UNIVERSIDADE DO VALE DO RIO DOS SINOS – UNISINOS UNIDADE ACADÊMICA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA NÍVEL MESTRADO

EDUARDO HENRIQUE TAUBE CUNEGATTO

DESIGN CONSTRUTAL PARA ALTO DESEMPENHO EM ARRANJOS DE TUBOS E MICROMISTURADORES VIA SIMULAÇÃO NUMÉRICA

SÃO LEOPOLDO

EDUARDO HENRIQUE TAUBE CUNEGATTO

DESIGN CONSTRUTAL PARA ALTO DESEMPENHO EM ARRANJOS DE TUBOS E MICROMISTURADORES VIA SIMULAÇÃO NUMÉRICA

Dissertação apresentada como requisito para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS)

Orientadora: Profa. Dra. Flávia Schwarz Franceschini Zinani

SÃO LEOPOLDO 2023

C972d Cunegatto, Eduardo Henrique Taube. Design construtal para alto desempenho em arranjos de tubos e micromisturadores via simulação numérica / por Eduardo Henrique Taube Cunegatto. - 2023. 126 f. : il. ; 30 cm. Dissertação (mestrado) - Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, São Leopoldo, RS, 2023. "Orientadora: Dra. Flávia Schwarz Franceschini Zinani". 1. Design construtal. 2. Dinâmica dos fluidos computacional (CFD). 3. Transferência de calor e massa. 4. Otimização. 5. Metodologia superfície de resposta (RSM). 6. Tubos. I. Título. CDU: 621:536.2

Catalogação na Publicação (CIP): Bibliotecário Alessandro Dietrich - CRB 10/2338

AGRADECIMENTOS

Dedico este trecho para fazer um agradecimento especial a todas as pessoas que me ajudaram e estiveram presente durante a minha trajetória na realização deste trabalho.

Meu agradecimento inicial vai para meus pais Míria e Evaldo por absolutamente tudo. Carinho, amor, aconchego e apoio, não apenas neste momento, mas em toda a vida. Muito obrigado por tudo. Tenho certeza de que lhes deixei orgulhosos. Amo vocês!

Agradeço também a minha professora, orientadora e grande amiga Flávia Zinani por ter escolhido me guiar e, principalmente, por me aguentar em todos os momentos de ansiedade e nervosismo. Que nossa parceria seja longa e continue a ser próspera!

Aos colegas do Núcleo de Reologia, Escoamentos e Otimização (NucREO) da Unisinos e demais pesquisadores do laboratório do PPGEM, também deixo meu agradecimento pela parceria e companheirismo durante toda minha jornada. Nunca tive um ambiente tão alegre e amigável para estudar e desenvolver minha pesquisa. Vocês são demais!

Agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela condecoração da bolsa de estudo!

Por fim, mas não menos importante, agradeço a todos os demais professores envolvidos, tanto neste trabalho, quanto na construção do meu conhecimento. Graças a vocês, pude fazer um trabalho de qualidade e com êxito!

Novamente, meu muito obrigado a todos! Eduardo Henrique Taube Cunegatto, 2023.

RESUMO

A combinação dos Método Superfície de Resposta (RSM) e Método Design Construtal (MDC) foi aplicada na investigação de dois problemas: configurações de arranjos de tubos para transferência de calor em fluidos pseudoplásticos e otimização geométrica de micromisturadores. Com relação ao primeiro problema, sistemas de tubos foram modelados de forma que três casos, com um, dois e quatro graus de liberdade fossem avaliados em termos de densidade de transferência de calor adimensional. No segundo problema, micromisturadores com obstáculos cilíndricos, cujo posicionamento vertical e horizontal, foram avaliados, totalizando dois graus de liberdade. Posteriormente, o número de obstáculos também é investigado, de forma que mais um grau de liberdade é considerado. A modelagem dos sistemas descritos foi elaborada e resolvida por meio de simulações numéricas via Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), através do método dos volumes finitos (MVF). A modelagem da viscosidade para os fluidos pseudoplásticos foi realizada por meio do modelo Power-Law, enquanto que a modelagem da mistura, no segundo problema, utilizou-se o modelo de Espécies. Para ambos os problemas, equações da continuidade e Navier-Stokes foram solucionadas. A aplicação da metodologia RSM foi feita em código aberto, onde os experimentos necessários foram projetos por meio do método Central Composite Design, e, posteriormente, utilizados para elaboração do modelo polinomial necessário para criação das superfícies de resposta. Com relação ao primeiro estudo, notou-se que a densidade de transferência de calor é diretamente dependente da distância entre cilindros e que, quanto maior o grau de pseudoplasticidade do fluido, maior é a performance na transferência de calor. Percebeu-se uma grande diferença na configuração quando fluidos pseudoplásticos e Newtonianos são utilizados. Para os primeiros, a configuração tende a ser mais compacta, de forma que espaçamentos menores e cilindros maiores possam ser desenvolvidos, contrariando a tendência apresentada pelos fluidos Newtonianos. Com relação ao segundo estudo, observou-se que, quanto maior o número de obstáculos, maior é a mistura obtida. Entretanto, a energia necessária também é maior. Por meio da introdução do Mixing Energy Cost (MEC), designs com três obstáculos foram mais eficientes, enquanto que o de sete (valor máximo avaliado) teve o pior índice. Contudo, o gradiente de pressão local é menor para quantidades maiores de obstáculos. Através da modificação de graus de liberdade, foi possível garantir que o sistema evoluísse de forma que objetivo dos sistemas (transferência de calor e massa) pudesse ser aumentado, garantindo assim uma maior performance, mesmo para configurações simples.

Palavras-chave: Design Construtal, CFD, Transferência de calor e massa, otimização, RSM.

ABSTRACT

The combination of the Response Surface Method (RSM) and Constructional Design Method (CDM) was applied in the investigation of two problems: configurations of tube arrangements for heat transfer in pseudoplastic fluids and geometric optimization of micromixers. Concerning the first problem, tube arrangement systems were modeled such that three cases, with one, two, and four degrees of freedom were evaluated in terms of dimensionless heat transfer density. In the second problem, micromixers with cylindrical obstacles, whose vertical and horizontal positioning, were evaluated, totaling two degrees of freedom. Subsequently, the number of obstacles is also investigated, so one more degree of freedom was considered. The modeling of the described systems was elaborated and solved using numerical simulations via Computational Fluid Dynamics (CFD), through the finite volume method (FVM). Viscosity modeling for the pseudoplastic fluids was performed using the Power-Law model, while mixing modeling, in the second problem, the Species model was used. For both problems, continuity, and Navier-Stokes equations were solved. The application of the RSM methodology was done in open-source code, where the necessary experiments were designed using the Central Composite Design method, and, later, used to elaborate the polynomial model needed to create the response surfaces. Concerning the first study, it was noted that the heat transfer density is directly dependent on the distance between cylinders and that the greater the degree of pseudoplasticity of the fluid, the greater the performance in heat transfer. A significant difference in configuration was noticed when pseudoplastic and Newtonian fluids were used. For the former, the configuration tends to be more compact, so that smaller spacings and larger cylinders can be developed, contrary to the tendency presented by Newtonian fluids. Concerning the second study, it was observed that the greater the number of obstacles, the greater the mixture obtained. However, the energy required is also greater. By introducing the Mixing Energy Cost (MEC), designs with three obstacles were more efficient, while the one with seven (maximum evaluated value) had the worst index. However, the local pressure gradient is smaller for larger amounts of obstacles. By modifying degrees of freedom, it was possible to ensure that the system evolved so that the objective of the systems (heat and mass transfer) could be increased, thus ensuring higher performance, even for simple configurations.

Keywords: Constructal Design, CFD, Heat and Mass transfer, Optimization, RSM.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Diagrama representando o desenvolvimento da camada limite de velocidade em	
uma placa plana	25
Figura 2 – Diagrama representando o desenvolvimento da camada limite térmica em uma	
placa plana à temperatura constante	26
Figura 3 - Diagrama representando o desenvolvimento da camada limite de concentração en	n
uma placa plana	27
Figura 4 – Diagrama representando escoamento externo e formação da camada limite em	
torno de um cilindro	29
Figura 5 – Diagrama ilustrando os diferentes tipos de configuração de feixes de tubos: (a) E	m
linha; (b) Escalonado	30
Figura 6 – Linhas de corrente de escoamentos em bancos de tubos: (a) Em linha; (b)	
Escalonado	30
Figura 7 – Diferentes regimes de escoamento sobre cilindros	32
Figura 8 – Diagrama de um escoamento unidimensional entre duas placas planas	33
Figura 9 – Exemplo de curva de escoamento ilustrando a relação linear entre tensão de	
cisalhamento e taxa de deformação de um fluido Newtoniano	34
Figura 10 – Reograma representando o comportamento da viscosidade dos vários tipos de	
fluidos	35
Figura 11 – Ilustração da transferência de massa em uma mistura: (a) contornos de	
concentração; (b) Perfis de concentração	37
Figura 12 – Superfície de resposta de uma variável dependente em função de duas variáveis	
independentes: (a) Projeção; (b) Perspectiva	41
Figura 13 – Central Composite Design (CCD) para um caso com duas variáveis	
independentes (Var1 e Var2)	44
Figura 14 – Exemplo de fit plot utilizado para visualização da precisão de um modelo de	
regressão	47
Figura 15 – Representação do caso estudado por Bharti et al. (2008)	48
Figura 16 – Geometria utilizada no estudo de Rao et al. (2011)	48
Figura 17 – Desenho esquemático de um problema de escoamento de fluido Não-Newtonia	no
oriundo de uma diferença de pressão em cilindros elípticos	49
Figura 18 – Escoamento de fluidos Não Newtonianos em um conjunto de quatro cilindros	51
Figura 19 – Geometria estudada por Teixeira et al. (2021)	52

Figura 20 – Casos ótimos referentes ao trabalho de Teixeira et al. (2021) – Superior: Campo
de velocidades da geometria com menor C_d .; Inferior: Campo de temperaturas da geometria
com maior <i>q</i> '
Figura 21 – Diagrama do estudo de escoamento de água em microcanais
Figura 22 – Geometrias ótimas no escoamento de água em microcanais – Superior: melhor
performance térmica; Inferior: melhor performance fluidodinâmica54
Figura 23 – Diagrama representando o estudo do resfriamento de cilindros
Figura 24 – Diferentes designs de micromisturadores passivos com <i>baffles</i>
Figura 25 – Perfis de concentração obtidos através de dados experimentais
Figura 26 – Micromisturador passivo com unidades de misturas com pás
Figura 27 – Micromisturadores com <i>baffles</i> e obstáculos: (a) circulares; (b) diamante; (c)
quadrados
Figura 28 – Comparação de modelos de acoplamento na mistura de um micromisturador 59
Figura 29 – Fluxograma da aplicação do método Design Construtal61
Figura 30 – Configuração do problema e condições de contorno: (a) um grau de liberdade; (b)
dois graus de liberdade; (c) quatro graus de liberdade
Figura 31 – Malhas computacionais utilizadas: (a) Um grau de liberdade; (b) Dois graus de
liberdade; (c) Três graus de liberdade; (d) Vista aproximada da malha na região dos cilindros.
Figura 32 – Desenho esquemático da geometria de referência para o design de
micromisturador: (a) Informações gerais sobre o design de referência; (b) Informações gerais
sobre o design proposto
Figura 33 – Desenho esquemático do design evolutivo proposto: (a) 4 obstáculos; (b) 5
obstáculos; (c) 6 obstáculos; (d) 7 obstáculos
Figura 34 – Desenho esquemático das condições de contorno adotadas no problema de design
de Micromisturadores
Figura 35 – Malhas computacionais utilizadas no problema de design de Micromisturadores:
(a) Malha em torno do obstáculo; (b) Malha entre obstáculos
Figura 36 – Gráfico referente à verificação da modelagem Power-Law para fluidos
Newtonianos ($n = 1 \text{ e Pr} = 0,72$)
Figura 37 – Superfície de resposta referente ao Caso 1: (a) $Be = 10^4$; (b) $Be = 10^5$ 85
Figura 38 – Qualidade de ajuste: RSM (modelo) vs CFD (Simulados) referentes ao Caso 1:
(a) $Be = 10^4$; (b) $Be = 10^5$

