

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

Helder Filipe da Costa Alves

**Dissertação de Mestrado
Energia Térmica**

Orientador: Professor Fernando Manuel Coutinho Tavares de Pinho



Universidade do Porto
Faculdade de Engenharia

FEUP

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto
Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica

10-2010

Resumo

Este trabalho tem como objectivo principal interpretar os factores intervenientes nas características de um escoamento forçado por gradiente de pressão e electro-osmose de um fluido viscoelástico num microcanal. O modelo do fluido estudado tem como particularidade fundamental, o facto da sua descrição reológica alicerçar-se na combinação de dois modelos distintos: o modelo de Phan-Thien-Tanner para a componente polimérica e o modelo de Newton que descreve o solvente. Esta simples inserção altera de forma substancial a solução final, com o aparecimento do solvente newtoniano a representar um papel crucial no resultado. No entanto, nem sempre o modelo reológico adoptado é o principal factor no desenvolvimento de um escoamento, habitualmente em soluções poliméricas existem interacções entre macromoléculas poliméricas e as superfícies envolventes, que nem sempre podem ser desprezadas e que facilmente se convertem no factor interveniente de maior relevo. Este assunto é abordado neste trabalho como complemento do estudo inicial.

Characteristics of mixed electro-osmotic and pressure driven flow of a viscoelastic fluid with a Newtonian solvent

Abstract

The combined influence of electrokinetic and pressure driven forces in fluid micro-systems have long been a subject of great research and development.

This thesis as the purpose of understanding flow characteristics, surrounding viscoelastic fluids in micro sized ducts, through the study of the interactions between a Newtonian solvent coupled with a polymer contribution described by the Phan-Thien-Tanner (PTT) model.

Most solutions presented in literature tend to neglect the influence of a Newtonian solvent, in a viscoelastic fluid flow. This presence, in more or less weight, has the capability to affect in a considerable manner the shear-thinning effect that characterizes non-Newtonian behavior.

Besides the important complex aspects concerning the fluid characteristics presented above, there are some significant phenomenon related with wall to fluid interactions that have to be addressed. Some of those assume the creation of a skimming layer constituted solely by Newtonian solvent which inevitably affect flow behavior and will be taken in to concern on this study.

Índice de Conteúdos

1	Introdução	1
1.1	Enquadramento e objectivos	1
1.2	Organização da tese	2
2	Estado da Arte.....	3
3	Noções teóricas preliminares	5
3.1	Fluidos newtonianos e não-newtonianos	5
3.2	Tensões normais em escoamentos de corte.....	7
3.3	Viscosidade extensional.....	7
3.4	Efeitos electrocinéticos.....	8
3.5	Aproximação de Debye-Hückel.....	9
3.6	Electro-osmose	9
4	Equações governativas	13
4.1	Condições gerais do problema.....	17
4.2	Equações de transporte	13
4.3	Modelo de fluido newtoniano.....	17
4.4	Modelo Phan-Thien-Tanner	17
4.5	Condições de fronteira	16
4.6	Alteração das condições de fronteira com a introdução de uma camada de escorregamento	17
5	Solução do problema	19
5.1	Análise do problema	19
5.2	Adimensionalização do problema	20
5.3	Solução do problema (1ºcaso)	21
5.4	Método numérico utilizado	22
5.5	Solução do problema com a introdução de uma camada de escorregamento (2ºcaso)	24
6	Discussão	27
6.1	Características do escoamento forçado por electro-osmose pura	27
6.2	Características do escoamento de uma solução polimérica com solvente newtoniano	30
6.3	Influência de uma camada de escorregamento (<i>skimming layer</i>) no escoamento	36
7	Conclusões.....	41
8	Referências	43
ANEXO A:	Solução da equação cúbica	45
ANEXO B:	Detalhes da solução do 2ºcaso	47
ANEXO C:	Componentes da velocidade	51
ANEXO D:	Perfil de viscosidade.....	53

Simbologia utilizada

Simbologia latina

De	Número de Débora
c_0	Concentração iónica (m^3)
e	Carga elementar ($1,6022 \times 10^{-19}C$)
E_x	Componente x do gradiente eléctrico ($V m^{-1}$)
$f(\tau_{kk})$	Função do traço do tensor da tensões do modelo PTT
H	Meia altura do microcanal(m)
k_B	Constante de Boltzman ($1,3807 \times 10^{-23} JK^{-1}$)
l	Comprimento do canal (m)
P	Pressão (Pa)
$P_{,x}$	Gradiente de pressão axial ($Pa m^{-1}$)
t	Tempo (s)
T	Temperatura (K)
u_{sh}	Velocidade de Helmholtz-Smoluchowski ($m s^{-1}$)
w	Largura do canal (m)
x	Direcção do eixo do canal (m)
y	Coordenada transversal (m)
Z	Valência de iões

Vectores e Tensores

D	Tensor da taxa de deformação (s^{-1})
E	Vector campo eléctrico ($V m^{-1}$)
u	Vector velocidade ($m s^{-1}$)
τ	Tensor das tensões desviadoras (Pa)

Simbologia Grega

χ	Variável de proximidade à parede do canal $\{(1 - \bar{y}) \bar{\kappa}\}$
δ_e	Espessura da camada de escorregamento (m)
ε	Parâmetro limitador do modelo PTT
ϵ	Permissividade eléctrica ($F m^{-1}$)
φ	Potencial eléctrico aplicado externamente (V)
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação de corte (s^{-1})
Γ	Razão das forças de pressão sobre as electro-osmóticas
η	Viscosidade total do fluido combinado (Pa s)

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

η_s	Viscosidade do solvente(Pa s)
η_p	Viscosidade da componente poliméric (Pa s)
κ^2	Parâmetro de Debye-Hückel (m^{-2})
λ	Tempo de relaxação (s)
ρ_e	Densidade da carga eléctrica (c/m^3)
$\tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{11}, \tau_{22}, \tau_{33}$	Tensões Normais (Pa)
τ_{xy}	Tensão de Corte (Pa)
τ_{KK}	Traço do tensor das tensões desviatórias (Pa)
ξ	Espessura da dupla camada eléctrica “EDL” (m)
ψ	Campo potencial (V)
ψ_o	Potencial “zeta” na parede $\{\psi_o \equiv \zeta\}$ (V)
Ψ_1	Coefficiente da primeira diferença de tensões normais
Ψ_2	Coefficiente da segunda diferença de tensões normais

Símbolos Matemáticos

∇_A	Derivada convectiva superior do termo A
------------	---

Abreviaturas

EDL	Dupla camada eléctrica (<i>electric double layer</i>)
-----	---

Índice de Figuras

Figura 1: perfis de viscosidade para diferentes óleos de base em silicone demonstrativos do comportamento não newtoniano. 6

Figura 2: comparação entre comportamento viscoso do modelo newtoniano e modelo de Carreau com a exibição de dois patamares de viscosidade de corte (adaptada de [17]). 6

Figura 3: escoamento de Couette plano (adaptado de [17])..... 7

Figura 4: variação da viscosidade extensional com a velocidade de deformação normal $\dot{\epsilon}$ para diferentes fluidos..... 8

Figura 5: estrutura iónica de um fluido em equilíbrio termodinâmico com a exemplificação esquemática da camada de Stern (s) e de Debye (λ_D)..... 9

Figura 6: (a) variação da densidade iónica ao longo do canal; (b) evolução do perfil do campo eléctrico na camada de Debye (λ_D), com indicação específica do potencial zeta na superfície de contacto entre parede e fluido..... 10

Figura 7: representação esquemática do problema em estudo com a indicação de alguns parâmetros mais relevantes. 13

Figura 8: representação esquemática de uma solução polimérica num microcanal. A curva a cheio representa o perfil de densidade específica do fluido em cada camada, a curva a tracejado demonstra a variação do potencial eléctrico e δ_e é o valor da espessura da camada de escorregamento (adaptado de[14])...... 17

Figura 9: (a) perfis de velocidade para um fluido newtoniano sob influência de electro-osmose pura $\Gamma = 0$; (b) perfis de velocidade para um fluido newtoniano (*Newt*) e para uma viscoelástico (*sPTT*) obtidos analiticamente; evolução dos perfis de velocidade obtidos a partir da solução numérica para diferentes valores de β e com $\sqrt{\epsilon}De_k = 2$ 29

Figura 10: perfis de velocidade para diferentes valores de β com $\sqrt{\epsilon}De_k = 2$, $\bar{\kappa} = 20$ (a) $\Gamma = -1$ e (b) $\Gamma = 3$ 30

Figura 11: Perfis de velocidade para diferentes valores do parâmetro agrupado $\sqrt{\epsilon}De_k$ para um fluido com $\beta = 0.5$ e $\Gamma = 0$ 31

Figura 12: perfis das componentes da velocidade para um fluido sPTT para o efeito combinado de pressão e electro-osmose com $\sqrt{\epsilon}De_k = 2$ e $\Gamma = -1$. (a) $\beta = 0.0001$, (b) $\beta = 0.2$, (c) $\beta = 1$ 32

Figura 13: tensão de corte do polímero adimensional em função de β para diferentes valores de $\sqrt{\epsilon}De_k$. (a) $\sqrt{\epsilon}De_k = 3$, (b) $\sqrt{\epsilon}De_k = 0.01$ e $\bar{\kappa} = 20$ 33

Figura 14: tensões normais da componente polimérica para diferentes valores de β com $\sqrt{\epsilon}De_k = 3$ e $\bar{\kappa} = 20$ 34

Figura 15: perfis de viscosidade adimensional para: (a) diferentes valores de β , com $\Gamma = 0$, $\sqrt{\epsilon}De_k = 2$ e $\bar{\kappa} = 20$; (b) diferentes valores de $\sqrt{\epsilon}De_k$ com $\Gamma = 0$, $\beta = 0.5$ e $\bar{\kappa} = 20$ 35

Figura 16: efeito da variação da espessura da camada de escorregamento δ_e para diferentes valores de beta, com $\epsilon Dek = 2$ e $\kappa = 20$: (a) $\delta_e = 50$, (b) $\delta_e = 20$ e (c) $\delta_e = 10$ 36

Figura 17: influência da camada de escorregamento num escoamento com a acção conjunta de forças de pressão e electro-osmose; (a) $\beta = 0.0001$, (b) $\beta = 0.2$, (c) $\beta = 0.4$, (c) $\beta = 1$. Os restantes parâmetros mantêm-se constantes; com $\sqrt{\epsilon}De_k = 10$, $\bar{\kappa} = 20$ e $\bar{\delta}_e = 10$ 37

Figura 18: influência da camada de escorregamento num escoamento com a acção conjunta de forças de pressão e electro-osmose com uma viscosidade do polímero dez vezes superior à do solvente; (a) $\bar{\delta}_e = 20$, (b) $\bar{\delta}_e = 10$, (c) $\bar{\delta}_e = 5$. Os restantes parâmetros mantêm-se constantes entre alíneas com $\sqrt{\varepsilon}De_k = 10$, $\bar{\kappa} = 20$ e $\phi = 10$ 39

1 Introdução

1.1 Enquadramento e objectivos

Nos últimos anos tem havido um desenvolvimento considerável no campo da miniaturização de sistemas para aplicação em diversas áreas, e.g. química, biologia ou biomédica, sendo que a microfluídica tem uma influência muito importante nestas aplicações.

Nos sistemas miniaturizados ocorrem escoamentos em microcanais que por vezes operam sob determinadas condições que em macroescoamentos são desprezáveis mas que aqui se tornam bastante relevantes.

A microfluídica é uma disciplina da hidrodinâmica que estuda a teoria do escoamento de fluidos e suspensões em microsistemas onde ocorrem certas solicitações que à macroescala são desprezáveis. Hoje em dia espera-se muita da microfluídica, existe uma ideia generalizada de que o controlo de escoamentos à escala micrométrica permita a construção de sistemas de elevada complexidade, onde os fluidos podem circular num labirinto de microcanais de forma perfeitamente arquitectada, possibilitando um conjunto vasto de tarefas pré-determinadas.

Este campo de estudo tem ainda muito para ser explorado e é possível receber uma indicação do nível de complexidade que se poderá obter ao observar o que a natureza nos oferece. É admissível que parte do problema está limitado a dificuldades relacionadas com o controlo de escoamentos. Uma das aplicações destes conceitos, mais visível e de rápida expansão, é a tecnologia “Lab-on-a-chip”¹.

Muita da tecnologia desenvolvida pela indústria da microelectrónica, nomeadamente na microfabricação de plataformas de base em silício, está agora a ser implementada no fabrico de sistema “lab-on-a-chip”. O conceito deste tipo de tecnologia está assente nas variadíssimas vantagens associadas à miniaturização de um equipamento laboratorial standard, que evolui de uma escala de centímetros para uma escala de micrómetros ou mesmo manómetros. A vantagem mais óbvia é a redução dramática da quantidade de amostra necessária para uma qualquer análise, outro aspecto relevante é o acréscimo na velocidade de realização das análises, devido à necessidade de volumes de amostra bastante mais reduzidos. Por fim, a diminuição da dimensão deste tipo de sistemas aumenta a sua portabilidade e torna a sua implementação prática, mais fácil e simples. As aplicações “Lab-on-a-chip” têm capacidade para se tornarem no instrumento de análise bioquímica de maior importância na vida moderna, dada a sua praticidade e à expectativa de produção em massa que porventura, permitiria a redução significativa de custos.

A circulação de um fluido por um canal com apenas alguns micrómetros de largura apresenta problemas muito peculiares que intervêm no domínio da hidrodinâmica, com a crescente preponderância de factores como os efeitos de superfície, ou a presença do movimento browniano e mais genericamente um balanço de forças incomum.

¹Dispositivos utilizados para análises químicas e bioquímicas indicados para transportar e manipular quantidades ínfimas de substâncias, possibilitando a sua integração em microsistemas de análise automatizados.

Um conjunto de fenómenos físicos relevante à micro-escala, que à macro-escala é irrelevante, é a electrocinética. Quando fluidos polares são colocados em contacto com superfícies sólidas pode ocorrer espontaneamente a separação de cargas na superfície e no fluido, pelo que os próprios escoamentos, ou as aplicações de campos eléctricos, criam forças electrostáticas que afectam as características do escoamento de uma forma que pode ser significativa. Estes efeitos são designados por efeitos electrocinéticos, sendo aqui de destacar a electro-osmose e quando existem partículas envolvidas, a electroforese.

Esta tese tem como objectivo principal, o estudo das características do escoamento de um fluido viscoelástico accionado por forças geradas por electro-osmose e gradiente de pressão. O modelo reológico adoptado para descrever o fluido viscoelástico é o modelo Phan-Thien-Tanner simplificado (sPTT) com solvente newtoniano, que tem a particularidade de incluir efeitos de memória, de prever uma viscosidade do fluido variável e ainda a existência de tensões normais em escoamentos de corte e onde o coeficiente da primeira diferença de tensões normais varia não linearmente com a velocidade de deformação.

Trabalhos anteriores já deduziram soluções analíticas para um escoamento desenvolvido de fluidos viscoelásticos representados pelo modelo sPTT, mas no entanto, as soluções apresentadas não consideraram uma descrição reológica com solvente newtoniano, sendo a actual descrição mais adequada a soluções diluídas ou semi-diluídas. Assim, nesta tese assume-se que a tensão total do fluido é dada pela soma de uma componente newtoniana para o solvente com uma componente polimérica definida pelo modelo sPTT.

Em soluções de macromoléculas, como é o caso da maiorias das soluções poliméricas, existem efeitos que necessitam ser considerados, devido à maior complexidade relacionada com a interacção de forças entre as superfícies (e.g. paredes de uma canal) e macromoléculas. Como consequência pode haver adsorção de moléculas, ou esvaziamento molecular nas imediações das paredes, o que pode ser bastante influenciável para um escoamento. Um segundo objectivo para esta tese é a análise da influência de uma camada de escorregamento (*skimming layer*), “esvaziada” de macromoléculas, nas características do escoamento determinadas no primeiro objectivo.

1.2 Organização da tese

Em linhas gerais esta tese está dividida em sete capítulos organizados da seguinte forma: no capítulo 2 apresenta-se uma breve revisão bibliográfica de assuntos e conhecimentos que servem de base e ponto de partida para este trabalho, no capítulo 3 faz-se uma exposição de alguns conceitos teóricos mais específicos que sustentam esta tese, no capítulo 4 apresentam-se as equações governativas que descrevem as características do escoamento em estudo, no capítulo 5, as equações governativas são simplificadas e adaptadas às especificidades definidas para o problema para a obtenção de uma solução final e finalmente nos capítulos 6 e 7 apresentam-se a discussão dos resultados produzidos e as conclusões desta tese respectivamente.

2 Estado da Arte

Os escoamentos de Poiseuille estão presentes em inúmeros sistemas de engenharia e por isso não é de surpreender que seja tão importante conhecer as suas características. Para fluidos newtonianos as suas características são bem conhecidas desde o século XIX e a consulta de obras clássicas, como Lamb [1], fornece essas informações.

Para fluidos não newtonianos, o nível de complexidade do modelo é maior e nem sempre é possível encontrar uma solução analítica para as características do escoamento de Poiseuille. Para o modelo Phan-Thien-Tanner existem diferentes soluções analíticas para algumas condições específicas, em condutas planas, circulares ou anelares e para diferentes formulações do modelo fornecidas por Oliveira e Pinho [2]. Estas soluções foram evoluídas seguidamente por Cruz et al [3], onde se combina com o modelo PTT a contribuição de um solvente newtoniano. Convém lembrar que a maioria das soluções analíticas para modelos viscoelásticos, assume que a contribuição da viscosidade do solvente é insignificante. O presente trabalho visa a obtenção de uma solução para um problema que envolve o modelo PTT mas onde a viscosidade do solvente é finita e não desprezável.

Uma vez que a relação entre a superfície e o volume de uma conduta é inversamente proporcional à dimensão, o impacto das forças de superfície nas características de um escoamento aumenta à medida que a escala do escoamento diminui. Os efeitos capilar e electrocinético podem assim, tornar-se dominantes em escoamentos em microcanais [4].

A electro-osmose é um fenómeno electrocinético descrito inicialmente por Reuss [5] em 1809, a partir de experiências realizadas com argila porosa. Mais tarde, Wiedemann [6] e Quincke [7] desenvolveram extensivos estudos experimentais sobre a mesma matéria, com Quincke a sugerir a existência do efeito electrocinético “streaming potential” entre a parede e o fluido, que pode ser caracterizado como o contrário da electro-osmose. Em 1879 Helmholtz [8] desenvolveu a teoria da dupla camada eléctrica “EDL” que relaciona os parâmetros associados a um escoamento, com parâmetros eléctricos para descrever um escoamento electrocinético e seguidamente, nos primeiros anos do século XX, von Smoluchowski [9] particulariza a análise para o caso que envolve uma espessura de EDL muito mais pequena que a largura do canal.

