepsilon = \delta / L$	18
Figura 4-Actuação de tensões de corte e tensões normais.	18
Figura 5- Escoamento viscoelástico	19
Figura 6- Transição entre fluidos newtoniano e não newtoniano	19
Figura 7- Dupla camada eléctrica (EDL), electro-osmose e forças de pressão	20
Figura 8- Gráfico de coordenada $\bar{\delta}$ para as quais a velocidade é máxima	31
Figura 9- Perfil de velocidade, quando as forças de pressão dominam o escoamento, com uma razão de pressão/electro-osmose de $\Gamma = 20$	34
Figura 10- Evolução do perfil de velocidade, quando $\Gamma \rightarrow \infty$ (Poiseuille)	35
Figura 11- Tensões tangenciais $\Gamma = 20$ e $\Gamma \rightarrow \infty$	35
Figura 12- Influência do rácio de altura do microcanal ($k H$) sobre influência de forças eletrocinéticas, para condições simétricas ($R = 1$).	36
Figura 13- Efeito do rácio de altura do micro canal ($k H$) para uma assimetria do microcanal de $R=0,5$	36
Figura 14- Efeito de $h= k H$ para fluidos newtonianos para:	
a) Potencial zeta de sinal contrários, $R = -1$	
b) Potencial zeta é nulo numa das paredes, $R = 0$	36
Figura 15- Perfis de Velocidade para fluidos newtonianos em função da razão de altura do microcanal R	37
Figura 16- Ilustração da razão de potencial R em relação a $1 / R$	38
Figura 17- Influência das forças de pressão, em função de Γ , nos perfis de velocidade para o caso simétrico $R=1$ e caso assimétrico $R= -0,5$	39
Figura 18- Viscosidade e perfis de tensões para fluidos newtonianos $R=-0,5$	39
Figura 19- Características de fluxo com electro-osmose pura, ($\Gamma = 0$)	
a) Em função da razão de potencial R para $\varepsilon^{0,5} De_k = 0,5$	
b) Em função de $\varepsilon^{0,5} De_k$ para $R=0,25$	40

- Figura 20- Perfil de tensão e viscosidade, sem forças de pressão $\Gamma = 0$.
- Em função da razão de potencial R para $\varepsilon^{0,5} De_k = 0,5$
 - Em função de $\varepsilon^{0,5} De_k$ para R=0,25 41
- Figura 21- perfis de Velocidade, tensões e viscosidade, sobre o efeito combinado de electro-osmose e forças de pressão $\Gamma = -1$ em função de $\varepsilon^{0,5} De_k$ para o caso em que o potencial zeta é simétrico, R=1 43-44
- Figura 22- perfis de Velocidade, tensões e viscosidade, sobre o efeito combinado de electro-osmose e forças de pressão $\Gamma = -1$ em função de $\varepsilon^{0,5} De_k$ para o caso em que o potencial zeta é assimétrico, R= -0,5 43-44
- Figura 23- Perfil de velocidades para uma razão de assimetria R=0 , rácio de microcanal h=20 e uma razão de pressão/electro-osmose de $\Gamma = -1$. 45
- Figura 24- Perfil de tensões em coordenadas locais χ . 45
- Figura 25 – Velocidade para um rácio de forças de pressão / electro-osmose de $\Gamma = 5$ em função de $\varepsilon^{0,5} De_k$:
- potenciais zeta positivos, R = 0,25
 - potencial zeta negativo na parede 2, R = -0,25. 45
- Figura 26- Perfis de tensões de corte, tensões normais e viscosidade
- Potenciais zeta positivos, R = 0,25
 - Potencial zeta negativo na parede 2, R = -0,25. 46
- Figura 27 – Perfis de viscosidade, em coordenadas da parede $\chi = (1-y)*h$, na parede 2 e na parede 1 para R= - 0.25 e $\Gamma = 5$ 47
- Figura 28- Perfil de velocidades, da viscosidade, das tensões e da viscosidade junto ás paredes para $\Gamma = 5$ e $\varepsilon^{0,5} De_k = 1$ em função de R 47
- Figura 29- Representa a variação do caudal em função de $\varepsilon^{0,5} De_k$ para várias razões de assimetria, R e para um rácio de microcanal h=20.
- Caso favorável: razão de pressão/electro-osmose $\Gamma = - 1$
 - Caso desfavorável: razão de pressão/electro-osmose $\Gamma = 2,5$ 48
- Figura 30- Caudal volumétrico para h=20 e $\Gamma = 25$ em função de R 49
- Figura. 31- Caudal volumétrico para h=20 e $\Gamma = 100$ em função de R 49

Nomenclatura

Símbolos Latinos

A, B, C e D	Funções utilizadas para compactar equações	
a_0, a_1, a_2	Coefficientes de equações cúbicas do tipo $a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + x^3 = 0$	
b	Extensibilidade no modelo do haltere (modelo FENE-P do inglês finitely extensible nonlinear elastic - polymer)	
b_0, b_1, b_2, b_3	Coefficientes de equações cúbicas do tipo $b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 = 0$	
De_k	Número de Débora do microcanal com base na espessura de Debye-Hückel ($De_k = h De_{sh}$)	(-)
De_{sh}	Nº de Deborah combinado com a velocidade de Helmholtz-Smoluchowski ($De_{sh} = U_{sh} \lambda / H$)	(-)
e	Carga elementar do electrão	
E_x	Componente x do vector gradiente eléctrico	(V m ⁻¹)
$f(\tau_{kk})$	Função coeficiente de tensão modelo PTT	(-)
H	Meia altura do microcanal	(m)
h	Rácio de altura do microcanal ($h = k H$)	(-)
I'_c	Intensidade de corrente eléctrica por unidade de largura	(A m ⁻¹)
k_B	Constante de Boltzmann	(1.3807×10 ⁻²³ J K ⁻¹)
l	Comprimento do microcanal	(m)
n_0	Concentração volumétrica do número iónico	(m ⁻³)
p	Pressão	(Pa)
$p_{,x}$	Gradiente de pressão axial	(Pa m ⁻¹)
Q	Caudal volumétrico	(m ³ s ⁻¹)
\bar{Q}	Caudal volumétrico adimensional	(-)
R	Razão de potencial eléctrico $R = \psi_2 / \psi_1$	(-)
S_1, S_2	Factores de assimetria da parede 1 e da parede 2	(-)
t	Tempo	(s)
T	Temperatura absoluta	(K)

U_N	Velocidade média do fluido newtoniano	(m s ⁻¹)
\bar{U}	Velocidade média	(m s ⁻¹)
U_{sh}	Velocidade de Helmholtz–Smoluchowski na parede 1	(m s ⁻¹)
w	Largura do micro canal	(m)
x	Direcção axial	(m)
Y	Coordenada transversal	(m)
y	Coordenada transversal adimensional $y = Y / H$	(-)
z	Valência de Iões	
$Z(\tau_{kk})$	Coeficiente de tensão da função FENE-P (finitely extensible non linear elastic – polymer)	(-)

Tensores e vectores

\mathbf{E}	Vector campo eléctrico externo aplicado	(V / m ⁻¹)
\mathbf{I}	Tensor unitário	
\mathbf{u}	Vector velocidade	(m s ⁻¹)
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor das tensões do material polímero	(Pa)

Matemático

∇	Operador matemático de Lagrange	
----------	---------------------------------	--

Símbolos Gregos

χ	Coordenada transversal de parede ($\chi = (1 - y) * h$)	(m)
$\bar{\delta}$	Coordenada onde ocorre a velocidade máxima	(m)
ε	Parâmetro de extensibilidade do modelo PTT	
ϵ	Constante dieléctrica do fluido	(C V ⁻¹ m ⁻¹)

ϕ	Potencial eléctrico	(V)
γ	Constante de Euler–Mascheroni	
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação ao corte	(s ⁻¹)
Γ	Razão entre as forças motrizes de pressão e electro-osmóticas.	
η	Coeficiente de viscosidade do material polimérico (modelos PTT e FENE-P)	(Pa s)
κ^2	Parâmetro Debye–Hückel	(m ⁻²)
λ	Tempo de relaxação do polímero	(s)
μ	Viscosidade viscosimétrica	(Pa s)
ρ_e	Densidade da carga eléctrica	(C m ⁻³)
τ_{xx}, τ_{yy}	Tensão de deformação normal	(Pa)
τ_{xy}	Tensão de deformação de corte	(Pa)
τ_{kk}	Traço do tensor extra-tensão	(Pa)
ζ	Espessura da dupla camada eléctrica (EDL) do inglês “electrical double layer”	(m)
ψ	Campo potencial eléctrico	(V)
ψ_1, ψ_2	Potencial zeta nas paredes w_1 e w_2 , respectivamente	(V)

1- Introdução

1.1- Enquadramento

Os desenvolvimentos das técnicas da microfluídica permitem o desenvolvimento dos sistemas termofluídicos miniaturizados de grande impacto em vários sectores industriais tais como: sistemas para análises químicas e biológicas em células de combustíveis, impressão com jacto de tinta, etc. Nestas industrias muitos dos fluidos utilizados são de facto sintéticas e apresentam na sua grande maioria, características reológicas não lineares [Barnes (2000)]. É por isso relevante o estudo do escoamento de fluidos não-lineares (ou não-newtonianos), em canais/conduitas de pequena dimensão, que designaremos daqui em diante por microcanais.

Por outro lado, nos processos de fabricação de microcanais é frequente existir paredes feitas de material diferente que interagem diferentemente com os fluidos que se encontram no seu interior, como se discutirá mais adiante. É desta interacção que vai resultar um escoamento que também pode ser assimétrico e que justifica plenamente este trabalho. A assimetria dos materiais constitutivos dá lugar a uma interacção assimétrica entre o fluido e a parede de que resultam distorções do potencial induzido, designado por potencial zeta, que vai influenciar o perfil de velocidades podendo apresentar uma distorção em relação ao caso de condições de potencial simétrico.

Neste trabalho são apresentadas soluções analíticas para o escoamento de fluidos viscoelásticos em microcanais que no caso vertente se limita ao escoamento em placas paralelas sobre a acção combinada de um gradiente de pressão axial e de forças eléctricas. Incluiu-se neste estudo o caso da electro-osmose pura. Em relação aos modelos constitutivos reológicos, os fluidos viscoelásticos estão descritos pelos modelos simplificados Phan-Thin-Tanner (PTT) [Phan-Thien & Tanner (1977) e Phan-Thien (1978) que incluiu os modelos de Maxwell, newtoniano e FENE-P. Oliveira (2002) investigou algumas soluções analíticas usando o modelo FENE-P e PTT que foram posteriormente aprofundadas por Cruz e Pinho (2005). A solução deste problema é não linear.

1.2- A microfluídica

A microfluídica é a mecânica dos fluidos aplicada aos escoamentos em dispositivos de dimensões microscópicas, decorrendo daqui as seguintes características:

- * Pequena dimensão dos canais
- * Pequenos volumes de fluido
- * Baixo consumo de energia
- * Domínio de efeitos das Bactérias e de forças superficiais

Trata-se de um campo multidisciplinar interceptando as áreas de engenharia, física, química, biotecnologia e micro tecnologia/micro fabricação, com aplicações práticas para a concepção de sistemas em que são utilizados pequenos volumes de fluido.

A microfluídica surgiu no início da década de 1980, exemplos da sua aplicação são a impressão a jacto, os chips para análise de ADN, tecnologia lab-on-a-chip, a micro propulsão, etc. Também tem uma grande aplicabilidade na realização de ensaios laboratoriais a baixo custo e de resposta rápida, o que a torna numa das grandes áreas actuais em desenvolvimento.

Em microfluídica, existem fenómenos que passam a ser muito importantes, fenómenos que eram antes irrelevantes num escoamento a nível macroscópico. Em consequência, factores tais como a tensão superficial, a dissipação de energia e a resistência fluídica têm uma influência acrescida, dominando o escoamento. A microfluídica estuda a influência desses factores no seu comportamento, abrindo caminho a novos trabalhos ou procurando novas utilizações.

Várias propriedades de interesse estão relacionadas com a microfluídica. propriedades como a tensão superficial, que são desprezáveis quando se lida com escoamentos á macro escala, começam por dominar esta dinâmica quando nos encontramos a nível da micro escala. O número de Reynolds é extremamente baixo em pequenas escalas, o que significa que o fluxo é inequivocamente laminar. Isto torna alguns aspectos da microfluídica um pouco mais desafiadores. Por exemplo, não existe turbulência o que implica termos de recorrer a outras técnicas quando pretendemos misturar dois fluxos.

Os sistemas microfluídicos devem ser fabricados com grande precisão. O plástico e o silício são muito usados para conformar o escoamento, sendo o vidro usado como camada transparente.

Uma nova área de investigação é a integração da microfluídica na tecnologia MEMS (sistemas micro electromecânicos). Se incluirmos pequenas “bombas” (electro-osmose) num chip, a variedade de aplicações aumenta. Os dispositivos microfluídicos poderão ser equipados com muitos e minúsculos canais que vão permitir controlar de forma útil os complexos caminhos dos fluidos. Tem havido um grande interesse na utilização de chips microfluídicos para testes laboriais, (biologia , física e química), reduzindo de forma muito significativa a dimensão dos equipamentos.

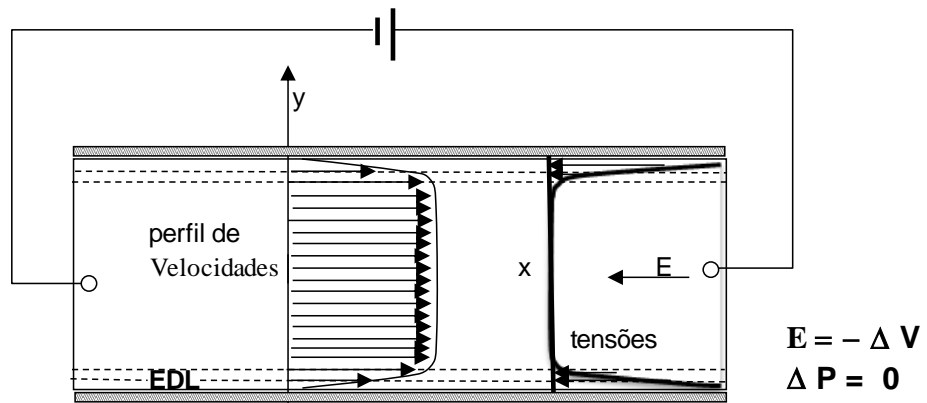
1.3- Electro-osmose

Na Electroquímica, na Física e na Biologia de sistemas vasculares a electro-osmose é o movimento de um líquido através de uma membrana polar ou outra estrutura porosa sob a influência de um campo eléctrico. A electro-osmose foi primeiramente descrita por F.F. Reuss em 1809 e a sua aplicação tem vindo acrescer a nível da microfluídica.

As experiências utilizando material poroso (ex: argila) foram seguidas pelo trabalho teórico sobre a camada eléctrica dupla (EDL) (fig.1), do inglês “electric double layer” de Helmholtz em 1879, atendendo aos parâmetros do fluxo eléctrico e electrocinético que impulsionam o escoamento. No início dos anos 1900 Smoluchowski (1917) estuda as condições em que a espessura EDL é muito menor do que a altura do canal.

Para os fluidos newtonianos, a modelação rigorosa do escoamento electro-osmótico em microcanais tem sido objecto de vários estudos. Burgreen e Nakache [Burgreen (1964)] estudaram o efeito do potencial na superfície sobre o transporte de líquido através de canais ultra finos recorrendo a uma linearização, invocando a aproximação de Debye-Hückel, na presença de um potencial eléctrico sobre influência de um campo eléctrico imposto. Esta linearização impõe que $\Delta\phi/l \ll \psi_0/\xi$ onde $\Delta\phi$ é a diferença de potencial do campo eléctrico aplicado, l é o comprimento do canal e ξ é a espessura da Debye, $\xi = 1/k$ e $10 \approx H/\xi < \approx 10^3$ o que na prática limita os valores de potencial induzido, normalmente dignado por potencial zeta (ψ_0), a ≈ 25 mV. Rice & Whitehead (1965) discutiram o mesmo problema para um canal de secção circular. Dutta & Beskok (2001) obtiveram soluções analíticas para a distribuição de velocidade, atendendo ao caudal em escoamentos combinados de electro-osmose e pressão, tendo em vista canais lineares bidimensionais sob condições EDL com aplicação à microfluídica para uma distância de parede a parede três ordens de grandeza superior que a espessura EDL. Arulanandam and Li (2000) e Wang et al. (2007) apresentaram um modelo bidimensional analítico para o fluxo electro-osmótico num microcanal com secção transversal rectangular. Uma revisão aprofundada sobre vários outros aspectos da electro-osmose pode ser encontradas em Karniadakis (2005).

O estudo teórico sobre o escoamento de fluidos não newtonianos sobre a acção de electro-osmose é recente e a maior parte dos trabalhos estão limitados a simples modelos reológicos para fluidos inelásticos, devido às dificuldades analíticas inerentes ao uso de equações constitutivas viscoelásticas. Exemplos disso são as recentes obras de Das e Chakraborty (2006) e Chakraborty (2007), que apresentaram soluções analíticas explícitas para a velocidade estando presentes também solução térmica, perfis de temperatura e distribuições electro-osmóticas de escoamentos em microcanais com fluidos não newtonianos.



