

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO EM FÍSICA

Alysson Nogueira de Magalhães

Análise de um Micromixer Passivo Rômbico de Colisões Desequilibradas com
Subcanais Deslocados

Maceió, 2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO EM FÍSICA

Alysson Nogueira de Magalhães

Análise de um Micromixer Passivo Rômbico de Colisões Desequilibradas com
Subcanais Deslocados

Dissertação de mestrado apresentada no
Instituto de Física da Universidade Federal de
Alagoas como requisito para obtenção do título
de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Vinicius Dias Vermelho
Coorientador: Prof. Dr. David Vieira Sampaio

Maceió, 2022

Catálogo na Fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

M188a Magalhães, Alysson Nogueira de.

Análise de micromixer passivo rômico de colisões desequilibradas com subcanais deslocados / Alysson Nogueira de Magalhães. – 2022.
98 f. : il. color.

Orientador: Marcos Vinicius DiasVermelho.

Co-orientador: David Vieira Sampaio.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2022.

Bibliografia: f. 93-98.

1. Microfluídica. 2. Micromixers. 3. Colisão desequilibrada. I. Título.

CDU: 532

AGRADECIMENTOS

Esse trabalho só foi possível graças ao acolhimento e incentivo de algumas pessoas queridas a mim.

Agradeço à minha mãe, Martinha, por sempre cuidar de mim, mesmo estando à 131 Km de distância; e ao meu pai, Dilsinho, que tenho certeza de que estaria por perto se eu precisasse, sem pensar duas vezes.

Agradeço às minhas irmãs, Adriana e Ana Paula, pela pressão, incentivo e acolhimento nos altos e baixos de todo o processo. Somos irmãos, mas as duas também são mães para mim.

Agradeço à minha esposa, Patrícia, por me aguentar todos os dias com companheirismo, carinho, amor e paciência (nem sempre). Eu não conseguiria realizar esse trabalho sem a sua companhia todas as manhãs e noites. Obrigado por ouvir todas as minhas besteiras e ideias mirabolantes. Obrigado pelo acolhimento sempre que preciso. Espero estar contribuindo do mesmo jeito em sua jornada.

Agradeço aos meus sogros, pela assistência e teto nessa cidade mal planejada e por serem as figuras paternas enquanto meus pais estão distantes.

Agradeço aos professores Marcos Vermelho e David Sampaio, por serem meus mentores e por viabilizarem a execução desse trabalho em um período em que o "normal" deixou de existir.

Por fim, agradeço aos colegas técnicos Ana Rúbia e Victor Xavier, aos camaradas de jogatina da styx e aos colegas de pós-graduação Vinícius, Ícaro, Carol e Everton.

RESUMO

Neste trabalho, analisamos numericamente a capacidade de mistura de um novo tipo de micromixer passivo planar, que utiliza colisões desequilibradas promovidas por subcanais assimétricos com deslocamentos súbitos. As equações de Navier-Stokes, a equação de continuidade e a equação de difusão-convecção foram resolvidas utilizando o método dos elementos finitos. Dentre as condições de contorno utilizadas, sete escoamentos diferentes foram testados, variando o número de Reynolds de 5 a 100. A principal característica dos modelos propostos é a adoção de um deslocamento no mais largo dos subcanais assimétricos. Esses deslocamentos apresentam constrições que alteram o campo de velocidade, gerando linhas de fluxo mais velozes e vórtices secundários. Essas estruturas hidrodinâmicas são capazes de aumentar a área de contato entre dois fluidos, favorecendo sua mistura ao acelerar o processo de difusão. Três modelos de micromixers foram propostos, onde cada micromixer possui um deslocamento diferente seguindo uma regra de proporção. O índice de mistura, que é um parâmetro utilizado para medir a eficiência de micromixers, e a queda de pressão para cada caso foram calculados e analisados. As simulações mostraram que os deslocamentos geraram vórtices de recirculação e modificaram o choque desequilibrado nas zonas de recombinação dos micromixers, promovendo Advecção Caótica. Todos os três modelos propostos, W_r 0,5, W_r 1,0 e W_r 2,0, obtiveram maiores eficiências que o modelo de referência em todos os Re com exceção de Re 100. Para números de Reynolds menores, médios e maiores, os micromixers W_r 2,0, W_r 1,0 e W_r 0,5 apresentaram as maiores eficiências, respectivamente, com W_r 0,5 atingindo um de mistura de 85% em Re 100. Enquanto W_r 0,5 teve as menores quedas de pressão, W_r 2,0 obteve as maiores devido aos deslocamentos mais apertados.

Palavras-chave: Microfluídica; Micromixers passivos; Colisão Desequilibrada.

ABSTRACT

In this work, we numerically analyze the mixing capabilities of a new type of planar passive micromixer, which uses unbalanced collisions promoted by asymmetrical subchannels with sudden displacements. The Navier-Stokes equations, the continuity equation and the diffusion-convection equation were solved using the finite element method. Among the boundary conditions used, seven different flows were tested, varying the Reynolds number from 5 to 100. The main characteristic of the proposed models is the adoption of a displacement in the widest of the asymmetrical subchannels. These displacements have constrictions that alter the velocity field, generating faster flow lines and secondary vortices. These hydrodynamic structures can increase the contact area between two fluids, favoring their mixing by accelerating the diffusion process. Three models of micromixers were proposed, where each micromixer has a different displacement following a rule of proportion. The mixing index, which is a parameter used to measure the efficiency of micromixers, and the pressure drop for each case were calculated and analyzed. The simulations showed that the displacements generated expansion vortices and modified the unbalanced shock in the recombination zones of the micromixers, promoting Chaotic Advection. All three proposed models, W_r 0.5, W_r 1.0 and W_r 2.0, obtained higher efficiencies than the reference model in all Re except for Re 100. For lower, medium, and higher Reynolds numbers, the W_r 2.0, W_r 1.0 and W_r 0.5 micromixers showed the highest efficiencies, respectively, with W_r 0.5 achieving an 85% mixing at Re 100. While W_r 0.5 had the lowest pressure drops, W_r 2.0 got the highest due to tighter displacements.

Keywords: Microfluidics; Passive Micromixers; Unbalanced Collision.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Perna de ácaro sobre drive (MEMS) de espelhos microscópicos..	14
Figura 1.2 - Lab-on-a-chip para a detecção de carcinoma epidermóide oral..	15
Figura 1.3 - Esquema mostrando os componentes do micromixer usado para geração de nanopartículas através de ondas sonoras.....	18
Figura 1.4 - Esquema do Micromixer acústico de Ahmed e Esquema do Micromixer magnético de Veldurthi.....	20
Figura 1.5 - Exemplos de micromixers passivos: planar e tridimensional..	21
Figura 1.6 - Experimento e simulação do micromixer Floyd gerando um perfil multilaminado.	22
Figura 1.7 - Esquemas de Micromixers planares de Hossain.	23
Figura 1.8 - Esquema do micromixer em espiral e experimento.	23
Figura 1.9 - Esquema representando o micromixer com paredes convergentes e divergentes de Afzal e colaboradores.	24
Figura 1.10 - Esquemas representando o micromixer de SAR 3D de Lee.	25
Figura 1.11 - Esquemas representando os micromixers planares de Ansari com colisões equilibradas e desequilibradas em um escoamento de Re 60.....	26
Figura 1.12 - Esquema 3D de modelo desenvolvido por Li.	26
Figura 1.13 - Esquemas de micromixers desenvolvidos por Raza.....	27
Figura 1.14 - Esquema de Micromixer rômbico com estruturas defletoras nas zonas de recombinação e Fotografia de Micromixer em S com estruturas defletoras	28
Figura 1.15 - Esquemas de um dos modelos de micromixer com o subcanal maior deslocado e Modelo de referência de Ansari com proporção de 3:1 das larguras dos subcanais.	28
Figura 2.1 - Volumes de controle com variações na densidade de momento. .	35
Figura 2.2 - Esquema exemplificando a difusão entre moléculas de dois fluidos diferentes.....	41
Figura 2.3 - Volumes de controle com variações de fração de concentração de um escalar	42
Figura 2.4 - Distribuição do escalar em diferentes instâncias de tempo.	47

Figura 2.5 - Esquema representando o comportamento da concentração de um escalar em um sistema microfluídico sem estruturas de mistura.	47
Figura 2.6 - Esquema exemplificando a diminuição da espessura de estriação através de um vórtex.	51
Figura 2.7 - Esquema exemplificando a transformação do padeiro e micromixer desenhado para gerar estruturas similares à transformação do padeiro com a utilização de buracos que guiam o fluxo.	51
Figura 2.8 - Focalização hidrodinâmica.....	52
Figura 2.9 - Esquema com vórtices de Dean gerados por um canal de curvo de largura w e raio de curvatura R	53
Figura 2.10 - Linhas de fluxo formando um vórtex de expansão após aumento abrupto da área da seção transversal.	54
Figura 3.1 - Diagrama destacando as dimensões geométricas do modelo rômico de colisões desequilibradas com subcanais deslocados. Modelo da figura: Wr 1,0.56	
Figura 3.2 - Diagrama destacando os deslocamentos nos subcanais maiores.	58
Figura 3.3 - Aspectos da malha prismática utilizadas para as simulações.....	62
Figura 3.4 - Teste de Convergência das malhas prismáticas.....	63
Figura 3.5 - Planos transversais (em amarelo) onde se calculam as médias das pressões na entrada e saída dos micromixers para calcular a queda de pressão.	64
Figura 4.1 - Principais Estruturas Geométricas dos Micromixers.	66
Figura 4.2 - Escala colorida de fração de concentração.	66
Figura 4.3 - Recortes transversais na Junção em T.....	67
Figura 4.4 - Campo Vetorial da Velocidade Transversal na entrada dos subcanais maiores.....	68
Figura 4.5 - Fração de Concentração nas entradas dos subcanais maiores. ..	68
Figura 4.6 - Linhas de fluxo nos primeiros deslocamentos em escoamentos de Re 5.	69
Figura 4.7 - Efeitos da redução de tamanho nos perfis transversais de concentração.	69
Figura 4.8 - Linhas de fluxo após o primeiro deslocamento dos modelos propostos	70
Figura 4.9 - Perfis transversais de concentração após o primeiro deslocamento.	71

Figura 4.10 - Linhas de fluxo nas curvas de 90° e perfis de concentração no plano transversal da curva.	72
Figura 4.11 - Vórtices de Dean após a curva de 90° do primeiro subcanal maior..	73
Figura 4.12 - Perfis transversais de concentração após a curva do primeiro subcanal maior..	73
Figura 4.13 - Enfraquecimento dos vórtices de Dean após a curva de 90° no subcanal maior.	74
Figura 4.14 - Linhas de fluxo nas zonas de recombinação..	75
Figura 4.15 - Campo de concentração para o caso $Wr\ 2,0\ Re\ 5$	75
Figura 4.16 - Perfis de concentração dentro da primeira zona de recombinação..	76
Figura 4.17 - Perfis Transversais de concentração das zonas de recombinação para o modelo $W_f\ 0,5$	77
Figura 4.18 - Perfis Transversais de concentração das zonas de recombinação para o modelo $Wr\ 1,0$	77
Figura 4.19 - Perfis Transversais de concentração das zonas de recombinação, para o modelo $Wr\ 2,0$	78
Figura 4.20 - Perfis Transversais de concentração das zonas de recombinação para o modelo de controle.	78
Figura 4.21 - Índices de Mistura em função do Número de Reynolds.....	79
Figura 4.22 - Quedas de Pressão em função do Número de Reynolds	82
Figura 4.23 - Níveis de pressão nas primeiras câmaras de mistura dos modelos estudados.....	84
Figura 4.24 - Níveis de pressão para todos os micromixers com $Re\ 60$, na primeira zona de recombinação.	85
Figura 4.25 - Cortes Longitudinais dos campos de velocidade para $Re\ 60$ e todos os micromixers.	85

SUMÁRIO

RESUMO	5
1. INTRODUÇÃO	13
1.1 MICROFLUÍDICA E APLICAÇÕES	14
1.2 MISTURA EM MICROFLUÍDICA – MICROMIXERS.....	18
1.3 MICROMIXERS PASSIVOS	21
1.3.1 Exemplos de Micromixers Passivos.....	22
1.3.2 Micromixers passivos baseados em colisões desequilibradas	24
1.3.3 O uso de constrições	26
1.4 OBJETIVOS GERAIS	29
1.5 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	29
2. REVISÃO TEÓRICA	30
2.1 CONCEITOS BÁSICOS.....	30
2.1.1 Flúidos.....	30
2.1.2 A hipótese do contínuo e as partículas de fluído	31
2.2 EQUAÇÕES DE MOVIMENTO DA HIDRODINÂMICA.....	32
2.2.1 Conservação da Massa	32
2.2.2 Conservação do Momento	33
2.2.3 O Número de Reynolds.....	38
2.3 TRANSPORTE DE ESCALARES E O PROCESSO DE MISTURA.....	40
2.3.1 Fluxos de escalares - Difusão e Convecção	40
2.3.2 Adimensionalização da equação de difusão-convecção	42
2.4 O PROCESSO FÍSICO DA MISTURA.....	44
2.4.1 Difusão como uma caminhada aleatória	44
2.4.2 Um Exemplo Útil para Micromixers	45
2.4.3 Tempo de Permanência.....	48
2.5 MECANISMOS E TÉCNICAS DE MISTURA PASSIVA.....	49
2.5.1 Mistura Caótica.....	49
2.5.2 Redução de Tamanho e Focalização Hidrodinâmica.	52
2.5.3 Vórtices Secundários de Dean.....	53
2.5.4 Vórtices de Expansão	54

3. CONSTRUÇÃO GEOMÉTRICA DOS MICROMIXERS E DEMAIS	
METODOLOGIAS	55
3.1 PARÂMETROS GEOMÉTRICOS DOS MICROMIXERS.....	56
3.2 ANÁLISE NUMÉRICA	58
3.2.1 <i>Condições de Contorno</i>	59
3.2.2 <i>Discretização e Estudo de Malha</i>	61
3.3 ANÁLISE DE DADOS	63
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	65
4.1 EFEITOS DA GEOMETRIA SOBRE OS CAMPOS DE VELOCIDADE E CONCENTRAÇÃO	
65	
4.1.1 <i>Junção em T</i>	67
4.1.2 <i>Bifurcação</i>	67
4.1.3 <i>Deslocamento e Construção</i>	69
4.1.4 <i>Curva de 90°</i>	71
4.1.5 <i>Zona de Recombinação</i>	74
4.2 EVOLUÇÃO DOS CAMPOS DE CONCENTRAÇÃO.	76
4.3 ÍNDICES DE MISTURA	79
4.4 QUEDAS DE PRESSÃO.....	82
5. CONCLUSÃO	88
REFERÊNCIAS.....	90

1. INTRODUÇÃO

Neste trabalho, foi proposto e analisado numericamente um novo modelo de micromixer passivo. O modelo proposto tem como referência um modelo planar, rômbo, de separação e recombinação com subcanais desequilibrados, proposto por Ansari e colaboradores em 2010. O modelo de referência possui quedas de pressão abaixo de 5KPa, que é considerado um valor baixo, mas possui eficiências de mistura de no máximo 53% em um escoamento de Re 100. Reconhecendo-se o potencial do modelo, buscou-se aprimorá-lo com a implementação de deslocamentos laterais nos subcanais maiores, objetivando aumentar o processo de mistura por advecção caótica enquanto mantêm uma queda de pressão baixa para os padrões da literatura. O modelo proposto foi analisado em simulações numéricas utilizando o método dos elementos finitos por meio do software COMSOL multiphysics.

Este documento é dividido em quatro seções. Neste capítulo será introduzido o contexto do trabalho, que passa pela exploração da Microfluídica, levando ao problema da mistura em Microfluídica e chegando em seguida às soluções, os micromixers, que são dispositivos desenhados para acelerar o processo de difusão. No fim do capítulo será apresentado o modelo proposto.

Na segunda seção, comenta-se sobre alguns conceitos teóricos importantes para o entendimento do funcionamento dos micromixers passivos. Desenvolve-se as equações de movimento da hidrodinâmica e a equação de transporte de escalares, que são necessárias para a previsão da eficiência dos micromixers. Em seguida, alguns conceitos mais importantes para o processo de mistura.

Os detalhes metodológicos do trabalho serão dados na terceira seção. Explica-se como se dá a construção geométrica dos micromixers propostos e detalhes sobre as simulações numéricas usadas para calcular a eficiência dos modelos.

Por fim, os resultados qualitativos e quantitativos obtidos pelas simulações são expostos na quarta seção. Detalhes qualitativos dos campos de velocidade e concentração dentro dos micromixers são apresentados, seguido da análise

quantitativa da eficiência dos micromixers propostos por meio dos Índices de mistura e das quedas de pressão.

1.1 Microfluídica e Aplicações

Nos anos 80, um campo de aplicações tecnológicas conhecido como sistemas microeletromecânicos - ou MEMS (do inglês *microelectro-mechanical systems*), que basicamente são sistemas elétricos e mecânicos em escala micrométrica, teve grande impulso em decorrência dos avanços da miniaturização de sistemas eletrônicos, ópticos e mecânicos. Exemplos de MEMS vão de simples microválvulas, microbombas, sensores, transistores, até complicados sistemas integrados para análise e detecção [1]. Uma das primeiras aplicações conhecidas de MEMS são os sensores capacitivos microscópicos usados pela indústria automobilística para a ativação de *airbags*, que são capazes de responder rapidamente a uma colisão com uma mínima variação de capacitância [2]. Os MEMS atingiram um sucesso industrial por causa da integração de detecções, análises de informação e processamento de dados em um único chip, que pode ser produzido em massa.

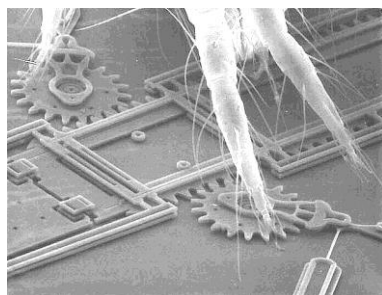


Figura 1.1 - Perna de ácaro sobre drive (MEMS) de espelhos microscópicos. Fonte: Sandia National Laboratories [3].

No início dos anos 90, com a miniaturização em evidência, começaram a surgir aplicações integradas de MEMS e fluidos capazes de realizar separações por eletroforese, sistemas de bombeamentos eletro-osmóticos, amplificadores de DNA, sistemas de citometria e microreatores químicos [2]. O surgimento dessas diversas aplicações originou um novo campo de estudo interdisciplinar: A **Microfluídica** – que

pode ser definida como a ciência que estuda a manipulação de fluidos e suspensões em sistemas com canais e outras estruturas em escala micrométrica ($10^{-6}m$) e influenciados por forças externas [4]. Vantagens de portabilidade, grande paralelização de tarefas e controle de fluxos laminares são apresentadas pela principal aplicação da Microfluídica, os dispositivos *Lab-on-a-chip* (LOC, que em inglês significa Laboratório em um chip) ou μ TAS (lê-se “*microtas*”, do inglês *micro-total analysis system*, ou microssistemas de análise total), que demonstram potencial revolucionário para as indústrias farmacêuticas, químicas, alimentícias, biomédicas, dentre outras [2]. Os dois termos são considerados sinônimos, portanto, continuaremos usando apenas o termo *LOC*. A figura 1.2 a seguir mostra um exemplo de LOC capaz de detectar câncer oral através de amostras de saliva. Este chip é capaz de realizar lise celular e, simultaneamente, a amplificação de DNA por PCR para a detecção de células cancerígenas [5].

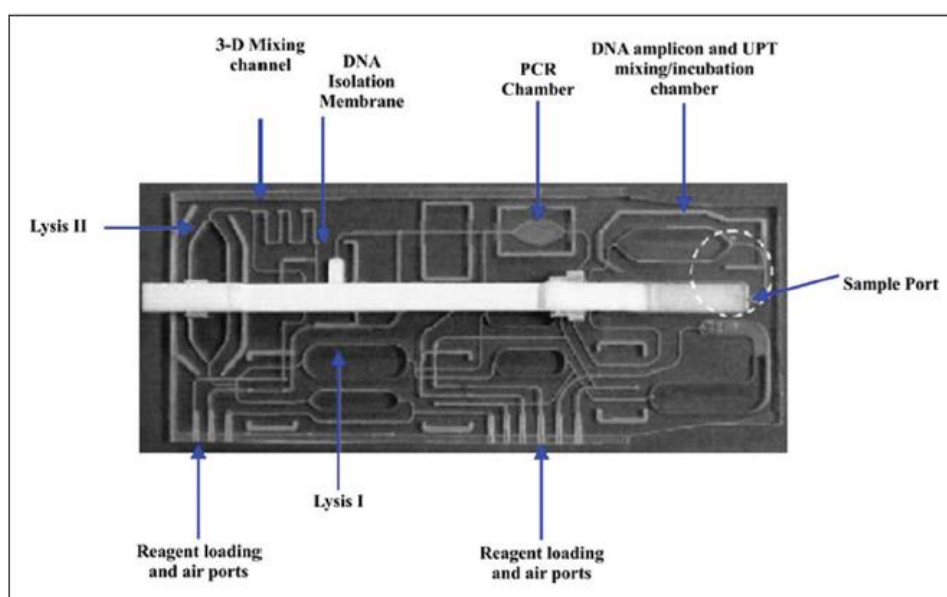


Figura 1.2 - Lab-on-a-chip para a detecção de carcinoma epidermóide oral. Reproduzido de [5].

Como o nome sugere, um dispositivo LOC pode ser interpretado como a miniaturização de um laboratório em um único chip cuja maior dimensão pode ser da ordem de milímetros. Usualmente, esses dispositivos podem integrar injeção, processos de mistura, reações químicas, processos de lavagem, processos de separação, detecção, dentre outros. Reduzir a escala de trabalho para dimensões micrométricas culmina em alguns benefícios como a portabilidade, que permite a

aplicação de diagnósticos na ponta do tratamento, por exemplo [6]. Outro benefício é a redução significativa na quantidade necessária das amostras de interesse, o que resulta em análises mais velozes e sensíveis, assim como a diminuição do perigo no manuseio de espécies químicas e biológicas perigosas. Tais vantagens aparecem junto com o fato de que uma redução linear de um fator de 10^3 resulta em uma redução de volume por um fator de 10^9 , como destacado por Bruus [4].

Existe uma variedade de aplicações da Microfluídica que permeiam diferentes áreas das ciências e engenharias. Por exemplo, Liang e colaboradores desenvolveram uma técnica capaz de utilizar urina para detectar câncer de bexiga com uma sensibilidade de 81,3% e especificidade de 90%. O chip microfluídico feito em Poli(metil metacrilato) (PMMA) possui um *design* simples e eficiente, integrando duas membranas de policarbonato como filtros para isolar e enriquecer vesículas extracelulares, as quais possuem diâmetros entre 30 e 200 *nm*. Em seguida, a técnica realiza um ensaio sorológico imunoenzimático (ELISA) para detectar a concentração dessas vesículas [7].

Sklavounos e colaboradores desenvolveram um dispositivo capaz de utilizar marcadores metabólicos para testar a susceptibilidade de bactérias a antibióticos. A aplicação desenvolvida integra um módulo de aquecimento e uma câmera colorida de baixo custo à uma plataforma, que utiliza *machine learning* para monitoramento automático e em tempo real de absorbância e fluorescência. Foi fabricado um sistema multiplexado para prova de conceito capaz de classificar *E. Coli* e de testar dois antibióticos com um bom nível de eficiência [8].

A microfluídica também pode contribuir com a atenuação das mudanças climáticas. Tsai-Hsing e colaboradores utilizaram uma estrutura simples de microcanais para aprisionar bolhas de CO₂ em água. Composta essencialmente por uma junção T, o dispositivo imita condições de reservatórios em aquíferos salinos para CCS (*carbon capture and sequestration*) em alta pressão. Comparados com as aplicações em escalas milimétricas, a aplicação microfluídica aumentou a transferência de massa volumétrica de CO₂ em água por um valor de duas a três

ordens de magnitude, enquanto reduziu o diâmetro dos canais em cerca de cinquenta vezes [9].

Para aplicações em óptica como direcionamento de feixes, sistemas de comunicação e armazenamento de dados, é importante a utilização de grades de difração facilmente ajustáveis. Lin Chen e colaboradores desenvolveram uma técnica que emprega a distribuição de três fluidos em padrões multilaminados ajustáveis, de maneira análoga a uma grade com fendas paralelas para aplicação em difrações de feixes ópticos. A técnica permite o ajuste da vazão de cada um dos três fluidos de maneira que os parâmetros geométricos da grade possam ser alterados, dependendo da aplicação [10].

Como evidenciado pelos exemplos anteriores, os dispositivos microfluídicos podem realizar várias tarefas de um laboratório em escala micrométrica. Em particular, muitas aplicações dependem da interação entre duas ou mais soluções, as quais precisam ser misturadas para gerar algum efeito de interesse. Por exemplo, da Silva e colaboradores desenvolveram um dispositivo microfluídico para medir a toxicidade da água em sistemas de recirculação. O funcionamento do dispositivo consiste na detecção da luz emitida pela luminescência da bactéria *Aliivibrio fischeri* ao entrar em contato com determinadas substâncias consideradas indesejáveis para esses sistemas. Para melhores detecções, o sistema utiliza um conjunto de misturadores microscópicos que misturam a solução contendo as bactérias e as amostras de água [11].

Um outro exemplo da importância de misturas em dispositivos microfluídicos é o trabalho de Huang e colaboradores [12]. Nesse trabalho os autores construíram um dispositivo para sintetização de nanopartículas utilizando uma plataforma acusticofluidica baseada em *acoustic streaming* (um fluxo de baixa velocidade em um fluido promovido por ondas sonoras) para misturar os componentes sintetizantes. Variando frequência e intensidade das ondas sonoras, assim como a vazão dos fluidos, é possível controlar a eficiência da mistura, afetando a sintetização das nanopartículas. A figura 1.3 mostra um esquema de como funciona o dispositivo: Os fluidos contendo os reagentes entram por dois microcanais que se unem em uma

junção em T. Após a junção, os fluidos em contato caminham pela microcanal com estruturas pontiagudas. Um transdutor acústico produz ondas sonoras que vibram as estruturas pontiagudas, que por sua vez agitam os reagentes dentro do microcanal

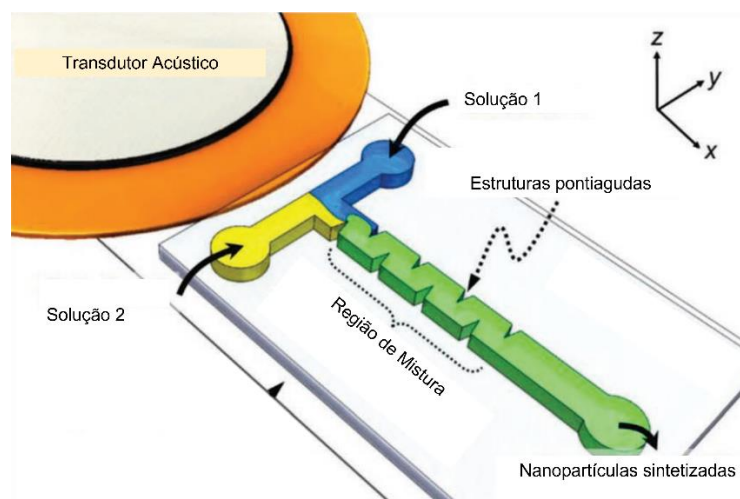


Figura 1.3 - Esquema mostrando os componentes do micromixer usado para geração de nanopartículas através de ondas sonoras. Reproduzido de Huang [12].

