

Utilização de coordenadas generalizadas para solução da equação de convecção-difusão em domínio anelar

Breno Tiago de Souza Mota¹

UFOPA/MTA, Monte Alegre, PA

Gilza Santos Simão Ferreira²

IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

Luiz Nelio Henderson Guedes de Oliveira³

IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

Sérgio Silva de Sousa⁴

IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

Leandro Blass⁵

UNIPAMPA, Campus Bagé/RS

Resumo. Em muitos problemas modelados por equações diferenciais o formato do domínio físico se torna um empecilho para aplicar determinados métodos numéricos para encontrar a solução. Este trabalho tem por objetivo mostrar a solução da equação de convecção-difusão em um domínio físico em formato de anel, utilizando a técnica de coordenadas generalizadas. Esse processo transforma o domínio físico (cartesiano) em um domínio matemático que utiliza as coordenadas polares. Percebe-se que usando este tipo de metodologia é possível aplicar métodos numéricos específicos tornando a solução mais viável.

Palavras-chave. Coordenadas generalizadas, convecção-difusão, domínio anelar.

1 Introdução

Recentes avanços na tecnologia microfluídica levaram a um aumento do interesse pela mistura laminar de fluidos. Na indústria química, são realizados estudos com a intenção de misturar reagentes e separar partículas sólidas e filtração, mas essas aplicações se estendem também a análises físicas, biológicas e médicas [6]. Nesse contexto, surge a aplicação de micromisturadores.

Em [6] propõem a construção de um micromisturador anelar. Em [3] apresentam a modelagem matemática de um micromisturador anelar idealizado por [6]. Esta análise limita-se a uma estrutura pequena e fixa do canal, decorrente de um parâmetro utilizado na modelagem.

Por se tratar de um domínio físico em formato de anel, existem dificuldades nos métodos numéricos para solucionar a equação diferencial parcial que modela o problema. Este trabalho aborda a solução do modelo descrito por [3] utilizando uma transformação no domínio através das coordenadas generalizadas. Os resultados mostram a eficácia da técnica proposta.

Na seção 2, é descrito a modelagem matemática do problema. A fundamentação teórica sobre transformação generalizada é descrita na seção 3. A aplicação da metodologia proposta é explicada na seção 4. As seções 5 e 6 são destinadas à exposição dos resultados e conclusões, respectivamente.

¹brenotsm1@gmail.com

²gilzasimao85@gmail.com

³neliohenderson@gmail.com

⁴pfsergiosousa@yahoo.com.br

⁵leandroblass@unipampa.edu.br

2 Problema: escoamento em um micromisturador

A geometria anelar do micromisturador é mostrada na Figura 1 onde o raio da linha central é R (mm) e ρ representa a metade da largura do canal, portanto a parede interna é dada por: $r = R - \rho$ e a parede externa por: $r = R + \rho$.

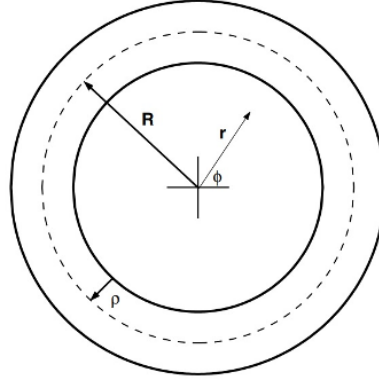


Figura 1: Geometria do micromisturador.

O processo de mistura do micromisturador que calcula o nível de concentração é modelado pela equação da convecção-difusão [2],

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) - \kappa \nabla^2 c = 0, \quad (1)$$

onde $u(r, \theta, t)$ é o vetor de velocidade do fluido, $c(r, \theta, t)$ é a concentração do solvente (Kg/mm^3), e κ é o coeficiente de difusão molecular. Em coordenadas polares, a Equação (1) é dada por [3]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v(r)}{r} \frac{\partial c}{\partial \phi} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) - \frac{\kappa}{r^2} \frac{\partial^2 c}{\partial \phi^2} = 0, \quad (2)$$

para todo $R - \rho \leq r \leq R + \rho$ e $t > 0$, com as seguintes condições de contorno

$$\frac{\partial c(R - \rho, \theta, t)}{\partial r} = \frac{\partial c(R + \rho, \theta, t)}{\partial r} = 0 \quad (3)$$

3 Fundamentação Matemática

Segundo [1], há certas geometrias (particularmente aquelas construídas a partir de circunferências), cujo estudo fica facilitado com o uso de coordenadas polares. Por esse motivo, as coordenadas polares são usadas em problemas de Cálculo, especialmente na avaliação de certas integrais duplas.

