

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

# **Simulação de Partículas Carregadas em Fluidos Ionizados**

por

Manoel da Rosa Paiva Filho

Dissertação submetida como requisito parcial  
para a obtenção do grau de  
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dagoberto Adriano Rizzotto Justo, Ph.D.  
Orientador

Porto Alegre, maio de 2010.

## CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Filho, Manoel da Rosa Paiva

Simulação de Partículas Carregadas em Fluidos Ionizados / Manoel da Rosa Paiva Filho.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2010.

62 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2010.

Orientador: Justo, Ph.D., Dagoberto Adriano Rizzotto

Dissertação: Matemática Aplicada,  
Diferenças Finitas, Navier-Stokes, Contorno Virtual

# Simulação de Partículas Carregadas em Fluidos Ionizados

por

Manoel da Rosa Paiva Filho

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em  
Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade  
Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a  
obtenção do grau de

## Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Análise Numérica e Computação Científica

Orientador: Prof. Dagoberto Adriano Rizzotto Justo, Ph.D.

Banca examinadora:

Prof. Dr. Luciano Bedin  
DM/UFSC

Prof. Dr. Rafael Rodrigues Dihl  
PPGGTA/ULBRA

Prof. Dr. Leonardo Fernandes Guidi  
PPGMAp/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em  
31 de maio de 2010.

Prof. Dr. Waldir Leite Roque  
Coordenador

À Daniele e aos meus pais Manoel e Elza

## AGRADECIMENTOS

À Deus e a Jesus Cristo, obrigado por estarem sempre junto a mim.

Aos meus pais por todo amor e dedicação e por sempre estarem rezando por mim, eu amo vocês.

Ao meu orientador a quem considero um excelente professor, por toda atenção e amizade, obrigado por tudo.

Aos professores do PPGMAp, obrigado por tudo que me ensinaram.

Aos colegas, Daniel, Esequia, Fabio, João, Jorge, Roberto e a todos os outros, obrigado. Em especial a colega Elisângela, que se mostrou uma grande amiga daquelas que se pode contar nas horas difíceis.

À Daniele, sem você eu não teria conseguido, você é muito importante para mim.

## Sumário

|  |             |
|--|-------------|
| <b>AGRADECIMENTOS</b> . . . . .                  | <b>v</b>    |
| <b>LISTA DE FIGURAS</b> . . . . .                | <b>viii</b> |
| <b>RESUMO</b> . . . . .                          | <b>xi</b>   |
| <b>ABSTRACT</b> . . . . .                        | <b>xii</b>  |
| <br>   |             |
| <b>1 INTRODUÇÃO</b> . . . . .                    | <b>1</b>    |
| <br>   |             |
| <b>2 EQUAÇÕES GOVERNANTES</b> . . . . .          | <b>5</b>    |
| 2.1 Equação de Poisson-Boltzmann . . . . .       | 5           |
| 2.2 Equação de Navier-Stokes . . . . .           | 6           |
| 2.3 Movimento da Partícula . . . . .             | 7           |
| 2.4 Condições de Contorno . . . . .              | 8           |
| 2.5 Constantes e Variáveis Físicas . . . . .     | 10          |
| <br>   |             |
| <b>3 MÉTODOS NUMÉRICOS</b> . . . . .             | <b>12</b>   |
| 3.1 Malha Cartesiana . . . . .                   | 12          |
| 3.2 Discretização dos Operadores . . . . .       | 12          |
| 3.2.1 Equação de Navier-Stokes . . . . .         | 14          |
| 3.2.2 Equação de Poisson-Boltzmann . . . . .     | 16          |
| 3.3 Interpolação Lagrangeana . . . . .           | 17          |
| 3.4 Dinâmica de Movimento da Partícula . . . . . | 21          |
| 3.5 Estrutura do Algoritmo . . . . .             | 24          |
| <br>   |             |
| <b>4 RESULTADOS NUMÉRICOS</b> . . . . .          | <b>26</b>   |
| 4.1 Teste da Interpolação Lagrangeana . . . . .  | 26          |
| 4.2 Ordem de Convergência . . . . .              | 29          |

|       |  |    |
|-------|--|----|
| 4.3   | Simulação das Equações de Navier-Stokes . . . . .          | 31 |
| 4.4   | Cilindro Fixo em um Duto . . . . .                         | 36 |
| 4.5   | Partícula em Movimento Circular . . . . .                  | 42 |
| 4.5.1 | Cilindro Livre . . . . .                                   | 45 |
| 4.6   | Simulação da Equação de Poisson-Boltzmann . . . . .        | 46 |
| 4.7   | Problema Completo em um Duto Simples . . . . .             | 48 |
| 4.8   | Movimento de uma Partícula em um Fluido Ionizado . . . . . | 49 |
| 5     | CONSIDERAÇÕES FINAIS E CONCLUSÕES . . . . .                | 58 |
|       | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .                       | 60 |

## Lista de Figuras

|            |   |    |
|------------|---|----|
| Figura 1.1 | Diagrama esquemático do sistema Eletroforese Capilar. $R_1$ e $R_2$ são os recipientes contendo solução eletrolítica, $e_1$ e $e_2$ são os eletrodos, F é a fonte de potência. A detecção radial da absorção molecular é representada por uma fonte de radiação ( $\nu$ ) e um detector (D) acoplado a um computador (C). . . . . | 2  |
| Figura 2.1 | $\Omega_2$ domínio do fluido e $\Omega_1$ domínio da partícula . . . . .  | 6  |
| Figura 2.2 | Domínio para a simulação . . . . .  | 9  |
| Figura 3.1 | Malha computacional para o método de diferenças finitas . . . . .   | 13 |
| Figura 3.2 | Domínio computacional onde $\vec{x}$ é a malha Euleriana e $\vec{x}_k$ é a malha lagrangeana . . . . .  | 18 |
| Figura 3.3 | Pontos $\phi(x_1, y_1), \phi(x_1, y_2), \phi(x_2, y_1)$ e $\phi(x_2, y_2)$ na malha cartesiana e ponto $x_k$ na malha lagrangeana . . . . .   | 19 |
| Figura 3.4 | Ponto $P_k$ sobre o contorno da molécula e pontos $P_1, P_2, P_3$ e $P_4$ distantes $\Delta x, 2\Delta x, \Delta y$ e $2\Delta y$ do ponto k . . . . .  | 20 |
| Figura 3.5 | Pontos de interpolação externo à partícula . . . . .  | 21 |
| Figura 3.6 | Parte do contorno da partícula . . . . .  | 23 |
| Figura 4.1 | $\phi = 10$ e $erro =  exato - aproximado $ , onde as abscissas representam o índice $i$ do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro . . . . .   | 27 |
| Figura 4.2 | $\phi = x$ e $erro =  exato - aproximado $ onde as abscissas representam o índice $i$ do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro . . . . .  | 28 |
| Figura 4.3 | $\phi = x^2$ e $erro =  exato - aproximado $ onde as abscissas representam o índice $i$ do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro . . . . .  | 28 |
| Figura 4.4 | $\phi = x^3$ e $erro =  exato - aproximado $ onde as abscissas representam o índice $i$ do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro . . . . .  | 29 |
| Figura 4.5 | $\phi = \text{sen}(x)$ onde as abscissas representam o índice $i$ do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro . . . . .  | 30 |
| Figura 4.6 | $\phi = \text{sen}(x)$ , malhas $21 \times 21, 41 \times 41, 81 \times 81$ e $161 \times 161$ pontos . . . . .  | 30 |



|             |  |    |
|-------------|--|----|
| Figura 4.7  | Malha com $101 \times 101$ pontos com $Re = 1000$ : (a) domínio completo, (b) ampliação na entrada e (c) ampliação na saída.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . .  | 33 |
| Figura 4.8  | Malha com $201 \times 201$ pontos com $Re = 1000$ : (a) domínio completo, (b) ampliação na entrada e (c) ampliação na saída.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . .  | 34 |
| Figura 4.9  | Malha com $401 \times 401$ pontos com $Re = 1000$ : (a) domínio completo, (b) ampliação na entrada e (c) ampliação na saída.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . .  | 35 |
| Figura 4.10 | Malha com $201 \times 201$ pontos com $Re = 100$ : (a) domínio completo e (b) ampliação do vórtice.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . .   | 37 |
| Figura 4.11 | (a)Malha com $201 \times 201$ pontos com $Re = 500$ : (b)ampliação vórtice assimétrico.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . .   | 39 |
| Figura 4.12 | Malha $201 \times 201$ pontos $Re = 1000$ : (a) $t = 30$ e (b) $t = 40$ .(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . .   | 41 |
| Figura 4.13 | Malha com $61 \times 61$ pontos, $Re = 100$ : (a) 20.000 iterações, $t = 2$ , (b)40.000 iterações, $t = 4$ , (c)60.000 iterações, $t = 6$ e (d) 80.000 iterações, $t = 8$ .(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . . | 43 |
| Figura 4.14 | Malha com $61 \times 61$ pontos, $Re = 100$ : (a) 100.000 iterações, $t=10$ , (b)120.000 iterações, $t=12$ (c) 140.000 iterações, $t=14$ e (d)ampliação do vórtice central.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . . | 44 |
| Figura 4.15 | Cilindro em movimento.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . .  | 45 |
| Figura 4.16 | Malha com $41 \times 41$ pontos e $\rho = 5$ . . . . .   | 46 |
| Figura 4.17 | Malha com $41 \times 41$ pontos e $\rho = -5$ . . . . .  | 47 |
| Figura 4.18 | Malha com $41 \times 41$ pontos e $k_1 = 2$ e $k_2 = 78$ . . . . .   | 47 |
| Figura 4.19 | $Re = 0.1$ : (a) malha $31 \times 31$ pontos, (b) malha $61 \times 61$ pontos.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)  | 50 |

|             |   |    |
|-------------|---|----|
| Figura 4.20 | $Re = 0.1$ e malha $31 \times 31$ pontos: (a) 61 pontos lagrangeanos, (b) 121 pontos lagrangeanos.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores) . . . . . | 51 |
| Figura 4.21 | $Re = 0.1$ malha $61 \times 61$ pontos: (a) pressão (b) ampliação região da partícula . . . . .   | 52 |
| Figura 4.22 | $Re = 0.1$ malha $61 \times 61$ pontos: (a) potencial elétrico (b) ampliação região da partícula . . . . .  | 53 |
| Figura 4.23 | Malha com $61 \times 61$ pontos, $Re = 0.1$ : (a) direção sul, (b) direção norte.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)                            | 56 |
| Figura 4.24 | Malha com $61 \times 61$ pontos, $Re = 0.1$ : (a) direção leste, (b) direção oeste.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)                          | 57 |

## RESUMO

Neste trabalho abordam-se alguns aspectos numéricos relacionados ao movimento de uma partícula carregada em um fluido ionizado, constituindo assim o fenômeno de eletroforese. A equação de Navier-Stokes governa a hidrodinâmica do sistema, sendo atribuída a esta um termo forçante relacionado a equação de Poisson-Boltzmann que descreve a interação com o campo elétrico. A simulação foi realizada utilizando a linguagem Fortran 90 e as discretizações foram feitas pelo método de diferenças finitas junto as equações governantes. Para descrever a posição da partícula foi usada a técnica de fronteira virtual, onde são criados pontos lagrangeanos sobre o contorno da partícula formando uma espécie de segunda malha. Foram feitos testes com objetivo de validar as equações governantes e identificar a influência das condições de contorno na direção da partícula.

## ABSTRACT

In this work we study some of the numerical aspects related to the motion of a charged particle in an ionized fluid, known as the phenomenon of electrophoresis. The Navier-Stokes equations models the hydrodynamics of the system, with the addition of a forcing term, related to the Poisson-Boltzmann equation, which describes the interaction of the electric field. The simulation was performed using Fortran 90 and discretizations were made by the method of finite differences applied to the governing equations. To describe the position of the particle the technique of virtual boundary is used, where Lagrangean points are created around the circumference of the particle forming a sort of second mesh. Tests were made with the objective of validating the governing equations and to identify the influence of boundary conditions in the direction of the particle.

# 1 INTRODUÇÃO

O fenômeno denominado eletroforese é definido como sendo a migração de partículas carregadas eletricamente, que ocorre quando as mesmas são imersas em um eletrólito (fluido ionizado) e passam a se mover quando uma corrente elétrica é aplicada a este meio. É bastante comum a sua utilização no campo da biologia molecular, genética, bioquímica e outros. O objetivo deste trabalho é simular e estudar alguns dos aspectos numéricos relacionados com este fenômeno, tendo como base e apoio a tese do Prof. Dr. Luciano Bedin [3]. A motivação que nos levou a estudar a eletroforese é poder investigar os diferentes aspectos na modelagem e simulação desse fenômeno.

Em [3] são explicados e caracterizados os tipos de eletroforese, sendo que neste trabalho todas as vezes que nos referirmos a eletroforese estamos nos referindo a eletroforese capilar. Esta técnica de separação de moléculas e macromoléculas teve um grande avanço nos anos 80 devido a contribuição de Jorgenson e seus colaboradores [23], apresentando uma grande eficiência. O nome eletroforese capilar provém da técnica ser efetuada em capilares finos de 10 a 200  $\mu m$  de diâmetro interno e comprimento da ordem de 0.5m. Nessa técnica é empregado um tubo capilar que normalmente é preenchido por uma solução aquosa, denominada *solução tampão*, e quando aplicamos uma diferença de potencial nas extremidades dos capilares, estabelece-se um campo elétrico o qual promove a eletrosmose do fluido e a eletroforese das moléculas [17, 23]. Um diagrama esquemático do sistema é apresentado na figura 1.1 [13].

Uma das equações envolvidas nesse fenômeno é a equação de Poisson-Boltzmann, que é responsável pela interação eletrostática entre a partícula e o fluido ionizado. Esta equação é importante nos domínios da dinâmica molecular e biofísica porque pode ser usada na modelagem dos efeitos do solvente sobre as proteínas,

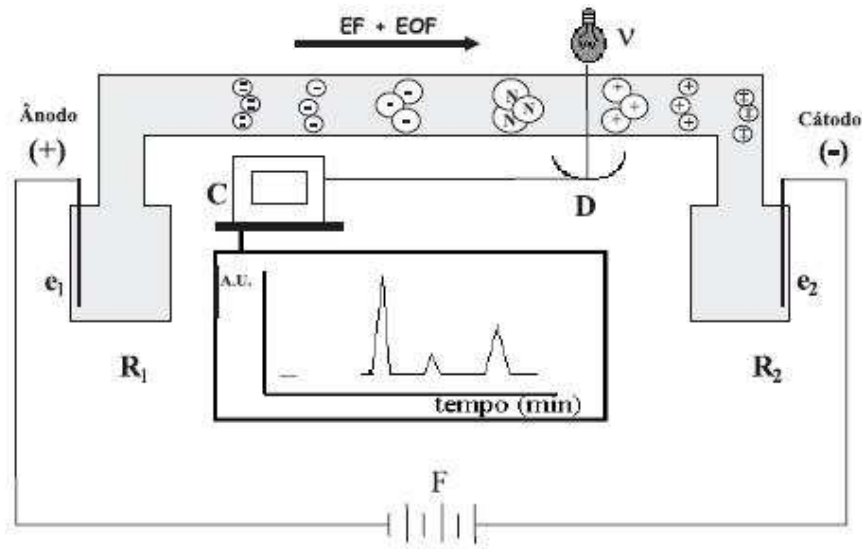


Figura 1.1: Diagrama esquemático do sistema Eletroforese Capilar.  $R_1$  e  $R_2$  são os recipientes contendo solução eletrolítica,  $e_1$  e  $e_2$  são os eletrodos, F é a fonte de potência. A detecção radial da absorção molecular é representada por uma fonte de radiação ( $\nu$ ) e um detector (D) acoplado a um computador (C).

DNA, RNA e outras moléculas de força iônica diferente. Uma outra equação a ser estudada é a equação de Navier-Stokes, que governa a hidrodinâmica do sistema; apesar de ser um modelo muito utilizado em dinâmica dos fluidos, esta equação é altamente não linear o que torna a solução do problema muito mais difícil.

Conforme observado em [17, 6, 3] o movimento eletroforético é complexo tanto do ponto de vista físico como matemático, sendo muitas as variáveis que influenciam o seu comportamento, tal como temperatura, velocidade, potencial elétrico, constante dielétrica e outras. Sabendo da grande complexidade que exige a simulação numérica da eletroforese, nosso objetivo é simular o comportamento de uma macromolécula em um fluido ionizado (tipicamente água e NaCl) em um pequeno domínio. Como citado em [6], o tubo, chamado de tubo capilar, onde é realizada a separação de moléculas por eletroforese capilar é da ordem de micrômetros, geralmente possuindo um comprimento de  $500000 \mu m = 50 \text{ cm}$  e um diâmetro in-

terno de  $50 \mu m$  (micrômetros). Vamos simular um tubo de  $4 \mu m$  por  $4 \mu m$ , que é uma pequena parte do tubo capilar, restringindo o estudo a aspectos numéricos da simulação e evitando comparações com o problema físico. Neste trabalho as dimensões do tubo capilar não estão sendo levados em consideração.

No capítulo 2 são apresentadas as equações governantes, dando um breve resumo das equações que governam e descrevem o comportamento de uma partícula carregada em um fluido ionizado. É importante salientar que a análise dessas equações é bastante complexo tanto no campo analítico como no computacional. O modelo utilizado foi baseado em [3]. As referências [19, 12, 11] fornecem uma explicação mais detalhada sobre a equação de Navier-Stokes e [2, 15] apresenta um estudo mais aprofundado da equação de Poisson-Boltzmann. Também são apresentadas as equações que descrevem o movimento da partícula e as condições de contorno, assim como as constantes e variáveis físicas do sistema.

No capítulo 3 descrevemos o procedimento de discretização para o domínio da simulação e a aproximação das equações pelo método de diferenças finitas aplicado às equações citadas anteriormente. Logo após introduzimos o método da fronteira virtual na simulação numérica, relacionamos o movimento da partícula com as equações governantes e por fim mapeamos a construção do algoritmo.

Finalmente no capítulo 4 apresentamos os resultados numéricos de forma ordenada e parcial. É apresentado o cálculo do erro das interpolações feitas sobre os pontos lagrangeanos e também a ordem de erro do método. O algoritmo para a discretização da equação de Navier-Stokes é validado de quatro formas; a primeira através do refinamento da malha, a segunda pela simulação de diferentes números de Reynolds influenciando no surgimento de vórtices, a terceira com a simulação de uma partícula em movimento circular e a quarta, um cilindro livre dentro de um duto. A validação da equação de Poisson-Boltzmann é analisada através da mudança de parâmetros e na mudança e no estudo do comportamento de suas variáveis. Também são mostrados uma série de resultados importantes para a val-

idação do código. Por fim é modelado o fenômeno eletroforese onde a partícula movimenta-se por influência somente da diferença de potencial elétrico.