Considerando o papel da **mistura** de soluções em aplicações microfluídicas, os **micromixers** (misturadores microscópicos em inglês) se apresentam como os componentes responsáveis por proporcionar a mistura de substâncias de interesse em LOC. Eles são importantes em aplicações que envolvem reações químicas, ensaios colorimétricos, detecções por luminescência, dentre outros [13-15], e impactam diretamente a sensibilidade e a eficiência desses dispositivos.

1.2 Mistura em Microfluídica – Micromixers

Em hidrodinâmica, é sabido que o escoamento de um fluido pode adotar diferentes comportamentos dependendo de propriedades intrínsecas deste fluido e do local onde ele escoar. Existe um parâmetro adimensional chamado de número de Reynolds, representado pela sigla Re , que atribui um valor numérico ao escoamento de um fluido. Este parâmetro leva em conta as dimensões dos canais, a velocidade do escoamento e a viscosidade do fluido escoando, onde viscosidade é uma

propriedade que se refere à resistência à deformação aplicada sobre um fluido. A depender do valor de Re , o escoamento pode ser dividido em dois regimes: escoamentos laminares, representados por $Re < 2500$; e escoamentos turbulentos, representados por $Re > 2500$ [16].

Sistemas microfluídicos são caracterizados por canais microscópicos e escoamentos de baixa vazão, resultando em escoamentos laminares. Em contraste, sistemas macroscópicos possuem grandes volumes e vazões muito maiores que sistemas microfluídicos, resultando em escoamentos turbulentos. Sistemas macroscópicos exploram a turbulência para misturar suas soluções, enquanto nos sistemas microfluídicos o processo de mistura é dificultado pela falta de turbulência. Nos regimes de escoamento laminar os processos de mistura se dão basicamente por difusão, que é um processo de transporte lento, o que reduz a eficiência para aplicações *Lab-on-a-chip*.

Soluções propostas para esse problema envolvem o *design* de **micromixers**, que de maneira resumida são dispositivos que induzem a agitação das linhas de fluxo com o propósito de aumentar a área da interface de contato entre os fluidos a serem misturados. Em níveis moleculares, a variação temporal do volume misturado de dois fluidos é, aproximadamente [17]:

$$V \sim A\sqrt{Dt}, \quad 1.1$$

onde A é a área de contato entre os fluidos e D é o coeficiente de difusão. Para um volume constante, perturbar as linhas de fluxo aumenta a área de contato dos fluidos. Por sua vez, o aumento dessa área diminui o comprimento característico de difusão. Em outras palavras, a distância que as espécies diluídas percorrem para se distribuir de maneira uniforme é reduzida [17].

Em geral, micromixers podem ser classificados como **ativos**, que possuem uma fonte externa de perturbação, como campos elétricos, magnéticos e sonoros por exemplo; e **passivos**, que não utilizam fontes externas de energia além da propulsão principal dos fluídos, mas capitalizam na inércia do escoamento para perturbar as

linhas de fluxo utilizando microestruturas geométricas como obstáculos, curvas, buracos e constrições. O contraste entre as duas categorias de micromixers se dá por critérios de simplicidade, facilidade de integração, capacidades de mistura e dificuldades de fabricação. Micromixers ativos normalmente possuem mais eficiência de mistura em comprimentos menores, geometrias mais simples e melhores controles, mas possuem mais dificuldades de integração em dispositivos *LOC*. Micromixers passivos, em contrapartida, são mais simples de serem integrados, têm menor custo e possuem fabricação mais simples.

É possível citar diversos exemplos de micromixers ativos. Ahmed e colaboradores [18] desenvolveram um micromixer acústico que utiliza um atuador para vibrar uma bolha de ar presa em uma estrutura que se assemelha a uma ferradura (figura 1.4, item a). As oscilações da bolha promovem a convecção do fluido (*microstreaming*) de maneira que em 7 ms a mistura completa é alcançada. Veldurthi e colaboradores utilizaram um campo magnético rotacional para movimentar um agitador magnético microscópico capaz de misturar completamente dois fluidos em alguns segundos (figura 1.4, item b) [19]. Estudos numéricos mostraram que uma eficiência de 90% de mistura pode ser alcançada com um RPM de 1500. Este micromixer foi utilizado experimentalmente para funcionalizar a droga Rifamicina com partículas de TiO_2 .

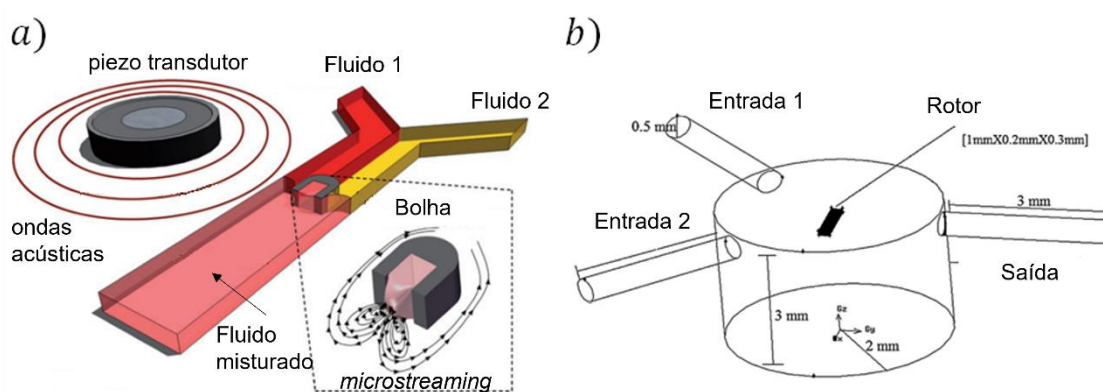


Figura 1.4 - a) Esquema do Micromixer acústico de Ahmed e b) Esquema do Micromixer magnético de Veldurthi. Reproduzidos de [18] e [19], respectivamente.

A escolha do tipo de micromixer depende da aplicação, já que cada micromixer tem suas vantagens e desvantagens [20]. Por serem mais econômicos e

convenientes, micromixers passivos são mais atrativos, especialmente em condições de operação precárias, como por exemplo, em aplicações de diagnóstico na ponta do tratamento. Existe uma demanda pela elaboração de micromixers passivos que utilizem cada vez menos espaço e produzam misturas de maneira tão eficientes quanto os micromixers ativos. Por isso, este trabalho tratará dessa categoria de micromixers, os micromixers passivos.

1.3 Micromixers Passivos

Em geral, as revisões de literatura buscam classificar os micromixers passivos de duas maneiras: pela sua dimensionalidade como referência e por sua principal estrutura geométrica. O primeiro critério divide os micromixers entre planares e tridimensionais. A princípio, essa classificação pode gerar estranheza uma vez que qualquer microcanal possui altura, largura e comprimento. No entanto, é chamado de planar todos os micromixers passivos cujo as paredes superior e inferior não mudam de plano. Dessa maneira, a sua altura permanece constante em qualquer posição. Caso contrário, o micromixer é chamado de tridimensional ou não-planar (figura 1.5). Apesar de efetivos, micromixers planares em geral possuem menos capacidade de mistura que os não-planares, mas possuem mais facilidade de fabricação e utilizam menos energia. O segundo critério de classificação não é bem definido entre as revisões de literatura [20][21][22].

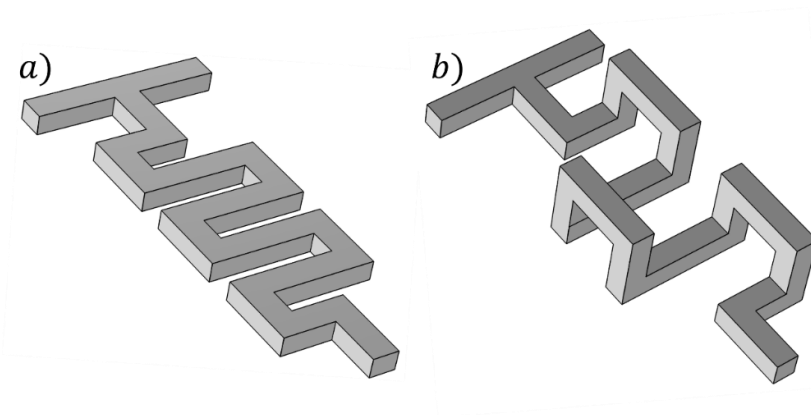


Figura 1.5 - Exemplos de micromixers passivos: a) planar e b) tridimensional. Fonte: Autor.

A revisão organizada por Lee e colaboradores resume o segundo critério em dois grandes princípios de funcionamento: padrões multilaminados e advecção caótica [23]. O primeiro se refere à tática de criar um padrão multilaminado com n interfaces de contato entre os fluidos. Aumentar o número de interfaces resulta em maiores áreas de contato, acelerando o processo de difusão. Um exemplo seria o trabalho de Floyd e colaboradores [24], que utilizaram um sistema de dez entradas para gerar um padrão multilaminado, a fim de misturar soluções de diferentes pH, como mostra a figura 1.6. O segundo princípio, a **advecção caótica**, de maneira simplificada se refere ao transporte de alguma quantidade pelo movimento dos fluidos enquanto promove o alongamento e o curvamento das interfaces de contato por meio de fluxos transversais. Esse processo amplia a área de contato e acelera a difusão da quantidade. Em micromixers passivos, esses fluxos são criados pela interação da inércia dos fluidos com as estruturas geométricas dos micromixers. Como Suh e colaboradores afirmam, é aceito como regra que a mistura por advecção caótica é o melhor mecanismo de mistura em sistemas microfluídicos [18].

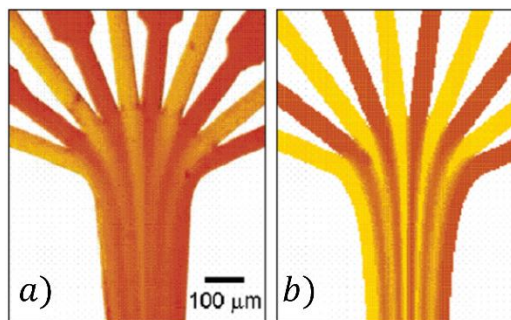


Figura 1.6 - Experimento a) e b) simulação do micromixer Floyd gerando um perfil multilaminado. Reproduzido de Floyd [24].

1.3.1 Exemplos de Micromixers Passivos

Há uma variedade de subcategorias de micromixers que podem aproveitar a advecção caótica. Hossain e colaboradores [25] analisaram numericamente três micromixers planares com estruturas serpentinadas: zigue-zagues, ondas quadradas e curvas (figura 1.7). Para valores pequenos de números de Reynolds fluxos transversais foram considerados desprezíveis, mas para $Re > 15$ estruturas transversais de fluxo começaram a aparecer, com o micromixer de onda quadrada

sendo o mais eficiente dentre os analisados. Em Re 267, os três modelos atingem o valor limite de eficiência de 90%. Apesar de ter a menor eficiência para Re 267, o micromixer curvo apresentou menores quedas de pressão devido a suavidade do percurso, enquanto o no formato de zigue-zague apresentou valores intermediários tanto para eficiência da mistura como para a queda de pressão. Fluxos secundários devido a inércia das curvas foram os principais mecanismos que aceleraram a mistura [25].

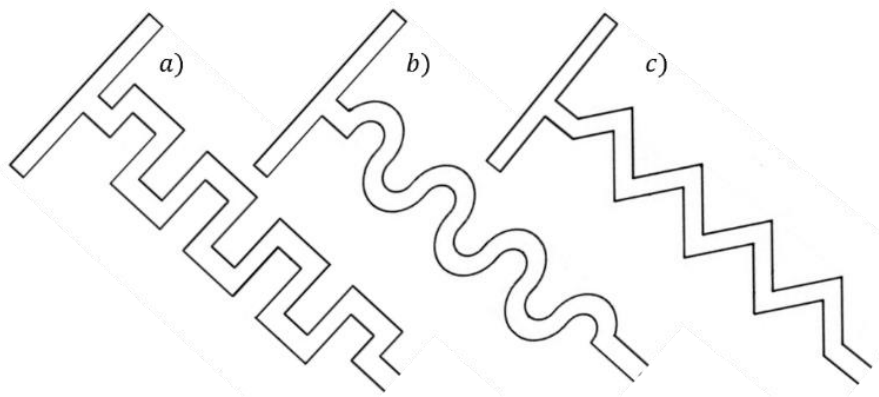


Figura 1.7 - Esquemas de Micromixers planares de Hossain, a) Onda quadrada, b) Curvas e c) Zigue-Zague. Adaptado de Hossain [25].

Capitalizando na força centrífuga gerada pela inércia de canais curvos, Arjun e colaboradores [26] estudaram uma variedade de microcanais em formato de espiral como micromixers como mostra a figura 1.8. Com o aumento da taxa de fluxo, há um aumento da intensidade de forças centrífugas acompanhado de um aumento na performance da mistura. As forças centrífugas geram pares de vórtices simétricos que aumentam a área de contato dos fluidos. Esses pares são conhecidos como vórtices de Dean.

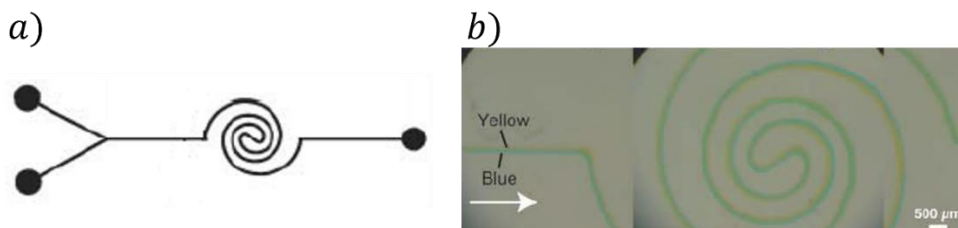


Figura 1.8 - a) Esquema do micromixer em espiral e b) experimento com corantes azul e amarelo. Adaptado e Reproduzido de Arjun [26].

Utilizando paredes que convergem e divergem senoidalmente, além de obstáculos, Afzal e colaboradores propuseram um micromixer (figura 1.9) que utiliza o aumento da seção transversal do microcanal a fim de gerar vórtices de expansão, perturbando as linhas de fluxo. Junto com as separações e recombinações de fluxos, foi previsto numericamente que o micromixer é capaz de misturar com 95% de eficiência em escoamentos de até Re 70 [27].

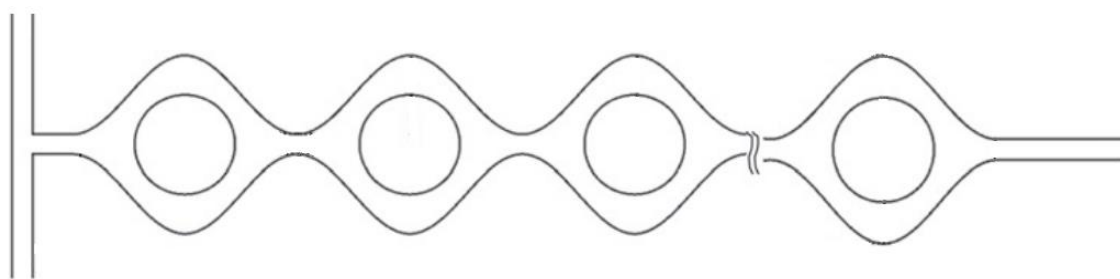


Figura 1.9 - Esquema representando o micromixer com paredes convergentes e divergentes de Afzal e colaboradores. Adaptado de Afzal [27].

1.3.2 Micromixers passivos baseados em colisões desequilibradas

Durante o processo de mistura em Microfluídica é possível separar os fluidos a serem misturados em duas porções, reconfigura-las e uni-las novamente, a fim de acelerar o processo de mistura [28]. Essa estratégia recebe o nome de Separação e Recombinação ou SAR (do inglês *Split and Recombine*). Em micromixers do tipo SAR não-planares é possível criar um padrão próximo de multilaminado. Lee e colaboradores [29] utilizaram muros e planos para dividir e recombinar dois fluidos, como mostra a figura 1.10. O modelo foi capaz de atingir 90% de mistura após 7 ciclos em um escoamento de Re 0,6. Micromixers planares não conseguem gerar padrões multilaminados, pois é preciso que os subcanais separados se sobreponham verticalmente em algum ponto.

Como Ansari e colaboradores observam [30], alguns micromixers **planares** do tipo **SAR** produzem colisões equilibradas de fluídos. Seus subcanais, que recebem os fluxos separados e os direcionam para a recombinação, possuem as mesmas dimensões e são simétricos. Assim, as porções de fluido separados também se chocam de maneira simétrica. O resultado é a criação de uma fina e plana interface

de contato nas zonas de recombinação, que não são boas aceleradoras de mistura. Além disso, há uma tendência de que os fluidos distintos se separem completamente nas bifurcações, efetivamente aumentando o comprimento do micromixer. Mouza e colaboradores [31] propuseram um SAR planar de subcanais curvos para aproveitar os vórtices de Dean, que são vórtices gerados pela inércia das curvas. Por sua vez, Chung e colaboradores [32] propuseram um SAR com subcanais rômnicos, que basicamente são duplos zigue-zagues para aproveitar a recirculação dos fluidos nas curvas agudas. Em ambos os casos, as colisões foram subaproveitadas devido a simetria desses subcanais.

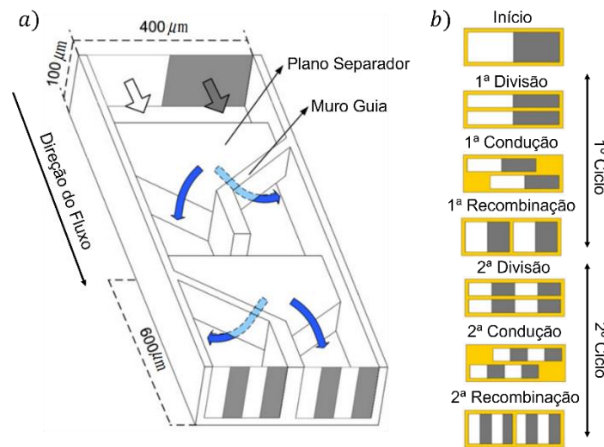


Figura 1.10 - Esquemas representando o **a)** micromixer de SAR 3D de Lee. **b)** Previsão das seções transversais dos fluidos nos dois primeiros ciclos, evidenciando o mecanismo de divisão e recombinação. Adaptado de Lee [29].

Para gerar colisões desequilibradas no modelo de Mouza e em um modelo similar ao de Chung, Ansari e colaboradores [33] propuseram a adoção de subcanais assimétricos com mostra a figura 1.11. É explicado que o choque entre duas vazões diferentes gera um desequilíbrio que perturba e aumenta a interface de contato na zona de recombinação, acelerando a mistura. Foram testados subcanais cujo as larguras seguiram as razões de 1:1, 2:1, 3:1 e 4:1. Os *designs* foram submetidos a escoamentos que variaram entre Re 1 e Re 80. As simulações previram que as razões 3:1 e 2:1 foram as mais eficientes para os modelos rômnicos e curvos, com 52% e 58% de capacidade de mistura, respectivamente. Como resultado, o trabalho de Ansari e col. mostrou que as colisões desequilibradas geraram melhores misturas, mas que ainda havia espaço para aprimoramento.

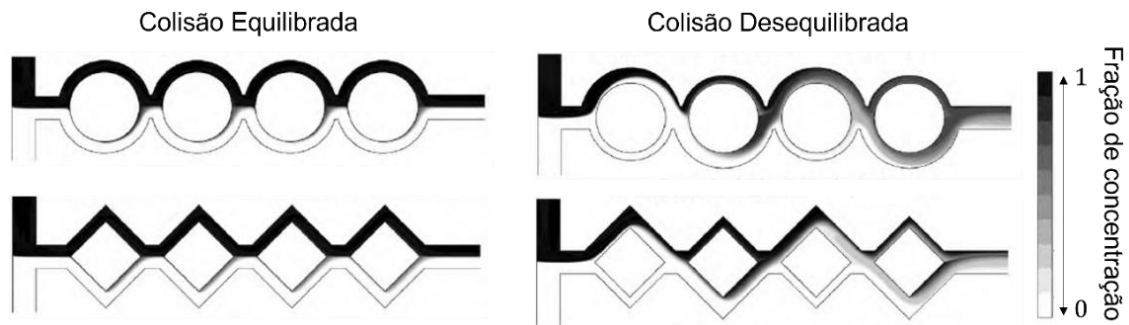


Figura 1.11 - Esquemas representando os micromixers planares de Ansari com colisões equilibradas e desequilibradas em um escoamento de Re 60. Pode-se observar que as colisões desequilibradas afetam mais capacidade de mistura do que as equilibradas. Adaptado de Ansari [33].

1.3.3 O uso de constrições

Trabalhando sobre o design curvo com a proporção 2:1 de Ansari, Li e colaboradores propuseram deslocar uma parte dos subcanais maiores (figura 1.12) para criar zonas de contração que alteraram o campo de velocidade dos fluidos [34]. A mudança, além de criar vórtices de expansão, alterou a distribuição de velocidade nas zonas de recombinação criando uma dinâmica do modelo circular de Ansari. Apesar do aumento da queda de pressão, a eficiência da mistura aumentou consideravelmente, saindo de 52% para 83% em escoamentos com Re 80. Os deslocamentos de Li chamam atenção por gerar um design que apresenta uma menor queda de pressão em escoamentos com $20 < Re < 60$ em análise comparativa com outros micromixers passivos da literatura [22].



Figura 1.12 - Esquema 3D de modelo desenvolvido por Li com micromixer planar de divisão e recombinação redondo com colisões desequilibradas e subcanais deslocados. Fonte: Autor.

Buscando aprimorar o modelo de Li, Raza e colaboradores propuseram a adição de estruturas defletoras em alguns dos subcanais maiores (item “a” da figura

1.13) [35]. Essas estruturas tinham como função criar uma constrição durante a passagem pelo subcanal maior, gerando vórtices de expansão e aceleração do fluido, o que ajuda a promover advecção caótica. Em outro trabalho [36], Raza propôs a criação de constrições como degraus nas entradas e saídas dos subcanais, criando um design não-planar do micromixer de Li (item “b” da figura 1.13) O fim dos degraus cria vórtices de expansão, o que ajuda a promover advecção caótica.

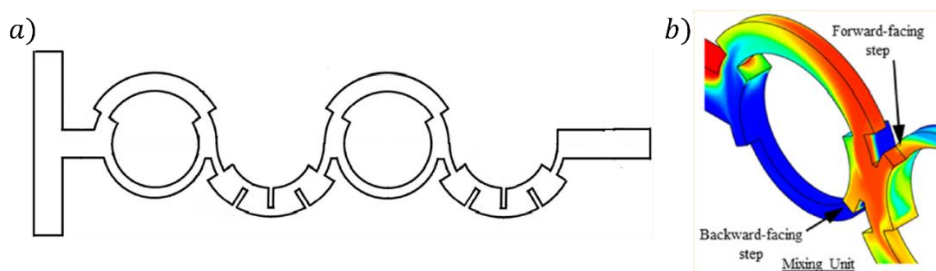


Figura 1.13 - Esquemas de micromixers desenvolvidos por Raza. Em a): SAR planar redondo com estruturas defletoras, adaptado de Raza [35]. Em b): Câmara de mistura de micromixer SAR redondo 3D com degraus. Reproduzido de Raza [36].

O uso de constrições é uma estratégia comum em micromixers passivos. Chung e Shih [37] experimentaram inserir constrições em um modelo de micromixer com canais rômnicos balanceados (item “a” da figura 1.14). Utilizando defletores, Chung conseguiu gerar separações e recombinações com vórtices de expansão e vórtices de Dean após a recombinação em escoamentos com Re 20. Tsai e colaboradores [38] propuseram um modelo que utiliza constrições em paredes alternadas de um microcanal em formato de “S” (item “b” da figura 1.14). De acordo com as simulações a adesão de constrições, feitas por defletores, causaram vórtices de expansão, aceleração do fluxo e vórtices de Dean mais intensos.

Em geral o uso de constrições, seja por deslocamentos de microcanais, seja pela inserção de defletores ou outros obstáculos, causa efeitos similares onde são aplicados. É esperado que a redução da seção transversal na constrição acelere o fluido, gerando o potencial para o surgimento de agitações na interface de contato entre os fluidos, contribuindo para a aceleração do processo de mistura.

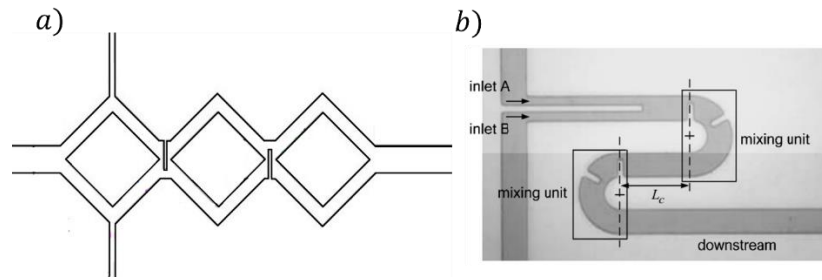


Figura 1.14 - Em a) Esquema de Micromixer rômbo com estruturas defletoras nas zonas de recombinação. Adapado de Chung [37]. Em b): Fotografia de Micromixer em S com estruturas defletoras construído por Tsai. Reproduzido de Tsai [38].