A Fig.1 esquematiza a dupla camada eléctrica (EDL) e a eletro-osmose pura (sem forças de pressão).

Do fluido em contacto com a parede, surge uma migração de iões (fig.1) devido à interacção entre as paredes do dieléctrico do micro canal de altura $2H$, comprimento l e largura w sendo $w \gg 2H$, atraindo contra-íões carregados positivamente e formando camadas de fluído perto das paredes repelindo os co-íões. São formadas duas camadas, uma camada muito fina de contra-íões estacionários junto à parede, seguidas por uma mais espessa camada de contra-íões, formando o que se chama: a dupla camada eléctrica (EDL).

Uma vez que as camadas de EDL são muito finas o núcleo continua aproximadamente neutro.

Estas camadas irão ter espessuras diferentes dependendo do potencial das paredes, designado por potencial zeta (assimétrico, caso em estudo).

Quando aplicamos uma diferença de potencial, DC, nas extremidades do canal, é gerado um campo eléctrico que exerce uma força fazendo mover o núcleo do fluído. Se invertemos a polarização, também invertemos o sentido do fluxo.

Podemos combinar este efeito com uma diferença de pressão, que pode ser no mesmo sentido do campo eléctrico ou no sentido contrário, resultando naturalmente um escoamento diferente.

1.3- A Reologia

No âmbito da mecânica dos sólidos, Robert Hooke formulou os princípios básicos da teoria moderna da Elasticidade que relaciona o estado de tensão e deformação nos corpos sólidos sujeitos a deformações elásticas. Nos casos em que existe elasticidade linear, o factor de proporcionalidade entre as tensões e as deformações, designa-se pelo módulo da elasticidade ou módulo de Young do material, sendo válida a expressão da lei de Hooke, $\tau = E \epsilon$.

No âmbito da mecânica dos fluidos, um material fluido, que apresenta uma relação linear entre todos os componentes do tensor das tensões, $\boldsymbol{\tau}$, e as componentes do tensor velocidade de deformação, designa-se como fluido newtoniano, em que o factor de proporcionalidade desta relação linear é designado por viscosidade viscosimétrica, η , que é a propriedade reológica mais conhecida, e a única que caracteriza os fluidos newtonianos. Um fluido não-newtoniano, não tem um comportamento linear.

A palavra reologia vem do grego “rheo” que significa fluxo e do “logos” que significa estudo, sendo sugerido pela primeira vez por Bingham e Crawford, para descrever o fluxo no caso de materiais líquidos e a deformação no caso de materiais sólidos.

A reologia é o ramo da física que estuda as relações entre as tensões aplicadas a um material fluido e as deformações que elas provocam. Esta relação é crucial para caracterizar o transporte de quantidade de movimento num escoamento. A propriedade física mais importante de um fluido é a sua viscosidade que decorre de forças internas de fricção. Esta fricção ocorre internamente no material, onde uma camada de fluido possui uma certa resistência ao deslocamento sobre a outra. Enquanto temos por um lado os solventes que possuem baixa viscosidade, temos também as resinas com uma viscosidade elevada, devido à interacção entre as moléculas e ao tamanho da sua cadeia polimerizada. Ambos são compostos orgânicos, mas os seus comportamentos são totalmente diferentes. A fig. (2) pretende esquematizar as deformações devido à existência de tensões tangenciais, τ_{xy} , (que actuam numa face y segundo a direcção x as quais tendem a deformar o material provocando rotação do mesmo fig.4.

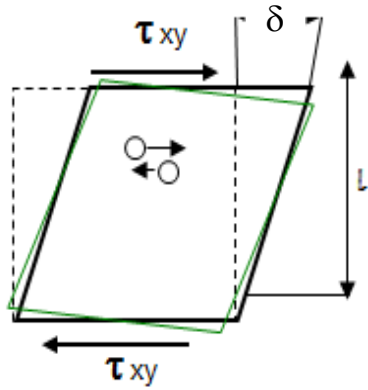


Fig.2 - Esquematiza a actuação das tensões tangenciais provocam uma deformação, $\gamma = \delta / L$, do material

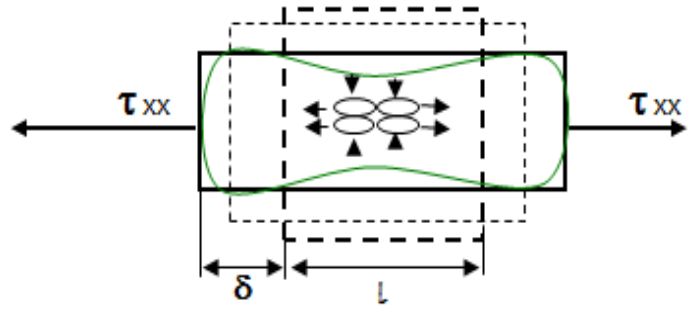


Fig.3 - Esquematiza a actuação das tensões normais das que provocam uma deformação (extensão), $\epsilon = \delta / L$, do material

A fig.3 pretende esquematizar as deformações devido à existência de tensões normais, τ_{xx} , (que actúan numa face x segundo a direcção x) as quais tendem a deformar o material provocando uma extensão e uma consequente contracção no sentido ortogonal (y) fig.3 diminuindo a sua secção central.

É usual trabalhar-se com a taxa de deformação, $\dot{\gamma} = \delta/U$, em vez de uma deformação $\gamma = \delta / L$, visto que se trata de um escoamento que por inerência, tem uma determinada velocidade, U.

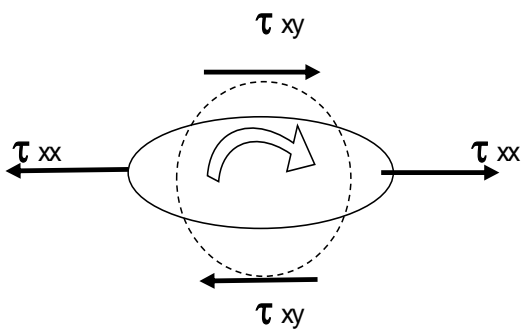


Fig.4-Esquematiza o comportamento do material viscoelástico, sujeito a tensões de corte e tensões normais.

Quando o material é sujeito simultaneamente a tensões tangenciais e tensões normais, não-newtoniano figura (4), as tensões de corte provocam uma extensão do material e as tensões tangenciais provocam uma deformação que tende a rodar o material. É de referir que ao rodar o material, a face normal passa a ser outra provocando uma deformação na face que está nesse momento perpendicular ao eixo x .

O fluido necessita de tempo para se deformar, deforma e adapta-se (fig.5) [Barnes 2000].

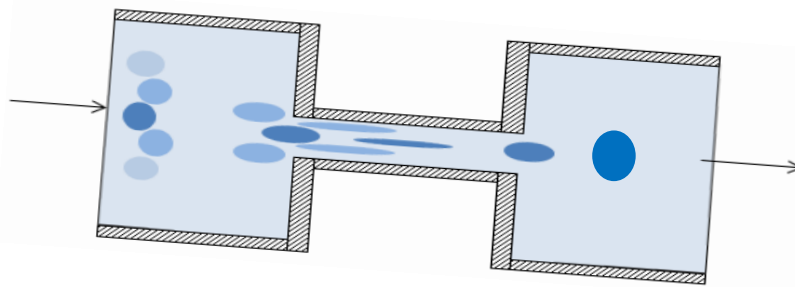


Fig. 5 Escoamento de um fluido viscoelástico. O fluido deforma para que seja possível passar pelo canal mais estreito, recuperando a sua deformação quando chega a região mais larga.

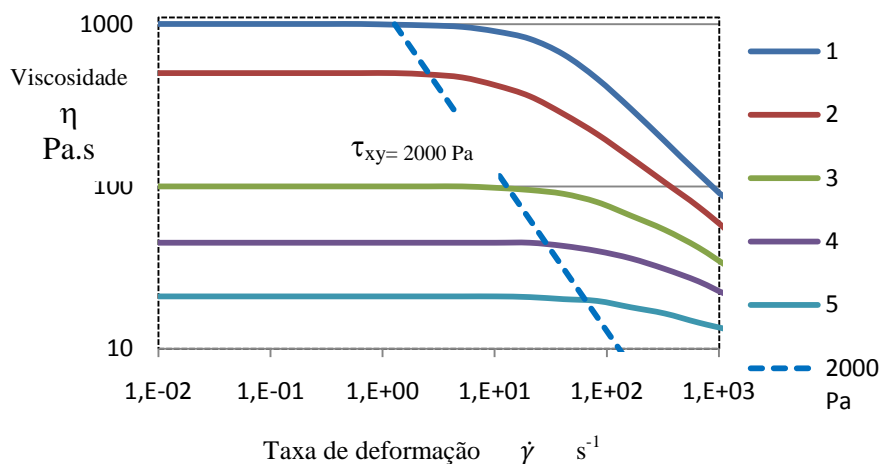


Fig 6 Representa a viscosidade para 5 fluidos, em função da sua taxa de deformação, onde se pode verificar a transição entre fluidos newtoniano e não newtoniano que ocorre para valores de τ_{xy} por volta dos 2000 Pa

Um fluido pode ter um comportamento linear (newtoniano) mas para tensões superiores a 2000 Pa, [Barnes (2000)] ele passa a ter um comportamento não linear (não-newtoniano), Fig.6

1.5- Objectivo

O objectivo deste trabalho é obter soluções analíticas (ou numérico/ analíticas) para o escoamento desenvolvido fig.(6) em canais de soluções poliméricas descritas pelos modelos não lineares Phan-Thien-Tanner (PTT) e o modelo de extensibilidade finita não-linear com a aproximação de Peterlin (FENE-P) motorizados por gradiente de pressão e electro-osmose. A solução corresponde a um fluido homogéneo entre duas placas paralelas, obedecendo ao modelo anterior. O escoamento ocorre devido à existência combinada de gradiente de pressão e da electro-osmose, sendo que as duplas camadas eléctricas junto às duas paredes serão diferentes.

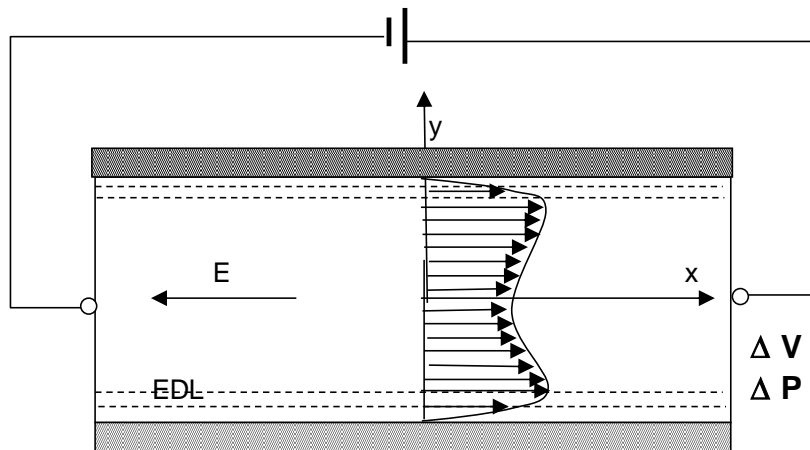


Fig.7 mostra a dupla camada eléctrica (EDL) e esquematiza um escoamento sujeito a um campo eléctrico (E) quando aplicamos uma diferença de potencial eléctrico (ΔV) e forças de pressão (ΔP).

2-Equações governativas

2.1- Equações de transporte

Num escoamento incompressível plenamente desenvolvido para fluidos viscoelásticos com paredes de potencial eléctrico assimétrico polarizado por electro-ose, a polaridade pode ser invertida mantendo-se válidas as equações aqui descritas.

Para um fluído incompressível e escoamento desenvolvido entre placas paralelas a equação da continuidade e dada por:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{1}$$

e a equação de conservação da quantidade de movimento linear é:

$$\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho_e \mathbf{E} = 0 \tag{2}$$

Onde \mathbf{u} é o vector de velocidade, p é a pressão, ρ é a massa volúmica do fluido e $\boldsymbol{\tau}$ é a contribuição do polímero para a tensão total. O termo $\rho_e \mathbf{E}$ representa a força electrolítica por unidade de volume, onde ρ_e é a densidade de carga eléctrica e \mathbf{E} é o campo eléctrica exterior que dá a diferença de potencial eléctrico ΔV tal que $\mathbf{E} = -\nabla V$.

O escoamento desenvolvido entre placas paralelas apresenta um campo de velocidades com uma única componente $\mathbf{u} = (u(y), 0, 0)$, de acordo com o esquema da figura 5. A forma exacta do perfil vai depender da lei constitutiva reológica do fluido, das condições fronteira e dos mecanismos de promoção do escoamento, constituindo a obtenção dessa solução que é o objectivo desta Tese.

2.2 Análise do modelo PTT

O modelo viscoelástico de Phan-Thien e Tanner (1977) usualmente designado por PTT foi o modelo reológico usado para chegar a solução analítica apresentada nesta tese. É possível obter expressões globais do campo de tensões para fluido PTT neste escoamento de corte puro. Estas estão deduzidas nas equações seguintes e são idênticas às que existem num macro escoamento, já deduzidas por Oliveira e Pinho (1999)

$$f(\tau_{kk}) \boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\tau} = 2 \eta \nabla \mathbf{D} \quad (3)$$

onde $\mathbf{D} = \frac{\nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}}{2}$ é o tensor do taxa de deformação, λ é o tempo de relaxação, η é o coeficiente de viscosidade do polímero e $\overset{\nabla}{\tau}$ representa a derivada conectiva de Oldroyd, definida por:

$$\overset{\nabla}{\tau} = \frac{D\tau}{Dt} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \tau - \tau \nabla \mathbf{u}. \quad (4)$$

A função do coeficiente de tensão $f(\tau_{kk})$, na sua forma linear [Barmes (2000)] é dada pela equação:

$$f(\tau_{kk}) = \left(1 + \varepsilon \frac{\lambda}{\eta} \tau_{kk}\right) \quad (5)$$

onde (τ_{kk}) representa traço do tensor da tensões e ε é um parâmetro inversamente proporcional a viscosidade extensional do material. Recupera-se o modelo conectivo superior de Maxwell, UCM, do inglês “ Upper Convected Maxwell ”, no caso em que $\varepsilon = 0$

As equações que regem o estado de tensão do fluido PTT num escoamento desenvolvido sendo $\mathbf{u} = (u(y), 0, 0)$ podem ser obtidas das equações (3), (4) e (5) e são as seguintes:

$$f(\tau_{kk}) \tau_{xx} = 2 \varepsilon \lambda \dot{\gamma} \tau_{xy} \quad (6)$$

$$f(\tau_{kk}) \tau_{yy} = 0 \quad (7)$$

$$f(\tau_{kk}) \tau_{xy} = \eta \dot{\gamma} + \lambda \dot{\gamma} \tau_{yy} \quad (8)$$

$$\tau_{kk} = \tau_{xx} + \tau_{yy} \quad (9)$$

Para se verificar a equação (7), τ_{yy} terá que ser igual a zero, por outro lado, atendendo a equação (9) conclui-se que $\tau_{kk} = \tau_{xx}$. Desta forma podemos tirar a taxa de deformação, $\dot{\gamma}$, tomando em consideração a equação (8), da seguinte forma:

$$\dot{\gamma} = \frac{f(\tau_{kk})\tau_{xy}}{\eta} = \frac{f(\tau_{xx})\tau_{xy}}{\eta} \quad (10)$$

se dividirmos a equação (6) pela equação (8) teremos a expressão (11) que nos permite determinar τ_{xx} .

$$\tau_{xx} = \frac{2 \lambda \tau_{xy}^2}{\eta} \quad (11)$$

2.3- Modelo FENE-P

O segundo modelo viscoelástico utilizado é o modelo de extensibilidade finita não linear com a aproximação de Peterlin e designado por modelo FENE-P. Neste caso, a tensão extra do polímero, é dada por [Bird 1980]:

$$Z(\tau_{kk}) \tau + \lambda \overset{\nabla}{\tau} - \lambda \left(\tau - \frac{b}{b+2} n k_B T \mathbf{I} \right) \frac{D \ln Z}{Dt} = 2 \eta \left(\frac{b+5}{b+2} \right) D \quad (12)$$

onde \mathbf{I} é o tensor identidade, b é o parâmetro que mede a extensibilidade, k_B é a constante Boltzmann, T é a temperatura absoluta e n é um parâmetro do modelo [Bird (1980)]. A função do coeficiente de tensão, $Z(\tau_{kk})$, pode ser expressa por [Bird (1980)]:

$$Z(\tau_{kk}) = 1 + 3 \left(\frac{1}{b+2} + \frac{\lambda}{3 \eta} \frac{\tau_{kk}}{(b+5)} \right) \quad (13)$$

Para um fluido FENE-P, num escoamento totalmente desenvolvido entre duas placas paralelas ou num tubo, $\mathbf{u} = \{u(y), 0, 0\}$:

$$Z(\tau_{kk}) \tau_{xx} = 2 \lambda \gamma \tau_{xy} \quad (14)$$

$$Z(\tau_{kk}) \tau_{xy} = \left(\frac{b+5}{b+2} \right) \eta \dot{\gamma} \quad (15)$$

Novamente, o traço do tensor das tensões torna-se assim

$$Z(\tau_{xx}) = \left(\frac{b+5}{b+2} \right) \left[1 + \frac{\lambda}{\eta} \frac{(b+2)}{(b+5)^2} \right] \tau_{xx} \quad (16)$$

A relação entre a tensão normal e a tensão de corte é dada por:

$$\tau_{xx} = 2 \frac{\lambda}{\eta} \frac{(b+2)}{(b+5)^2} \tau_{xy}^2 \quad (17)$$

A passagem do modelo PTT para o modelo FENE-P é feita por uma transformação matemática sendo validas todas as equações apresentadas neste trabalho.