Para fluidos newtonianos existem modelos rigorosos de escoamentos forçados por electro-osmose em microcanais. Bugreen e Nakache [10] estudaram o efeito da electro-osmose com a imposição da aproximação de Debye-Hückel na distribuição do potencial eléctrico. Dutta e Beskok [11] obtiveram a solução analítica para um escoamento forçado pela combinação de gradiente de pressão e electro-osmose num canal bidimensional, admitindo uma espessura da dupla camada eléctrica “EDL” bastante reduzida, cerca de 2 a 3 ordens de grandeza inferior à largura do canal.

O estudo da electro-osmose em fluidos não-newtonianos está sempre associado a dificuldades de análise de escoamentos, dada a normal complexidade das equações constitutivas. A maioria dos trabalhos está limitada a modelos de fluidos inelásticos mais simples, como o modelo de lei de potência, com os trabalhos apresentados por Das e Chakraborty [12] e Chakraborty [13] que mais recentemente foram adaptados a fluidos viscoelástico por Afonso et al [4]

Em soluções compostas por macromoléculas existem alguns efeitos, tais como adsorção molecular ou o esvaziamento molecular, criados pela interacção entre a parede e o escoamento que necessitam ser contabilizados. Estas interacções são descritas por Olivares et al [14].

O escoamento electro-osmótico de um fluido não newtoniano, com o desenvolvimento de uma camada de escorregamento periférica de características newtonianas, foi previamente estudado por Berli e Olivares [15] e mais tarde adaptada a um fluido sPTT por Sousa et al [16] numa extensão do trabalho de Afonso et al [4]. O trabalho produzido por Berli e Olivares [15] explica a influência do esvaziamento molecular (junto à parede de um microcanal), nas características dinâmicas do escoamento de um fluido. Também sugere que a existência de um comportamento não-newtoniano implica a presença de entidades discretas com varias dezenas de nanómetros, e.g. macromoléculas. Por sua vez, a presença dessas entidades favorece a criação de uma camada de vazio macromolecular na proximidade das superfícies do canal, com uma espessura da mesma ordem de grandeza que o raio de giração das macromoléculas envolvidas.

Sousa et al [16] também admite a presença de uma região esvaziada de macromoléculas próxima da parede que apresenta uma reologia com características newtonianas, mas considera que fora desta camada a descrição reológica do fluido é meramente polimérica. Esta camada esvaziada de moléculas, também designada como camada de escorregamento, é presumivelmente mais espessa que a camada EDL, com o efeito de electro-osmose a actuar essencialmente dentro da zona de escorregamento, que é de facto o aspecto mais relevante associado ao esvaziamento molecular. Convém salientar que a viscosidade do fluido da camada de escorregamento é previsivelmente mais baixa que a do resto do volume, o que produz o aparente escorregamento hidrodinâmico, fenómeno normalmente observado em soluções poliméricas.

Torna-se claro desta revisão que não é ainda conhecida a solução do escoamento por acção de forças de pressão e electro-osmose, de fluidos elásticos descritos por modelos constitutivos que incorporam simultaneamente um comportamento viscoso reofluidificante, com patamares newtonianos a baixos e a elevadas velocidades de deformação, efeitos de tensão normal e memória. Isto pode conseguir-se modelando fluidos, como sendo constituídos pela soma de uma contribuição polimérica descrita pelo modelo PTT e uma contribuição linear típica de um solvente newtoniano.

3 Noções teóricas preliminares

3.1 Fluidos newtonianos e não-newtonianos

Quando se fala de fluidos de um modo geral a maioria das pessoas associa-os a exemplos de fluidos comuns, como o ar ou a água que apresentam características newtonianas. É incontestável que estes representam mais de 99% dos fluidos na biosfera, para além da sua frequente presença na indústria e na nossa vida diária [17].

Por definição, um fluido newtoniano é um fluido líquido ou gasoso cuja viscosidade varia com a pressão e temperatura mas não com a taxa de deformação ou com o tempo. Este tipo de fluido também não apresenta quaisquer propriedades elásticas ou anomalias extensionais. É claro, que tudo isto não passa de uma idealização mas ainda assim é uma aproximação muito válida para as condições normais de utilização [18].

A viscosidade é uma propriedade de um líquido que descreve a sua resistência ao escoamento. Formalmente define-se como o coeficiente entre a tensão de corte e a velocidade de deformação de corte, num escoamento de corte em regime permanente, desta forma, um líquido com elevada viscosidade flui mais lentamente que um fluido que apresenta viscosidade mais baixa.

Muitos fluidos demonstram um comportamento newtoniano para uma ampla gama de taxas de deformação $\dot{\gamma}$, ao passo que muitos outros apresentam o mesmo comportamento mas para uma faixa mais restrita.

A viscosidade da maioria dos líquidos diminui com a temperatura devido ao aumento do movimento browniano inter-molecular e geralmente, quanto maior a viscosidade maior é o decremento efectivo com a subida de temperatura, e.g., enquanto a viscosidade da água reduz cerca de 3% por cada °C à temperatura ambiente, os óleos de motor diminuem cerca de 5%/°C e em betumes é normal reduzir 15% ou até mais [18].

O efeito da pressão na viscosidade é bastante contido, quando a pressão se eleva a viscosidade tenderá indubitavelmente a subir e sempre com incrementos muito suaves, facilmente observável em situações normais do dia-a-dia. Uma excepção muito importante, para a aparente insignificância da relação entre as variações de pressão e viscosidade, é o caso da interacção entre um par de engrenagens onde a pressão atinge valores muito elevados nos pontos de contacto, durante espaços de tempo muito curtos. Neste caso a viscosidade de um qualquer óleo de lubrificação de engrenagens, normalmente bastante baixa, aumenta de forma exponencial atingindo valores próximos da viscosidade do betume à pressão atmosférica.

Muitos líquidos assumem um comportamento não newtoniano a partir de determinada taxa de deformação ($\dot{\gamma}$), mas na maioria desses fluidos isso é apenas notório para valores bastante elevados de $\dot{\gamma}$. A figura seguinte é exemplificativa desse facto, onde é mostrada a evolução da viscosidade de diversos óleos de silicone, com características newtonianas padrão em relação à taxa de deformação. Nota-se que para valores mais elevados de viscosidade, o fluido torna-se não-newtoniano para uma taxa de deformação cada vez mais baixa [18].

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

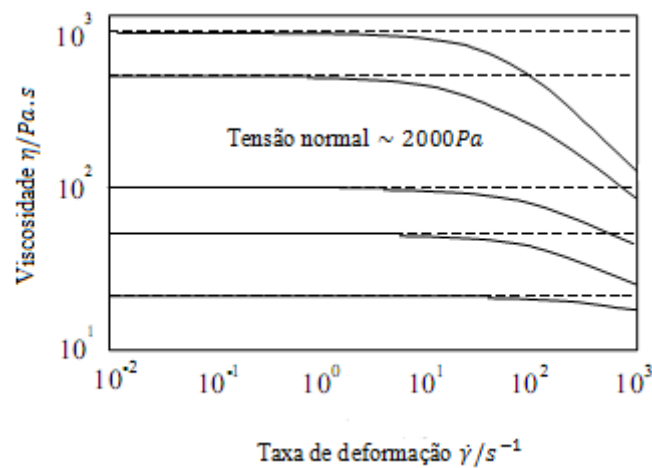


Figura 1: perfis de viscosidade para diferentes óleos de base em silicone demonstrativos do comportamento não newtoniano (adaptada de [18]).

Os fluidos mais comuns, no que diz respeito à viscosidade de corte, apresentam um comportamento reofluidificante² como demonstrado na figura seguinte, onde podem ser observados dois patamares de viscosidade constante bem distintos.

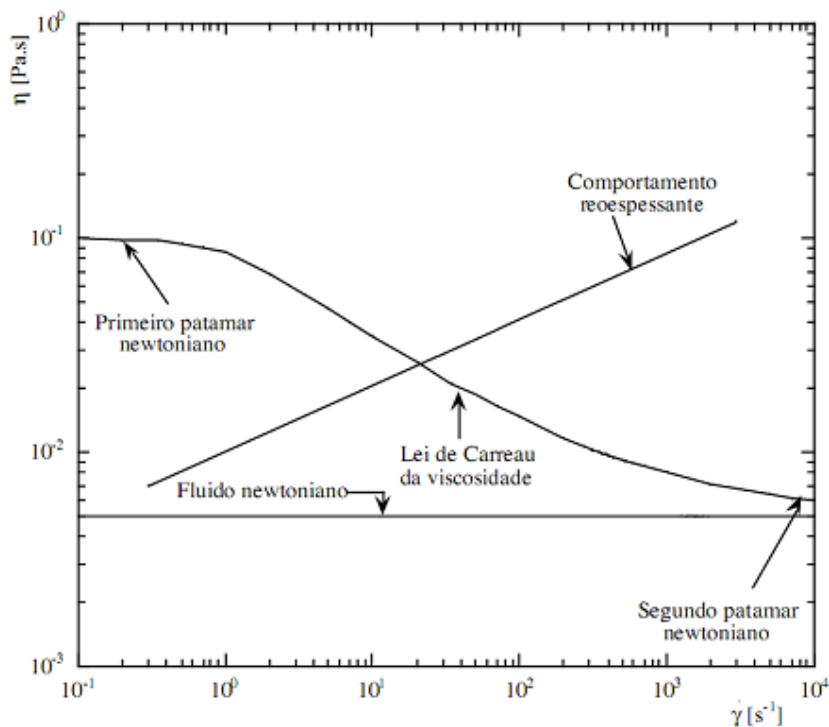


Figura 2: comparação entre comportamento viscoso do modelo newtoniano e modelo de Carreau com a exibição de dois patamares de viscosidade de corte (adaptada de [17]).

² Descreve a existência de um patamar de viscosidade constante e elevada para baixas taxas de deformação $\dot{\gamma}$ e um segundo patamar de viscosidade constante, neste caso inferior, para taxas de deformação mais altas.

3.2 Tensões normais em escoamentos de corte

Um certo número de efeitos importantes que normalmente acontecem em escoamentos de líquidos poliméricos podem ser atribuídos ao facto da tensão normal poder variar em escoamentos de corte, o que não acontece com fluidos newtonianos.

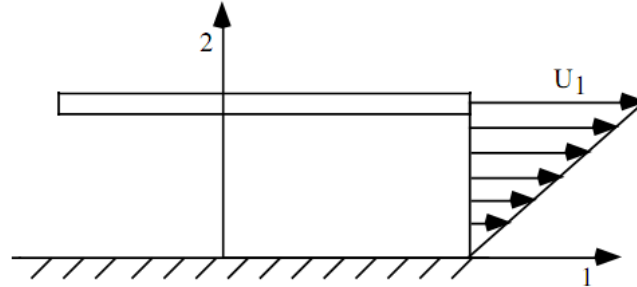


Figura 3: escoamento de Couette plano (adaptado de [17]).

Considere-se um fluido viscoelástico num escoamento de Couette a mover-se numa direcção “1”, com a velocidade a variar apenas segundo uma direcção “2” perpendicular ao escoamento e finalmente com a terceira direcção (normal) “3” a manter-se neutra. Se o fluido for elástico vão desenvolver-se tensões normais. Estas definem uma primeira diferença de tensões, N_1 , que tende a afastar as duas superfícies e está na origem de uma propriedade denominada, coeficiente da primeira diferença de tensões normais Ψ_1 .

$$\Psi_1 = \frac{N_1}{\dot{\gamma}^2} \equiv \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\dot{\gamma}^2} \quad (3.1)$$

O segundo coeficiente da diferença de tensões normais Ψ_2 é dado pelas restantes componentes da tensão normal, que assume normalmente valores muito baixos e de sinal oposto a N_1 , na ordem dos 2% de N_1 .

$$\Psi_2 = \frac{N_2}{\dot{\gamma}^2} \equiv \frac{\tau_{22} - \tau_{33}}{\dot{\gamma}^2} \quad (3.2)$$

Nos fluidos newtonianos as diferenças de tensão são exactamente zero para este tipo de escoamento, ao passo que para fluidos poliméricos, a primeira diferença é praticamente sempre negativa e numericamente muito superior à segunda diferença de tensões. Isto significa que nos escoamentos de corte com fluidos viscoelástico, para além da tensão de corte é necessário adicionar uma tensão extra na direcção do escoamento, que é responsável por alguns efeitos peculiares, que de outra forma ficariam sem explicação, como o efeito de Weissenberg. Esta tensão extra está relacionada com a deformação e interacção entre as moléculas poliméricas induzida pelas movimentações térmicas [19].

3.3 Viscosidade extensional

Em qualquer composição líquida existe uma condição natural de relaxamento da microestrutura que representa o estado mínimo de conservação energética. Tal como numa mola que após estendida tende sempre para a sua posição relaxada inicial, num fluido o conceito mantém-se, i.e., sempre que existe uma deformação da estrutura líquida criam-se

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

forças termodinâmicas internas que procuram que o material regresse a um estado de equilíbrio inicial. Este tipo de interacção energética está na origem do conceito de elasticidade entrópica numa estrutura líquida [20].

Se sujeitarmos uma amostra de fluido a um escoamento uniaxial extensional, e.g. como o que se verifica num ensaio de tracção, o quociente entre a diferença de tensões normais e a velocidade de deformação normal fornece-nos a viscosidade extensional ou elongacional η_E .

$$\eta_E = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\dot{\epsilon}} \quad (3.3)$$

Todos os fluidos possuem uma viscosidade extensional que no caso de um fluido newtoniano é igual a três vezes a viscosidade de corte ($\eta_E/\eta = 3$). Aquilo que caracteriza inúmeros fluidos viscoelástico é o facto desta razão de viscosidades poder exceder amplamente o valor 3, assinalado atrás.

Numa descrição mais completa da mecânica da deformação sabe-se que inicialmente, as tensões associadas à recuperação do estado inicial aumentam linearmente com a deformação, mas para deformações elevadas o comportamento torna-se não-linear. A figura 4 ilustra o comportamento típico da viscosidade extensional de alguns fluidos viscoelásticos.

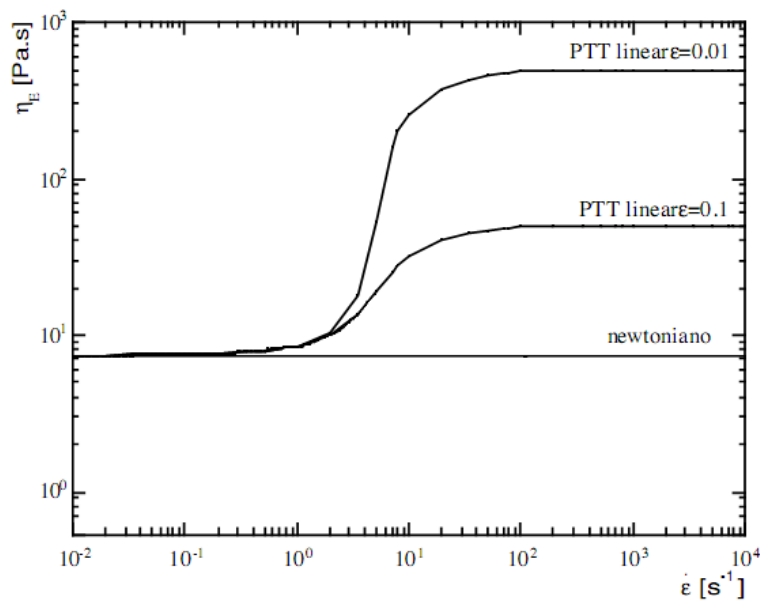


Figura 4: variação da viscosidade extensional com a velocidade de deformação normal $\dot{\epsilon}$ para diferentes fluidos (adaptado de [17]).

3.4 Efeitos electrocinéticos

Em muitas aplicações “lab-on-a-chip”, o movimento interno dos micro-fluidos é controlado electricamente. Existem diversos fenómenos electrocinéticos de grande utilidade para o accionamento de escoamentos, com a electro-osmose a assumir um papel muito relevante.

A camada de Debye

Quando um fluido electrolito (solução aquosa de iões) entra em contacto com uma superfície sólida, como por exemplo as paredes de um microcanal por onde o fluido se escoar, existe uma movimentação de cargas em cada um dos meios que depende apenas da composição química do sólido e do líquido. Assim, o meio líquido tende a acumular uma carga eléctrica com um sinal contrário ao meio sólido adjacente, nas imediações da interface. No entanto, o resto do fluido em escoamento mantém na sua globalidade uma carga neutra. O processo físico é bastante simples, os iões existentes no fluido com carga contrária (contra-iões) são atraídos pelas paredes enquanto os iões de carga idêntica (co-iões) são repelidos. O resultado deste fenómeno é a geração de um potencial eléctrico na interface entre o meio sólido e líquido.

“EDL”

O processo descrito anteriormente provoca a formação de uma dupla camada eléctrica *EDL* (da terminologia inglesa “electric double layer”) junto à superfície de cada uma das paredes do canal, dada pelo trabalho teórico produzido por Helmholtz [8]. A figura 5 mostra essencialmente a configuração assumida pelos iões ao longo de metade da largura do canal. É visível uma primeira camada de iões imóveis (designada por camada de *Stern*), dispostos ao longo da superfície do canal. Imediatamente a seguir existe uma segunda camada de iões que é difusa, i.e., os iões podem movimentar-se com predominância de contra-iões, que delimita a espessura de *Debye* λ_D .

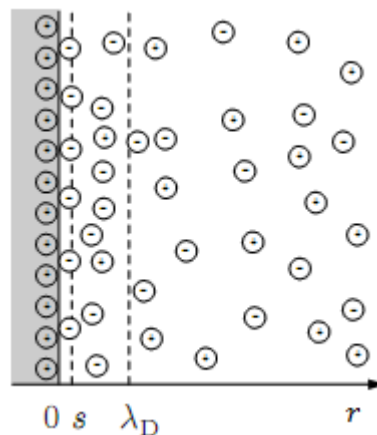


Figura 5: estrutura iónica de um fluido em equilíbrio termodinâmico com a exemplificação esquemática da camada de *Stern* (s) e de *Debye* (λ_D) (adaptado de [21]).

A expressão termodinâmica seguinte descreve a relação entre o potencial químico $\mu_{\pm}(r)$ e a concentração iónica $c_{\pm}(r)$ num meio e ajuda a compreender o comportamento electroquímico neste estudo.

$$\mu_{\pm}(r) = \mu_0 + k_B T \ln \left(\frac{c_{\pm}(r)}{c_0} \right) \mp Z e \psi(r) \quad (3.4)$$

Os parâmetros μ_0 e c_0 representam o potencial químico e a densidade iónica respectivamente, quando o potencial eléctrico é nulo.

Admitindo que existe equilíbrio termodinâmico no meio envolvente, o potencial químico é assumido constante por todo o sistema.

Assim, com $\mu_{\pm}(r) = const \Rightarrow \nabla\mu_{\pm}(r) = 0$

A expressão simplifica bastante substituindo o gradiente $\nabla\mu_{\pm}(r) = 0$ na equação anterior diferenciada, que se pode apresentar da seguinte forma:

$$k_B T \nabla \ln \left(\frac{c_{\pm}(r)}{c_0} \right) = \mp Z e \nabla \psi(r) \quad (3.5)$$

Esta equação mostra que há medida que nos afastamos da superfície, as concentrações iónicas aproximam-se do valor de equilíbrio c_0 e o potencial eléctrico anula-se (ver figura 6). A superfície sólida adquire um valor de potencial eléctrico constante que é conhecido na literatura como potencial zeta (ζ).