Reconhecendo o poder das constrições em acelerar o processo de mistura em micromixers passivos, buscamos verificar se a adoção de constrições nos subcanais maiores do modelo de micromixer com colisão desequilibrada, rômbo, e com proporções 3:1 entre a largura dos subcanais [33], teria capacidade de gerar maiores capacidades de mistura. Acreditamos que ao acelerar os fluxos, as constrições devem gerar distorções na interface de contato dos fluidos por meio de vórtices de expansão, pela reconfiguração de vórtices de Dean na curva de 90° e pela alteração do choque desequilibrado nas zonas de recombinação. Para verificar, construímos três modelos teóricos de micromixer baseado no modelo rômbo com proporções 3.0, adicionando constrições por meio de deslocamentos nos subcanais maiores e variando as proporções dessas constrições. A figura 1.15 mostra um dos três modelos elaborados e o micromixer de referência. Mais detalhes geométricos e construtivos sobre o modelo estão disponíveis no capítulo 3.

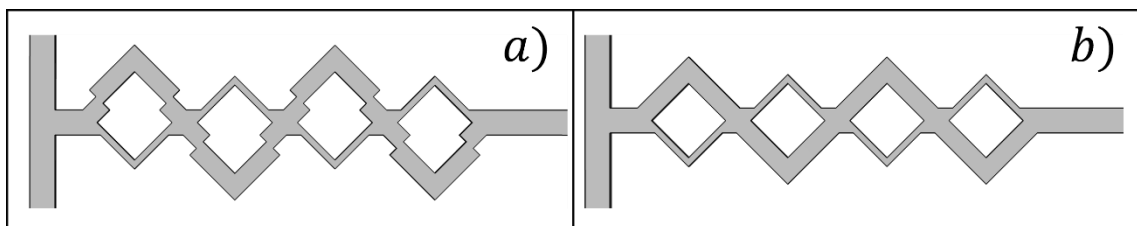


Figura 1.15 - a) Esquemas de um dos nossos modelos de micromixer com o subcanal maior deslocado e b) Modelo de referência de Ansari com proporção de 3:1 das larguras dos subcanais. Fonte: Elaborados pelo autor.

1.4 Objetivos Gerais

Diante do exposto nas seções anteriores, esse trabalho tem como objetivo avaliar a melhoria da eficiência de mistura em um micromixer baseado nos modelos de Ansari [33] e Li [34]. Especificamente, visamos avaliar a influência da introdução de deslocamentos nos subcanais maiores de um micromixer rômbico planar de subcanais assimétricos. Uma descrição detalhada desses micromixer é dada na seção 3.1.

Por meio da inspeção de simulações que utilizam o software COMSOL multiphysics, baseado no método dos elementos finitos, foram testados diferentes parâmetros geométricos de deslocamento nos subcanais maiores. Para entender como o impacto das alterações afetam o design de referência onde será realizada a intervenção, calculamos os Índices de mistura e as quedas de pressão. Além disso, realizamos uma observação qualitativa dos campos de velocidade e concentração de espécies diluídas para entender melhor como as interfaces de contato dos fluidos estão sendo afetadas.

1.5 Objetivos Específicos

1 – Propor um parâmetro geométrico para a realização de análise: a largura da constrição dos deslocamentos.

2 - Testar esse parâmetro em diferentes escoamentos por meio simulações computacionais utilizando o software COMSOL Multiphysics.

3 – Obter valores para os Índices de Mistura e 2 Quedas de pressão para todos os modelos e em diferentes escoamentos.

4 – Analisar e comparar com o micromixer de referência, o impacto das alterações dos deslocamentos tanto nos subcanais quanto nas zonas de recombinação.

2. REVISÃO TEÓRICA

2.1 Conceitos Básicos

Nas seções anteriores vimos como os sistemas *lab-on-a-chip* utilizam a manipulação de fluidos para as mais diversas aplicações. Compreender e prever o comportamento dos fluidos sob diversas condições se torna relevante para quem deseja trabalhar com Microfluídica.

2.1.1 Fluídos

Os fluidos são caracterizados pela propriedade de se deformarem com pouca resistência quando submetidos às ações de forças externas. Os fluidos adotam as formas dos recipientes que os contêm uma vez que não possuem rigidez e elasticidade para preservarem algum formato original. Dessa forma, fluidos podem ser deformados sem necessariamente afetar algumas propriedades macroscópicas como densidade, por exemplo [4].

Um fluido em repouso é caracterizado pela ausência de movimento e não por seu formato. Em contraste, os sólidos respondem a aplicação de uma força ganhando uma deformação finita e, assumindo que essa força seja pequena o suficiente, voltam à sua configuração original quando essa força desaparece. Enquanto a resposta dos sólidos é elástica a dos fluidos é viscosa [39]. Viscosidade pode ser entendida como a resistência à deformação aplicada os fluidos.

Fluidos podem ser líquidos ou gases. Ambos diferem principalmente por suas densidades, que são da ordem de $\rho_{líquidos} \approx 10 \text{ Kg/m}^3$ e $\rho_{gases} \approx 1 \text{ Kg/m}^3$ respectivamente [4]. Comparados aos sólidos, gases são rarefeitos e suas moléculas se movem como partículas livres, interagindo por colisões. Líquidos possuem densidades da mesma ordem dos sólidos e, considerando curtos intervalos de tempo

e espaço, possuem ordenamentos de moléculas similar. Contudo, as flutuações térmicas dos líquidos superam a tendência de ordenamento, permitindo assim, sua deformação e fluidez [40].

2.1.2 A hipótese do contínuo e as partículas de fluído

De acordo com Bruus, as moléculas de um líquido são compactadas de tal modo que as distâncias médias entre moléculas vizinhas são próximas de 0.3 nm [4]. Em aplicações nanométricas os fluidos são quantizados por essas distâncias intermoleculares, mas em aplicações microscópicas (*lab-on-a-chip*) e macroscópicas, os fluidos aparentam ser materiais contínuos, o que nos leva para a hipótese do contínuo.

A hipótese do contínuo afirma que as propriedades macroscópicas de um fluido podem ser vistas como perfeitamente contínuas em estrutura. Propriedades físicas como massa, momento, entre outras, as quais são associadas às moléculas do fluído, são então assumidas como uniformemente espalhadas em um pequeno elemento de volume contínuo, em vez de serem concentradas em pequenas moléculas, como é na realidade [40]. Nesse sentido, essas quantidades físicas devem ser tomadas como a soma da contribuição de cada molécula dentro de cada pequeno volume. Esse pequeno volume pode ser interpretado como uma **partícula de fluído**, e um fluido é composto por inúmeras dessas partículas.

A partícula de fluido deve tamanho o suficiente para acomodar uma grande quantidade de moléculas, de maneira que flutuações de propriedades físicas em escala atômica sejam estatisticamente desprezíveis. Também devem ser pequenas o suficiente para que forças externas não sejam relevantes. Não se define um tamanho exato para uma partícula fluida, mas se subteme que ela é pequena, e não infinitesimal [4]. Em hidrodinâmica, de qualquer maneira, é esperado que se trabalhe com as quantidades físicas por unidade de volume como densidades de massa, de momento, entre outros.

Em aplicações microfluídicas as dimensões micrométricas ainda são muito grandes frente às dimensões intermoleculares. Uma maneira de interpretar um fluido em uma aplicação Microfluídica é através do cenário Euleriano, onde se foca em determinados pontos fixos do espaço do sistema e se observa a evolução espaço-temporal dos campos de velocidade, pressão, densidade, entre outros. Nesta abordagem, as variáveis de campo são definidas em termos de seus valores médios dentro de uma partícula de fluido. Dessa forma, podemos definir os campos de densidade ρ e de velocidade $\vec{u}$, por exemplo, como [4]:

$$\rho(\vec{r}, t) \equiv \frac{1}{\Delta\Omega} \sum_{i \in \Delta\Omega} m_i \quad (2.1)$$

$$\vec{u}(\vec{r}, t) \equiv \frac{1}{\rho(\vec{r}, t)\Delta\Omega} \sum_{i \in \Delta\Omega} m_i \vec{u}_i, \quad (2.2)$$

onde i representa o índice da molécula dentro de um volume $\Delta\Omega$ que representa uma partícula de fluido. A partir de agora, suprimiremos o par ordenado $(\vec{r}, t)$.

2.2 Equações de movimento da Hidrodinâmica

As equações fundamentais da Hidrodinâmica normalmente descrevem a conservação e o fluxo de grandezas como massa, momento e energia. Nesta seção focaremos nas duas primeiras. Utilizaremos alguns conceitos de cálculo vetorial e tensorial para chegarmos na equação de continuidade e na equação de Navier-Stokes.

2.2.1 Conservação da Massa

Considerando um pequeno volume Ω contendo um determinado fluido de densidade $\rho(\vec{r}, t)$, a massa $M(\Omega, t)$ contida dentro de Ω será:

$$M_{\Omega} = \int_{\Omega} \rho \, dr^3. \quad (2.3)$$

A única maneira da massa variar dentro de Ω é através da convecção do fluído, que atravessa a superfície S que envolve Ω . O fluxo de massa pode ser escrito como:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \, dr^3 = - \int_S \rho \vec{u} \cdot \hat{n} \, ds. \quad (2.4)$$

Podemos utilizar o teorema de Gauss e reescrever o fluxo de massa:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \, dr^3 = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho \vec{u}) \, dr^3. \quad (2.5)$$

Podemos então, por fim, retirarmos as integrais e escrevermos a equação de continuidade para fluidos compressíveis:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\nabla \cdot (\rho \vec{u}). \quad (2.6)$$

Se o fluido em questão for considerado incompressível, ou seja, possuir densidade uniforme, a equação de continuidade se torna:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 = -\rho \nabla \cdot \vec{u} \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.8)$$

Esse último resultado é utilizado extensivamente no desenvolvimento de outros em dinâmica de fluídos [4].

2.2.2 Conservação do Momento

Similar à massa, o momento de um fluido contido em um determinado elemento de volume Ω e área superficial S é dado por uma relação de integrais. A variação de momento ocorre não só devido à convecção de momento, mas também pelo efeito de

forças descritas pela segunda lei de Newton [4]. Essas forças podem ser divididas em forças de contato, que atuam na superfície do elemento de volume Ω , e forças volumétricas que atuam no interior de Ω . Dessa maneira e com ρ uniforme, podemos escrever a variação da densidade de momento $\rho \vec{u} = \vec{P}$ destacando cada contribuição:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \vec{u} dr^3 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P} = \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}^{conv} + \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}^{cont} + \frac{\partial}{\partial t} \vec{P}^{vol}, \quad (2.10)$$

onde os sobrescritos *conv*, *cont* e *vol* se referem às contribuições por convecção, forças de contato e forçar volumétricas. A densidade de fluxo de um escalar é um vetor por depender do campo de velocidade. A densidade de momento $\vec{P}^{conv}$, por sua vez é um tensor de ranque 2, ou tensor diádico [39]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}^{conv} = - \int_S (\rho \vec{u} \vec{u}) \cdot \hat{n} ds. \quad (2.11)$$

Aplicando o teorema de Gauss, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}^{conv} = - \int_{\Omega} \rho \nabla \cdot (\vec{u} \vec{u}) dr^3 \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}^{conv} = -\rho \int_{\Omega} ((\nabla \cdot \vec{u}) \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u}) dr^3. \quad (2.13)$$

Pela equação de continuidade ($\nabla \cdot \vec{u} = 0$) para fluidos incompressíveis, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}^{conv} = -\rho \int_{\Omega} \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} dr^3. \quad (2.14)$$

Por sua vez, a contribuição das forças de contato $\vec{P}^{cont}$ é dada pelo tensor de tensão $\vec{\tau}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{P}^{cont} = \int_S \vec{\tau} \cdot \hat{n} ds = \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{\tau} dr^3, \quad (2.15)$$

onde também utilizamos o teorema de Gauss. Por fim, a contribuição de $\vec{P}^{vol}$ é dada pelo somatório de forças que atuam individualmente nas moléculas, como gravidade e forças eletromagnéticas. Desta maneira e retirando as integrais, podemos escrever:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \vec{u} dr^3 = -\rho \int_{\Omega} \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} dr^3 + \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{\tau} dr^3 + \int_{\Omega} \sum_i \vec{f}_i dr^3 \quad (2.16)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \nabla \cdot \vec{\tau} + \sum_i \vec{f}_i, \quad (2.17)$$

onde os vetores $\vec{f}_i$ representam densidades de forças volumétricas diferentes. Esta última equação é conhecida como a equação de momento de *Cauchy* [39]. Ela estabelece que variações temporais do momento em um volume de controle, são frutos da advecção do momento somado com os efeitos das tensões e das forças volumétricas. Podemos ilustrar a ação de cada contribuição em um elemento de volume, como mostra a figura 2.1.

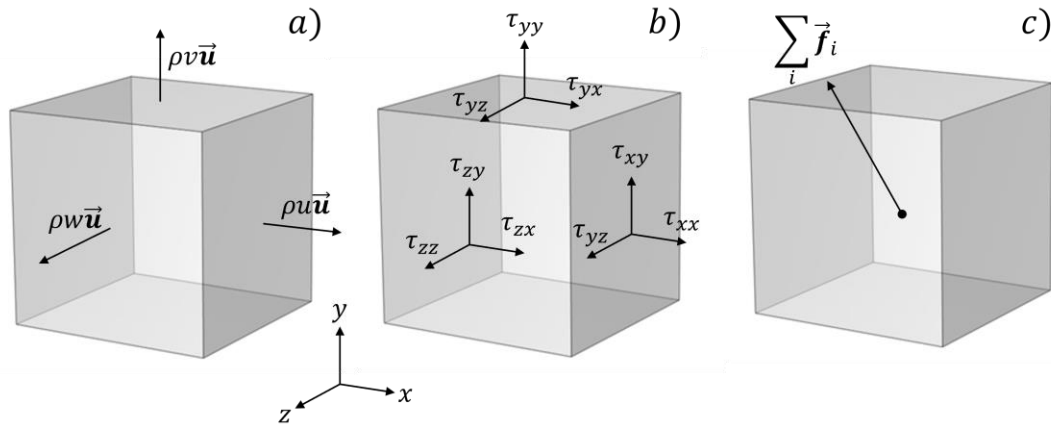


Figura 2.1 - Volumes de controle com variações na densidade de momento por a) Advecção, b) tensões superficiais e c) Forças volumétricas.

O item a) da figura 2.1 mostra a contribuição na variação do momento por convecção, onde as componentes da velocidade ($\vec{u} = u\hat{x} + v\hat{y} + w\hat{z}$) transportam uma quantidade de momento $\rho \vec{u}$ normal a cada uma das faces. Por sua vez, as tensões que compõem o tensor de tensão $\vec{\tau}$ atuam normal e tangencialmente às faces dos elementos. O somatório dessas tensões resulta na força resultante $\nabla \cdot \vec{\tau}$.

As tensões que atuam nas superfícies dos elementos podem ser geradas pelo campo de pressão, que atua na direção normal à essas superfícies, ou por forças viscosas, que atuam tanto na direção normal como na tangencial e, mais importante, são proporcionais ao campo de velocidade [34]. Podemos escrever $\vec{\tau}$ como a soma de dois tensores, um para as tensões de pressão $\vec{\tau}_p$, e outro para as tensões de viscosidade $\vec{\tau}_\eta$:

$$\vec{\tau} = \vec{\tau}_p + \vec{\tau}_\eta. \quad (2.18)$$

Na notação de matrizes, as componentes da diagonal principal são as componentes que atuam na direção normal às faces do elemento de volume, como mostra o item b) da figura 1. Dessa maneira, podemos escrever o tensor $\vec{\tau}_p$ em notação de matriz da seguinte maneira:

$$\vec{\tau}_p = -p\vec{I} = \begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix}, \quad (2.19)$$

onde $\vec{I}$ é um tensor identidade, representado por uma matriz identidade de três dimensões. Tomando o divergente de $\vec{\tau}_p$, temos:

$$\nabla \cdot \vec{\tau}_p = \nabla \cdot (-p\vec{I}) \quad (2.20)$$

$$\nabla \cdot \vec{\tau}_p = -\nabla p. \quad (2.21)$$

Podemos então, reescrever a equação do momento de Cauchy como:

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}_\eta + \sum_i \vec{f}_i, \quad (2.22)$$

As tensões de viscosidade são proporcionais ao campo de velocidade do fluido. O tensor $\vec{\tau}_\eta$ é não nulo somente quando as partículas de fluido estão em movimento

relativo umas com as outras. Dessa forma, o tensor $\vec{\tau}_\eta$ é a medida da variação do momento devido à ação do atrito entre as faces de diferentes elementos de fluido [41].

Um dos fundamentos dos fluidos Newtonianos é que eles contêm uma propriedade chamada **viscosidade**, que relaciona a taxa de deformação de uma partícula de fluido às tensões que atuam sobre ela. A origem dessa relação constitutiva vem das interações entre as moléculas em escalas atômicas, então é tratada como um postulado da hipótese do contínuo quando trazida para propriedades macroscópicas [39]. Para fluidos Newtonianos como água e ar, a viscosidade é o coeficiente de proporcionalidade entre a taxa de deformação, definida pelo tensor taxa de deformação $\vec{\epsilon}$, e as tensões viscosas $\vec{\tau}_\eta$. Dessa maneira, podemos escrever:

$$\vec{\tau}_\eta = 2\eta\vec{\epsilon}. \quad (2.23)$$

O tensor taxa de deformação é definido como:

$$\vec{\epsilon} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}, \quad (2.24)$$

então, temos que:

$$\vec{\tau}_\eta = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\eta\frac{\partial u}{\partial x} & \eta\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \eta\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \eta\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & 2\eta\frac{\partial v}{\partial y} & \eta\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \\ \eta\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) & \eta\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) & 2\eta\frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (2.25)$$

Podemos escrever a equação de momento de Cauchy como:

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \nabla \cdot 2\eta \vec{\epsilon} + \sum_i \vec{f}_i. \quad (2.26)$$

Podemos substituir $\nabla \cdot 2\eta \vec{\epsilon}$ por $\nabla \cdot \eta \nabla \vec{u}$. Além disso, para o caso de fluidos newtonianos, a viscosidade η é uniforme. Por fim, podemos escrever a equação de Navier-Stokes em sua forma vetorial:

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{u} + \sum_i \vec{f}_i. \quad (2.27)$$

2.2.3 O Número de Reynolds

Em aplicações microfluídicas, as vazões envolvidas são geralmente pequenas. Pode-se tirar proveito desse fato reescrevendo a equação de Navier-Stokes em função de parâmetros adimensionais. Para isso, reescrevemos $\mathbf{r}$ e $\mathbf{u}$ como [4]:

$$\vec{r} = L\tilde{r}, \quad (2.28)$$

$$\vec{u} = U\tilde{u}, \quad (2.29)$$

onde L representa a escala de comprimento, U a escala de velocidade, e $\tilde{r}$ e $\tilde{u}$ representam quantidades adimensionais. Também podemos reescrever o tempo t e a pressão p como:

$$t = \frac{L}{U} \tilde{t}, \quad (2.30)$$

$$p = \frac{\eta U}{L} \tilde{p} = P\tilde{p}. \quad (2.31)$$

Operadores também podem ser reescritos como:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}, \quad (2.32)$$

$$\nabla = \frac{\tilde{\nabla}}{L}. \quad (2.33)$$

Se os substituirmos na equação de Navier-Stokes e ignorando o termo das forças volumétricas, uma vez que em microfluídica o fator de escala faz com que esse termo seja desprezível, temos [4]:

$$\rho \left[\frac{U}{L} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\mathbf{u}} + \frac{U^2}{L} (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla}) \tilde{\mathbf{u}} \right] = -\frac{P}{L} \tilde{\nabla} \tilde{p} + \frac{\eta U}{L^2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{u}}. \quad (2.34)$$

Por fim, dividindo por $\eta U/L^2$, temos:

$$Re \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\mathbf{u}} + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla}) \tilde{\mathbf{u}} \right] = -\tilde{\nabla} \tilde{p} + \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{u}}, \quad (2.35)$$

onde:

$$Re = \frac{\rho UL}{\eta}. \quad (2.36)$$

Re é um parâmetro adimensional chamado de Número de Reynolds [4], proposto por Osborn Reynolds em 1886 [42]. O número de Reynolds determina a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas de um fluido. Se $Re \ll 1$, o lado esquerda da equação se torna desprezível, de maneira que o termo de viscosidade $\tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{u}}$ se torna dominante. Fluxos com $Re \ll 1$ são chamados de Fluxos de Stokes e possuem soluções analíticas para algumas aplicações comuns para a Microfluídica, como o fluxo de Pouiselle, que descreve o campo de velocidade de um canal retilíneo de seção transversal conhecida [41]. Em contrapartida, fluxos estacionários com $Re \gg 1$ tornam dominante o termo não linear da advecção de momento $\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}}$, que necessita de métodos numéricos para serem solucionados. Esse termo representa as variações da densidade de momento causadas por forças inerciais, associadas ao movimento do fluido, e é muito importante para misturas passivas em Microfluídica.

Escoamentos laminares, que são dominantes em Microfluídica devido às dimensões microscópicas e aos escoamentos envolvidos, apresentam números de Reynolds menores que 2500, enquanto valores acima desse limite representam escoamentos turbulentos.

2.3 Transporte de Escalares e o processo de Mistura

Para entendermos o funcionamento do processo de mistura de substâncias diferentes, é interessante discutirmos a equação de transporte passivo de escalares, que governa o transporte de qualquer propriedade conservada que sofre advecção (é transportado pelo fluido) e não afeta o fluxo do fluido que a contém. Essa equação pode descrever o transporte de espécies químicas, calor, dentre outros, bastando que o escalar não altere propriedades do fluido, como viscosidade e densidade [39].

Em sistemas microfluídicos, as dimensões dos microcanais e as baixas velocidades de fluxo resultam em escoamentos com números de Reynolds baixos. Isso significa que sistemas microfluídicos possuem fluxos laminares e que a mistura de espécies se dá primariamente por difusão, revelando a dificuldade enfrentada por sistemas microfluídicos em misturar espécies de interesse. Essa situação, conhecido como o **problema da mistura em Microfluídica**, resultou no crescente interesse por advecção caótica, que segundo Kirby, representa a utilização de campos de fluxo determinísticos para amplificar os efeitos aleatórios da difusão de escalares, aumentando a mistura exponencialmente [39].

2.3.1 Fluxos de escalares - Difusão e Convecção

Consideremos um sistema com dois líquidos inicialmente separados, mas em contato e contendo alguma quantidade escalar dentro deles, como espécies diluídas, por exemplo, como mostrado na figura 2.2. Inicialmente os fluidos possuem uma interface bem definida. A difusão do escalar seria o seu deslocamento gerado pelas flutuações térmicas no interior do sistema. Apesar desses movimentos serem aleatórios, o efeito somado no final tende a fazer com que o escalar se desloque na direção contrária ao do seu gradiente de concentração, afinal não há mudança aparente acima ou abaixo da interface dos fluidos. Com o passar do tempo, a permeação de moléculas vai desfazendo a interface lentamente [16] até atingir um estágio de distribuição uniforme.

A difusão é descrita pela lei de Fick [43], que relaciona a densidade de fluxo de um escalar ao seu gradiente de concentração. Considerando um volume de controle de um fluido, temos:

$$\mathbf{J}_{dif} = -D\nabla c, \quad (2.37)$$

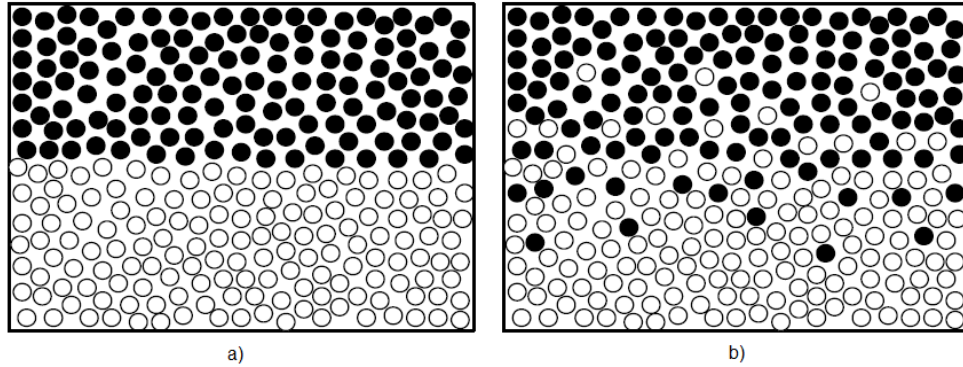


Figura 2.2 - Esquema exemplificando a difusão entre moléculas de dois fluidos diferentes. Moléculas inicialmente separadas a) e após alguns instantes b). Reproduzido de Suh et al [16].

onde $\mathbf{J}_{dif}$ é a densidade de fluxo do escalar por difusão, D é a difusividade do escalar e c é a concentração do escalar. Em um fluido que se movimenta, o transporte de escalares também acontece pela convecção:

$$\mathbf{J}_{conv} = \mathbf{u}c, \quad (2.38)$$

onde $\mathbf{J}_{conv}$ é a densidade de fluxo do escalar por convecção e $\mathbf{u}$ é o campo de velocidade. A figura 2.3 mostra ambas as contribuições atuando sobre um volume de controle. Pode-se então escrever a equação de conservação:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} c \, dr^3 = - \int_S \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, ds, \quad (2.39)$$

onde V é o volume de controle, S é a superfície do volume de controle e $\mathbf{J}$ é a densidade de fluxo total do escalar, contabilizando a difusão e a convecção. Substituindo $\mathbf{J}$ pelas equações (2.37) e (2.38) e usando o teorema de Gauss, encontramos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} c \, dr^3 = - \int_S (-D \nabla c + \mathbf{u}c) \cdot \hat{\mathbf{n}} \, ds \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} c \, dr^3 = - \int_{\Omega} \nabla(-D \nabla c + \mathbf{u}c) \, dr^3 \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} c \, dr^3 = - \int_{\Omega} (-\nabla D \nabla c - D \nabla^2 c + \nabla \mathbf{u} \cdot c + \mathbf{u} \cdot \nabla c) \, dr^3. \quad (2.42)$$

Para os casos de difusividade D uniforme e fluidos incompressíveis, temos que ∇D e $\nabla \cdot \mathbf{u}$ são zero, então:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = D \nabla^2 c, \quad (2.43)$$

que é conhecida como a equação de difusão-convecção escalar [39]. Apesar de ser parecida com Navier-Stokes, essa equação é mais simples uma vez que o termo de pressão desaparece e o termo do campo de velocidade é linear.