2.4- Equações de Poisson-Boltzmann

O contacto entre as paredes do canal dieléctrico e o líquido electrolítico resulta na formação espontânea de duas camadas eléctricas duplas, uma do lado da parede de referência e outra (diferentes para o caso de condições assimétricas) do lado da parede oposta. Estas camadas EDL são consideradas como estando longe uma da outra para podermos tratá-los como efeitos independentes.

O potencial do campo eléctrico dessa camada dupla pode ser expressa por meio de uma equação de Poisson-Boltzmann:

$$\nabla^2 \psi = - \frac{\rho_e}{\epsilon} \quad (18)$$

onde a constante dieléctrica da solução (ϵ) é assumida como constante. A equação de Poisson-Boltzmann pode ser integrada e submetida a condições de fronteira de potencial, ψ_1 (na parede 1) e potencial, ψ_2 (na parede 2).

A quantificação da densidade de carga eléctrica, ρ_e , de acordo com Bruus (2008), para um meio electrolítico em equilíbrio é dada através da fórmula seguinte:

$$\rho_e = -2\eta_0 e Z \sinh\left(\frac{eZ}{K_B} \psi\right) \quad (19)$$

onde η_0 é a densidade iónica, e é a carga eléctrica elementar do electrão e z é a valência dos iões.

Nas nossas condições, assumimos que os valores do argumento do sinh são muito pequenas, assim sendo podemos considerar que o sinh(a) é aproximadamente igual ao próprio argumento (a). Este procedimento é conhecido como a aproximação de Debye-Hückel.

2.5- Potencial eléctrico através do canal

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} = -k^2\psi \quad (20)$$

Onde $k^2 = 2 \eta_0 e^2 z^2 / (\epsilon k_B T)$ é o parâmetro de Debye-Hückel relacionado com a lei de Debye $\xi = \frac{1}{k}$ referente à espessura da camada dupla. A equação (20), depois de integrada com condições fronteira para a parede (w_1), um potencial eléctrico ψ_1 e para a paredes (w_2) um potencial eléctrico ψ_2 , em que $\psi_2 = R \psi_1$ equação (24), desta forma o potencial eléctrico será dada por:

$$\psi = \psi_1 (S_1 e^{kY} + S_2 e^{-kY}) \quad (21)$$

Definimos S_1 e S_2 (anexo1) como sendo números adimensionais referentes à assimetria da parede w_1 e da parede w_2 , do seguinte modo:

$$S_1 = \frac{e^{kH} - R e^{-kH}}{e^{2kH} - e^{-2kH}} \quad \text{ou} \quad S_1 = \frac{e^{kH} - R e^{-kH}}{4 \text{Sinh}(kH) \cosh(kH)} \quad (22)$$

$$S_2 = \frac{R e^{kH} - e^{-kH}}{e^{2kH} - e^{-2kH}} \quad \text{ou} \quad S_2 = \frac{R e^{kH} - e^{-kH}}{4 \text{Sinh}(kH) \cosh(kH)} \quad (23)$$

Sendo R o rácio dos potenciais eléctricos entre a parede w_2 , (ψ_2), e a parede de referencia w_1 , (ψ_1), que fica definido pela expressões seguinte:

$$R = \frac{\psi_2}{\psi_1} \quad (24)$$

A densidade de carga eléctrica, atendendo à equação (19) e à simplificação de Debye-Hückel será dada pela seguinte equação:

$$\rho_e = -k^2 \epsilon \psi \quad (25)$$

Atendendo a que ψ é dado pelas equações, (21), (22) e (23) teremos:

$$\rho_e = -k^2 \epsilon \psi_1 \left(\frac{e^{kH} - R e^{-kH}}{e^{2kH} - e^{-2kH}} e^{kY} + \frac{R e^{kH} - e^{-kH}}{e^{2kH} - e^{-2kH}} e^{-kY} \right) \quad (26)$$

3- Solução da equação de quantidade de movimento

Para condições de escoamento homogêneo e desenvolvido a equação (2) fica reduzida a:

$$\frac{d\tau_{xy}}{dy} = -\rho_e E_x + p_{,x} \quad (27)$$

Fazendo a integração da equação (27) e recorrendo à equação (26), a tensão de deformação (τ_{xy}) para condições assimétricas será dada por:

$$\tau_{xy} = k \epsilon E_x \psi_1 (S_1 e^{ky} - S_2 e^{-ky}) + p_{,x} y + \frac{C_1 U_{sh}}{H} \quad (28)$$

Ficando por determinar a constante de integração adimensional C_1 , que será determinada mais tarde impondo as condições de velocidade nula na parede.

A tensão normal τ_{xx} pode ser obtida da equação (11) substituindo τ_{xy} pela equação (28) que relaciona as tensões normais com as tangenciais, resultando a seguinte equação:

$$\tau_{xx} = 2 \frac{\lambda}{\eta} [k \epsilon E_x \psi_1 (S_1 e^{ky} - S_2 e^{-ky}) + p_{,x} y + \frac{C_1 U_{sh}}{H}]^2 \quad (29)$$

Recorrendo ainda às equações (5) e (10) teremos a taxa de deformação dada pela equação seguinte:

$$\dot{\gamma} = \frac{\tau_{xy}}{\eta} (1 + \epsilon \frac{\lambda}{\eta} \tau_{xx}) \quad (30)$$

Atendendo às equações (11) e que a taxa de deformação é dada por $\frac{dU}{dy}$, chegamos assim à seguinte equação:

$$\dot{\gamma} = \frac{dU}{dy} = \frac{\tau_{xy}}{\eta} (1 + 2 \epsilon \frac{\lambda^2}{\eta^2} \tau_{xy}^2) \quad (31)$$

Atendendo à equação (28) teremos:

$$\dot{\gamma} = \frac{dU}{dY} = \frac{k \in E_x \psi_1 (S_1 e^{kY} - S_2 e^{-kY}) + p_{,x} Y + \frac{C_1 U_{sh}}{H}}{\eta} \left\{ 1 + 2 \varepsilon \frac{\lambda^2}{\eta^2} \right. \\ \left. [k \in E_x \psi_1 (S_1 e^{kY} - S_2 e^{-kY}) + p_{,x} Y + \frac{C_1 U_{sh}}{H}]^2 \right\} \quad (32)$$

Integrando a equação (32) em ordem a Y , $U = \int \dot{\gamma} dY + C_2$ e depois de adimensionalizar a velocidade pela velocidade de Smoluchowski, U_{sh} e atendendo às condições fronteira de velocidade nula nas paredes e depois de determinarmos a constante C_2 , obtemos a equação (33) da velocidade adimensionalizada. É de notar que temos duas condições fronteira de velocidade para determinar as duas constantes de integração, uma será usada para determinar a constante C_1 da integração anterior e a outra será usada para determinar a constante da presente integração, C_2 .

$$\frac{U}{U_{sh}} = \frac{2}{3} \varepsilon De_k^2 [E_3 - A_3 + \frac{9}{2h} C_1 (AB - E)] + (1 - A) \left[1 + 6 \varepsilon De_k^2 \left(\frac{C_1^2}{h^2} - \frac{C}{4} \right) \right] \\ + \left[\varepsilon De_k^2 \left(3C - \frac{2C_1^2}{h^2} \right) - 1 \right] (1 - y) C_1 + \frac{1}{2} (y^2 - 1) \left(1 + \frac{\varepsilon De_k^2}{h^2} (y^2 + 1) \Gamma^2 \right) \Gamma \\ + \frac{3}{2h^2} \varepsilon De_k^2 \Gamma [1 - A^2 + (y^2 - 1)(2C_1^2 - h^2 C) + 2h(AB y - E)] \\ + 12 \varepsilon De_k^2 \Gamma \left[\frac{C_1}{h^2} \left(1 - A y + \frac{1}{h} (B - E) \right) - \Gamma h^{-4} (h(E - B y) + A - 1 + \right. \\ \left. \frac{1}{2} h^2 (A y^2 - 1) - \frac{1}{6} C_1 h^2 (y^3 - 1) \right] \quad (33)$$

Usando as seguintes expressões de compactação: (anexo 1)

$$\begin{aligned} A &= S_1 e^{yh} + S_2 e^{-yh} & E &= S_1 e^h - S_2 e^{-h} \\ B &= S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh} & C &= 4 S_1 S_2 \\ A_3 &= S_1^3 e^{3yh} + S_2^3 e^{-3yh} & E_3 &= S_1^3 e^{3h} + S_2^3 e^{-3h} \end{aligned}$$

A equação (33), fica dependente da determinação da constante da anterior integração, C_1 , para a sua determinação temos que invocar uma condição fronteira de velocidade nula na parede $\frac{U(y=1)}{U_{sh}} = 0$. Ficando a constante C_1 dependente da resolução de uma equação cúbica. Substituindo $y=1$ e igualando a zero, a equação (33) pode ser escrita explicitando C_1 , tomando a seguinte forma:

$$C_1^3 + a_2 C_1^2 + a_1 C_1 + a_0 = 0 \quad \text{para} \quad \varepsilon^{0.5} De_k \neq 0 \quad (34)$$

Em que os coeficientes da equação (34) são dados por:

$$a_0 = \left(\left(\frac{3}{2} S_1 S_2 - \frac{1}{4 \varepsilon De_k^2} \right) (R - 1) + (S_1^3 - S_2^3) (e^{3h} - e^{-3h}) \right) \left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8} h^2 \right) + \frac{3}{8} h \Gamma \left((S_1^2 - S_2^2) (e^{2h} - e^{-2h}) \right) + \frac{3}{2} \Gamma^2 (1 - R - 2 (S_1^2 - S_2^2) (e^{2h} + e^{-2h})) \quad (35)$$

$$a_1 = \frac{3}{4} h (S_1^2 + S_2^2) (e^{2h} - e^{-2h}) + \left(\frac{1}{2 \varepsilon De_k^2} - 6 S_1 S_2 \right) h^2 - 3 (S_1 + S_2) \left(e^h + e^{-h} - \frac{e^h - e^{-h}}{h} \right) \quad (36)$$

$$a_2 = \frac{3}{2} (R - 1) \quad (37)$$

A solução da equação (34) será dada, usando as transformada de Möbius [Shurman (1997)], Anexo 3, por:

$$C_1 = \frac{(\beta - \alpha r)}{1 - r} - \frac{a_2}{3} \quad (38)$$

Sendo: $p = -\frac{1}{3} a_2^2 + a_1$; $q = a_0 - \frac{1}{3} a_1 a_2 + \frac{2}{27} a_2^3$

$$\alpha := \frac{\left(-\frac{q}{2} - S \right)}{\frac{p}{3}} ; \beta := \frac{\left(-\frac{q}{2} + S \right)}{\frac{p}{3}}$$

onde S é uma raiz quadrada do determinante, e r uma raiz cúbica de $\frac{\alpha}{\beta}$

$$S = \sqrt{\left(\frac{q}{2} \right)^2 + \left(\frac{p}{3} \right)^3} \quad r = \sqrt[3]{\frac{\alpha}{\beta}} \quad (39)$$

Há dois casos particulares em que não é necessário resolver uma equação cúbica, que são os seguinte:

a) O caso de $\varepsilon^{0.5} De_k = 0$ a equação (26) é linear, sendo dada por:

$$C_1 = -(S_1 - S_2) \sinh(h) = \frac{1-R}{2} \quad (40)$$

b) O caso de condições simétricas, $\psi_1 = \psi_2$, em que a constante de integração será igual a zero, $C_1 = 0$.

Para adimensionalizarmos as tensões, recorreu-se à expressão, $3 \eta U_{sh} k$, que tem as dimensões de uma tensão. Se dividirmos a equação (28), que nos dá a tensão tangencial τ_{xy} , por $(3 \eta U_{sh} k)$, obteremos a equação (41) para as tensões tangenciais adimensionais.

$$\frac{\tau_{xy}}{3 \eta U_{sh} k} = \frac{1}{3} \left(\frac{\Gamma y}{h} - (S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh}) + \frac{C_1}{h} \right) \quad (41)$$

Do mesmo modo, se usarmos a equação (29) teremos a equação (42) para a tensão normal de alongamento adimensional:

$$\frac{\tau_{xx}}{3 \eta U_{sh} k} = \frac{2 De_k}{3} \left[\frac{\Gamma y}{h} - (S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh}) + \frac{C_1}{h} \right]^2 \quad (42)$$

A taxa de deformação adimensional será dada pela equação :

$$\frac{\dot{\gamma}}{U_{sh} k} = \left[\frac{\Gamma y}{h} - (S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh}) + \frac{C_1}{h} \right] \left[1 + 2 \varepsilon De_k^2 \left(\frac{\Gamma y}{h} - (S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh}) + \frac{C_1}{h} \right)^2 \right] \quad (43)$$

A viscosidade adimensional será dada pela equação:

$$\frac{\mu(\dot{\gamma})}{\eta} = \left[1 + \frac{2}{3} \varepsilon De_k^2 \left(\frac{\Gamma y}{h} - (S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh}) + \frac{C_1}{h} \right)^2 \right]^{-1} \quad (44)$$

As equações adimensionais, das tensões tangenciais, das tensões normais e da viscosidade na parede w_1 (parede de referencia) serão dadas respectivamente pelas equações:

$$\frac{\tau_{xy}}{3 \eta U_{sh} k} \Big|_{w_1} = \frac{1}{3} \left(\frac{\Gamma}{h} - R \right) \quad (45)$$

$$\frac{\tau_{xx}}{3 \eta U_{sh} k} \Big|_{w_1} = \frac{2 De_k}{3} \left(\frac{\Gamma}{h} - R \right)^2 \quad (46)$$

$$\frac{\mu(\dot{\gamma})}{\eta} \Big|_{w_1} = \left[1 + \frac{2}{3} \varepsilon De_k^2 \left(\frac{\Gamma}{h} - R + \frac{C_1}{h} \right)^2 \right]^{-1}$$

A velocidade é máxima ou mínima quando a tensão é nula, da equação (41) teremos:

$$\bar{\delta} \frac{\Gamma}{h} - (S_1 e^{\bar{\delta} h} - S_2 e^{-\bar{\delta} h}) + \frac{C_1}{h} = 0 \quad (41)$$

onde $\bar{\delta}$ é o valor de y que anula a tensão. A determinação de $\bar{\delta}$ é iterativa.

A fig.8 mostra as coordenadas $\bar{\delta}$, segundo y , para as quais a velocidade é máxima em função da assimetria do potencial, da razão pressão/electro-osmose Γ e de $\varepsilon^{0,5} De_k$. Para o caso simétrico ($R=1$) temos $C_1 = 0$ e podemos confirmar pela fig.8 a) que para este caso a velocidade máxima ocorre ao centro, $\bar{\delta} = 0$, independentemente da pressão e da electro-osmose.

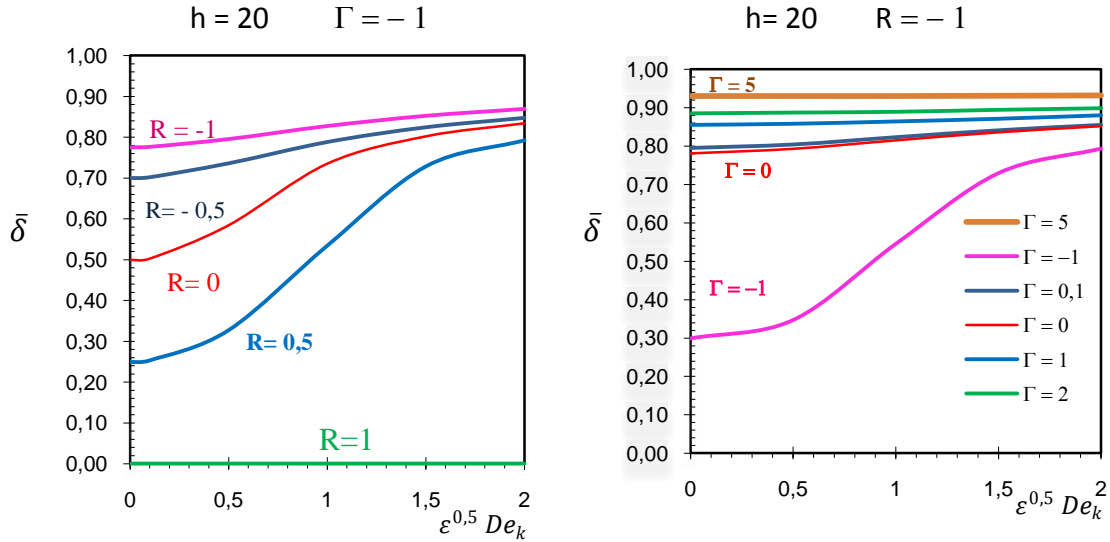


Fig 8 - mostra as coordenadas $\bar{\delta}$ para as quais a velocidade é máxima, em função de $\varepsilon^{0,5} De_k$
a) para uma razão de pressão/electro-osmose de $\Gamma = -1$ e variando os valores de assimetria R
b) para uma razão de assimetria $R = -1$ e variando os valores de pressão/ electro-osmose Γ .