## 2 EQUAÇÕES GOVERNANTES

O conjunto de equações que descreve o comportamento do fluido e o comportamento de partículas eletricamente carregadas interagindo com um fluido ionizado é fundamental para a análise do fenômeno eletroforese. Estas equações são apresentadas juntamente das suas variáveis e condições de contorno para a resolução do problema.

### 2.1 Equação de Poisson-Boltzmann

As interações eletrostáticas entre moléculas em soluções iônicas são essenciais na compreensão de muitos processos biológicos. Processos esses que algumas vezes envolvem o estudo de macromoléculas de DNA (ou seus fragmentos) estando estas imersas em um solvente (tipicamente água e NaCl), onde suas dimensões e seu volume, estão devidamente fornecidas em [1].

Devido ao grande avanço no campo da computação e as grandes melhorias que tem ocorrido na construção de algoritmos numéricos, a equação de Poisson-Boltzmann tem sido utilizada com grande êxito na simulação de fenômenos elétricos em sistemas biológicos. Em [3, 15] temos mais aplicações para a equação de Poisson-Boltzmann.

Nesse trabalho pretendemos simular numericamente uma macromolécula carregada, representada pela região  $\Omega_1$ , imersa numa solução eletrolítica representada pela região  $\Omega_2$  conforme a figura 2.1.

A equação de Poisson-Boltzmann descreve o comportamento do potencial elétrico; que é o trabalho realizado por uma força elétrica, para atrair ou repelir

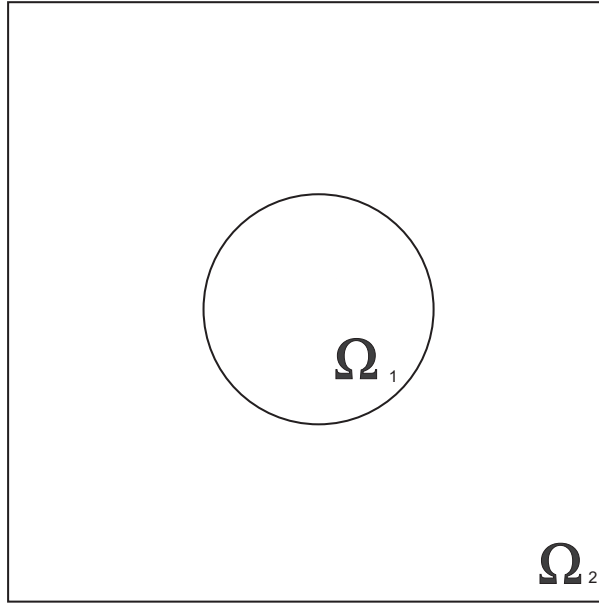


Figura 2.1:  $\Omega_2$  domínio do fluido e  $\Omega_1$  domínio da partícula

cargas elétricas [22] . Esta é dada por

$$\nabla \cdot (K \nabla \phi) - b \sinh \left( \frac{e\phi}{T} \right) = \rho, \quad em \quad \Omega_1 \cup \Omega_2 \quad (2.1)$$

onde  $\phi$  é o potencial eletrostático do sistema (solvente e macromolécula),  $K$  é a constante dielétrica,  $e$  é a carga do elétron,  $T$  é o produto da constante de Boltzmann pela temperatura do sistema,  $\rho$  é uma distribuição de cargas fixas,  $\sinh \left( \frac{e\phi}{T} \right)$  é a distribuição de Boltzmann de íons livres no solvente e  $b = k_2 r_D^{-2}$  onde  $k_2$  é a constante dielétrica do fluido e  $r_D$  é o raio de Debye. A partir da sua solução podemos calcular o campo elétrico representado por  $\vec{E}_1 = -\nabla \phi_1$  em  $\Omega_1$  e  $\vec{E}_2 = -\nabla \phi_2$  em  $\Omega_2$ , onde  $\phi_1$  e  $\phi_2$  representam o potencial elétrico em  $\Omega_1$  e  $\Omega_2$ .

## 2.2 Equação de Navier-Stokes

O estudo da hidrodinâmica do sistema é bastante complexo, desta forma o conjunto de equações que descreve este fenômeno é fundamental. Vamos considerar um fluxo não estacionário e a hidrodinâmica do sistema será então governada pela

equação de Navier-Stokes

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{u} + \vec{F} \text{ em } \Omega_2 \quad (2.2)$$

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

onde  $\vec{u}$  é a velocidade,  $p$  é a pressão,  $Re$  é o número de Reynolds e  $\vec{F}$  é a força elétrica sobre o domínio do fluido. Uma descrição mais detalhada dessa equação pode ser encontrada nos livros [11, 19, 10].

O número de Reynolds é um número adimensional que relaciona as forças viscosas com as forças de inércia, sendo dado por

$$Re = \frac{\beta u d}{\eta}, \quad (2.4)$$

onde  $\beta$  é a massa específica ( $Kg/m^3$ ),  $u$  é a velocidade,  $d$  é o diâmetro interno do tubo capilar ( $m$ ) e  $\eta$  é o coeficiente de viscosidade dinâmica do fluido ( $Pa.s$ ) que no nosso caso será uma solução aquosa.

## 2.3 Movimento da Partícula

Quando um campo elétrico é aplicado sobre o contorno do recipiente do fluido ionizado, este gera uma força elétrica sobre este domínio representada por

$$\vec{F} = \left( C_1 \rho + C_2 \sinh \left( \frac{e\phi}{T} \right) \right) \nabla \phi, \quad (2.5)$$

onde  $C_1 > 0$  e  $C_2 > 0$ . A partícula é um círculo com distribuição uniforme de cargas. A segunda lei de Newton nos diz que  $\vec{F} = m\vec{a}$  do qual obtemos a equação para o movimento da partícula, que é descrito pela seguinte equação

$$m \frac{d\vec{u}_c}{dt} = \vec{F}, \quad (2.6)$$

onde  $m$  é a massa,  $\vec{u}$  é a velocidade da partícula, o movimento pode ser determinado a partir da equação

$$\frac{d\vec{x}_c}{dt} = \vec{u}_c \quad (2.7)$$

onde  $\vec{x}_c$  é o centro de massa e  $\vec{u}_c$  a velocidade da partícula no centro e

$$\vec{I} = \int_{\partial\Omega_1} \sigma^H \cdot \vec{n} ds + \int_{\partial\Omega_1} \sigma^E \cdot \vec{n} ds \quad (2.8)$$

representa a tensão dinâmica e eletrostática na superfície da molécula composta pelo tensor de tensões do fluido

$$\sigma^H = 2\eta \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - p\delta_{ij} \right) \quad (2.9)$$

e pelo tensor eletrostático

$$\sigma^E = \sigma_{ij}^E = \frac{Tk_2}{4\pi e} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \delta_{ij} (\nabla \psi)^2 \right), \quad (2.10)$$

onde  $\psi = \frac{\phi e}{T}$  em  $\Omega_2$  e  $\vec{n}$  é o vetor normal sobre o contorno da partícula.

## 2.4 Condições de Contorno

As equações de Navier Stokes e Poisson-Boltzmann são bastante comuns em estudos de fenômenos naturais, químicos e biológicos. O acoplamento destas equações com condições de contorno diferentes, assim como o uso de parâmetros e condições iniciais adequadas permite a utilização destas equações para o estudo de diferentes tipos de fenômenos.

Em nosso trabalho faremos testes usando diferentes tipos de condição de contorno, com o objetivo de estudar o comportamento da partícula. A figura 2.2 mostra o modelo do nosso domínio, que possui dimensões  $4\mu m \times 4\mu m$  e uma molécula no centro de raio  $r = 0.2\mu m$

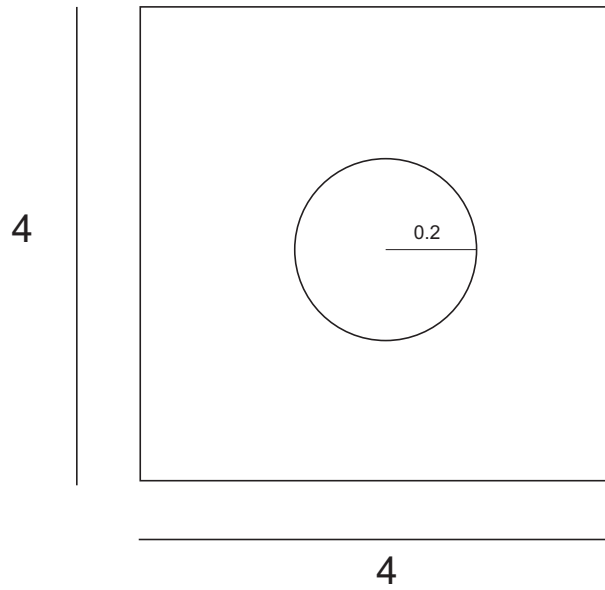


Figura 2.2: Domínio para a simulação

No caso da molécula estar em movimento as condições de contorno usadas para equação de Navier-Stokes no campo da pressão; representada aqui por  $p$ , e para a velocidade; representadas por  $u$  e  $v$ , na direção  $x$  e  $y$  respectivamente, são

$$u = u_c, \text{ em } \partial\Omega_1, \quad (2.11)$$

$$v = v_c, \text{ em } \partial\Omega_1, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \partial\Omega_1, \quad (2.13)$$

$$u = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (2.14)$$

$$v = 0, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (2.17)$$

$$u = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 4 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (2.18)$$

$$v = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 4 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \partial\Omega_2. \quad (2.20)$$

e no caso da molécula estar parada  $u_c = 0$  e  $v_c = 0$ .

As condições de contorno usadas na equação de Poisson-Boltzmann foram

$$\phi = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (2.21)$$

$$\phi = -1, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 0 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 4 \text{ para } 0 < x < 4. \quad (2.24)$$

## 2.5 Constantes e Variáveis Físicas

Para a simulação do problema físico da eletroforese é necessária a definição de constantes e variáveis físicas. Na equação de Poisson Boltzmann temos

$$\rho = -\frac{4\pi e}{T}\rho_1, \quad \text{para } x \in \Omega_1 \quad (2.25)$$

$$\rho = -\frac{4\pi e}{T}\rho_2, \quad \text{para } x \in \Omega_2 \quad (2.26)$$

$$b = 0, \quad \text{para } x \in \Omega_1 \quad (2.27)$$

$$b = k_2 r_D^{-2}, \quad \text{para } x \in \Omega_2 \quad (2.28)$$

$$k_1 = 2, \quad \text{para } x \in \Omega_1 \quad (2.29)$$

$$k_2 = 78, \quad \text{para } x \in \Omega_2 \quad (2.30)$$

onde  $e = 1,60 \times 10^{-19}C$  é a carga do elétron [21],  $T = 20^\circ C$  é a temperatura [17],  $\rho_1 = 1$  é a distribuição de cargas fixas dentro da partícula,  $\rho_2 = 1$  é a distribuição de cargas fixas fora da partícula,  $k_1 = 2$  é a constante dieletrica da partícula [3],  $k_2 = 78$  é a constante dielétrica do fluido ionizado [18] e  $r_D^{-2} = \frac{4\pi n e^2}{K_2 T}$  onde  $n$  é a concentração de massa e  $r_D$  é o raio de Debye, que é a distância fornecida da separação de cargas por influência de um campo elétrico a contar da parede do duto no interior do solvente [3, 6].

Na equação de Navier-Stokes, o número de Reynolds ( $Re$ ) está relacionado com a viscosidade do fluido. Em [20, 12] é apresentado uma classificação da formação de vórtices por influência do número de  $Re$ , para um fluido se deslocando dentro de um cilindro circular em regime laminar para  $Re < 5$ . No fenômeno aqui estudado, a velocidade do deslocamento da água dentro de um capilar de diâmetro interno de  $d = 50\mu m$  é aproximadamente  $u = 0.0001m/s$ , e temos também que a viscosidade da água na temperatura de  $20^\circ C$  é  $\frac{\beta}{\eta} = 10^6 KgPa.s/m^3$  onde  $\beta$  é a massa específica ( $Kg/m^3$ ) e  $\eta$  é a viscosidade (Pa.s) o que fornece como resultado  $Re \approx 0.05$  [17]. A massa da partícula é da ordem de  $10^{-18}gramas$ .

### 3 MÉTODOS NUMÉRICOS

Acima estabelecemos as equações do modelo matemático que serão utilizadas na simulação do movimento eletroforético. Em [3] foi estudado o método analítico para a demonstração da existência da solução deste problema, mas aqui vamos apresentar um método numérico para simulação do mesmo. As equações utilizadas foram discretizadas pelo método de diferenças finitas [11].

#### 3.1 Malha Cartesiana

Para obter uma solução numérica, devemos discretizar o domínio, isto é, subdividi-lo em quadrados menores, onde nos vértices desses quadrados a solução será aproximada. A este conjunto de pontos damos o nome de malha que está representado pela figura 3.1.

Os pontos da malha localizam-se na intersecção das linhas horizontais com as verticais, separados por uma distância  $\Delta x$  na direção  $x$  e  $\Delta y$  na direção  $y$ , construindo assim uma malha de espaçamento uniforme. Os pontos da malha são indicados por  $i$  e  $j$  de forma que  $i$  representa a direção  $x$  e  $j$  a direção  $y$  (para mais detalhes veja [11, 4, 10]).

#### 3.2 Discretização dos Operadores

Nesta etapa apresentamos a discretização das equações governantes (apresentadas nas seções 2.1, 2.2 e 2.3) por meio do método de diferenças finitas. A expansão em série de Taylor é a base das aproximações de diferenças finitas.

Suponha que  $f$  seja contínua no intervalo  $[a,b]$  e que esta possua derivada até a ordem  $N$  (onde  $N \in \mathbb{N}$ ) contínuas nesse intervalo. Então para todo o ponto



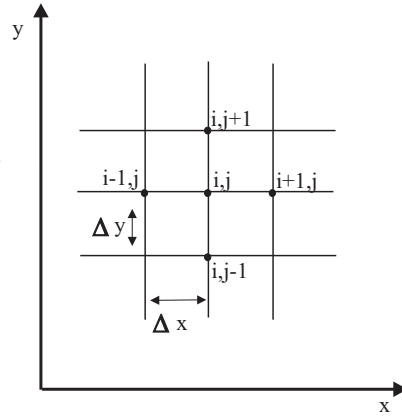


Figura 3.1: Malha computacional para o método de diferenças finitas

$x \in [a, b]$  e  $f$  analítica em  $x$  podemos escrever

$$f(x) = f(x_0) + (\Delta x) \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x_0} + \dots \quad (3.1)$$

onde  $\Delta x = x - x_0$ .

Para determinar a primeira derivada da função  $f$  no ponto  $x_i = i\Delta x$ , que será aqui denotada por  $\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i$ , devemos expandir  $f(x)$  em série de Taylor em torno do ponto  $x_i$ ,

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + (\Delta x) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_i + \dots \quad (3.2)$$

isolando a primeira derivada podemos escrever

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} + \left[ -\frac{\Delta x}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_i - \dots \right] \quad (3.3)$$

onde a expressão (3.3) indica que a primeira derivada é igual ao quociente

$$\frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} \quad (3.4)$$

mais todo o termo do *erro de truncamento local* (ETL)

$$ETL = -\frac{\Delta x}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_i - \dots \quad (3.5)$$

Podemos simplificar a equação (3.3) por

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (3.6)$$

onde esta expressão representa uma aproximação de primeira ordem, utilizando diferença para frente.

Para obter uma aproximação de ordem 2 devemos manipular convenientemente as expansões em série de Taylor

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + (\Delta x) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i + \mathcal{O}((\Delta x)^3) \quad (3.7)$$

e

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - (\Delta x) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i + \mathcal{O}((\Delta x)^3) \quad (3.8)$$

Combinando essas duas expressões, obtemos

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}((\Delta x)^2). \quad (3.9)$$

Utilizando as expressões (3.7) e (3.8) e rearranjando os termos obtemos a aproximação para a derivada de segunda ordem

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2). \quad (3.10)$$

A expressão (3.10) é denominada aproximação por diferença central, para maiores detalhes consulte [11].

### 3.2.1 Equação de Navier-Stokes

Usando as aproximações citadas na seção anterior, podemos discretizar as equações de Navier-Stokes. Primeiro transformamos (2.2) e (2.3) em

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + F_u \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + F_v \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.13)$$

Aplicando a aproximação de primeira ordem

$$\left[ \frac{\partial u}{\partial t} \right]_{i,j}^{n+1} = \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} \quad (3.14)$$

podemos utilizar o método de Euler para as derivadas temporais. Desta forma, as equações (2.2) e (2.3) do momento tornam-se

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left[ \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(uu)}{\partial x} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} - \frac{\partial p}{\partial x} + F_u \right], \quad (3.15)$$

$$v^{n+1} = v^n + \Delta t \left[ \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(vv)}{\partial y} - \frac{\partial p}{\partial y} + F_v \right]. \quad (3.16)$$

Consideremos as velocidades intermediárias  $\hat{u}^n$  e  $\hat{v}^n$  sem considerar a pressão

$$\hat{u}^n = u^n + \Delta t \left[ \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(uu)}{\partial x} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} + F_u \right], \quad (3.17)$$

$$\hat{v}^n = v^n + \Delta t \left[ \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(vv)}{\partial y} + F_v \right] \quad (3.18)$$

e desta forma podemos escrever as equações (3.15) e (3.16) como

$$u^{n+1} = \hat{u}^n - \Delta t \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x}, \quad (3.19)$$

$$v^{n+1} = \hat{v}^n - \Delta t \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y}. \quad (3.20)$$

Devemos ainda obter uma equação para calcular a pressão. Para isso, podemos substituir (3.19) e (3.20) na equação da continuidade (2.3) obtendo

$$0 = \frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial y} = \frac{\partial \hat{u}^{(n)}}{\partial x} - \Delta t \frac{\partial^2 p^{(n+1)}}{\partial x^2} + \frac{\partial \hat{v}^{(n)}}{\partial y} - \Delta t \frac{\partial^2 p^{(n+1)}}{\partial y^2} \quad (3.21)$$

de onde, rearranjando os termos, temos

$$\frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial y^2} = \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{\partial \hat{u}^n}{\partial x} + \frac{\partial \hat{v}^n}{\partial y} \right). \quad (3.22)$$

Assim, obtemos o acoplamento pressão-velocidade representado pela equação de Poisson (3.22). As funções  $F_u$  e  $F_v$  são a força elétrica sobre o domínio

do fluido (conforme [3])

$$F_u = \left( C_1 \rho + C_2 \sinh \left( \frac{e\phi}{T} \right) \right) \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad (3.23)$$

$$F_v = \left( C_1 \rho + C_2 \sinh \left( \frac{e\phi}{T} \right) \right) \frac{\partial \phi}{\partial y}. \quad (3.24)$$

As derivadas foram discretizadas utilizando o método de diferenças finitas com derivada de segunda ordem e central. Como exemplo, considere a equação (3.17), (3.18) e (3.23) onde as derivadas são aproximadas por

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \approx \frac{v_{i,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i,j-1}}{\Delta y^2} \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial(uu)}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j}u_{i+1,j} - u_{i-1,j}u_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial(uv)}{\partial y} \approx \frac{u_{i,j+1}v_{i,j+1} - u_{i,j-1}v_{i,j-1}}{2\Delta y} \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (3.29)$$

Através desses procedimentos, conseguimos discretizar a equação de Navier-Stokes, que será utilizada no algoritmo computacional descrito na seção (3.5).