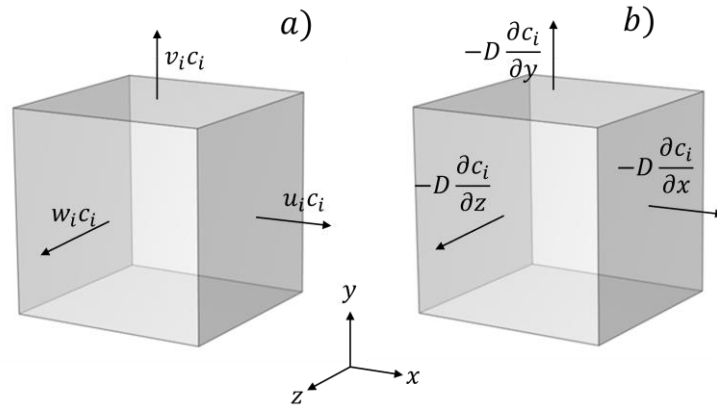


Figura 2.3 - Volumes de controle com variações de fração de concentração de um escalar por **a)** Advecção e **b)** Difusão.

2.3.2 Adimensionalização da equação de difusão-convecção

Uma maneira de facilitar a análise da contribuição dos dois mecanismos de transporte é através da adimensionalização da equação (2.43), de maneira similar ao

que foi feito com a equação de Navier-Stokes. Representamos as variáveis físicas do sistema em função de sua dimensão característica:

$$t = T\tilde{t}, \quad (2.44)$$

$$\mathbf{u} = U\tilde{\mathbf{u}}, \quad (2.45)$$

$$\mathbf{r} = L\tilde{\mathbf{r}}, \quad (2.46)$$

$$c = C\tilde{c}, \quad (2.47)$$

onde as grandezas com til representam quantidades adimensionais. Substituindo na equação (2.43), temos:

$$\frac{C}{T} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \tilde{t}} + \frac{UC}{L} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{c} = \frac{DC}{L^2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{c}. \quad (2.48)$$

Dividindo por C e multiplicando por T temos:

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial \tilde{t}} + \frac{UT}{L} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{c} = \frac{DT}{L^2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{c}. \quad (2.49)$$

Podemos prosseguir quando definirmos T , pois o tempo característico da difusão e o da convecção são normalmente diferentes. Tomando o tempo característico da convecção $T = L/U$ como referência, temos:

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{c} = \frac{1}{Pe} \tilde{\nabla}^2 \tilde{c}, \quad (2.50)$$

$$Pe = \frac{UL}{D}, \quad (2.51)$$

onde Pe é o **número de Peclet**, um parâmetro adimensional correspondente à razão entre o transporte de escalares por convecção e o por difusão em um sistema. Pode-se notar que $Pe \gg 1$ caracteriza sistemas onde a convecção tem um papel mais importante no transporte, enquanto $Pe \ll 1$ representa um domínio do transporte pela difusão [39].

2.4 O Processo Físico da Mistura

Em geral, o processo de mistura ocorre pela atuação simultânea dos dois processos descritos na equação de convecção-difusão: o transporte por difusão e o transporte por convecção, que também é conhecido por advecção. Para facilitar o entendimento, podemos estabelecer que o processo de mistura acontece em dois estágios. O primeiro seria a **advecção** das espécies, que são transportadas pelo fluido ao seguir suas linhas de fluxo, e o segundo seria a difusão através dos gradientes de concentração. O primeiro estágio potencializa o segundo diminuindo as escalas de difusão [2].

2.4.1 Difusão como uma caminhada aleatória

Podemos explicar o processo de difusão utilizando uma caminhada aleatória. Consideremos um sistema em 1-D onde uma espécie dissolvida está dentro de um solvente. Considerando que cada passo i na direção x tem comprimento $\Delta x_i = \pm l$ e que cada passo possui a mesma probabilidade de ir para cada lado, a posição final $x(N)$ após N passos será:

$$x(N) = \sum_{i=1}^N l_i, \quad (2.52)$$

onde $l_i = \pm l$. Obviamente, o valor médio de x é zero, já que ambos os lados possuem a mesma probabilidade de acontecer. Precisamos então utilizar o desvio padrão se quisermos obter informações úteis para o problema [43]:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} = l\sqrt{N}, \quad (2.53)$$

onde pode-se definir o comprimento de difusão $l_{dif}(N)$ pelo desvio padrão:

$$l_{dif}(N) = l\sqrt{N}. \quad (2.54)$$

Se definirmos um tempo τ para cada passo, o tempo total da caminhada passa a ser:

$$t = N\tau. \quad (2.55)$$

Por sua vez, pode-se relacionar o comprimento de difusão com o tempo total:

$$l_{dif}(N) = l\sqrt{\frac{t}{\tau}} = \sqrt{\frac{l^2 t}{\tau}} = \sqrt{Dt}, \quad (2.56)$$

$$D = \frac{l^2}{\tau}, \quad (2.57)$$

aqui, o coeficiente de difusividade passa a ser escrito em função do tempo característico da difusão. O tempo entre cada passo τ pode ser definido como esse tempo característico [43]:

$$T_{dif}(l) = \frac{l^2}{D}. \quad (2.58)$$

Para efeito de ilustração, escalares com coeficiente de difusão na ordem de $10^{-11}m^2/s$, por exemplo, levam cerca de 16,6 min para se difundir por uma distância microscópica de $100\mu m$, o que torna o transporte por difusão ineficiente para as aplicações microfluídicas que exigem rapidez em sua execução.

2.4.2 Um Exemplo Útil para Micromixers

Em geral, quando fluidos a serem misturados se encontram forma-se uma interface bem definida, como mostra a primeira imagem da figura 1. Podemos aproximar a situação como um problema em uma dimensão, onde um domínio infinito no eixo x possui uma interface bem definida em $y = 0$ e $t = 0$, de maneira que um escalar c possui valor $c = c_0$ em $y > 0$ e $c = 0$ em $y < 0$. Em $t = 0$, os fluidos estão

completamente separados e o escalar está totalmente no lado negativo de y . Em $t > 0$ o processo de difusão espalha o escalar na direção positiva do eixo y . Nesse caso, $u = 0$ pois não há convecção dos fluidos, e a equação (2.43) pode ser escrita em uma dimensão, como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}. \quad (2.59)$$

A solução dessa equação diferencial é:

$$c = \frac{1}{2} c_o \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{Dt}} \right), \quad (2.60)$$

onde utiliza-se a função erro de Gauss complementar. A equação (2.60) mostra que com $t \rightarrow \infty$, $c = c_o/2$ para todo y . Ou seja, após tempo suficiente, o processo de difusão torna a distribuição do escalar uniforme. Em $y = l_{dif} = \sqrt{Dt}$, $c \rightarrow \frac{1}{4} c_o$, o que torna útil a utilização de l_{dif} como escala de comprimento de difusão, visto que representa o ponto onde a solução difundiu “metade” do caminho em direção ao ponto de equilíbrio [39]. A figura 2.4 mostra um gráfico de como se comporta a distribuição do escalar em diversas instâncias de tempo.

Apesar do problema explorado não conter um campo de velocidade, a análise dele é interessante para a dinâmica da mistura em sistemas microfluídicos com fluxos estacionários. Um exemplo desses sistemas são os micromixers em T ou em Y, que são simples uniões de microcanais que transportam substâncias distintas. Essas substâncias se difundem transversalmente às linhas de fluxo, e a dinâmica desse transporte se dá igual à do problema dos reservatórios semi-infinitesimais

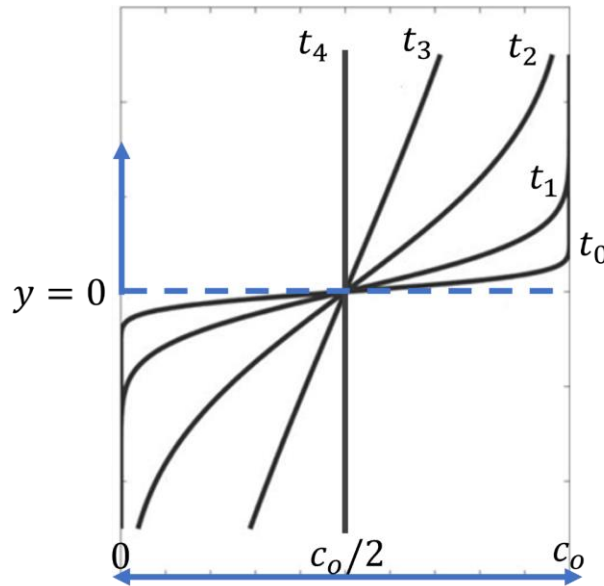


Figura 2.4 - Distribuição do escalar em diferentes instâncias de tempo. Neste exemplo a difusividade do escalar é $10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$. Adaptado de Kirby [39].

A figura 2.5 contém a ilustração de um micromixer semelhante. Inicialmente os fluidos estão separados nas câmaras A e B e entram em contato na entrada do canal, no ponto P0. Inicialmente, a interface é bem definida. Ao longo do microcanal, a interface se torna mais suave, mas nas paredes superior e inferior os valores de c são 1 e 0 respectivamente. A partir do ponto P1, os valores máximos e mínimos de c vão se aproximando de 0.5 e a curva vai se aproximando de uma reta vertical, representando o estágio de equilíbrio e de completa mistura (notar que na figura 3, a fração de concentração c se encontra no eixo horizontal) [16].

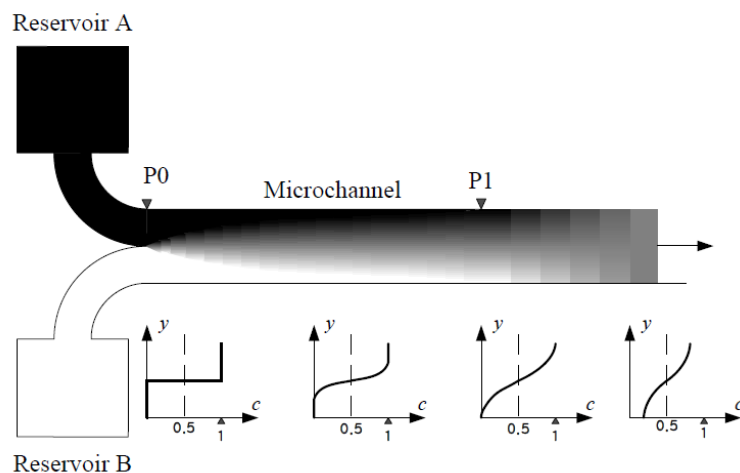


Figura 2.5 - Esquema representando o comportamento da concentração de um escalar em um sistema microfluídico sem estruturas de mistura. Adaptado de Suh [16].

O sistema da figura 2.5 possui uma geometria que é ideal para a **minimização** da mistura em sistemas microfluídicos [39]. O tempo característico da difusão é proporcional à l^2/D onde l representa o comprimento característico da sessão transversal do microcanal. A escala temporal da difusão é demasiadamente lenta para a maioria das aplicações microfluídicas, de forma que a convecção dos fluídos se torna necessária para acelerar os processos de mistura, tendo em vista que pode diminuir a escala dos comprimentos de difusão. Para **maximizar** a mistura, a agitação dos fluidos gerada pela convecção precisa diminuir a escala do comprimento da separação espacial entre os fluidos A e B, de maneira que essa se aproxime da escala de comprimento de difusão $l_{dif} = \sqrt{Dt}$.

Em níveis moleculares, para um dado sistema cujo a soma de dois fluidos forma um determinado volume, a agitação desses fluidos resulta no aumento da interface de contato entre eles. Se o volume é constante, o aumento da área de contato diminui a **espessura de estriação**, que seria a distância entre as camadas dos fluidos a serem misturados. O objetivo da convecção na aceleração da mistura é o de promover menores espessuras de estriação e, em micromixers passivos, isso é alcançado através da interação entre a inercia do escoamento e as estruturas geométricas do micromixer.

2.4.3 Tempo de Permanência

Um parâmetro importante para a difusão de escalares é o tempo de permanência, que pode ser entendido como o tempo em que um ponto material passa dentro de um volume de controle [44]. Em campos de velocidade estacionários e conservativos, o tempo de permanência pode ser escrito como a razão entre o volume de controle e a taxa de fluxo que passa por esse volume:

$$t_r = \frac{V}{Q}. \quad (2.61)$$

Como a taxa de fluxo é diretamente proporcional ao número de *Reynolds*, temos que:

$$t_r \sim \frac{1}{Re}. \quad (2.62)$$

A relação (2.62) mostra que escoamentos muito lentos, com $Re < 1$ terão um tempo de permanência muito alto, o que favorece o processo de difusão. Com $Re > 1$, o tempo de permanência se aproxima de zero rapidamente, de maneira que processos convectivos devem compensar essa redução com um grande aumento da área de contato se o resultado desejado for a mistura.

2.5 Mecanismos e Técnicas de Mistura Passiva

Micromixers passivos utilizam microcanais com geometrias específicas que buscam manipular os fluidos de maneira que, no fim, há uma redução do comprimento de difusão do sistema, o que acarreta a aceleração da mistura. Potencialmente, há uma infinidade de maneiras de se misturar espécies em sistemas microfluídicos passivamente. Contudo, algumas linhas gerais podem ser destacadas visto que estão presentes em boa parte da literatura de micromixers passivos.

2.5.1 Mistura Caótica

Como Tabeling [2] relembra, um sistema dinâmico é um conceito central envolvido em regimes caóticos. Em misturas caóticas, é importante relacionar a velocidade do fluido $u(x, t)$ à posição $x(t)$ de uma partícula de interesse. Nesse caso, um sistema dinâmico, é um sistema de equações diferenciais da forma:

$$\frac{dx}{dt} = u(x, t), \quad (2.63)$$

cuja as soluções podem ser vistas como trajetórias das partículas de interesse com coordenadas espaciais $X(t)$ no sistema de coordenadas (X, Y, Z) . Uma vez que uma solução apresenta sensibilidade às condições iniciais, esse sistema é considerado

caótico [2]. Em termos mais objetivos, isso equivale a dizer que, em um sistema caótico, partículas próximas apresentam trajetórias que divergem exponencialmente com o tempo, em média.

Considerando um ponto com coordenada inicial $X(t_o)$, onde t_o é o tempo inicial. Podemos definir a posição de uma partícula próxima como $X + \delta x$. O vetor δx determina se as partículas divergem ou não com o tempo. Se existe uma determinada direção em que as partículas se afastam exponencialmente, o sistema é considerado caótico. Pode-se escrever:

$$\delta x_i(t) \approx \delta x_0 e^{\sigma_i t}, \quad (2.64)$$

onde δx_i é a componente do vetor de separação na direção i , σ_i é um parâmetro maior que zero e δx_0 é um parâmetro pequeno. Pode-se escrever σ_i como:

$$\sigma_i = \frac{1}{t} \ln \left(\frac{\delta x_i(t)}{\delta x_0} \right). \quad (2.65)$$

A análise também é feita sobre a trajetória $X(t)$, terminando com um conjunto de parâmetros σ_i que dependem de $X(t)$. A média desses valores, quando positiva, recebe o nome de número de Lyapunov e corresponde à direção pela qual a divergência das trajetórias é maximizada. Em micromixers caóticos, a ordem de magnitude desse número é proporcional ao inverso da razão entre o comprimento característico da mistura e a velocidade característica de mistura. Essa razão é conhecida como “*turnaround time*” [2].

De maneira prática e intuitiva, se as trajetórias divergem, os comprimentos das linhas de matéria crescem exponencialmente, mas se o sistema é fechado essas linhas devem se esticar e dobrarem-se sobre si mesmas, pois volume e massa permanecem constantes. O resultado corresponde ao surgimento de estruturas cinemáticas como os vórtices e as transformações do Padeiro [2], como mostram as figuras 2.6 e 2.7. Essas estruturas aumentam a área superficial da interface de contato

e diminuem a espessura de estriação, diminuindo o comprimento característico da difusão.

Em termos mais abrangentes, a sensibilidade às condições iniciais de sistemas caóticos faz com que perturbações muito pequenas sejam amplificadas exponencialmente. Em sistemas físicos, os sistemas caóticos são governados por equações determinísticas, mas eles diminuem a correlação com essas equações com o passar do tempo [2]. No contexto de misturas em sistemas microfluídicos, um escoamento determinístico pode resultar, caoticamente, em uma mistura através da amplificação das flutuações aleatórias envolvendo a difusão [39].



Figura 2.6 - Esquema exemplificando a diminuição da espessura de estriação através de um vórtex. Adaptado de Kirby [39].

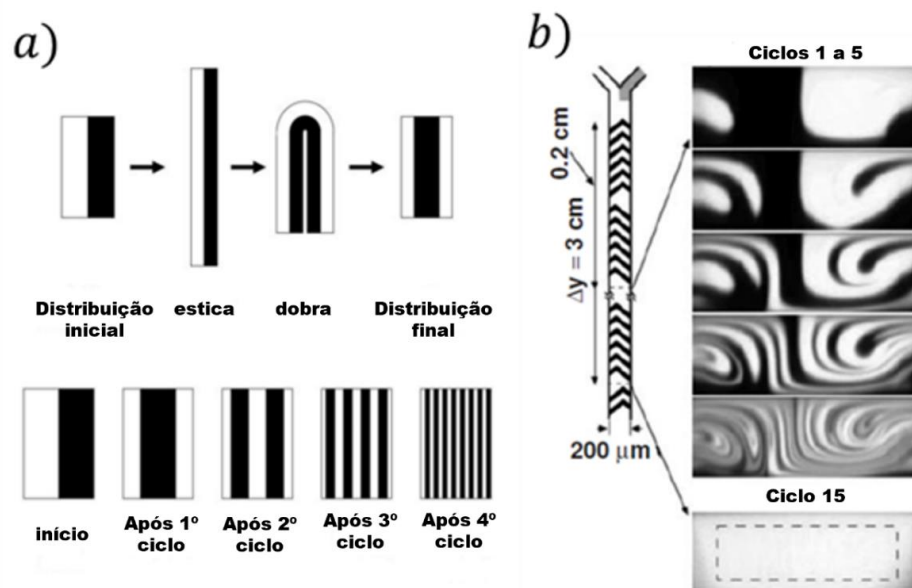


Figura 2.7 - a) Esquema exemplificando a transformação do padeiro. Começa-se com uma distribuição, a estica e a dobra sobre si mesma. Após algumas dobras o sistema se encontra mais distribuído e a área de contato entre os fluidos maior. b) Micromixer desenhado para gerar estruturas similares à transformação do padeiro com a utilização de buracos que guiam o fluxo. Adaptados de Kirby [39].

2.5.2 Redução de Tamanho e Focalização Hidrodinâmica.

A ideia mais simples para se realizar uma mistura não caótica efetiva é através da diminuição do tempo de difusão ao **reduzir o espaço** por onde os fluidos podem escoar. Ao diminuir a largura do microcanal, as linhas de fluxo laminar ficam mais próximas umas das outras. Considerando um microcanal com largura w e altura h , o tempo de difusão é proporcional à:

$$t \sim \frac{w^2}{D}. \quad (2.66)$$

Se os fluidos estiverem escoando com velocidades Q/wb , onde Q é a vazão desses fluidos, a distância necessária para a mistura ocorrer será próximo à [1]:

$$L \sim \frac{Qw}{bD}. \quad (2.67)$$

A vantagem dessa estratégia está na facilidade em se ajustar os parâmetros geométricos desse micromixer. Contudo, reduzir a largura do canal pode resultar em quedas de pressão muito grandes. A **redução de tamanho** pode ser obtida através da **focalização hidrodinâmica**, que utiliza as vazões de fluídos para manipular a direção das linhas de fluxo laminar das espécies a serem misturadas. Knight e colaboradores [45] utiliza dois fluidos, A e B, vindos de dois canais adjacentes ao canal principal onde se encontram as espécies a serem misturadas (figura 2.8). Os fluidos A e B têm suas vazões ajustadas de maneira que comprimem o fluido do canal principal, acelerando a mistura através da redução do espaço.

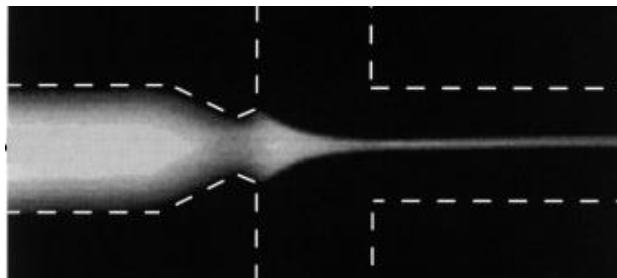


Figura 2.8 - Focalização hidrodinâmica. Reproduzido e Adaptado de Knight [45].

2.5.3 Vórtices Secundários de Dean

Em microcanais curvos, efeitos inerciais podem surgir e auxiliar o processo de mistura. Ao executar uma curva dentro de um microcanal, o escoamento de um fluido apresenta uma diferença entre o vetor de velocidade no centro da seção transversal do canal e nas regiões próximas às paredes. Por terem mais inércia, elementos de fluido próximos da altura do centro do microcanal são empurrados para a parede mais externa (relativo ao centro de curvatura do microcanal), enquanto elementos próximos às paredes superior e inferior são empurrados pelo gradiente transversal de pressão em direção à parede interna. O resultado é o surgimento de dois vórtices simétricos que giram em sentidos opostos (figura 2.9), chamados de fluxos secundários ou fluxos de Dean [36].

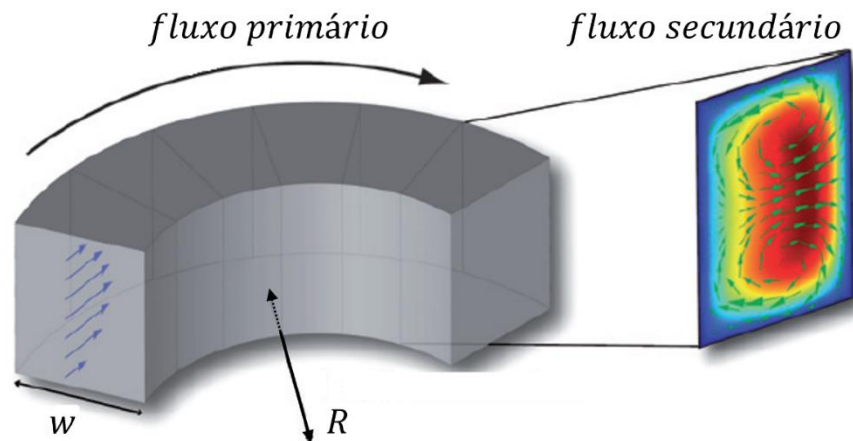


Figura 2.9 - Esquema com vórtices de Dean gerados por um canal de curvo de largura w e raio de curvatura R . Adaptado de Di Carlo [46].

Há um parâmetro adimensional chamado número de Dean que é usado para caracterizar esses escoamentos secundários. O número de Dean κ é proporcional à geometria do microcanal e ao número de Reynolds do escoamento:

$$\kappa = Re \sqrt{\frac{w}{2R}}, \quad (2.68)$$

onde w é a largura do microcanal e R é o raio de curvatura. Além de dar um indicativo da velocidade do escoamento secundário, κ também possui correlação com a forma do escoamento, onde maiores valores de κ indicam a aproximação dos centros dos

vórtices das paredes externas [46]. Dependendo da geometria do microcanal, o aumento de κ também pode indicar surgimento de mais pares de vórtices [32].

2.5.4 Vórtices de Expansão

Dependendo das geometrias e do número de Reynolds do escoamento, a separação entre a camada limite e o resto de fluxo pode ocorrer. Para escoamentos internos, um crescimento abrupto da seção transversal do canal deve vir acompanhado de um gradiente de pressão positivo, conhecido como gradiente de pressão adverso. De acordo com a equação de Bernoulli, um gradiente de pressão adverso, se for intenso o suficiente, pode inverter o sentido da velocidade fluxo. A equação é:

$$u \frac{\partial u}{\partial s} = -\frac{1}{\rho} \frac{dP}{ds}, \quad (2.69)$$

onde s é uma coordenada que segue a linha de fluxo [44]. O fluxo separado gera uma zona de recirculação composta por um ou mais vórtices (figura 2.10). Em aplicações microfluídicas, esses vórtices são chamados de vórtices de expansão e podem ser utilizados para acelerar misturas, homogeneizar fluidos, prender partículas, entre outros [47].



Figura 2.10 - Linhas de fluxo formando um vórtice de expansão após aumento abrupto da área da seção transversal. Fonte: autor.

3. CONSTRUÇÃO GEOMÉTRICA DOS MICROMIXERS E DEMAIS METODOLOGIAS

Neste capítulo serão detalhados os métodos utilizados na execução do trabalho. Primeiramente são descritos os parâmetros geométricos de construção do micromixer. O desenho dos modelos desenvolvidos neste trabalho e do micromixer de referência seguem uma determinada ordem de execução e é importante que esse algoritmo geométrico de construção seja descrito para comparações com possíveis trabalhos do futuro. Em seguida, é descrito o estudo paramétrico a ser realizado na análise numérica e os detalhes das simulações que a compõem. Por fim, é especificado como os dados obtidos no estudo numérico fornecem informações para a caracterização da eficiência dos modelos dos micromixers propostos.

A metodologia que será utilizada nesse trabalho segue a mesma linha apresentada na literatura [48][49][50] e pode ser resumida em três etapas. Inicialmente, etapa 1, desenha-se um modelo de micromixer (original ou baseado em alguma referência) e um determinado parâmetro geométrico a ser variado, como por exemplo, a relação entre as larguras de alguns canais [33], o ângulo de uma determinada curva [51], a amplitude e a fase da senoide que descreve uma parede [48], entre outros. A partir da escolha do modelo e da definição do parâmetro geométrico, os modelos desenhados são submetidos a um estudo paramétrico onde se prevê numericamente a eficiência e as estruturas hidrodinâmicas que surgem quando submetidos a diferentes escoamentos, esta é a etapa 2. Esses escoamentos são representados pelo número de Reynolds calculado em uma seção transversal de interesse dos micromixers. Por fim, na terceira etapa, as capacidades de mistura de cada modelo de interesse são comparadas entre si, considerando os diferentes escoamentos testados.

3.1 Parâmetros Geométricos dos Micromixers

Os micromixers propostos nesse trabalho são baseados nos modelos rômnicos de colisões desequilibradas elaborados por Ansari e colaboradores [33]. Como explanados no capítulo 1, eles utilizam a separação e a recombinação desequilibrada para promover a aceleração da mistura por meio do choque inercial entre os dois fluxos que se recombina. Os modelos aqui apresentados buscam distorcer o fluxo nos subcanais maiores com a introdução de deslocamentos com constrições, que visam alterar a dinâmica dos fluidos nesses subcanais e nas zonas de recombinação.