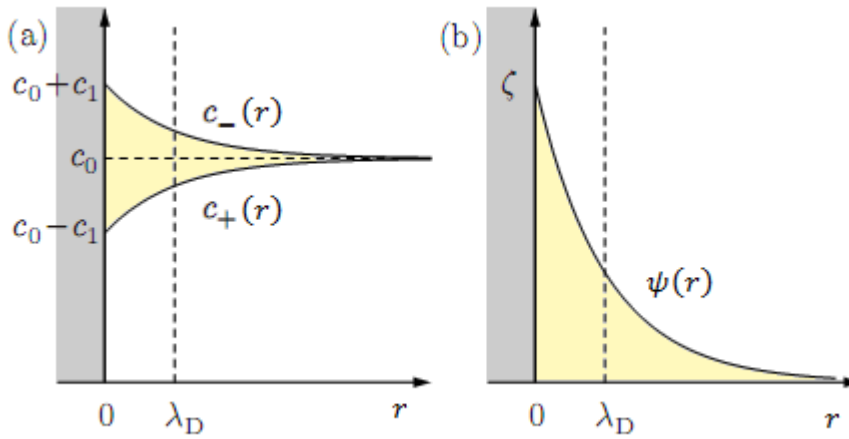


Figura 6: (a) variação da densidade iónica ao longo da largura do canal; (b) evolução do perfil do campo eléctrico na camada de Debye (λ_D), com indicação específica do potencial zeta na superfície de contacto entre parede e fluido.

Considerando as seguintes condições de fronteira:

$$c_{\pm}(\infty) = c_0, \quad \psi(\infty) = 0, \quad \psi(\text{superfície}) = \zeta.$$

É possível estabelecer após integração da equação (3.4) a expressão seguinte:

$$c_{\pm}(r) = c_0 \exp \left[\mp \frac{Z e}{k_B T} \psi(r) \right] \quad (3.6)$$

Sendo a densidade da carga eléctrica ρ_e para electrólitos simétricos ($z-z$) definida como:

$$\rho_e = Z e [c_+(r) - c_-(r)] \quad (3.7)$$

A substituição da equação (3.6) na expressão (3.7) e o recurso a funções hiperbólicas, com o $\sinh = (e^x - e^{-x}/2)$, permite obter a seguinte equação para a densidade eléctrica ρ_e :

$$\rho_e = -2Z e c_0 \sinh \left[\frac{Z e}{k_B T} \psi(r) \right] \quad (3.8)$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

Finalmente, substituindo ρ_e definido anteriormente na equação de Poisson obtém-se uma equação diferencial do potencial eléctrico denominada, equação de Poisson-Boltzman:

$$\nabla^2 \psi(r) = 2 \frac{Zec_0}{\epsilon} \sinh \left[\frac{Ze}{k_B T} \psi(r) \right] \quad (3.9)$$

Esta equação pode ser resolvida numericamente e em alguns casos apresenta solução analítica como no caso da solução de Gouy-Chapman.

3.5 Aproximação de Debye-Hückel

Se a energia eléctrica for pequena quando comparada com a energia térmica, i.e., para $Ze \zeta \ll k_B T$, podemos simplificar a equação (3.9). No caso de soluções aquosas como acontece quando o potencial na parede (ζ) é inferior a cerca de 26 mV à temperatura ambiente, pois a expansão de série de Taylor do seno hiperbólico mostra que $\sinh(u) \approx u$. Daqui surge a equação diferencial final simplificada eq. (3.9) onde se utiliza também a definição de espessura de Debye [22].

$$\nabla^2 \psi(r) = 2 \frac{(Ze)^2 c_0}{\epsilon k_B T} \psi(r) \equiv \frac{1}{(\lambda_D)^2} \psi(r) \quad (3.10)$$

Assumindo que o potencial eléctrico anula quando r tende para infinito, como se pode ver na figura 6 (b). A solução da equação anterior pode ser dada da seguinte forma:

$$\psi(r) = \zeta e^{-k r} \quad (3.11)$$

Com $k = 1/\lambda_D$, termo de simplificação normalmente relacionado com a espessura da camada de Debye.

3.6 Electro-osmose

A electro-osmose foi inicialmente demonstrada, via experimental, por Reuss [5] e pode ser descrita como um fenómeno electrocinético, onde um escoamento de um fluido electrólito num microcanal é induzido por um campo eléctrico E aplicado externamente entre a admissão e a saída. As camadas de iões formadas junto à parede, descritas anteriormente, movem-se sob acção de um campo eléctrico e arrastam por efeito viscoso o núcleo de fluido com carga neutra, como um conjunto sólido. Este efeito pode ser usado como mecanismo de bombagem de electrólitos (substâncias ionizadas) em microsistemas. Embora não seja completamente viável para o accionamento de macroescoamentos, devido às baixas velocidades geradas, em escoamentos de sistemas miniaturizados torna-se uma opção muito válida, já que uma das vantagens da electro-osmose é a habilidade de movimentar fluidos com uma velocidade que apresenta um perfil praticamente constante e homogéneo por toda a largura do canal, aliado também à facilidade de miniaturização de sistemas eléctricos acoplados dos circuitos de microfluídica.

4 Equações governativas

4.1 Condições gerais do problema

Pretende-se estudar as características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de um fluido sintético, descrito por um modelo que soma uma contribuição polimérica τ_p descrita pela equação sPTT com uma contribuição newtoniana τ_s , i.e., a tensão total é obtida da seguinte forma: $\tau = \tau_p + \tau_s$

De forma a diminuir o nível de complexidade e aumentar a relevância dos parâmetros em estudo, a figura (7) descreve em linhas gerais a geometria do problema. O canal rectilíneo de comprimento l , tem uma altura entre paredes $2H$ e largura w (medida no plano perpendicular ao esquema da figura) com dimensão muito superior, tal que $w \gg H$.

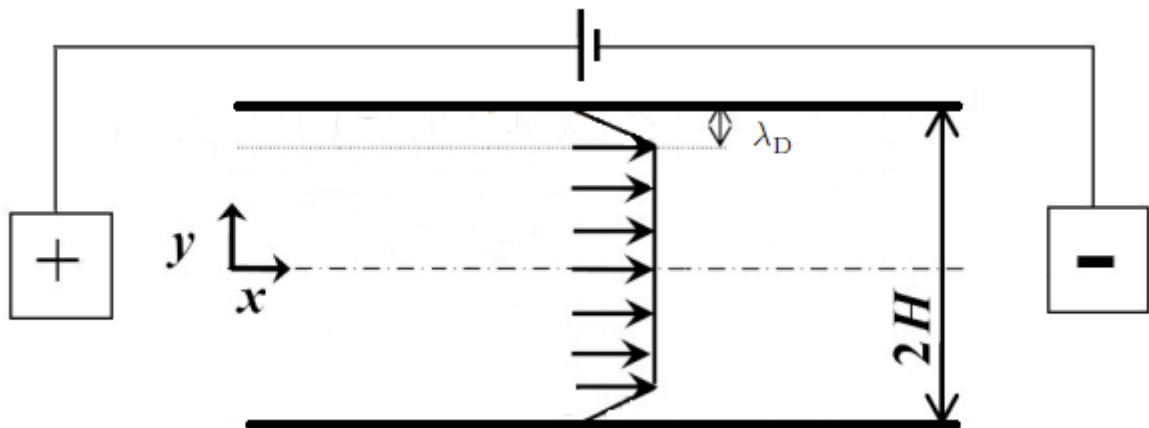


Figura 7: representação esquemática do problema em estudo com a indicação de alguns parâmetros mais relevantes.

4.2 Equações de transporte

Neste trabalho considera-se um escoamento laminar perfeitamente desenvolvido de um fluido incompressível. A direcção do escoamento está predefinida da esquerda para a direita, mas com a possibilidade de inversão caso a polaridade dos terminais colocados nas extremidades do canal seja invertida, i.e., a solução é perfeitamente geométrica. Assim a equação da conservação da massa pode ser simplificada da seguinte forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.1)$$

Na equação de Cauchy modificada considera-se um escoamento descrito pela combinação das duas tensões mencionadas ($\tau_p + \tau_s$) e forçado por gradientes de pressão (∇P) e força electrostática ($\rho_e E$).

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla P + \nabla \tau_s + \nabla \tau_p + \rho_e E \quad (4.2)$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

Onde u representa o vector velocidade, ρ a massa volúmica do fluido τ_s e τ_p que representam o tensor das tensões associadas a forças viscosas produzidas em cada partícula de fluido do solvente newtoniano e da componente polimérica respectivamente.

Admitindo um escoamento perfeitamente desenvolvido, a derivada material da velocidade anula-se.

$$\rho \frac{Du}{Dt} = 0 \quad (4.3)$$

Assim, a equação (4.2) escrita em notação indicial simplifica para:

$$0 = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ik,solvente}}{\partial x_k} + \frac{\partial \tau_{ik,polimero}}{\partial x_k} + \rho_e E_i \quad (4.4)$$

A equação anterior iguala o gradiente da tensão total do fluido ao somatório do gradiente de pressões com a contribuição da força electrostática sobre as cargas iónicas.

A determinação das tensões das contribuições do solvente newtoniano e polímero é o assunto tratado nas próximas secções.

4.3 Modelo de fluido newtoniano

Um fluido de Newton não apresenta qualquer tipo de memória e tem uma viscosidade constante, excepto no que diz respeito ao efeito da temperatura e pressão. As suas propriedades não têm qualquer tipo de dependência do tempo ou de estados de deformação anteriores à tensão desviatória. Assim, o fluido newtoniano obedece à seguinte relação linear:

$$\tau_{ij} = 2\eta S_{ij} + \lambda' \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (4.5)$$

onde parâmetro η representa a viscosidade do fluido que é constante e o S_{ij} é o tensor velocidade de deformação que se define como:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (4.6)$$

Como este fluido é incompressível é irrelevante o valor do coeficiente λ' , que está relacionado com a expansão volumétrica (ou dilatação do fluido) [17]. Esta simplificação modifica a equação anterior, reduzindo-a da seguinte forma:

$$\tau_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (4.7)$$

4.4 Modelo Phan-Thien-Tanner

Para descrever o comportamento da contribuição polimérica adoptou-se a forma simplificada do modelo Phan-Thien-Tanner (sPTT). Na sua forma completa o modelo Phan-Thien-Tanner é descrito pela equação:

$$\begin{aligned} f(\tau_{kk})\tau_{ij} + \lambda \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \xi (\tau_{ik} D_{jk} + \tau_{jk} D_{ik}) \right) \\ = \eta_p \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde aparecem quatro parâmetros: ε , ξ , λ , η_p . Sendo que ε é introduzido através da função exponencial do traço do tensor das tensões $f(\tau_{kk})$ dada por:

$$f(\tau_{kk}) = \exp\left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \tau_{kk}\right) \quad (4.9)$$

Neste trabalho considera-se a forma linearizada da função $f(\tau_{kk})$ com a seguinte configuração:

$$f(\tau_{kk}) = 1 + \frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \tau_{kk} \quad (4.10)$$

Neste modelo, ε é um parâmetro que limita a viscosidade extensional, ξ é um parâmetro que contabiliza o deslizamento da rede molecular em relação ao meio contínuo, λ é tempo de relaxação do fluido visco-elástico e η_p é o respectivo coeficiente de viscosidade.

O modelo Phan-Thien-Tanner caracteriza-se por prever tensões normais transversais (τ_{yy}) num escoamento de corte, do qual resulta uma segunda diferença de tensões normais N_2 ($N_2 = \tau_{yy} - \tau_{zz}$).

A versão simplificada do modelo Phan-Thien-Tanner, com denominação sPTT (simplificado), obtém-se impondo $\xi = 0$ como demonstrado na equação seguinte na forma reduzida.

$$f(\tau_{kk})\tau_{ij} + \lambda \overset{\nabla}{\tau}_{ij} = \eta_p \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (4.11)$$

A derivada convectiva superior (ou derivada de Oldroyd) é definida da seguinte forma:

$$\overset{\nabla}{\tau}_{ij} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \quad (4.12)$$

O modelo Phan-Thien-Tanner simplificado apresenta $\tau_{yy} = 0$ e $N_2 = 0$. Embora reologicamente aparente ser mais complexo que os modelos de Maxwell convectivo e Oldroyd-B, a sua solução não apresenta grandes problemas do ponto de vista numérico. Como este modelo reológico prevê o comportamento reofluidificante da viscosidade de corte e sobretudo não apresenta singularidades tende a comportar-se melhor numericamente.

4.5 Condições de fronteira

Dada a simetria do canal, o estudo pode ser feito para metade da largura ($0 \leq y \leq H$). Como o escoamento é perfeitamente desenvolvido, a velocidade e as tensões apenas dependem da coordenada transversal (y). Na parede ($y = H$) assume-se a condição de não escorregamento e no eixo do canal ($y = 0$), dada a condição de simetria da velocidade do escoamento e de anti-simetria das tensões de corte assume-se $\tau_{xy} = 0$.

Admite-se que a distribuição da carga iónica é constante ao longo do canal e a espessura das camadas eléctricas (*EDL*) é bastante reduzida quando comparada com a largura do canal. Considera-se que o campo eléctrico aplicado é de pequena magnitude não influenciando por isso, a distribuição longitudinal de cargas iónicas. Estas são as bases da teoria electrocinética padrão e isso significa que a distribuição das cargas é essencialmente independente do campo eléctrico externo e é determinado apenas pelo potencial eléctrico na parede (ζ).

A equação obtida anteriormente, $\psi(y) = \psi_o e^{-k y}$ pode ser adaptada à geometria do canal passando a ser escrita da seguinte forma:

$$\psi(r) = \psi_o \frac{\cosh(k y)}{\cosh(k H)} \quad (4.13)$$

Finalmente, a densidade eléctrica dada pela equação (3.8) em conjunto com a equação anterior pode ser novamente deduzida numa expressão com uma forma bastante mais simplificada:

$$\rho_e = -\epsilon k^2 \psi_o \frac{\cosh(k y)}{\cosh(k H)} \quad (4.14)$$

4.6 Alteração das condições de fronteira com a introdução de uma camada de escorregamento (*skimming layer*)

A influência de uma camada de escorregamento (*skimming layer*) no escoamento, com as características especificadas anteriormente obriga a uma ligeira reformulação do problema. A figura 8 demonstra esquematicamente as características assumidas para o escoamento em estudo. Sem qualquer alteração da geometria definida anteriormente, com a adição de apenas um novo parâmetro δ_e que especifica a espessura de uma camada que se assume estar desprovida de macromoléculas de polímero e que se comporta essencialmente como um fluido newtoniano.

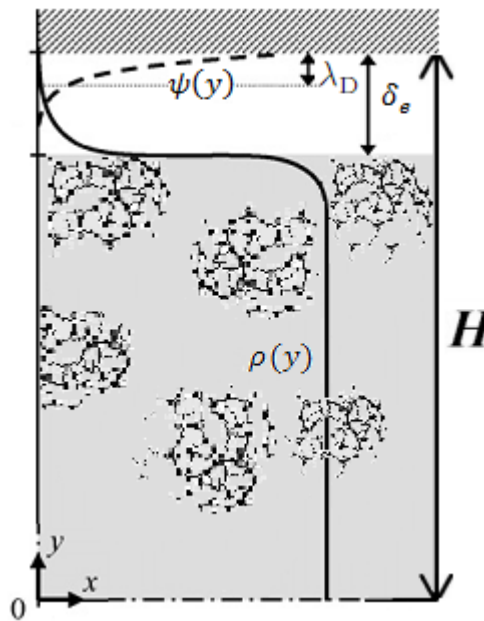


Figura 8: representação esquemática de uma solução polimérica num microcanal. A curva a cheio representa o perfil de densidade específica do fluido em cada camada, a curva a tracejado demonstra a variação do potencial eléctrico e δ_e é o valor da espessura da camada de escorregamento (adap. [14]).

A introdução da camada de escorregamento insere uma nova condição de fronteira no problema. Na parede continua a ser válida a condição de não escorregamento e no centro do escoamento volta a existir a condição de simetria do escoamento. A diferença está na existência de uma interface entre a camada de escorregamento, desprovida de macromoléculas, e o núcleo do fluido que mantém as mesmas características apresentadas no início deste capítulo. Assim, na interface assume-se nova condição de não escorregamento com ambos os fluidos a moverem-se à mesma velocidade.

5 Solução do problema

5.1 Análise do problema

A combinação das equações governativas e a sua integração, que permite obter a solução do problema, é o assunto da 1ª parte deste capítulo.

A tensão total $\tau_{xy} = \tau_{xy,s} + \tau_{xy,p}$ é obtida após integração segundo y da equação de Cauchy modificada (eq. (4.4)), onde é introduzida a condição de fronteira no eixo do escoamento, que assume uma tensão de corte nula para $y = 0$ e com particular atenção para o último termo ρ_e dado pela equação (4.14).

$$\tau_{xy,s} + \tau_{xy,p} = \epsilon \psi_o E_x \frac{\sinh(ky)}{\cosh(kH)} + P_{,x} y \quad (5.1)$$

Onde $E_x \equiv -\frac{d\varphi}{dx}$, com φ a representar o potencial eléctrico aplicado externamente, como representado na figura 6 e $P_{,x} \equiv \frac{dP}{dx}$.

Para o fluido newtoniano, com a introdução das condições predefinidas para o escoamento e consequentes simplificações, temos uma relação entre a tensão de corte, a viscosidade do solvente η_s e a velocidade do escoamento que é dada pela seguinte equação.

$$\tau_{xy,s} = \eta_s \frac{du}{dy} \quad (5.2)$$

Por outro lado, a simplificação da equação (4.8) para as condições deste escoamento resulta no seguinte sistema de equações para a contribuição polimérica.

$$f(\tau_{kk}) \tau_{xx,p} = 2\lambda \dot{\gamma} \tau_{xy,p} \quad (5.3)$$

$$f(\tau_{kk}) \tau_{yy,p} = 0 \quad (5.4)$$

$$f(\tau_{kk}) \tau_{xy,p} = \eta_p \dot{\gamma} \quad (5.5)$$

Com o traço do tensor das tensões a ser dado por $\tau_{kk} = \tau_{xx,p} + \tau_{yy,p}$, da eq.(5.4) deduz-se que $\tau_{yy,p} = 0$ e assim, o sistema de equações pode ser simplificado com a substituição da função traço do tensor das tensões $f(\tau_{kk})$ para a obtenção das seguintes equações:

$$\tau_{xx,p} = \frac{2\lambda}{\eta_p} (\tau_{xy,p})^2 \quad (5.6)$$

$$\dot{\gamma} \equiv \frac{du}{dy} = \frac{1}{\eta_p} \left(1 + \frac{\epsilon\lambda}{\eta_p} \tau_{xx,p} \right) \tau_{xy,p} \quad (5.7)$$

Num fluido caracterizado pelo modelo sPTT, a tensão normal (ver eq.(5.6)) não é desprezável e é directamente proporcional ao quadrado da tensão de corte, com η_p a especificar a viscosidade da componente polimérica. A associação das equações (5.6) e (5.7) expõe a taxa de deformação como função de uma equação cúbica da tensão de corte $\tau_{xy,p}$.