A determinação da velocidade máxima e mínima é feita a partir da equação (33) substituindo y por $\bar{\delta}$, tendo em atenção as expressões de compactação (A , B e A_3), onde terá também de substituir y por $\bar{\delta}$. (Anexo 2)

O caudal médio adimensionalizado (\bar{Q}) é dado pelo integral da velocidade adimensional, entre as duas paredes. (Anexo 3)

$$\bar{Q} = \frac{q}{2H U_{sh}} = \int_{-1}^1 \frac{u}{U_{sh}} dy \quad (48)$$

Depois de integrada a equação poderá ser escrita na seguinte forma:

$$\bar{Q} = b_3 \Gamma^3 + b_2 \Gamma^2 + b_1 \Gamma + b_0 \quad (49)$$

As expressões para a determinação dos valores numéricos para os coeficientes b_3 , b_2 , b_1 e b_0 são apresentadas no Anexo 3, permitindo calcular o caudal volumétrico a partir da equação (49).

Desta mesma equação, igualando o caudal a zero poderemos determinar os valores numéricos do rácio de pressões electro-osmose (Γ) para os quais o caudal é nulo (Anexo 3), sendo necessário resolver a equação cúbica (Anexo 4), cuja soluções e dada por:

$$\Gamma = \frac{(\beta - \alpha r)}{1 - r} - \frac{a_2}{3} \quad (50)$$

4- Discussão dos resultados

Foram obtidas as equações gerais: do perfil de velocidades, perfis de tensões, perfil de viscosidade e caudal médio, para escoamento desenvolvido, de fluidos viscoelásticos (PTT), sob a influência da mistura combinada de electro-osmose e gradiente de forças de pressão. As diferentes influências das forças motrizes, condições de fronteira e reológica sobre os perfis de velocidade estão contidas na equação (33). Para melhor compreender as características deste escoamento iremos abordar os seguintes casos limite contidos na solução geral:

(a) Fluido newtoniano em situação de electro-osmose e gradiente de pressão e a influência de R e de $h = k H$ no perfil de velocidades.

(b) Escoamento de Poiseuille com fluidos viscoelásticos, que corresponde á situação de $\Gamma \rightarrow \infty$.

(c) Escoamento por electro-osmose pura de fluido viscoelásticos ($\Gamma = 0$)

Finalmente, faremos a análise do caso geral de escoamento de fluido viscoelástico sob a acção combinada de electro-osmose e gradiente de pressão.

Estes casos serão analisados atendendo a condições de assimetria das paredes, R , sendo abordadas as seguintes situações particulares:

(a) $R=0$ correspondendo a um potencial nulo, na parede w_2

(b) $R= 1$ condições simétricas, que servem de referência e de comparação [Afonso (2009)].

(c) $R= -1$ correspondente a potenciais iguais nas duas paredes em termos absolutos, mas de sinais contrários.

(d) $R=0,5$ e $R=- 0,5$ correspondente a situações intermédias

4.1- Fluidos newtonianos

Para um fluido newtoniano o tempo de relaxação é nulo e o número Deborah é nulo ($De_\kappa = 0$), assim a equação geral (33) torna-se:

$$\frac{U}{U_{sh}} = \frac{1}{2}(y^2 - 1) \Gamma - (S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh}) - \frac{1-R}{2} \quad (51)$$

E a equação da velocidade adimensionalizada pela velocidade média será dada por:

$$\frac{U}{U_{med}} = \frac{e^h \left(S_1 e^{yh} + S_2 e^{-yh} + \frac{1}{2}(y-1) ((R-1) + \Gamma(y+1)) \right) + S_2 + S_1 e^{2h}}{\frac{1}{3} \Gamma e^h - S_1 e^{yh} - e^{-yh} + \frac{1}{2}(1-R) e^h + \frac{1}{2h}(S_1 + S_2)(e^{2h} - 1)} \quad (52)$$

O escoamento é regido pela influência de electro-osmose e forças de pressão, como também foi demonstrado por Dutta e Beskok (2001).

Quando $\Gamma \rightarrow \infty$, as forças de pressão dominam a dinâmica de transporte para qualquer valor de h , é recuperado o clássico perfil de velocidades, como mostra a fig. 9, em que a velocidade está adimensionalizada pela velocidade média, $\frac{U}{\bar{U}}$ fazendo variar o rácio do micro canal de $h=20$ a $h=200$ e a razão de potencial de $R=1$ e $R=-1$.

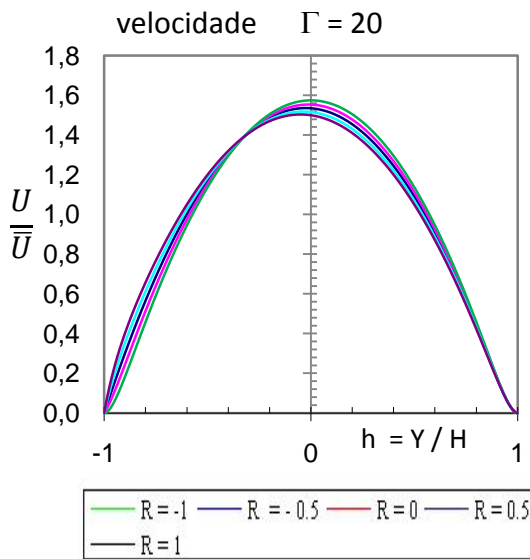


Fig. 9- A evolução do perfil de velocidade, quando as forças de pressão dominam o escoamento, $\Gamma=20$. A electro-osmose e a assimetria das paredes tornam-se pouco relevantes.

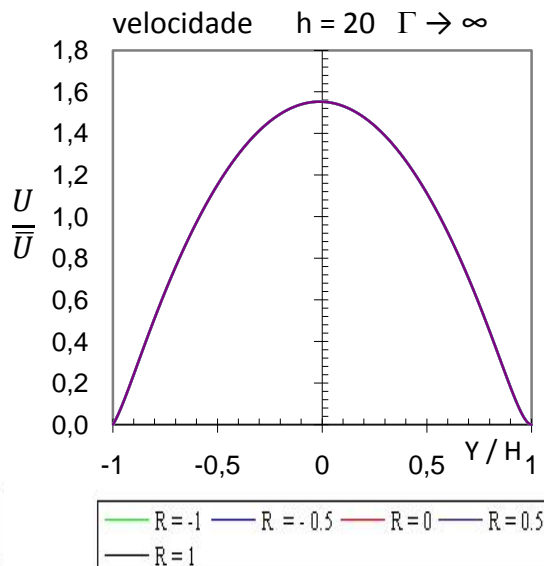


Fig.10- Mostra a evolução do perfil de velocidade, quando $\Gamma \rightarrow \infty$ as forças de pressão dominam o escoamento independente dos valores de R e h .

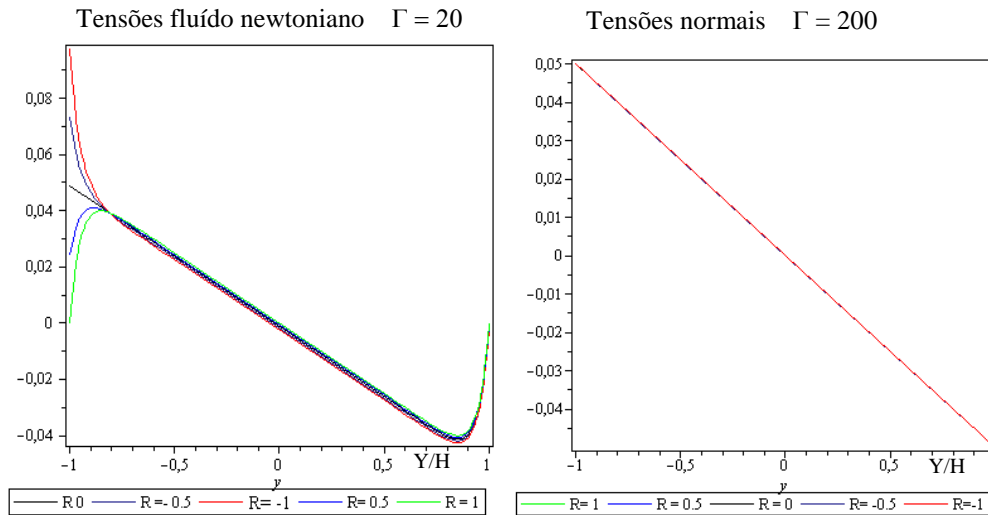


Fig.11- Mostra as tensões tangenciais quando a razão de pressões/electro-osmose tende para infinito
a) para $\Gamma=20$ b) para $\Gamma \rightarrow \infty$

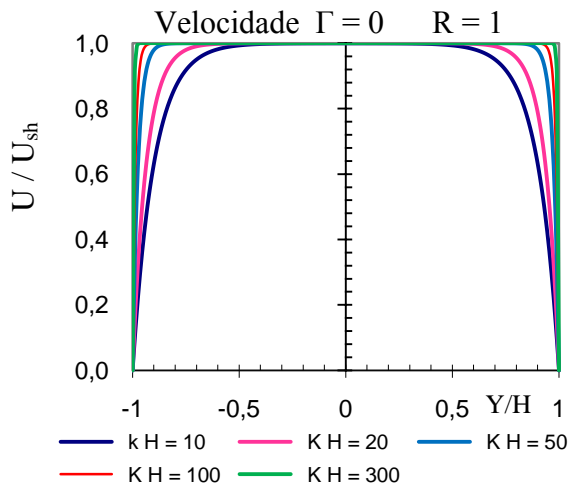
A electro-osmose está pouco presente tendo as condições de assimetria (R) pouca relevância fig.9 uma vez que as forças de pressão dominam o escoamento, o que corresponde a $Ex \rightarrow 0$ e $U_{sh} \rightarrow 0$. Quando $De_k=0$ (sem electro-osmose) o perfil é parabólico, Fig.10.

Quando $\Gamma \rightarrow 0$, o 1º termo da Equação (51) desaparece, o fluxo é regido exclusivamente pela electro-osmose e o perfil de velocidade é apenas uma função da distância da parede, da razão relativa do microcanal (h) e pela assimetria (R), fig.13.

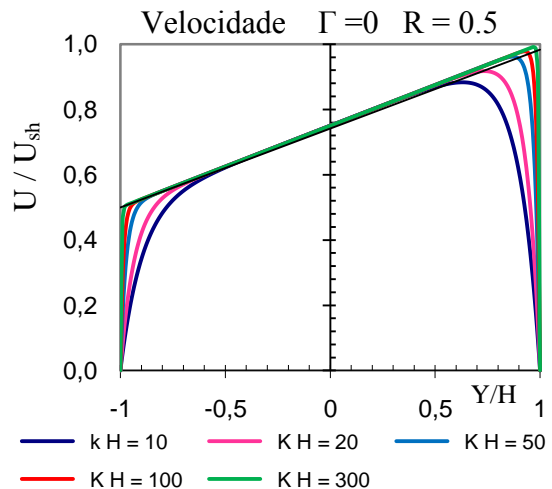
A fig.12 mostra o efeito do rácio relativo a microcanais, $h = k H$ (ou H / ξ , onde ξ é a espessura da camada de Debye) sobre os perfis de velocidade adimensional de um escoamento com electro-osmose pura, $\Gamma = 0$.

Se $h \rightarrow 1$ a espessura da dupla camada torna-se da mesma ordem de grandeza que meia altura do canal e a região de excesso de carga é distribuída ao longo de todo o canal. Esta situação não é compatível com esta solução visto que a aproximação de Debye-Hückel exige $h \gg 10$. Para $h=100$ a largura da camada de Debye é de cerca de 1% do microcanal. Note que para grandes valores de h ($h \rightarrow \infty$) o tamanho da região EDL ou de excesso de carga é relativamente pequena, e a equação (51) reduz para a equação clássica de Helmholtz-Smoluchowski, $U/U_{sh}=1$, com $\Gamma = 0$.

4.1.1 - Influência das condições de assimetria das paredes e da razão de altura do microcanal



A Fig. 12 mostra os perfis de velocidade em função do rácio de altura do microcanal (kH) sobre influência de forças eletrocinéticas, para condições simétricas ($R = 1$).



A Fig.13-Perfis de velocidade em função do rácio de altura do microcanal (kH) sobre influência de forças eletrocinéticas, para condição de assimétrica ($R = 0.5$).

A fig. 12 mostra os perfis de velocidade para $R=1$, [Afonso (2009)] para diversos valores de rácio de microcanal, para $kH=100$ são idênticas às de Dutta e Beskok (2001). As curvas apresentadas nas fig.12 e fig.13 são idênticas, para a parede de referência. A parede w_2 tem valores menores que se devem ao facto do potencial na parede ser metade do potencial da parede de referencia, ($R = 0,5$).

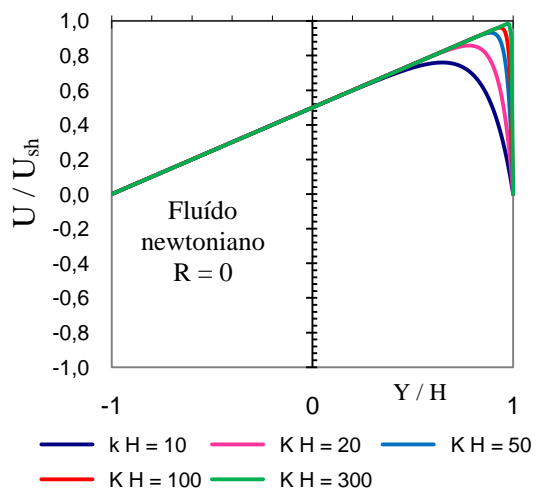
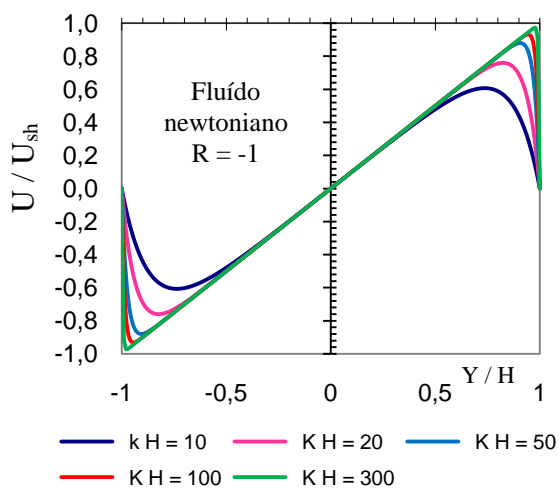


Fig.14 Mostra o efeito de $h = kH$ para dois casos extremos. a) caso do potencial na parede ser igual em valor absoluto mas de sinais contrários, $R = -1$. b) mostra o caso em que o potencial é nulo numa das paredes, $R = 0$

Comparando entre si, as figuras (12) (13) e (14) podemos ver o efeito da razão de altura do microcanal ($h = k H$) e a influência da razão de potencial R no perfil de velocidade.

Na fig.14 podemos observar vários perfis de velocidade para várias razões de potencial, $R = \psi_2 / \psi_1$, numa situação de electro-osmose pura e uma razão de microcanal de $h = 20$.

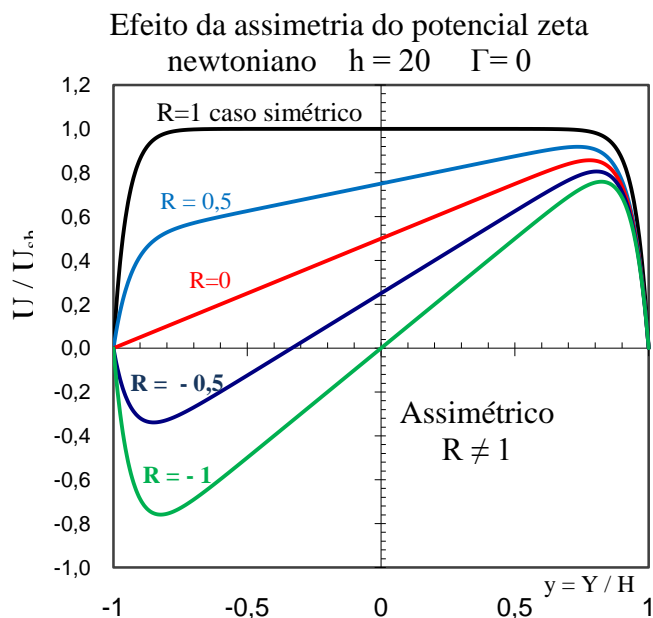


Fig. 15 - Vários perfis de Velocidade, relativos a um microcanal de rácio $h = 20$ considerando várias razões de potencial, $R = \psi_2 / \psi_1$. Para fluidos newtonianos sob a exclusiva influência das forças eletrocinéticas, $\Gamma = 0$.