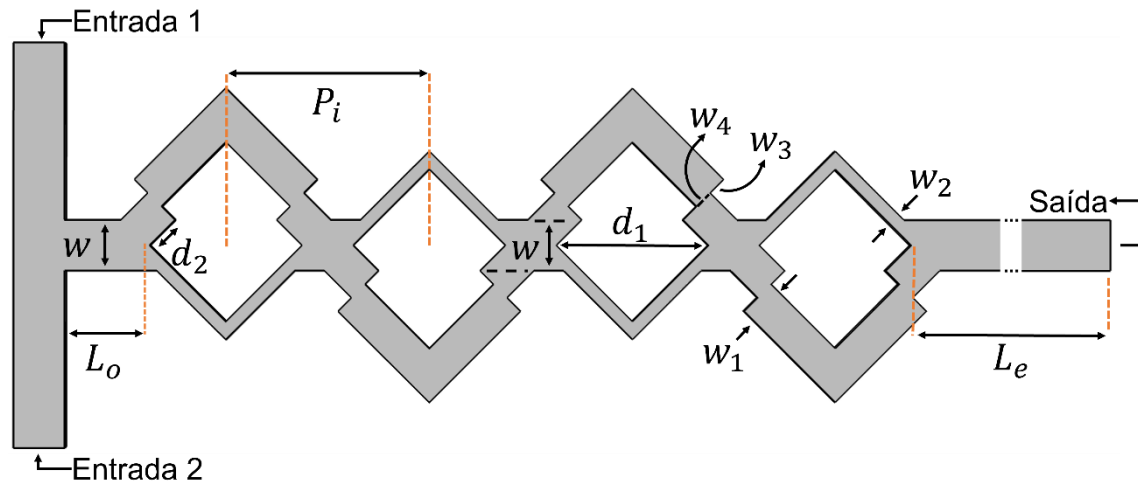


Figura 3.1 - Diagrama destacando as dimensões geométricas do modelo rômico de colisões desequilibradas com subcanais deslocaos. Modelo da figura: W_r 1,0. Fonte: Elaborado pelo autor.

As dimensões dos micromixers foram escolhidas de acordo com a literatura. As dimensões de trabalhos similares como Ansari [33], Li [34], Raza [35] e Hossain [51] foram usadas como referências. Os micromixers são planares e possuem altura de $200 \mu m$ em todos os seus pontos. Como mostra a figura 3.1, há duas entradas que se unem em uma junção em T e formam o canal principal, com largura $w = 300 \mu m$. As larguras das entradas também possuem $300 \mu m$. Os micromixers possuem quatro câmaras que são unidas pelas zonas de recombinação. A diagonal do quadrado maior na região central das câmaras é $d = 900 \mu m$. O primeiro vértice do quadrado maior da primeira câmara se encontra a $L_o = 500 \mu m$ da entrada do canal principal. A distância entre duas câmaras consecutivas, que é o “passo” (do inglês *pitch*) equivale a $P_i =$

1200 μm . Os subcanais maior e menor são desenhados projetando a parede do quadrado central para fora e possuem larguras de $w_1 = 225 \mu m$ e $w_2 = 75 \mu m$. Eles possuem uma razão de proporção de 3:1 e somados possuem o mesmo valor que a largura do canal principal ($w_1 + w_2 = w$). O parâmetro $d_2 = 212 \mu m$ marca a posição dos deslocamentos em relação aos vértices que estão no meio do canal principal. Os deslocamentos são desenhados de maneira que o subcanal é projetado para a direção externa. Por fim, $L_e = 2950 \mu m$, que é o comprimento do canal principal de saída.

O parâmetro de variação entre os modelos é a razão $W_r = w_3/w_4$, onde os parâmetros w_3 e w_4 descrevem os deslocamentos e são definidos de tal maneira que somados possuem o mesmo valor que a largura do subcanal maior, $w_1 = 225 \mu m$. As razões $W_r = w_3/w_4$ escolhidas para teste foram 0,5; 1,0 e 2,0. As dimensões dos parâmetros w_3 e w_4 estão na tabela 3.1. A figura 3.2 contém mostra em detalhes os deslocamentos.

Tabela 3.1 -Dimensões que definem os deslocamentos nos subcanais maiores dos modelos propostos

W_r	w_3	w_4
0.5	75,0 μm	150,0 μm
1.0	112,5 μm	112,5 μm
2.0	150,0 μm	75,0 μm

Os três descolamentos possuem constrições determinadas pelo parâmetro w_4 . É esperado que todos os três modelos propostos possuam capacidades de mistura melhores quando comparados ao controle (sem deslocamento). Como discutido no capítulo 1, é esperado que as constrições dos deslocamentos gerem vórtices de expansão e criem uma aceleração local do fluxo, culminando em distorções nas interfaces de contato dos fluidos.

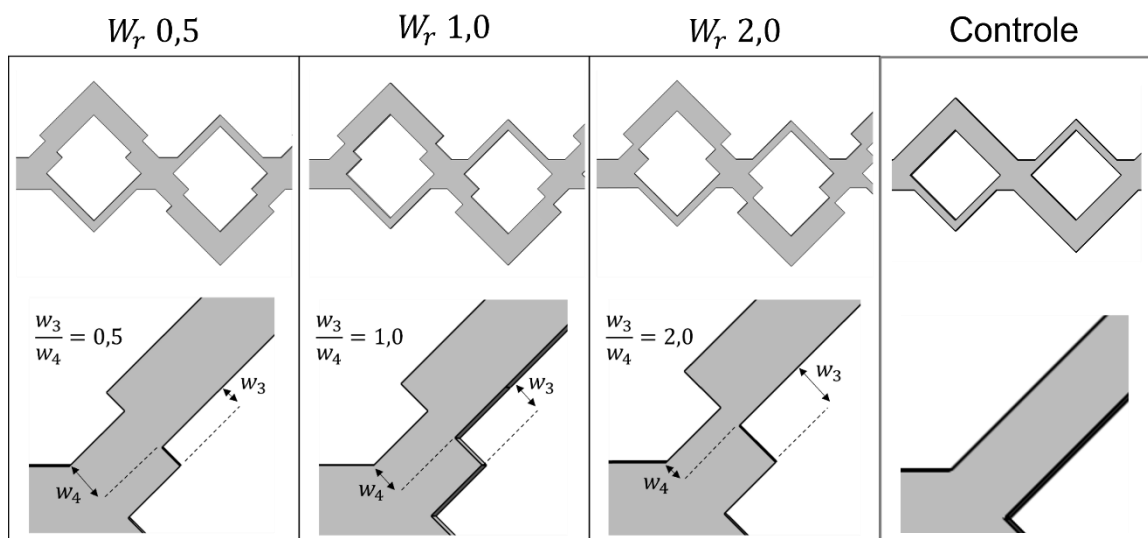


Figura 3.2 - Diagrama destacando a principal característica dos modelos propostos, os deslocamentos nos subcanais maiores. Destaca-se também a diferença entre o micromixer de controle e os demais. Fonte: Elaborado pelo Autor.

3.2 Análise Numérica

Para prever a eficiência de mistura dos micromixers foram realizadas simulações computacionais com o software comercial COMSOL Multiphysics 5.6. Como dado de entrada, primeiro se desenha um modelo 3D do problema a ser trabalhado. No presente caso, foram projetados três micromixers e o de controle em modelos tridimensionais. Em seguida, configuramos todos os parâmetros que descrevem o problema físico, as condições de contorno, dentro do COMSOL. Uma vez que as simulações estão completas, temos acesso a uma variedade de dados que podem ser visualizados, recortados e analisados.

Todos os processos foram realizados em um computador pessoal com processador AMD Ryzen-5 3500X e 32GB de memória RAM com frequências de 3000 MHz. Os micromixers aqui trabalhados foram inicialmente desenhados em 2D no software de gráficos vetoriais CorelDraw 2021. Em seguida, os arquivos foram importados em formato DXF para o ambiente gráfico do COMSOL, onde, por fim, passaram por uma extrusão de 200 μm de altura.

O software COMSOL Multiphysics possui o objetivo de aplicar o Método dos Elementos Finitos para solucionar equações diferenciais parciais aplicadas a problemas físicos. Ele possui módulos que são desenvolvidos para solucionar problemas de diferentes áreas aplicadas da física e engenharia, de maneira que as equações diferenciais referentes a essas áreas podem ter soluções aproximadas para os modelos geométricos inseridos. Em nosso trabalho utilizaremos o módulo de **fluxo laminar** para solucionar as equações de Navier-Stokes e a equação de continuidade em diferentes escoamentos, e utilizaremos o módulo de **transporte de espécies diluídas** para resolver a equação de difusão-convecção. Nessa metodologia, o COMSOL resolverá os campos de pressão e velocidade em todos os escoamentos e utilizará a solução do campo de velocidade na equação de difusão-convecção a fim de obter o campo de concentração de um escalar. O escalar é inserido na entrada 1 dos micromixers (figura 3.1) com uma determinada densidade de concentração. Obter o campo de concentração desse escalar nos fornece a informação do quão misturado ele estará após passar pelo micromixer.

3.2.1 Condições de Contorno

No módulo de fluxo laminar, foi selecionada a água com densidade de 1000 kg/m^3 e viscosidade uniforme de $0,001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ como meio material. Nesse trabalho, a água é considerada incompressível. Nas paredes dos micromixers as condições de não-eskorregamento foram selecionadas, o que quer dizer que a velocidade da água nas paredes é a mesma da parede (zero nesse caso). Os fluxos são considerados estacionários. Na saída dos micromixers, uma pressão estática de zero é definida.

Na literatura, os escoamentos são definidos por um número de Reynolds que é calculado em um ponto arbitrário do micromixer. Em nosso caso, trabalharemos com escoamentos dos quais os números de Reynolds variam de 5 a 100 ($Re = \{5, 10, 20, 40, 60, 80, 100\}$). Esses valores são definidos e calculados no canal principal do micromixer, antes da primeira câmara de mistura. No COMSOL, selecionados as velocidades dos fluidos nas entradas 1 e 2 dos micromixers. O perfil de velocidade

nas entradas é uniforme ($\mathbf{u} = -U_o \hat{\mathbf{n}}$, onde $\hat{\mathbf{n}}$ aponta para o lado externo). Para obter os módulos das velocidades de entrada, utilizamos a seguinte equação:

$$U_o = \frac{\eta Re}{2\rho w}, \quad 3.1$$

onde η é a viscosidade da água, ρ é a densidade da água, Re é o número de Reynolds do escoamento e w é a largura do canal principal dos micromixers. Um fator 2 é inserido no denominador pelo fato de que a vazão no canal principal é o dobro das vazões nas entradas dos micromixers. A tabela 2 a seguir mostra os valores de U_o e a respectiva vazão nas entradas para cada escoamento.

Tabela 3.2 - Módulos das velocidades uniformes aplicadas nas entradas dos micromixers e respectivas vazões, para cada escoamento.

Re	Velocidade ($m \cdot s^{-1}$)	Vazão ($\mu L/min$)	Vazão ($\mu L/s$)
5	0,00842	30,3	0,505
10	0,01685	60,6	1,010
20	0,03370	121,2	2,020
40	0,06741	242,4	4,040
60	0,10112	363,6	6,060
80	0,13482	484,8	8,080
100	0,16853	606,6	10,100

No módulo de transporte de espécies diluídas foi utilizada uma concentração de $c = 1 \text{ mol}/m^3$ de um escalar arbitrário que é inserido continuamente na entrada 1, enquanto na entrada 2 a concentração é de $c = 0$. O escalar age como um parâmetro rastreador, e o campo de concentração calculado nos fornece a sua evolução, de maneira que é possível obter a informação sobre como esse escalar se distribui e se mistura no micromixer. Uma vez que as condições de contorno estão configuradas, o próximo passo no COMSOL é a discretização do problema e a geração da malha de elementos.

3.2.2 Discretização e Estudo de Malha

No método dos elementos finitos, é preciso dividir o problema físico em blocos menores, chamados de elementos, onde aproximações numéricas para as equações diferenciais parciais do problema serão obtidas. O método dos elementos finitos obtém as soluções em cada elemento e constrói um grande modelo que busca se aproximar da solução real do problema. Dentro de cada elemento, as funções que formam a base da solução aproximada podem ser lineares, quadráticas ou de ordens maiores. Aumentar a ordem dessas funções, diminui o erro entre a solução aproximada e a solução real. Outra maneira de diminuir esse erro é através do uso de blocos cada vez menores, aumentando a discretização do problema. Em ambos os casos, diminuir o erro aumenta o custo computacional das simulações. É interesse do pesquisador obter soluções mais precisas por custos computacionais não proibitivos. Para mais informações, consultar a referência [52].

A discretização dos modelos 3D a serem trabalhados divide o problema em um conjunto de elementos que é chamado de **malha**. O COMSOL possui uma interface e um gerador próprio de malhas automatizado que auxilia o trabalho do pesquisador e, portanto, nesse trabalho foi utilizado essa ferramenta. Inicialmente, elementos triangulares foram construídos na superfície superior dos micromixers e depois foram “varridos” (*swept*) até a superfície inferior, gerando uma malha prismática semiestruturada. A escolha do tipo de malha foi baseada na facilidade de implementação e precisão. Malhas tetraédricas não estruturadas são mais simples de serem implementadas, mas propagam níveis maiores de difusão numérica, que é um erro intrínseco em simulações com campos de concentração, que infla artificialmente os valores de interesse. As malhas prismáticas semiestruturadas apresentam menos difusão numérica que malhas tetraédricas e são relativamente simples de serem construídas. Além disso, malhas prismáticas geram elementos menos convexos com relação às malhas tetraédricas, o que resulta em elementos de melhor qualidade [53]. Levando em consideração esses aspectos foi decidido utilizar as malhas prismáticas semiestruturadas. Aspectos geométricos da malha podem ser visualizados na figura 3.3.

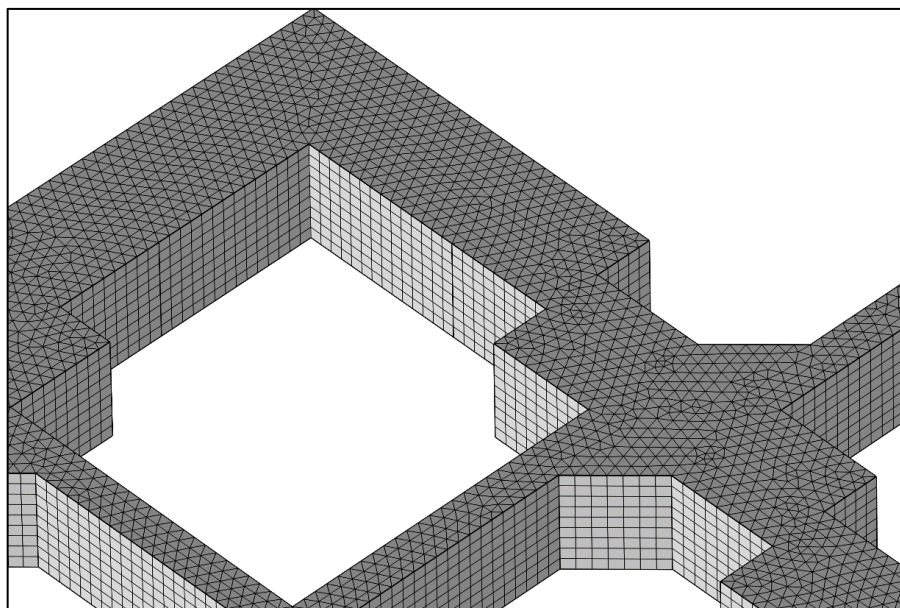


Figura 3.3 - Aspectos da malha prismática utilizadas para as simulações. Modelo da figura: W_r 1,0.

Em todo estudo numérico que utiliza o método dos elementos finitos, é importante garantir que as malhas utilizadas geram soluções confiáveis [33]. O aumento da densidade de elementos tende a resultar em soluções mais próximas da solução real, mas esse aumento tem como contrapartida o crescente custo computacional e a ampliação do tempo necessário para a realização das simulações. Nesse sentido, é preciso atingir um equilíbrio entre a precisão da simulação e o custo computacional.

Para contornar esse obstáculo utilizamos um teste de convergência. Simulamos o mesmo modelo com as mesmas condições de contorno aumentando a densidade de elementos na malha e observando a convergência de algum resultado de interesse. Foi adotado a malha com a quantidade de elementos necessários para que o resultado apresentado tenha uma variação inferior a 5% do apresentado pela malha anterior. Neste estudo, malhas com cerca de 225×10^5 elementos prismáticos demonstraram atender à exigência estabelecida. A grandeza utilizada como referência foi o índice de mistura (figura 3.4), que será explicado na próxima seção, na saída do micromixer W_r 0,5 em um escoamento de Re 40.

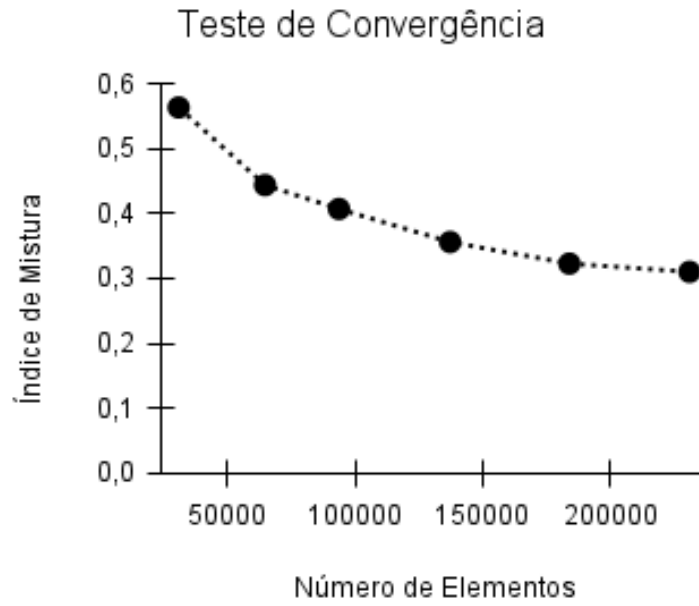


Figura 3.4 - Teste de Convergência das malhas prismáticas utilizando o caso Wr 0,5 com Re 40.

3.3 Análise de Dados

Uma vez que as simulações estejam concluídas, o COMSOL armazena as soluções aproximadas dos campos de pressão p , velocidade $\mathbf{u}$ e concentração do escalar c . O jeito mais conveniente de acessar esses dados é por meio de *plots* em recortes transversais, recortes longitudinais, projeções nas superfícies externas, ou *plots* tridimensionais dentro dos micromixers. Todas essas formas de representação gráfica foram utilizadas para observar a evolução dos três campos mencionados de maneira qualitativa.

Além da análise dos campos, para determinar a eficiência dos micromixers, dois outros parâmetros são importantes: O Índice de Mistura Mi (do inglês *Mixing Index*) e a queda de pressão Pd , do inglês *Pressure Drop*). O Índice de mistura é calculado no plano transversal de saída dos micromixers através da equação:

$$Mi = 1 - \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (c_i - \bar{c}_m)^2}{\sigma_{max}^2}}, \quad 3.2$$

onde c_i é a fração de concentração no i -ésimo ponto de amostragem, N é o número de pontos de amostragem, σ_{max}^2 é a variância máxima da fração de concentração obtida na situação de pior mistura e equivale a 0,25. Por fim, $\bar{c}_m$ é a fração de concentração em uma situação de completa mistura [34] que, nesse trabalho é dado por $\bar{c}_m = 0,5 \text{ mol/m}^3$. Uma situação de perfeita mistura é descrita por $Mi = 1$.

A queda de Pressão Pd foi obtida através da subtração da média das pressões calculadas no canal principal nos planos destacados da figura 3.4, um plano antes da primeira câmara de mistura e outro após a última.

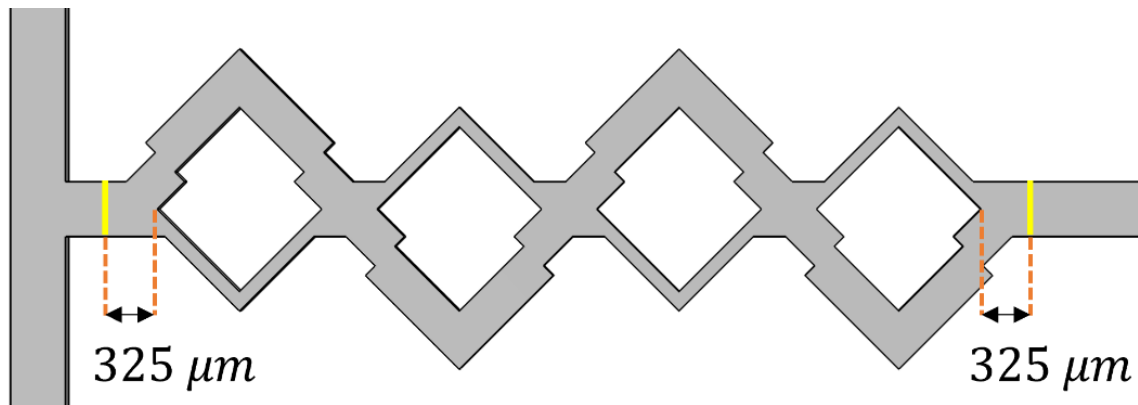


Figura 3.5 - Planos transversais (em amarelo) onde se calculam as médias das pressões na entrada e saída dos micromixers para calcular a queda de pressão. Modelo da figura: Wr 0,5. Fonte: Autor.

Com o auxílio das representações gráficas dos campos de pressão, velocidade e concentração do escalar c , é possível observar de maneira qualitativa como as características geométricas dos micromixers influenciam a evolução desses campos e, conseqüentemente, a mistura. Quantificamos a interação da geometria com a inércia dos escoamentos através dos Índices de mistura e das quedas de pressão.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados os resultados e as discussões referentes à capacidade de mistura dos nossos micromixers comparados com o controle. Primeiramente, é descrito como as estruturas geométricas dos micromixers atuam em conjunto com a inércia dos escoamentos para produzir estruturas cinemáticas, que deformam as interfaces de contato dos fluidos e aceleram a mistura. Para tal, os micromixers são analisados até o fim da primeira câmara de mistura, uma vez que as interfaces de contato dos fluidos ainda estão bem definidas e os campos de velocidade se repetem no restante de cada micromixer. O campo de concentração não se repete em cada câmara como o de velocidade, pois ele evolui devido a difusão do escalar. Dessa maneira, foca-se no restante das zonas de recombinação para mostrar a evolução dos campos de concentração até as saídas. Nessa primeira parte, $Re\ 20$ é usado para representar os escoamentos mais lentos, $Re\ 60$ para os intermediários e $Re\ 100$ para os mais velozes. Em seguida, a seção de resultados continuará com a apresentação e a discussão dos índices de mistura e das quedas de pressão, que são os principais parâmetros de avaliação de eficiência de micromixers. E por fim, os motivos pelos quais esses valores foram obtidos e as perspectivas que esses valores representam serão discutidas.

4.1 Efeitos da Geometria sobre os Campos de Velocidade e Concentração

Micromixers passivos funcionam utilizando a interação da inércia dos escoamentos com as estruturas geométricas dos micromixers. O objetivo primário desses dispositivos é a perturbação das linhas de fluxo do escoamento, buscando a criação de fluxos transversais, que por sua vez, ampliam as interfaces de contato dos fluidos a serem misturados. Os modelos de micromixers estudados nesse trabalho são modelos planares de separação e recombinação com subcanais rômnicos de larguras que seguem a proporção de 3:1. A principal característica é a adição de deslocamentos nos subcanais mais largos. Esses deslocamentos são construídos de

maneira que geram constrições, as quais provocam a aceleração local da velocidade dos fluidos como também a geração de vórtices de expansão. A figura 4.1 mostra as principais estruturas geométricas dos micromixers a serem analisados. As análises seguirão a seguinte ordem na apresentação: Junção em T, Bifurcação, Deslocamento e Construção, Curva 90° e Zona de Recombinação.

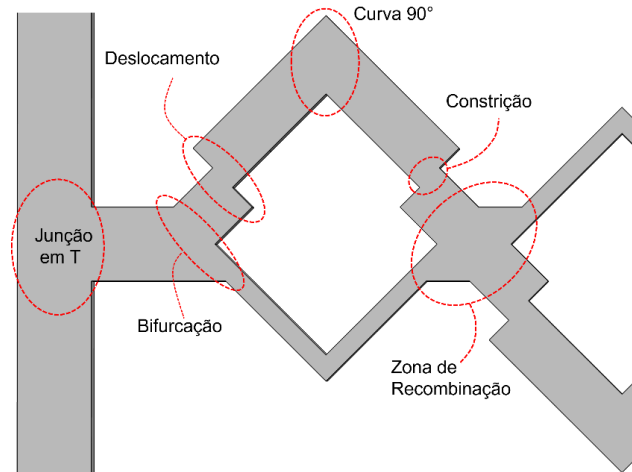


Figura 4.1 - Principais Estruturas Geométricas dos Micromixers. Modelo na figura: W_r 1,0.

Durante as próximas subseções os campos de velocidade serão representados com recortes transversais, que mostrarão vetores com o mesmo fator de escala, e com *plots* tridimensionais das linhas de fluxo. Os campos de concentração também serão exibidos com recortes transversais. Tanto as linhas de fluxo tridimensionais como os recortes dos campos de concentração possuem informação sobre a fração de concentração do escalar c nos pontos mostrados. A escala colorida da fração de concentração é mostrada na figura 4.2. As regiões de alta concentração estarão mais próximas do vermelho, enquanto as de baixa do azul. A situação de completa mistura é representada por pontos com frações de concentração de 0,5, na cor verde.

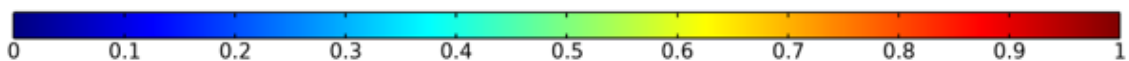


Figura 4.2 - Escala colorida de fração de concentração utilizada nos *plots* tridimensionais das linhas de fluxo e nos recortes transversais dos campos de concentração.

4.1.1 Junção em T

A estrutura mais básica dos nossos modelos é a junção em T, que une os fluidos que entram pelas duas entradas. A junção em T é considerada o micromixer mais básico [53], uma vez que somente conecta os fluidos com um choque frontal. As simulações realizadas mostram que o choque frontal é capaz de induzir vórtices transversais em escoamentos intermediários e maiores como visto para Re 60 e Re 100 na figura 4.3. Esses vórtices conseguem criar uma pequena distorção na parte superior e inferior da interface de contato, espalhando o escalar, acelerando o processo de mistura.