### 3.2.2 Equação de Poisson-Boltzmann

Uma maneira de aproximar a solução para a equação de Poisson-Boltzmann é discretizar cada termo conforme a seção anterior, obtendo desta forma uma equação não linear e implícita para  $\phi$ . Poderíamos então usar o método de Newton (veja [7]) para resolver esta equação.

Entretanto usamos um outro método. Acrescentamos à equação de Poisson-Boltzmann um termo com derivada temporal  $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ . O objetivo, então, é obter a solução permanente  $\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$  para esta equação do calor, sabendo que esta é também solução da equação de Poisson-Boltzmann desejada.

Desta forma temos a equação

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla \phi) - b \sinh(\phi) - \rho \quad (3.30)$$

que discretizada torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} &= \frac{k_{i+\frac{1}{2},j}(\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i,j}^n) - k_{i-\frac{1}{2},j}(\phi_{i,j}^n - \phi_{i-1,j}^n)}{\Delta x^2} \\ &+ \frac{k_{i,j+\frac{1}{2}}(\phi_{i,j+1}^n - \phi_{i,j}^n) - k_{i,j-\frac{1}{2}}(\phi_{i,j}^n - \phi_{i,j-1}^n)}{\Delta x^2} \\ &- b_{i,j} \sinh \phi_{i,j}^n - \rho_{i,j}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Isolando  $\phi_{i,j}^{n+1}$  obtemos

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{n+1} &= \phi_{i,j}^n + dt \left\{ \frac{k_{i+\frac{1}{2},j}(\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i,j}^n) - k_{i-\frac{1}{2},j}(\phi_{i,j}^n - \phi_{i-1,j}^n)}{\Delta x^2} \right\} \\ &+ dt \left\{ \frac{k_{i,j+\frac{1}{2}}(\phi_{i,j+1}^n - \phi_{i,j}^n) - k_{i,j-\frac{1}{2}}(\phi_{i,j}^n - \phi_{i,j-1}^n)}{\Delta x^2} - b_{i,j} \sinh \phi_{i,j}^n - \rho_{i,j} \right\} \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde

$$k_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{k_{i,j} + k_{i+1,j}}{2}, \quad (3.33)$$

$$k_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{k_{i,j} + k_{i-1,j}}{2}, \quad (3.34)$$

$$k_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{k_{i,j} + k_{i,j+1}}{2}, \quad (3.35)$$

$$k_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{k_{i,j} + k_{i,j-1}}{2}. \quad (3.36)$$

### 3.3 Interpolação Lagrangeana

Corpos imersos em fluidos são um problema de grande complexidade tanto no campo da geometria como no estudo do seu movimento. Uma das maiores dificuldades enfrentadas é com o contorno da partícula, pois este não coincide com os pontos da malha cartesiana, e por isso, faz-se necessário a aplicação de pontos lagrangianos sobre este contorno; a este método damos o nome de *fronteira virtual*. O método aqui proposto é o mesmo usado em [8], pois é baseado no cálculo do

campo de força ao longo de uma sequência de pontos lagrangeanos, como mostra a figura 3.2. Estes representam a interface da partícula que está imersa em um fluido de escoamento laminar ao longo de um domínio de dimensões  $4\mu m \times 4\mu m$ .

As informações sobre as equações que controlam o movimento do fluido e calculam a força sobre as partículas foram descritas nas seções 3.2.1 e 3.2.2.

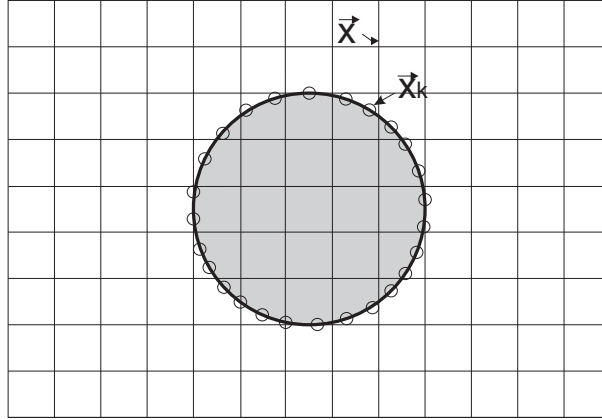


Figura 3.2: Domínio computacional onde  $\vec{x}$  é a malha Euleriana e  $\vec{x}_k$  é a malha lagrangeana

As coordenadas dos pontos lagrangeanos em torno da partícula são dadas por

$$x_i = x_c + r \cos(\alpha_i) \quad \text{para } i = 0, \dots, p \quad (3.37)$$

$$y_i = y_c + r \sin(\alpha_i) \quad \text{para } i = 0, \dots, p \quad (3.38)$$

onde  $(x_c, y_c)$  são as coordenadas do centro da partícula,  $r$  é o raio da partícula,  $\alpha_i = \frac{2\pi i}{p}$  e  $p$  é a quantidade de pontos.

Precisamos transferir os valores da velocidade  $(u, v)$ , pressão  $p$  e potencial elétrico  $\phi$  calculado na malha cartesiana através das equações (2.1), (2.2) e (2.3) para a malha lagrangeana. Desta forma podemos aplicar as condições de contorno apropriadas para cada incógnita e calcular as tensões superficiais na partícula. Vamos apresentar as equações para  $\phi$  e para as outras variáveis é usada a mesma

metodologia. Utilizamos uma interpolação bilinear para obter a partir de 4 pontos vizinhos na malha cartesiana (veja figura 3.3) o valor da quantidade num ponto lagrangiano através da equação

$$\begin{aligned} \phi(x, y) &= \phi(x_1, y_1) \frac{(x_2 - x)(y_2 - y)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} \\ &+ \phi(x_2, y_1) \frac{(x - x_1)(y_2 - y)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} \\ &+ \phi(x_1, y_2) \frac{(x_2 - x)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} \\ &+ \phi(x_2, y_2) \frac{(x - x_1)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

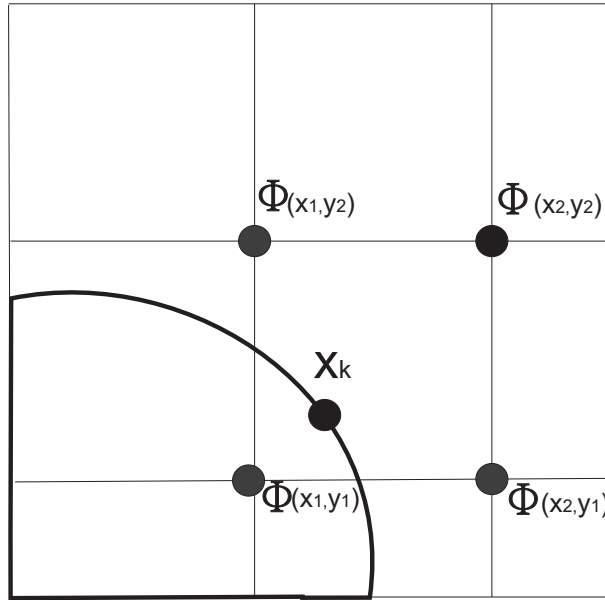


Figura 3.3: Pontos  $\phi(x_1, y_1), \phi(x_1, y_2), \phi(x_2, y_1)$  e  $\phi(x_2, y_2)$  na malha cartesiana e ponto  $x_k$  na malha lagrangeana

Para calcular a derivada de  $\phi$  nos pontos lagrangeanos, precisamos interpolar  $\phi$  no ponto  $P_k$ , conforme a figura 3.4, que está sobre o contorno da molécula e em mais 4 pontos vizinhos:  $P_1, P_2, P_3$  e  $P_4$ . Por exemplo, para o ponto  $P_3$  usamos os quatro pontos que o cercam pertencentes a malha euleriana. A distância do ponto  $P_k$  aos pontos  $P_1$  e  $P_2$  é  $\Delta x$  e  $2\Delta x$  respectivamente; a distância do ponto  $P_k$  aos pontos  $P_3$  e  $P_4$  é  $\Delta y$  e  $2\Delta y$  respectivamente. A derivada primeira na direção  $x$  e na

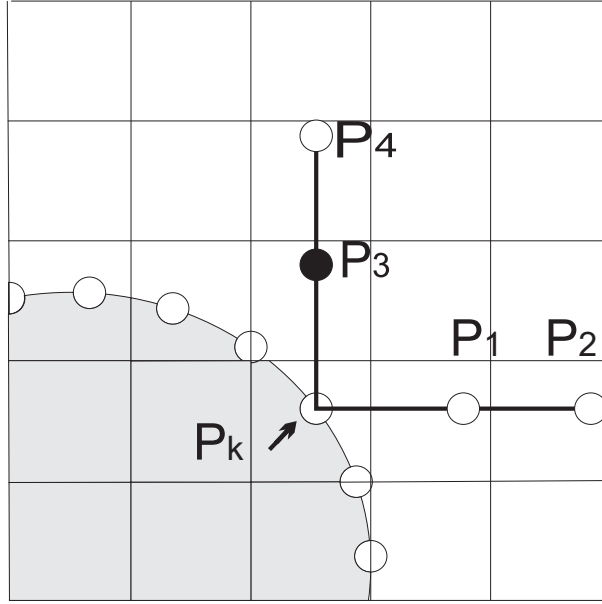


Figura 3.4: Ponto  $P_k$  sobre o contorno da molécula e pontos  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$  e  $P_4$  distantes  $\Delta x$ ,  $2\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $2\Delta y$  do ponto  $k$

direção  $y$  são aproximadas por

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_k}{\partial x}(x_k, y_k) &= \frac{(x_k - x_2)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_k)} P_1 \\ &+ \frac{(x_k - x_1)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_k)} P_2 \\ &+ \frac{(x_k - x_1) + (x_k - x_2)}{(x_k - x_1)(x_k - x_2)} P_k, \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_k}{\partial y}(x_k, y_k) &= \frac{(y_k - y_4)}{(y_3 - y_4)(y_3 - y_k)} P_3 \\ &+ \frac{(y_k - y_3)}{(y_4 - y_3)(y_4 - y_k)} P_4 \\ &+ \frac{(y_k - y_3) + (y_k - y_4)}{(y_k - y_3)(y_k - y_4)} P_k, \end{aligned} \quad (3.41)$$

onde  $P_1, P_2, P_3$  e  $P_4$  são obtidos através da interpolação de  $\phi$  na malha euleriana. É importante ressaltar que a distribuição dos pontos são obtidos através da interpolação de  $\phi$  na malha euleriana sempre para fora da fronteira da partícula, como mostrado na figura 3.5 (veja [8] e para mais informações sobre interpolação veja [14]).



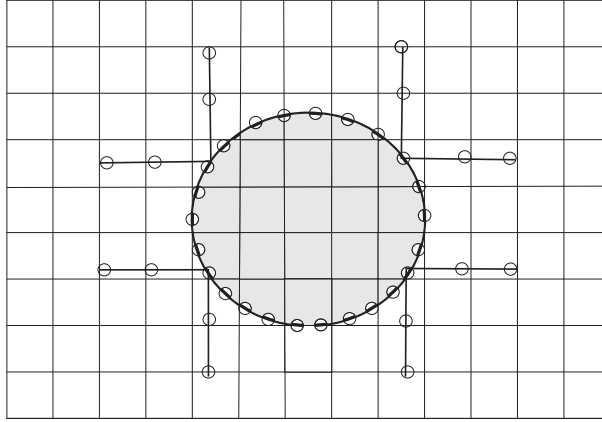


Figura 3.5: Pontos de interpolação externo à partícula

### 3.4 Dinâmica de Movimento da Partícula

Nesta seção estabelecemos a relação do movimento da partícula com as equações governantes do sistema. A equação de Navier-Stokes, responsável pelo comportamento hidrodinâmico do sistema, possui um termo fonte (força elétrica) dependendo não-linearmente sobre o potencial eletrostático.

Para uma explicação mais rica em detalhes, como por exemplo para o raio de Debye, camada limite de Prandtl, efeitos da eletro-osmose, veja [3]. Consideremos uma partícula rígida eletricamente carregada, imersa em um fluido ionizado que passa a se mover pela ação de um campo elétrico externo, já discutido no capítulo anterior. As dimensões do domínio estão na ordem de  $\mu m$  (micrometros) e o tamanho da partícula também está nessa ordem possuindo um raio de  $0.2\mu m$ .

O movimento da partícula pode ser determinado a partir do centro de massa  $\vec{x}_c$  desta e da equação

$$\frac{d\vec{x}_c}{dt} \cong \frac{\vec{x}_c^{m+1} - \vec{x}_c^n}{dt} = \vec{u}_c \quad (3.42)$$

onde a velocidade é determinada a partir de

$$m \frac{d\vec{u}_c}{dt} \cong \frac{\vec{u}_c^{m+1} - \vec{u}_c^n}{dt} = \vec{I}, \quad (3.43)$$

onde

$$\vec{I} = \int_{\partial\Omega_1} \sigma^H \cdot \vec{n} ds + \int_{\partial\Omega_1} \sigma^E \cdot \vec{n} ds \quad (3.44)$$

e os tensores hidrodinâmico e elétrico são definidos como

$$\sigma^H = \eta \left[ \begin{pmatrix} u_x & v_x \\ u_y & v_y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u_x & u_y \\ v_x & v_y \end{pmatrix} \right] - \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

$$\sigma^E = \frac{Tk_2}{4\pi e} \begin{pmatrix} \frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi}{dx} - \frac{1}{2}(\nabla\psi)^2 & \frac{d\psi}{dy} \frac{d\psi}{dx} \\ \frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi}{dy} & \frac{d\psi}{dy} \frac{d\psi}{dy} - \frac{1}{2}(\nabla\psi)^2 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

Para discretizar a equação (3.44) devemos encontrar o vetor normal a superfície da partícula. O contorno da partícula é dado pelas equações paramétricas (3.37) e (3.38). Para encontrar o vetor tangente a curva, calculamos

$$\left( \frac{dx}{d\alpha}, \frac{dy}{d\alpha} \right) \quad (3.47)$$

e aplicando a matriz de rotação

$$R = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

com  $\theta = 90^\circ$  obtemos o vetor normal a curva no ponto  $(x, y)$  como

$$\begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{dy}{d\alpha} \\ -\frac{dx}{d\alpha} \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

Discretizando o vetor normal a curva obtemos

$$n_1 = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2} \quad (3.50)$$

$$n_2 = \frac{-(x_{i+1} - x_{i-1})}{2} \quad (3.51)$$

O vetor tangente pode ser encontrado usando o ponto médio do segmento anterior e posterior ao ponto  $(x_i, y_i)$  conforme a figura 3.6.

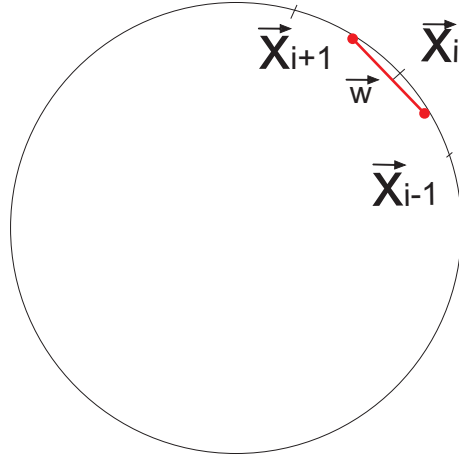


Figura 3.6: Parte do contorno da partícula

$$\vec{w}_i = \left( \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \frac{y_i + y_{i+1}}{2} \right) - \left( \frac{x_i + x_{i-1}}{2}, \frac{y_i + y_{i-1}}{2} \right) \quad (3.52)$$

$$\vec{w}_i = \left( \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2} \right) \quad (3.53)$$

Podemos então calcular o comprimento de um elemento de arco da curva  $ds$  que é dado por

$$ds \approx \|\vec{w}_i\| = \sqrt{\left( \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2} \right)^2 + \left( \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2} \right)^2} \quad (3.54)$$

Desta forma podemos aproximar a integral de superfície pelo somatório

$$\vec{I} = \int_{\partial\Omega_1} \sigma^H \cdot \vec{n} ds + \int_{\partial\Omega_1} \sigma^E \cdot \vec{n} ds \approx \sum \sigma^H \cdot \vec{n} ds + \sum \sigma^E \cdot \vec{n} ds \quad (3.55)$$

e utilizar os tensores hidrodinâmico e elétrico para calcular o deslocamento da partícula num intervalo de tempo  $dt$  dado pela equação

$$m \frac{u_c^{n+1} - u_c^n}{\Delta t} = I_1, \quad (3.56)$$

$$m \frac{v_c^{n+1} - v_c^n}{\Delta t} = I_2. \quad (3.57)$$

### 3.5 Estrutura do Algoritmo

O programa foi desenvolvido na linguagem Fortran 90 e foram utilizadas duas plataformas diferentes para a simulação:

- um computador com processador Intel Core 2Duo, memória de 2GB e Windows XP;
- um computador com processador Intel Core 2Duo, memória de 2GB e rodando Linux.

Uma descrição geral do algoritmo utilizado para a simulação do problema pode ser dada pelo algoritmo abaixo.