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

O conjunto das equações (5.1), (5.6) e (5.7) deverá ser resolvido para obtenção da solução, mas antes de prosseguir será realizada a adimensionalização das equações para generalização da solução.

5.2 Adimensionalização do problema

O tratamento adimensional das expressões é um passo importante que permite generalizar uma solução. Neste caso específico, este tratamento foi realizado inicialmente, dada a impossibilidade de obtenção de uma solução analítica para o problema e assim adquirir a solução numérica já com base em grandezas adimensionais.

Após a introdução das normalizações $\bar{y} = y / H$, $\bar{k} = kH$ e da razão de viscosidades $\beta = \eta_s / (\eta_s + \eta_p)$, que contabiliza a contribuição de cada uma das viscosidades para a tensão de corte total na combinação entre o solvente e a componente polimérica, a equação de Cauchy apresentada anteriormente pode reescrever-se na forma adimensional, com cada uma das componentes de corte da tensão adimensional definida como $\bar{\tau}_{xy,i} = \tau_{xy,i} / (3 \eta_i u_{sh} k)$, que aqui aparecem relacionadas com a velocidade u_{sh} de Helmholtz-Smoluchowski, i.e.:

$$\bar{\tau}_{xy,s} = \frac{\tau_{xy,s}}{3 \eta_s u_{sh} k} \quad \text{e} \quad \bar{\tau}_{xy,p} = \frac{\tau_{xy,p}}{3 \eta_p u_{sh} k} \quad (5.8)$$

Interessa indicar que a velocidade u_{sh} , parâmetro que define a velocidade de um escoamento movido por electro-osmose pura, está directamente associada à viscosidade total do fluido ($u_{sh} = -\epsilon \psi_o E_x / (\eta_s + \eta_p)$). A interligação entre as forças electro-osmóticas e o gradiente de pressões é evidenciada pelo parâmetro $\Gamma = -P_x H^2 / (\epsilon \psi_o E_x)$ que neste trabalho terá uma aplicação directa na solução do problema com uma atribuição de valores normalmente encontrados na literatura.

Equação de Cauchy adimensional pode ser apresentada da seguinte forma:

$$\beta \frac{\partial \bar{\tau}_{xy,s}}{\partial \bar{y}} + (1 - \beta) \frac{\partial \bar{\tau}_{xy,p}}{\partial \bar{y}} = \left[1 - \frac{\bar{k}^2 \cosh(\bar{k} \bar{y})}{\Gamma \cosh(\bar{k})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{k}} \quad (5.9)$$

Após adimensionalização da equação (5.1), a expressão seguinte apresenta as duas componentes da tensão de corte total de forma implícita.

$$\beta \bar{\tau}_{xy,s} + (1 - \beta) \bar{\tau}_{xy,p} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k} \sinh(\bar{k} \bar{y})}{\Gamma \cosh(\bar{k})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{k}} \quad (5.10)$$

O termo $\bar{\tau}_{xy,s}$, correspondente à tensão de corte adimensional do solvente, pode ser facilmente explícito em função da velocidade de deformação adimensional ($d\bar{u}/d\bar{y}$) indicado logo abaixo, com $\bar{u} = u/u_{sh}$.

$$\bar{\tau}_{xy,s} = \left(\frac{1}{3 \bar{k}} \right) \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} \quad (5.11)$$

O trabalho de adimensionalização das equações (5.6) e (5.7) permite obter a expressão seguinte, com a tensão de corte correspondente à componente polimérica descrita no modelo PTT, a ser apresentada na seguinte forma adimensional:

$$\bar{y} \equiv \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} = 3 \bar{k} \bar{\tau}_{xy,p} (1 + 18 \epsilon D e_k^2 \bar{\tau}_{xy,p}^2) \quad (5.12)$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

Nesta equação a velocidade de deformação adimensional é explícita em ordem à tensão polimérica e à relação directa dos parâmetros ε e número de Deborah ($De_k = \lambda u_{sh} k$). Este último termo introduz o factor tempo de relaxação do fluido λ adimensionalizado em relação à velocidade electro-osmótica u_{sh} e à espessura da dupla camada eléctrica “EDL” associada ao parâmetro k .

Convém salientar que a tensão normal $\bar{\tau}_{xx,p}$ aparece com a seguinte forma adimensional:

$$\bar{\tau}_{xx,p} = 6 De_k \bar{\tau}_{xy,p}^2 \quad (5.13)$$

5.3 Solução do problema (1º caso)

Na solução apresentada nos passos seguintes (1º caso) pretende-se estudar as características do escoamento definidas anteriormente, sem a inclusão de uma camada de escorregamento (*skimming layer*), que será descrita mais adiante.

Após substituição de $\bar{\tau}_{xy,s}$ na equação (5.10), pela igualdade fornecida pela equação (5.11), obtém-se uma expressão que combina a velocidade de deformação adimensional \bar{y} com a tensão de corte polimérica $\bar{\tau}_{xy,p}$. Estas duas componentes aparecem iguais a um termo que interliga as forças provenientes do gradiente de pressões com as da electro-osmose. O facto da tensão de corte polimérica $\bar{\tau}_{xy,p}$ não se encontrar explícita no modelo PTT obrigará a uma nova substituição posteriormente.

$$\beta \left(\frac{1}{3 \bar{k}} \right) \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} + (1 - \beta) \bar{\tau}_{xy,p} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{\kappa}} \quad (5.14)$$

Substituindo a velocidade de deformação \bar{y} dada pelo modelo PTT na eq. (5.12) temos:

$$\beta \bar{\tau}_{xy,p} (1 + 18 \varepsilon De_k^2 \bar{\tau}_{xy,p}^2) + (1 - \beta) \bar{\tau}_{xy,p} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{\kappa}} \quad (5.15)$$

Seguidamente, após simplificação surge uma equação cúbica em ordem a $\bar{\tau}_{xy,p}$:

$$18 \beta \varepsilon De_k^2 \bar{\tau}_{xy,p}^3 + \bar{\tau}_{xy,p} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \right] \quad (5.16)$$

A mesma equação (5.16) pode ser reescrita numa forma reduzida com solução bastante simplificada que pode ser facilmente encontrada na literatura.

$$\bar{\tau}_{xy,p}^3 + 3A \bar{\tau}_{xy,p} - 2B = 0 \quad (5.17)$$

$$3A = \frac{1}{18 \beta \varepsilon De_k^2} \quad \text{e} \quad 2B = \frac{1}{54} \frac{\Gamma}{\beta \varepsilon De_k^2 \bar{\kappa}} \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \right] \quad (5.18)$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

Num estudo mais aprofundado da interligação entre os diferentes parâmetros, que compõe a equação cúbica, nota-se que apenas Γ admite valores positivos e negativos, no seu espectro de possibilidades. O facto de aceitar valores negativos direcciona a solução da equação para uma raiz específica, das três que a compõe. As diferentes raízes obtidas são apresentadas em anexo (anexo A).

A raiz seleccionada é a única que permite evitar uma solução imaginária dentro do intervalo escolhido para cada um dos diferentes parâmetro que a constituem:

$$\bar{\tau}_{xy,p} = \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \quad (5.19)$$

Finalmente, podemos substituir a solução obtida na equação seguinte para obtenção do perfil comparativo de velocidades do escoamento, obtido após integração. Esta equação é apenas uma evolução da eq. (5.14) após isolar o termo referente à velocidade de deformação adimensional ($d\bar{u}/d\bar{y}$) e aparece igualada a dois termos distintos que são analisados mais adiante:

$$\int_{\bar{u}}^0 \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} d\bar{y} = \int_{\bar{y}}^1 \left[\frac{\Gamma}{\beta} \left(\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k}\bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right) - \frac{(1-\beta)}{\beta} 3\bar{k} \cdot \bar{\tau}_{xy,p} \right] d\bar{y} \quad (5.20)$$

5.4 Método numérico utilizado

O primeiro termo da eq. (5.20)³ tem solução analítica quando $\beta = 1$ que representa a evolução do perfil de velocidades para um escoamento sob influência de forças geradas por electro-osmose e gradiente de pressão para um fluido newtoniano. Origina uma solução em tudo idêntica à apresentada por Afonso et al [4] para fluidos newtonianos que pode ser facilmente deduzida a partir da equação seguinte.

$$0 - \bar{u} = \frac{\Gamma}{1} \cdot \left[\frac{\bar{y}^2}{2} - \frac{1}{\Gamma} \frac{\cosh(\bar{k}\bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right]_{\bar{y}}^1 \quad (5.21)$$

Solução analítica do perfil de velocidades para um fluido newtoniano nas características de escoamento especificadas anteriormente:

$$\bar{u} = 1 - \frac{\cosh(\bar{k}\bar{y})}{\cosh(\bar{k})} + \frac{1}{2}(\bar{y}^2 - 1) \quad (5.22)$$

O segundo termo da eq. (5.20)⁴ revelou ser bastante mais complexo com a introdução da tensão da componente polimérica constituída por uma solução real da equação cúbica apresentada na equação (5.19), não sendo possível obter uma solução analítica devido à complexidade invocada pelo seno hiperbólico associado à variável independente \bar{y} . Desta feita, partiu-se para a obtenção de uma solução numérica com a utilização de um método numérico, neste caso o método *Runge-Kutta-Fehlberg*, que é um algoritmo dos mais utilizados para a resolução de equações diferenciais ordinárias, que tem por base dois métodos

³ $\frac{\Gamma}{\beta} \left(\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k}\bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right)$

⁴ $-\frac{(1-\beta)}{\beta} 3\bar{k} \cdot \bar{\tau}_{xy,p}$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

de Runge-Kutta, um de quarta ordem e outro de quinta ordem. Este método tem a particularidade de ser composto por um procedimento que determina o valor do passo h mais apropriado. Assim, a cada passo de iteração são obtidas duas aproximações para a solução e seguidamente comparadas. Se as duas respostas estiverem em consonância, a aproximação é aceite, caso contrário, se as duas respostas não respeitarem a exactidão especificada, o passo é reduzido.

Para uma equação diferencial num problema de condições iniciais do género $\frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} = f(\bar{y}_n, \bar{u}_n)$, $\bar{u}(\bar{y}_0) = \bar{u}_0$, a formulação mais usada neste método é a seguinte:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(\bar{y}_n, \bar{u}_n), \\ k_2 &= hf\left(\bar{y}_n + \frac{1}{4}h, \bar{u}_n + \frac{1}{4}k_1\right), \\ k_3 &= hf\left(\bar{y}_n + \frac{3}{8}h, \bar{u}_n + \frac{3}{32}k_1 + \frac{9}{32}k_2\right), \\ k_4 &= hf\left(\bar{y}_n + \frac{12}{13}h, \bar{u}_n + \frac{1932}{2197}k_1 - \frac{7200}{2197}k_2 + \frac{7296}{2197}k_3\right), \\ k_5 &= hf\left(\bar{y}_n + h, \bar{u}_n + \frac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \frac{3680}{513}k_3 - \frac{845}{4104}k_4\right), \\ k_6 &= hf\left(\bar{y}_n + \frac{1}{2}h, \bar{u}_n - \frac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \frac{3544}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5\right). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Seguidamente é obtida uma aproximação para a solução utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem a partir da seguinte equação:

$$\bar{u}_{n+1} = \bar{u}_n + \frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5 \quad (5.24)$$

Quando é determinado que é necessário um valor de aproximação mais exacto para a solução, passa a ser utilizado o método de Runge-Kutta de quinta ordem a partir da seguinte equação:

$$Z_{n+1} = \bar{u}_n + \frac{16}{135}k_1 + \frac{6656}{12825}k_3 + \frac{28561}{56430}k_4 - \frac{9}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6 \quad (5.25)$$

A aproximação numérica do erro ϵ no ponto \bar{y}_{n+1} é dada por:

$$\epsilon = \bar{u}_{n+1} - Z_{n+1} \quad (5.26)$$

O valor optimizado para utilizar no passo h pode ser determinado multiplicando um escalar s ao passo correntemente utilizado. Este escalar s é determinado da seguinte forma:

$$s = \left(\frac{\epsilon h_{n+1}}{2|Z_{n+1} - \bar{u}_{n+1}|}\right)^{1/4} \quad (5.27)$$

Este método é computacionalmente muito eficiente apesar de exigirem diversas avaliações da função, o passo h pode ser muito maior sem que por isso haja perda de precisão. O erro absoluto estimado será de 10^{-7} e o erro relativo de 10^{-6} .

Se a função a integrar f depender apenas de \bar{y}_n , como é o caso da equação (5.20) a integrar, o método de Runge-Kutta reduz-se para uma regra de integração de Simpson adaptativa, com a vantagem da avaliação do passo h explicada anteriormente, com uma influência muito

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional evidente no esforço computacional necessário para a obtenção dos resultados expostos no capítulo seguinte.

5.5 Solução do problema com a introdução de uma camada de escorregamento (*skimming layer*), (2º caso)

Para o estudo desta nova condição apresentam-se duas soluções distintas. Na primeira solução (A) existe uma adaptação da solução fornecida no primeiro caso sem inclusão de qualquer novo parâmetro. Na segunda solução (B), apresentada mais adiante, existe uma substituição do parâmetro β^5 que contabiliza a razão entre a viscosidade do solvente e a viscosidade total, por um novo parâmetro ϕ que indica de uma forma mais específica, a razão entre a viscosidade da componente polimérica e a viscosidade do solvente ($\phi = \eta_p/\eta_s$).

5.51 Solução (A)

Na figura (7) é possível distinguir duas zonas distintas, cada uma com o seu modelo reológico específico. A primeira zona junto à parede, denominada camada de escorregamento, está limitada entre ($H - \delta_e \leq y \leq H$) com as condições de fronteira especificadas anteriormente. Ao assumir que a camada de escorregamento é constituída apenas por solvente newtoniano, a sua descrição reológica segue o modelo de Newton apresentado no capítulo 4.

Assim, analisando a equação de Cauchy adimensional (eq.(5.9))⁶, usada na solução do problema anterior, observa-se a associação das duas derivadas da tensão de corte de cada uma das componentes (solvente e polímero) igualadas a forças provenientes do gradiente de pressão e da electro-osmose. Como na camada de escorregamento a viscosidade do solvente η_s é inevitavelmente igual à viscosidade total, visto não existir componente polimérica, o parâmetro β é invariavelmente unitário. Desta forma para $\beta = 1$, a derivada da tensão de corte polimérica é anulada e a equação fica reduzida a uma única tensão de corte, com solução analítica apresentada na secção 5.3 equação (5.22)⁷.

A segunda zona, fora da camada de escorregamento, está limitada entre ($0 \leq y \leq H - \delta_e$). Neste caso o modelo reológico que descreve o fluido em escoamento no núcleo é o mesmo usado no 1º caso. O aspecto mais relevante a definir é a introdução da condição de fronteira na interface entre o núcleo do escoamento e a camada de escorregamento. Admitindo a condição de não escorregamento na interface, a velocidade no ponto ($y = H - \delta_e$) é a mesma determinada na solução analítica obtida para a zona da camada de escorregamento. Assim, a solução para a segunda zona respeitante ao núcleo do escoamento é dada pela integração da seguinte equação:

$$^5 \beta = \eta_s / (\eta_s + \eta_p)$$

$$^6 \beta \frac{\partial \bar{\tau}_{xy,s}}{\partial \bar{y}} + (1 - \beta) \frac{\partial \bar{\tau}_{xy,p}}{\partial \bar{y}} = \left[1 - \frac{\bar{k}^2}{\Gamma} \frac{\cosh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{k}}$$

$$^7 \bar{u} = 1 - \frac{\cosh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} + \frac{1}{2} (\bar{y}^2 - 1)$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

$$\int_{\bar{u}}^{\bar{u}_{\delta_e}} \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} d\bar{y} = \int_{\bar{y}}^{\bar{y}_{\delta_e}} \left[\frac{\Gamma}{\beta} \left(\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k}\bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right) - \frac{(1-\beta)}{\beta} 3\bar{k} \cdot \bar{\tau}_{xy,p} \right] d\bar{y}, \quad (5.28)$$

se $\left(0 \leq \bar{y} \leq 1 - \frac{\delta_e}{H} \right)$

Com \bar{u}_{δ_e} a ser obtido analiticamente como descrito anteriormente e a posição da interface \bar{y}_{δ_e} , após adimensionalização, a ser dada da seguinte forma:

$$\bar{u}_{\delta_e} = 1 - \frac{\cosh(\bar{k}\bar{y}_{\delta_e})}{\cosh(\bar{k})} + \frac{1}{2}(\bar{y}_{\delta_e}^2 - 1), \quad \bar{y}_{\delta_e} = 1 - \frac{\delta_e}{H} \quad (5.29)$$

5.52 Solução (B)

Para poder estabelecer uma diferença de grandeza entre as viscosidades do núcleo e da camada de escorregamento houve a necessidade de adicionar um novo parâmetro à solução usada até aqui. De forma a minorar alguma disparidade entre a solução a obter e a já existente estabeleceu-se apenas, que a viscosidade do polímero seria dada por um coeficiente ϕ a multiplicar pela viscosidade do solvente. Assim, $\eta_p = \phi \eta_s$ e o parâmetro β , indicativo da razão entre a viscosidade do solvente e a viscosidade total do fluido, passaria a equacionar-se da seguinte forma:

$$\beta = \frac{\eta_s}{(\eta_s + \eta_p)} \equiv \frac{1}{1 + \phi} \quad (5.30)$$

Os detalhes do procedimento para a obtenção da solução encontram-se no anexo B visto o seu tratamento não ser muito diferente do desenvolvimento demonstrado nas soluções apresentadas anteriormente. Assim, para a camada de escorregamento compreendida entre $(H - \delta_e \leq y \leq H)$ temos apenas fluido newtoniano com a equação diferencial, mostrada em eq.(5.31), a revelar solução analítica (ver eq.(5.32)) considerando as mesmas condições de fronteira especificadas na solução (A).

$$\left(\frac{1}{1 + \phi} \right) \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k}\bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \frac{\Gamma}{3\bar{k}} \quad (5.31)$$

$$\bar{u} = (1 + \phi) \left[1 - \frac{\cosh(\bar{k}\bar{y})}{\cosh(\bar{k})} + \frac{1}{2}(\bar{y}^2 - 1) \right], \quad \text{se} \left(1 - \frac{\delta_e}{H} \leq \bar{y} \leq 1 \right) \quad (5.32)$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

Para o resto do escoamento, fora da camada de escorregamento que está limitada entre $(0 \leq y \leq H - \delta_e)$, temos a seguinte equação diferencial com a condição de fronteira descrita na equação (5.34), que após integração permite obter uma solução numérica do problema. Convém salientar que o termo $\bar{\tau}_{xy,p}$ embora varie devido à substituição do parâmetro β por ϕ , de facto não altera de forma substancial a solução da equação cúbica apresentada anteriormente.

$$\int_{\bar{u}}^{\bar{u}_{\delta_e}} \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} d\bar{y} = \int_{\bar{y}}^{\bar{y}_{\delta_e}} \left[(1 + \phi) \left(\Gamma \bar{y} - \frac{\bar{k} \sinh(\bar{k}\bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right) - \phi 3\bar{k} \cdot \bar{\tau}_{xy,p} \right] d\bar{y}, \quad (5.33)$$

se $\left(0 \leq \bar{y} \leq 1 - \frac{\delta_e}{H} \right)$

$$\bar{u}_{\delta_e} = 1 - \frac{\cosh(\bar{k} \bar{y}_{\delta_e})}{\cosh(\bar{k})} + \frac{1}{2} (\bar{y}_{\delta_e}^2 - 1), \quad \bar{y}_{\delta_e} = 1 - \frac{\delta_e}{H} \quad (5.34)$$

Esta simples alteração modifica de forma determinante a maneira de abordar o problema. Quando antes, o parâmetro β interpretava o grau de contribuição de cada uma das tensões de corte (componente polimérica e solvente) na solução, agora, o parâmetro ϕ permite estabelecer uma base de comparação entre a viscosidade total do fluido que constitui o núcleo e a viscosidade do fluido que constitui a camada de escorregamento, inevitavelmente solvente newtoniano

6 Discussão

No capítulo anterior foram apresentadas as equações gerais do problema e determinada a sua solução. Foram identificadas as diferentes características reológicas e electro-cinéticas intervenientes na solução final. Neste capítulo inicia-se a apresentação de casos limite contidos na solução geral para a melhor compreensão do problema em análise seguindo-se depois a discussão do caso geral.