Figura 39 - Streamlines (superior) e campos de temperatura (inferior) referente ao fluido Figura 40 – Densidade de transferência de calor e configuração ótima em função do índice de Figura 42 – Qualidade de ajuste: RSM (modelo) vs CFD (Simulados) referentes ao Caso 2: Figura 43 – Streamlines (superior) e campos de temperatura (inferior) referente ao fluido Power-Law de n = 0.4, Be = 10^4 e $R_1^* = R_1^*$, opt nos espaçamentos S_0^* : (a) $S_0^* = 0.2$; (b) $S_0^* = 0.2$; (c) $S_0^* = 0.2$; (c) Figura 44 – Streamlines (superior) e campos de temperatura (inferior) para Be = 10^5 , R_1 * = $R_{I}^{*,opt}$ e $S_{0}^{*} = S_{0}^{*}, opt$ do Caso 2 referente aos fluidos: (a) n = 0,4; (b) n = 0,7; (c) n = 1,...,96Figura 45 – Densidade de transferência de calor e configuração ótima em função do índice de Figura 47 – Qualidade de ajuste: RSM (modelo) vs CFD (Simulados) referentes ao Caso 3: Figura 48 – Streamlines (superior) e campos de temperatura (inferior) das configurações Figura 49 – Densidade de transferência de calor e configuração ótima em função do índice de Figura 50 – Comparação entre resultados numéricos do presente trabalho e resultados experimentais da literatura para o perfil de concentração em um micromisturador......104 Figura 51 – Superfícies de Resposta referentes a porcentagem de mistura (esquerda) e diferença de pressão (direita) para: (a) 3 obstáculos; (b) 4 obstáculos; (c) 5 obstáculos; (d) 6 Figura 52 – Qualidade do ajuste para porcentagem de mistura (esquerda) e diferença de pressão (direita): (a) 3 obstáculos; (b) 4 obstáculos; (c) 5 obstáculos; (d) 6 obstáculos; (e) 7 Figura 53 – Contornos de concentração nas regiões de entrada (esquerda) e saída (direita) do micromisturador: (a) 3 obstáculos; (b) 4 obstáculos; (c) 5 obstáculos; (d) 6 obstáculos; (e) 7

Figura 56 – Queda de pressão local para cada unidade de mistura.	114
Figura 57 – Campos de magnitude de velocidade com <i>streamlines</i> : (a) 3 obstáculos; (b) 7	
obstáculos	115
Figura 58 – Resumo geral dos designs de micromisturadores: (a) Performance; (b) Evolução	0
geométrica; (c) Mixing Energy Cost; (d) Queda de pressão local	117

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores ótimos das geometrias dos artigos de referência
Tabela 2 – Limites das variáveis independentes para determinação do campo experimental
inicial para o problema de transferência de calor via CCD64
Tabela 3 – Resultados do Grid Convergence Index para o problema de transferência de calor
considerando $n = 1$ e Be = 10^4
Tabela 4 - Limites das variáveis independentes para determinação do campo experimental
inicial para otimização de micromisturador via CCD74
Tabela 5 – Limites das variáveis independentes para determinação do campo experimental
inicial para otimização das novas geometrias76
Tabela 6 - Resultados do Grid Convergence Index para o problema de design de
micromisturadores considerando Re = 1
Tabela 7 – Resultados comparativos referentes à verificação do modelo Power-Law para
fluidos não Newtonianos
Tabela 8 - Tabela de valores máximos e otimizados referentes ao Caso 1
Tabela 9 – Tabela de valores máximos e otimizados referentes ao Caso 2
Tabela 10 - Tabela de valores máximos e otimizados referentes ao Caso 3 100
Tabela 11 - Comparação dos parâmetros geométricos ótimos em relação aos demais casos. 101
Tabela 12 – Resultados comparativos referentes a validação do modelo matemático de
mistura
Tabela 13 – Tabelas de valores máximos e ótimos dos designs de micromisturador 109
Tabela 14 – Comparação do Mixing Energy Cost (MEC) entre os designs avaliados 111

LISTA DE SIGLAS

CCD	Central Composite Design
CFD	Computational Fluid Dynamics (Dinâmica dos Fluidos Computacional)
DOE	Design of Experiments (Design de Experimentos)
FVM	Método dos Volumes Finitos (Finite Volume Method)
LOC	Lab on a chip
MAE	Mean Absolute Error (Erro absoluto médio)
MDC	Método Design Construtal
MEC	Mixing Energy Cost (Custo Energético de Mistura)
RSM	Response Surface Methodology (Metodologia Superfície de Resposta)
SSR	Sum of Squares of Residuals (Soma do Quadrado dos Resíduos)
SST	Total Sum of Squares (Soma do Quadrado Total)
NucREO	Núcleo de Reologia, Escoamentos e Otimização

LISTA DE SÍMBOLOS

Nomenclatura

a	Coeficiente de rotatividade	[-]
Α	Área	[m²]
Be	Número adimensional de Bejan	[-]
С	Concentração molar	[mol/m³]
D	Diâmetro do obstáculo	[m]
D_0	Diâmetro do cilindro principal	[m]
D_{AB}	Coeficiente de difusão	[m²/s]
DP	Diferença de pressão	[Pa]
F	Força	[N]
h	Coeficiente de transferência de calor por convecção	[W/m ² K]
H_n	Distância horizontal entre obstáculos	[µm]
k	Número de variáveis independentes	[-]
Κ	Índice de consistência	[Pa.s ⁿ]
Km	Constante da malha	[-]
L_d	Comprimento a jusante	[m]
L_u	Comprimento a montante	[m]
MAE	Mean Absolute Error (Erro Médio Absoluto)	[-]
MEC	Mixing Energy Cost (Custo energético de mistura)	[W/%]
Na"	Fluxo molar	[mol/m²s]
n	Índice do escoamento	[-]
np	Número de pontos na base de dados	[-]
Nm	Número de divisões da malha	[-]
Ν	Número de pontos da amostra	[-]
Р	Pressão	[Pa]
OD	Diâmetro da obstrução	[µm]
OF	Offset	[µm]
Pr	Número adimensional de Prandtl	[-]
q'	Taxa de calor por unidade de distância	[W/m]
$q^{\prime\prime}$	Fluxo de transferência de calor	[W/m ²]
Q^*	Densidade de transferência de calor	[-]
Qv	Vazão volumétrica	[m³/s]

R_1	Raio do cilindro intermediário	[m]
R_2	Raio do cilindro secundário	[m]
R^2	Coeficiente de determinação	[-]
S_0	Espaçamento entre cilindros principais	[m]
S_2	Espaçamento entre cilindros secundários	[m]
SSR	Sum of Square Residuals (Soma dos quadrados dos resíduos)	[-]
SST	Total Sum of Squares (Soma total dos quadrados)	[-]
T_0	Temperatura do fluido	[K]
T_w	Temperatura do cilindro	[K]
u_{∞}	Velocidade da corrente livre	[m/s]
V	Velocidade de entrada do fluido	[m/s]
V_n	Distância horizontal entre obstáculos	[µm]
Ζ	Variável dependente/resposta	[-]
Letras Gre	egas	
α	Difusividade térmica	[m²/s]
β	Coeficiente de regressão	[-]
Ϋ́	Taxa de deformação	[1/s]
δ	Espessura da camada limite de velocidade	[m]
δ_t	Espessura da camada limite térmica	[m]
δ_c	Espessura da camada limite de concentração	[m]
ϵ	Erro estatístico	[-]
κ	Condutividade térmica	[W/mK]
μ	Viscosidade dinâmica	[Pa.s]
μ_c	Viscosidade dinâmica característica	[Pa.s]
σ	Desvio padrão	[-]
ρ	Massa específica	[kg/m ³]
arphi	Porcentagem de mistura	[%]
τ	Tensão de cisalhamento	[Pa]
Subscritos		
()s	Superfície	
() _f	Fluido	
$()_{max}$	Máximo	

- ()_{real} Valor real
- ()_{ref} Referência

()_{pred} Valor previsto

()_M Índice da malha

()_{opt} Ótimo (otimizado)

Sobrescritos

()* Variável adimensional

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	18
1.1 DEFINIÇÃO DO TEMA OU PROBLEMA	21
1.2 DELIMITAÇÕES	22
1.3 OBJETIVOS	22
1.3.1 Objetivo Geral	22
1.3.2 Objetivos Específicos – Transferência de calor em bancos de tubos	22
1.3.3 Objetivos Específicos – Design de micromisturadores	22
1.4 JUSTIFICATIVA E CONTRIBUIÇÕES	23
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	24
2.1 CONVECÇÃO FORÇADA E CLASSIFICAÇÃO DOS ESCOAMENTOS	24
2.1.1 Camadas Limite de Velocidade, Temperatura e Concentração	25
2.1.2 Escoamento em torno de cilindros	28
2.1.3 Escoamento sobre arranjo de tubos	29
2.1.4 Escoamentos laminares e turbulentos	31
2.2 CLASSIFICAÇÃO DOS FLUIDOS	32
2.2.1 Fluidos Newtonianos	33
2.2.2 Fluidos não Newtonianos	34
2.2.2.1 Fluidos Pseudoplásticos e modelagem Power-Law	35
2.3 CONCEITOS GERAIS DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA	36
2.3.1 Princípios físicos	36
2.3.2 Composição de misturas	37
2.4 MICROMISTURADORES	37
2.4.1 Micromisturadores passivos	38
2.4.2 Micromisturadores ativos	38
2.4.3 Principais aplicações	38

2.5 TEORIA E MÉTODO DESIGN CONSTRUTAL
2.6 FERRAMENTAS PARA OTIMIZAÇÃO 40
2.6.1 Metodologia Superfície de Resposta (RSM) 40
2.6.2 Design de Experimentos (DOE) 42
2.6.2.1 Designs Fatoriais 2 ^k e Central Composite Design (CCD)
2.6.3 Modelos de Regressão 44
2.6.3.1 Métricas para avaliação de modelos de regressão
2.6.3.1.1 Coeficiente de determinação (R ²) 45
2.6.3.1.2 Mean Absolute Error (MAE)
2.7 ESCOAMENTO E TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM FLUIDOS NÃO NEWTONIANOS SOBRE BANCOS DE TUBOS
2.8 MÉTODO DESIGN CONSTRUTAL APLICADO A BANCOS DE TUBOS 51
2.9 ANÁLISE GEOMETRICA E DESEMPENHO DE MICROMISTURADORES PASSIVOS
3 METODOLOGIA 61
3.1 METODOLOGIA – TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM BANCOS DE TUBOS 61
3.1.1 Modelagem matemática 66
3.1.2 Modelos de regressão
3.1.3 Metodologia numérica 68
3.1.3.1 Malha computacional 69
3.2 METODOLOGIA – DESIGN DE MICROMISTURADORES
3.2.1 Modelagem matemática 76
3.2.2 Metodologia Numérica
3.2.2.1 Malha computacional
4 RESULTADOS
4.1 ANÁLISE DO PROBLEMA DE TRASFERÊNCIA DE CALOR EM BANCOS DE TUBOS
4.1.1 Verificação da modelagem matemática

4.1.2 Caso 1 – Um grau de liberdade	
4.1.3 Caso 2 – Dois graus de liberdade	90
4.1.4 Caso 3 – Quatro graus de liberdade	
4.2 ANÁLISE DO PROBLEMA DE DESIGN DE MICROMISTURADORES	104
4.2.1 Validação da modelagem matemática	104
4.2.2 Verificação da modelagem matemática	105
4.2.3 Análise dos designs de micromisturador	106
5. CONCLUSÕES	119
6. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	121
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	122

1 INTRODUÇÃO

A busca pela solução de problemas de engenharia em certas áreas específicas pode estimular a criatividade e fazer surgir ideias para a solução de problemas de outras áreas que, a princípio, não estariam relacionadas. Assim, o presente trabalho traz dois exemplos com problemáticas distintas: transferência de calor em bancos e tubos e design de micromisturadores passivos com obstáculos cilíndricos, para os quais se aplicou a mesma filosofia para a melhoria de desempenho.

A princípio, as duas propostas citadas podem não apresentar similaridade, levando em conta a função e escala destes equipamentos. Contudo, os elementos físicos podem ser citados, de forma a criar um elo de ligação entre eles. A transferência de calor, presente no primeiro problema, tem estreita relação com as leis da Termodinâmica, visto que é um dos principais mecanismos para transferência de energia em um sistema. Além disso, o mecanismo é análogo ao da transferência de massa, presente na segunda problemática abordada. Como principal "força motriz", existe um fluido envolvido em ambos os processos, o que traz também à tona conceitos de mecânica dos fluidos. Além disso, o estudo de geometria é muito importante em ambas as aplicações, o que gera oportunidades de uma possível troca de informações entre os sistemas.

Tanto na indústria, quanto em objetos simples do cotidiano, equipamentos podem ter a estrutura de bancos de tubos, em especial trocadores de calor. Considerando a importância desse tipo de equipamento, a primeira análise investigada neste trabalho motiva a investigação sobre o escoamento em torno de bancos de tubos, característicos de trocadores de calor. A complexidade deste tipo de escoamento permite que sejam investigadas configurações que têm o potencial de elevar o desempenho de um dispositivo, com alta sensibilidade às condições operacionais – tipos de fluidos, regimes de escoamento, temperaturas, vazões, etc.

No que concerne aos fluidos utilizados nos processos industriais, pode-se classificá-los em fluidos Newtonianos e não Newtonianos. Os fluidos não Newtonianos possuem características reológicas distintas, dentre as quais a mais comum é a viscosidade variável de acordo com as deformações a que são submetidos. Os fluidos pseudoplásticos (ou shear-thinning) estão entre os fluidos não Newtonianos mais comuns. São caracterizados pela redução da viscosidade aparente com o aumento das taxas de cisalhamento, ou seja, o fluido torna-se menos viscoso conforme ele é agitado ou transportado. Exemplos de fluidos pseudoplásticos são: sangue humano, polpas de frutas, molhos, tintas, polímeros fundidos, etc. (CHHABRA E RICHARDSON, 2008).