Sejam E e D subconjuntos do R^n , define-se uma transformação T de E sobre D a toda função cujo domínio é E e cuja imagem é D . Se $E, D \subset R^2$, $T : E \rightarrow D$ é uma transformação, então, dados $P = (x, y) \in E$ e $Q = (u, v) \in D$ com $T(P) = Q$ pode-se escrever a transformação T por meio de duas funções coordenadas dadas por:

$$T : \begin{cases} u = u(x, y) \\ v = v(x, y) \end{cases}, \quad (4)$$

$\forall(x, y) \in E$ ou ainda $T(x, y) = [u(x, y), v(x, y)]$.

Considera-se as transformações dadas pelas Equações (4) do plano xy no plano uv . Se T é inversível, as Equações (4) definem x e y como funções de u e v , ou seja [1],

$$T^{-1} : \begin{cases} x = x(u, v) \\ y = y(u, v) \end{cases} . \tag{5}$$

Caso as Equações (4) possuam derivadas parciais de 1ª ordem em u e v , defini-se o Jacobiano de T , como segue:

$$J_T = \frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \begin{vmatrix} u_x & u_y \\ v_x & v_y \end{vmatrix} = u_x v_y - u_y v_x \tag{6}$$

Dessa forma, no caso da Transformação Inversa (T^{-1}) existir e o Jacobiano da Transformação ser diferente de zero ($J_T \neq 0$), pode-se obter $x(u, v)$ e $y(u, v)$ a partir das Equações (4). Neste caso, faz-se necessário que as condições necessárias a transformação inversa sejam observadas e satisfeitas.

Teorema da Transformação Inversa [1]: Dada a Transformação da Equação 4 tal que u e $v \in C^1(\Omega)$ com $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ aberto e se $P_0 = (x_0, y_0) \in \Omega$ tal que $J_T(P_0) \neq 0$, então fica determinado de modo único, a transformação inversa (Equação (5)), que esta definida em uma bola aberta B , com centro $Q_0 = T(P_0) = [u(P_0), v(P_0)] = (u_0, v_0)$, tal que:

- $T^{-1}(Q_0) = T^{-1}(u_0, v_0) = [x(u_0, v_0), y(u_0, v_0)] = P_0$;
- $(T \circ T)^{-1}(u, v) = I_B(u, v) = (u, v), \forall(u, v) \in B$;
- As funções $x(u, v)$ e $y(u, v)$ possuem derivadas parciais de 1ª ordem dadas por:

$$x_u = \frac{v_y}{J_T}, y_u = \frac{-v_x}{J_T}, y_v = \frac{-u_y}{J_T} \text{ e } y_v = \frac{u_x}{J_T}.$$

3.1 Coordenadas polares

As coordenadas polares (r, θ) são definidas por [1]:

$$\begin{aligned} x &= r \times \cos(\theta) \\ y &= r \times \sin(\theta) \end{aligned} \tag{7}$$

De acordo com a Figura 2, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ determina a distância de cada ponto (x, y) à origem e θ é o ângulo formado entre o semi-eixo positivo x e o vetor (x, y) . Para evitar ambiguidade

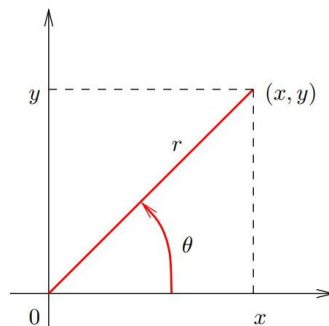


Figura 2: Coordenadas Polares (r, θ) em \mathbb{R}^2 .

considera-se a variação do ângulo θ no intervalo de $[0, 2\pi]$.

3.2 Coordenadas Polares x Cartesianas

Seja a aplicação

$$g(r, \theta) = [r \times \cos(\theta), r \times \sin(\theta)] = (x, y) \tag{8}$$

Então, g é de classe C^1 em \mathbb{R}^2 e a derivada é injetiva em $\mathbb{R}^2 - \{(0, 0)\}$. De fato:

$$J_g = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -r\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & r\cos(\theta) \end{bmatrix} = r(\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta)) = r. \tag{9}$$

Como as funções trigonométricas são periódicas, a função g não é injetiva em $\mathbb{R}^2 - \{(0, 0)\}$. Mas, definido por:

$$T = \{(r, \theta) \in \mathbb{R}^2 : r > 0 \text{ e } 0 < \theta < 2\pi\} \tag{10}$$

então, a função $g : T \rightarrow \mathbb{R}^2$ define uma mudança de coordenadas [1].