**Algoritmo:**

1.  $t = 0$ ,
2. Defina  $\Delta t$
3. Defina condições iniciais para  $u, v, p$  e  $\phi$
4. Enquanto  $t < t_{final}$
5.   Calcula Poisson-Boltzmann usando (3.32)
6.   Calcula Força Elétrica usando (3.23) e (3.24)
7.   Calcule  $\hat{u}$  e  $\hat{v}$  usando (3.17) e (3.18)
8.   Aplica Condições de Contorno de  $\hat{u}$  e  $\hat{v}$
9.   Calcula Pressão usando (3.22)
10.   Calcula  $u$  e  $v$  usando (3.19) e (3.20)
11.   Aplica Condições de Contorno de  $u$  e  $v$
12.   Calcula a coordenada dos pontos lagrangeanos
13.   Utiliza (3.40) para atribuir valores de  $u, v, p$  e  $\phi$  aos pontos lagrangeanos
14.   Calcula a derivada de  $u, v$  e  $\phi$  nos pontos lagrangeanos usando (3.41) e (3.42)

15. Calcula a integral de superfície da partícula usando (3.44)
16. Calcula movimento partícula usando (3.56) e (3.57)
17.  $t = t + \Delta t$

## 4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo apresentaremos os resultados obtidos na simulação da partícula imersa em um fluido ionizado, que descreve o fenômeno eletroforese. Para validar a discretização dos pontos Lagrangianos são feitos alguns testes de ordem de convergência para um objeto circular. Também apresentaremos vários testes parciais com o objetivo de validar os diferentes aspectos físicos e numéricos do modelo, visando o problema completo do fenômeno da eletroforese. Simulamos primeiramente apenas a equação de Navier-Stokes em um domínio simples, seguido pela simulação do fluxo ao redor de um cilindro fixo. Depois colocamos a partícula sobre um movimento circular forçado e por fim deixamos o cilindro livre para se movimentar dentro do fluido. Testamos separadamente a equação de Poisson-Boltzmann e terminamos por simular o problema completo. Como já citado anteriormente, a linguagem Fortran 90 foi usada na implementação computacional e a visualização de resultados foi através do software Visual [16].

### 4.1 Teste da Interpolação Lagrangeana

Começaremos testando a ordem das discretizações calculadas nos pontos lagrangeanos através das interpolações. Os testes são feitos da seguinte forma:

- atribuímos uma função  $\phi$  conhecida nos pontos da malha cartesiana;
- utilizamos as interpolações para transferir os dados para os pontos lagrangeanos;
- utilizamos a equação (3.41) e (3.42) para calcular as derivadas de  $\phi$  nos pontos lagrangeanos;
- calculamos o erro obtido em cada discretização através da equação.

$$Erro = |\phi_{exata} - \phi_{aproximada}| \quad (4.1)$$

O teste é feito para os monômios  $\phi = 10$ ,  $\phi = x$ ,  $\phi = x^2$  e  $\phi = x^3$  e assim sucessivamente usando 37 pontos lagrangeanos sobre um círculo de raio  $r = 0.1$  e centro em  $(0.5, 0.5)$ .

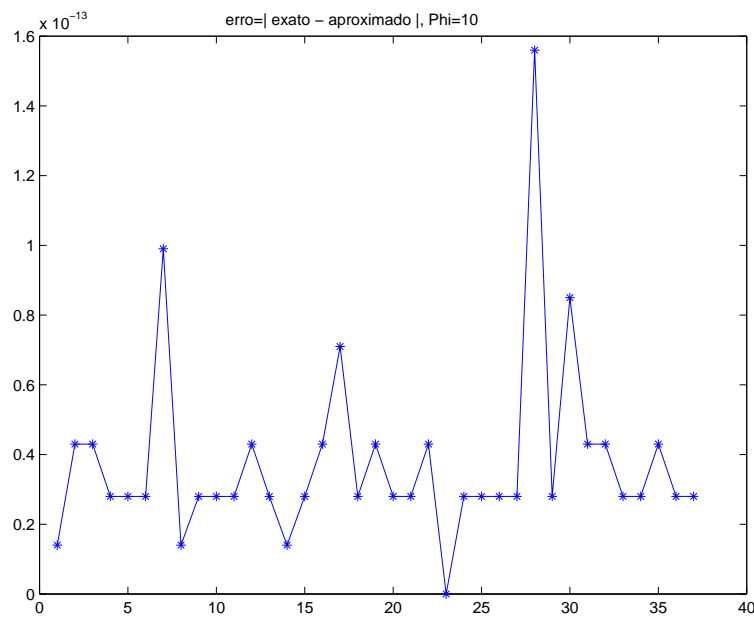


Figura 4.1:  $\phi = 10$  e  $erro = |exato - aproximado|$ , onde as abscissas representam o índice  $i$  do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro

Nas figuras 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 temos o cálculo do erro para as funções  $\phi = 10$ ,  $\phi = x$ ,  $\phi = x^2$  e  $\phi = x^3$ . Podemos verificar que até  $\phi = x^2$  o erro é da ordem do epsilon de máquina.

Sabemos por [10] que um método é chamado de ordem  $p$  se recuperar exatamente toda solução polinomial de ordem  $p$ . Como podemos ver nos gráficos tivemos uma ótima aproximação até o polinômio de ordem 2, o que nos remete a concluir que a discretização através dos pontos lagrangeanos é um método de ordem 2.

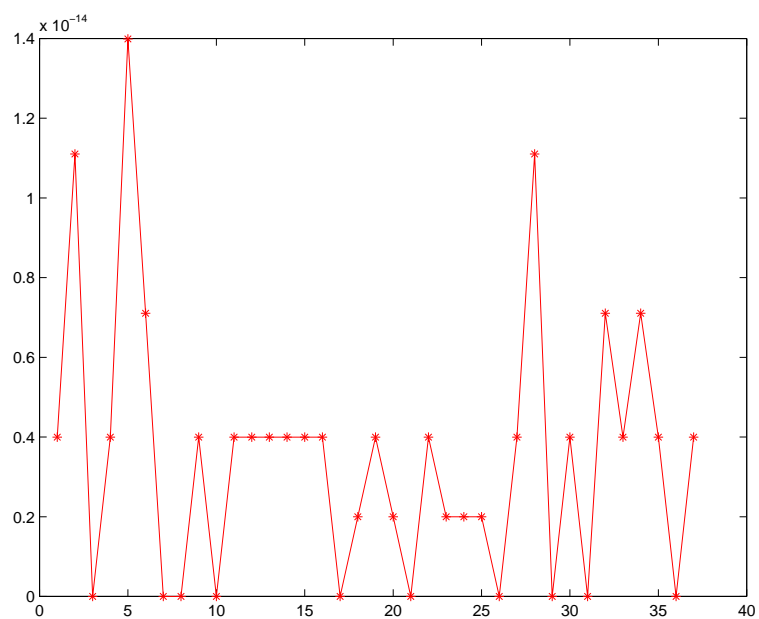


Figura 4.2:  $\phi = x$  e  $erro = |exato - aproximado|$  onde as abscissas representam o índice  $i$  do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro

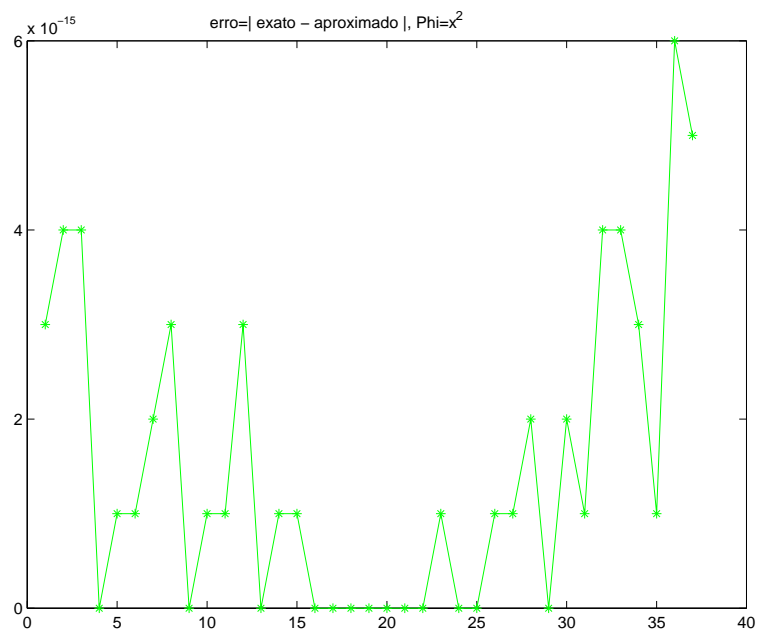


Figura 4.3:  $\phi = x^2$  e  $erro = |exato - aproximado|$ ,  $\text{Phi}=x^2$  onde as abscissas representam o índice  $i$  do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro



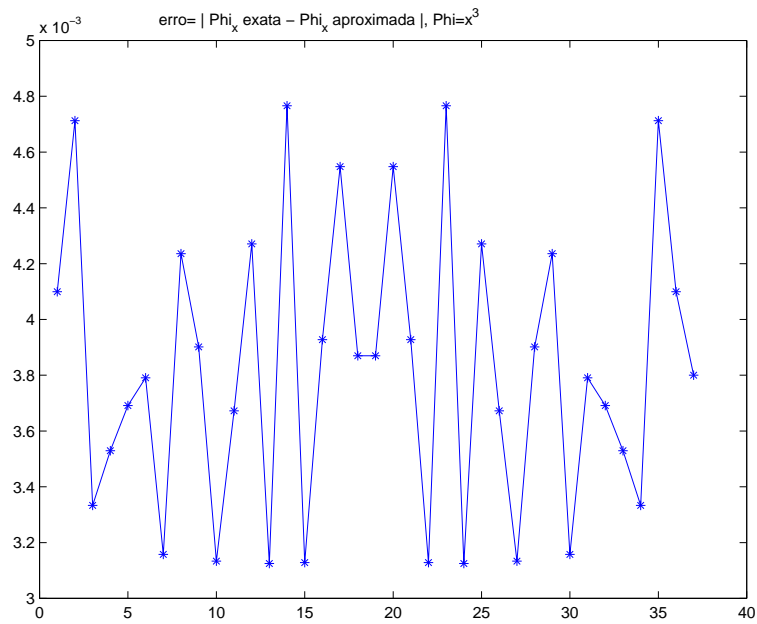


Figura 4.4:  $\phi = x^3$  e  $erro = |exato - aproximado|$  onde as abscissas representam o índice  $i$  do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro

A figura 4.5 mostra o erro para  $\phi = \sin(x)$ , com 201 pontos lagrangeanos.

Como utilizamos uma malha cartesiana com  $21 \times 21$  pontos, o que implica que  $h = \mathcal{O}(\frac{1}{21})$ , e a função não é polinomial, obtemos um erro da ordem de  $h^3$  como esperado

A figura (4.6) mostra o decaimento do erro para diferentes quantidades de pontos da malha. Para está análise foram usadas malhas com  $21 \times 21$ ,  $41 \times 41$ ,  $81 \times 81$ ,  $161 \times 161$  pontos a equação (4.1).

## 4.2 Ordem de Convergência

Raramente temos a solução exata  $u(t)$  para calcular o erro obtido na solução numérica [10]. Se a solução é suave o suficiente e o espaçamento da malha denotado por  $\Delta x$  é pequeno, podemos usar o seguinte procedimento para estimar

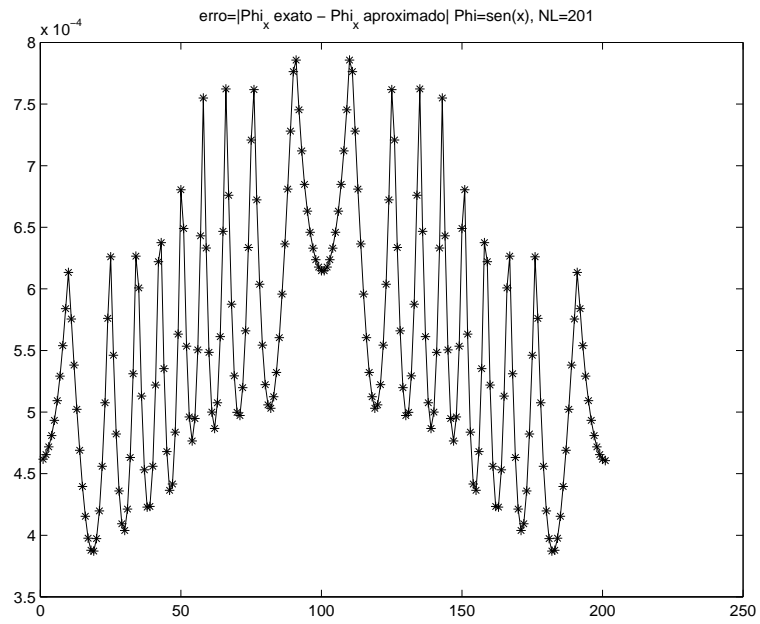


Figura 4.5:  $\phi = \text{sen}(x)$  onde as abscissas representam o índice  $i$  do ponto lagrangeano e as ordenadas representam o erro

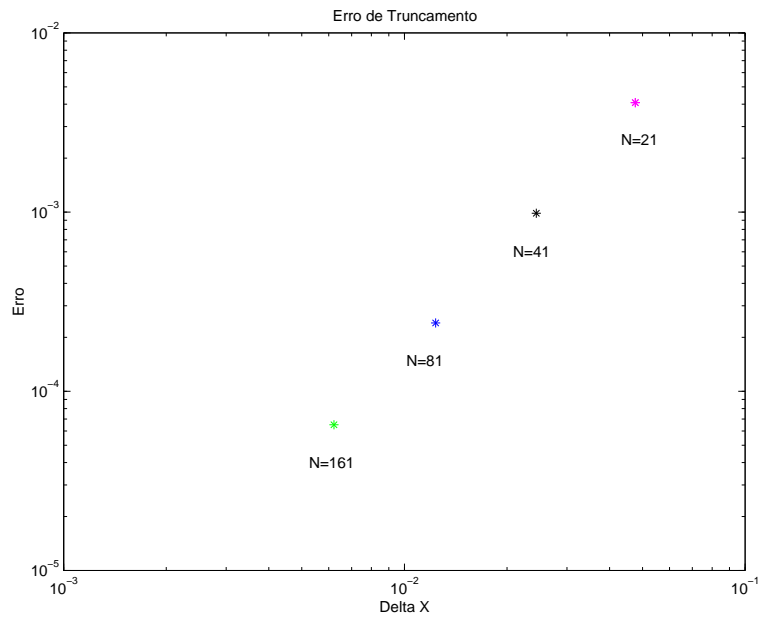


Figura 4.6:  $\phi = \text{sen}(x)$ , malhas  $21 \times 21$ ,  $41 \times 41$ ,  $81 \times 81$  e  $161 \times 161$  pontos

a ordem do método ou também o erro na solução. A medida que  $\Delta x$  decresce se aproximando de 0 (zero), a ordem de convergência do método tende a se aproximar de  $p$ . Existe uma faixa  $\Delta x_{min} < \Delta x < \Delta x_{max}$  onde o método apresenta a ordem esperada.

Estando dentro dessa faixa podemos utilizar uma solução bem refinada, e supor que ela seja uma boa aproximação da solução exata. Desta forma podemos calcular o erro como  $e^h = \| u^h - u^* \|$  e a ordem do método é estimada como (veja [10])

$$\begin{aligned}
 p &\approx \frac{\log(e^h) - \log(e^{h/2})}{\log(h) - \log(h/2)} & (4.2) \\
 &\approx \frac{\log\left(\frac{e^h}{e^{h/2}}\right)}{\log(h/(h/2))} \\
 &\approx \frac{\log\left(\frac{e^h}{e^{h/2}}\right)}{\log(2)} \\
 &\approx \frac{\log\left(\frac{\|u^h - u^*\|}{\|u^{h/2} - u^*\|}\right)}{\log(2)}.
 \end{aligned}$$

Supondo que a malha mais refinada dentre as simuladas é uma boa aproximação da solução exata  $u^*$ , escolhemos  $u^*$  como a solução calculada na malha com  $161 \times 161$  pontos e estimamos a ordem do método através dos dados da figura 4.6 como sendo  $p \approx 2.0321$ .

### 4.3 Simulação das Equações de Navier-Stokes

Para começar vamos utilizar apenas as equações de Navier-Stokes aplicadas em domínios simples. Considere um fluido em um duto livre com  $Re = 1000$

de dimensões  $4 \times 2$  com condições de contorno

$$u = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.3)$$

$$v = 0, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.6)$$

$$u = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4 \quad (4.7)$$

$$v = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4 \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0 \text{ e } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4. \quad (4.10)$$

Como a equação de Poisson para a pressão com condições de Neumann em todos os lados não apresenta solução única, utilizamos o artifício numérico de fixar a pressão em um ponto da malha arbitrário. Desta forma temos a unicidade da solução.

Simulamos o mesmo problema utilizando três malhas diferentes onde cada malha é sucessivamente mais refinada. Assim a primeira malha apresenta  $101 \times 101$  pontos, a segunda  $201 \times 201$  pontos e a terceira  $401 \times 401$  pontos. O objetivo é poder comparar se o comportamento do fluido permanece o mesmo para os três tipos diferentes de malha.

Como podemos ver nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9 o fluido teve um comportamento esperado, pois se manteve laminar ao longo de toda a sua trajetória, vindo dessa forma a validar esta parte do código.