Consoante a escala, existem centenas de produtos nos quais elementos de microescala estão envolvidos, como os próprios trocadores de calor. É uma tendência mais comum imaginar microescala em equipamentos eletrônicos, mas na área de mecânica dos fluidos existe a subárea de Microfluídica, destinada ao estudo de escoamentos em escala micrométrica. Dentre as aplicações mais promissoras desta subárea, cita-se os micromisturadores, utilizados para mistura de duas ou mais substâncias, isoladamente ou acoplados em um chip.

A gama de aplicações é variada, como exemplos nas áreas química, biológica e médica, que envolvem o diagnóstico de doenças, a fabricação de remédios e de novos materiais (LI *et al.* 2022). Dentro das áreas de aplicação, observa-se que os chips nos quais Micromisturadores estão acoplados executam as mais variadas funções. Um dos mais famosos exemplos é o Labon-a-chip (LOC), um dispositivo que realiza funções de laboratório em escala miniaturizada. Outro exemplo se trata do organ-on-a-chip, que combina aspectos biológicos e microtecnológicos para reproduzir aspectos da fisiologia humana, via microcanais que são utilizados para guiar e manipular soluções (LEUNG *et al.* 2022).

Dentre as metodologias utilizadas no projeto de sistemas, o método Design Construtal (MDC) tem se consolidado nos últimos anos. Este tem origem na Lei Construtal, enunciada por Adrian Bejan em 1996. A Lei Construtal está relacionada com a evolução dos sistemas vivos, nos quais são identificados escoamentos com diferentes propósitos. De acordo com Bejan e Zane (2012), a Lei Construtal é enunciada como: "Para que um sistema de escoamento de tamanho finito persista no tempo (sobreviva), a sua configuração deve evoluir de tal maneira que ela venha a prover um acesso mais fácil às correntes que escoam por ele". A Lei Construtal enuncia que tudo aquilo que se move, independentemente de ser um sistema animado (biológico) ou inanimado, é um sistema vivo, e que estes sistemas evoluem em uma direção específica e determinística (BEJAN, 1997). Em projetos de engenharia, o MDC define as funções objetivo, restrições e graus de liberdade, além de priorizar as configurações com conceitos de ramificação e hierarquia, que resultam em configurações de alto desempenho, boa distribuição das imperfeições e baixa resistência aos seus fluxos.

Em 2005, foi publicado um estudo sobre o desempenho de configurações de bancos de tubos que aplica os conceitos da Teoria Construtal. No artigo "Constructal multi-scale cylinders in cross-flow", Bello-Ochende e Bejan (2005) avaliaram configurações de uma fila de tubos, e de configurações com tubos secundários e terciários que trocam calor com ar. Trabalhos do grupo de pesquisa NucREO (Núcleo de Reologia, Escoamentos e Otimização) da UNISINOS, vêm investigando configurações de bancos de tubos com vista ao melhor desempenho na troca de calor com fluidos não Newtonianos via MDC. Por exemplo, o artigo de Klein *et al.* (2017b)

aplicou MDC em bancos de tubos de seção elíptica, buscando configurações que maximizassem a densidade de transferência de calor para escoamentos de fluidos pseudoplásticos, submetidos ao mesmo diferencial de pressão, representado adimensionalmente pelo número de Bejan. Neste caso, constatou-se que cilindros de seção alongada na direção do escoamento (slender) apresentaram a melhor densidade de troca térmica, em virtude da maior área de contato dos fluidos pseudoplásticos com o cilindro, propiciando o aumento da viscosidade aparente e dos efeitos advectivos. O emprego do número de Bejan no estudo de problemas que envolve escoamentos de fluidos não Newtonianos submetidos a diferença de pressão em bancos de tubos foi examinado por Klein *et al.* (2017a). Os autores apresentaram uma metodologia para modelagem de fluidos não Newtonianos, tais como Power-Law, Carreau e Bingham, juntamente com um estudo de caso. Os resultados mostram que a metodologia permitiu a avaliação de problemas com aplicação de fluidos não Newtonianos sob o ponto de vista do MDC.

A aplicação do MDC no estudo de micromisturadores é escassa, sendo o estudo de Cetkin e Miguel (2019) o que mais se assemelha com a metodologia adotada. Dentre os trabalhos que servem como motivação para esta proposta, cita-se o de Ortega-Casanova (2017), que aplicou o método Response Surface (RSM) para otimizar a geometria de um micromisturador. A partir de uma geometria de referência, os autores determinaram graus de liberdade, variando parâmetros da geometria, via simulação computacional, até obter uma configuração ótima. Os autores Rahmannezhad e Mirbozorgi (2019) realizaram uma análise multiobjetiva, também via CFD e RSM em um micromisturador com obstáculos de diferentes perfis, buscando elevada taxa de mistura e baixo custo de energia (diferença de pressão). O uso das metodologias permitiu obtenção de geometrias que atendessem ao escopo do trabalho, para cada tipo de perfil de obstáculo. O trabalho anterior teve continuação através do estudo de Mainochi et al. (2022), que, empregando ferramentas de machine learning, conseguiram aprimorar ainda mais a geometria utilizada anteriormente. Um algoritmo de redes neurais foi utilizado para treinamento dos dados com os parâmetros avaliados, enquanto um algoritmo genético foi utilizado para encontrar a melhor geometria (elevada mistura e baixa pressão). Nikpour e Mohebi (2022) combinaram CFD, RSM e algoritmos meta-heurísticos e também obtiveram resultados satisfatórios no design de Micromisturadores passivos.

Com a consciência de que a aplicação do MDC envolve a avaliação de configurações geométricas, torna-se viável recorrer à Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para a solução dos problemas de escoamento e transferência de calor. O uso desta ferramenta é muito

amplo, fornece resultados com rapidez e confiança e torna-se uma alternativa para redução de custos com experimentos (MALISKA, 2004).

Na maioria dos casos em que o objetivo da investigação e projeto pelo MDC é encontrar uma configuração ótima, é comum trabalhar com algoritmos de otimização associados ao MDC. No caso do uso da busca exaustiva, pode ser necessário a realização de um grande número de experimentos (simulações), o que demanda recursos de tempo e esforço computacional. Uma das técnicas de modelagem e otimização mais empregadas é o Método de Superfície de Resposta (Response Surface Methodology - RSM). Este método consiste na criação de um metamodelo a partir de resultados de experimentos realizados conforme um delineamento planejado. A RSM utiliza os resultados dos experimentos. Assim, o resultado ótimo pode ser obtido a partir do modelo de superfície de regressão como uma função dos parâmetros dos experimentos. Assim, o resultado ótimo pode ser obtido a partir do modelo de superfície de resposta desenvolvido pela regressão dos resultados experimentais – que, no caso do uso de CFD, são os resultados das simulações (RAHMANNEZHAD E MIRBOZORGI, 2019).

Diante do exposto, este trabalho objetiva, por meio dos princípios da Lei Construtal, através do MDC e DOE planejar os casos e investigar o efeito das configurações e os melhores designs, via CFD, para dois problemas de engenharia: bancos de tubos de 1,2 e 4 graus de liberdade para transferência de calor com fluidos pseudoplásticos e design de micromisturadores, considerando uma geometria de referência, de forma a buscar um design mais eficiente. Aliando estas metodologias ao RSM, realizar a regressão dos dados, análise de efeitos, de forma a otimizar a configuração geométrica de cada caso. As configurações básicas para o caso de transferência de calor seguem as propostas introduzidas por Bello-Ochende e Bejan (2005), as quais melhoram os resultados pela adição de tubos secundários e terciários. Já o design de referência do micromisturador é baseado no trabalho de Mainochi *et al.* (2022).

1.1 DEFINIÇÃO DO TEMA OU PROBLEMA

O presente trabalho investiga a transferência de calor em escoamentos externos de fluidos pseudoplásticos, em conjuntos de tubos dispostos em três configurações distintas, com queda de pressão constante, de forma a buscar as melhores configurações geométricas, para otimização da densidade de transferência de calor, relacionando os efeitos dos parâmetros físicos, especialmente reológicos, e a geometria dessas configurações. Além disso, também é investigado escoamentos de substâncias distintas para aprimoramento da porcentagem de mistura destas diante da modificação geométrica de micromisturadores, propondo o design evolutivo destes para aprimoramento do sistema.

1.2 DELIMITAÇÕES

O trabalho é delimitado ao estudo de escoamentos desenvolvidos em torno de cilindros e/ou superfícies circulares. São delimitações do trabalho o regime de escoamento, ou seja, somente são abordados casos com operação em regime laminar e permanente. Finalmente, o trabalho é delimitado as classe de fluidos Newtonianos e não Newtonianos pseudoplásticos puramente viscosos e independentes do tempo.

1.3 OBJETIVOS

Os objetivos do trabalho são divididos em geral e específicos, descritos a seguir.

1.3.1 Objetivo Geral

O objetivo geral do presente trabalho se trata da aplicação do método Design Construtal para análise dos efeitos das configurações geométricas, em aplicações distintas (transferência de calor e transferência de massa) e propor um design evolutivo para cada sistema.

1.3.2 Objetivos Específicos – Transferência de calor em bancos de tubos

- Analisar efeito da distância entre os tubos no caso de uma fileira simples;

- Analisar os efeitos combinados das distâncias entre tubos e as razões de diâmetros nos casos nos quais são adicionados tubos secundários e terciários;

- Comparar as configurações ótimas obtidas para os fluidos com diferentes graus de pseudoplasticidade;

- Comparar as configurações ótimas obtidas para os diferenciais de pressão maiores e menores;

- Analisar o benefício da adição de tubos secundários e terciários para a melhoria da troca térmica do sistema.

1.3.3 Objetivos Específicos – Design de micromisturadores

 Propor diferentes configurações geométricas de micromisturadores a partir de uma geometria de referência;

- Analisar o efeito dos distanciamentos verticais e horizontais de obstáculos cilíndricos na porcentagem de mistura de diferentes designs de micromisturadores;

 Verificar a relação entre porcentagem de mistura e diferença de pressão no design de um micromisturador;

- Analisar o design evolutivo do sistema e definir um design ótimo;

- Comparar as geometrias ótimas dos designs propostos com o design de referência.

1.4 JUSTIFICATIVA E CONTRIBUIÇÕES

Grande maioria dos equipamentos utilizados nos mais variados setores acabam sendo limitados por motivos como normativas ou dificuldades de fabricação, onde perde-se a chance de explorar novos caminhos para designs únicos. Diante disso, o presente trabalho vislumbra a oportunidade de estudo da otimização geométrica de dois equipamentos distintos, utilizados em diferentes campos da engenharia: bancos de tubos, para transferência de calor em fluidos Newtonianos e não Newtonianos; e micromisturadores, para mistura de substâncias químicas.

A problemática que avalia bancos de tubos envolve o estudo da evolução do sistema, inicialmente caracterizado por uma fileira simples de tubos, cujo grau de liberdade proposto é a distância entre os cilindros. A otimização deste sistema permite que a melhor configuração seja obtida, para cada fluido estudado, o que também abre oportunidades para a evolução deste. Como proposta para esta evolução, propõe-se a adição de cilindros secundários e terciários, totalizando três casos com diferentes graus de complexidade.

Consoante ao problema de designs de micromisturadores, explora-se uma geometria já existente, utilizada como referência e, a partir dela, novos designs são propostos. Neste caso, emprega-se o conceito de manter o volume do sistema constante e modificar a estrutura deste, objetivando a busca de um design mais eficiente. O princípio de evolução neste caso está atrelado ao uso dos designs propostos, de forma a aprimorar o design de referência.

Além de buscar as geometrias ótimas, os resultados do presente trabalho são subsídios para a discussão sobre a aplicabilidade dos conceitos da Teoria Construtal, na forma do método Design Construtal. A comparação entre o desempenho de sistemas que incorporam os conceitos de ramificação e hierarquia com sistemas mais simples enriquece a discussão sobre a aplicabilidade do método, além de gerar resultados para o melhor desempenho dos equipamentos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esta seção objetiva apresentar uma sucinta revisão bibliográfica sobre os principais conceitos e fenômenos que norteiam os objetivos desse trabalho. Apresenta-se, primeiramente, definições teóricas gerais sobre os escoamentos estudados e os fenômenos de convecção forçada e transferência de massa. Em seguida, aborda-se o comportamento e caracterização de fluidos Newtonianos e não Newtonianos, bem como a modelagem matemática destes fluidos. Além disso, uma revisão geral sobre micromisturadores também é apresentada. Na sequência, expõe-se os princípios da Teoria Construtal, a qual dá origem ao método Design Construtal, e o método Response Surface, utilizado para otimização das geometrias. Por fim, realiza-se um compilado geral referente ao estado da arte de escoamentos em bancos de tubos e transferência de calor em fluidos não Newtonianos, bem como otimização geométrica de micromisturadores, revisando os principais trabalhos que abordam estes problemas.

2.1 CONVECÇÃO FORÇADA E CLASSIFICAÇÃO DOS ESCOAMENTOS

O processo de transferência de energia denominado de convecção é caracterizado pela transferência de calor entre um meio fluido e um meio sólido. Este processo abrange dois mecanismos, um no ponto de vista macroscópico e outro no ponto de vista microscópico. Em termos macroscópicos, essa transferência de energia ocorre por meio da movimentação global do fluido (advecção), enquanto que, em termos microscópicos, ocorre por meio da movimentação desordenada das moléculas (difusão), tanto do fluido, quanto as moléculas do corpo imerso (BERGMAN e LAVINE, 2019). Esse processo de transferência de calor (convecção) é classificado por convecção natural e convecção forçada, de acordo coma origem de movimentação do escoamento. A convecção forçada, objetivo do presente trabalho, ocorre quando o movimento é causado por algum mecanismo que cause uma diferença de pressão, como bombas ou ventiladores, forçando o fluido a escoar em alguma superfície ou meio.