Os casos a abordar serão:

- Escoamento por electro-osmose pura para um fluido newtoniano.
- Efeito da contribuição do solvente sobre as características do escoamento.
- Efeito da elasticidade sobre as características do escoamento de electro-osmose.
- Preponderância do parâmetro agrupado $\sqrt{\varepsilon}De_k$ no perfil de velocidades.
- Influência do gradiente de pressão no perfil de velocidades.
- Influência de uma camada de escorregamento no escoamento

6.1 Características do escoamento forçado por electro-osmose pura

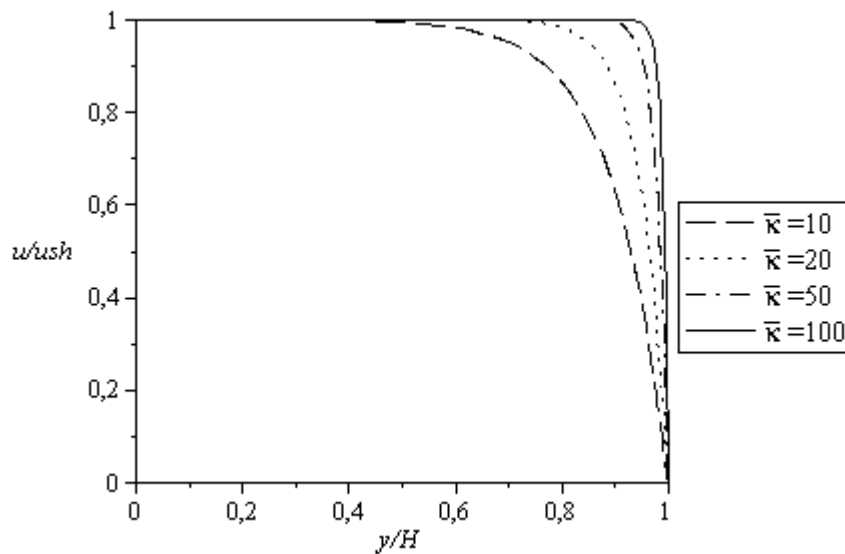
Um escoamento com Γ tendente para infinito é basicamente influenciado por forças de pressão, exibindo um perfil laminar de velocidades clássico com uma curva parabólica. Quando por outro lado $\Gamma = 0$, o escoamento é regido pelo efeito da electro-osmose e o perfil de velocidades depende apenas da distância à parede do canal e da espessura da camada de Debye descrita anteriormente.

Observando um escoamento de um fluido newtoniano ao longo de um canal, movido apenas pelo efeito da electro-osmose é possível registar diversas características específicas, inerentes à reologia deste tipo de fluido. Com um tempo de relaxação nulo e consequentemente o desaparecimento do parâmetro De_k torna-se mais simples deduzir a solução analítica do perfil de velocidades para um fluido de Newton. A figura 9(a) mostra os perfis transversais de velocidade para um fluido newtoniano para condições de electro-osmose pura. Com um Γ igual a zero é notório o efeito da electro-osmose no escoamento, que demonstra um perfil de velocidades constante na zona central do canal e que diminui exponencialmente à medida que evolui no sentido da parede ($y/H = 1$). O parâmetro adimensional $\bar{\kappa}$ é igual ao inverso da espessura da camada Debye e permite regular a taxa de abatimento da curva na imediação da parede, facto que pode ser observado na figura 9(a) para diferentes valores de $\bar{\kappa}$. Para um escoamento por electro-osmose pura ($\Gamma = 0$), quando $\bar{\kappa}$ tende para a unidade é assumida uma espessura da camada de Debye que se aproxima do comprimento da totalidade da largura do microcanal e logo, a criação de uma região com carga iónica não nula, que está disposta por toda a largura do canal. Esta situação não é abrangida pela solução em estudo nesta tese, que assume a aproximação de Debye-Hückel admissível apenas para valores de $\bar{\kappa}$ superiores a 10 (portanto, para espessuras de Debye inferiores a 10% da largura de metade do canal).

Após observar o comportamento algo previsível do fluido newtoniano, correspondente a um $\beta=1$, interessa estudar a evolução do perfil de velocidades para diferentes valores de β . O parâmetro β já foi deduzido anteriormente como um rácio entre a viscosidade do solvente newtoniano e a viscosidade total do fluido combinado. O coeficiente β é essencialmente um parâmetro que regula o grau de contribuição de cada uma das tensões de corte (do solvente

newtoniano e da componente polimérica) para a tensão de corte total. Na figura 9(b) são mostrados diversos perfis para valores crescentes de β mantendo os parâmetros ε e De_k constantes. É importante notar que a solução obtida respeita os limites esperados, tendo em conta os valores atribuídos aos diferentes parâmetros. O limite inferior é dado pela solução analítica de um fluido newtoniano que pode ser definida a partir da eq.(5.22)⁸ descrita anteriormente, ao passo que, o limite superior é obtido a partir da solução analítica para um fluido viscoelástico descrito “apenas” pelo modelo sPTT (sem contribuição do solvente newtoniano) fornecida por Afonso et al [4]. Fica claro que a solução numérica obtida respeita ambos os limites. Na mesma figura é igualmente possível observar a transferência das características reológicas evidenciadas por um fluido normal newtoniano, para as características mais complexas associadas ao fluido descrito pelo modelo sPTT, tendo em conta os valores não nulos dos parâmetros ε e De_k . É notória a influência de β na amplitude do perfil de velocidades, especialmente quando nos aproximamos de valores sucessivamente mais baixos, como se pode averiguar na figura 9(b). A diminuição de β produz um crescimento da participação da viscosidade da componente polimérica na viscosidade total o que se traduz no aumento do efeito reofluidificante no escoamento.

(a)



⁸ $\bar{u} = 1 - \frac{\cosh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} + \frac{1}{2}(\bar{y}^2 - 1)$

(b)

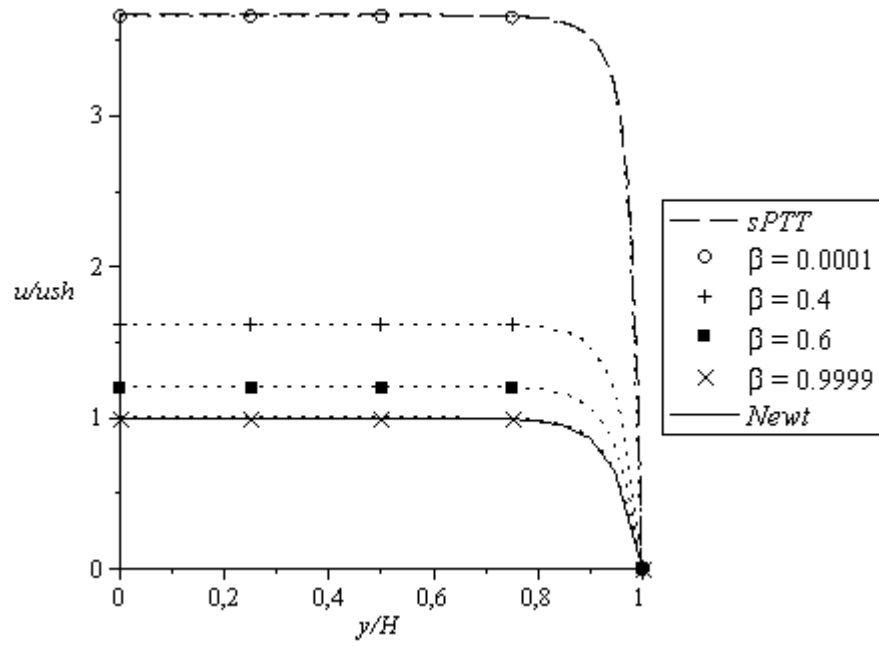


Figura 9: (a) perfis de velocidade para um fluido newtoniano sob influência de electro-osmose pura ($\Gamma = 0$); (b) perfis de velocidade para um fluido newtoniano (*Newt*) e para um viscoelástico (*sPTT*) obtidos analiticamente; evolução dos perfis de velocidade obtidos a partir da solução numérica para diferentes valores de β e com $\sqrt{\epsilon}De_k = 2$.

6.2 Características do escoamento de uma solução polimérica com solvente newtoniano

As figuras 10 (a) e (b) mostram as características de um escoamento sob a acção combinada de forças de pressão e electro-osmose. Para valores de $\Gamma < 0$ o gradiente de pressões tem uma acção favorável no escoamento com a apresentação de um perfil a tender para a geometria parabólica típica de um escoamento de Poiseuille. Os valores de $\Gamma > 0$ correspondem igualmente a escoamentos de Poiseuille combinados com electro-osmose, mas neste caso com um gradiente de pressões adverso onde é possível verificar duas zonas bem distintas no perfil de velocidades, com a existência de um máximo nas imediações da parede e um mínimo estabelecido no eixo do canal. Mais uma vez demonstra-se a influência da viscosidade do solvente newtoniano na viscosidade total do fluido viscoelástico (rácio β). Este parâmetro aparece a variar em intervalos consecutivos, desde $\beta = 1$ para um fluido newtoniano até valores de β muito próximos de zero, para um fluido que evidencia um comportamento descrito pelo modelo sPTT. Não obstante o facto do efeito reofluidificante diminuir com o aumento consecutivo da viscosidade do solvente na viscosidade total, é importante salientar que a conseqüente diminuição da velocidade adimensional, não se reflecte necessariamente numa diminuição real da velocidade dimensional. Convém lembrar que na solução apresentada, o parâmetro β permite dosear a influência de cada uma das componentes (solvente ou polímero) no comportamento reológico do fluido, sem contabilizar a influência real de uma diferença na grandeza entre viscosidades que naturalmente influenciaria a velocidade real do escoamento.

Na figura 10(b) é possível averiguar que no eixo do microcanal, os valores de velocidade são negativos para a larga maioria dos perfis apresentados.

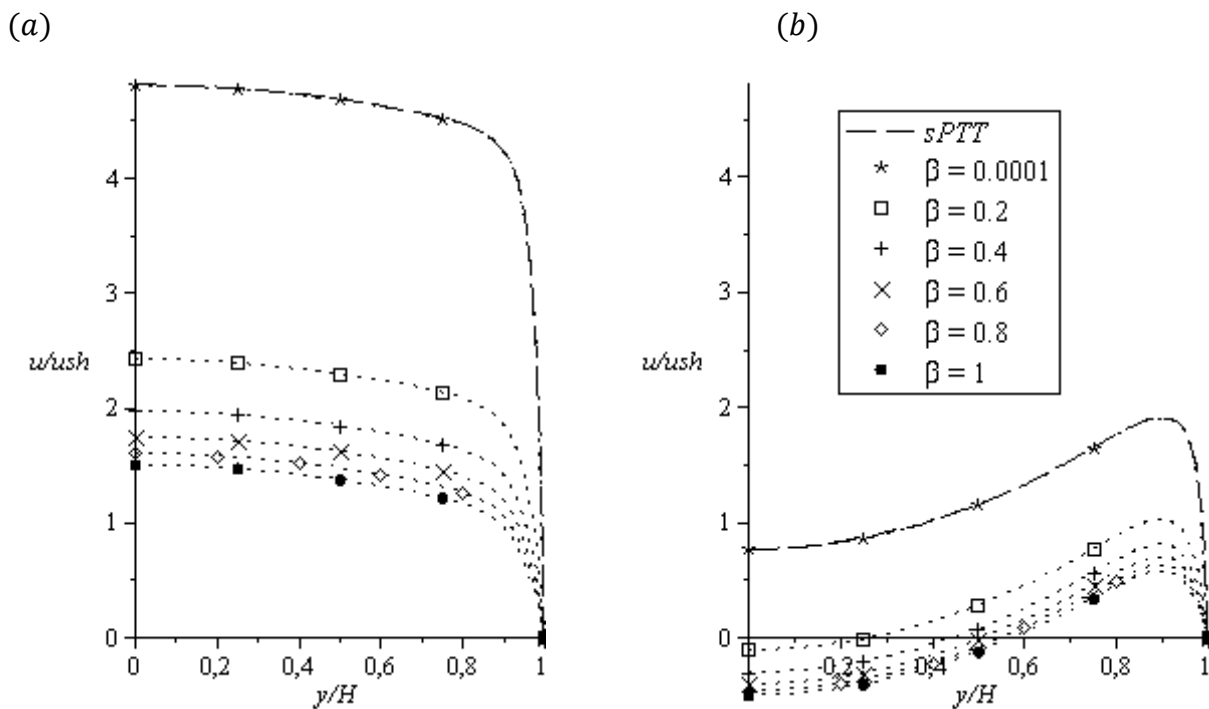


Figura 10: perfis de velocidade para diferentes valores de β com $\sqrt{\epsilon}De_k = 2$, $\bar{\kappa} = 20$, (a) $\Gamma = -1$ e (b) $\Gamma = 3$

Se observarmos os diferentes perfis de velocidade apresentados na figura 11 podemos constatar um crescimento gradual da amplitude do perfil de velocidades, com a variação do parâmetro combinado $\sqrt{\varepsilon}De_k$, para um fluido com um valor de β mediano e constante. Comparando com a figura 8(a), os diversos perfis de velocidade demonstram a mesma forma de curva, mas com patamares de velocidade adimensional máxima sucessivamente mais elevados para valores de $\sqrt{\varepsilon}De_k$ crescentes. É perceptível uma influência mais evidente para baixos valores de $\sqrt{\varepsilon}De_k$ que tende a dissipar-se para valores mais elevados.

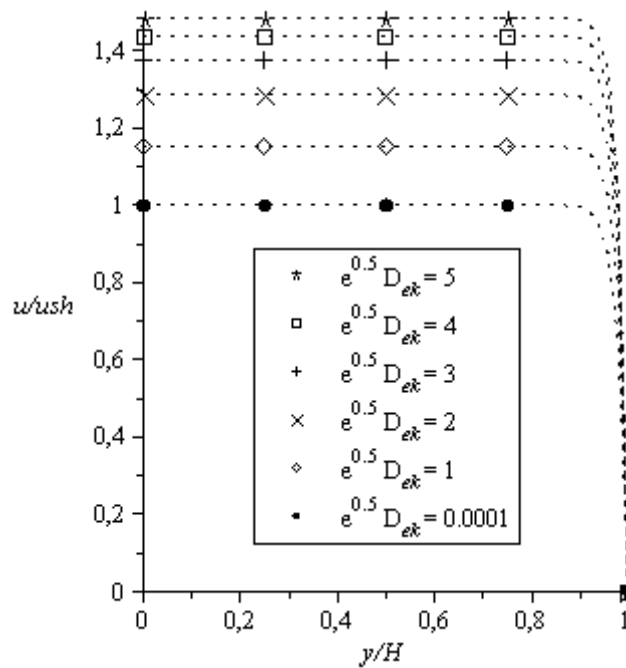


Figura 11: Perfis de velocidade para diferentes valores do parâmetro agrupado $\sqrt{\varepsilon}De_k$ para um fluido com $\beta = 0.5$ e $\Gamma = 0$

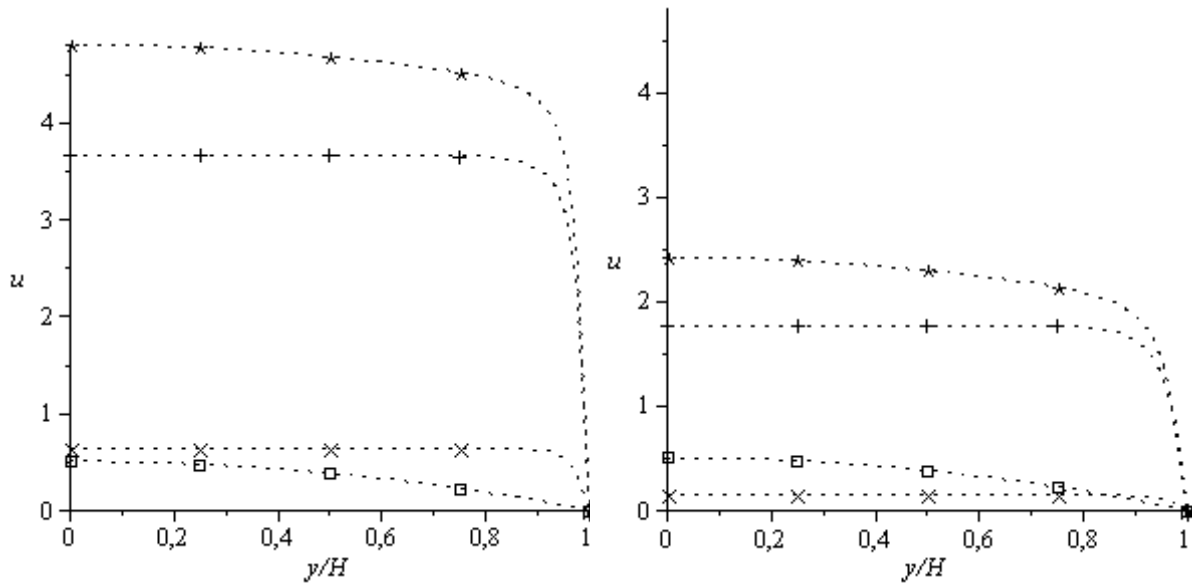
A figura 12 mostra as diferentes componentes do perfil de velocidades para determinados valores de β , com $u = u_E + u_P + u_{EP}$. O procedimento de cálculo para cada uma das diferentes componentes é descrito no anexo C.