A função g transforma T no conjunto:

$$g(T) = \mathbb{R}^2 - \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : y = 0 \text{ e } x \geq 0\} \tag{11}$$

Para evitar ambiguidade, considera-se a variação do ângulo θ no intervalo de $[0, 2\pi)$.

Por outro lado, para cada θ fixo em T obtém-se, em (x, y) um segmento de reta tal como mostrado na Figura 2. Portanto, ao círculo centrado na origem e de raio R e do qual se retire o semi-eixo positivo, x corresponde, nas coordenadas polares (r, θ) , o retângulo $]0, R[\times]0, 2\pi[$.

Em qualquer caso, vale $x = x(r, \theta) = r\cos(\theta)$ e $y = y(r, \theta) = r\sin(\theta)$. Uma vez que $x(r, \theta)$ e $y(r, \theta)$ têm derivadas parciais de primeira ordem contínuas e vale $J_g \neq 0$, segue que g é inversível.

A expressão de g^{-1} é dada por [1]:

$$g^{-1} = \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \theta = 2\pi - \arccos \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} & \text{se } y < 0 \text{ ou} \\ \theta = \arccos \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} & \text{se } y \geq 0 \end{cases} \tag{12}$$

4 Aplicação das coordenadas generalizadas

Como apresentado na seção 2, o problema físico abordado (Equação (2)) é dado por uma geometria anelar e para resolve-lo utiliza-se uma transformação inversa que associa cada ponto do domínio físico a um ponto no domínio matemático, dado na forma retangular. Essa transformação é feita por meio de coordenadas generalizadas que levam o domínio anelar para um domínio retangular, como mostra a Figura 3. Na Figura 3.a, tem-se o domínio físico, orientado pelos eixos cartesianos, mas em sua forma anelar e após realizar a transformação inversa, tem-se a Figura 3.b, com o domínio matemático retangular, mas escrito em coordenadas polares.

Portanto, a grade apresentada na Figura 3.b terá a sua posição perfeitamente determinada por meio de um par ordenado de números reais que representam medidas das distâncias a dois eixos orientados, um deles vertical e o outro horizontal.

Com a transformação, além das condições de contorno já citadas (Equação (3)), surgem outras duas no domínio matemático. A Figura 3.b, estabelece as condições de contorno no domínio matemático

$$c(r, 0, t) = c(r, 2\pi, t). \tag{13}$$

Essa condição de contorno (Equação (13)) surge do domínio físico, uma vez que para $\theta > 2\pi$, o valor das funções trigonométricas se reduzem ao domínio $0 < \theta < 2\pi$.

Em relação a discretização, cada célula corresponde ao ponto central (r_i, θ_i) onde uma célula arbitrária dessa grade de discretização é denotada por Ω_{ij} , de modo que $\Omega_{ij} = [r_{i-1}, r_i] \times [\theta_{j-1/2}, \theta_{j+1/2}]$.

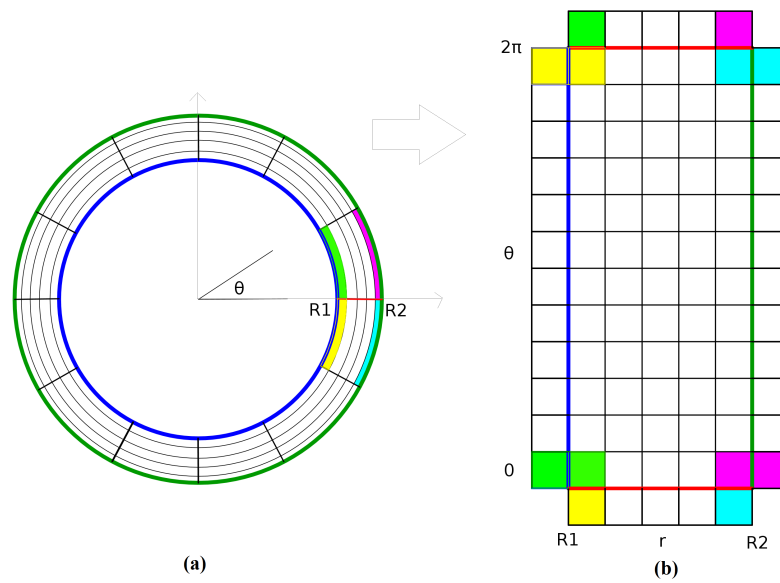


Figura 3: Discretização dos domínios.