Quando $\Gamma = 0$ e $R=1$ o perfis de velocidade correspondem a um escoamento com velocidade constante no núcleo. Se a razão de potencial, R , for diferente de 1 a velocidade do escoamento varia uniformemente no núcleo. Quando $R= 0$ a variação da velocidade mantêm-se linear até à parede de potencial nulo, $\psi_2 = 0$ retomando a forma característica junto à parede contrária.

Quando R é negativo, o que corresponde a potenciais de sinais contrários, a velocidade adimensional perto de uma das paredes é contrária á velocidade perto da outra parede e, para além de se anular nas paredes, a velocidade também se anula num ponto intermédio y . No caso partícula de $R= - 1$ ou seja ($\psi_2 = -\psi_1$), verifica-se que a velocidade se anula para $y = 0$ e que o valor numérico da velocidade adimensional a uma determinada distância de uma das paredes é igual, mas de sinal contrário, ao valor numérico da velocidade adimensional à mesma distância da parede oposta.

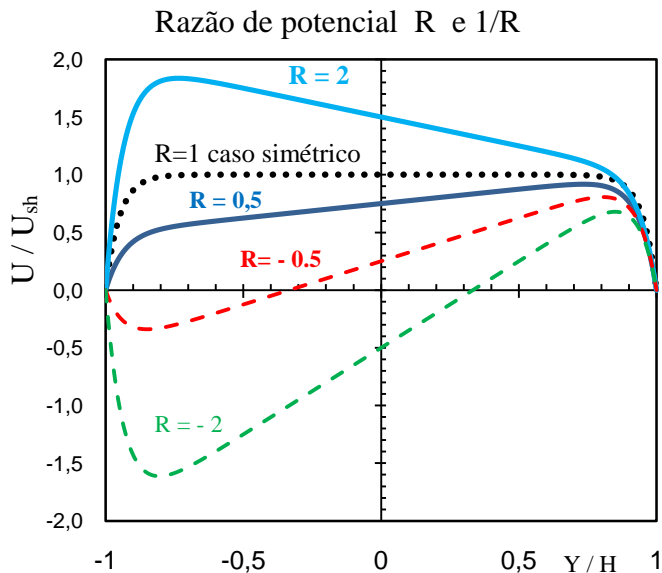


Fig 16 ilustração da razão de potencial R em relação ao seu inverso 1 / R

Quando afirmamos que o potencial numa das paredes e metade do potencial da outra parede, $\psi_2 / \psi_1 = 0,5 = R$, isto é igual a afirmarmos que o potencial da segunda parede é o dobro do potencial da primeira parede, $\psi_2 / \psi_1 = 2 = 1/R$ o que leva a esperarmos gráfico iguais para as velocidades. Pelo gráfico da fig. 16 verificamos que as linhas não coincidem, nem os valores, para $R=0,5$ a uma determinada distância da primeira parede são iguais aos valores para $R=2$ à mesma distância da segunda parede.

Por observação do mesmo gráfico, podemos verificar que os perfis são equivalentes diferindo entre si de um factor R, isto é dividido ao facto de a adimensionalização ter sido feita a partir de U_{sh} da parede 1, que é a nossa parede de referência, ou seja, $U/U_{sh}(y) = R U^*/U_{sh}(-y)$, diferem entre si de uma razão de potencial.

Foi verificada a validade da afirmação, analiticamente e numericamente, esta ultima, usando 200 pontos ao longo do perfil e comparando o valor da velocidade adimensional no ponto y para R com a velocidade adimensional no ponto -y para 1/R.

Por exemplo e por observação do gráfico podemos verificar que no eixo central, $y = 0$, temos para $R= 0,5$ uma velocidade de 0,75 ($U/U_{sh} = 0,75$) e para $1 / R = 2$ a velocidade é 1,5 ($U^*/U_{sh} = 1/R 0,75$).

4.1.2- Influência das forças de pressão

Num escoamento de Poiseuille com electro-osmose, fig.17, quando $\Gamma > 1$ há um aumento das Velocidades no canal que afasta o perfil de velocidades da sua forma linear na zona afastada das paredes, essa forma linear verifica-se quando $\Gamma = 1$. Quando $\Gamma < 1$ teremos uma situação contrária, o perfil de velocidades toma uma curvatura contrária chegando a ter velocidades negativas podendo assim atingir-se um escoamento médio em sentido inverso por acção de um gradiente de pressão desfavorável. A viscosidade é constante fig.18 a), como era de esperar, visto ser um fluido newtoniano.

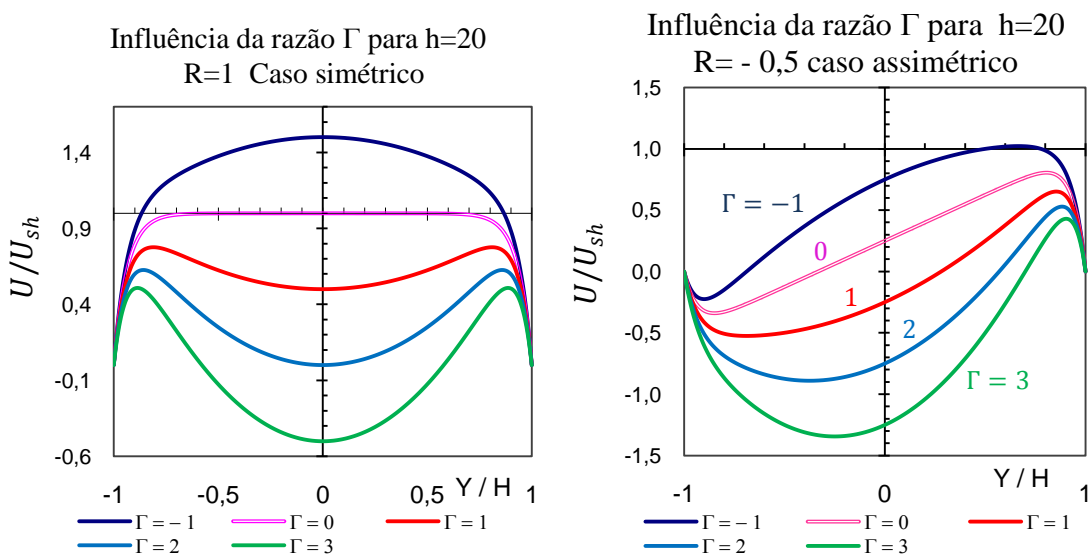


Fig 17 perfis de velocidade fazendo variar os valores de razão de pressão/ electro-osmose Γ
a) caso simétrico R=1 b) caso assimétrico R= - 0,5

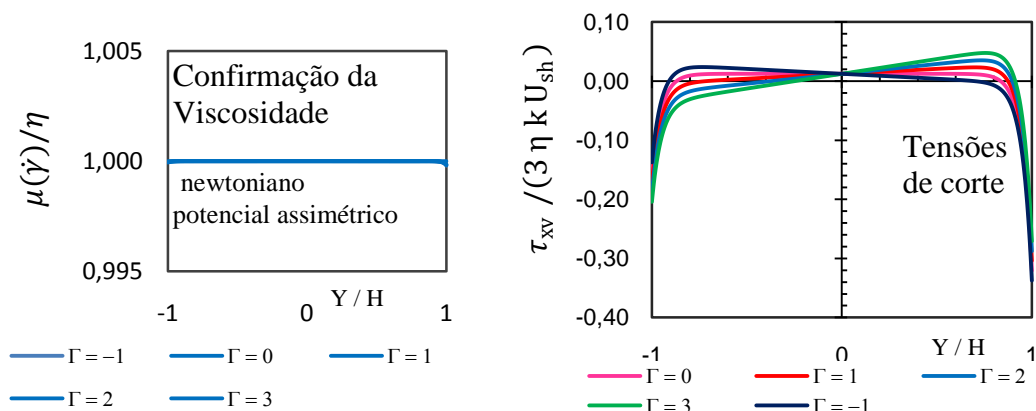
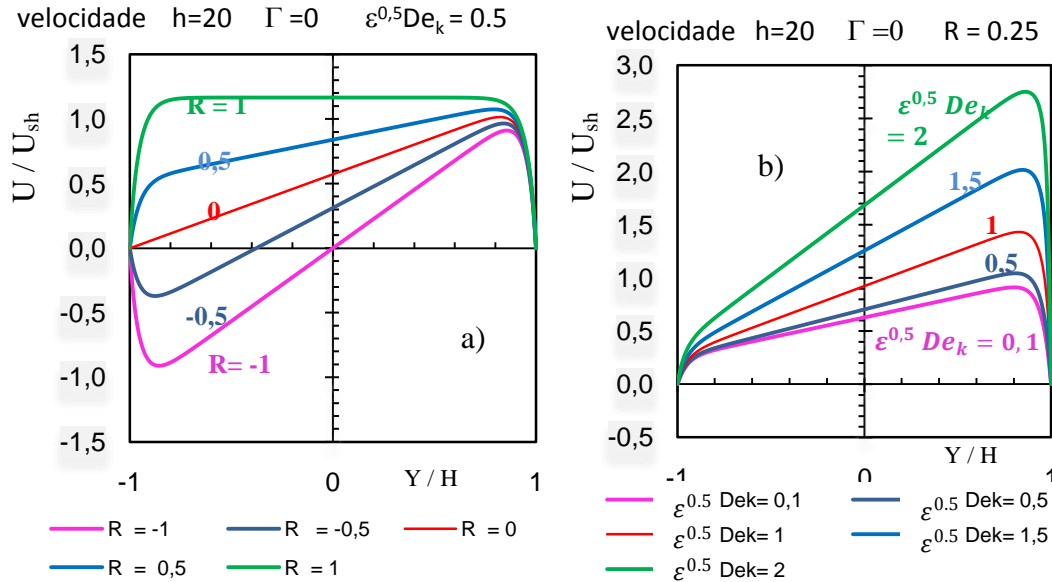


Fig 18 a) confirmação da viscosidade adimensional para o fluido newtoniano e b) perfis de tensões para um razão de potencial R= - 0.5 e $h=20$

4.2- Escoamento com Fluidos viscoelásticos com electro-osmose pura

Para um fluido viscoelástico sob a exclusiva influência de forças de electro-osmose, ou seja não há pressão imposta exteriormente, $\Gamma = 0$, nesta situação a equação geral (33) reduz a:

$$\frac{U}{U_{sh}} = \frac{2}{3} \varepsilon De_k^2 (S_1^3 (e^{3h} - e^{3hy}) + S_2^3 (e^{-3h} - e^{-3yh})) + \frac{3C_1}{h} \varepsilon De_k^2 (S_1^2 (e^{2yh} - e^{2h}) + S_2^2 (e^{-2h} - e^{-2yh})) + (1 - S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh}) \left(1 + 6 \varepsilon De_k^2 \left(\frac{C_1^2}{h^2} - S_1 S_2 \right) \right) + \left((12 S_1 S_2 \varepsilon De_k^2 - 1) - \frac{2 C_1^2 \varepsilon De_k^2}{h^2} \right) (1 - y) C_1 \quad (53)$$



Sendo a constante de integração C_1 dada por:

$$C_1^3 + a_2 C_1^2 + a_1 C_1 + a_0 = 0$$

Em que, a_2 , a_1 e a_0 são dados pelas equações seguintes:

$$a_2 = \frac{3}{2} (R - 1)$$

$$a_1 = \frac{3}{4} h (S_1^2 + S_2^2) (e^{2h} - e^{-2h}) + \left(\frac{1}{2 \varepsilon De_k^2} - 6 S_1 S_2 \right) h^2$$

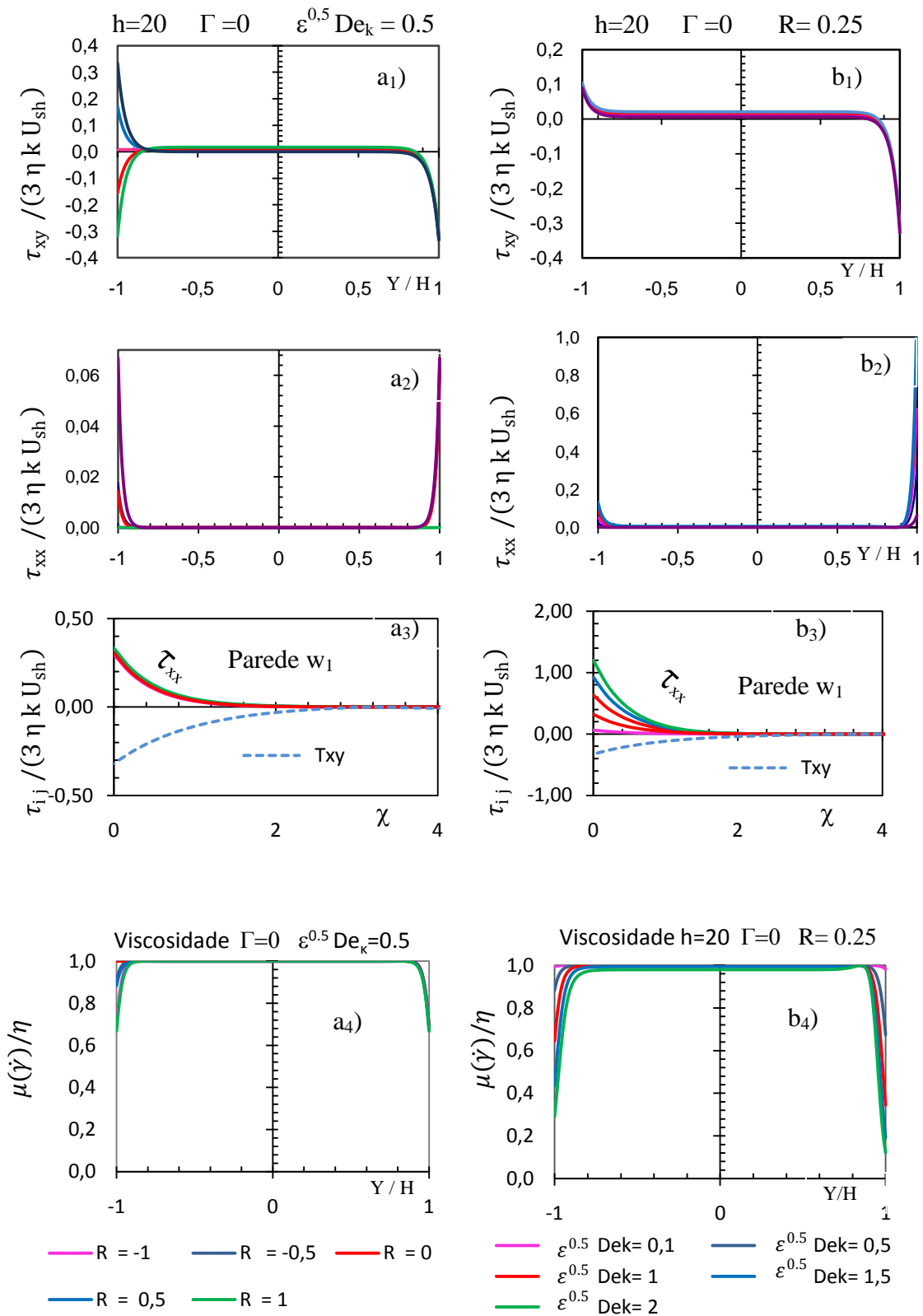


Fig. 20 Perfil de tensão adimensionalizados para os casos da figura 19. O gráfico (a₁ e b₁) representa os perfis de tensão de corte em toda a largura do canal, (a₂ e b₂) as tensões normais, (a₃ b₃) os perfil de tensões adimensionais, perto da parede 1, $\chi=(1-y) h$ e (a₄, b₄) os perfis de viscosidade adimensionais. sendo a_k) para diferentes valores de assimetria R e para $\varepsilon^{0.5} De_k=0,5$. b_k), para R=0,25 variando o valo de $\varepsilon^{0.5} De_k$. Sem forças de pressão $\Gamma=0$.

$$a_0 = \left(\left(\frac{3}{2} S_1 S_2 - \frac{1}{4 \varepsilon De_k^2} \right) (R - 1) + \left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8} h^2 (S_1^3 - S_2^3) (e^{3h} - e^{-3h}) \right) \right)$$

A solução da equação cúbica, C_1 , pode ser determinada pela equação (38) seguindo o algoritmo exposto no anexo 4, como já anteriormente foi sugerido e atendendo aos coeficiente a_2 , a_1 e a_0 , definidos para o presente caso.

A fig 19a) mostra os perfis de velocidade em função da razão de potencial, R , para $\varepsilon^{0.5} De_k = 0,5$ e a fig.19 b) mostra os perfis de velocidade em função de $\varepsilon^{0.5} De_k$ com $R=0,25$ e razão de altura do micro canal de, $h=20$. Estes perfis devem ser comparados com os perfis da Fig.14 para fluidos newtonianos, em que a diferença entre eles se deve a $\varepsilon^{0.5} De_k$ ser diferente de zero.

A influência de h sobre os perfis de velocidade, Fig.19, está restringida a uma pequena zona nas proximidades das paredes, EDL, o que corresponde a uma espessura adimensionalizada de $\xi / H \cong 0.1$ ou $\chi \cong 2$.

A fim de simplificar a análise foi usada uma nova variável $\chi = (1 - y) h$, para mostrar mais detalhe junto á parede. A fig. 20 mostra os perfis adimensionais para as tensões normais, para as tensões de deformação ao corte e para a viscosidade. Para fluidos viscoelásticos as tensões normais destacam-se com o aumento do valor de $\varepsilon^{0.5} De_k$, como mostra em mais detalhe a fig. 20b₄).