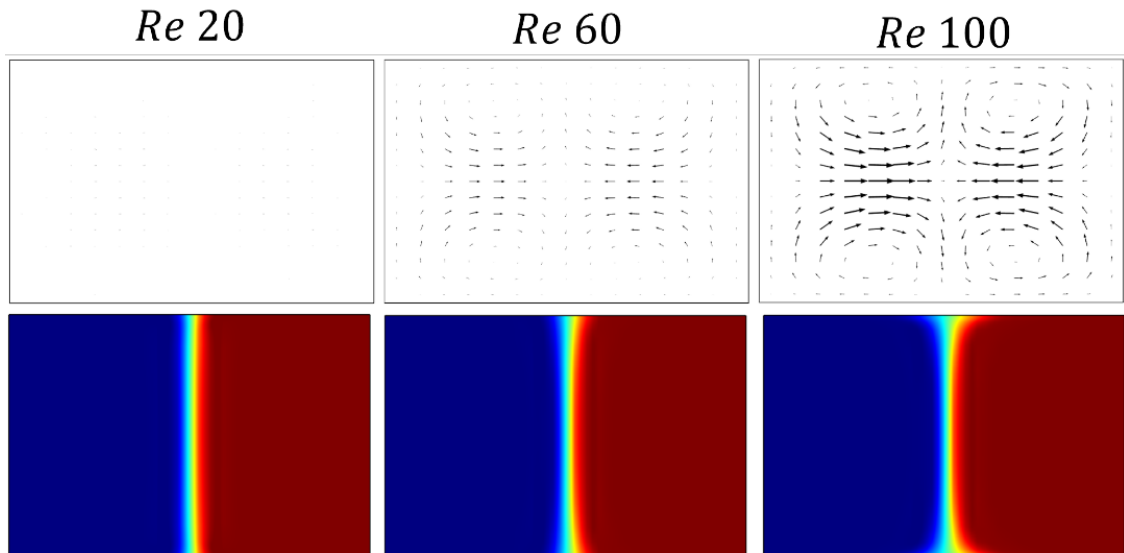


Figura 4.3 - Recortes transversais na Junção em T, na entrada do canal principal, dos campos de velocidades (imagens superiores) e dos campos de concentração (imagens inferiores) nos escoamentos Re 20, Re 60 e Re 100. Modelo da imagem: W_r 0,5.

4.1.2 Bifurcação

Por meio de uma bifurcação em formato de “Y”, os fluidos são separados entre os subcanais maior e menor ao adentrar a primeira câmara de mistura. Em todos os modelos e em todos os escoamentos, a interface de contato entra inteiramente no subcanal maior nesta primeira divisão, restando apenas fluido da entrada 2 no subcanal menor, com gradiente de concentração igual a zero. Devido ao ângulo de 45° na bifurcação, os fluidos entram nos subcanais realizando uma curva. Como

consta no capítulo 2, a realização de uma curva por um fluido em movimento pode ocasionar na geração de um par de vórtices simétricos chamados de vórtices de Dean. Escoamentos maiores geram vórtices mais intensos, como mostra a figura 4.4, a qual mostra a direção do campo de velocidade na entrada do subcanal maior. Os vórtices causados pelas curvas da bifurcação distorcem a interface de contato, que apresenta uma concavidade como mostra a figura 4.5. A concavidade se torna mais fechada em maiores Re .

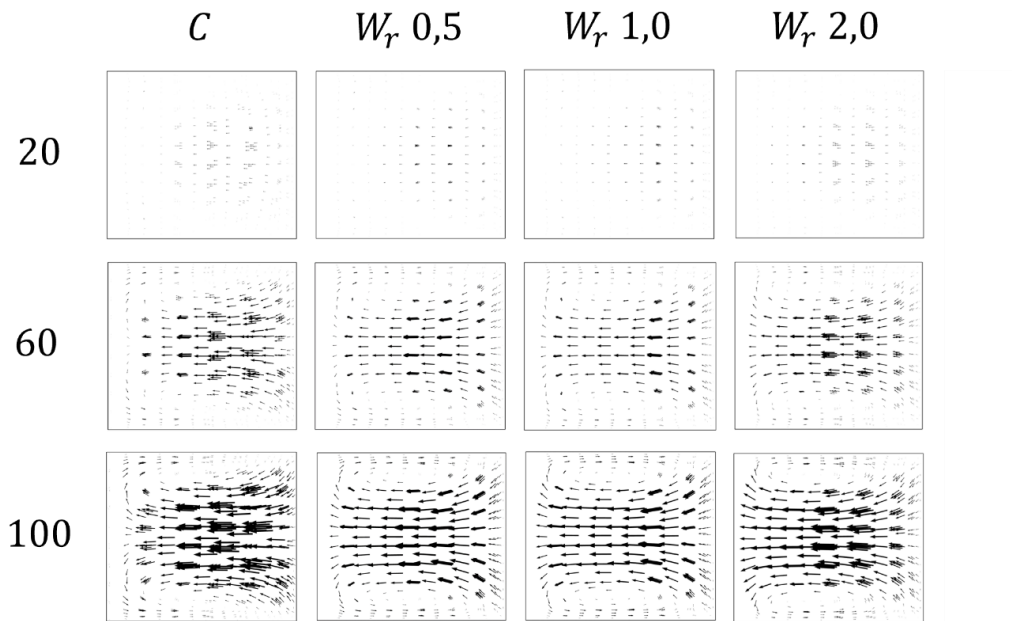


Figura 4.4 - Campo Vetorial da Velocidade Transversal na entrada dos subcanais maiores. A coluna a esquerda representa os escoamentos, enquanto a linha superior determina o modelo de micromixer. C é o micromixer de controle.

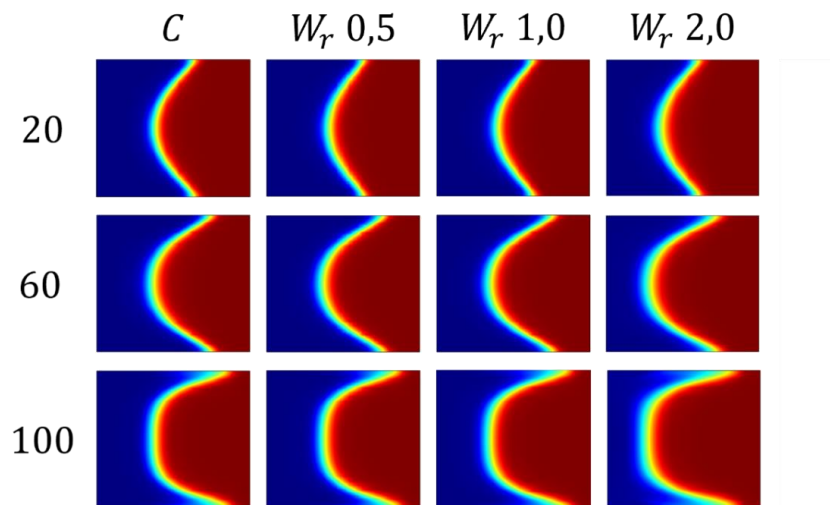


Figura 4.5 - Fração de Concentração nas entradas dos subcanais maiores da primeira câmara. Números a esquerda são os escoamentos. A coluna C representa o micromixer de controle.

4.1.3 Deslocamento e Construção

Seguindo o subcanal maior da primeira câmara, por onde entra a interface de contato, a porção de fluido chega ao primeiro deslocamento e passa pela primeira construção. Inicialmente, as linhas de fluxo são comprimidas ao passar pela seção transversal da construção, causando um aumento na densidade de linhas (figura 4.6). Comprimir as linhas de fluxo resulta em um efeito descrito no capítulo 2, chamado de **redução de tamanho**, que auxilia o processo de mistura ao diminuir o comprimento de difusão. Já a figura 4.7 mostra como a redução de tamanho afeta o perfil transversal de concentração, comprimindo-o cada vez mais com o aumento da construção e do Re (comparar com a 4.7 com a figura 4.5).

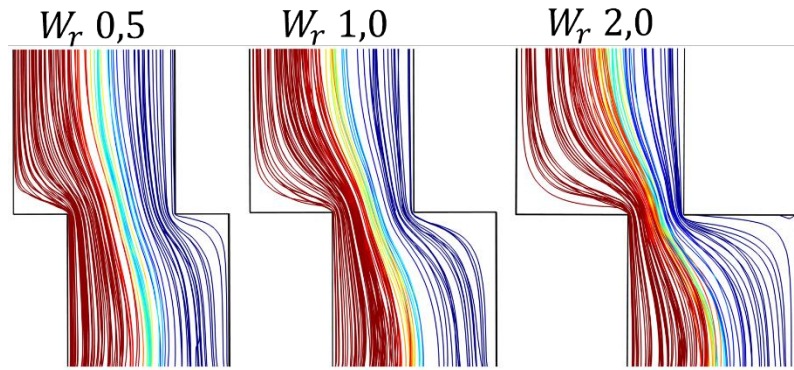


Figura 4.6 - Linhas de fluxo nos primeiros deslocamentos em escoamentos de Re 5. A densidade de linhas aumenta na passagem pela construção.

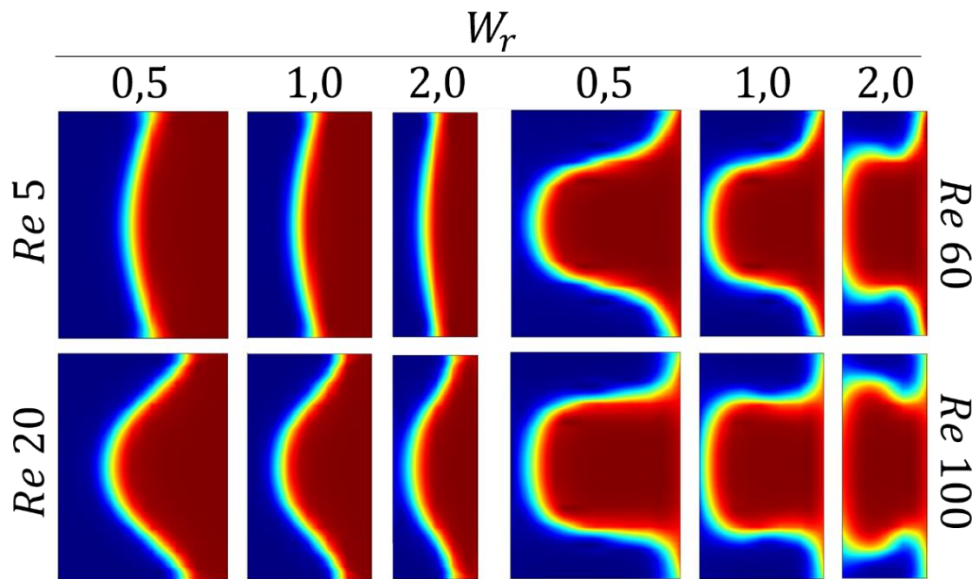


Figura 4.7 - Efeitos da redução de tamanho nos perfis transversais de concentração para os casos Re 5, Re 20, Re 60 e Re 100, na construção do primeiro deslocamento para os modelos propostos.

Além da redução de tamanho, a passagem por seções transversais mais constrictas normalmente é acompanhada de um aumento local da velocidade de fluxo [40]. Esse aumento de velocidade, que é maior para as constrictões mais estreitas em uma mesma vazão, auxilia a criação de **vórtices de expansão** devido ao aumento abrupto da seção transversal após as constrictões. Para um mesmo escoamento, os vórtices aumentam de diâmetro quanto menor for a seção transversal da constricção (figura 4.8). Além disso, nos modelos estudados, quanto menor a constricção, maior é o espaço lateral livre para a geração do vórtice.

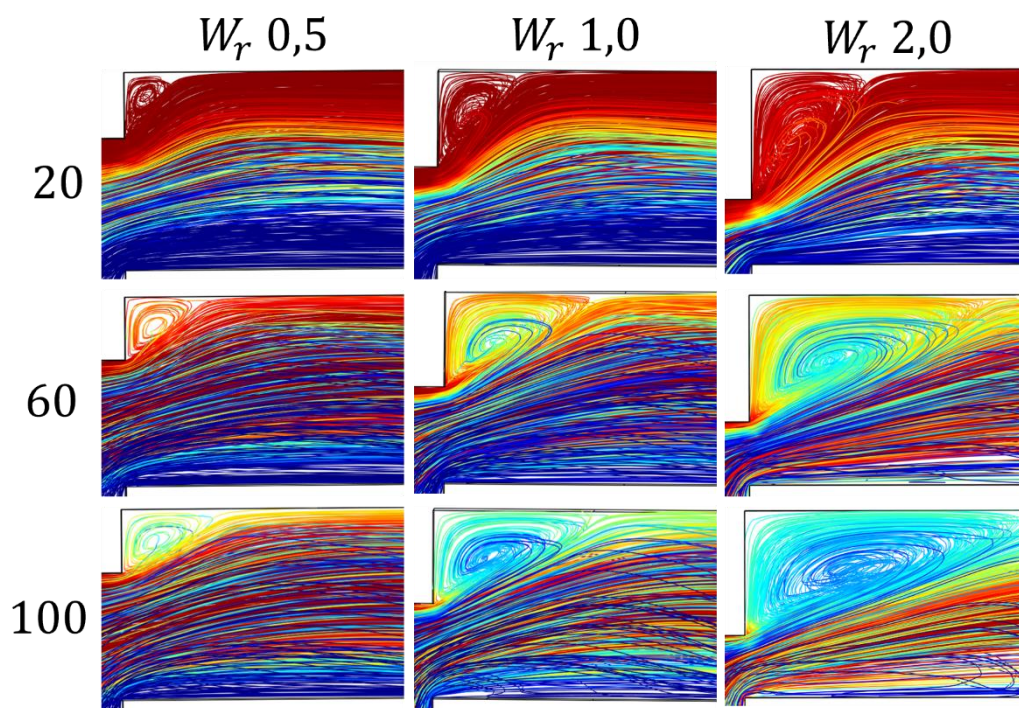


Figura 4.8 - Linhas de fluxo após o primeiro deslocamento dos modelos propostos nos escoamentos *Re* 20, *Re* 60 e *Re* 100. Os vórtices aumentam de tamanho com o aumento da razão W_r e com o aumento do número de Reynolds.

Em micromixers passivos, vórtices de expansão são fenômenos geralmente desejáveis por apresentar uma camada de mistura, que fica nas bordas dos vórtices [54]. Os perfis transversais de concentração começam a se diferenciar após a passagem pelo primeiro deslocamento. A figura 4.9 mostra os perfis de concentração após o fim do vórtice de expansão gerado pelo primeiro deslocamento. As imagens foram capturadas a uma distância de $115 \mu m$ do vértice interior da curva de 90° , logo após o fim do vórtice de expansão do caso W_r 2,0 *Re* 100, que é o maior vórtex de expansão produzido.

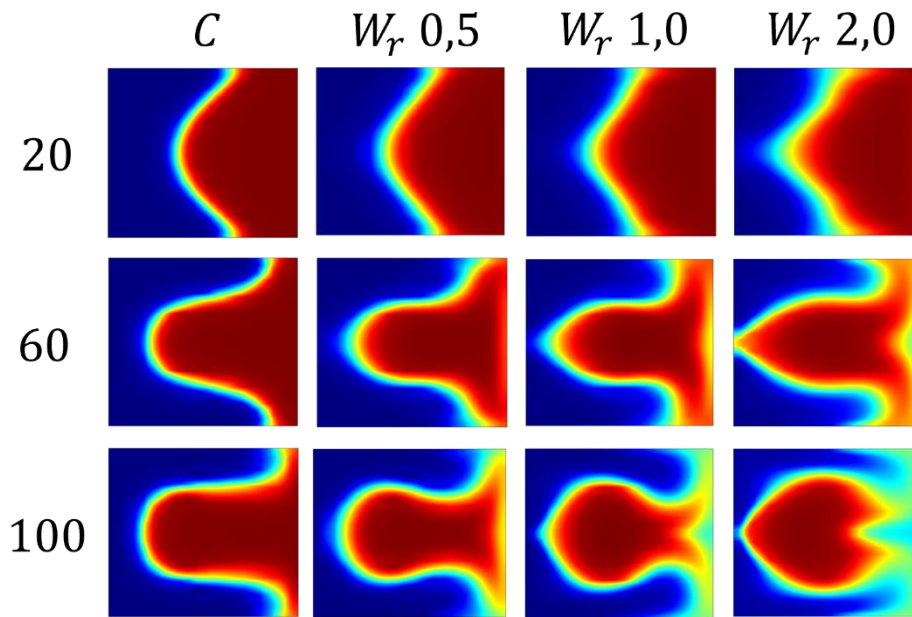


Figura 4.9 - Perfis transversais de concentração após o primeiro deslocamento. Linhas representam o mesmo número de Reynolds. Colunas representam o mesmo micromixer. C é o controle.

Ainda na figura 4.9, pode-se observar o efeito da camada de mistura dos vórtices de expansão com o aumento da razão W_r e do escoamento. É possível notar nos planos do micromixer de controle que a borda direita das imagens é preenchida por regiões de alta concentração. Os vórtices de expansão produzem linhas de fluxo de média concentração na camada de mistura e essas linhas se propagam para o lado direito das seções transversais à medida que a constrição e o Re aumentam, formando uma região com uma fração de concentração próximo de 0,5 (cor verde) na borda direita para Re 60 ou mais e $W_r \geq 0,5$.

4.1.4 Curva de 90°

Em cada um dos subcanais há uma curva de 90° que tem como principal objetivo mudar bruscamente a direção da trajetória do fluxo. A primeira consequência é a geração de um vórtex de expansão devido ao aumento da seção transversal na realização da curva como mostra a figura 10. Os vórtices de expansão ficam localizados ao lado do vértice externo. Nos escoamentos mais lentos, como Re 20, Re 10 e Re 5, não há o surgimento desses vórtices. A partir de Re 40, os vórtices aparecem em todos os micromixers, menos no de controle. Nos micromixers

propostos, os vórtices de expansão ajudam o transporte do escalar através da camada de mistura, enquanto no de controle a camada de mistura dos vórtex de expansão está entre regiões com a mesma concentração, anulando a contribuição desses para a aceleração da mistura. A figura 4.10 mostra as linhas de fluxo no micromixer W_r 1,0 e o de controle. É possível observar que o vórtex de expansão para Re 60 para e W_r 1,0 ajuda no processo de mistura, uma vez que as linhas de fluxo entram amareladas no vórtex e saem laranjas (por cima da região de alta concentração), indicando que essas linhas absorveram uma quantidade do escalar de uma região de maior concentração.

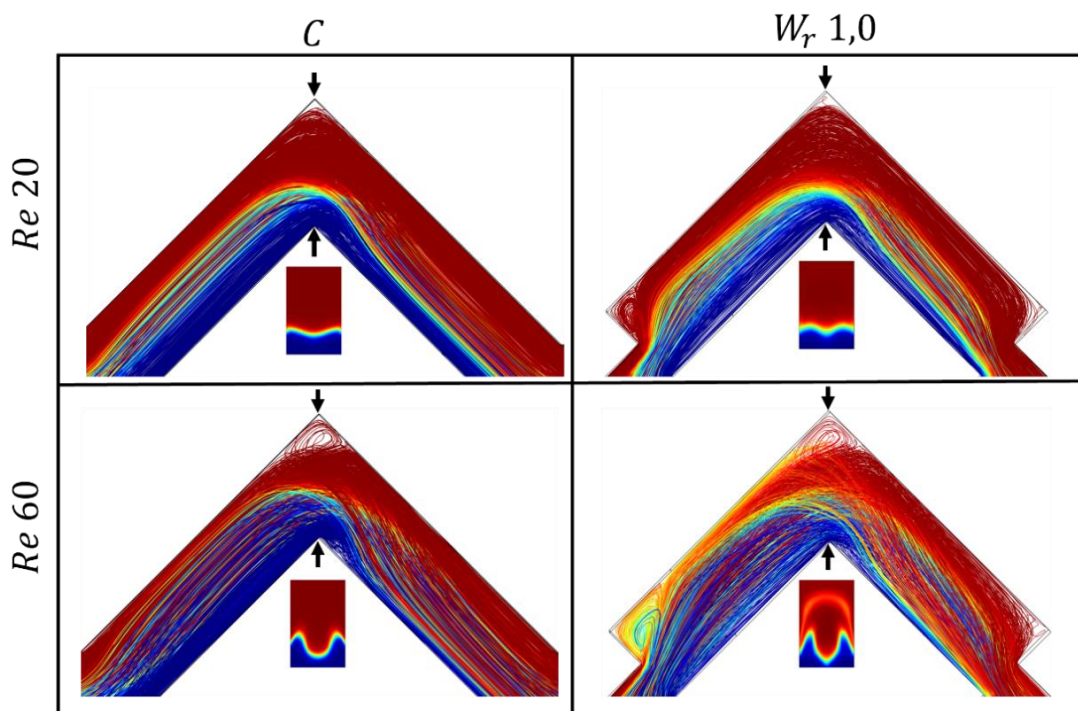


Figura 4.10 - Linhas de fluxo nas curvas de 90° e perfis de concentração no plano transversal da curva. Vórtices de expansão podem ser observados nos casos com Re 60.

Quando os fluxos passam pela curva, a inércia da rotação gera vórtices de Dean, que por sua vez alternam a concavidade da interface de contato. Através das figuras 4.9 e 4.10, observamos que antes da curva as linhas de fluxo com baixa concentração estão envolvendo uma porção das linhas de alta concentração. Após a curva, o padrão se inverte e as linhas de alta concentração passam a envolver as linhas de baixa concentração. A figura 4.11 mostra os vórtices de Dean que deformam a interface de contato e invertem a concavidade. Os recortes foram retirados com a mesma distância de $115 \mu m$ do vértice interno da curva, semelhante à figura 4.9,

porém após a curva. Vórtices para os escoamentos com Re 20 foram ignorados por não aparecerem nos recortes utilizando a escala gráfica que foi adotada para o comprimento dos vetores. Os correspondentes perfis de concentração podem ser vistos na figura 4.12.

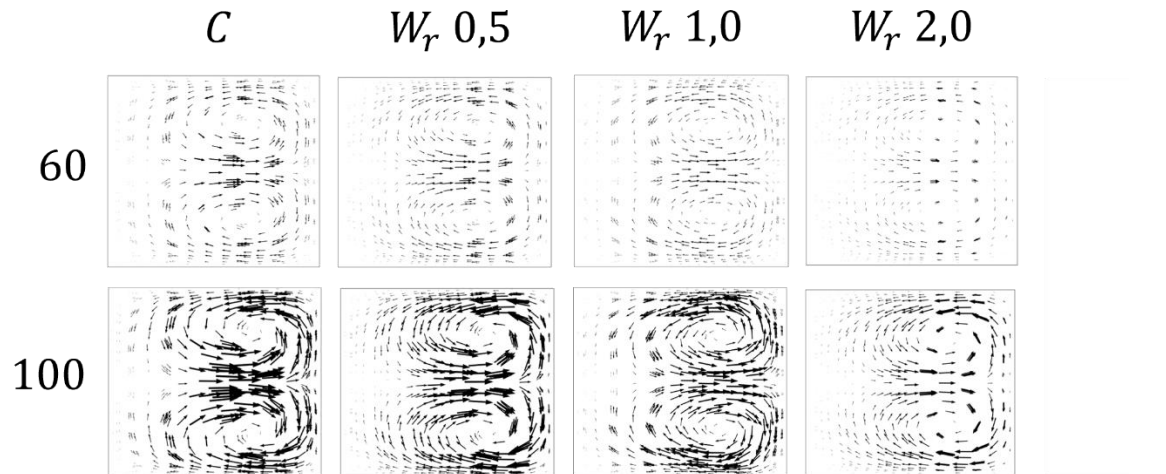


Figura 4.11 - Vórtices de Dean após a curva de 90° do primeiro subcanal maior. Os números na esquerda representam os escoamentos.

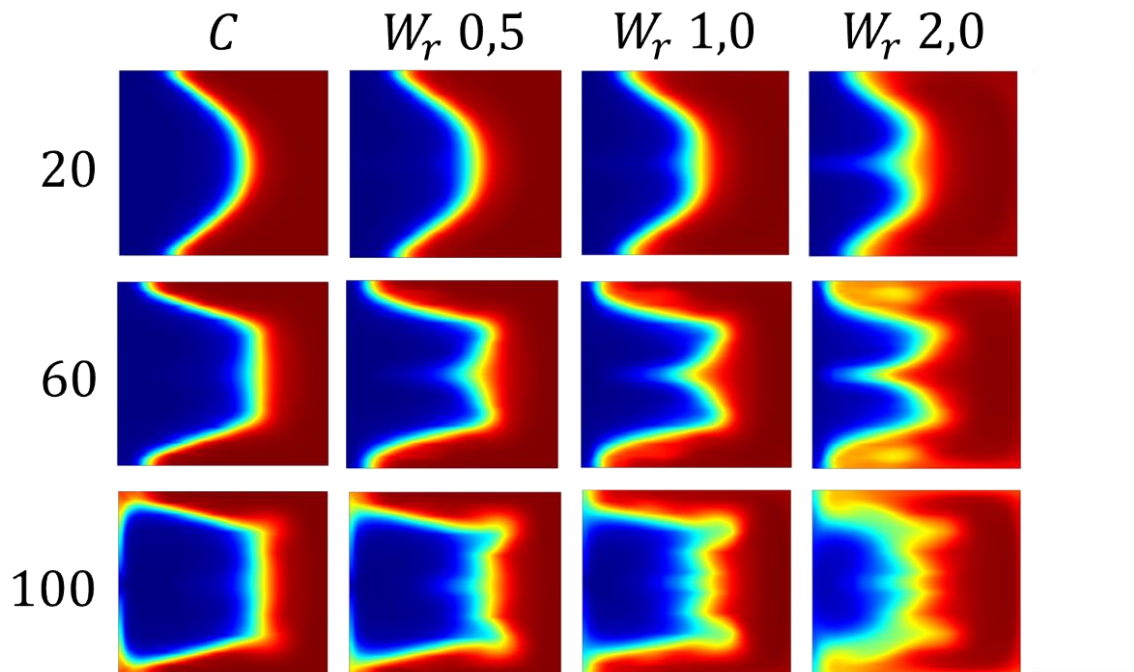


Figura 4.12 - Perfis transversais de concentração após a curva do primeiro subcanal maior. As concavidades das interfaces de contato são invertidas em relação às da figura 9. Números à esquerda representam os escoamentos.