O processo de convecção também envolve o estudo de mecânica dos fluidos e torna-se importante determinar a classificação do escoamento do problema de estudo. Basicamente, os escoamentos podem ser classificados como internos ou externos, dependendo do sistema no qual o fluido escoa. O primeiro caracteriza-se por um escoamento no qual o fluido é envolto por uma superfície sólida, tal como ocorre em tubos ou dutos. Já o segundo é caracterizado pela superfície sólida ser envolta pelo fluido, de modo que, ou o fluido escoa sobre esta superfície, tal como o vento soprando em uma árvore, ou o sólido se movimenta no escoamento, como o voo de um pássaro. Em termos mais técnicos, escoamentos externos possuem a característica de que, a camada limite se desenvolve de maneira livre, sem nenhuma restrição causada por

alguma superfície adjacente. Consequentemente, na região externa à camada limite, os gradientes de velocidade e temperatura são considerados desprezíveis. Em um escoamento interno, a camada limite é incapaz de se desenvolver sem finalmente ter esse desenvolvimento restringido (ÇENGEL e GHAJAR, 2012).

2.1.1 Camadas Limite de Velocidade, Temperatura e Concentração

A concepção da camada limite foi disruptiva para a Mecânica dos Fluidos e tem papel fundamental no entendimento de qualquer fenômeno que envolva escoamentos. Diante disso, compreender este conceito é fundamental para qualquer caso que envolva transferência de calor por convecção, seja ela forçada ou natural. Em resumo, a camada limite representa uma pequena região no escoamento, localizada próximo à uma parede sólida, onde as forças viscosas não podem ser ignoradas (ÇENGEL e CIMBALA, 2015).

A camada limite de velocidade, como o próprio nome diz, está relacionada com a velocidade do escoamento, e sempre se desenvolve quando há escoamento de um fluido sobre uma superfície. Esse desenvolvimento se dá quando as partículas do fluido entram em contato com tal superfície, de modo que a força de reação causa desaceleração, fazendo com que a velocidade em tal região seja reduzida a valores muito baixos, aproximando-se de zero. Isso traz como consequência o retardamento das partículas adjacentes, da mesma forma, retardam as partículas da próxima camada de fluido, até uma distância $y = \delta$ da placa, na qual a desaceleração das partículas é desprezível. A Figura 1 ilustra o fenômeno descrito.

Figura 1 – Diagrama representando o desenvolvimento da camada limite de velocidade em uma placa plana.



Fonte: Bergman e Lavine (2019)

No diagrama, *u* representa a componente da velocidade na direção *x*, a qual é perpendicular à superfície, e é uma função da distância *y*, pois os efeitos de desaceleração diminuem conforme o aumento da distância, até atingir o valor da velocidade de corrente livre, u_{∞} , cujo subscrito ∞ representa a velocidade do fluido fora da camada limite, na altura $y = \delta$. Conforme mencionado, as forças de reação da superfície resultam em tensões cisalhantes τ , que

atuam no plano paralelo do escoamento, representando a origem do retardamento das partículas, e, consequentemente, a formação da camada limite (BERGMAN e LAVINE, 2019).

A distância vertical δ representa a espessura da camada limite, e é definida como a distância na qual a velocidade perpendicular à superfície é 99% a velocidade de corrente livre, ou seja, $u(y) = 0.99u_{\infty}$. Com isso, para distâncias acima de δ , os efeitos cisalhantes e gradientes de velocidade são considerados desprezíveis.

De maneira análoga à camada limite de velocidade, a camada limite térmica também se desenvolve quando um fluido escoa sobre uma superfície, de maneira que o desenvolvimento desta é dado pela interação entre as partículas do fluido e a superfície, na medida que exista diferença de temperatura entre os dois meios. Neste caso, o fenômeno de desaceleração é substituído pela troca de energia oriunda da diferença de temperaturas. Como resultado, há transferência de energia entre placa e partículas próximas, que trocam energia com partículas adjacentes, até atingir uma região na qual o gradiente de temperatura é desprezível. O processo é ilustrado na Figura 2.





Fonte: Bergman e Lavine (2019)

Na Figura 2, quando o escoamento de velocidade u_{∞} e temperatura T_{∞} entra em contato com a superfície, de temperatura $T_s \neq T_{\infty}$, ocorre a transferência de energia entre os dois meios, originando um gradiente de temperaturas, definido por T(y), até este último se tornar desprezível em $y = \delta_t$, ou seja, na espessura da camada limite térmica. A espessura da camada limite térmica é definida quando a razão exposta na Equação 1 é verdadeira:

$$\frac{T_s - T(y)}{T_s - T_{\infty}} = 0,99$$
 (1)

Para distâncias acima de δ_t , os gradientes de temperatura são considerados desprezíveis. Também é importante salientar que, nas Figuras 1 e 2, conforme a distância *x* aumenta, a espessura das camadas limites tendem a aumentar, o que leva ao aumento de regiões que tensões cisalhantes e a transferência de energia influenciam o escoamento. A velocidade do fluido decai para valores extremamente baixos quando as partículas entram em contato com a superfície sólida. Entretanto, uma simplificação válida é considerar a velocidade do fluido, na superfície, como zero, principalmente devido à condição de nãodeslizamento. Isso significa que a taxa de transferência de calor entre a superfície e a camada adjacente à parede, ou seja, em y = 0, é puramente condutiva, modelada através da Lei de Fourier, mostrada pela Equação 2:

$$q_s'' = -\kappa_f \frac{\partial T}{\partial y} \tag{2}$$

onde o subscrito s indica superfície, k representa a condutividade térmica, o subscrito f indica referência ao fluido, T é a temperatura, y é a componente da distância perpendicular à superfície.

Combinando a Equação 2 com a lei de resfriamento de Newton (Equação 3), a qual é utilizada para modelagem da transferência de calor por convecção, obtém-se a relação que descreve o comportamento da transferência de calor dentro da camada limite:

$$q_s'' = h(T_s - T_\infty) \tag{3}$$

$$h = \frac{-\kappa_f \partial T / \partial y}{T_s - T_\infty} \tag{3.1}$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor por convecção.

Por fim, a camada limite de concentração está presente em fenômenos de transferência, como os decorrem em micromisturadores por exemplo. Ela se desenvolve quando uma mistura de diferentes substâncias escoa sobre uma superfície plana, tal qual uma placa plana. A Figura 3 apresenta o processo.

Figura 3 - Diagrama representando o desenvolvimento da camada limite de concentração em uma placa plana.



Fonte: Bergman e Lavine (2019)

A concentração da espécie A na superfície é representada por $C_{A,s}$ e na corrente livre, $C_{A,\infty}$. Se $C_{A,s}$ for diferente que na corrente livre, ocorrerá transferência da espécie A pôr convecção. A camada limite de concentração quer dizer que, em tal região, existem gradientes de concentração, cuja espessura desta é definida de maneira análoga à Equação 1, com a diferença de que T_s , T_∞ e T(y) são substituídos por $C_{A,s}$, C_∞ e C_A , respectivamente.

Em geral, o fenômeno de transferência de massa é semelhante ao de transferência de calor, bem como a modelagem matemática. Na Equação 2 é apresentada a Lei de Fourier, que na transferência de massa, é denominada Lei de Fick. Ambas as leis possuem a mesma forma: o fluxo é proporcional à diferença concentração/temperatura multiplicada pelo coeficiente característico do problema, que no caso da transferência de massa, é o coeficiente de difusão D_{AB} , que representa uma propriedade da mistura das espécies. Com isso, a Lei de Fick é representada matemáticamente por:

$$N_A" = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial y} \tag{2.1}$$

onde N_A " representa o fluxo molar da espécie A.

2.1.2 Escoamento em torno de cilindros

Os conceitos apresentados na seção anterior são fundamentais para o entendimento dos mecanismos de formação das camadas limites em placas planas. Para adequação ao escopo deste trabalho, essa seção dedica-se a expandir a base teórica para escoamentos em torno de cilindros. A Figura 4 ilustra este problema.

O escoamento, a uma velocidade V, ao encontrar o ponto de estagnação frontal, desacelera até o repouso, devido ao aumento de pressão causado pelo cilindro. A partir deste ponto, com o aumento da distância em x, o fluido acelera novamente, devido à influência de gradientes de pressão favoráveis (dP/dx < 0). Isso faz com que o escoamento, em torno do cilindro, retorne a escoar a uma velocidade u_{∞} , a velocidade de corrente apresentada na Figura 1, sendo que, neste caso, é uma função da distância x, paralela ao escoamento, do ponto de estagnação, originando a camada limite em torno do cilindro. Esta dependência de x também se dá pelo fato de que o gradiente de pressão favorável ocorrer na mesma direção (BERGMAN e LAVINE, 2019).

O ponto de separação e as esteiras, apresentadas na Figura 4, ocorrem mediante a alta velocidade do fluido. O fluido envolve a parte frontal do cilindro, mas torna-se rápido demais para se manter colado ao cilindro, o que causa a separação da camada limite da superfície, resultando na formação de uma região de esteiras atrás do cilindro. Essa região é caracterizada por gradientes de pressão inferiores ao ponto de estagnação, levando a formação de vórtices. Quando a velocidade *V*, a montante do cilindro é baixa o suficiente, o fluido tende a se envolver

em torno do cilindro, de forma que nem o ponto de separação, nem a zona de esteiras são formados (ÇENGEL e GHAJAR, 2012).



Figura 4 – Diagrama representando escoamento externo e formação da camada limite em torno de um cilindro.

Fonte: Bergman e Lavine (2019)

Conforme visto na seção anterior, os coeficientes h de transferência de calor e massa tendem a diminuir com o aumento de x e para o escoamento em um cilindro, isto ocorre, quando a distância aumenta a partir do ponto de estagnação. Entretanto, quando se chega ao ponto de separação, o fluido se separa, com a tendência de h aumentar, devido a mistura associada aos vórtices formados na região da esteira, resultando no aumento nas taxas de transferência de calor e de massa.

2.1.3 Escoamento sobre arranjo de tubos

No presente trabalho, são analisados sistemas de escoamento externo em arranjos de múltiplos tubos. Em geral, os feixes de tubos encontrados nas mais diversas aplicações industriais são organizados em linha ou escalonados (alternados), conforme mostra a Figura 5 (ÇENGEL e GHAJAR, 2012).

Figura 5 – Diagrama ilustrando os diferentes tipos de configuração de feixes de tubos: (a) Em linha; (b) Escalonado.



Fonte: Elaborado pelo Autor. Adaptado de Çengel e Ghajar (2012).

Tanto para o caso de cilindro único, quanto para bancos de tubos, o comprimento característico do escoamento é o diâmetro D do cilindro. O fluido, ao escoar entre os cilindros, tende a acelerar, via a lei de conservação de massa, devido a redução da área causada pelos cilindros adjacentes. No caso do arranjo escalonado, a velocidade pode aumentar ainda mais, se as fileiras estiverem próximas. Por conseguinte, a velocidade de corrente u_{∞} a ser utilizada nas análises é a velocidade máxima, atingida quando o fluido escoa entre os cilindros, oriunda da diminuição da área do escoamento. A Figura 6 ilustra linhas de corrente do escoamento nas diferentes configurações.





Fonte: Bergman e Lavine (2019).

O comportamento do escoamento ao redor dos tubos da primeira fileira de um feixe é semelhante ao de um cilindro único, apresentado na seção anterior. Com isso, se o trocador de calor é composto por uma única fileira de tubos, o escoamento em torno destes pode ser considerado como o de um elemento. Porém, na presença de mais fileiras, o escoamento é alterado, influenciado pela configuração. As esteiras que se formam a partir do escoamento no primeiro tubo amplificam o efeito do coeficiente de transferência de calor, por meio da mistura das partículas de fluido. Em arranjos escalonados, a trajetória do escoamento tende a ser mais tortuosa, originando misturas mais intensas, o que favorece a intensificação, tanto da transferência de calor quanto da transferência de massa.

Ambos os casos vistos nas seções 2.1.2 e 2.1.3, apresentam inúmeras correlações empíricas e parâmetros geométricos corriqueiramente utilizados para questões de dimensionamento e melhoria. Tais metodologias estão além do escopo deste trabalho, e podem ser verificadas nas referências: Çengel e Ghajar (2012) e Bergman e Lavine (2019).

2.1.4 Escoamentos laminares e turbulentos

Escoamentos através e sobre cilindros resultam na formação de zonas de esteira à jusante do cilindro. Conforme as condições de operação, esta pode ser marcada pelo movimento aleatório das partículas de fluido, assemelhando-se a um escoamento **turbulento**.

Destaca-se o termo 'turbulento' no parágrafo anterior, pois é a classificação dada a escoamentos que possuem comportamento totalmente desordenado. A origem deste tipo de comportamento é associada à instabilidade de um fluido, oriunda de forças inerciais e /ou gradientes de energia potencial suficientes para superar a resistência do escoamento (MÖLLER e SILVESTRINI, 2004). A utilização deste tipo de escoamento está fora do escopo deste trabalho, porém faz-se a menção a escoamentos turbulentos, com o propósito de distingui-los das zonas de esteiras.