A determinação do caudal volúmico é dada pelo integral da velocidade adimensionalizada pela expressão seguinte:

$$\bar{Q} = \frac{Q}{2 H U_{sh}} = \int_{-1}^1 \frac{U}{U_{sh}} dy$$

Integrando a eq.53, para o caso de electro-osmose pura o caudal será dado por:

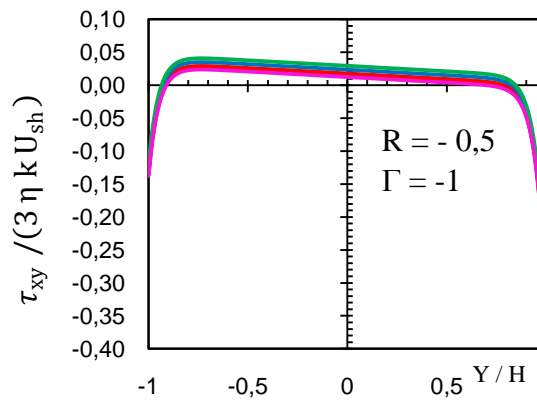
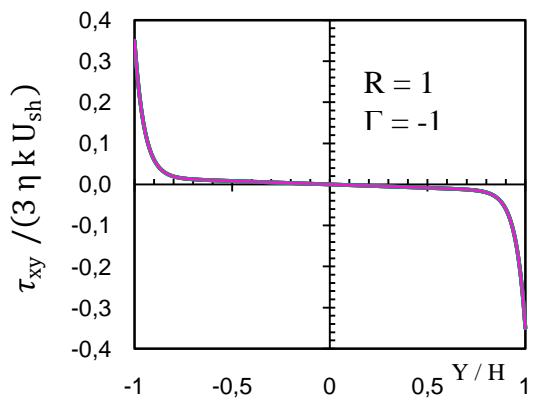
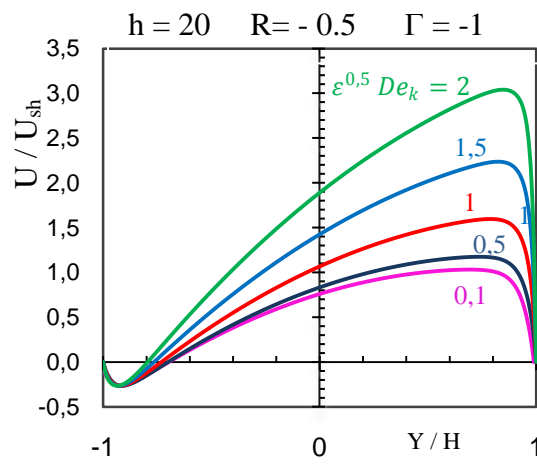
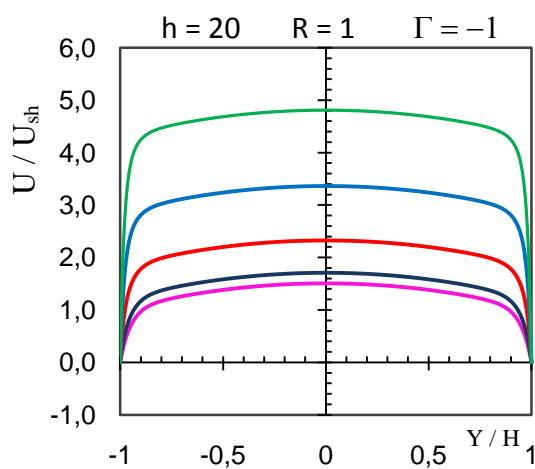
$$\begin{aligned} \bar{Q}_0 = \varepsilon De_k^2 \left\{ \left[\frac{2}{3} (S_1^3 + S_2^3 e^{-3h}) + 6 \left(\frac{C_1^2}{h^2} - S_1 S_2 \right) - \frac{2 C_1^3}{h^2} - \frac{3 C_1 (S_1^2 e^{2h} - S_2^2 e^{-2h})}{h} + \right. \right. \\ \left. \left. 12 C_1 S_1 S_2 - \frac{3 ((S_1 + S_2) C_1^2 - h^2 S_1 S_2 (S_2 + S_1) (e^h - e^{-h}))}{h^3} + \frac{3 C_1 (S_1^2 - S_2^2) (e^{2h} - e^{-3h})}{4 h^2} + \right. \right. \\ \left. \left. \frac{1 (-S_1^3 - S_2^3) (e^{3h} - e^{-3h})}{9 h} \right] - C_1 + S_2 e^{-h} + S_1 e^h - \frac{1 (S_2 + S_1) (e^h - e^{-h})}{2 h} \right\} \end{aligned} \quad (54)$$

Sendo a constante C_1 a mesma que é usada na determinação da velocidade.

4.3- Escoamento de fluidos viscoelásticos na presença combinada de electro-osmose e forças de pressão

As características dos fluidos viscoelásticos sob a acção combinada de electro-osmose e gradiente de pressão imposto serão abordadas recorrendo a equação (33). A Figura (21) apresenta perfis de velocidade, com base em fluxos favoráveis, $\Gamma < 0$.

A velocidade diminui para condições em relação as condições simétricas, tendo velocidades em sentido contrário junto á parede de sinal contrário ($R < 0$).



— $\epsilon^{0.5} De_k = 0,5$ — $\epsilon^{0.5} De_k = 1$
 — $\epsilon^{0.5} De_k = 1,5$ — $\epsilon^{0.5} De_k = 2$
 — $\epsilon^{0.5} De_k = 0,1$

— $\epsilon^{0.5} De_k = 0,5$ — $\epsilon^{0.5} De_k = 1$
 — $\epsilon^{0.5} De_k = 1,5$ — $\epsilon^{0.5} De_k = 2$
 — $\epsilon^{0.5} De_k = 0,1$

Fig. 21- a₁) mostra os perfis de velocidade e a₂) tensões de corte para o caso simétrico.

Fig. 22- mostra b₁) os perfis de velocidade e de b₂) tensões de corte para o caso assimétrico ($R = -0,5$).

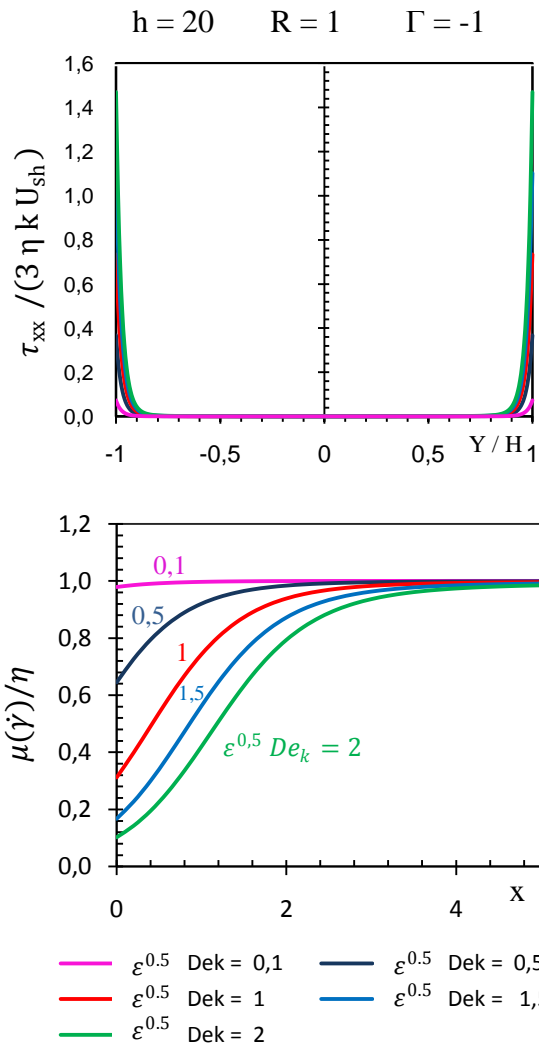


Fig 21cont. mostra a₃) os perfis de tensões normais e a₄) a viscosidade para o caso simétrico em coordenadas de parede

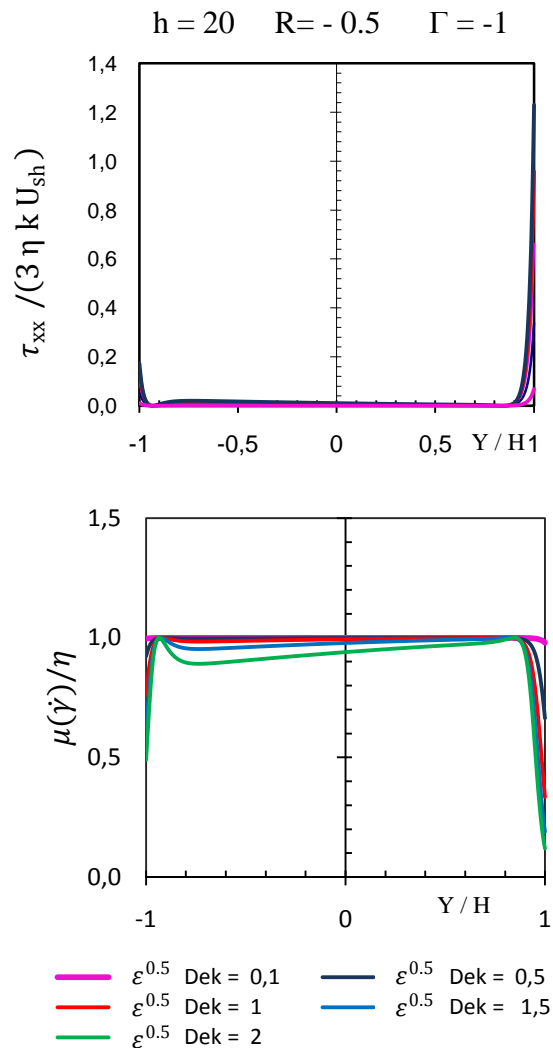


Fig 22 cont. mostra b₃) os perfis de tensões normais e b₄) a viscosidade para o caso assimétrico ($R = -0,5$)

Se compararmos os gráficos da figura 21, caso simétrico com os gráficos da figura 22, caso assimétrico, podemos visualizar as diferenças no que respeita aos perfis de velocidades, aos perfis de tensão, e aos perfis de viscosidade. Podemos verificar que as diferenças se devem á influência de um potencial menor, na parede 2, do que o potencial da parede 1 (de referência, que tem potencial igual ao do caso simétrico). Por este facto, as diferenças são maiores à medida que caminhamos para a parede 2. Para $\Gamma < 0$, a pressão é favorável contribuindo para o aumento da velocidade do escoamento, esse aumento é contrariado, no caso assimétrico, pelo potencial negativo na parede 2 ($R < 0$) figura (22).

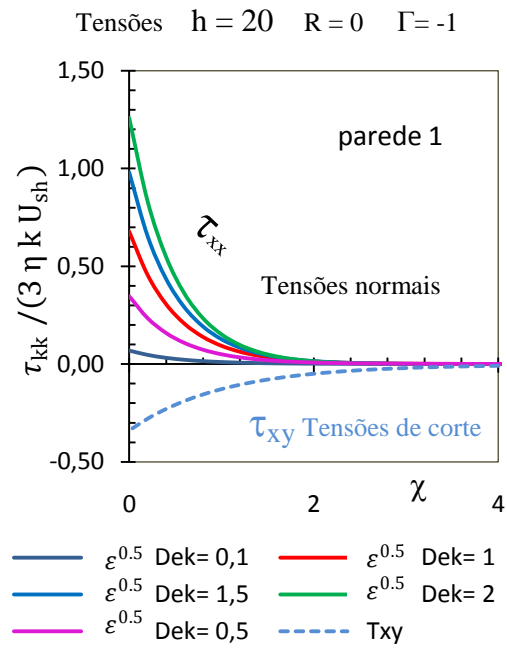
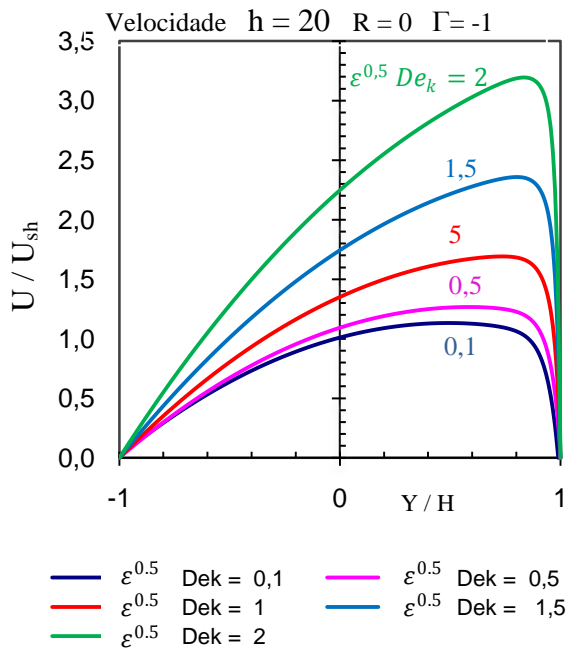


Fig. 23- Mostra o perfil de velocidades para uma razão de assimetria $R=0$, rácio de microcanal de $h=20$ e uma razão de pressão/electro-osmose de $\Gamma=-1$.

Fig. 24- Mostra o perfil de normais, para o caso da figura ao lado, e a tracejado mostra as tensões de corte para o mesmo caso, em coordenadas de parede w_1 , $\chi = (1-y) * h$.

Para $\Gamma > 0$, a pressão é desfavorável fazendo diminuir a velocidade do escoamento.

Quando $R < 0$ a parede de potencial negativo, também é desfavorável verificando-se

uma influenciada desfavorável dos valores de $\epsilon^{0,5} De_k$, junto á referida parede, fig 25

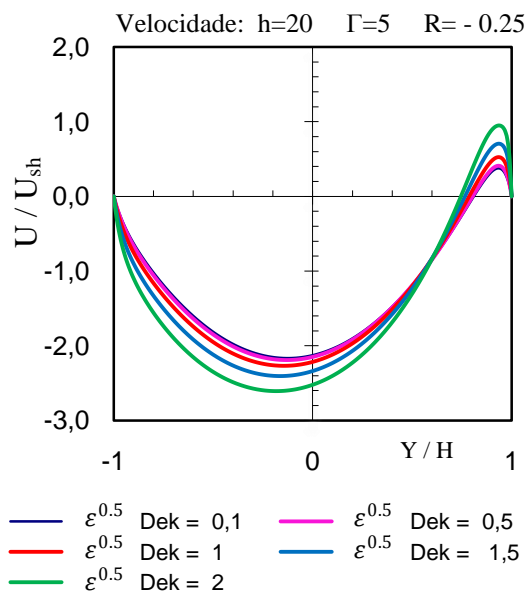
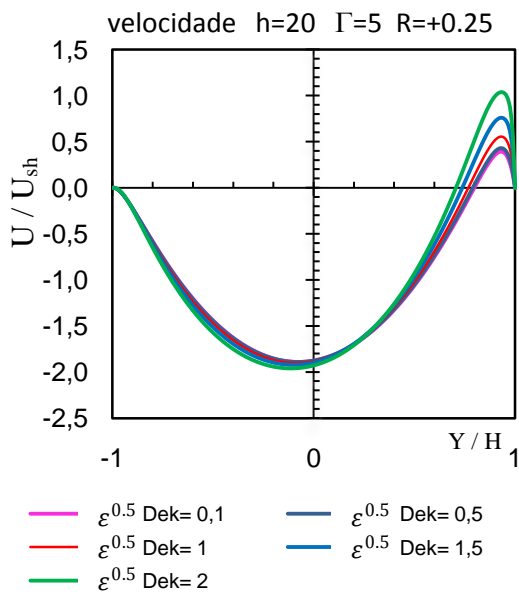


Fig. 25 –Mostra as diferenças no perfis de velocidade, modelo PTT, para um fluido sob a influência de um rácio de forças de pressão / de electro-osmose, $\Gamma=5$ e um rácio relativo da altura do microcanal, $h=20$ para vários valores de $\epsilon^{0,5} De_k$: a) potenciais positivos, $R = 0,25$ e (b) potencial negativo na parede 2, $R = -0,25$.