Na alínea (a) demonstram-se as diferentes componentes da velocidade para um β muito baixo que corresponde a um fluido PTT com uma apresentação idêntica à encontrada em Afonso et al. [4]. A variação do parâmetro β , como seria de esperar, provoca alterações substanciais nos diversos perfis, com a excepção do perfil correspondente ao gradiente de pressão favorável que se mantém inalterado. É interessante observar que para apenas um valor de $\beta = 0.20$, a velocidade máxima adimensional medida no eixo do canal reduz-se basicamente para metade. Esta situação demonstra bem a influência que uma pequena presença de solvente newtoniano pode exercer na velocidade do escoamento. Quando $\beta = 1$, o que corresponde a um fluido com características puramente newtonianas, os diferentes perfis apresentam curvas clássicas facilmente encontradas na literatura, com a componente não linear do fluido, referente à combinação entre electro-osmose e gradiente de pressão, a desaparecer por completo.

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

(a) $\beta = 0.0001$

(b) $\beta = 0.2$



(c) $\beta = 1$

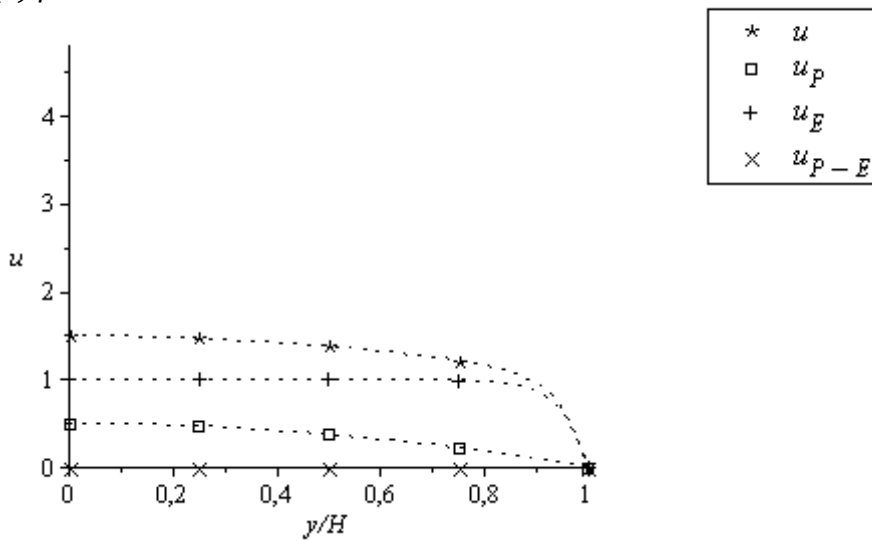


Figura 12: perfis das componentes da velocidade para um fluido sPTT para o efeito combinado de pressão e electro-osmose com $\sqrt{\epsilon}De_k = 2$ e $\Gamma = -1$. (a) $\beta = 0.0001$, (b) $\beta = 0.2$, (c) $\beta = 1$.

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

A figura 13 (a) mostra uma sucessão de curvas representativas da variação transversal da tensão de corte polimérica à medida que nos afastamos da parede. Como forma de simplificar a análise utiliza-se uma nova variável χ (chi)⁹, que substitui a variável independente (\bar{y}) da equação (5.19)¹⁰ e tem particularidade de desenvolver as curvas a partir da parede do canal e de eliminar o efeito do parâmetro $\bar{\kappa}$ na elaboração dos perfis (a variação de $\bar{\kappa}$ gera curvas sobrepostas). Ao variar o parâmetro β entre cada curva é possível visualizar a redução da tensão transferida para a componente polimérica com valores crescentes de β , i.e., nota-se um elevado grau de dependência da tensão de corte do polímero em relação à presença, em maior ou menor rácio, do solvente newtoniano.

Na figura 13 (b) mostram-se as mesmas curva que na alínea anterior, mas agora para um valor de $\sqrt{\varepsilon}De_k$ bastante mais reduzido. Esta alteração permite observar a influência do efeito reofluidificante na repartição das tensões entre o solvente newtoniano e a componente polimérica, já que neste caso a separação entre curvas é bastante inferior em comparação com a alínea anterior.

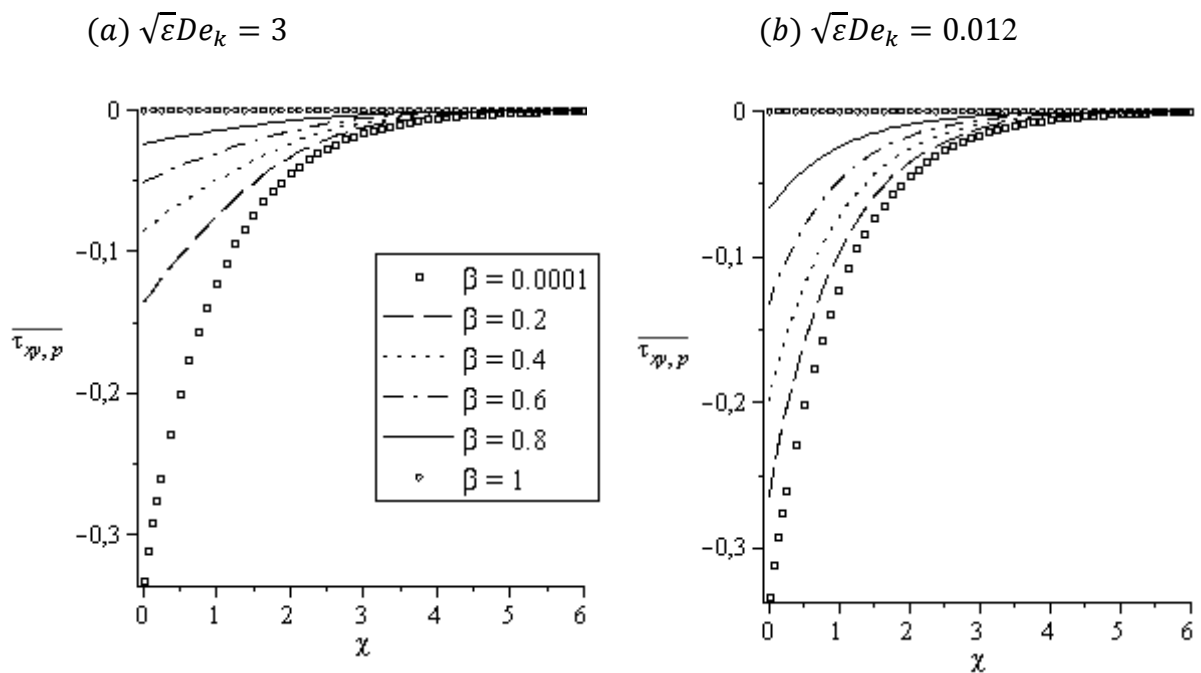


Figura 13: tensão de corte do polímero adimensional em função de β para diferentes valores de $\sqrt{\varepsilon}De_k$:. (a) $\sqrt{\varepsilon}De_k = 3$, (b) $\sqrt{\varepsilon}De_k = 0.01$ e $\bar{\kappa} = 20$

⁹ Variável de proximidade à parede definida por: $\chi = (1 - \bar{y}) \bar{\kappa}$

¹⁰ $\bar{\tau}_{xy,p} = \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}}$, com $A = \frac{1}{54 \beta \varepsilon De_k^2}$ e $B = \frac{1}{108} \frac{\Gamma}{\beta \varepsilon De_k^2 \bar{\kappa}} \left[\bar{y} - \frac{\bar{\kappa}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \right]$

A figura 14 apresenta os diferentes perfis de tensão normal polimérica, para as mesmas condições impostas na figura 12(a). A tensão normal adimensional polimérica ($\bar{\tau}_{xx,p}$), dada pela equação (5.13)¹¹ e é directamente proporcional ao quadrado da tensão de corte polimérica que apresenta uma influência do parâmetro β bastante pronunciada para valores mais baixos.

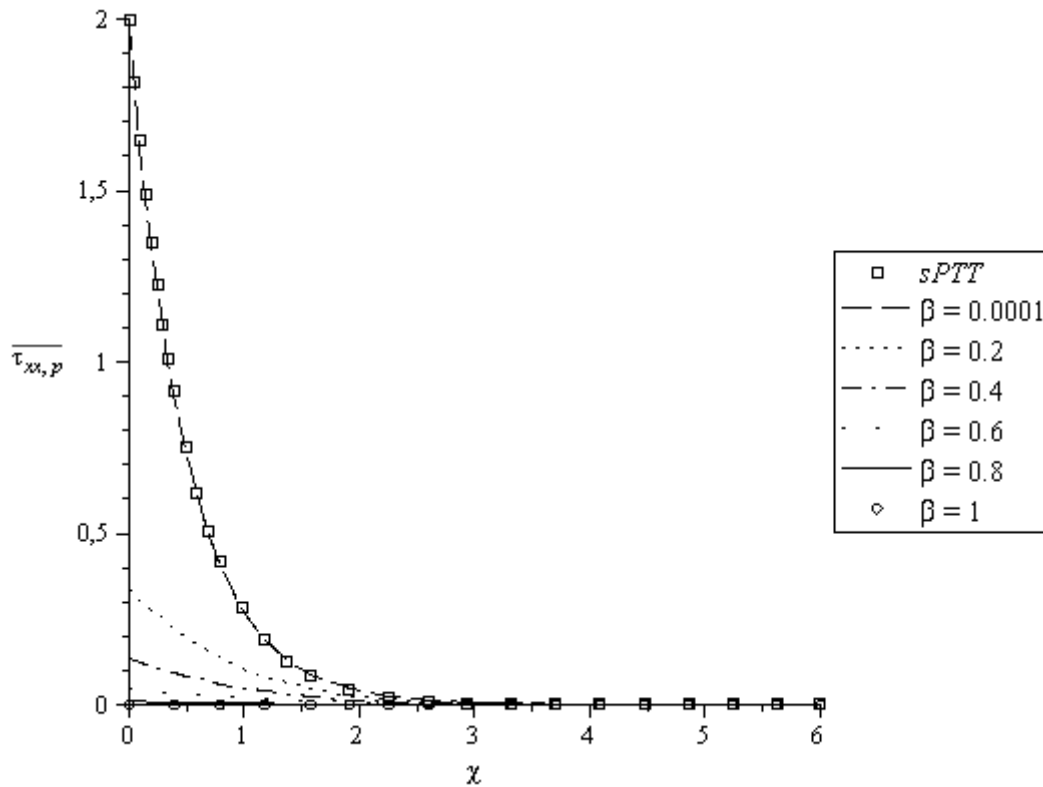


Figura 14: tensões normais da componente polimérica para diferentes valores de β com $\sqrt{\varepsilon}De_k = 3$ e $\bar{\kappa} = 20$

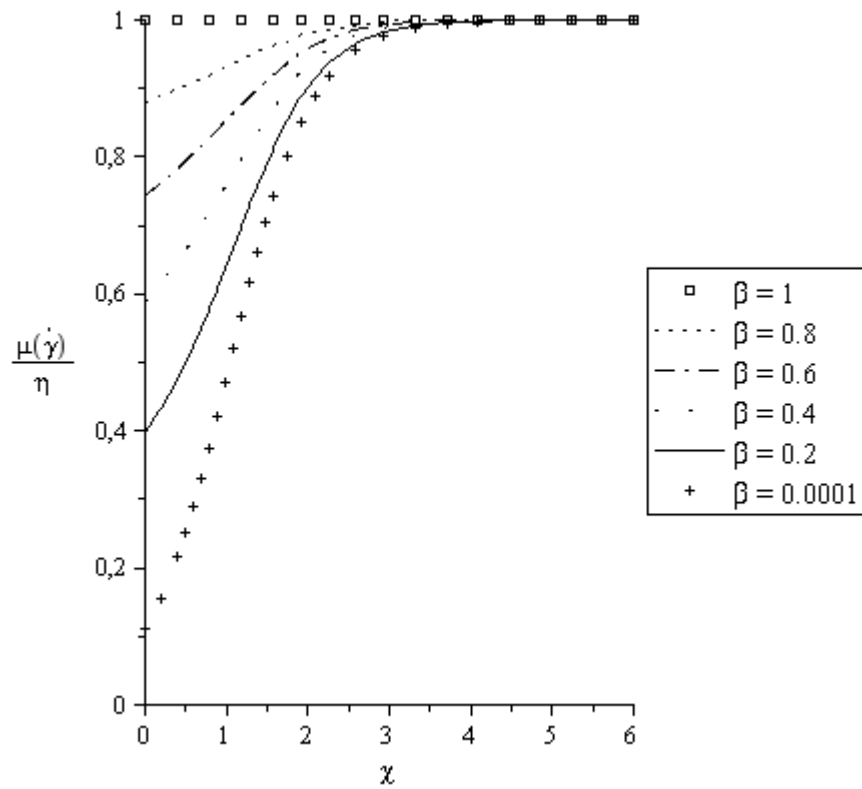
A figura 15 mostra a variação transversal da viscosidade de corte adimensional em função da variável χ descrita anteriormente. As expressões utilizadas na obtenção dos resultados são apresentadas no anexo D.

É imediatamente visível o comportamento refluidificante previsto pelo modelo sPTT com uma diminuição da viscosidade de corte que se acentua com a proximidade da parede, onde as tensões de corte são sucessivamente mais elevadas. A evolução do parâmetro β demonstra previsivelmente a alternância das características reológicas de um fluido newtoniano que apresenta uma viscosidade constante ao longo do canal, para um fluido sPTT de viscosidade variável, que obviamente depende das características descritas nos parâmetros ε e De_k .

Quanto à variação da viscosidade com o parâmetro agrupado $\sqrt{\varepsilon}De_k$, tal como já foi demonstrado anteriormente na figura 11, neste caso a diferença entre curvas demonstra um comportamento semelhante. É esta particularidade de baixa viscosidade na parede para fluidos com valores mais elevados de $\sqrt{\varepsilon}De_k$, que proporciona um elevado aumento da velocidade evidenciado no gráfico (b).

¹¹ $\bar{\tau}_{xx,p} = 6 De_k \bar{\tau}_{xy,p}^2$

(a)



(b)

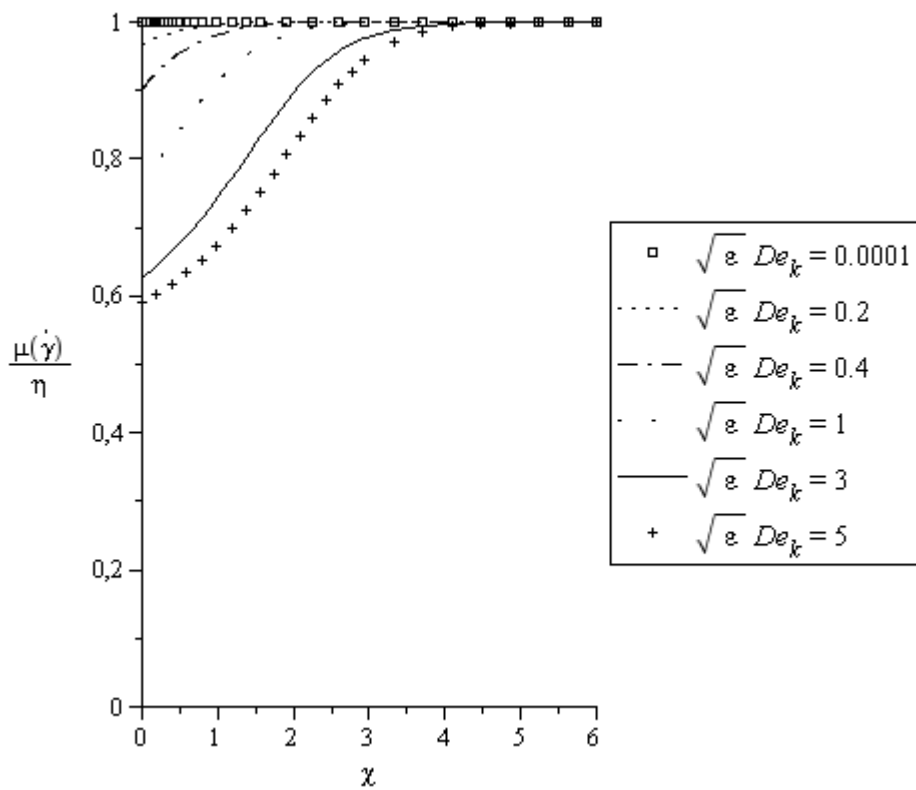


Figura 15: perfis de viscosidade adimensional para: (a) diferentes valores de β , com $\Gamma = 0$, $\sqrt{\epsilon} De_k = 2$ e $\bar{k} = 20$; (b) diferentes valores de $\sqrt{\epsilon} De_k$ com $\Gamma = 0$, $\beta = 0.5$ e $\bar{k} = 20$.

6.3 Influência de uma camada de escorregamento (*skimming layer*) no escoamento

Utilizando os dados apresentados na figura 10(a), com a omissão de apenas alguns perfis menos relevantes, para um menor constrangimento do desenho, pretende-se demonstrar na figura 16, a influência da camada de escorregamento, relativamente à espessura da dupla camada *EDL* de valor constante para diferentes valores de β entre cada perfil. Existe claramente, uma relação directa entre a espessura da dupla camada *EDL* definida pelo parâmetro $\bar{\kappa}$ e a espessura da camada de escorregamento. Para valores de $\bar{\delta}_e$ ¹² maiores que $\bar{\kappa}$, o escoamento é necessariamente dominado pelo efeito reofluidificante gerado pelo fluido viscoelástico que constitui o seu núcleo. A proximidade entre ambos os valores de $\bar{\kappa}$ e $\bar{\delta}_e$, provoca sempre um grande decréscimo nos perfis de velocidade com componente polimérica, embora não anule por completo o efeito reofluidificante que os define. Quando o valor de $\bar{\delta}_e$ é cerca de metade do de $\bar{\kappa}$, o efeito reofluidificante é quase anulado para todo o espectro de β , o que atesta bem relação entre esses dois primeiros parâmetros.