No caso dos fluidos escoando sobre/através e cilindros, o ponto de separação, identificado na Figura 4, indica o momento na qual a resistência do escoamento é superada por gradientes de pressão adversos, causando seu descolamento do cilindro, dando origem às zonas de esteira. Porém, a depender do caso, o fluido pode recuperar a sua estabilidade e retornar a um escoamento organizado, caracterizado por linhas de corrente que se assemelham a lâminas, denominado escoamento **laminar.** Logo, um escoamento estão organizadas, oriundo de um arranjo molecular bem definido. Portanto, para o escopo deste trabalho, considera-se o uso de

escoamentos laminares. A Figura 7 ilustra os diferentes regimes de escoamento sobre cilindro em função do número adimensional de Reynolds.



Figura 7 – Diferentes regimes de escoamento sobre cilindros.

Fonte: Lienhard, J.H. (1966).

Quanto a quantidade de movimento é muito baixa (Re < 5), o escoamento contorna todo o cilindro e não se separa, e esteiras não são formadas. Conforme o número de Reynolds aumenta (quantidade de movimento), a zona de esteiras começa a se formar. A imagem também traz uma informação importante: durante um regime laminar, as esteiras formadas também permanecem laminares. Baseado nisso, a região de esteiras é um efeito inerente à escoamentos em cilindros e, pode ocorrer tanto em escoamentos laminares, quanto em escoamentos turbulentos.

2.2 CLASSIFICAÇÃO DOS FLUIDOS

Os fluidos encontrados nas mais diversas aplicações de engenharia podem ser classificados através de duas maneiras diferentes, de acordo com as condições de operação. Podem ser classificados como **compressíveis**, quando a massa específica varia em função do tempo, devido à atuação de um gradiente de pressão, sendo um efeito comum em gases; e

incompressíveis, caso a massa específica mantenha-se constante ao longo do tempo, de forma que o volume do fluido permaneça inalterado ao longo do processo. Esta característica é utilizada em líquidos, pois a mudança da massa específica mediante atuação de pressão é desprezível (ÇENGEL e CIMBALA, 2015).

Fluidos também são classificados com relação à sua reologia, ou seja, a resposta na forma de deformação às tensões aplicadas. Fluidos cuja taxa de deformação é proporcional à tensão cisalhante são chamados de **Newtonianos**; se a relação entre taxa de deformação e tensão cisalhante não for linear, o fluido é classificado como **não Newtoniano.**

2.2.1 Fluidos Newtonianos

Um fluido Newtoniano é caracterizado pela resposta linear da taxa de deformação em relação à tensão cisalhante atuando sobre ele. A Figura 8 ilustra esta questão. No diagrama, uma camada de fluido encontra-se entre duas placas planas, onde a placa inferior é fixa e a placa superior movimenta-se com velocidade constante u, oriunda da aplicação de uma força F. O fluido que se encontra em contato com a placa superior move-se na mesma velocidade, e como resultado, é submetido a uma tensão cisalhante τ , determinada por:

$$\tau = \frac{F}{A} \tag{4}$$

onde A é a área de contato entre o fluido e a placa.

Figura 8 – Diagrama de um escoamento unidimensional entre duas placas planas.



Fonte: Elaborado pelo autor. Adaptado de Chhabra e Richardson (2008).

Para um fluido Newtoniano incompressível em escoamento laminar, a tensão cisalhante é o produto da taxa de deformação (gradiente de velocidade) e a viscosidade. Diante disso, a Equação 4 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\tau = \frac{F}{A} = \mu \frac{du}{dy} = \mu \dot{\gamma} \tag{5}$$

onde $\dot{\gamma}$ é a taxa de deformação e μ é a viscosidade do fluido. A viscosidade é uma medida de resistência à deformação, e é resultado da força de atrito entre as camadas de fluido, originada da força que as fazem se mover. Para fluidos Newtonianos, ela é independente de τ e $\dot{\gamma}$, e dependente apenas de temperatura e pressão. A relação linear antes mencionada pode ser observada através de gráficos chamados **curvas de escoamento**, nos quais realiza-se a plotagem da tensão cisalhante em função da taxa de deformação, e a inclinação da curva resultante é a viscosidade. A Figura 9 apresenta um exemplo de curva de escoamento.

Figura 9 – Exemplo de curva de escoamento ilustrando a relação linear entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação de um fluido Newtoniano.



Taxa de deformação (du/dx)

Fonte: Elaborado pelo autor. Adaptado de Çengel e Cimbala (2015).

Na Figura 9 estão expostos alguns fluidos Newtonianos comuns nas aplicações de engenharia. Outros exemplos de fluidos Newtonianos são: benzeno, mercúrio líquido, etileno glicol, glicerina, mel, vidro derretido e gases (CHHABRA e RICHARDSON, 2008).

2.2.2 Fluidos não Newtonianos

A classificação não Newtoniana é dada para fluidos cuja viscosidade, neste caso denominada como viscosidade aparente μ_c , é dependente da taxa de deformação, e não apresenta uma relação linear em relação à tensão cisalhante aplicada. Conforme a característica do fluido Não-Newtoniano, a aplicação da tensão pode causar aumento na viscosidade aparente,

no caso de fluidos **dilatantes**, deixando-os mais espessos; ou reduzir, no caso de fluidos **pseudoplásticos**. Ambos os tipos de fluidos são categorizados como **independentes do tempo**, pois a viscosidade aparente é determinada apenas pela razão entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação, não influenciada sob qualquer efeito temporal. A Figura 10 apresenta um reograma geral mostrando o comportamento da viscosidade de cada tipo de fluido.





Taxa de deformação (*du/dx*)

Fonte: Elaborado pelo autor. Adaptado de Çengel e Cimbala (2015).

O plástico de Bingham, também categorizado como fluido independente do tempo, possui a característica de se comportar como um sólido, até que a tensão cisalhante seja suficiente para o fazer escoar. Uma vez sob movimento, o comportamento da viscosidade aparente é similar ao de um fluido Newtoniano.

2.2.2.1 Fluidos Pseudoplásticos e modelagem Power-Law

Dentre os fluidos Não Newtonianos, os Pseudoplásticos aparecem como primeiros na lista de aplicações na Engenharia. Este tipo de fluido, quando em repouso, apresenta uma configuração molecular desordenada, e quando submetidos a uma tensão cisalhante, suas moléculas tendem a se direcionar na direção dela, de forma a oferecer menor resistência ao escoamento. Em razão disso, a viscosidade tende a decair conforme a tensão cisalhante se intensifica. Na literatura, é comum encontrar o termo *shear-thinning* para definir o comportamento reológico dos fluidos Pseudoplásticos.
A modelagem matemática de um fluido Pseudoplástico pode ser feita através do amplamente utilizado modelo Ostwald-de-Waele, mais conhecido como Power Law. Esse modelo se baseia da ideia de que a relação entre tensão cisalhante e taxa de deformação para um fluido Pseudoplástico pode ser aproximada por uma equação de potência sobre uma faixa limitada de tensão cisalhante ou taxa de deformação (CHHABRA e RICHARDSON, 2008). O modelo Power Law é expresso matematicamente através da Equação 6:

$$\mu_c(\dot{\gamma}) = K \dot{\gamma}^{n-1} \tag{6}$$

onde *K* representa o índice de consistência do fluido e *n* representa índice do escoamento. O índice de escoamento define o tipo de fluido a ser modelado: quando o valor for n = 1, o fluido é Newtoniano; se n > 1, trata-se de um fluido Dilatante; por fim, se n < 1, o fluido é Pseudoplástico. Uma observação importante é que, quanto menor for o valor de *n*, mais forte é o efeito de afinamento do fluido (*shear-thinning*).

2.3 CONCEITOS GERAIS DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA

Outrora mencionado nos capítulos anteriores, os fenômenos de transferência de calor e de massa são análogos. Da mesma forma que a transferência de calor ocorre quando existe uma diferença de temperatura, uma diferença de concentração de alguma substância indica que o fenômeno de transferência de massa está ocorrendo.

2.3.1 Princípios físicos

O uso do termo "transferência de massa" deve ser interpretado como o movimento relativo de espécies em uma mistura devido à presença de gradientes de concentração (BERGMAN e LAVINE, 2019). Ou seja, deve haver, no mínimo, duas substâncias (diferença de concentração) distintas para que o fenômeno de transferência de massa ocorra.

A Figura 11 (a) apresenta a seção do encontro de duas substâncias em um exemplo de micromisturador, enquanto a Figura 11 (b) mostra o perfil de concentração de cada substância. A coloração vermelha representa a substância A, enquanto a azul representa a substância B. A priori do encontro das duas espécies, a concentração de cada espécie é máxima em seus respectivos canais. Quando estas se encontram, na parte central da geometria, representada pela coloração verde, o fenômeno de transferência de massa ocorre, e os fluidos começam a se misturar. A quantidade de substância B é maior na parte inferior e, com isso, as moléculas tendem a se movimentar na direção positiva de *y*. Da mesma forma, as moléculas da substância A se movimentam para baixo, conforme mostram as indicações na parte direita da figura. Esse

movimento molecular dá origem a um gradiente de concentração, originando assim o fenômeno de transferência de massa.



Figura 11 – Ilustração da transferência de massa em uma mistura: (a) contornos de concentração; (b) Perfis de concentração.

Fonte: Elaborado pelo autor.

2.3.2 Composição de misturas

Misturas consistem em dois ou mais constituintes químicos (espécies), e quantidade de uma espécie *i* da mistura pode ser quantificadas em função da massa específica ρ_i ou via concentração molar C_i (BERGMAN e LAVINE, 2019):

$$\rho = \sum_{i} \rho_i \tag{7.1}$$

$$C = \sum_{i} C_i \tag{7.2}$$

2.4 MICROMISTURADORES

Micromisturadores são dispositivos, em escala sub-milimétrica, utilizados para misturar duas ou mais espécies, sejam estas sólidas (particulados), líquidas ou gasosas e, por conta de sua microescala, estes dispositivos requerem pouca quantidade de material. O design de micromisturadores envolve a manipulação do escoamento através de parâmetros geométricos ou influências externas (NGUYEN, 2011).

2.4.1 Micromisturadores passivos

Métodos passivos em micromisturadores envolvem a utilização de estruturas geométricas de microcanais, de forma a causar distúrbios no escoamento. Esse tipo de técnica não necessita nenhuma força externa para auxiliar na mistura, necessitando apenas da influência da geometria. Isso abre oportunidade para utilização dos mais diversos tipos de técnicas para o desenvolvimento de canais focados no aprimoramento da difusão mássica (LI *et al.* 2022).

2.4.2 Micromisturadores ativos

Ao contrário dos micromisturadores passivos, o método ativo faz uso de forças externas para auxiliar na mistura de substâncias, tais como campos elétricos, magnéticos, ondas sonoras ou ainda transferência de calor (CAI *et al.* 2017). O uso deste tipo de técnica permite um maior controle do processo através do ajuste dos parâmetros dos dispositivos externos, aprimorando consideravelmente a mistura. Contudo, isso também aumenta o custo energético necessário no processo.

2.4.3 Principais aplicações

O uso de dispositivos em microescala tem grande aplicabilidade em diversas áreas, cuja área biomédica é a principal delas. Como mencionado, a quantidade de material necessária para a utilização desses é baixa, o que traz muitos benefícios para a área biomédica, além de abrir oportunidades para aplicações em demais setores. Tecnologias como *Lab on a chip* (LOC), utilizado para realizar funções de um laboratório em microescala, possuem micromisturadores em sua estrutura.

Dentro da área da biomedicina, uma das principais aplicações é no estudo de concentração de amostras biológicas. A baixa quantidade de movimento do escoamento e a possibilidade de manter um gradiente de concentração tornam micromisturadores uma opção formidável neste tipo de aplicação (LEE e FU, 2018).

Também se encontra aplicação de micromisturadores em reatores químicos, pois, o funcionamento da mistura em microescala funciona de maneira análoga a um dispositivo em macro escala, tornando-se uma opção para o design de reatores eficientes, viabilizando assim os testes devido ao baixo requisito de materiais. Outras aplicações envolvem o uso em processos de polimerização, proporcionando misturas mais uniformes, na extração de solventes.

2.5 TEORIA E MÉTODO DESIGN CONSTRUTAL

As Leis da Física, por meio de modelos preditivos, buscam explicar os fenômenos que ocorrem na natureza. Essa afirmação traz indícios importantes de como os mecanismos naturais

podem ser explorados em prol do desenvolvimento da sociedade. A percepção de que as mais diversas criações encontradas no ambiente natural é um fenômeno físico universal, talvez tenha sido ofuscado pela vulgaridade do princípio exposto acima, até a concepção da Teoria Construtal, na década de noventa.

Primeiramente concebida por Adrian Bejan, a Teoria Construtal enuncia que, a sobrevivência de um sistema é resultado da sua evolução, caracterizada pela melhoria/acessibilidade das correntes que o atravessam. Em outras palavras, a Lei Construtal diz que um sistema vivo possui duas características fundamentais: ele escoa, analogamente considerado um sistema termodinâmico de não-equilíbrio; e se transforma de maneira livre em direção a configurações que permitem melhor acesso aos mecanismos abrangidos por ele (BEJAN e LORENTE, 2013).