5 Resultados

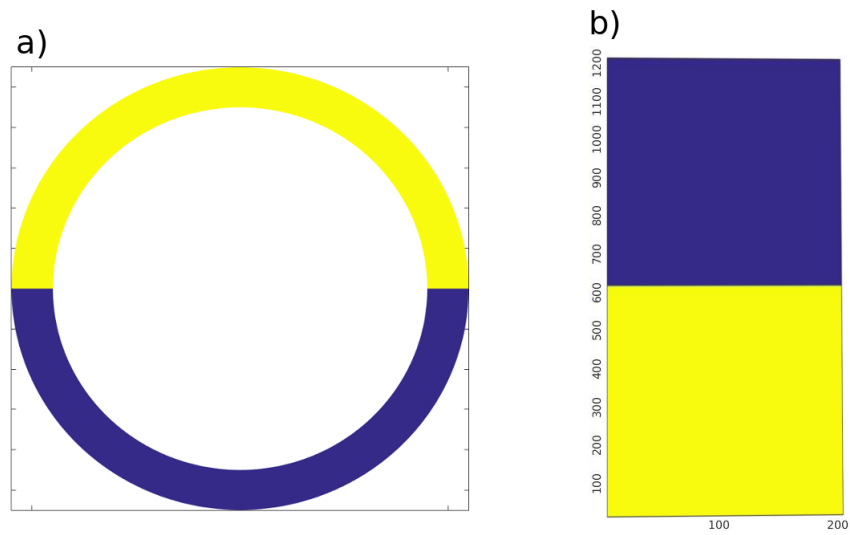


Figura 4: Domínio físico em comparação com o domínio matemático.

A implementação computacional foi feita em linguagem de programação Fortran, com uma malha de 200 nós para o raio r e 1200 nós para o ângulo θ . A condição inicial, nesse exemplo, é descrita pela Equação (14) com raio central de $R = 5mm$.

$$c(r, \theta, 0) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0 \leq \theta < \pi \\ 0 & \text{se } \pi \leq \theta < 2\pi, \end{cases} \quad (14)$$

Do ponto de vista numérico, a condição inicial (Equação (14)) apresenta o desafio de ser descontínua, exibindo dois patamares com valores de concentração, ilustrando duas substâncias inicialmente não misturadas (Figura 4.a).

Para resolver a equação de convecção-difusão, dada em coordenadas polares pela Equação (2), aplicou-se a técnica de separação de operadores [4]. Essa metodologia possibilita o uso de métodos específicos para solucionar cada um dos subproblemas [2]. O termo convectivo foi resolvido usando o método semi-Lagrangiano do Tubo de Trajetórias [2]. Para resolver o termo difusivo empregou-se o método do Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado [5] (resolução de sistemas lineares com matrizes não simétricas). Os métodos foram aplicados no domínio matemático (Figura 4.b), após isso, a solução é transportada para o domínio físico Figura 4.a.