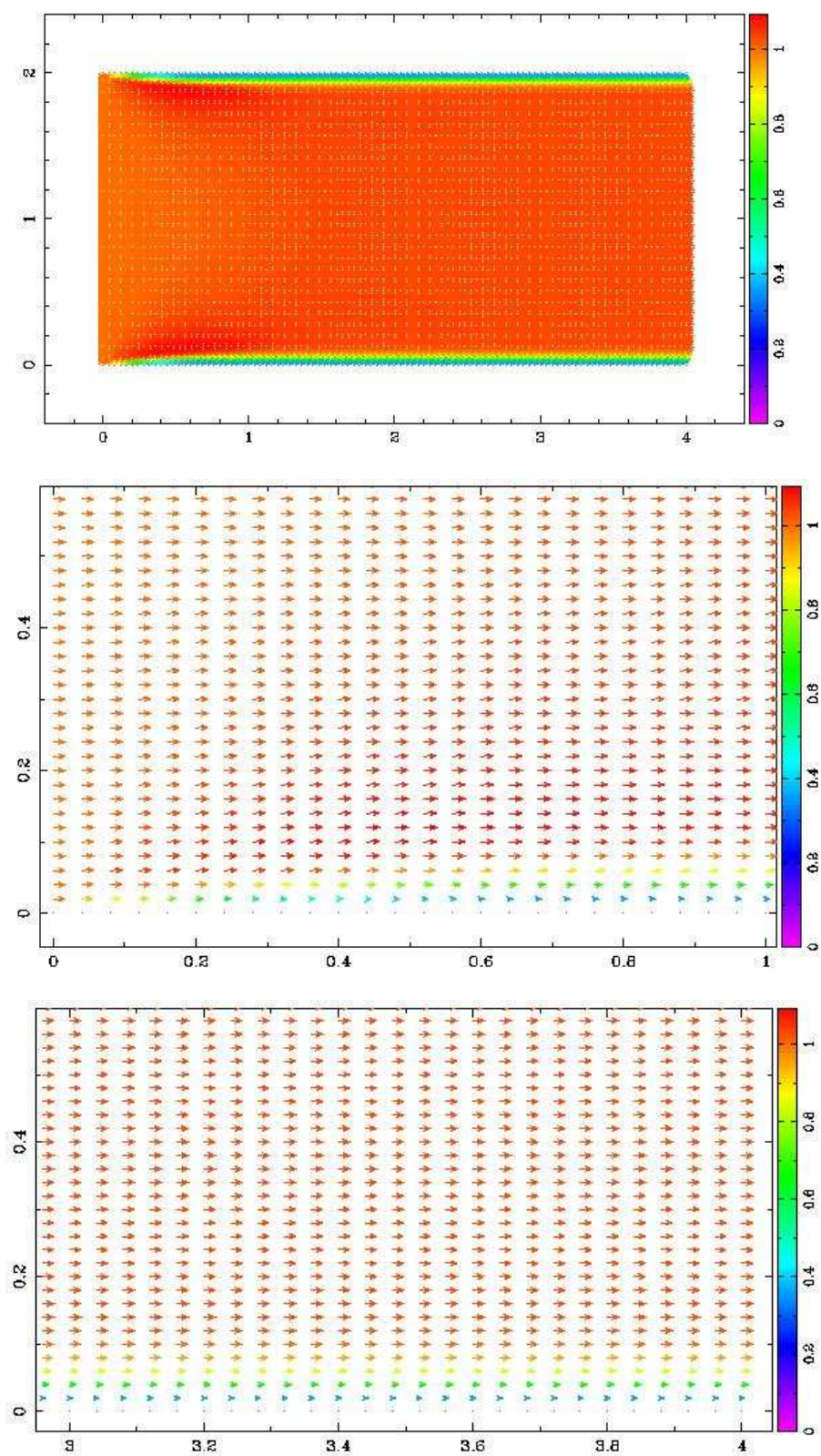


Figura 4.7: Malha com  $101 \times 101$  pontos com  $Re = 1000$ : (a) domínio completo, (b) ampliação na entrada e (c) ampliação na saída.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)



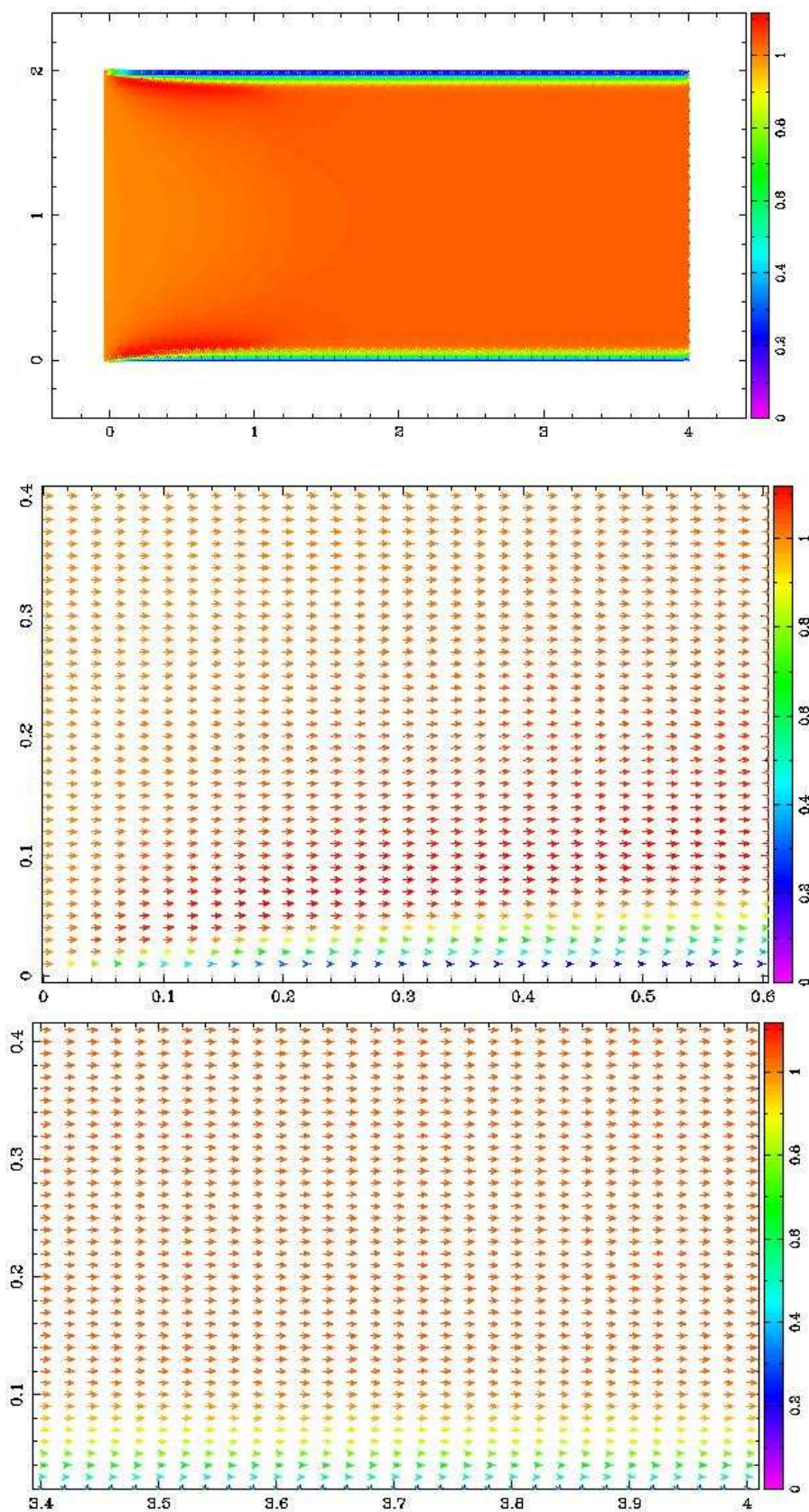


Figura 4.8: Malha com  $201 \times 201$  pontos com  $Re = 1000$ : (a) domínio completo, (b) ampliação na entrada e (c) ampliação na saída.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)



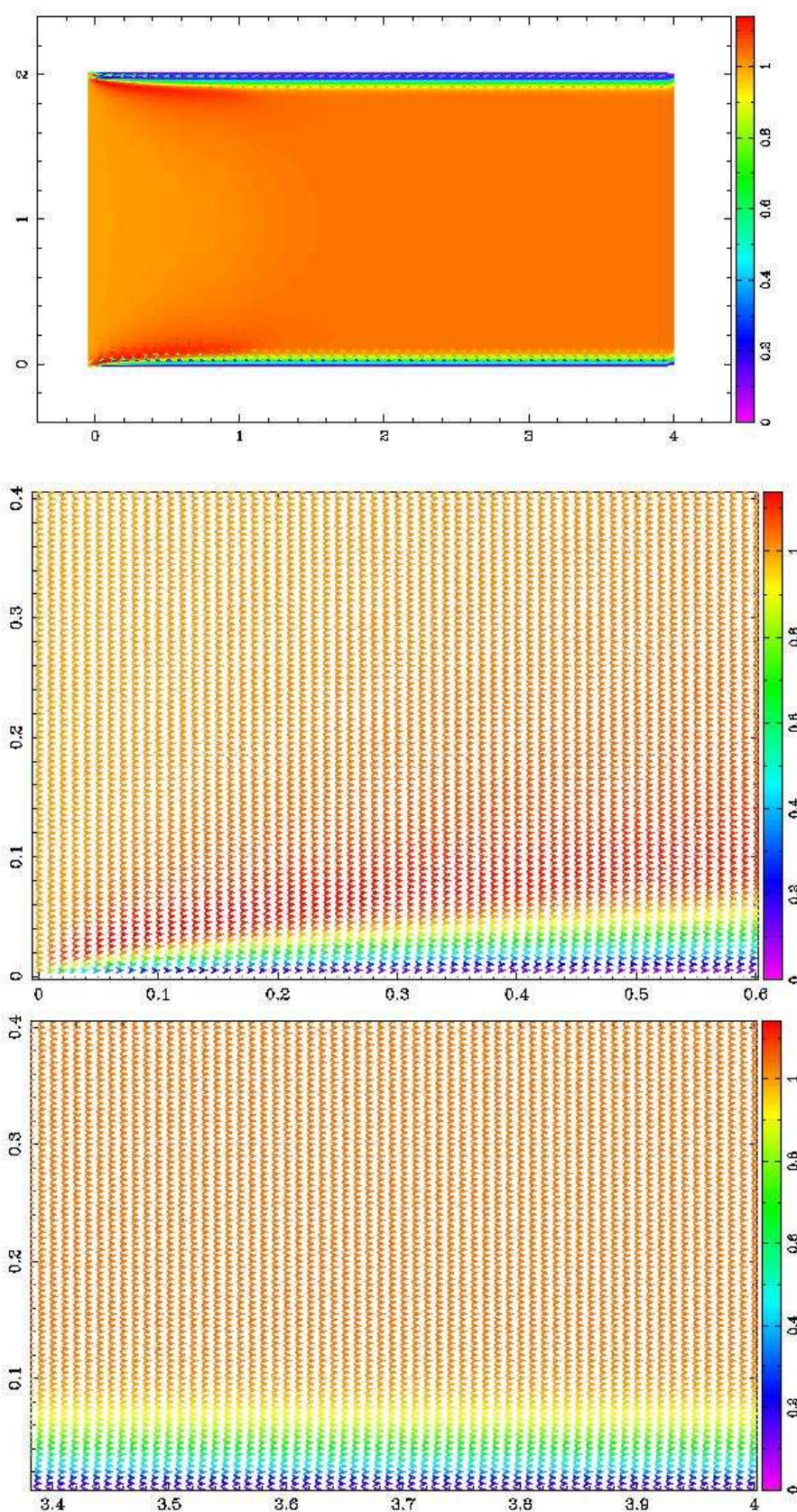


Figura 4.9: Malha com  $401 \times 401$  pontos com  $Re = 1000$ : (a) domínio completo, (b) ampliação na entrada e (c) ampliação na saída. (onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

#### 4.4 Cilindro Fixo em um Duto

Neste teste acrescentamos ao duto simples um obstáculo de forma circular com centro em  $(0.7, 1)$  e raio  $r = 0.1$  com um domínio de tamanho  $2\mu m \times 3\mu m$ . Nas três simulações seguintes foram usados  $201 \times 201$  pontos na malha.

Na figura 4.10 temos o resultado para  $Re = 100$  onde usamos condições de contorno

$$u = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.11)$$

$$v = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.13)$$

$$u = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.14)$$

$$v = 0, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.17)$$

$$u = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.18)$$

$$v = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0 \text{ e } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4. \quad (4.21)$$

Para o tempo  $t = 80$  temos o fluxo permanente totalmente desenvolvido onde podemos notar logo após o cilindro dois pequeno vórtices simétricos um no sentido horário e o outro no sentido anti-horário.



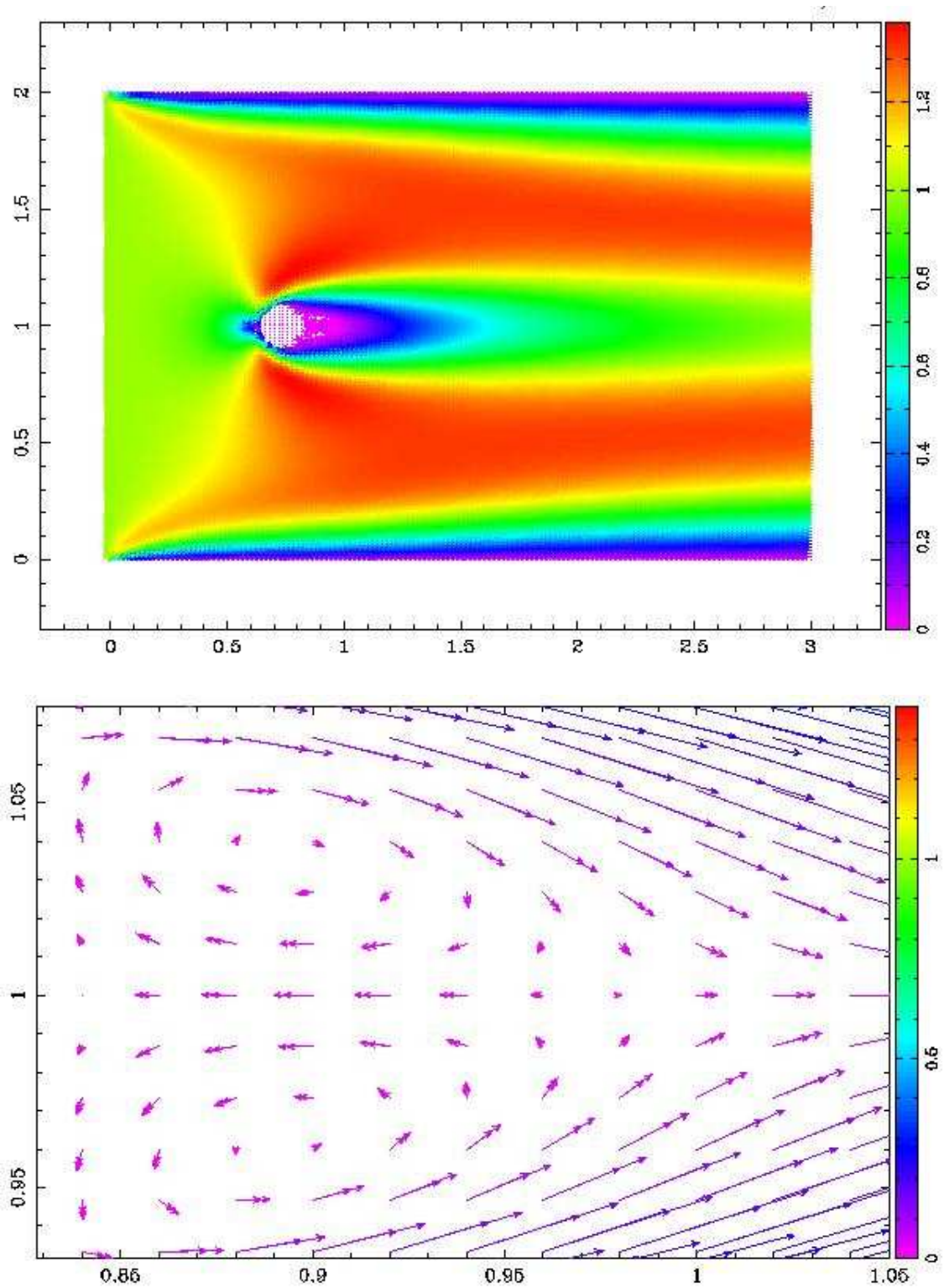


Figura 4.10: Malha com  $201 \times 201$  pontos com  $Re = 100$ : (a) domínio completo e (b) ampliação do vórtice. (onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

Na figura 4.11 temos o resultado para  $Re = 500$  onde usamos condições de contorno

$$u = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.22)$$

$$v = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.24)$$

$$u = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.25)$$

$$v = 0, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.28)$$

$$u = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.29)$$

$$v = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0 \text{ e } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4. \quad (4.32)$$

Para  $t = 40$  temos o fluxo turbulento totalmente desenvolvido onde verificamos o desprendimento de vórtices influenciado pelo aumento do número de Reynolds, notamos também que este aumento influencia diretamente o surgimento de vórtices assimétricos.

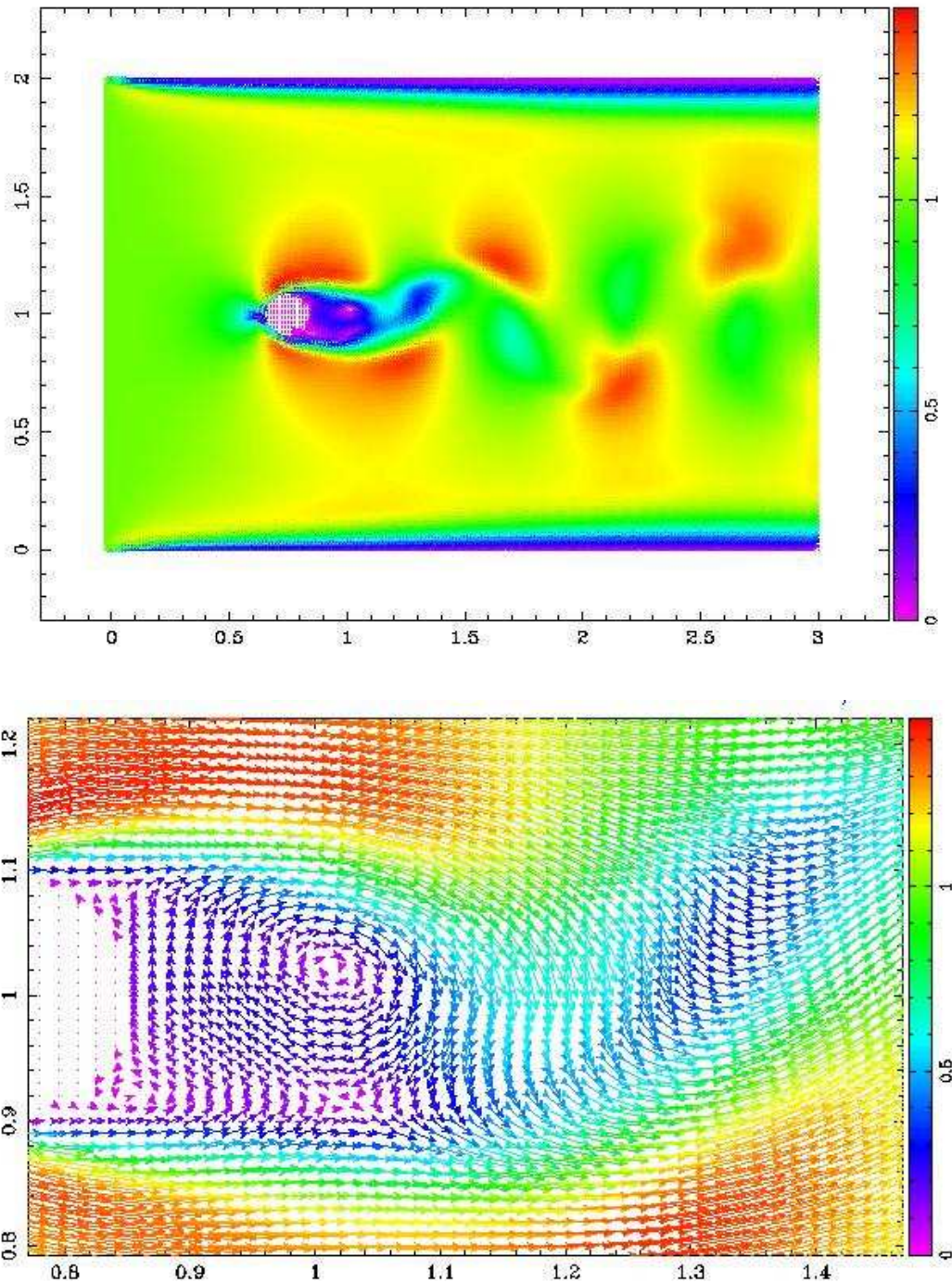


Figura 4.11: (a)Malha com  $201 \times 201$  pontos com  $Re = 500$ : (b)ampliação vórtice assimétrico.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

Na figura 4.12 o obstáculo circular está em  $(1.34, 1)$  com  $r = 0,2$  um domínio de tamanho  $2\mu m \times 4\mu m$  temos o resultado para  $Re = 1000$  onde usamos condições de contorno

$$u = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.33)$$

$$v = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.34)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.35)$$

$$u = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.36)$$

$$v = 0, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.37)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.39)$$

$$u = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.40)$$

$$v = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.41)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0 \text{ e } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4. \quad (4.43)$$

Para o  $t = 30$  e  $t = 40$  notamos que a formação de vórtices se altera com o tempo, tornando-se assim um escoamento transiente e assimétrico. A figura nos mostra a influência que o fluido sofre ao aumentar o número de Reynolds alterando também o desprendimento de vórtices cada vez mais próximo ao cilindro.