De forma concisa, a evolução prevista pela Teoria Construtal tem o propósito de facilitar o escoamento. Entretanto, é importante salientar que o enunciado da Teoria Construtal não se trata de uma releitura sobre otimização, maximização ou minimização ou ainda o desenvolvimento de um design final. Ele se refere a direção da evolução ao longo do tempo, e o fato de que as configurações não são estáticas (BEJAN e LORENTE, 2013).

A necessidade de evolução de um sistema para dar acessibilidade às suas correntes é proveniente das irreversibilidades, ou seja, o aumento da entropia resultante de cada ciclo, conforme prevê a segunda Lei da Termodinâmica. Em palavras mais simples, conforme Bejan e Zane (2012), um sistema de escoamento/fluxo sempre terá imperfeições, e a capacidade de reduzir essas imperfeições é o que determina o ciclo de vida deste sistema.

A aplicação prática dos conceitos enunciados pela Teoria Construtal em algum sistema vivo ou material é definido como método Design Construtal. Nesta vertente, a busca por um design/configuração que permita a melhor distribuição das imperfeições do sistema (ROCHA, LORENTE e BEJAN, 2017). Ou seja, a análise é voltada para a identificação do sistema, o que está fluido através, definir o que é mais propício para a sua evolução e, neste caso, alcançar a configuração que melhor distribui as imperfeições, com o propósito de otimizar o funcionamento/ciclo.

Por conseguinte, o método Design Construtal, diferentemente da Teoria, busca a ideia de otimização e melhor design, diante de identificação e análise completa do sistema a ser estudado. No âmbito da engenharia, o uso do método Design Construtal é encontrado em aplicações que envolvem a otimização de geometrias em problemas de transferência de calor e mecânica dos fluidos.

2.6 FERRAMENTAS PARA OTIMIZAÇÃO

O Método Design Construtal está relacionado a modificar configurações para promover a melhor condição de escoamento com relação ao propósito de um sistema. Otimização é o processo de obtenção do valor máximo ou mínimo de uma função, e identificação da combinação de parâmetros que promovem este resultado. Para o escopo deste trabalho, a associação do MDC à otimização tem pleno sentido, já que quando um sistema físico pode ser modelado matematicamente, a busca de sua melhor performance pode se reduzir a um problema de otimização.

2.6.1 Metodologia Superfície de Resposta (RSM)

Uma técnica amplamente utilizada para modelagem e otimização de problemas de engenharia é a Metodologia Superfície de Resposta, do inglês, *Response Surface Methodology* (RSM). Trata-se de um compilado de técnicas matemáticas e estatísticas para modelagem de sistemas, na forma de uma variável de resposta (dependente) em função de variáveis independentes, geralmente com objetivo de encontrar o máximo ou o mínimo desta função (MONTGOMERY, 2012a).

Cita-se como exemplo de aplicação desta metodologia trabalhos desenvolvidos pelo grupo NucREO da UNISINOS, tais como as dissertações de Klein (2017c), que também aliou o método Design Construtal (MDC) com RSM para otimização de bancos de tubos elípticos e a de Bloss (2020), aplicado à otimização geométrica de dispositivos de conversão de energia das ondas do tipo colunas de água oscilantes também por meio do uso de RSM e MDC. Percebese que a aplicação de ambas as metodologias possui sinergia, o que fornece potencial para aplicação de outros problemas de engenharia, e/ou ainda, problemas em áreas externas.

Os casos aplicados com RSM são modelados matematicamente ao definir variáveis independentes (I) e a variável de resposta (Z) como uma função:

$$Z = f(I_1, I_2, \dots, I_n) + \epsilon \tag{8}$$

onde ϵ representa o erro estatístico observado na resposta Z. Como geralmente são utilizados gráficos de superfície para avaliar o comportamento do sistema, o método recebe o nome de **superfícies de resposta.** Estes gráficos, além de mostrarem a localização do ponto ótimo, permitem uma visualização geral do comportamento da variável de resposta em relação às variáveis independentes. A Figura 12 apresenta um exemplo de superfície de resposta de uma variável dependente em função de duas variáveis independentes.

As linhas da projeção representam a faixa de valores da variável dependente na região, e as cores representam a intensidade. Pouca variação de cores em uma determinada direção significa que uma determinada variável independente tem pouco efeito na variável dependente. Caso a variação de cores é grande, a influência da variável independente é significativa. A perspectiva fornece uma versão tridimensional da projeção, e através dela é possível observar, com mais clareza, o comportamento, de forma que a região ótima, ou de máximo, é representada pelo pico da superfície.

A aplicação da RSM parte de um banco de dados que fornece as informações necessárias para a elaboração de um modelo matemático que consiga descrever as relações entre as variáveis. A origem destes dados pode ser proveniente de experimentos, registros históricos ou observações.





Fonte: Elaborado pelo autor.

A estratégia mais comum para modelagens matemáticas de problemas é a utilização de polinômios de ordem baixa, geralmente primeira e segunda ordem, mostrados, respectivamente, nas Equações 9.1 e 9.2 (MONTGOMERY, 2012b).

$$Z = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i I_i + \epsilon \tag{9.1}$$

$$Z = \beta_o + \sum_{i=1}^{k} \beta_i I_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} I_i^2 + \epsilon$$
(9.2)

onde β representa os coeficientes de regressão *e k* representa o número de variáveis independentes. Caso a relação entre as variáveis apresentar comportamento linear, um polinômio de ordem 1 pode ser suficiente. No exemplo mostrado na Figura 12, o comportamento é não-linear, exigindo um polinômio de, pelo menos, segunda ordem na modelagem.

A partir da definição do modelo matemático, a superfície de resposta pode ser criada. Uma característica importante sobre o RSM é que se trata de um processo sequencial. Isso significa que se a superfície de resposta não apresentar uma região ótima bem definida, tornase necessário obtenção de mais dados/realizar mais experimentos, e/ou fazer uma mudança no modelo matemático, objetivando identificar uma superfície mais bem ajustada.

2.6.2 Design de Experimentos (DOE)

A precisão de uma superfície de resposta depende da qualidade dos dados empregados na construção dos modelos matemáticos. Pesquisas em áreas como a engenharia são oriundas dos mais variados experimentos, e planejá-los e executá-los corretamente traz mais confiança nos resultados obtidos. De acordo com Montgomery (2012a), a aplicação de técnicas estatísticas pode aumentar consideravelmente o desempenho de experimentos e proporcionar conclusões mais concisas. Para o uso adequado destes métodos estatísticos, o experimentalista deve cumprir os seguintes procedimentos:

- a) É imprescindível o uso do conhecimento técnico sobre o problema, não somente o estatístico. Ambos devem trabalhar em conjunto.
- b) Manter o design e a análise o mais simples possível. Técnicas estatísticas básicas são suficientes para elaboração de um planejamento adequado de experimentos. Experimentos mal planejados podem produzir resultados complexos.
- c) Reconhecer a diferença entre parâmetros práticos significativos e parâmetros estatísticos significativos. Um parâmetro definido como insignificante estatisticamente pode ser fundamental na parte prática.

 d) Experimentos são iterativos. Quanto mais experimentos são realizados, mais conhecimento sobre o processo é assimilado.

2.6.2.1 Designs Fatoriais 2^k e Central Composite Design (CCD)

Experimentos que envolvem vários fatores (variáveis independentes) e a determinação das interações entre elas por meio de superfícies de resposta geralmente são planejados utilizando a técnica 2^k *Factorial Designs*, onde *k* representa o número de fatores. O algarismo 2, presente na nomenclatura da técnica, representa o número de níveis (*levels*) de cada variável, representando pontos opostos (máximo e mínimo).

O uso de somente um *factorial design* resulta em uma superfície linear devido à presença de apenas dois níveis, indicando que a equação linear apresentada na Equação 8.1 pode modelar adequadamente a superfície de resposta. Entretanto, o comportamento real pode não ser linear, e/ou os experimentos podem não ser suficientes para se tirar uma conclusão definitiva.

Uma maneira de aprimorar os *factorial design* é a adição de um **nível (ponto) central** e **níveis axiais, denominados** *2k axial points*. A junção de todos esses níveis forma a técnica conhecida como *Central Composite Design* (CCD). Trata-se de uma técnica que aumenta consideravelmente o número de experimentos, mas fornece a criação de uma base de dados robusta (MONTGOMERY, 2012a).

O **ponto central**, como o nome sugere, refere-se ao ponto que se localiza do centro dos demais níveis. Em um caso com duas variáveis independentes, a coordenada do ponto central (I_1, I_2) é determinada pela média entre o máximo e o mínimo de cada variável (Equações 10.1 e 10.2):

$$I_1 = \frac{I_{1,max} + I_{1,min}}{2} \tag{10.1}$$

$$I_2 = \frac{I_{2,max} + I_{2,min}}{2} \tag{10.2}$$

Já os **pontos axiais** são fundamentais para garantir a característica de **rotatividade** do modelo CCD. Isso quer dizer que os pontos (configurações) do experimento estarão distribuídos de maneira uniforme, um aspecto desejado em qualquer planejamento de experimento, pois a variância vai ser a mesma em qualquer ponto. O critério que define a rotatividade do design é o parâmetro *a*, expresso matematicamente por:

$$a = (2^k)^{\frac{1}{4}} \tag{11}$$

Com isso, os limites das variáveis definem o campo experimental e, conforme mostra a Figura 13, com o método CCD, é possível fazer uma distribuição de pontos uniformemente espalhada, que permite obter resultados por todo esse campo experimental (área hachurada), possibilitando a construção de superfícies de resposta mais definidas.



Figura 13 – Central Composite Design (CCD) para um caso com duas variáveis independentes (Var1 e Var2).

Fonte: Elaborado pelo autor.

2.6.3 Modelos de Regressão

As equações empregadas para criação de uma superfície de resposta, ou seja, os modelos matemáticos, são chamados, dentro do campo da estatística, de **modelos de regressão.** Mesmo que a nomenclatura seja diferente, o objetivo é o mesmo, ou seja, descrever relações entre variáveis dependentes e independentes.

No caso da Equação 9.1, o modelo de regressão apresentado é uma **regressão linear**, enquanto a Equação 9.2 se trata de uma **regressão polinomial.** Os coeficientes de regressão (β) são parâmetros fundamentais, pois, o principal objetivo da regressão é encontrar os coeficientes que mais se adequam aos dados. Para calcular os valores de β , utiliza-se o **método dos mínimos quadrados,** cujos cálculos seguem a ordem das equações matriciais apresentadas na Equação 12.1:

$$Z = I\beta = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & I_{11} & I_{12} & \cdots & I_{1k} \\ 1 & I_{21} & I_{22} & \cdots & I_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & I_{n1} & I_{n2} & \cdots & I_{nk} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix}$$
(12.1)

$$I^T Z = I^T I \beta \tag{12.2}$$

$$(I^{T}I)^{-1}I^{T}Z = (I^{T}I)^{-1}I^{T}I\beta = \beta$$
(12.3)

onde o sobrescrito *T* representa a transposição da matriz (WASHINGTON, 2011). É importante salientar que devem existir registros suficientes para determinação dos coeficientes de regressão. Isso quer dizer que a base de dados deve proporcionar valores suficientes ou o modelo deve ser reduzido. Contextualizando, um experimento planejado por meio de um CCD fornece, no mínimo, nove registros de entrada na base de dados, o que é suficiente para a aplicação de um modelo de regressão polinomial de segunda ordem.

2.6.3.1 Métricas para avaliação de modelos de regressão

A principal intenção no uso de modelos de regressão e RSM neste trabalho é utilizá-los para fazer previsões. Isso significa que o modelo empregado deve ser avaliado para garantir que os resultados previstos estão de acordo com o fenômeno físico real. Esta subseção apresenta algumas métricas a serem utilizadas na avaliação dos modelos.

2.6.3.1.1 Coeficiente de determinação (R^2)

O coeficiente de regressão, do inglês, *R-Squared* (R^2) é um parâmetro utilizado para verificação do ajuste de modelos de regressão. O cálculo deste parâmetro envolve parâmetros que avaliam diferenças (erros): a soma dos quadrados dos resíduos (*SSR*) e soma dos quadrados totais (*SST*) (WASHINGTON, 2011). O parâmetro *SSR* representa a variação dos valores previstos em torno dos valores médios reais, que matematicamente é expresso por:

$$SSR = \sum_{i=1}^{np} \left(Z_{real,i} - Z_{pred,i} \right)^2 \tag{13}$$

onde *np* representa o número de pontos na base de dados e os subscritos *pred* e *real* indicam o valor previsto e o valor real, respectivamente.