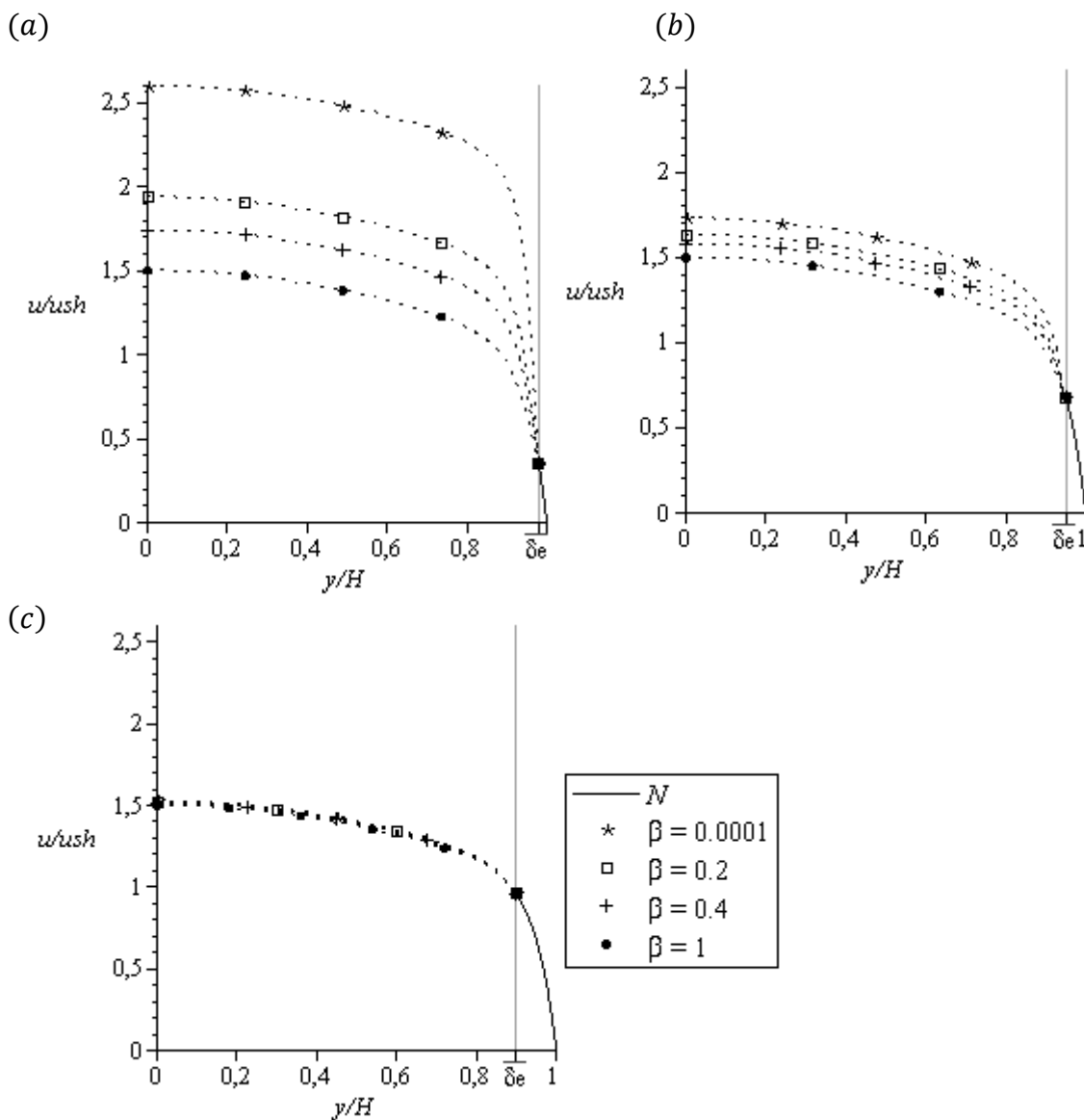


Figura 16: efeito da variação da espessura da camada de escorregamento $\bar{\delta}_e$ para diferentes valores de beta, com $\sqrt{\epsilon}De_\kappa = 2$, $\bar{\kappa} = 20$ e $\Gamma = -1$: (a) $\bar{\delta}_e = 50$, (b) $\bar{\delta}_e = 20$ e (c) $\bar{\delta}_e = 10$.

¹² Parâmetro adimensional relativo à espessura da camada de escorregamento: $\bar{\delta}_e = H/\delta_e$

A figura 17 é exemplificativa da influência da camada de escorregamento num escoamento. Nas diversas alíneas que constituem a figura seguinte são exibidos vários perfis de velocidades para diferentes valores de gama, variando apenas o valor de beta entre alíneas. Inicialmente são visíveis fortes variações no perfil de velocidades nos pontos de transição entre a zona de escorregamento e o núcleo do fluido muito dependentes do valor de gama em absoluto. Estas variações estão invariavelmente associadas ao efeito reofluidificante que tende a dissipar-se à medida que o valor de beta aumenta.

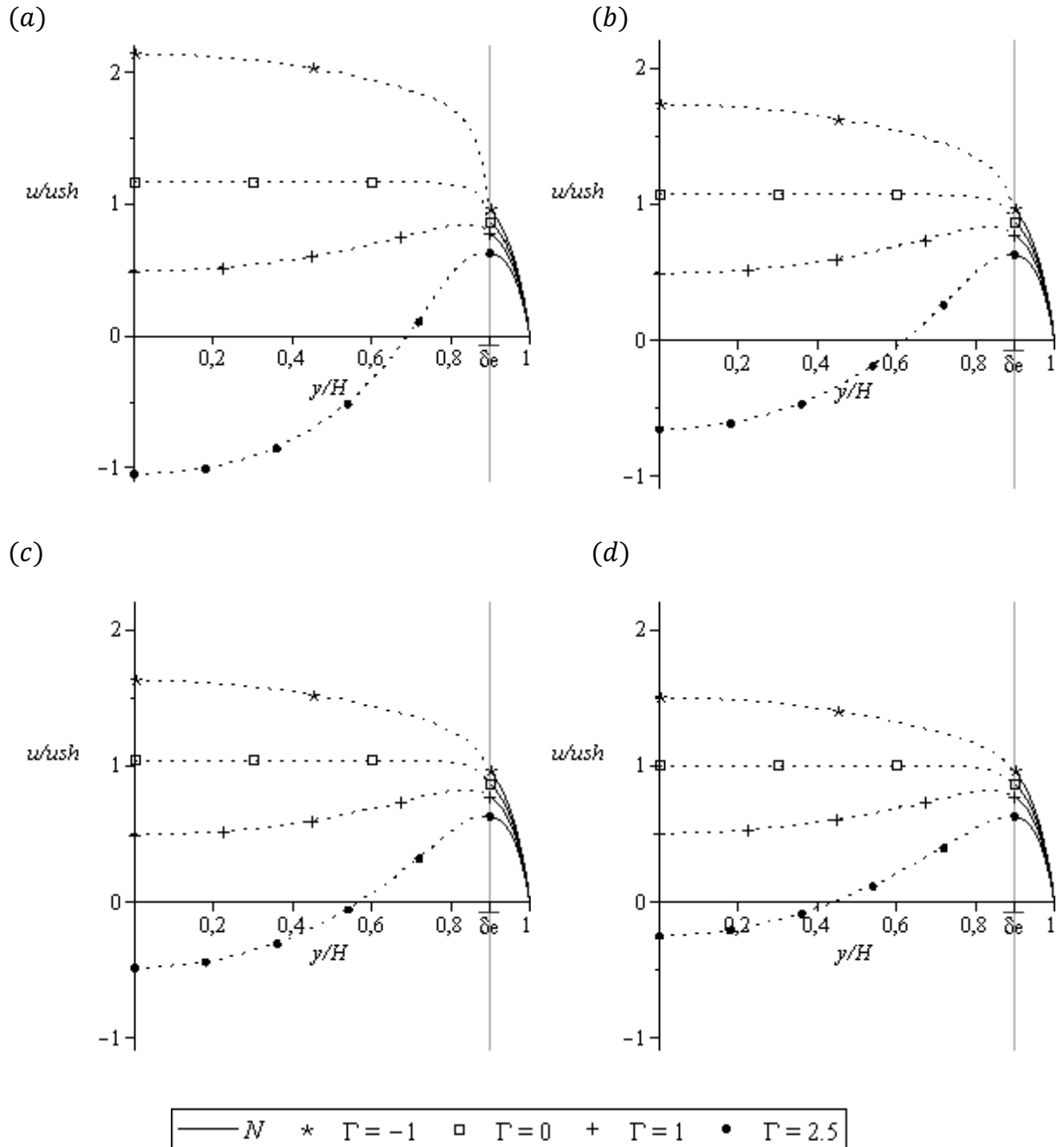
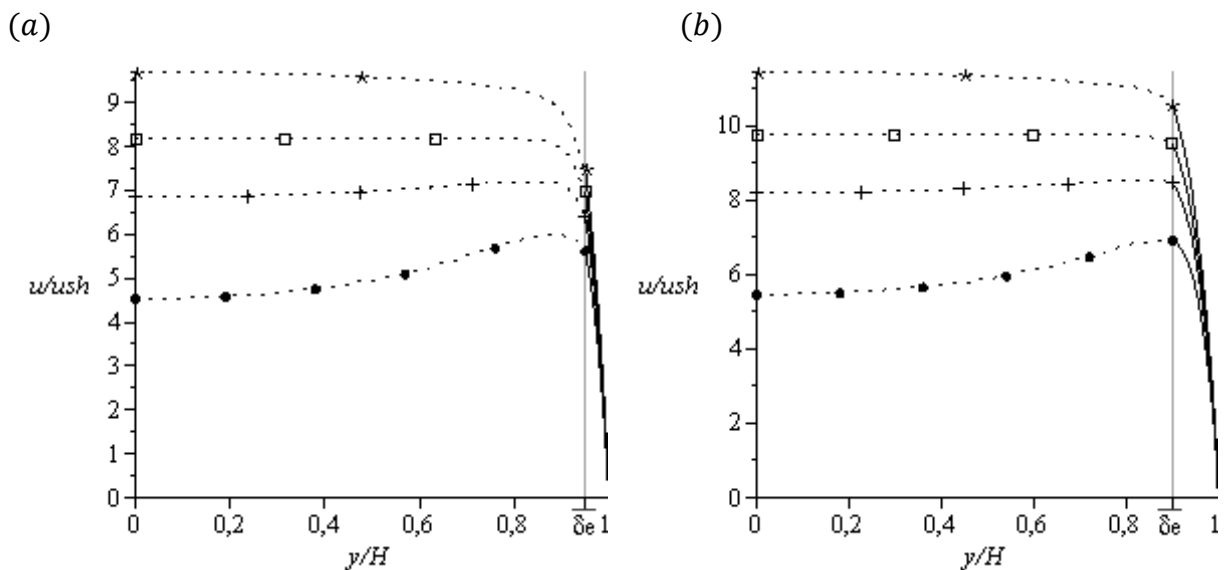


Figura 17: influência da camada de escorregamento num escoamento com a acção conjunta de forças de pressão e electro-osmose; (a) $\beta = 0.0001$, (b) $\beta = 0.2$, (c) $\beta = 0.4$, (c) $\beta = 1$. Os restantes parâmetros mantêm-se constantes entre alíneas com $\sqrt{\epsilon}De_k = 10$, $\bar{\kappa} = 20$ e $\bar{\delta}_e = 10$

Se compararmos estes resultados com dados obtidos anteriormente constata-se que a existência de uma camada de escorregamento tem uma influência negativa no escoamento, demonstrando uma redução generalizada das velocidades máximas entre cada perfil. Este aspecto não é totalmente realista, visto que a solução utilizada até aqui, não revela uma mais que provável diferença de viscosidades entre o núcleo do escoamento composto por solvente mais componente polimérica e a camada de escorregamento constituída apenas por solvente newtoniano. Esta diferença pode ser bastante assinalável com forte influência no desenvolvimento do perfil de velocidades. As figuras seguintes clarificam esse efeito levando em linha de conta, a diferença de viscosidades entre núcleo e camada de escorregamento. A introdução do parâmetro ϕ permite contabilizar a razão entre viscosidades ($\phi = \eta_p/\eta_s$) sem introduzir alterações substanciais na solução do problema.

Um aspecto que desde logo se manifesta é o facto da viscosidade total do fluido deixar de ser um parâmetro constante para todo o perfil de velocidades e acima de tudo, o facto da velocidade de Smoluchowski u_{sh} , que é usada na adimensionalização do problema, estar intimamente relacionada com viscosidade total η . Este aspecto afecta de forma bastante evidente os resultados, com particular influência na escala de valores associada à velocidade adimensional u/u_{sh} .

A figura seguinte tenta exemplificar de forma explícita a acção de uma camada de escorregamento, com uma viscosidade razoavelmente inferior à do núcleo, num escoamento idêntico ao demonstrado anteriormente. Ao sugerir um valor de $\phi = 10$, que equivale a $\eta_p = 10 \cdot \eta_s$, é detectável uma subida gradual dos diferentes perfis de velocidade à medida que a espessura da camada de escorregamento aumenta. Tendo em conta que o efeito reofluidificante existente no núcleo tende a dissipar-se com o aumento da espessura da camada do escorregamento, como descrito anteriormente, não deixa de ser interessante o facto desse comportamento não se evidenciar. De facto, a diferença entre as viscosidades do núcleo e da camada de escorregamento permite gerar valores em absoluto de velocidade do escoamento, consecutivamente superiores a cada aumento de espessura. Este aspecto é indiciador da relevância que uma camada de escorregamento pode exercer num escoamento em microcanal.



(c)

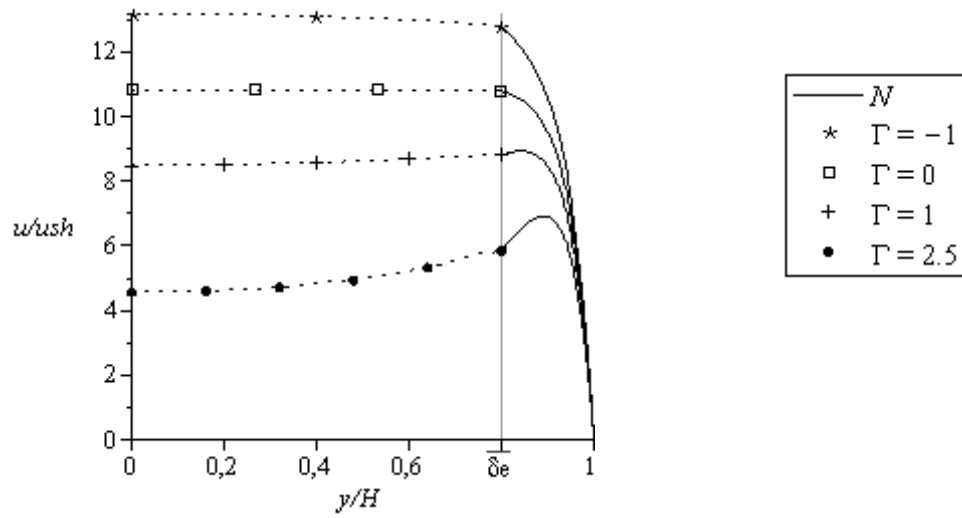


Figura 18: influência da camada de escorregamento num escoamento com a acção conjunta de forças de pressão e electro-osmose com uma viscosidade do polímero dez vezes superior à do solvente; (a) $\bar{\delta}_e = 20$, (b) $\bar{\delta}_e = 10$, (c) $\bar{\delta}_e = 5$. Os restantes parâmetros mantêm-se constantes entre alíneas com $\sqrt{\varepsilon}De_\kappa = 10$, $\bar{\kappa} = 20$ e $\phi = 10$.

7 Conclusões

Com este trabalho pretendia-se estudar as características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de um fluido viscoelástico descrito pela associação de dois modelos reológicos distintos. Trabalhos anteriores já deduziram soluções analíticas para escoamentos em microcanal de fluidos representados pelo modelo Phan-Thien-Tanner simplificado (sPTT), no entanto, a descrição reológica mais adequada considera que a tensão total do fluido é a soma de uma componente newtoniana para o solvente com uma componente polimérica, portanto $N+sPTT$.

Após comparação dos resultados obtidos é possível concluir que a inclusão de uma componente newtoniana na solução do problema produz alterações bastante evidentes, mesmo numa pequena fracção. É bastante notória a presença do solvente newtoniano no fluido viscoelástico, interferindo de imediato, no domínio de algumas das características inerentes de um fluido não newtoniano, como a viscosidade extensional ε e o tempo de relaxação λ do fluido, o que provoca invariavelmente uma atenuação do comportamento reofluidificante evidenciado por este tipo de fluidos.

No escoamento de um fluido viscoelástico é viável assumir a migração de macromoléculas poliméricas para junto ou longe da parede, consoante a química das forças de fronteira em jogo. A segunda hipótese é assumidamente mais frequente e foi alvo de estudo neste trabalho.

Tendo em conta que o comportamento reofluidificante está associado a altas taxas de corte, normalmente encontradas junto à parede, é importante considerar a possível formação de uma camada de escorregamentos na periferia do escoamento, que exhibe um comportamento newtoniano. Com uma espessura δ_e normalmente da mesma ordem de grandeza das macromoléculas que constituem a componente polimérica e presumindo que o comprimento seja superior à espessura da dupla camada EDL é admissível que este facto afecte de forma considerável o comportamento reofluidificante do núcleo viscoelástico do escoamento. Assim para uma grande variedade de sistemas não newtonianos, o facto de $\lambda_D \ll \delta_e$ indica que os efeitos electrocinéticos ficam confinados à região de solvente newtoniano adjacente à parede.

8 Referências

- [1] H. Lamb. *Hydrodynamics*, 6th edition, Cambridge, Cambridge University Press, 1932.
- [2] P.J. Oliveira, F.T. Pinho, Analytical solution for fully-developed channel and pipe flow of Phan-Thien–Tanner fluids, *J. Fluid Mech.* 387 (1999) 271–280.
- [3] D.O.A. Cruz, F.T. Pinho, P.J. Oliveira, Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelástico liquids with a Newtonian solvent contribution, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 132 (2005) 28–35.
- [4] A.M. Afonso, M. A. Alves and F. T. Pinho, Analytical solution of mixed electro-osmotic/ pressure driven viscoelastic fluids in microchannels, *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 159 (50-63) 2009.
- [5] F. F. Reuss, Sur un nouvel effet de l'électricité galvanique, *Mémoires de la Société Impériale des Naturalistes de Moscou*, 2 (327-337) 1809.
- [6] G. Wiedemann, Ueber die Bewegung von Flüssigkeiten im Kreise der geschlossenen galvanischen Säule. *Ann Phys.* 87 (321 – 52) 1852.
- [7] G. Quincke, Ueber die Fortführung materieller Theilchen durch strömende Elektrizität. *Ann Phys*, 113 (513–98) 1861.
- [8] H. Helmholtz, Über den einfluß H. Helmholtz, Über den Einfluß der elektrischen Grenzsichten bei galvanischer Spannung und der durch Wasserströmung erzeugten Potentialdifferenz, *Ann.* 7, (337) 1879.
- [9] M. von Smoluchowski, Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetic colloid Lösungen, *Z. Phys. Chem.* 92 (1917) 129-135
- [10] D. Burgreen and F. R. Nakache, Electrokinetic flow in ultrafine capillary slits, *J. Phys. Chem.*, 68 (1084-1091) 1964.
- [11] P. Dutta and A. Beskok, Analytical solution of combined electroosmotic/pressure driven flows in two-dimensional straight channels: finite Debye layer effects. *Anal. Chem.*, 73 (1979- 1986) 2001.
- [12] S. Das and S. Chakraborty, Analytical solutions for velocity, temperature and concentration distribution in electroosmotic microchannel flows in a non- Newtonian biofluid. *Anal. Chim. Acta*, 559 (15-24) 2006.
- [13] S. Chakraborty, Electroosmotically driven capillary transport of typical non-Newtonian biofluids in rectangular microchannels, *Anal. Chim. Acta*, 605 (175-184) 2007.
- [14] M. L. Olivares, L. Vera- Candiotti and C. L. A. Berli, The EOF of polymer solutions, *Electrophoresis*, 30 (921-929) 2009.
- [15] C. L. A. Berli and M. L. Olivares, Electrokinetic flow of non-Newtonian fluids in microchannels. *J. Colloid and Interface Science*, 320 (582-589) 2008.
- [16] J. J. Sousa, A. M. Afonso, F. T. Pinho, M. A. Alves, Effect of the skimming layer on electro-osmotic Poiseuille flows of viscoelastic fluids, (2009).
- [17] F.T. Pinho. Cálculo de escoamentos de fluidos não newtonianos em regime laminar – Desenvolvimentos e aplicações recentes da metodologia dos volumes finitos. Dezembro 2003
- [18] Howard A. Barnes, *A Handbook of elementary Rheology* Wirral England, University of Wales Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics University of Wales Aberystwyth, Penglais, Aberystwyth, Dyfed, Wales, SY23 3BZ. (2000)

- [19] R.B. Bird, R. C. Armstrong e O. Hassager (1996). Dynamics Of Polymeric Liquids - Volume 1, Wiley, New York (1977, 2nd edition 1987)
- [20] R.B. Bird, C. F. Curtiss, R. C. Armstrong e O. Hassager, Dynamics of Polymeric Liquids. Vol. 2 – Kinetic Theory. 2nd Ed. John Wiley & Sons, New York, (1987b).
- [21] H. Bruus, Theoretical Microfluidics, Oxford Master Series in Condensed Matter Physics, Oxford University Press, Oxford, UK, 2008.
- [22] P. Tabeling, Introduction to Microfluidic, Oxford University Press, Oxford New York, 2005.
- [23] N. Phan-Thien, R.I. Tanner, New constitutive equation derived from network theory, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 2 (1977) 353–365.
- [24] F. Pinho, F.T. Oliveira, Study of steady pipe and channel flows of a single-mode Phan Thien–Tanner fluid, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 101 (2001) 55–76.
- [25] M.A. Alves, P.J. Pinho, F.T. Oliveira, Study of steady pipe and channel flows of a single-mode Phan Thien–Tanner fluid, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 101 (2001)55-76.
- [26] D.O.A. Cruz, F.T. Pinho, Skewed Poiseuille-Couette flows of sPTT fluids in concentric annuli and channels, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 121 (2004) 1–14.
- [27] M.A.M. Alves, Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos em Regime Laminar: Análise Numérica, Teórica e Experimental. Tese de Doutoramento, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, 2004.
- [28] Erwin Kreyszig, Advanced Engineering Mathematics, 9th Ed, John Wiley & Sons, Hoboken, (2006).
- [29] T. Apostol, Calculus Vol.2, 2nd Ed, John Wiley & Sons, New York, 1967-1969
- [30] H.A. Stone, A.D. Stroock, and A. Ajdari, Engineering flows in small devices: Microfluidics toward a lab-on-a-chip, Annual Review of Fluid Mechanics 36, (381-411) 2004.
- [31] A. Madureira, Lições de Álgebra Superior e Geometria Analítica, 2^a edição, Porto Editora, 1948.