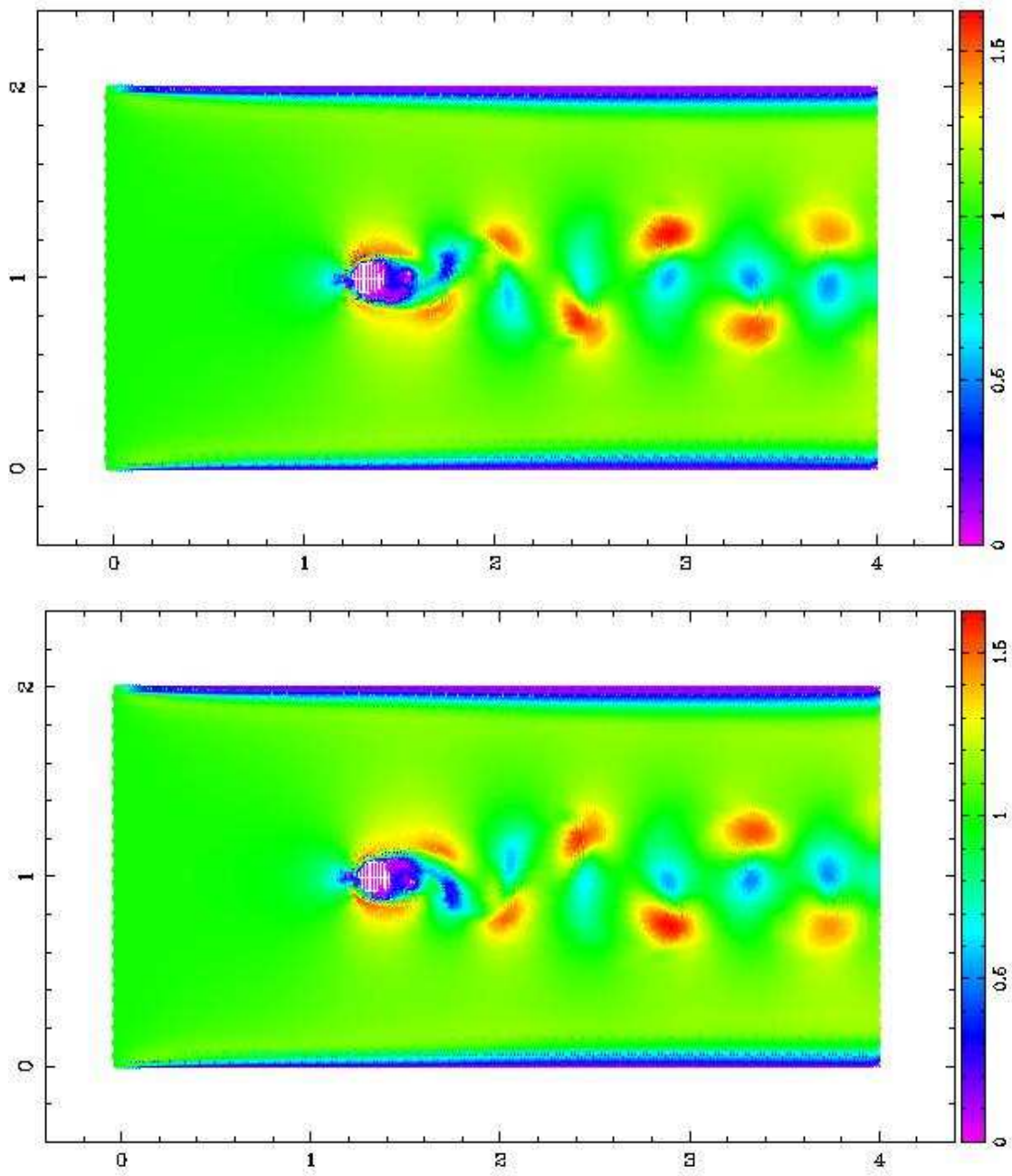


Figura 4.12: Malha  $201 \times 201$  pontos  $Re = 1000$ : (a)  $t = 30$  e (b)  $t = 40$ . (onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

Podemos notar que ao aumentarmos o número de Reynolds de  $Re = 100$  para  $Re = 1000$  temos o surgimento da esteira de vórtices de von Karmann como esperado ([11, 10]).

## 4.5 Partícula em Movimento Circular

Nesta seção a partícula é prescrita a se movimentar através de equações paramétricas de um círculo. Sejam  $(x_c, y_c)$  as coordenadas do centro geométrico do objeto, seu movimento é dado por

$$x_c = x_0 + r \cos(\omega t), \quad (4.44)$$

$$y_c = y_0 + r \sin(\omega t), \quad (4.45)$$

onde  $x_0$  e  $y_0$  são as coordenadas do centro da trajetória da partícula e  $r$  é o raio da circunferência. Calculando a derivada das equações (4.44) e (4.45) em relação a  $t$ , obtemos as componentes da velocidade  $(u_c, v_c)$  do centro do objeto dadas por

$$u_c = -\omega r \sin(\omega t), \quad (4.46)$$

$$v_c = \omega r \cos(\omega t). \quad (4.47)$$

As figuras 4.13 e 4.14 apresentam a simulação para uma malha com  $61 \times 61$  pontos e  $Re = 100$ . Note que no momento inicial o fluido está em repouso e a medida que o objeto começa a se mover no sentido horário, o campo de velocidades começa a ser alterado conforme a física do problema. Na última figura o objeto percorreu aproximadamente duas voltas dentro do domínio e o fluxo está bem definido de forma a surgir um vórtice no centro do domínio e dois pequenos vórtices nos cantos do domínio.



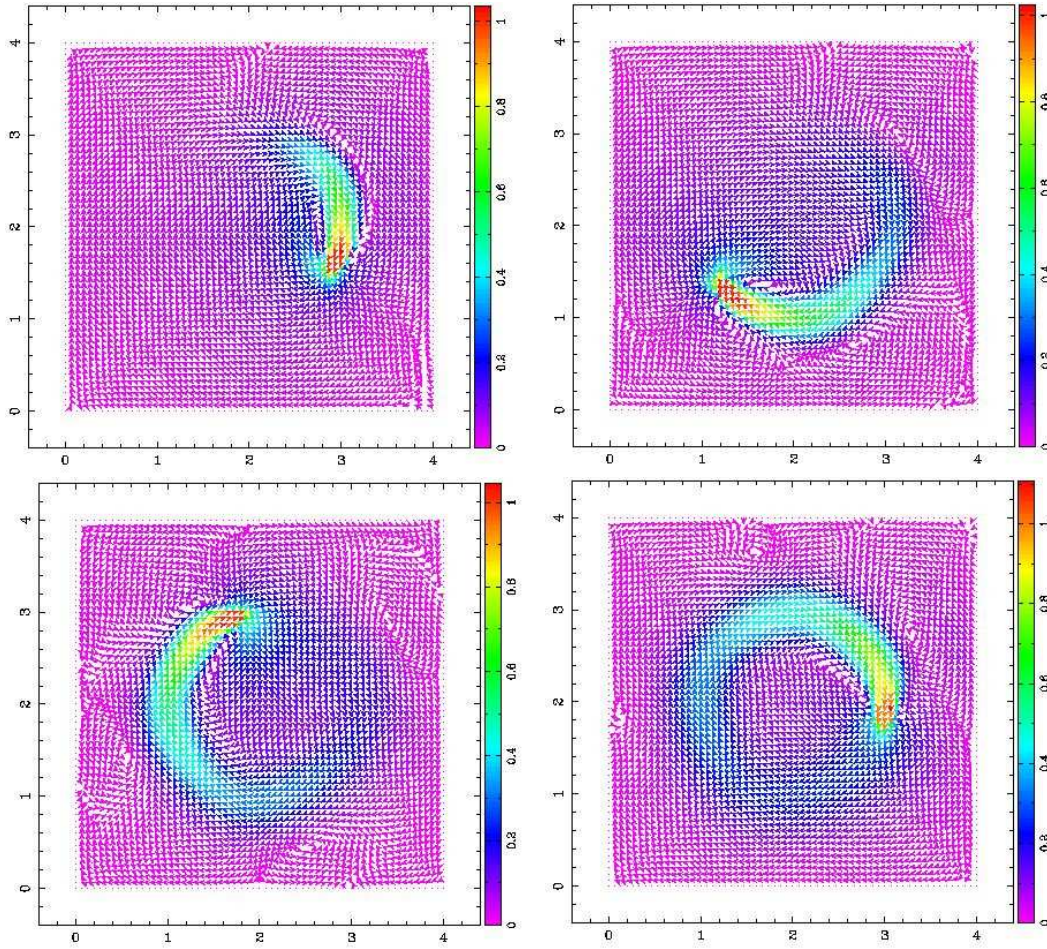


Figura 4.13: Malha com  $61 \times 61$  pontos,  $Re = 100$  : (a) 20.000 iterações,  $t = 2$ , (b) 40.000 iterações,  $t = 4$ , (c) 60.000 iterações,  $t = 6$  e (d) 80.000 iterações,  $t = 8$ . (onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

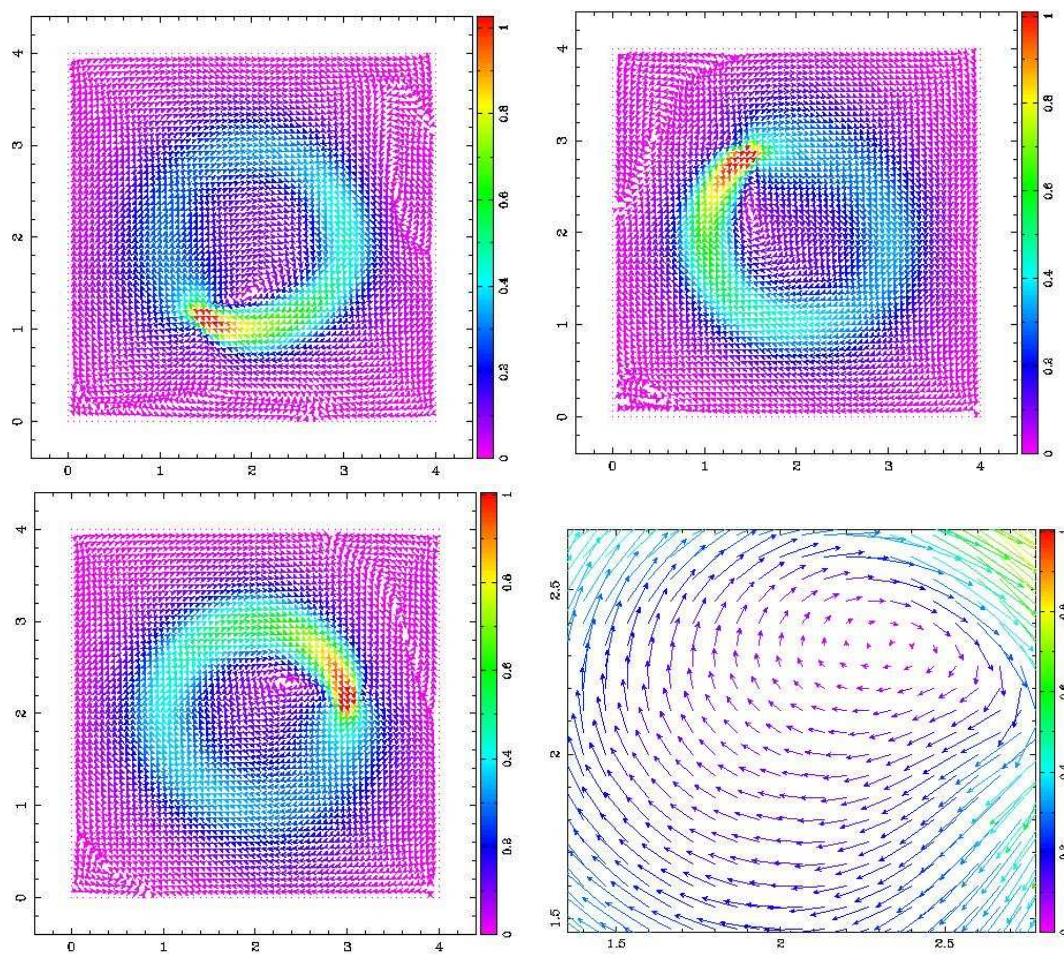


Figura 4.14: Malha com  $61 \times 61$  pontos,  $Re = 100$  : (a) 100.000 iterações,  $t=10$ , (b) 120.000 iterações,  $t=12$  (c) 140.000 iterações,  $t=14$  e (d) ampliação do vórtice central. (onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)



### 4.5.1 Cilindro Livre

A próxima simulação será com um cilindro livre para se movimentar dentro do duto. A figura 4.15 possui uma malha com  $61 \times 61$  pontos e  $Re = 100$ .

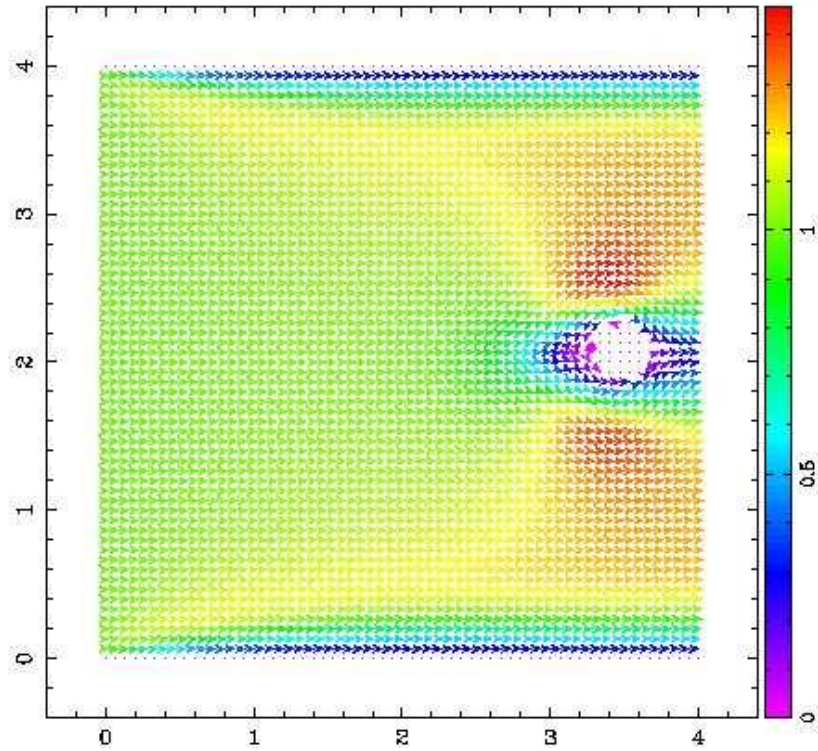


Figura 4.15: Cilindro em movimento.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

Nessa simulação são aplicadas as condições de contorno no duto como anteriormente e, além disso, é calculada a integral

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{I} = \int_{\partial\Omega_1} \sigma^H \cdot \vec{n} ds \quad (4.48)$$

que é responsável pela força de superfície agindo no contorno da partícula. A partir de  $\vec{I}$  atualizamos a posição e a velocidade do centro da molécula através das equações (3.56) e (3.57). Note que a medida que avançamos no tempo, a partícula movimentar-se da esquerda para a direita como esperado.

## 4.6 Simulação da Equação de Poisson-Boltzmann

Nesta seção, faremos testes usando apenas a equação de Poisson-Boltzmann de tal forma a validar essa parte do problema. Nessas simulações estamos usando uma malha com  $41 \times 41$  pontos com condições de contorno

$$\phi = 0, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 1, \quad (4.49)$$

$$\phi = 1, \text{ em } x = 1 \text{ para } 0 < y < 1, \quad (4.50)$$

$$\phi = x, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 1 \text{ para } 0 < x < 1. \quad (4.51)$$

Para os testes abaixo, iteramos a equação (3.32) utilizando o método de Euler até obtermos a solução permanente ( $\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$ ) com um erro menor que  $tol = 10^{-7}$ . Note que na figura 4.16, para  $\rho(x, t) > 0$ , a solução apresenta uma concavidade para baixo pois o termo  $\rho$  tem o mesmo papel que um termo fonte para equação do calor [9, 5] e na figura 4.17, para  $\rho < 0$ , a situação se inverte como esperado.