De maneira análoga, o parâmetro *SST* representa a variância total dos dados, ou seja, a diferença entre cada valor experimental (real), Z_{real} e o valor médio, $\overline{Z_{real}}$, elevada ao quadrado. Matematicamente é expresso por:

$$SST = \sum_{i=1}^{np} \left(Z_{real,i} - \overline{Z_{real}} \right)^2 \tag{14}$$

Com ambos os parâmetros definidos, o coeficiente de determinação representa a razão entre *SSR* e *SST*, conforme mostra a Equação 15:

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{np} (Z_{real,i} - Z_{pred,i})^{2}}{\sum_{i=1}^{np} (Z_{real,i} - \overline{Z_{real}})^{2}} = 1 - \frac{SSR}{SST}$$
(15)

O valor de R^2 varia entre 0 e 1, e, quanto mais próximo de 1, mais os resultados previstos se aproximam dos valores reais e melhor o modelo consegue explicar a relação entre as variáveis. Caso o valor de R^2 seja 1, toda variância é explicada pelo modelo; caso o valor de R^2 seja 0, o modelo não consegue explicar a relação entre as variáveis dependentes e independentes. O resultado de R^2 pode ser multiplicado por 100 (cem) para uma medida de porcentagem.

2.6.3.1.2 Mean Absolute Error (MAE)

Outro parâmetro estatístico que pode ser utilizado para avaliação de modelos é o *Mean Absolute Error*, ou seja, erro absoluto médio, tratando-se de uma medida que avalia a diferença absoluta entre os valores previstos pelo modelo e os valores reais. Matematicamente, o *MAE* é expresso por:

$$MAE = \frac{1}{np} \sum_{i=1}^{np} |Z_{real,i} - Z_{pred,i}|$$
(16)

O valor de *MAE* possui a mesma grandeza da variável de resposta do problema. Uma vez que o erro absoluto médio representa a soma da diferença entre previsto e real, quanto menor o valor, mais próximo o modelo está de prever os dados reais. Conforme Willmot e Matsuura (2005), o *MAE* representa uma medida natural do erro e o seu valor é de fácil interpretação, pois não se tem nenhum valor elevado a uma potência.

Os valores de R^2 e *MAE*, representam um valor global do modelo, pois envolvem o somatório de todos os valores previstos e reais. Porém, estes valores podem ser observados visualmente por meio de gráficos de ajuste (*fit plots*), representado na Figura 14. Neste tipo de gráfico, os pontos representam os valores previstos pelo modelo, enquanto que a linha que parte da origem representa os valores reais.

Figura 14 – Exemplo de fit plot utilizado para visualização da precisão de um modelo de regressão



Fonte: Elaborado pelo autor.

Visualmente, R^2 e *MAE* possuem semelhanças: o primeiro pode ser entendido como a proximidade dos pontos em relação a curva, ou o quanto a linha cruza os pontos; o segundo representa o somatório das "distâncias" dos pontos até a linha. Essa distância em questão é mostrada na Figura 14, e representa a diferença absoluta entre o valor previsto e o real na mesma configuração.

2.7 ESCOAMENTO E TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM FLUIDOS NÃO NEWTONIANOS SOBRE BANCOS DE TUBOS

Na literatura, inúmeros são os estudos que englobam escoamento de fluidos não Newtonianos sobre bancos de tubos. A seguir, seguem as principais pesquisas que serviram como motivação para a realização deste trabalho, os quais são trabalhos exclusivamente numéricos.

Um dos trabalhos utilizados como referência é o de Bharti *et al.* (2008). Estes autores estudaram o escoamento de fluidos não Newtonianos em torno de cilindros circulares e elípticos, conforme mostra a Figura 15. O estudo foi numérico, com o modelo de fluido Power-Law e índice de escoamento foi variado entre 0,2 e 1,8. Foi avaliado o número de Nusselt (Nu). Os resultados mostraram que o número de Nusselt é dependente tanto da geometria quanto do índice de escoamento, e que há um ganho considerável no desempenho da transferência de calor com o uso de fluidos pseudoplásticos, comparado a fluidos Newtonianos, associado principalmente ao efeito *shear-thinning*.



Figura 15 – Representação do caso estudado por Bharti et al. (2008).

Fonte: Bharti et al. (2008).

No trabalho de Rao *et al.* (2011), foi realizado um estudo numérico sobre escoamento de fluidos pseudoplásticos em cilindros de seção quadrada (inclinação de 45°), conforme mostra a Figura 16, onde avaliaram os efeitos do índice de escoamento (n), número de Reynolds (Re) e número de Prandtl (Pr) na transferência de calor, através do número de Nusselt (Nu) e no comportamento do escoamento, via coeficiente de arrasto.





Fonte: Rao et al. (2011).

Chegou-se à conclusão de que o coeficiente de arrasto aumenta conforme o índice de escoamento diminui, proveniente da pressão exercida pelo fluido. Entretanto, conforme Re aumenta, o coeficiente de arrasto tende a diminuir. Já o número de Nusselt tende a aumentar

conforme *n* diminui, tendência encontrada no artigo anterior. Como consequência, há um aumento na transferência de calor. Com a combinação adequada de Re, Pr e *n*, é possível obter um ganho em torno de 100% na performance de transferência de calor, comparado ao uso de fluidos Newtonianos. Por fim, os autores comentam que o comportamento *shear-thinning* dos fluidos pseudoplásticos têm um efeito de estabilização no escoamento, resultando em um atraso na separação do fluido em relação ao corpo sólido.

Considerando escoamentos de fluidos não Newtonianos em bancos de tubos oriundos de uma diferença de pressão, o trabalho de Klein *et al.* (2017a) traz uma metodologia que utiliza conceitos da Teoria Construtal, como o número adimensional de Bejan (Be), o qual representa a diferença de pressão adimensional. Em escoamentos não Newtonianos, a viscosidade, partindo de uma taxa de deformação característica, é definida como parâmetro de referência. Porém, quando a vazão não é conhecida, a velocidade característica pode ser definida como a raiz quadrada da diferença de pressão dividida pela massa específica. A partir desta definição, pode-se definir uma viscosidade característica para qualquer modelo não Newtoniano, mesmo para aqueles que não apresentam uma viscosidade característica definida explicitamente na função de viscosidade, tal como o modelo Power-Law.

A aplicação da metodologia descrita anteriormente foi utilizada no estudo de Klein *et al.* (2017b), que aplicou o método Design Construtal (MDC) no escoamento de fluidos pseudoplásticos em bancos de tubos de cilindros elípticos (Figura 17). Neste caso, os autores buscaram maximizar a densidade de troca térmica, variando parâmetros geométricos como espaçamento entre cilindros (S_0) e razão de aspecto (b/a), bem como o índice de escoamento (n).

Figura 17 – Desenho esquemático de um problema de escoamento de fluido Não-Newtoniano oriundo de uma diferença de pressão em cilindros elípticos.



Fonte: Klein et al. (2017b)

Empregando a modelagem Power-Law, os resultados da metodologia empregada foram comparados com resultados da literatura e o desempenho foi extremamente satisfatório. Notou-

se ganhos no desempenho da transferência de calor com a utilização de fluidos *shear-thinning*, que são mais intensos conforme o índice de escoamento diminui, observação que concorda com os demais trabalhos apresentados. Por meio da aplicação do MDC, os autores encontraram a configuração geométrica ótima para cada caso e perceberam que cilindros com razão de aspecto baixo retornam maior densidade de troca térmica, decorrente da maior área de contato com o escoamento.

Utilizando condições similares às ilustradas na Figura 17, com condição de velocidade prescrita, Hermany *et al.* (2018) estudaram o escoamento de fluidos viscoplásticos, via modelo de Herschel-Bulkley, variando-se o índice de escoamento, aplicando o MDC na busca de uma geometria que maximizasse a transferência de calor, através do número de Nusselt (Nu) e minimizasse a diferença de pressão necessária para escoamento do fluido. Os resultados mostraram que tubos com razão de aspecto próximos a 1 (circulares) promoveram a melhor performance térmica, uma tendência para todos os fluidos estudados. Entretanto, a geometria que retorna a menor diferença de pressão é diferente, a depender do fluido, porém salientam que, para fluidos que apresentam o comportamento *shear-thinning*, o tubo deve ter uma razão de aspecto menor para retornar uma menor diferença de pressão.

Trivedi *et al.* (2020) estudaram o efeito do comportamento de fluidos pseudoplásticos e dilatantes, através da modelagem Power-Law, em um conjunto de quatro cilindros, conforme mostra a Figura 18. Os autores variaram parâmetros como número de Reynolds (Re), número de Prandtl (Pr), índice de escoamento (n) e o espaçamento entre os cilindros e avaliaram os efeitos na performance na transferência de calor via número de Nusselt (Nu) e efeitos no escoamento através do coeficiente de arrasto (Cd). Os autores perceberam que o espaçamento entre os cilindros (*gap*) tem grande influência na performance geral do escoamento, de modo que o coeficiente de arrasto pode ter uma variação de até 80%, superior ou inferior, também influenciados por Re, Pr e n. Quando o arranjo de cilindros é compacto, isto é, para distâncias entre centros S (ver Figura 16) pequenas (~0,1), o fluido tende a circular em torno destes, ao invés de escoar através dos espaçamentos. Percebeu-se que, para fluidos pseudoplásticos, o arrasto pode chegar a valores negativos em arranjos muito compactos. Na transferência de calor, os fluidos pseudoplásticos apresentaram a melhor performance, e percebe-se que Nu é dependente dos demais parâmetros físicos e geométricos.

Seguindo a metodologia proposta por Klein *et al.* (2017a), o trabalho de Severo *et al.* (2021) investigou o escoamento de fluidos viscoplásticos em bancos de tubos de cilindros circulares (b/a = 1), cujas condições de contorno são idênticas às do problema apresentado na Figura 17. Aplicando o MDC, os autores buscaram encontrar qual a distância entre tubos (S_0)

que conseguisse maximizar a densidade de troca térmica, para casos com número adimensional de Bejan (Be) e número adimensional de Bingham (Bn) variáveis. Os resultados obtidos mostraram que a densidade de transferência de calor é proporcional ao aumento de Be, e inversamente proporcional ao aumento de Bn. Nos quesitos geométricos, os autores observaram que S_0 é inversamente proporcional a Be, por conta de camadas limites menores e proporcional ao aumento de Bn.

Figura 18 – Escoamento de fluidos Não Newtonianos em um conjunto de quatro cilindros.



Fonte: Trivedi et al. (2020).

2.8 MÉTODO DESIGN CONSTRUTAL APLICADO A BANCOS DE TUBOS

O estudo de Bello-Ochende e Bejan (2005) é a principal referência na aplicação do método Design Construtal (MDC) aplicado a escoamentos em bancos de tubos. O trabalho foi pioneiro em propor a análise destes sistemas do ponto de vista do MDC. Neste trabalho, os autores aplicaram os conceitos da Teoria Construtal em escoamentos cruzados, oriundos de diferentes quedas de pressão, de fluido Newtoniano sobre bancos de tubos. As configurações utilizadas englobam sistemas de um, dois e, na evolução final, quatro graus de liberdade, correspondendo a cilindros de um, dois e três tamanhos diferentes, respectivamente, buscandose a maximização da densidade de troca térmica em cada caso. As principais contribuições encontram-se na utilização do MDC na evolução geométrica dos bancos de tubos e como isso pode acarretar a melhoria de tais sistemas, resultando em uma melhor performance geral. Além disso, o caso é aplicado a fluido Newtoniano (ar) e fornece resultados importantes de como este tipo de fluido se comporta diante da evolução do sistema. Por conseguinte, o trabalho deixa

questões em aberto, trazendo oportunidades de estudo, tal como a utilização de fluidos não Newtonianos e a utilização de cilindros de seção geométricas variáveis (elipses, quadrados).

A aplicação do MDC em bancos de tubos seguiu muitas vertentes. Além dos trabalhos já citados na seção anterior, menciona-se o trabalho de Razera *et al.* (2019). Os autores empregaram o escoamento de fluido Newtoniano (ar) sobre cilindros com variação na razão de aspecto, idêntico ao caso ilustrado na Figura 17, objetivando maximizar a densidade de troca térmica, variando número de Bejan (Be). Em geral, os resultados compartilham o que foi exposto anteriormente: quanto maior Be, maior é a performance na transferência e mais compacta é a geometria, isto é, a distância entre cilindros é menor, sendo mais eficiente em cilindros com razão de aspecto altas.

O trabalho de Teixeira *et al.* (2021) realiza uma investigação acerca de um conjunto triangular de corpos, representado na Figura 19, imersos em escoamento de fluido Newtoniano (ar), aplicando os conceitos do MDC. Objetivando maximizar a taxa de transferência de calor por unidade de distância (q') e minimizar o coeficiente de arrasto (C_d), a busca pela geometria ótima apresenta três graus de liberdade: S_T/D , S_L/D e H_1/L_1 .



Figura 19 – Geometria estudada por Teixeira et al. (2021)



Os autores conseguiram, por meio do uso do MDC, obter geometrias que com ganho em torno de 69% e 100% nas performances fluidodinâmica e térmica, respectivamente. As geometrias que conferem tais valores apresentam os seguintes valores: $H_1/L_1 = 2,0, S_T/D = 2,0$ e $S_L/D = 4,0$, para o menor C_d e $H_1/L_1 = 0,1, S_T/D = 4,0$ e $S_L/D = 2,0$, para o maior valor de q'. A Figura 20 ilustra as geometrias. Figura 20 – Casos ótimos referentes ao trabalho de Teixeira *et al.* (2021) – Superior: Campo de velocidades da geometria com menor C_d .; Inferior: Campo de temperaturas da geometria com maior q'.