Os vórtices de Dean são gerados pela inércia das curvas e se enfraquecem quando o canal volta a ser retilíneo porque a força centrífuga deixa de existir. Porém, mesmo enfraquecidos, os vórtices de Dean continuam a afetar a interface de contato. Este efeito está mostrado na figura 4.13, onde as curvas de concentração foram obtidas em cortes transversais consecutivos para Re 100 e W_r 0,5.

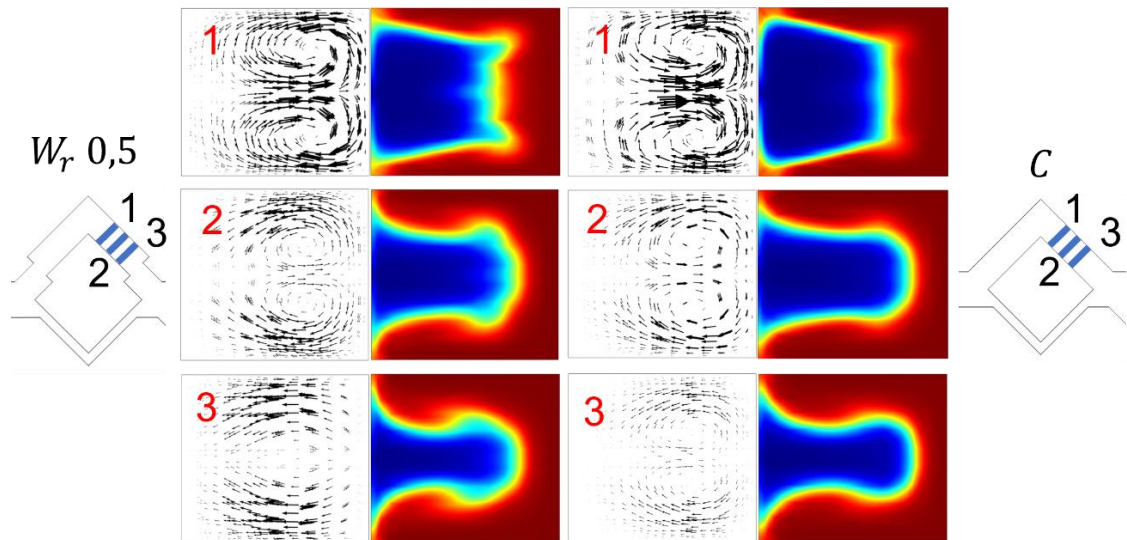


Figura 4.13 - Enfraquecimento dos vórtices de Dean após a curva de 90° no subcanal maior.

Antes de seguirem para as zonas de recombinação, os fluidos atravessam outro deslocamento, os quais geram novos vórtices de expansão e alteram a velocidade com que os fluidos entram nas zonas de recombinação.

4.1.5 Zona de Recombinação

Ao adentrarem nas zonas de recombinação, há um choque desequilibrado entre os fluxos dos subcanais maior e menor devido às diferenças de velocidade e vazão dos dois fluxos [33]. As linhas de fluxo se expandem após a constrição na saída do subcanal maior, depois são empurradas pelo fluxo vindo do subcanal menor. Ao mesmo tempo, o fluxo que entra no próximo subcanal menor auxilia essa condução do fluxo principal, como mostra a figura 4.14. O primeiro efeito que pode ser destacado é o aumento do comprimento de mistura (do inglês *Mixing Length*) com a distorção da trajetória do fluxo principal. Nos campos de concentração, o resultado é mais espaço

para difusão dentro das zonas de recombinação. Isso pode ser observado com mais facilidade nos casos de menores escoamentos, como mostra a figura 4.15, onde pode-se notar que a interface de contato descreve uma curva sinuosa em formato de “S”.

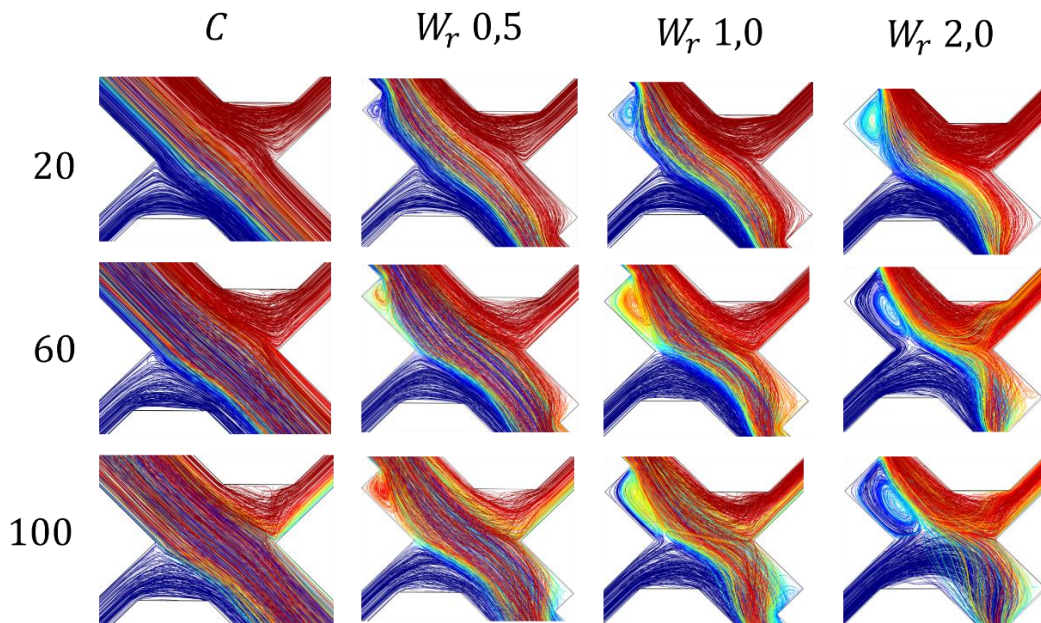


Figura 4.14 - Linhas de fluxo nas zonas de recombinação. O choque desequilibrado causa uma distorção que aumenta o comprimento de mistura. Números à esquerda representam os escoamentos.

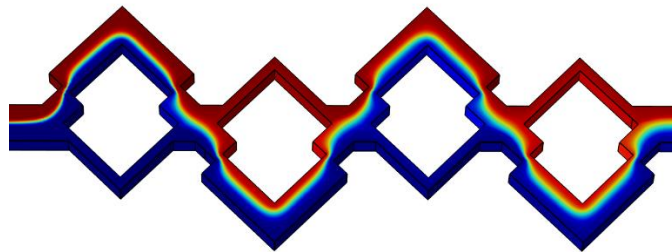


Figura 4.15 - Campo de concentração para o caso W_r 2,0 Re 5. A interface de contato descreve uma trajetória que remete à letra "S".

Dentro da zona de recombinação, o choque desequilibrado promove um “deslocamento lateral” nos perfis transversais de concentração que entram nos subcanais maiores, como mostra a figura 4.16, semelhante ao que ocorreu na entrada do primeiro elemento, na bifurcação. Na figura, a zona de recombinação foi seccionada em 5 planos e esses planos foram enumerados de acordo com a figura de legenda. Em todos os casos, os fluxos vindos dos planos 1 (saída do subcanal menor) e 2 (saída do subcanal maior) se juntam formando a distribuição de

concentração dos planos 3 (região de recombinação). Após a nova divisão, uma porção do fluido que chegou do plano 2 agora se encontra no plano 5 (entrada do novo subcanal menor) e a porção do plano 1 se encontra no plano 4 (entrada do novo subcanal maior). Por serem canais mais estreitos ($75\mu m$), os subcanais menores promovem o aumento da superfície de contato pelo mecanismo de **redução de tamanho**, visto com mais facilidade no plano 5 para W_r 0,5 e Re 100.

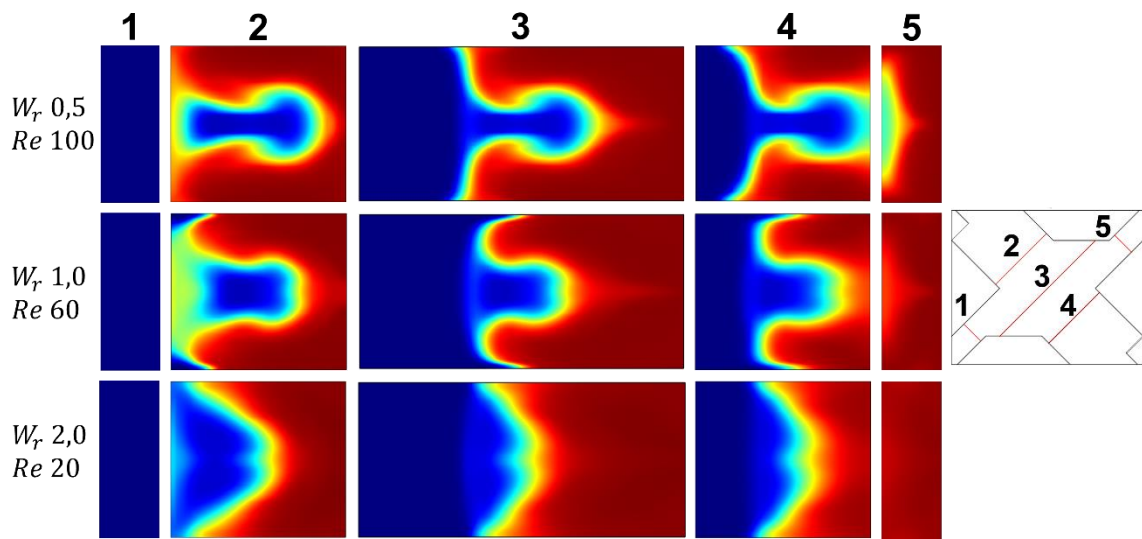


Figura 4.16 - Perfis de concentração dentro da primeira zona de recombinação. Os casos selecionados estão na esquerda, enquanto a indicação visual dos planos está na direita.

4.2 Evolução dos Campos de Concentração.

Nesta subseção serão mostradas as imagens contendo a evolução dos campos de concentração nas zonas de recombinação para os casos Re 20, Re 60 e Re 100.

As figuras 4.17, 4.18, 4.19 e 4.20, são referentes à cada um dos modelos de micromixer, e mostram que os perfis de concentração têm sua concavidade alternada entre as zonas de recombinação. As curvas dos subcanais maiores são as responsáveis por promover essa mudança como mencionado na seção anterior, pois são desenhadas de maneira que fiquem com concavidades alternadas. Cada curva consecutiva gera vórtices de Dean que giram em sentidos opostos aos anteriores. Além disso, o deslocamento lateral do perfil de concentração que ocorre dentro das

zonas de recombinação se repete, porém a direção do deslocamento também alterna entre cada zona. Por fim, os vórtices de expansão gerados pelos deslocamentos e pelas curvas também se repetem. Portanto, pode-se observar que o que foi descrito até o momento para a primeira câmara de mistura também ocorre nas demais estruturas do micromixer, sendo estes fenômenos responsáveis pelo processo de mistura dos fluidos nos modelos estudados.

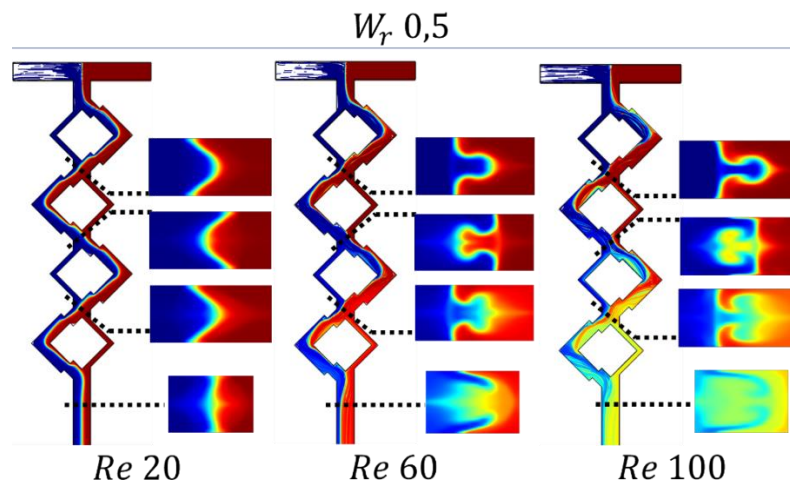


Figura 4.17 - Perfis Transversais de concentração das zonas de recombinação nos escoamentos Re 20, Re 60 e Re 100, para o modelo W_r 0,5.

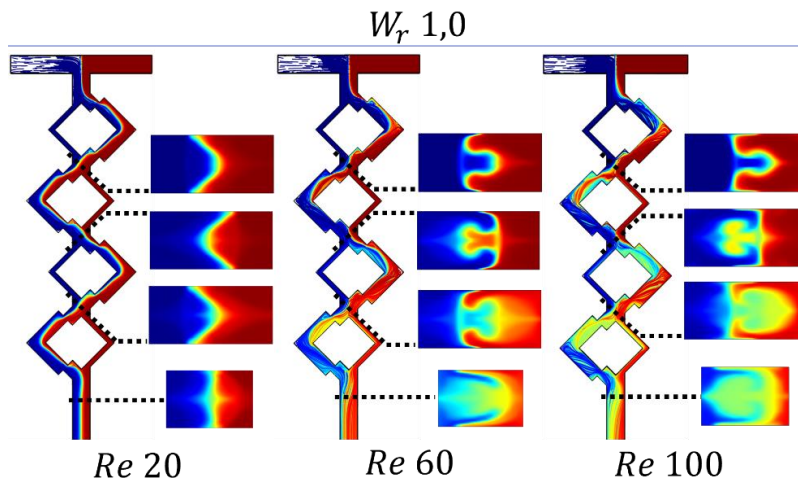


Figura 4.18 - Perfis Transversais de concentração das zonas de recombinação nos escoamentos Re 20, Re 60 e Re 100, para o modelo W_r 1,0.

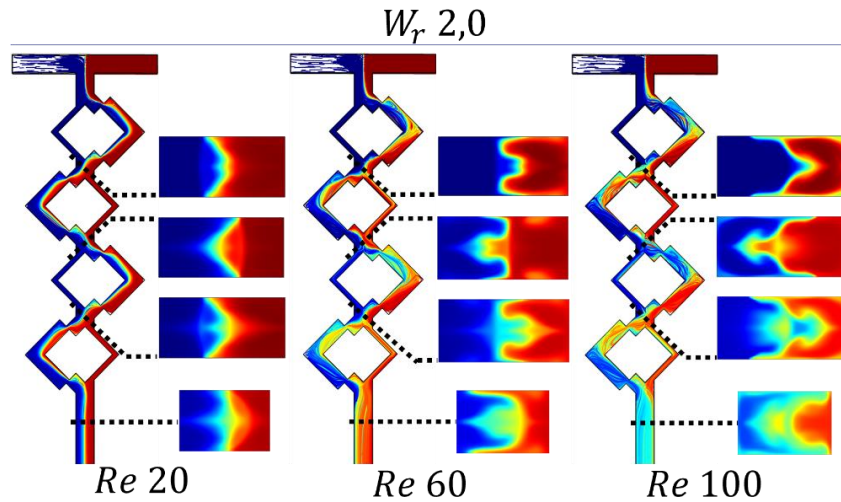


Figura 4.19 - Perfis Transversais de concentração das zonas de recombinação nos escoamentos $Re\ 20$, $Re\ 60$ e $Re\ 100$, para o modelo $Wr\ 2,0$.

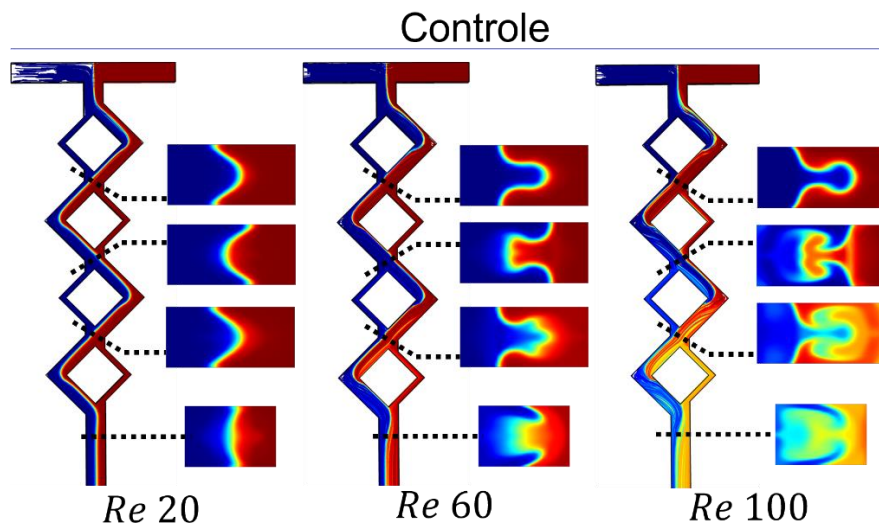


Figura 4.20 - Perfis Transversais de concentração das zonas de recombinação nos escoamentos $Re\ 20$, $Re\ 60$ e $Re\ 100$, para o modelo de controle.

Mistura por advecção caótica pode ser qualitativamente observada nos escoamentos $Re\ 60$ e $Re\ 100$, onde os perfis transversais de concentração mostram que as interfaces de contato se expandem e se deformam repetidas vezes, gerando uma região de média concentração que cresce até a saída. Em contraste, os escoamentos com $Re\ 20$ possuem regiões de baixa e de alta concentração separados por uma interface de contato bem delineada e que percorre toda a extensão dos micromixers. A interface de contato não se estica e dobra como nos escoamentos mais velozes, por que o escoamento $Re\ 20$ ainda não possui inércia o suficiente para promover uma melhor advecção do escalar.

De fato, as estruturas hidrodinâmicas necessárias para a geração de advecção caótica, como vórtices de expansão e vórtices de Dean, estão presentes em Re 20 como mostram as figuras 4.10 e 4.14, mas a intensidade dessas estruturas é fraca perante os escoamentos com Re 60 e Re 100, como mostra os vórtices da figura 4.4.

4.3 Índices de Mistura

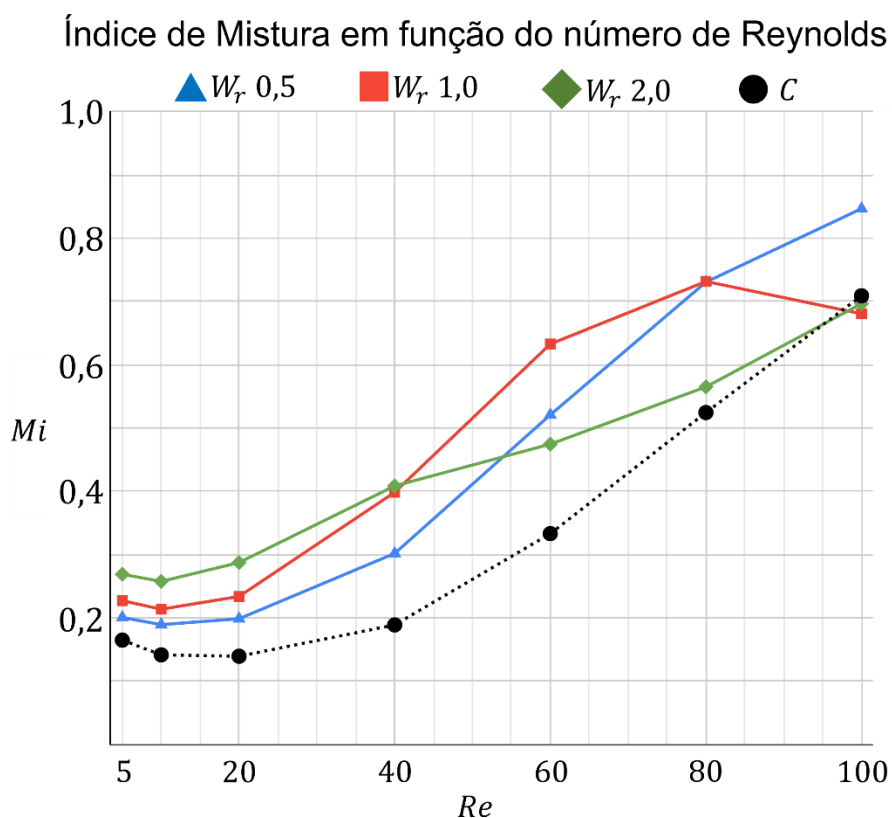


Figura 4.21 - Índices de Mistura em função do Número de Reynolds para todos os quatro micromixers estudados

É necessário quantificar o efeito dos campos de velocidade sobre os campos de concentração para determinar a eficiência de cada micromixer. Para isso foram utilizados o Índice de Mistura (Mi) e a queda de pressão em função do número de Reynolds. Nesta seção serão analisados os Mi comparando com o modelo controle.

Escoamentos cujo Re são abaixo de 1, representam regimes onde o principal mecanismo de mistura é a difusão. Como o tempo de permanência é inversamente proporcional ao Re , escoamentos com Re abaixo de 1 apresentam tempos de permanência elevados o que favorece a difusão, que é um processo lento. Neste trabalho exploramos os escoamentos cujo processo de mistura é acelerado pela advecção, que são aqueles que possuem tempos de permanência da ordem de milissegundos e possuem maiores capacidades de gerar fluxos transversais. Normalmente, transporte por advecção caótica é mais atuante quando o número de Reynolds cresce acima de 1 [30], por isso realizamos simulações com Re a partir de 5. De acordo com a figura 4.21, todos os modelos propostos apresentam, em geral, desempenhos melhores que o modelo de referência. Nota-se que para escoamentos com Re abaixo de 100, todos os micromixers mostram um índice de mistura maior do que o modelo controle. O modelo controle ultrapassa W_r 1,0 e W_r 2,0 apenas para Re 100, permanecendo sempre inferior ao W_r 0,5.

Em um regime de número de Reynolds abaixo de 40, os modelos W_r 2,0 apresentam maiores capacidades de mistura, seguidos dos modelos W_r 1,0, W_r 0,5 e o modelo de referência. As velocidades das partículas de fluido nesses regimes não permitem que efeitos inerciais sejam predominantes no processo de mistura, nesses casos a mistura ainda se dá primariamente por difusão. A eficiência da mistura em Re 5 é maior do que a eficiência em Re 10 por apresentar um **Tempo de Permanência** maior. Ou seja, uma vez que a velocidade do fluxo em Re 5 ainda é muito baixa, mais tempo para que as partículas se misturem por difusão se tem disponível.

Como dito anteriormente, em escoamentos com baixos números de Reynolds, os micromixers passivos têm suas características geométricas subaproveitadas. No nosso caso, para os números de Reynolds abaixo de 40, a existência das zonas de constrição nos deslocamentos auxilia o desenvolvimento da mistura através do mecanismo de **Redução de Tamanho**, que basicamente consiste em forçar a passagem dos fluidos por áreas mais constritas, aumentando a densidade de linhas de fluxo laminar, o que por sua vez permite diminuir o comprimento de difusão dos fluidos. Como o micromixer W_r 2,0 possui as zonas de constrição mais estreitas, este é o modelo que melhor tira proveito desse mecanismo. Os efeitos de **Redução de**

Tamanho também estão presentes no micromixer W_r 1,0 e W_r 0,5, porém em menor escala quando comparados ao micromixer W_r 2,0, visto que suas zonas de constrição são mais largas (ver seção 2.4.2).

Nos escoamentos com Re 10, encontramos a menor eficiência prevista para todos os micromixers. Como explicado anteriormente, o principal mecanismo de mistura nos escoamentos mais lentos é a difusão. A vazão dos fluidos no escoamento Re 10 é o dobro da vazão em escoamentos Re 5. Efetivamente, o **Tempo de Permanência** é reduzido pela metade, ou seja, menos tempo para os fluidos se misturarem espontaneamente por difusão. Além disso, em Re 10, o escoamento não possui momento para que a geometria do micromixer agite as linhas de fluxo. Assim, a área de contato entre os fluidos não aumenta de maneira significativa. Em suma, quando o número de Reynolds é 10, o escoamento é lento demais para gerar maiores perturbações na interface de contato, mas rápido demais para que ocorra difusão significativa das espécies. Isto posto, o **Tempo de Permanência** se torna cada vez menor com o aumento do número de Reynolds e, então, a mistura dos fluidos precisa ser compensada por mecanismos convectivos de mistura. Esse comportamento é bastante comum em micromixers passivos [20][21][22]. Para números de Reynolds iguais a 20, os efeitos inerciais ainda não são fortes o suficiente.

Em escoamentos maiores que Re 20 e menores que Re 60, nota-se primeiramente que a eficiência da mistura começa a modificar o padrão observado anteriormente. Após Re 20, os efeitos inerciais passam a se tornar o mecanismo de mistura mais importante e o micromixer W_r 2,0 começa a ter eficiência semelhante ao de W_r 1,0. Na prática, o micromixer W_r 2,0 é o que utiliza melhor a difusão, mas nota-se que o índice de mistura cresce mais rápido nos micromixers W_r 0,5 e W_r 1,0, enquanto o W_r 2,0 mantém um crescimento mais linear. Com o aumento do número de Reynolds, os efeitos advectivos sobre a mistura vão ficando mais acentuados. Em Re 40, pode-se notar que a eficiência de W_r 1,0 e W_r 2,0 são semelhantes. Com relação a W_r 0,5, a eficiência ainda continua a mais baixa. Entretanto, em Re 60, o modelo W_r 0,5 supera o de W_r 2,0, mas ainda é menos que W_r 1,0.

Por fim, para $Re > 80$, nota-se que W_r 0,5 ultrapassa todos os micromixers por uma boa margem, enquanto W_r 1,0 perde eficiência. A eficiência de W_r 2,0 mantém o seu padrão de crescimento aproximadamente linear. Um padrão interessante pode ser destacado: para $Re < 40$, W_r 2,0 é o modelo mais eficiente. para $40 < Re < 80$, W_r 1,0 toma a liderança; por fim, para $Re > 80$ W_r 0,5 se torna o mais eficiente no escoamento mais veloz.