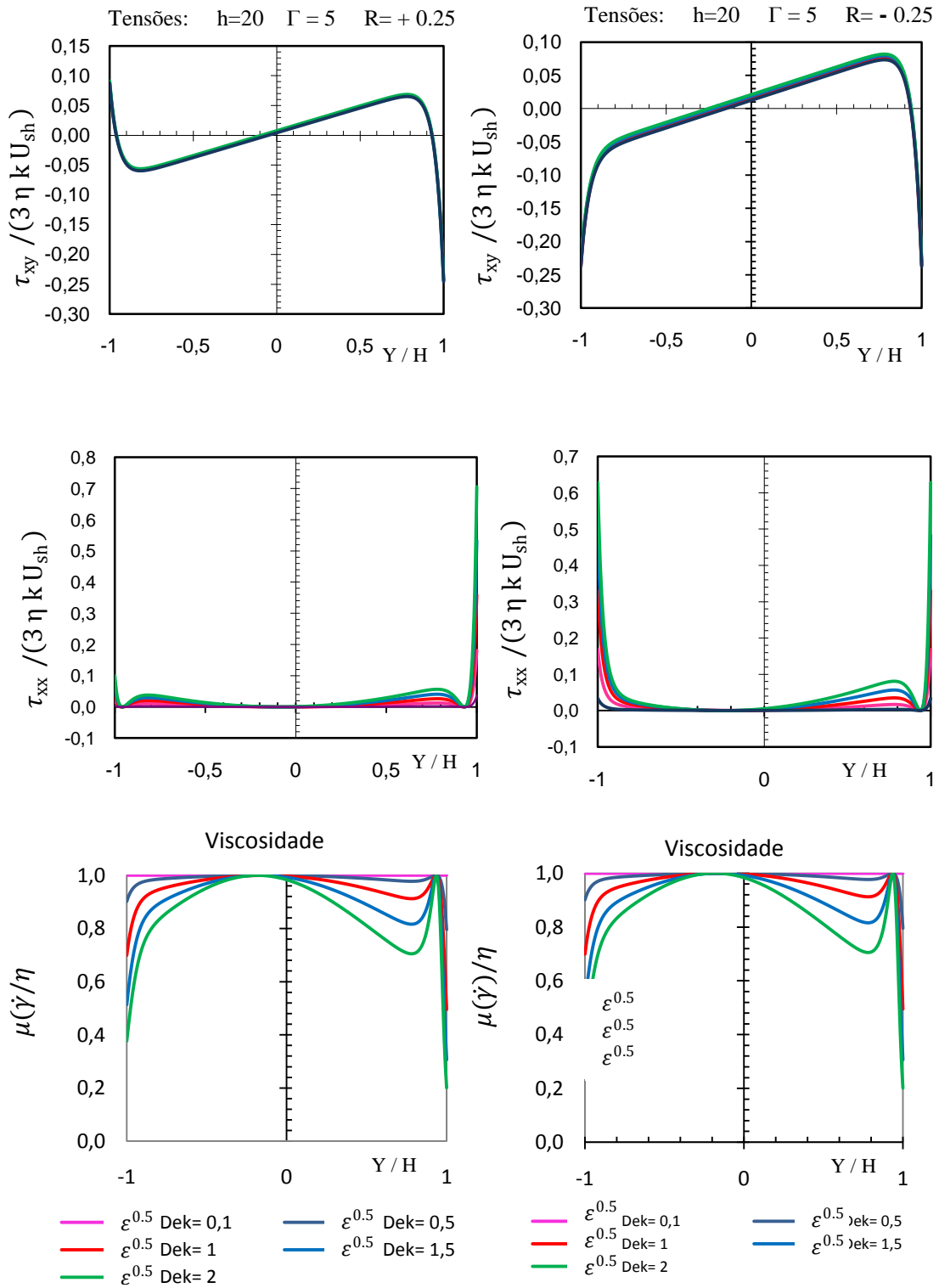


Fig. 26- Mostra os perfis de tensões de corte, tensões normais e viscosidade para os casos da Fig. 25.

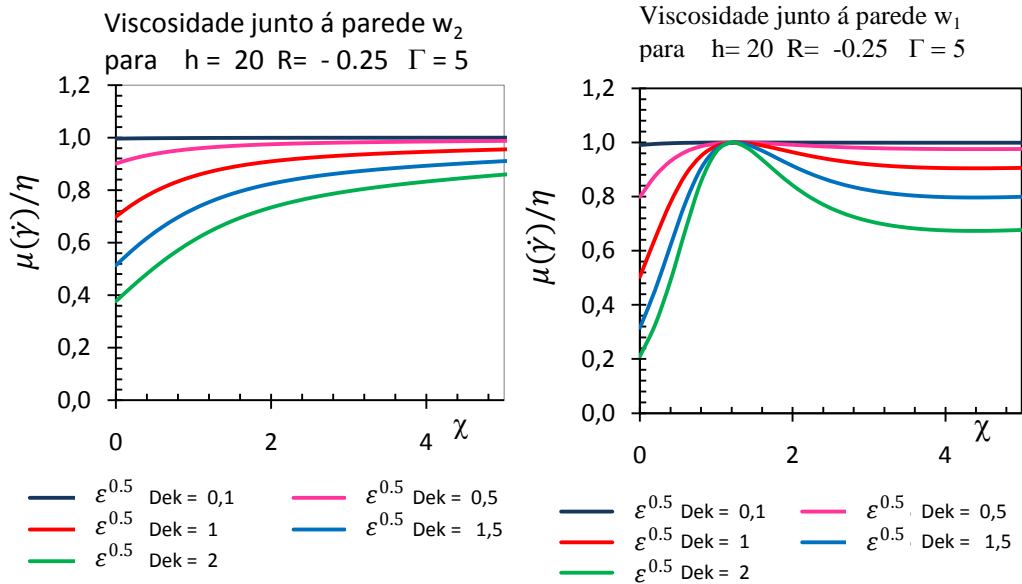


Fig. 27—Mostra as diferenças no perfil de viscosidade, em coordenadas da parede $\chi = (1-y)*h$, entre a parede w_2 e a parede w_1 para o caso de $R = -0.25$

O escoamento poderá reverter (anexo 2) em presença de pressões contrárias dominantes, ou seja, com o aumento de Γ . Com $R < 0$ a reversão ocorre mais cedo devido ao potencial da parede 2 ser desfavorável.

A localização de picos de velocidade dependem da razão de potencial, R e da razão entre a pressão e a electro-osmose, Γ .

Uma vez que o potencial da parede 1 é 4 vezes maior do que o potencial da parede 2 teremos junto á parede 2 um domínio do escoamento por parte das forças de pressão em relação a electro-osmose em que $\Gamma = 5$. Junto à parede 1 há um domínio das forças eléctricas, devido a um maior potencial na respectiva parede. Teremos um escoamento revertido uma vez que área negativa do gráfico é nitidamente maior que a área positiva, logo o escoamento é sentido inverso.

A fig 27 ilustra as diferenças no perfil de viscosidade junto ás paredes para o caso de paredes com potenciais diferentes, $R = -0.25$. Estas diferenças ficam a dever-se também ao facto das forças de pressão serem no mesmo sentido do potencial da parede 2 e de sentidos opostos na parede 1.

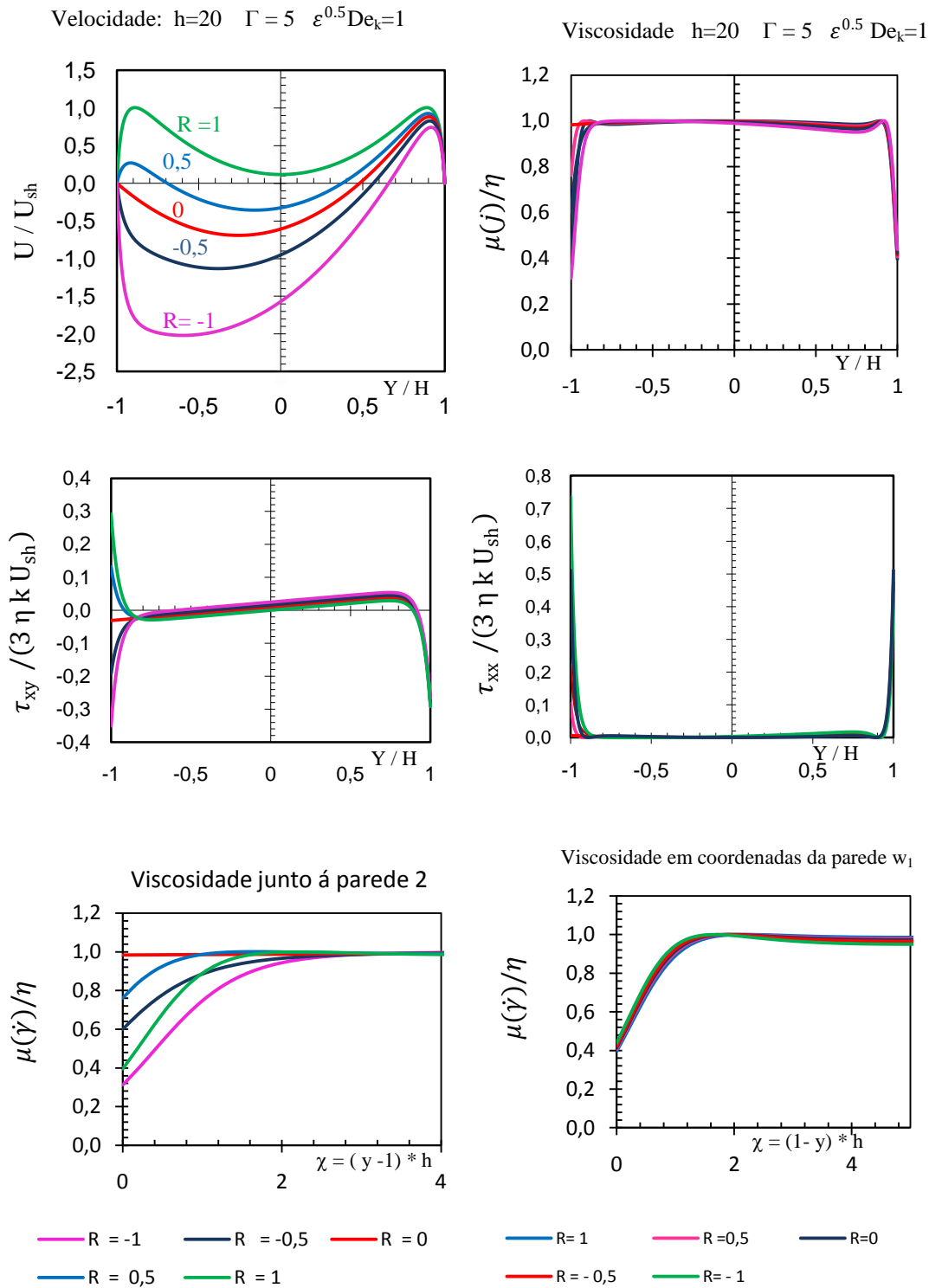


Fig. 28- Gráfico do perfil de velocidades, da viscosidade, das tensões e da viscosidade junto ás paredes w_1 e w_2 , para $h=20 \quad \Gamma=5$ e $\varepsilon^{0.5} De_k=1$ para diversos valores de razão de potencial, R .

Na figura 28 podemos analisar a situação em que as forças de pressão são desfavoráveis, $\Gamma=5$, em que se pode visualizar a evolução dos perfis de velocidade em

que junto à parede 2 o perfil de velocidade evolui no sentido das forças de pressão à medida que a razão de potencial R evolui para $R = -1$.

A situação em que as forças de pressão são favorável $\Gamma = -1$, o caudal é no sentido das forças electro-osmóticas independente da assimetria R , figura 29, mas se as forças são desfavoráveis $\Gamma = -2,5$ o caudal pode inverter o sentido dependendo da evolução da razão de potencial R para valores negativos.

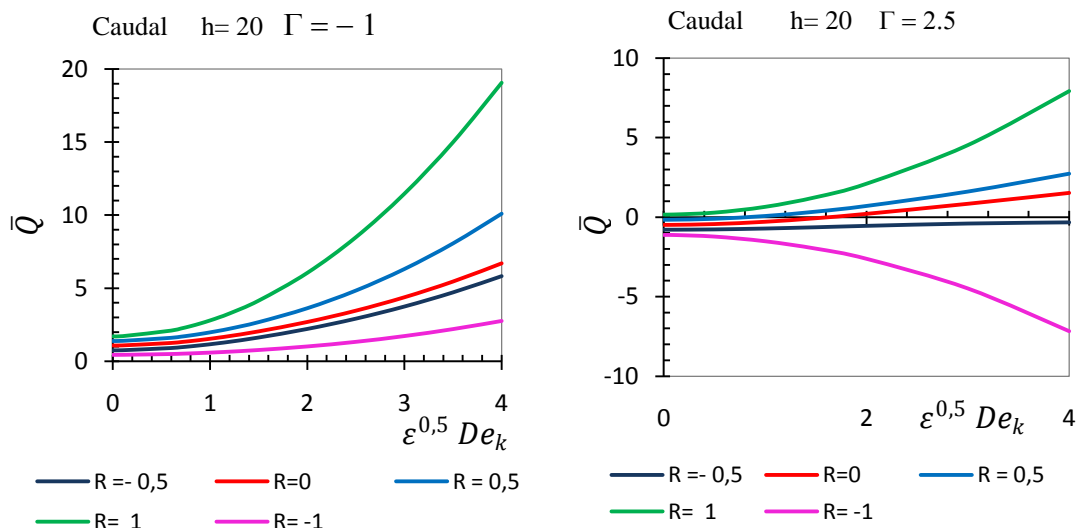


Fig. 29- Representa a variação do caudal em função de $\varepsilon^{0,5} De_k$ para varias razões de assimetria, R e para um rácio de micro canal $h=20$. a) para uma razão de pressão/eletro-osmose favorável $\Gamma = -1$ e b) para $\Gamma = 2,5$, desfavorável.

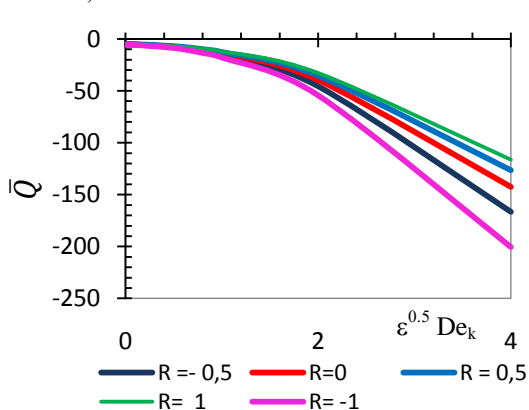


Fig. 20- Caudal para $h=20$ e $\Gamma=25$ em função da razão de potencial R

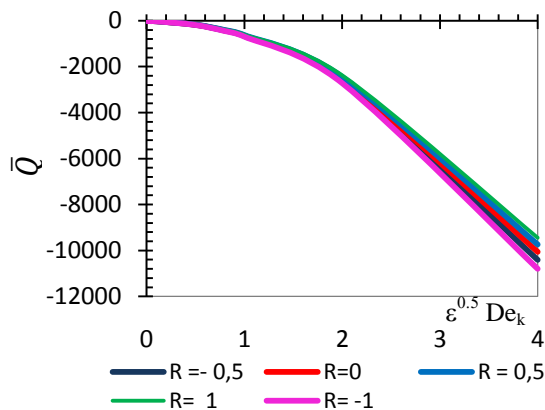


Fig. 21- Caudal para $h=20$ e $\Gamma=100$ em função da razão de potencial R

Quando as forças de pressão dominam o escoamento fig. 30 o escoamento dá-se no sentido das forças de pressão sendo pouco influenciado pela razão de potencial R e se a razão Γ for mais elevada (fig. 21, $\Gamma=100$) o caudal fica praticamente independente de R ou seja da assimetria do potencial zeta.

6- Conclusões

Foram obtidas as soluções analíticas para escoamentos em microcanais para fluidos viscoelásticos sobre a acção combinada de electro-osmose e forças de pressão sendo a dupla camada eléctrica EDL muito fina ou seja com uma espessura máxima de aproximadamente 0,1 de meia altura do micro canal. Os fluidos viscoelásticos utilizados são descritos pelo modelo PTT de Phan-Thien e Tanner (1977).

Na ausência de um gradiente de pressão imposta, o escoamento electro-osmótico apresenta um perfil semelhante ao perfil encontrado para fluidos newtonianos.

As condições de assimetria do potencial das paredes têm uma maior influência no escoamento quando este é dominado pelas forças de electro-osmose. Verifica-se um maior efeito da electro-osmose na parede de maior potencial eléctrico. No caso de potenciais serem contrários, a camada espessa de contra-íões, junto à parede desloca-se em sentidos opostos, influenciando o escoamento.

O escoamento será invertido se as forças de pressão imposta no sentido desfavorável vencerem as forças de electro-osmose, que dependem do potencial da parede sendo que a parede com potencial negativo funciona no sentido desfavorável.