ANEXO A: Solução da equação cúbica

$$\bar{\tau}_{xy,s}^3 = \frac{1}{54 \varepsilon De_k^2 \beta} \left[\frac{\bar{y} \Gamma}{\bar{\kappa}} - \frac{\sinh(k y)}{\cosh(k H)} \right] - \frac{1}{18 \varepsilon De_k^2 \beta} \bar{\tau}_{xy,s} \quad (A.1)$$

$$\bar{\tau}_{xy,p}^3 + 3A \bar{\tau}_{xy,p} - 2B = 0 \quad (A.2)$$

$$3A = \frac{1}{18 \beta \varepsilon De_k^2} \quad \text{e} \quad 2B = \frac{1}{54} \frac{\Gamma}{\beta \varepsilon De_k^2 \bar{\kappa}} \left[\bar{y} - \frac{\bar{\kappa}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \right] \quad (A.3)$$

$$\bar{\tau}_{xy,1} = \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \quad (A.4)$$

$$\begin{aligned} \bar{\tau}_{xy,p_2} = & -\frac{1}{2} \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} + \frac{1}{2} \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \\ & + \frac{1}{2} I \sqrt{3} \left(\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \right) \end{aligned} \quad (A.5)$$

$$\begin{aligned} \bar{\tau}_{xy,p_3} = & -\frac{1}{2} \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} + \frac{1}{2} \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \\ & - \frac{1}{2} I \sqrt{3} \left(\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \right) \end{aligned} \quad (A.6)$$

$$\frac{du}{dy} = \frac{1}{\eta_p} \tau_{xy,p} + \frac{2 \varepsilon \lambda^2}{\eta_p^3} \tau_{xy,p}^3 \quad (A.7)$$

$$\frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} = 3 \bar{\kappa} \bar{\tau}_{xy,p} + 54 \bar{\kappa} \varepsilon De_k^2 \bar{\tau}_{xy,p}^3 \quad (A.8)$$

$$\beta \left(\frac{1}{3 \bar{\kappa}} \right) \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} + (1 - \beta) \bar{\tau}_{xy,p_1} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{\kappa}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{\kappa}} \quad (A.9)$$

ANEXO B: Detalhes da solução do 2º caso

Solução analítica do modelo do fluido de newton no interior da camada de escorregamento para $(H - \delta_e \leq y \leq H)$.

Após derivação da equação de Cauchy, introduzindo a condição de fronteira na interface $(y = H - \delta_e)$ entre a camada de escorregamento e o núcleo do escoamento, que assume uma tensão de corte nula, obtém-se a seguinte equação explícita em relação à tensão de corte do solvente.

$$\tau_{xy,s} = \epsilon \psi_o E_x \frac{\sinh(k y)}{\cosh(k H)} + P_x y \quad (\text{B.1})$$

Seguindo o modelo newtoniano, facilmente obtemos a velocidade de deformação $\frac{du}{dy}$

$$\eta_s \frac{du}{dy} = \epsilon \psi_o E_x \frac{\sinh(k y)}{\cosh(k H)} + P_x y \quad (\text{B.2})$$

Seguidamente inicia-se o tratamento adimensional que permite generalizar a solução, com especial atenção para o parâmetro ϕ que substitui o parâmetro β até aqui utilizado.

$$\bar{y} = y / H ;$$

$$\bar{k} = kH ;$$

$$\eta = \eta_p + \eta_s ;$$

$$\eta_p = \phi \eta_s ;$$

$$\beta = \frac{\eta_s}{(\eta_s + \eta_p)} \equiv \left(\frac{1}{1 + \phi} \right) ;$$

$$\eta_p = \left(\frac{\phi}{1 + \phi} \right) \eta ;$$

$$\eta_s = \left(\frac{1}{1 + \phi} \right) \eta ;$$

$$\bar{\tau}_{xy,s} = \frac{\tau_{xy,s}}{3 \eta_s u_{sh} k} ;$$

$$u_{sh} = -\epsilon \psi_o E_x / \eta ;$$

$$\Gamma = -P_x H^2 / (\epsilon \psi_o E_x) .$$

A equação adimensionalizada a integrar para obtenção do perfil de velocidades com a condição de fronteira de velocidade nula na parede, para $\bar{u}(1) = 0$.

$$\left(\frac{1}{1 + \phi} \right) \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} + = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{k}} \quad (\text{B.4})$$

Solução analítica para o perfil de velocidade dentro da camada de escorregamento

$$\bar{u} = (1 + \phi) \left[1 - \frac{\cosh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} + \frac{1}{2} (\bar{y}^2 - 1) \right], \quad \text{se} \left(1 - \frac{\delta_e}{H} \leq \bar{y} \leq 1 \right) \quad (\text{B.5})$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

Solução numérica para o fluido composto por solvente newtoniano associado a uma componente polimérica correspondente ao núcleo viscoso que circula fora da zona de escorregamento limitada entre $(0 \leq y \leq H - \delta_e)$.

$$\tau_{xy,s} + \tau_{xy,p} = \epsilon \psi_o E_x \frac{\sinh(k y)}{\cosh(k H)} + P_{,x} y \quad (\text{B.6})$$

Parâmetros de adimensionalização:

$$\begin{aligned} \bar{y} &= y / H ; \\ \bar{k} &= kH ; \\ \eta &= \eta_p + \eta_s ; \\ \eta_p &= \phi \eta_s ; \\ \beta &= \frac{\eta_s}{(\eta_s + \eta_p)} \equiv \left(\frac{1}{1 + \phi} \right) ; \\ \eta_p &= \left(\frac{\phi}{1 + \phi} \right) \eta ; \\ \eta_s &= \left(\frac{1}{1 + \phi} \right) \eta ; \\ \bar{\tau}_{xy,s} &= \frac{\tau_{xy,s}}{3 \eta_s u_{sh} k} ; \\ \bar{\tau}_{xy,p} &= \frac{\tau_{xy,p}}{3 \eta_p u_{sh} k} ; \\ u_{sh} &= -\epsilon \psi_o E_x / \eta ; \\ \Gamma &= -P_{,x} H^2 / (\epsilon \psi_o E_x) . \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

A equação seguinte apresenta a adimensionalização da eq. (B.6)

$$\left(\frac{1}{1 + \phi} \right) \bar{\tau}_{xy,s} + \left(\frac{\phi}{1 + \phi} \right) \bar{\tau}_{xy,p} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{k}} \quad (\text{B.8})$$

Seguidamente faz-se a substituição da tensão de corte do solvente $\bar{\tau}_{xy,s}$, pela expressão em ordem à velocidade de deformação adimensional $\frac{d\bar{u}}{d\bar{y}}$ definida anteriormente.

$$\left(\frac{1}{1 + \phi} \right) \left(\frac{1}{3 \bar{k}} \right) \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} + \left(\frac{\phi}{1 + \phi} \right) \bar{\tau}_{xy,p} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{k}} \quad (\text{B.9})$$

Expressão da velocidade de deformação em ordem à tensão de corte da componente polimérica, definida pelo modelo sPTT na forma adimensional.

$$\frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} = 3 \bar{k} \bar{\tau}_{xy,p} (1 + 18 \epsilon De_k^2 \bar{\tau}_{xy,p}^2) \quad (\text{B.10})$$

Após substituição do termo $\frac{d\bar{u}}{d\bar{y}}$, dado pela equação anterior, obtemos a seguinte expressão:

$$\left(\frac{1}{1 + \phi} \right) \bar{\tau}_{xy,p} (1 + 18 \epsilon De_k^2 \bar{\tau}_{xy,p}^2) + \left(\frac{\phi}{1 + \phi} \right) \bar{\tau}_{xy,p} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \frac{\Gamma}{3 \bar{k}} \quad (\text{B.11})$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

A simplificação da equação anterior permite-nos obter a eq.(B.12), que é uma equação cúbica em ordem a $\bar{\tau}_{xy,p}$

$$18 \left(\frac{1}{1 + \phi} \right) \varepsilon De_k^2 \bar{\tau}_{xy,p}^3 + \bar{\tau}_{xy,p} = \left[\bar{y} - \frac{\bar{k}}{\Gamma} \frac{\sinh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \quad (\text{B.12})$$

A simplificação da equação anterior é o primeiro passo na obtenção de uma solução real, dentro do intervalo escolhido para cada um dos diferentes parâmetros que a constituem.

$$\bar{\tau}_{xy,p}^3 + 3A \bar{\tau}_{xy,p} - 2B = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$3A = \frac{1+\phi}{18 \varepsilon De_k^2} \quad \text{e} \quad 2B = \frac{1}{54} \frac{1+\phi}{\varepsilon De_k^2 \bar{k}} \left[\Gamma \bar{y} - \frac{\bar{k} \sinh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \quad (\text{B.14})$$

Embora tenha existido uma substituição de um parâmetro em relação à solução obtida para o 1º caso, a raiz seleccionada continua a ser a mesma, já que os valores admissíveis para o parâmetro introduzido ϕ variam apenas positivamente e logo, não alteram o sentido da solução a obter.

$$\bar{\tau}_{xy,p} = \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \quad (\text{B.15})$$

Finalmente, a solução numérica para o perfil de velocidades pode ser obtida após integração da equação seguinte com a introdução da condição de não escorregamento na interface. A velocidade na interface está definida na eq. (B.17) e é obtida analiticamente a partir da equação (B.5) definida anteriormente, no ponto referente à localização da interface da camada de escorregamento $\bar{y}_{\delta_e} = 1 - \frac{\delta_e}{H}$

$$\int_{\bar{u}}^{\bar{u}_{\delta_e}} \frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} d\bar{y} = \int_{\bar{y}}^{\bar{y}_{\delta_e}} \left[(1 + \phi) \left(\Gamma \bar{y} - \frac{\bar{k} \sinh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right) - \phi 3\bar{k} \cdot \bar{\tau}_{xy,p} \right] d\bar{y} \quad (\text{B.16})$$

$$\bar{u}_{\delta_e} = 1 - \frac{\cosh(\bar{k} \bar{y}_{\delta_e})}{\cosh(\bar{k})} + \frac{1}{2} (\bar{y}_{\delta_e}^2 - 1), \quad \bar{y}_{\delta_e} = 1 - \frac{\delta_e}{H} \quad (\text{B.17})$$

ANEXO C: Componentes da velocidade

Perfil de velocidades (\bar{u}_p) por acção apenas de gradiente de pressão [$E_x = 0$]

$$\tau_{xy,p}^3 = \frac{1}{2} \frac{\eta_p^3}{\eta_s \varepsilon \lambda^2} \left[+P_x y - \left(1 + \frac{\eta_s}{\eta_p} \right) \tau_{xy,p} \right] \quad (C.1)$$

$$\bar{y} = y / H, \bar{k} = kH;$$

$$\beta = \eta_s / (\eta_s + \eta_p);$$

$$\bar{\tau}_{xy,i} = \tau_{xy,i} / (3 \eta_i u_{sh} k);$$

$$\bar{\tau}_{xy,s} = \frac{\tau_{xy,s}}{3 \eta_s u_{sh} k}; \quad (C.2)$$

$$\bar{\tau}_{xy,p} = \frac{\tau_{xy,p}}{3 \eta_p u_{sh} k};$$

$$u_{sh} = -\varepsilon \psi_o E_x / (\eta_s + \eta_p);$$

$$\Gamma = -P_x H^2 / (\varepsilon \psi_o E_x).$$

$$\bar{\tau}_{xy,p}^3 = \frac{1}{54 \varepsilon De_k^2 \beta} \left(\frac{\bar{y} \Gamma}{\bar{k}} \right) - \frac{1}{18 \varepsilon De_k^2 \beta} \bar{\tau}_{xy,p} \quad (C.3)$$

$$\bar{\tau}_{xy,p}^3 + 3A \bar{\tau}_{xy,p} - 2B = 0 \quad (C.4)$$

$$3A = \frac{1}{18 \beta \varepsilon De_k^2} \quad \text{e} \quad 2B = \frac{1}{54} \frac{\Gamma}{\beta \varepsilon De_k^2 \bar{k}} \left(\frac{\bar{y} \Gamma}{\bar{k}} \right) \quad (C.5)$$

$$\bar{\tau}_{xy,p_1} = \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \quad (C.6)$$

O perfil de velocidade \bar{u}_p é obtido por integração numérica da equação seguinte.

$$\beta \frac{d\bar{u}_p}{d\bar{y}} = \bar{y} \Gamma - (1 - \beta) 3\bar{k} \bar{\tau}_{xy,p_1} \quad (C.7)$$

Características do escoamento forçado por electro-osmose e gradiente de pressão de uma solução polimérica com solvente newtoniano num canal bidimensional

Perfil de velocidades (\bar{u}_{EO}) por acção de electro-osmose pura [$P_x = 0$]

$$\tau_{xy,p}^3 = \frac{1}{2} \frac{\eta_p^3}{\eta_s \varepsilon \lambda^2} \left[\varepsilon \psi_o E_x \frac{\sinh(k y)}{\cosh(k H)} - \left(1 + \frac{\eta_s}{\eta_p} \right) \tau_{xy,p} \right] \quad (C.8)$$

Após adimensionalização utilizando os mesmos parâmetros descritos em (C.2) obtemos a seguinte equação:

$$\bar{\tau}_{xy,p}^3 = -\frac{1}{54 \varepsilon D e_k^2 \beta} \left[\frac{\sinh(k y)}{\cosh(k H)} \right] - \frac{1}{18 \varepsilon D e_k^2 \beta} \bar{\tau}_{xy,p} \quad (C.9)$$

$$\bar{\tau}_{xy,p}^3 + 3A \bar{\tau}_{xy,p} - 2B = 0 \quad (C.10)$$

$$3A = \frac{1}{18 \beta \varepsilon D e_k^2} \quad \text{e} \quad 2B = -\frac{1}{54} \frac{\Gamma}{\beta \varepsilon D e_k^2 \bar{\kappa}} \left[\frac{\bar{\kappa} \sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \right] \quad (C.11)$$

$$\bar{\tau}_{xy,p_1} = \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \quad (C.12)$$

O perfil de velocidade \bar{u}_{EO} é obtido por integração numérica da equação seguinte.

$$\beta \frac{d\bar{u}_{EO}}{d\bar{y}} = (\beta - 1) 3\bar{\kappa} \bar{\tau}_{xy,p_1} - \bar{\kappa} \frac{\sinh(\bar{\kappa} \bar{y})}{\cosh(\bar{\kappa})} \quad (C.13)$$

ANEXO D: Perfil de viscosidade

Para obtenção do perfil de viscosidade admite-se:

$$\mu(\dot{\gamma}) \equiv \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}} \quad (\text{D.1})$$

No caso da viscosidade adimensional utiliza-se a seguinte expressão:

$$\frac{\mu(\dot{\gamma})}{\eta} = \frac{(\beta) \bar{\tau}_{xy,s} + (1 - \beta) \bar{\tau}_{xy,p}}{\bar{\gamma}} \quad (\text{D.2})$$

O trabalho de adimensionalização origina uma equação com uma solução que depende apenas de $\bar{\tau}_{xy,p}$

$$\frac{\mu(\dot{\gamma})}{\eta} = 3 \bar{k} \left(\frac{\beta}{3 \bar{k}} + \frac{(1 - \beta) \bar{\tau}_{xy,p}}{3 \bar{k} \bar{\tau}_{xy,p} (1 + 18 \varepsilon De_k^2 \bar{\tau}_{xy,p}^2)} \right) \quad (\text{D.3})$$

Substituindo a tensão de corte polimérica $\bar{\tau}_{xy,p}$ pela solução fornecida na equação (5.20) obtém-se uma equação que define a variação da viscosidade adimensional ao longo da largura do canal.

$$\bar{\tau}_{xy,p} = \sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}} - \frac{A}{\sqrt[3]{B + \sqrt{A^3 + B^2}}} \quad (\text{D.4})$$

$$A = \frac{1}{54 \beta \varepsilon De_k^2} \quad B = -\frac{1}{108} \frac{\Gamma}{\beta \varepsilon De_k^2 \bar{k}} \left[\frac{\bar{k} \sinh(\bar{k} \bar{y})}{\cosh(\bar{k})} \right] \quad (\text{D.5})$$

Finalmente, resta apenas substituir a variável independente \bar{y} pela variável χ que caracteriza a evolução do perfil de viscosidade com o aumento do distanciamento à parede.

$$\chi = (1 - \bar{y}) \bar{k} \quad (\text{D.6})$$