4.4 Quedas de Pressão

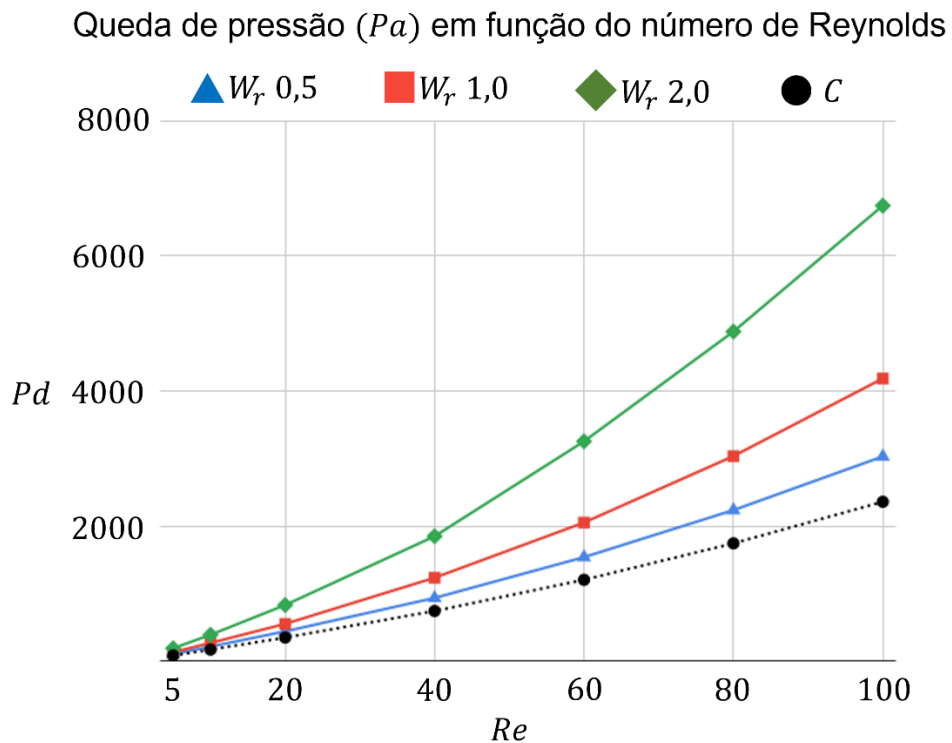


Figura 4.22 - Quedas de Pressão em função do Número de Reynolds para todos os micromixers estudados.

Prever a queda de pressão para se manter um escoamento é importante para entendermos a limitação do micromixer em condições de aplicação. Quanto maior for a queda de pressão, maior é o gasto energético para realizar a propulsão dos fluidos que adentram o micromixer. Além disso, quedas de pressão são um parâmetro importante para a manutenção da integridade de um micromixer ou de um LOC que

contenha um. Pressões muito grandes podem reduzir a eficiência ou até mesmo quebrar um dispositivo. Portanto, prever a queda de pressão de um micromixer é uma questão importante no contexto da fabricação e aplicação desses dispositivos.

O gráfico da figura 4.22 mostra um padrão claro. Os modelos com deslocamentos menos estreitos (ou sem deslocamentos) no subcanal maior, apresentam menores quedas de pressão. Ou seja, a queda de pressão segue a gradação: controle, W_r 0,5; W_r 1,0 e W_r 2,0. A equação de Bernoulli nos diz que quedas de pressão possuem uma relação direta com as velocidades locais de fluxo. Para um mesmo micromixer passivo, maiores Re significam maiores quedas de pressão, que por sua vez significam maiores gradientes locais de velocidade. Um micromixer passivo é desenhado para aproveitar esses gradientes com o intuito de gerar fluxos transversais como vórtices de Dean e vórtices de expansão, por exemplo [34].

A inserção de deslocamentos com constrições contribuiu para o aumento da queda de pressão dos micromixers em relação ao controle, contudo, o aumento não foi considerável quando comparados com outros micromixers similares da literatura como Raza [35] e Hossain [51], que excederam 10KPa de queda de pressão nos escoamentos mais velozes.

As figuras 4.23 e 4.24 mostram como as estruturas geométricas dos micromixers produzem diferentes quedas de pressão dependendo do Re . Em ambas as figuras, os campos de pressão foram divididos em 450 níveis, onde cada linha representa algum determinado nível constante de pressão. A diferença de pressão entre duas linhas consecutivas varia de escala para cada imagem. O adensamento de linhas revela quais estruturas estão gerando as maiores quedas de pressão e, consequentemente gerando os maiores gradientes locais de velocidade para cada micromixer. No micromixer de controle para Re 5, por exemplo, as linhas se distribuem de maneira aproximadamente uniforme, o que condiz com um escoamento que possui gradientes de velocidade mais uniformes, que geram poucos fluxos transversais. Nos demais micromixers, as constrições produzem uma região com queda de pressão mais acentuada como mostra a figura 4.23.

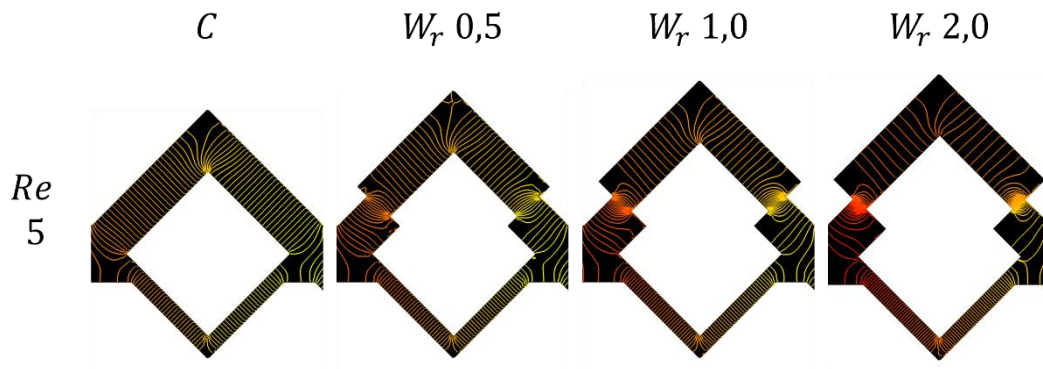


Figura 4.23 - Níveis de pressão nas primeiras câmaras de mistura dos modelos estudados. Nota-se que à medida que a constrição se torna mais estreita, a densidade de linhas ao seu redor aumenta.

Ao passo que Re aumenta, as estruturas geométricas dos micromixers afetam o campo de pressão de diferentes maneiras. Na figura 4.24, pode-se notar que, para Re 60, há uma maior densidade de linhas ao redor das curvas dos subcanais maiores do micromixer de controle. Nos modelos propostos, as densidades de linhas nas curvas diminuem com o aumento da razão W_r , enquanto as densidades de linhas nas constrições dos deslocamentos aumentam. Isso significa que a inserção de constrições altera a dinâmica do gradiente de velocidade nos subcanais maiores, fazendo com que as maiores velocidades locais de fluxo passem da curva para as constrições com o aumento da razão W_r . De fato, a velocidade média do fluxo após a curva cai com o aumento da razão W_r . A tabela a seguir mostra os valores médios das velocidades de fluxo para os escoamentos Re 20, Re 60 e Re 100 para os modelos estudados após a curva do subcanal maior.

Tabela 4.1: Velocidades médias de fluxo imediatamente após a curva de 90° do subcanal maior para os escoamentos Re 20, Re 60 e Re 100.

Re	C	W_r 0,5	W_r 1,0	W_r 2,0
20	8,84 cm/s	8,58 cm/s	8,22 cm/s	7,47 cm/s
60	28,59 cm/s	27,22 cm/s	25,28 cm/s	21,62 cm/s
100	49,56 cm/s	47,25 cm/s	43,29 cm/s	36,23 cm/s

Quando mais estreita for a constrição, menos intensos são os vórtices de Dean após a curva do subcanal menor, o que concorda com os vórtices apresentados na figura 4.11.

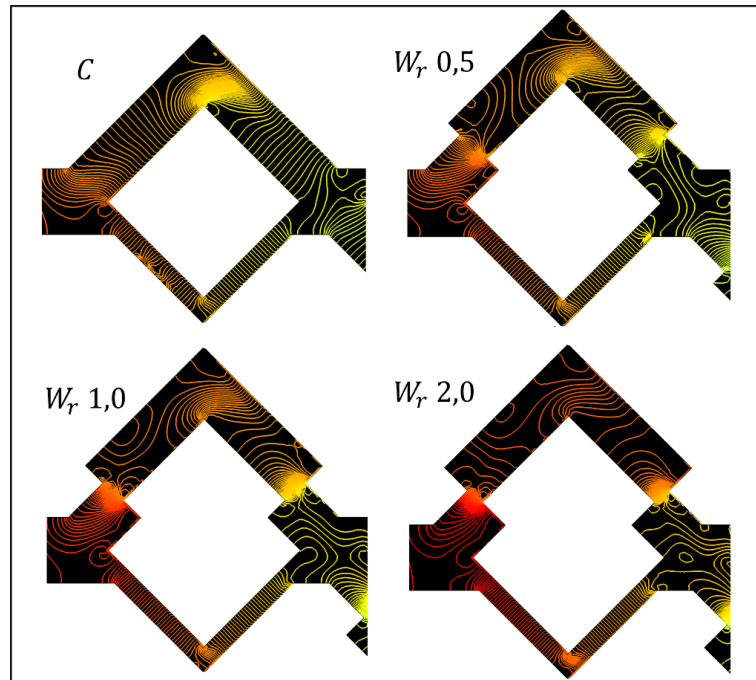


Figura 4.24 - Níveis de pressão para todos os micromixers com Re 60, na primeira zona de recombinação.

A figura 4.25 mostra as velocidades de fluxo na mesma posição que a figura 24, em um corte longitudinal na meio altura ($h = 100\mu m$) dos micromixers para Re 60. No modelo em que W_r 2,0 podemos ver que a velocidade de escoamento no subcanal menor é maior quando comparado com as velocidades dos subcanais menores dos outros modelos.

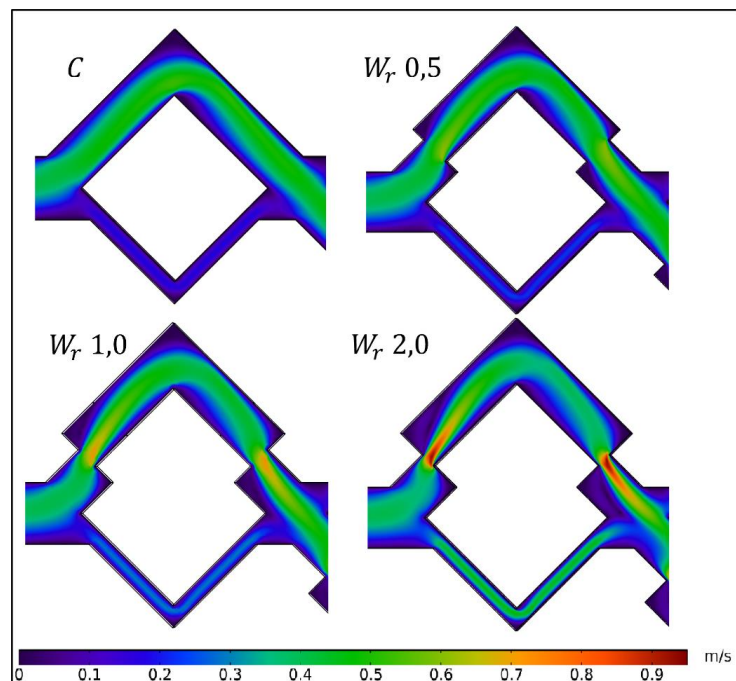


Figura 4.25 - Cortes Longitudinais dos campos de velocidade para Re 60 e todos os micromixers.

A vazão que escoar pelos subcanais maiores é relativamente maior quanto menor for a resistência hidráulica nesses subcanais. Naturalmente, os subcanais menores apresentam mais resistência hidráulica por serem mais estreitos e, portanto, comportam vazões menores. Então, comparando-se com a vazão no **canal principal**, o micromixer de controle possui maiores porcentagens de vazão para o subcanal maior, enquanto nos modelos propostos, a proporção vai ficando menor com o aumento da razão W_r . Os deslocamentos nos subcanais maiores criam zonas de constrição que geram maiores quedas de pressão. Essas quedas de pressão redistribuem as vazões para o subcanal menor. As porcentagens da vazão no subcanal maior em relação à vazão no canal principal estão na tabela 4.2. A dinâmica de vazões entre os subcanais explica as diferentes distorções apresentadas pelos choques desequilibrados nas zonas de recombinação apresentados na figura 14.

Tabela 4.2: Porcentagem relativa da vazão dentro do subcanal maior em relação à vazão do canal principal

Micromixer	Re 5	Re 10	Re 20	Re 40	Re 60	Re 80	Re 100
<i>Controle</i>	90,70%	90,60%	90,20%	89,23%	88,15%	87,13%	86,24%
W_r 0,5	88,40%	88,21%	87,76%	86,65%	85,41%	84,21%	83,17%
W_r 1,0	85,53%	85,25%	84,54%	82,84%	81,00%	79,29%	77,70%
W_r 2,0	79,25%	78,71%	77,33%	74,16%	71,17%	68,73%	66,80%

As dinâmicas entre os campos de velocidade e pressão mostram como as diferentes estruturas cinemáticas desenvolvidas pelos micromixers afetam a eficiência da mistura nos diferentes escoamentos. Recobrando o gráfico da figura 22, os índices de mistura em todas os escoamentos com exceção de Re 100, mostram os modelos W_r misturando mais que o controle. Isso é evidência de que a inserção de constrições e, conseqüentemente, o surgimento de vórtices de expansão produzem um efeito positivo sobre a aceleração da mistura. Contudo, para o escoamento Re 100, o micromixer de controle ultrapassa os modelos W_r 1,0 e W_r 2,0, mostrando que os vórtices de Dean desenvolvidos pelas curvas de 90° nos subcanais maiores, desempenham um papel mais importante que os vórtices de expansão de W_r 1,0 e W_r 2,0 para este escoamento. O micromixer W_r 0,5 apresenta um melhor equilíbrio

entre vórtices de Dean e vórtices de expansão, sendo o único que supera a eficiência de mistura do controle em Re 100.

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho, uma série de simulações que utilizaram o método dos elementos finitos foi realizada em busca de aprimorar micromixers passivos de colisões desequilibradas baseados no modelo rômbo de Ansari [33]. Para analisar o comportamento dos fluidos dentro do micromixer, as equações de Navier-Stokes, a equação de continuidade e a equação de difusão-convecção foram resolvidas através do software COMSOL Multiphysics.

Foi proposto um modelo baseado na criação de zonas de constrições nos canais maiores do micromixer rômbo de Ansari. Essas zonas de constrições tiveram a sua largura relativa variada de $W_r = 0,5$ a $W_r = 2,00$ (ver seção 3.1). Todos os três modelos apresentam maior índice de mistura que o micromixer de referência (micromixer de Ansari), para todos os números de Reynolds abaixo de 80. Para Re 100, somente o modelo W_r 0,5 supera a referência. Em contrapartida, os três modelos apresentaram quedas de pressão maiores que o modelo de referência, o que é esperado quando se adiciona características geométricas extras nos microcanais e não anula a utilização dos micromixers estudados.

Dependendo do escoamento considerado, o modelo mais eficiente para realizar a mistura pode ser diferente. Nos escoamentos com $Re \leq 20$, os modelos W_r 2,0 foram os mais eficientes. Em escoamentos com $20 \leq Re \leq 60$, o modelo W_r 1,0 apresenta maiores capacidades de mistura ao gerar mais distorções nas interfaces de contato, enquanto nos escoamentos $Re \geq 60$ esse triunfo é transferido para o modelo W_r 0,5, que é o único a ultrapassar 80% de eficiência em Re 100.

Portanto, é possível concluir que a utilização de zonas de constrição em micromixers rômboicos planares do tipo SAR com colisões desequilibradas é uma boa estratégia para aprimorar o processo de mistura em dispositivos microfluídicos. A aplicação dos deslocamentos é bastante poderosa ao moldar o perfil transversal de velocidade, gerar choques mais desequilibrados e gerar vórtices de expansão. Com relação à queda de pressão, os modelos propostos apresentaram bons valores de

queda de pressão quando comparados com outros micromixers da literatura, principalmente o modelo W_r 0,5. Isso significa que a aplicação desse modelo deve consumir menos energia que seus pares, sendo um bom candidato para compor um dispositivo microfluídico que necessite de um micromixer simples.

REFERÊNCIAS

- [1] Mishra, M. K., Dubey, V., Mishra, P. M., & Khan, I.. MEMS Technology: A Review. *Journal of Engineering Research and Reports*, 4(1), 1-24. (2019)
- [2] Tabeling P., *Introduction do Microfluidics*, Oxford University Press Inc., Oxford, (2005).
- [3] Sandia National Laboratories. *Mems Video & Image Gallery*. Disponível em:<<https://www.sandia.gov/mesa/mems-video-image-gallery/>>. Acesso em: 27 de junho de 2022.
- [4] Bruus H., *Theoretical Microfluidics*, Oxford University Press Inc., Oxford, (2008).
- [5] Pandya D., Nagarajapa A. K., Reddy S., Bhasin M. Lab-on-a-Chip – Oral Cancer Diagnosis at Your Door Step. *Journal of International Oral Health*, 7, 122-128, (2015).
- [6] Mabey, D., Peeling, R., Ustianowski, A. *et al.* Diagnostics for the developing world. *Nat Rev Microbiol* 2, 231–240 (2004).
- [7] LG Liang, MQ Kong, S Zhou, YF Sheng, P Wang, T Yu, *et al.* An integrated double-filtration microfluidic device for isolation, enrichment and quantification of urinary extracellular vesicles for detection of bladder cancer. *Sci Rep*, 7, p. 46224, (2017).
- [8] A. A. Sklavounos, C. R. Nemr, S. O. Kelley, A. R. Wheeler, Bacterial classification, and antibiotic susceptibility testing on an integrated microfluidic platform. *Lab Chip*, 21, 4208, (2021).
- [9] Ho T. M., Yang J., Tsai P. A., Microfluidic mass transfer of CO₂ at elevated pressures: implications for carbon storage in deep saline aquifers. *Lab Chip*, 21, 3942, (2021).

- [10] Chen L., Liu L., Xu L. Wide and continuous dynamic tuning of period, modulation depth and duty cycle of a laminar-flow-based microfluidic grating. *Lab Chip*, 21, 4118, (2021).
- [11] Da Silva, L.F.B.A.; Yang, Z.; Pires, N.M.M.; Dong, T.; Teien, H.-C.; Storebakken, T.; Salbu, B. Monitoring Aquaculture Water Quality: Design of an Early Warning Sensor with *Aliivibrio fischeri* and Predictive Models. *Sensors*, 18, 2848, (2018).
- [12] Huang, P.-H., Zhao, S., Bachman, H., Nama, N., Li, Z., Chen, C., Yang, S., Wu, M., Zhang, S. P., Huang, T. J., Acoustofluidic Synthesis of Particulate Nanomaterials. *Adv.Sci.* 6, 900913, (2019).
- [13] M. Lee, K. Lee, K. H. Kim, K. W. Oh, J. Choo, SERS based immunoassay using a gold array-embedded gradient microfluidic chip. *Lab Chip*, 12, 3720-3727, (2012).
- [14] J. Li, Y. Huang, D. Wang, B. Song, Z. Li, S. Song, L. Wang, B. Jiang, X. Zhao, J. Yan, R. Liu, D. He, C. Fan. A powerfree microfluidic chip for SNP genotyping using grapheneoxide and a DNA intercalating dye. *Chem. Commun.* 49, 3125-3127, (2013).
- [15] S. He, D. Li, C. Zhu, S. Song, L. Wang, Y. Long, C. Fan. Design of a gold nanoprobe for rapid and portable mercury detection with the naked eye, *Chem. Commun.* 40, 4885-4887, (2008).
- [16] Suh, Y.K.; Kang, S. A Review on Mixing in Microfluidics. *Micromachines*, 1, 82-111, (2010).
- [17] K. S. Ryu, K. Shaikh, E. Goluch, Z. Fan and C. Liu. Micro magnetic stir-bar mixer integrated with parylene microfluidic channels. *Lab Chip*, 4, 608, (2004).
- [18] Ahmed, D.; Mao, X.; Shi, J.; Juluri, B.K.; Huang, T.J. A millisecond micromixer via single-bubble-based acoustic streaming. *Lab Chip*, 9, 2738–2741, (2009).

- [19] Veldurthi, N.; Chandel, S.; Bhave, T.; Bodas, D. Computational fluid dynamic analysis of poly(dimethylsiloxane) magnetic actuator-based micromixer. *Sens. Actuators B Chem.* 212, 419–424, (2015).
- [20] Cai, G.; Xue, L.; Zhang, H.; Lin, J. A Review on Micromixers. *Micromachines*, 8, 274, (2017).
- [21] Nam-Trung Nguyen and Zhigang Wu. Micromixers – A Review. *J. Micromech. Microeng.* 15, R1, (2005).
- [22] Raza W, Hossain S, Kim KY. A Review of Passive Micromixers with a Comparative Analysis. *Micromachines (Basel)*. 11(5):455. (2020).
- [23] Chia-Yen Lee, Wen-Teng Wang, Chan-Chiung Liu, Lung-Ming Fu. Passive mixers in microfluidic systems: A review. *Chemical Engineering Journal*, Volume 288, 146-160, ISSN 1385-8947, (2016).
- [24] Floyd, T.M.; Schmidt, M.A.; Jensen, K.F. Silicon micromixers with infrared detection for studies of liquid-phase reactions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, 2351-2358, (2005).
- [25] Hossain S, M.A. Ansari, Kim K., Evaluation of the mixing performance of three passive micromixers, *Chemical Engineering Journal*, Volume 150, Issues 2–3, ISSN 1385-8947, (2009).
- [26] Sudarsan A. P. Ugaz V. M. Fluid mixing in planar spiral microchannels, *Lab Chip*, 6, 74, (2006).
- [27] Afzal, Arshad & Kim, Kwang-Yong. Passive split and recombination micromixer with convergent–divergent walls. *Chemical Engineering Journal*. 203. 182–192. (2012).

- [28] Xie, Haibo; Fan, Yurun; Yang, Huayong. New 3D SAR micromixer based on 2D standard photolithographic technique, *Micro & Nano Letters*, , 6, (6), p. 366-371, (2011).
- [29] Seok Woo Lee, Dong Sung Kim, Seung S Lee, Tai Hun Kwon. A split and recombination micromixer fabricated in a PDMS three-dimensional structure - *J. Micromech. Microeng.* **16** 1067, (2006).
- [30] Ansari, M. Kim, K. Anwar, K. Kim, S. M. J. A novel passive micromixer based on unbalanced splits and collisions of fluid streams. *Micromech. Microeng.* 20, 055007, (2010).
- [31] Mouza, A.A. Patsa, C. M. Schönfeld, F., Mixing performance of a chaotic micromixer, *Chemical Engineering Research and Design*, Volume 86, Issue 10, 1128-1134, 0263-8762, (2008).
- [32] Chung, C.K., Shih, T.R. Effect of geometry on fluid mixing of the rhombic micromixers. *Microfluid Nanofluid* 4, 419–425 (2008).
- [33] Ansari, M. A. Kim, K. Mixing performance of unbalanced split and recombine micromixers with circular and rhombic sub-channels, *Chemical Engineering Journal*, 162, 2, 760-767, 1385-8947, (2010).
- [34] Li, J. Xia, G. Li, Y. Numerical and experimental analyses of planar asymmetric split-and-recombine micromixer with dislocation sub-channels. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 88, 9, 0268-2375, (2013).
- [35] Raza, W.; Kim, K.-Y. Asymmetrical Split-and-Recombine Micromixer with Baffles. *Micromachines*, 10, 844, (2019).
- [36] Raza, W. Kim, K. Unbalanced Split and Recombine Micromixer with Three-Dimensional Steps. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 59 (9), 3744-3756, (2020).

- [37] C. K. Chung, T. R. Shih. A rhombic micromixer with asymmetrical flow for enhancing mixing. *J. Micromech. Microeng.* 17, 2495-2504, (2007).
- [38] Rei-Tang Tsai and Chih-Yang Wu, An efficient micromixer based on multidirectional vortices due to baffles and channel curvature, *Biomicrofluidics* 5, 014103 (2011).
- [39] Kirby, B. J. *Micro- and Nanoscale Fluid Mechanics – Transport in Microfluidic Devices*, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido, (2010).
- [40] Bachtelor G. K., *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, Nova York, 2ª Edição, (1999).
- [41] Laurel T, Lenshof A., *Microscale Acoustofluidics*. The Royal Society of Chemistry, Reino Unido, 2015.
- [42] Reynolds O. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels, *Phil. Trans. R. Soc.* **174**935–982, (1883).
- [43] Panigrahi, P. K. *Transport Phenomena in Microfluidic Systems*. Wiley, Kanpur, India, (2016).
- [44] Wilcox, David C. *Basic Fluid Mechanics*. 3rd ed. Mill Valley: DCW Industries, Inc., (2007).
- [45] Knight, J. B. Vishwanath, A. Brody J. P. Austin R. H. Hydrodynamic Focusing on a Silicon Chip: Mixing Nanoliters in Microseconds. *Phys. Rev. Lett.*, 80, 3866 (1998).
- [46] D. Di Carlo, Inertial Microfluidics. *Lab Chip*, 9, 3038. (2009).

[47] Berthier, J. Silberzan P. *Microfluidics for Biotechnology*. 2ª Edição, Artech House, Norwood, EUA, (2009).

[48] Parsa M. K., Hormozi F., Jafari D. - Mixing enhancement in a passive micromixer with convergent–divergent sinusoidal microchannels and different ratio of amplitude to wavelength. *Computer & Fluids*, 105, 82-90, (2014).

[49] Hai Le The, Hoa Le Thanh, Tao Dong, Bao Quoc Ta, Nhut Tran-Minh, Frank Karlsen. An effective passive micromixer with shifted trapezoidal blades using wide Reynolds number range, *Chemical Engineering Research and Design*, 93, 1-11, (2015).

[50] Yıldırım, E. Analysis and testing of a contraction-and-expansion micromixer for micromilled microfluidics. *Microsyst Technol*, 23, 4797–4804 (2017).

[51] Hossain, S.; Kim, K.-Y. Mixing Analysis of Passive Micromixer with Unbalanced Three-Split Rhombic Sub-Channels. *Micromachines*, 5, 913-928. (2014).

[52] COMSOL Multiphysics CYCLOPEDIA – *The Finite Element Method (FEM)*. Disponível em: <<https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method/>>. Acesso em: 29 de Julho de 2021.

[53] Okuducu, M.B.; Aral, M.M. Performance Analysis and Numerical Evaluation of Mixing in 3-D T-Shape Passive Micromixers. *Micromachines*, 9, 210, (2018).

[54] Han L., Riviere N, Chatelain M, et al. Recirculation zone downstream lateral expansions of open channel flow. *Physics of Fluids*, 32, 115-119, (2020).