Anexo 1- Fórmulas de compactação e simplificações

No caso de potencial simétrico podem ser usadas as funções sinh e cosh:

$$e^h - e^{-h} = 2 \sinh(h) \quad ; \quad e^{2h} - e^{-2h} = 4 \sinh(h) \cosh(h) \quad [\text{Apostol}(1979)]$$

Para o caso desta tese foram criadas as seguintes formulas de compactação:

$$S_1 = \frac{e^h - R e^{-h}}{e^{2h} - e^{-2h}} \quad S_2 = \frac{R e^h - e^{-h}}{e^{2h} - e^{-2h}} \quad \text{com : } h = k H$$

o uso destas fórmulas de compactação leva a que se verifique as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} S_1 e^h + S_2 e^{-h} &= 1 \\ S_2 e^h + S_1 e^{-h} &= R \\ (S_1 - S_2) (e^h + e^{-h}) &= 1 - R \\ S_2^2 e^{2h} + S_1^2 e^{-2h} &= -2 S_1 S_2 \end{aligned}$$

Fórmulas de compactação usadas nas equações gerais:

$$\begin{aligned} A &= S_1 e^{yh} + S_2 e^{-yh} & E &= S_1 e^h - S_2 e^{-h} \\ B &= S_1 e^{yh} - S_2 e^{-yh} & C &= 4 S_1 S_2 \\ A_3 &= S_1^3 e^{3yh} + S_2^3 e^{-3yh} & E_3 &= S_1^3 e^{3h} + S_2^3 e^{-3h} \end{aligned}$$

verifica-se que não será necessário criar mais formas de compactação visto que :

$$\begin{aligned} S_1^2 e^{2yh} + S_2^2 e^{-2yh} &= A^2 - \frac{C}{2} \\ S_1^2 e^{2h} + S_2^2 e^{-2h} &= 1 - \frac{C}{2} \\ S_1^2 e^{2yh} - S_2^2 e^{-2yh} &= A B \\ S_1^2 e^{2h} - S_2^2 e^{-2h} &= S_1 e^h - S_2 e^{-h} = E \end{aligned}$$

Para o caso simétrico, R=1, as fórmulas anteriores podem ser escritas da seguinte forma:

$$S_1 = S_2 = \frac{e^h - e^{-h}}{e^{2h} - e^{-2h}} = \frac{e^h - e^{-h}}{4 \sinh(h) \cosh(h)} = \frac{1}{2 \cosh(h)}$$

$$A = \frac{\cosh(yh)}{\cosh(h)} \quad ; \quad B = \frac{\sinh(yh)}{\cosh(h)} \quad ; \quad C = \frac{1}{\cosh(h)^2} \quad ; \quad E = \frac{\sinh(h)}{\cosh(h)}$$

Anexo 2- Pontos de velocidade nula, velocidade máxima e velocidade mínima

A determinação da equação da razão entre a pressão/electro-osmose, Γ , para os quais a velocidade se anula num determinado ponto, quando se combina uma situação de eléctro-osmose com pressão externa, fica dependente da resolução da equação cúbica:

$$a_0 + a_1 \Gamma + a_2 \Gamma^2 + \Gamma^3 = 0 \quad (55)$$

Será usada uma mudança de variável, $y = \delta$, deste modo os coeficientes da equação (55) são dados pelas seguintes expressões:

$$a_0 = \frac{4 h^2}{3(\delta^4 - 1)}(-A_3 + E_3) + \frac{(1-A) h^2}{(y^4 - 1)} \left[\frac{1}{\varepsilon D e_k^2} + 6 \left(\frac{C_1^2}{h^2} - \frac{C}{4} \right) \right] + \frac{6 C_1 h}{(\delta^4 - 1)}(B_2 - E) + \left[\left(3 C - \frac{1}{\varepsilon D e_k^2} \right) h^2 - 2 C_1^2 \right] (1 - \delta) C_1$$

$$a_1 = \frac{h^2}{\varepsilon D e_k^2 (\delta^2 + 1)} + \frac{24 C_1}{(\delta^4 - 1)}(-B_{2h} + B_2) + \left[1 - A \delta + \frac{1}{h}(-B - E) \right] + \frac{3}{(\delta^4 - 1)}(-A_2 + B_{2h}) + 6 \frac{h}{(\delta^4 - 1)}(E + B_2 \delta) + \frac{6}{(\delta + 1)} \left(C_1^2 \frac{C}{2} h^2 \right)$$

$$a_2 = \frac{4}{(\delta^4 - 1)}(-3 \delta^2 A + C_1(\delta^3 - 1) + 3) + \frac{24}{h(\delta^4 - 1)} \left(B - E + \frac{1}{h}(1 - A) \right)$$

A taxa que anula a velocidade num dado ponto é dada pelas soluções da eq. (55).de notar que, $\delta = 1$ e $\delta = -1$ serão naturalmente soluções. As soluções são dadas pela equação (anexo 4):

$$\Gamma(\delta) = \frac{(\beta - ar)}{1-r} - \frac{a_2}{3}$$

A velocidade é máxima ou mínima quando a tensão é nula, da equação (41) teremos:

$$\bar{\delta} \frac{\Gamma}{h} - (S_1 e^{\bar{\delta} h} - S_2 e^{-\bar{\delta} h}) + \frac{C_1}{h} = 0 \quad (56)$$

onde $\bar{\delta}$ é o valor de y que anula a tensão. A determinação de $\bar{\delta}$ é iterativa.

A determinação da velocidade máxima e mínima é feita da partir da equação (33) substituindo y por $\bar{\delta}$, do seguinte modo:

$$\begin{aligned}
\frac{U}{U_{sh}} = & \frac{2}{3} \varepsilon De_k^2 [E_3 - A_3 + \frac{9}{2h} C_1 (AB - E)] + (1 - A) \left[1 + 6 \varepsilon De_k^2 \left(\frac{C_1^2}{h^2} - \frac{C}{4} \right) \right] \\
& + \left[\varepsilon De_k^2 \left(3C - \frac{2C_1^2}{h^2} \right) - 1 \right] (1 - \bar{\delta}) C_1 + \frac{1}{2} (\bar{\delta}^2 - 1) \left(1 + \frac{\varepsilon De_k^2}{h^2} (\bar{\delta}^2 + 1) \Gamma^2 \right) \Gamma \\
& + \frac{3}{2h^2} \varepsilon De_k^2 \Gamma [1 - A^2 + (\bar{\delta}^2 - 1)(2C_1^2 - h^2 C) + 2h(AB\bar{\delta} - E)] \\
& + 12 \varepsilon De_k^2 \Gamma \left[\frac{C_1}{h^2} \left(1 - A\bar{\delta} + \frac{1}{h}(B - E) \right) - \Gamma h^{-4} (h(E - B\bar{\delta}) + A - 1 + \right. \\
& \left. \frac{h^2}{2} (A\bar{\delta}^2 - 1) - \frac{1}{6} C_1 h^2 (\bar{\delta}^3 - 1) \right] \tag{57}
\end{aligned}$$

$$A = S_1 e^{\bar{\delta} h} + S_2 e^{-\bar{\delta} h}$$

$$E = S_1 e^h - S_2 e^{-h}$$

$$B = S_2 e^{-\bar{\delta} h} - S_1 e^{\bar{\delta} h}$$

$$C = 4 S_1 S_2$$

$$A_3 = S_1^3 e^{3\bar{\delta} h} + S_2^3 e^{-3\bar{\delta} h}$$

$$E_3 = S_1^3 e^{3h} + S_2^3 e^{-3h}$$

As soluções da equação (57) correspondem á velocidade mínima ou á velocidade máxima. Essa distinção terá que ser feita pela análise do sinal da função nas proximidades do ponto $\bar{\delta}$.

De notar que $\bar{\delta} = 1$ e a $\bar{\delta} = -1$ não poderão ser uma solução visto que corresponde a velocidade nula na parede w_1 e velocidade nula na parede w_2 respectivamente.

Anexo 3 – Determinação do caudal volumétrico adimensional

O caudal médio adimensionalizado (\bar{Q}) é dado pelo integral da velocidade adimensionalizado, entre as duas paredes.

$$\bar{Q} = \frac{Q}{2H U_{sh}} = \int_{-1}^1 \frac{U}{U_{sh}} dy$$

$$\bar{Q} = b_3 \Gamma^3 + b_2 \Gamma^2 + b_1 \Gamma + b_0 \quad (58)$$

$$\begin{aligned} b_0 = \varepsilon De_k^2 \left(\left(\frac{2}{3} (S_1^3 + S_2^3 e^{-3h}) + 6 \left(\frac{C_1^2}{h^2} - S_1 S_2 \right) - \frac{2 C_1^3}{h^2} - \frac{3 C_1 (S_1^2 e^{2h} - S_2^2 e^{-2h})}{h} \right. \right. \\ \left. \left. + 12 C_1 S_1 S_2 - \frac{3 \left((S_1 + S_2) C_1^2 - h^2 S_1 S_2 (S_2 + S_1) (e^h - e^{-h}) \right)}{h^3} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3 C_1 (S_1^2 - S_2^2) (e^{2h} - e^{-3h})}{h^2} + \frac{1 (-S_1^3 - S_2^3) (e^{3h} - e^{-3h})}{9 h} \right) - C_1 + 1 \right. \\ \left. - \frac{1 (S_2 + S_1) (e^h - e^{-h})}{2 h} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_1 = 12 \frac{\varepsilon De_k^2}{h^2} C_1 \left(\frac{1-R}{h^2} + 1 + \frac{1}{2h} (S_2 e^h - S_1 e^{-h}) - \frac{3}{2h} (S_1 e^h - S_2 e^{-h}) \right) \\ + \frac{3}{4} \varepsilon De_k^2 \left(\frac{(S_2^2 + S_1^2) (e^{-2h} - e^{2h})}{h^3} + \frac{3}{h^2} (S_1^2 e^{2h} + S_2^2 e^{-2h}) - \frac{2 S_1 S_2}{h^2} \right. \\ \left. + \frac{4}{h} (S_2^2 e^{-2h} - S_1^2 e^{2h}) \right) - \frac{1}{3} + 4 S_1 S_2 \varepsilon De_k^2 - \frac{2 C_1^2 \varepsilon De_k^2}{h^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_2 = \frac{3 \varepsilon De_k^2}{h^2} \left(2 + \frac{8}{h^2} + \frac{4R}{h^2} - \frac{1}{h} (S_2 e^h - S_1 e^{-h}) - \frac{5}{h} (S_1 e^h - S_2 e^{-h}) - \frac{6}{h^3} (e^h - S_2 e^{-h}) \right. \\ \left. - \frac{6}{h^3} (e^h - e^{-h}) (S_1 + S_2) \right) - \frac{2 \varepsilon De_k^2 C_1}{h^2} \end{aligned}$$

$$b_3 = -\frac{4 \varepsilon De_k^2}{5 h^2}$$

Estas equações permitem calcular o caudal, e os gráficos de caudais.

Permite-nos, ainda determinar os rácios de pressão / eletrosmose, Γ , para os quais o caudal é nulo (estagnação), basta igualar a zero a equação do caudal (eq. 57) e resolver a equação cúbica, cuja solução é dada por: (Anexo4)

$$\Gamma = \frac{(\beta - \alpha r)}{1 - r} - \frac{a_2}{3}$$

atendendo a que, se dividindo a equação (57) por b_3 podemos escrever a equação cúbica na seguinte forma:

$$\Gamma^3 + a_2 \Gamma^2 + a_1 \Gamma + a_0 = 0$$

em que:

$$a_2 = \frac{b_2}{b_3}$$

$$a_1 = \frac{b_1}{b_3}$$

$$a_0 = \frac{b_0}{b_3}$$

Anexo 4- Resolução de uma equação cúbica

$$b_3 C^3 + b_2 C^2 + b_1 C + b_0 = 0$$

Em que C é a nossa incógnita (por exemplo, a constante de integração (C_1) ou (Γ) a razão de tensões/ electro-osmose, deste trabalho

Se dividindo a equação anterior por b_3 , obtemos uma equação na forma:

$$C^3 + a_2 C^2 + a_1 C + a_0 = 0 \quad \text{para } b_3 \neq 0$$

Atendendo á transformada de Möbius, $Y = \frac{a Z+b}{c Z+d}$ onde $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ tais que $a^2 + p a c^2 + q c^3 \neq 0$

$$Y^3 + p Y + q = 0$$

$$D = \det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = a d - b c = -6 S / p$$

Sendo (S) é uma raiz quadrada de $\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3$

1) Algoritmo para determinar a solução de uma equação cúbica se $\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3 \neq 0$

$$p = -\frac{1}{3}a_2^2 + a_1 \quad ; \quad q = a_0 - \frac{1}{3}a_1 a_2 + \frac{2}{27}a_2^3$$

E sendo (r) uma raiz cúbica de $\frac{\alpha}{\beta}$ com α e β dados por

$$\alpha := \frac{\left(-\frac{q}{2} - S\right)}{\frac{p}{3}} \quad ; \quad \beta := \frac{\left(-\frac{q}{2} + S\right)}{\frac{p}{3}}$$

Ou seja :

$$S = \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3} \quad \text{e} \quad r = \sqrt[3]{\frac{\alpha}{\beta}}$$

A solução será dada por: $C = \frac{(\beta - \alpha r)}{1 - r} - \frac{a_2}{3}$ (usada neste trabalho)

2) para $\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3 = 0$ a solução é $C = -\frac{3q}{3p}$ ou $C = +\frac{3q}{3p}$

3) para $p = 0$ a solução são as raízes cúbicas de $-q$

4) Para $b_3 = 0$ a equação é quadrática

5) Para $b_3=0$ e $b_2=0$ a solução é linear $C = -\frac{a_0}{a_1}$ (neste trabalho quando $\varepsilon^{0,5} \text{Dek} = 0$)

Glossário

Microfluídica - é a mecânica dos fluidos aplicada aos escoamentos em dispositivos de dimensões microscópicas

EDL- Camada eléctrica dupla (EDL) do inglês “electric double layer”

Electro-osmose - é o movimento de um líquido através de uma membrana polar ou outra estrutura porosa sob a influência de um campo eléctrico.

Reologia- é o ramo da física que estuda as relações entre as tensões aplicadas a um material fluido e as deformações que elas provocam.

Referências

- Afonso, A.M. ,M.A. Alves & F.T. Pinho - Analytical solution of mixed electro-osmotic/pressure driven flows of viscoelastic fluids in microchannels , *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, (2009)
- Apostol, Tom.M, *Cálculo 1- Ed. Reverté Lda* (1979) 292-295
- Arulanandam,S. D. Li, Liquid transport in rectangular microchannels by electroosmotic pumping, *Colloids Surf. A.* 161 (2000) 29–102.
- Barnes, Howard A. - *A Handbook of elementary Rheology* (2000)
- Bird, R.B. ,P.J. Dotson, N.L. Johnson, Polymer solution rheology based on a finitely extensible bead-spring chain model, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 7 (1980) 213–235.
- Bird, R.B. ,R. C. Armstrong e O. Hassager (1996). *Dynamics Of Polymeric Liquids -Volume 1*, John Wiley & Sons
- Burgreen,D, F.R. Nakache, Electrokinetic flow in ultrafine capillary slits, *J. Phys. Chem.* 68 (1964) 1084–1091.
- Bruus,H,, *Theoretical Microfluidics*, Oxford Master Series in Condensed Matter Physics, Oxford University Press, Oxford, UK, (2008).
- Castro ,Gomes de, A., J. A. Covas e A. c. Diogo (2001). *Reologia e suas aplicações industriais*. Lisboa, Ciência e Técnica. Instituto Piaget.
- Chakraborty, S.,Electroosmotically driven capillary transport of typical non-Newtonian biofluids in rectangular microchannels, *Anal. Chim. Acta* 605 (2007) 175–184
- Cruz, D.O.A. , F.T. Pinho, P.J. Oliveira, Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a Newtonian solvent contribution *Non-Newtonian Fluid Mech.* 132 (2005) 28–35.
- Das, S. Chakraborty, Analytical solutions for velocity, temperature and concentration distribution in electroosmotic microchannel flows of a non Newtonian bio-fluid, *Anal.Chim. Acta* 559 (2006) 15–24
- Dutta, P. , A. Beskok, Analytical solution of combined electroosmotic/pressure driven flows in two-dimensional straight channels: finite Debye layer effects, *Non-Newtonian Fluid Mech.* 132 (2005) 28–35.

- Dutta, P., A. Beskok, Analytical solution of combined electroosmotic/ pressure driven flows in two-dimensional straight channels: finite Debye layer effects, *Anal. Chem.* 73 (2001) 1979–1986.
- Eaber, T.E. *Fluid Dynamics for physicists*, Cambridge University Press (2006) 195-207
- Karniadakis, G., A. Beskok, N. Aluru, *Microflows and nanoflows. Fundamentals and Simulation. Interdisciplinary Applied Mathematics Series*, vol. 29, (2005).
- Kracht, M., E. Kreyesig, E. W. von Tsehirnhaus. His role in early Calculos and his work and impact on Algebra. *His Math* 17 (1990) 16-35
- Oliveira, Paulo J e Fernando T Pinho - Analytical solution for fully developed chanel ande pipe flow of Phan-Thien-Tanner fluids, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 387 (1999) 271–280
- Oliveira, P.J., An exact solution for tube and slit flowof a FENE-P fluid, *Acta Mech.* 158 (2002) 157–167.
- Phan-Thien, N. R. I. Tanner. New constitutive equation derived from network theory . *Non-Newtonian Fluids Mech* 2 (1977) 353-365
- Phan-Thien, N., A non-linear network viscoelastic model, *J. Rheol.* 22 (1978) 259–283
- Rice, C.L., R. Whitehead, Electrokinetic flow in a narrow cylindrical capillary, *J. Phys. Chem.* 69 (1965) 4017–4024. Shurman, J., “Geometry of the Quintic”, John Wiley & Sons, 1997.
- Smoluchowski, M. Von , Versuch Einer mathematischen Theorie der koagulationskinetickolloid Losungen, *Z. Phys. Chem.* 92 (1917) 129–135.
- White, F M *viscous fluids flow*, (1991), McGraw-Hill
- Wang, C., T.N.Wong, C.Yang, K.T.Ooi, Characterization of electro-osmotic flow in rectangular microchannels, *Int. J. Heat Mass Transf.* 50 (2007) 3115–3121.

Agradecimentos

Ao Prof. Fernando Pinho pelo apoio dado.