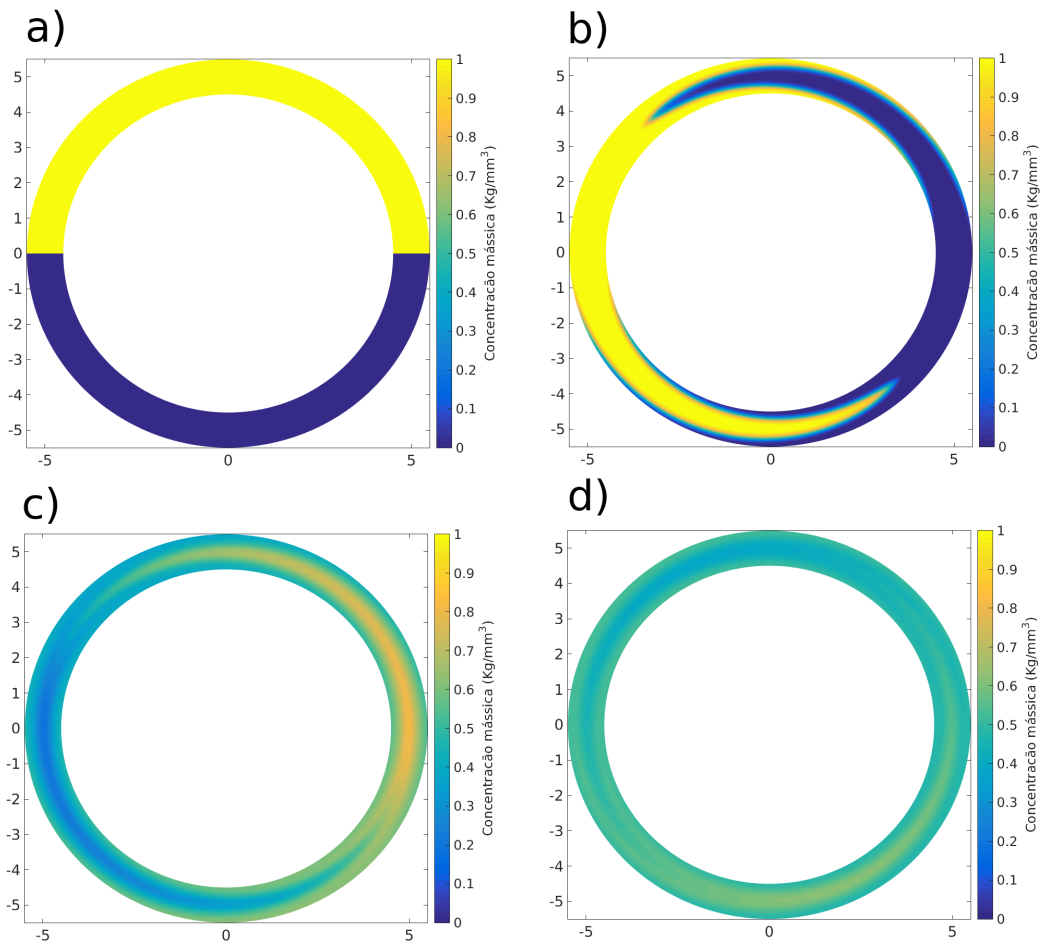


Figura 5: Processo de mistura em 4 níveis de tempo.

A Figura 5 mostra o processo de mistura em quatro tempos. Inicialmente o fenômeno é dominado quase exclusivamente pelo transporte (Figuras 5.a e 5.b), evidenciado pelo formato de infiltração de ambas as substâncias. Nota-se a presença da difusão molecular com valores de concentração mássica diferentes dos extremos 0 e 1. Na Figura 5.c os valores extremos inexistem, e as cores começam a se tornar homogêneas. Os valores de concentração nesse tempo pertencem ao intervalo de $[0.37; 0.62]$. A Figura 5.d ilustra o estágio final de mistura, nota-se a harmonização das cores, com valores de concentração uniformes, próximas a $0.5\text{kg}/\text{mm}^3$. Esse resultado demonstra a eficácia numérica em utilizar a transformada generalizada com uma malha refinada, conseguindo contornar a descontinuidade e capturar os efeitos difusivos. Os resultados são corroborados pelas análises encontradas também em [3].

6 Conclusões

Neste trabalho foram apresentados resultados da utilização das coordenadas generalizadas como metodologia primária para resolver a equação da convecção-difusão. Através de uma transformação, converte-se o domínio cartesiano (formato de anelar) em um domínio retangular, orientado por coordenadas polares.

Está metodologia se mostrou eficiente neste problema, pois facilita a aplicação de métodos numéricos específicos no domínio matemático. Os métodos, Tubo de Trajetórias e Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado, foram utilizados tendo como base a mesma discretização em coordenadas generalizadas, nesse caso, coordenadas polares. Como trabalhos futuros, deseja-se fazer outras análises qualitativas para este problema e utilizar está técnica em outros problemas com domínio físicos irregulares.

Referências

- [1] Lima, E. L. *Coordenadas no plano*. [S.l.]: IMPA/VITAE, 1992.
- [2] Henderson, N., Pacheco, F., & Kischinhevsky, M. Numerical solution of the Navier-Stokes equations using the Path Tubes method. *Chemical Engineering Science*, v. 172, p. 585-602, 2017.
- [3] Gleeson, J. P., Roche, O. M., West, J., & Gelb, A. Modelling Annular Micromixers. *Journal on Applied Mathematics - SIAM*, p. 1294-1310, 2004.
- [4] Bell, L. S. J., & Binning, P. J. A split operator approach to reactive transport with the forward particle tracking eulerian lagrangian localized adjoint method. *Advances in Water Resources-Elsevier*, v. 27, n. 4, p. 323-334, 2004.
- [5] Van der Vorst, H. A. Bi-cgstab: A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. *Journal on scientific and Statistical Computing - SIAM*, v. 13, n. 2, p. 631-644, 1992.
- [6] West, J. et al. Application of magnetohydrodynamic actuation to continuous flow chemistry. *Lab on a Chip*, v. 2, n. 4, p. 224-230, 2002