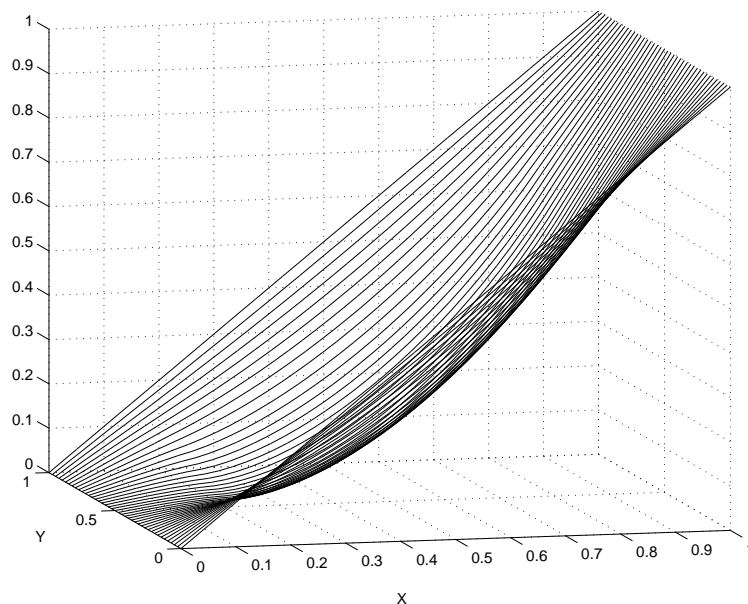


Figura 4.16: Malha com  $41 \times 41$  pontos e  $\rho = 5$ .

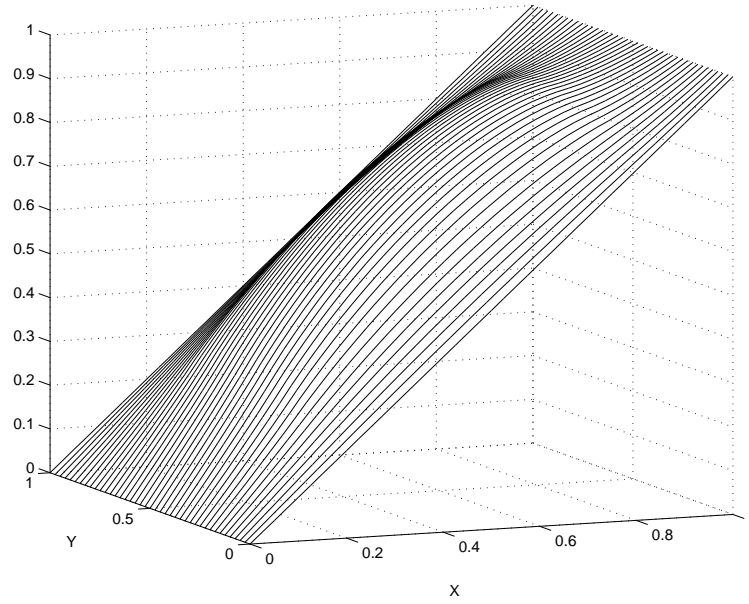


Figura 4.17: Malha com  $41 \times 41$  pontos e  $\rho = -5$ .

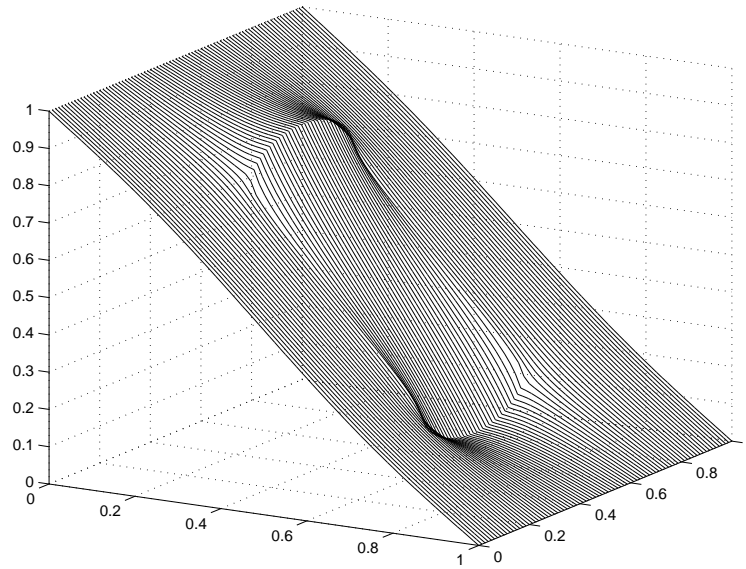


Figura 4.18: Malha com  $41 \times 41$  pontos e  $k_1 = 2$  e  $k_2 = 78$ .

Na figura 4.18 mantemos  $\rho = 1$  e usamos as constantes dielétricas  $k_1 = 2$  para  $0,3 \leq x \leq 0,7$  e  $0,3 \leq y \leq 0,7$  na molécula e  $k_2 = 78$  caso contrário no fluido. A região representada pela constante dielétrica  $k_1 = 2$  e  $k_2 = 78$  devido a função se tornar decrescente ao sair de  $\Omega_2$  e depois crescente ao sair de  $\Omega_1$ .

Dessa forma validamos o comportamento da equação de Poisson-Boltzman, testamos a variável  $\rho$  responsável pela distribuição de cargas fixas e também as constantes dielétricas  $k_1$  e  $k_2$ , localizadas nas regiões  $\Omega_1$  e  $\Omega_2$ .

## 4.7 Problema Completo em um Duto Simples

Nesta seção simulamos um fluido em um duto com  $4\mu m \times 4\mu m$ ,  $Re = 0.1$  e  $\rho = 1$  utilizando o modelo completo com as equações de Navier-Stokes e a equação de Poisson-Boltzmann. Na figura 4.19 (a) temos uma malha de  $31 \times 31$  pontos e 31 pontos lagrangeanos e em (b) temos uma malha de  $61 \times 61$  pontos e 31 pontos lagrangeanos e na figura 4.20 (a) temos uma malha  $31 \times 31$  pontos e 61 pontos lagrangeanos e em (b) temos uma malha  $31 \times 31$  pontos e 121 pontos lagrangeanos onde o objetivo é mostrar que o comportamento da molécula é o mesmo na medida que a malha é refinada e a quantidade de pontos lagrangeanos aumentam. Em seguida são apresentadas as figuras 4.21 e 4.22 onde são mostrados o comportamento da pressão e o comportamento do potencial elétrico respectivamente. Estas simulações tiveram como condições de contorno

$$u = u_c \text{ em } \partial\Omega_1, \quad (4.52)$$

$$v = v_c \text{ em } \partial\Omega_1, \quad (4.53)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \partial\Omega_1, \quad (4.54)$$

$$u = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.55)$$

$$v = 0, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.56)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.57)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.58)$$

$$u = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.59)$$

$$v = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.60)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \partial\Omega_2, \quad (4.61)$$

$$\phi = -1, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.62)$$

$$\phi = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.63)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 2 \text{ para } 0 < x < 4. \quad (4.64)$$

## 4.8 Movimento de uma Partícula em um Fluido Ionizado

Nessa seção apresentamos a simulação do problema completo, utilizando as equações de Navier-Stokes e Poisson-Boltzmann onde mostramos o resultado da simulação do fenômeno eletroforese localmente. Também testamos o comportamento da partícula carregada em um fluido ionizado e estudamos a influência das condições de contorno para a equação de Poisson-Boltzmann no movimento da partícula. Para notarmos esta influência, iniciamos com o fluido em repouso ( $u = 0, v = 0$ ) e fixamos a velocidade em repouso no contorno. Para a pressão utilizamos condições de Neumann no  $\partial\Omega_2$ .

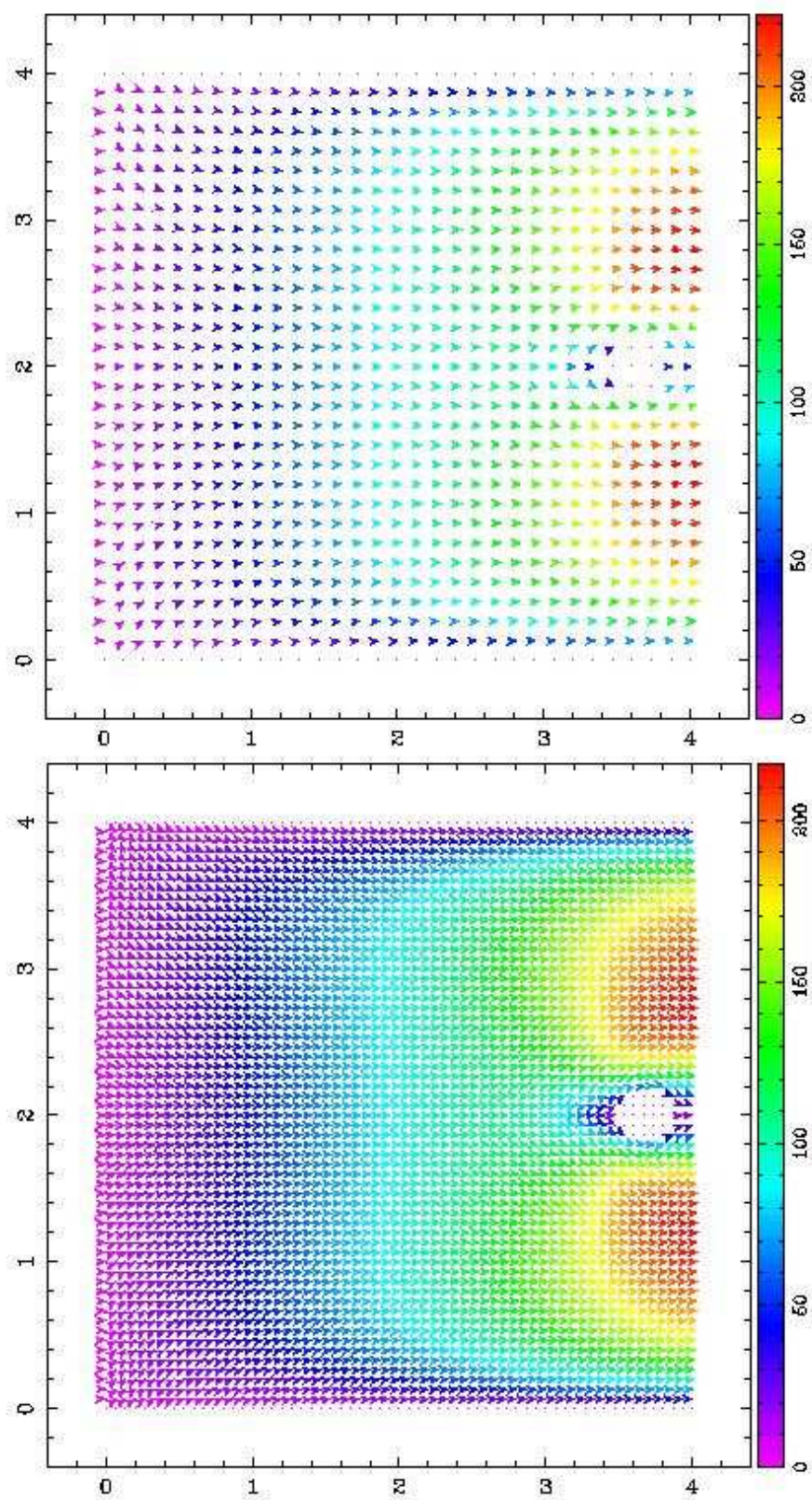


Figura 4.19:  $Re = 0.1$ : (a) malha  $31 \times 31$  pontos, (b) malha  $61 \times 61$  pontos.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)



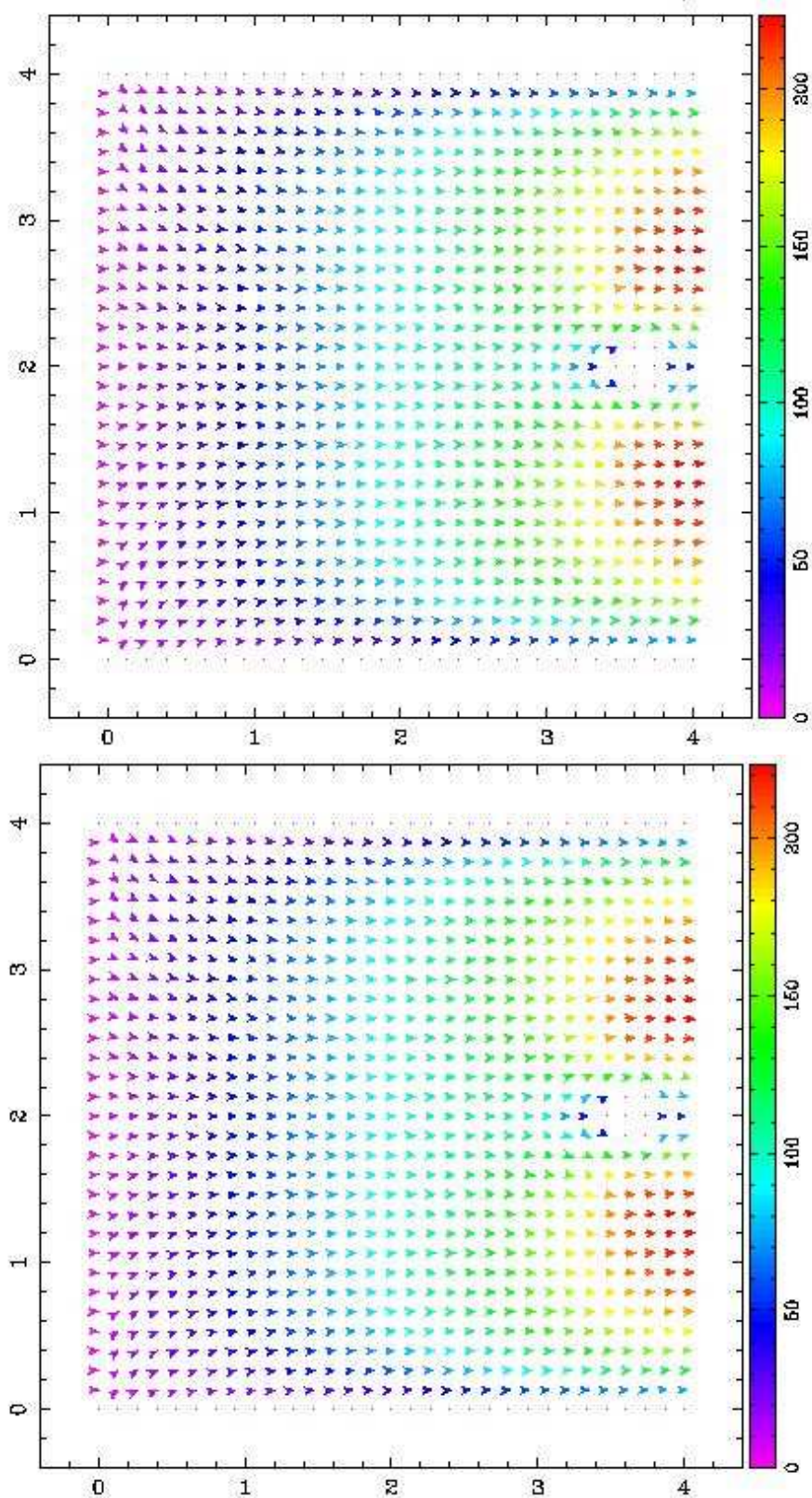


Figura 4.20:  $Re = 0.1$  e malha  $31 \times 31$  pontos: (a) 61 pontos lagrangeanos, (b) 121 pontos lagrangeanos.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

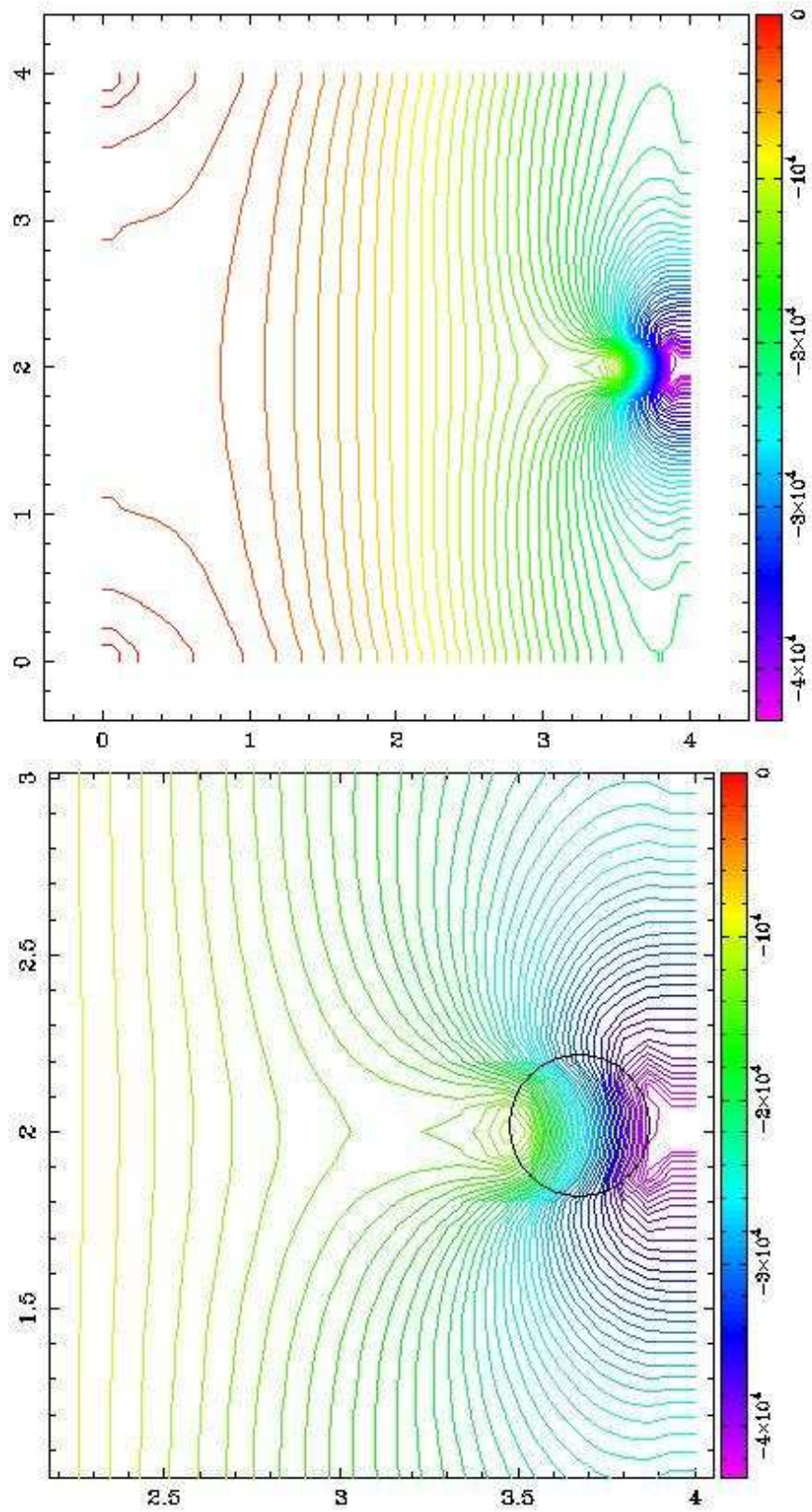


Figura 4.21:  $Re = 0.1$  malha  $61 \times 61$  pontos: (a) pressão (b) ampliação região da partícula



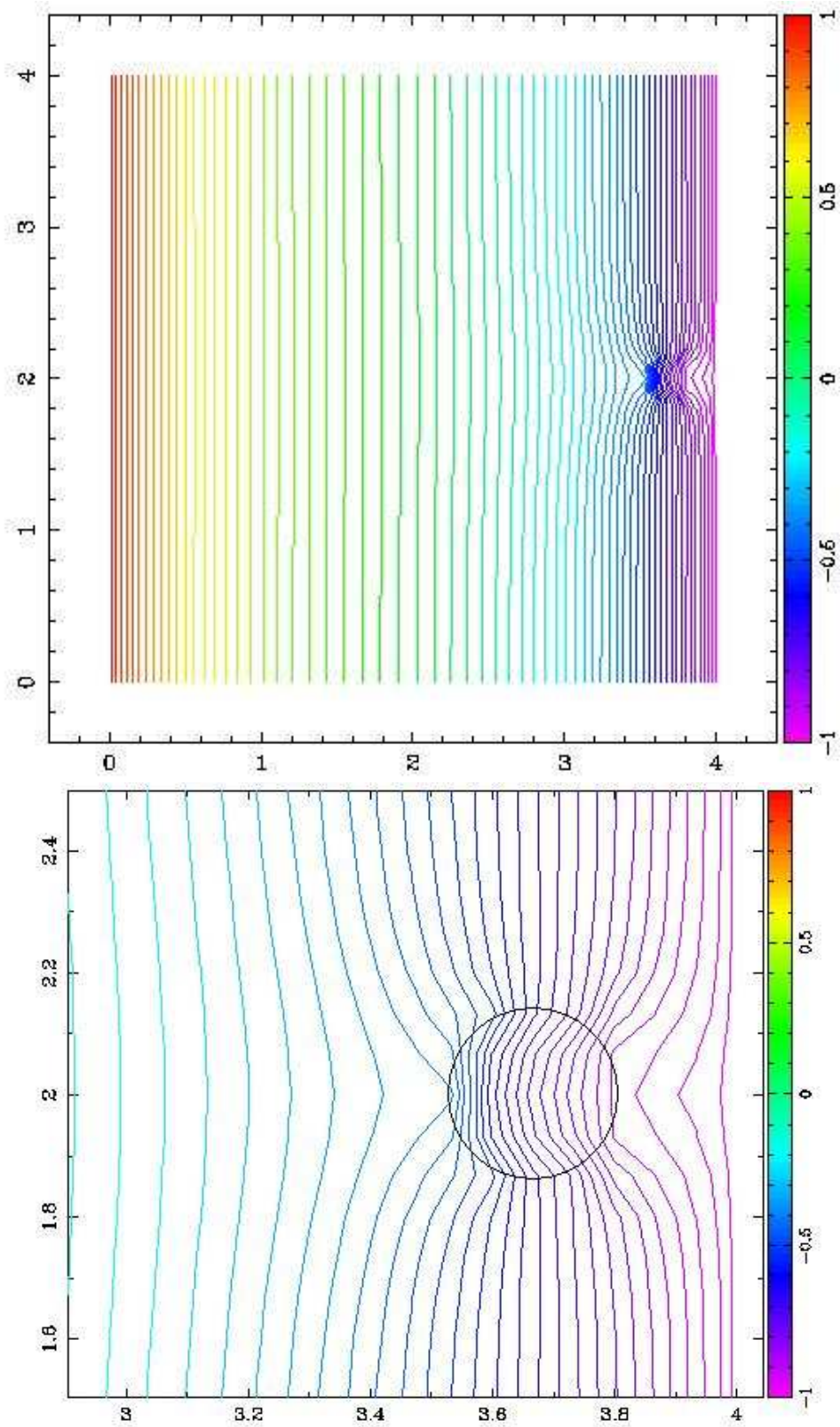


Figura 4.22:  $Re = 0.1$  malha  $61 \times 61$  pontos: (a) potencial elétrico (b) ampliação região da partícula

Nestas simulações utilizamos para a pressão e velocidade as mesmas condições de contorno que são

$$u = u_c, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.65)$$

$$v = v_c, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.66)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \Omega_1, \quad (4.67)$$

$$u = 0, \text{ em } \Omega_2, \quad (4.68)$$

$$v = 0, \text{ em } \Omega_2, \quad (4.69)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \text{ em } \Omega_2. \quad (4.70)$$

Simulamos quatro configurações para as condições de contorno do potencial  $\phi$  de tal forma a mostrar o comportamento da partícula sob influência destas.

Na figura 4.23(a) utilizamos as condições de contorno

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0 \text{ e } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.71)$$

$$\phi = -1, \text{ em } y = 0 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.72)$$

$$\phi = 1, \text{ em } y = 4 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.73)$$

$$(4.74)$$

e em (b) utilizamos

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \text{ em } x = 0 \text{ e } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.75)$$

$$\phi = 1, \text{ em } y = 0 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.76)$$

$$\phi = -1, \text{ em } y = 4 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.77)$$

$$(4.78)$$

Para a figura 4.24, fixamos  $\phi$  nos contornos leste e oeste tal que em (a) usamos

$$\phi = 1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.79)$$

$$\phi = -1, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.80)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 4 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.81)$$

$$(4.82)$$

e em (b) utilizamos

$$\phi = -1, \text{ em } x = 0 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.83)$$

$$\phi = 1, \text{ em } x = 4 \text{ para } 0 < y < 4, \quad (4.84)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0, \text{ em } y = 0 \text{ e } y = 4 \text{ para } 0 < x < 4, \quad (4.85)$$

$$(4.86)$$

O problema é simulado até momentos antes da molécula tocar o contorno do domínio, onde a partir desse momento a solução não é mais válida.

Podemos notar a correta influência das condições de contorno no movimento da molécula de tal forma que quando mudamos a configuração das condições de contorno do potencial  $\phi$  mudamos também a direção da molécula. Nos casos simulados podemos notar que a molécula move-se mediante a ação das forças elétricas em direção ao contorno com potencial mais baixo.

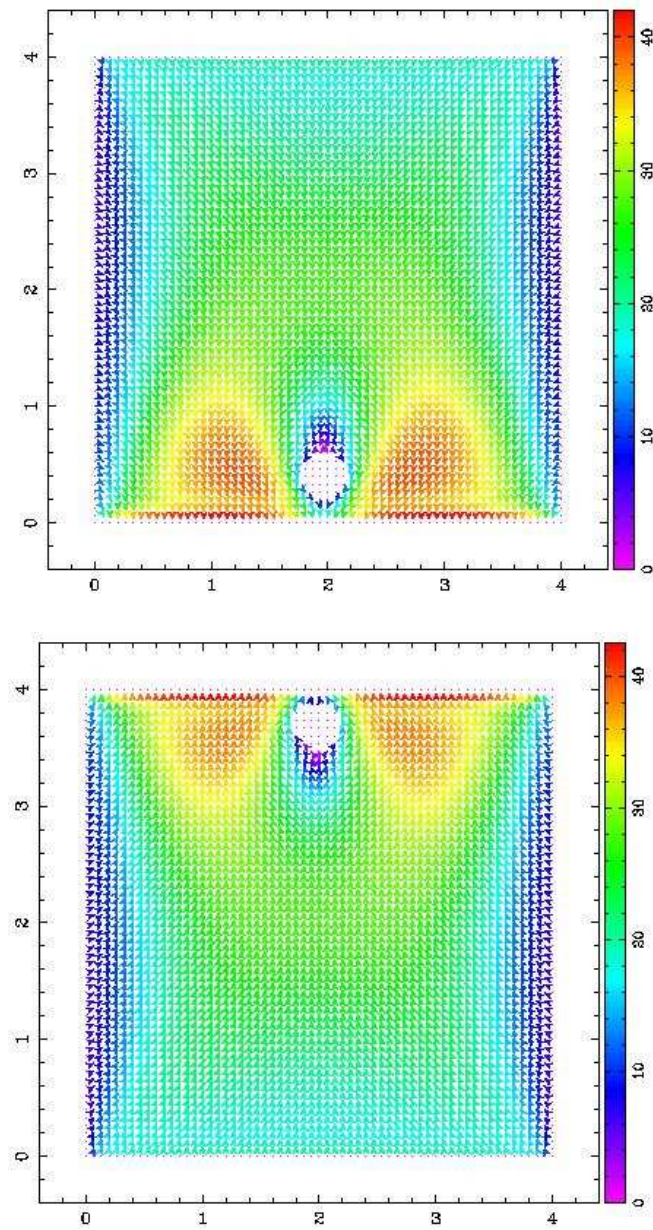


Figura 4.23: Malha com  $61 \times 61$  pontos,  $Re = 0.1$  : (a) direção sul, (b) direção norte.(onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

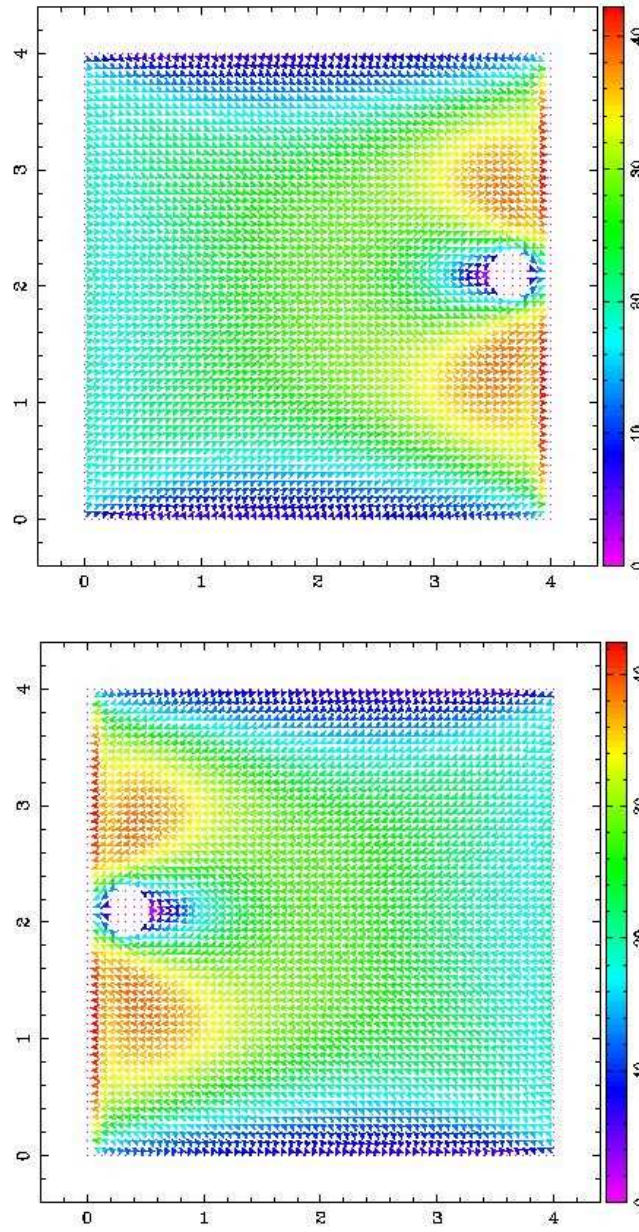


Figura 4.24: Malha com  $61 \times 61$  pontos,  $Re = 0.1$  : (a) direção leste, (b) direção oeste. (onde a escala de cores representa a magnitude dos vetores)

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E CONCLUSÕES

Primeiramente buscamos entender como funciona o fenômeno da eletroforese e listar todas as equações envolvidas na modelagem do problema. Como o contorno da molécula não coincide com a malha cartesiana, foi necessária a inclusão dos pontos lagrangeanos e a apresentação das fórmulas de interpolação e discretização para estes. Na sequência partimos para a implementação na linguagem Fortran 90 das discretizações utilizando o método das diferenças finitas.

Começamos então a fase de validação dos algoritmos utilizando inicialmente somente a equação de Navier-Stokes que é responsável pela hidrodinâmica do sistema. Simulamos 2 testes diferentes. No primeiro buscamos validar o código para um domínio simples; no caso um duto horizontal, através do refinamento da malha. Estando este correto, partimos para o estudo do comportamento do fluido ao redor de um cilindro fixo com o objetivo de analisarmos o desprendimento de vórtices para  $Re = 100$ ,  $Re = 500$  e  $Re = 1000$ . Podemos perceber um aumento na esteira de vórtices de forma gradativa acompanhando o aumento do número de Reynolds como esperado pela literatura.

Foram feitos mais dois testes: um com a partícula em movimento circular forçado no sentido horário e o outro com a partícula livre para se movimentar dentro do duto. Os dois testes se mostraram satisfatórios. Depois disso validamos então a parte do algoritmo responsável pela modelagem da equação de Poisson-Boltzmann. Fizemos testes para diferentes parâmetros e condições de contorno triviais de modo a validar o algoritmo satisfatoriamente.

Uma das dificuldades enfrentadas na simulação numérica, foi devido ao contorno da partícula não coincidir com os pontos da malha cartesiana. Por isso fez-se necessário a introdução dos pontos lagrangianos sobre o contorno da partícula.

Mostramos numericamente que o método utilizado nas interpolações e discretizações nos pontos lagrangeanos é de ordem 2.

E por fim, apresentamos os resultados da simulação que caracteriza o fenômeno eletroforese, onde a molécula começa a se movimentar por influência do potencial elétrico. Estes resultados estão acompanhados de suas condições de contorno, mostrando assim a sua real influência na direção da molécula. São apresentados resultados do comportamento da pressão e do potencial elétrico.

Neste trabalho não usamos as equações para a rotação da molécula pois estamos usando um corpo circular. A implementação dessas equações (apresentadas em [3]) não envolvem grande complexidade, porém a fase de testes se tornaria mais longa.

Para trabalhos futuros, também pretendemos estudar com cuidado os parâmetros que venham tornar a simulação um pouco mais próxima da realidade. Estamos simulando em um domínio muito pequeno de forma que a análise se torna local. Para simular por completo o problema deverão ser consideradas as diferentes escalas do problema e com isso usar um modelo de malha do tipo não-uniforme permitindo um refinamento local.

Do ponto de vista computacional, a inclusão de duas ou mais partículas requer uma leve estruturação do código. Entretanto a colisão entre essas moléculas requer uma correta modelagem do problema e a inclusão de mais algumas equações.

A utilização de moléculas com contornos suaves, desde que sejam convexos, é direta a partir das equações deste trabalho.

Podemos concluir que a implementação se mostrou satisfatória e bastante versátil pois diferentes problemas e modelos foram simulados a partir do mesmo algoritmo.



## Referências Bibliográficas

- [1] ALBERTS, B., BRAY, B., LEWIS, J., RAFF, M., ROBERTS, K., AND WATSON, J. D. *Biologia Molecular da Célula*. Artmed, 2004.
- [2] BEDIN, L. *A equação de Poisson-Boltzmann em Regiões com Fronteira Irregular*. Dissertação, Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2002.
- [3] BEDIN, L. *Movimento de Partícula Carregadas em Fluidos Ionizados: Fundamentos Matemáticos da Teoria de Eletroforese Capilar*. Tese, Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2005.
- [4] BORTOLI, Á. L. D. *Introdução à Dinâmica de Fluidos Computacional*. Editora de UFRGS, Porto Alegre, 2000.
- [5] BOYCE, W. E., AND DIPRIMA., R. *Elementary differential equations and boundary value problems*. Wiley New York, 1977.
- [6] DANIELI, R. *Transferência de calor e controle de temperatura em tubos capilares utilizados em eletroforese capilar*. Dissertação, Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2005.
- [7] DENNIS, J., AND SCHNABEL, R. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. Prentice Hall, 1983.
- [8] E SILVA, A. L. F. L., NETO, A. S., AND DAMASCENO, J. J. R. Numerical simulation of two-dimensional flows over a circular cylinder using the immersed boundary method. *Journal of Computational Physics* 189 (2003), 351–370.
- [9] EVANS, L. C. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 1997.



- [10] FERZIGER, J., AND PERIĆ, M. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Berlin, 2002.
- [11] FORTUNA, A. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. Edusp, São Paulo, 2000.
- [12] FOX, R., AND MCDONALD, A. *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. Editora Livro Técnico e Científico-LTC, Rio de Janeiro, 1998.
- [13] GERVASIO, A. P. G., LAVORANTE, A. F., MORAES, M. C. B., GINÉ, M. F., MIRANDA, C. E. S., AND CARRILHO, E. Eletroforese capilar acoplada à espectrometria com plasma: uma ferramenta eficiente para a especiação. *Quím. Nova* 26, 1 (2003), 65–74.
- [14] GRIEBEL, M., KNAPEK, S., AND ZUMBUSCH, G. W. *Numerical simulation in molecular dynamics*. Springer, 2000.
- [15] HOLST, M. J. *The Poisson-Boltzmann Equation: Analysis and Multilevel Numerical Solution*. 1994.
- [16] JUSTO, D. A. R. *Visual: Uma família de softwares para a visualização de fenômenos em mecânica dos fluidos*. Manual do visual, UFRGS, Porto Alegre, RS, março 1999.
- [17] KIST, T. B. L. *Eletroforese capilar de zona*. Dissertação, Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, 1993.
- [18] LEVITT, G. D. Electrostatic Calculations for an ion channel:I. Energy and Potential Profiles and Interactions between Ions. *Biophysical Journal* 22 (1978), 209–219.
- [19] MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Editora Livro Técnico e Científico-LTC, Rio de Janeiro, 1995.

- [20] PINTO, L. C. *Análise por Simulação Numérica do Desprendimento de Vórtices de um Cilindro Circular em Movimento Forçado*. Dissertação, Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental, UFRGS, Porto Alegre, 2008.
- [21] SCHOFFEN, J. R. *Efeitos Físicos na Técnicas de Eletroforese Capilar*. Dissertação, Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, 2001.
- [22] SERWAY, R. A., AND JR., J. W. J. *Princípios de Física.* , Thomson, São Paulo, 2004.
- [23] TAVARES, M. F. M. *Eltroforese Capilar: Conceitos Básicos*. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, SP, 1995.