Fonte: Adaptado de Teixeira et al. (2021)

É possível observar que a geometria do caso de menor C_d é um caso de conjunto escalonado de tubos, onde é possível enxergar, via contorno de velocidade (superior), a formação da região de esteiras. O comportamento do campo temperaturas (inferior) também dá indícios de formação de esteiras. Em geral, os autores conseguiram determinar as melhores configurações para cada objetivo, e perceberam que as mudanças no corpo frontal (H_1/L_1) tem grande influência nos demais parâmetros e indicadores de performance (C_d e q^2).

Feijó *et al.* (2021) realizaram estudo de escoamento de fluidos Newtonianos em microcanais, aplicando o MDC em uma geometria similar à bancos de tubos (Figura 21).

Figura 21 – Diagrama do estudo de escoamento de água em microcanais.



Fonte: Feijó et al. (2021).

Os autores buscaram analisar a influência da geometria nos processos de ebulição de um escoamento de água, por meio da taxa de transferência de calor (q) e queda de pressão (ΔP), e via MDC, determinaram os graus de liberdade do sistema, caracterizado pelas razões H_{11}/L_{11} e L_{12}/L_{11} . A busca pela melhor configuração foi feita através do método de busca exaustiva e a geometria que melhor apresentou performance térmica foi $H_{11}/L_{11} = 2,0$ e $L_{12}/L_{11} = 0,1$, enquanto para o desempenho fluido dinâmico, a melhor geometria foi $H_{11}/L_{11} = 0,1$ e $L_{12}/L_{11} = 0,1$. Ambas as configurações estão ilustradas na Figura 22.



Figura 22 – Geometrias ótimas no escoamento de água em microcanais – Superior: melhor performance térmica; Inferior: melhor performance fluidodinâmica.

Os autores perceberam que o impacto do primeiro bloco é mais influente na queda de pressão do que na transferência de calor. Diante da diferença entre os aspectos geométricos ótimos do bloco para cada situação, foi realizada uma otimização multiobjetiva de forma a encontrar a geometria de melhor desempenho para ambos os casos. O resultado da análise mostrou que a geometria apresenta razões geométricas iguais a $H_{11}/L_{11} = 0,1$ e $L_{12}/L_{11} = 0,1$, ou seja, a mesma geometria apresentada na melhor performance fluidodinâmica. Baseado nisto, os autores concluíram que os graus de liberdade adotados têm mais influência na performance fluidodinâmica do que na transferência de calor.

Em um estudo recente, Razera *et al.* (2022) analisam o resfriamento de dois cilindros elípticos, nos quais fluido Newtoniano (ar) está escoando (Figura 23), para diferentes números de Reynolds (Re). Aplicando os conceitos do MDC, os autores determinaram que as razões de aspecto de cada cilindro (H_1/L_1 e H_2/L_2) representam os graus de liberdade do sistema, cujo índice de performance é dado pelo coeficiente multiobjetivo (*C*), o qual leva em consideração as performances térmicas, avaliada pela taxa de transferência de calor adimensional (\check{q}) e fluidodinâmica, através da queda de pressão (ΔP), simultaneamente.

Fonte: Feijó et al. (2021).



Figura 23 – Diagrama representando o estudo do resfriamento de cilindros.

Fonte: Razera et al. (2022).

Através do uso da busca exaustiva, os autores chegaram a uma geometria ótima que alcançasse os objetivos da pesquisa. Os resultados mostraram que, os cilindros com maior razão de aspecto apresentaram a melhor performance térmica, enquanto que para performance fluidodinâmica, cilindros com menores razões de aspecto foram superiores. Além disso, o aumento de Re amplificou os efeitos térmicos no sistema e, na parte fluidodinâmica, o escoamento torna-se mais sensível à mudança de geometria. Por fim, por meio do coeficiente multiobjetivo, o design ótimo encontrado apresenta uma configuração intermediária entre os casos ótimos térmico e fluidodinâmico.

2.9 ANÁLISE GEOMETRICA E DESEMPENHO DE MICROMISTURADORES PASSIVOS

O campo de micromisturadores passivos apresenta inúmeros trabalhos na literatura, os quais contemplam testes experimentais, análises numéricas e, ocasionalmente, ambas aplicações simultâneas. Quando o foco se volta para otimização geométrica, a gama de trabalhos numéricos é superior as análises experimentais. Entretanto, muitos dos trabalhos experimentais fornecem aplicações excelentes para validação de modelos numéricos, propiciando o uso do CFD. Nesta seção apresenta-se os principais trabalhos que inspiraram o desenvolvimento da presente pesquisa.

A referência primordial deste trabalho é de Wang *et al.* (2012), que estudaram o desempenho de um micromisturador em formato "Y", e a partir de um design padrão, buscaram uma alternativa simples para melhoria na transferência de massa (Figura 24). É um trabalho numérico-experimental que oferece oportunidades tanto para verificação, quanto validação de modelos numéricos.



Figura 24 – Diferentes designs de micromisturadores passivos com baffles.

Fonte: Wang *et al.* (2012).

A proposta dos autores foi aprimorar a performance do micromisturador original (Design 1) adicionando *baffles* no canal principal, para que estes causem distúrbios no escoamento e, consequentemente, aumentem a mistura. Tanto os resultados experimentais, quanto os numéricos mostraram que, a adição deste recurso no micromisturador de fato melhorou a mistura, com aumento significativo na porcentagem de mistura, de 27% (Design 1) para 72% (Design 2), com um escoamento de Re = 1. O mesmo design também apresentou a maior mistura, 81%, para Re = 0,1. A Figura 25 apresenta perfis de concentração, obtidos experimentalmente pelos autores, que fornece um excelente parâmetro para validação de modelagens numéricas.

Figura 25 – Perfis de concentração obtidos através de dados experimentais.



Fonte: Wang, et al (2012).

Outro trabalho que apresenta análise numérica e experimental é o de Fang *et al.* (2012). Os autores estudam um modelo de micromisturador em formato "T", com câmaras de misturas com pás, acopladas no canal principal, conforme a mostra a Figura 26. Os resultados obtidos pelos autores mostraram que aumentando o número de unidades de mistura, o gradiente de concentração diminui, considerando Re = 0,29. Os dados apresentam, em termos de porcentagem de mistura, 51%, considerando 10 câmaras de mistura contra 21,9% considerando apenas 1.

O trabalho de Sarkar *et al.* (2014) traz uma análise numérica de vários designs de micromisturadores. Para cada design, os autores trazem informações sobre a mistura, bem como a diferença de pressão, um parâmetro que a análise numérica traz como benefício na avaliação dos designs. Em trabalhos experimentais, a diferença de pressão não é avaliada, muito por conta dos valores baixos necessários para movimentar o fluido, bem como a baixa escala dos equipamentos. Entretanto, análise da diferença de pressão traz um perspectiva de eficiência, e tende a ser um fator decisivo na escolha de um design otimizado.



Figura 26 – Micromisturador passivo com unidades de misturas com pás.

Fonte: Fang et al. (2012).

Ortega-Casanova (2017) traz uma continuidade no trabalho de Fang *et al.* (2012), propondo melhorias na geometria original (Figura 26). O autor utilizou as metodologias DOE e RSM para avaliar a influência do ângulo das pás das câmaras de mistura do dispositivo. Ao modificar os ângulos das pás, os autores conseguiram melhorar a mistura de 41% (original)

para 44%, considerando seis câmaras. Além disso, os autores trazem contribuições importantes em relação ao trabalho de Fang *et al.* (2012), como uma análise cautelosa na análise da malha computacional e a importância dela nos processos de mistura, bem como a análise da diferença de pressão do micromisturador quantificando sua eficiência.

A geometria proposta por Wang *et al.* (2012) foi aprimorada através do trabalho de Rahmannezhad e Mizborogi (2019). Os autores adicionaram obstáculos, que podem ser comparados à cilindros, de diferentes formas, no canal principal do micromisturador (Figura 27) que, combinados com os *baffles*, promovem ainda mais distúrbios no escoamento, buscando melhorar ainda mais a mistura dos fluidos. É um trabalho completamente numérico, no qual emprega-se as metodologias DOE e RSM para determinar o tamanho e a posição ideais dos obstáculos.





Fonte: Rahmannezhad e Mizborogi (2019).

Os autores avaliaram três parâmetros para determinar a configuração ótima do micromisturador: mistura, diferença de pressão e custo de mistura (razão entre pressão e vazão pela mistura). Uma otimização multiobjetiva foi conduzida, de forma a buscar uma geometria que alcançasse uma mistura elevada e baixo custo de mistura, para cada tipo de obstáculo. Os resultados mostraram que obstáculos quadrados apresentaram a maior mistura, mas também o maior custo de mistura. O menor custo foi alcançado com obstáculos diamante, mas a mistura foi inferior. Com o design proposto, os autores conseguiram aumento na mistura entre 25-33% com relação ao trabalho de Wang *et al.* (2012).

Kouadri *et al.* (2021) avaliam diferentes configurações de micromisturadores aplicados com fluidos não newtonianos. Para qualquer geometria apresentada, fluidos Newtonianos apresentaram melhores taxas de mistura, principalmente para Re baixos. Conforme Re aumenta para 50, a performance de fluidos Não Newtonianos é equivalente à de um fluido Newtoniano. Uma grande contribuição dessa pesquisa é a análise dos modelos de acoplamento utilizados nas simulações de misturas. Conforme mostra a Figura 28, os autores mostraram que a utilização de modelos QUICK ou de segunda ordem produzem resultados mais fiéis do que modelos de primeira ordem ou power-law.

Figura 28 – Comparação de modelos de acoplamento na mistura de um micromisturador.



Fonte: Kouadri et al. (2021).

O uso da Teoria Construtal no design de micromisturadores é encontrada no artigo de Cetkin e Miguel (2019). Com base em um design em forma de "Y", com e sem obstáculos, os autores avaliaram o ângulo dos canais de entrada, até um formato "T", comprimento e razão de diâmetro dos canais principal e secundários. Como parâmetro de quantificação da geometria, objetivou-se a maior mistura, e também uma nova perspectiva, que a impedância do escoamento, que deve ser a menor possível. As melhores taxas de mistura foram apresentadas para micromisturadores que apresentaram canais principais longos e com uma razão de diâmetro maior que os canais secundários. Os autores também observaram que, adicionando obstáculos, a impedância aumenta, mas o comprimento necessário para alcançar a mistura, quando comparado a uma estrutura sem obstáculos, é menor. Outro trabalho que merece destaque é o de Chen e Lv (2022), que empregaram a teoria fractal de Cantor na construção de obstáculos de um micromisturador passivo, objetivando encontrar, por meio de uma análise multiobjetiva, o design que resultaria em maior taxa de mistura e menor queda de pressão. Analisando diferente números de Reynolds (Red), foram combinadas técnicas de otimização como *Response Surface Analysis* (RSA) para definição das funções objetivo, e algoritmo genético multiobjetivo, para solução destas equações. Trata-se de um *blend* de ideias com uma perspectiva inovadora na construção e análise de micromisturadores. Os resultados mostraram que a utilização do algoritmo genético, através das curvas de Pareto, é uma excelente ferramenta na análise porcentagem de mistura x diferença de pressão de um micromisturador. Com o emprego desta técnica, os autores conseguiram aprimorar em 20.59% e 14.07% a taxa de mistura do micromisturador operando com Re iguais a 1 e 10, respectivamente. Além disso, foi possível observar que a aplicação da teoria fractal no design de micromisturadores provou ser uma alternativa eficiente, já que taxas de misturas elevadas e quedas de pressão baixas foram obtidas para os diferentes Re estudados.

A continuação do trabalho de Rahmannezhad e Mizborogi (2019) é feita pelos autores Mainochi, *et al.* (2022). Os autores, com base no problema da Figura 27, fizeram uso de redes neurais artificiais para otimizar o design do micromisturador, buscando uma solução ainda mais eficiente, de maneira mais rápida. Conforme é comentado no artigo, o uso de redes neurais de fato permitiu uma solução muito mais rápida na busca de uma geometria ótima, trazendo à tona uma alternativa para otimização de geometrias. A configuração ótima encontrada pelos autores aprimorou a mistura quando comparada à solução de Rahmannezhad e Mizborogi (2019), porém, a um custo muito maior de pressão. Esta última observação levantou questionamentos sobre o design obtido e serviu como estopim para propostas de melhoria e tal geometria (Tabela 1) serve como base no estudo desta dissertação.

Autor	Diam. Obs. [µm]	<i>Offset</i> [μm]	DP [Pa]	Taxa. Mistura [%]		
Rahmannezhad e Mizborogi (2019)	110,75	30	137,07	53,38		
Mainochi <i>et al.</i> (2022)	131	20	227,67	57,98		
Dados obtidos do artigo de Mainochi et al. (2022).						

Tabela 1 – Valores ótimos das geometrias dos artigos de referência.

3 METODOLOGIA

Para o estudo de bancos de tubos e micro misturadores foi utilizado o Método Design Construtal, a partir do fluxograma da Figura 29. O método pressupõe a definição de um sistema de tamanho finito, a identificação do fluxo o qual, quando facilitado, causa melhor desempenho do sistema, a definição de um indicador de desempenho, a definição de restrições e graus de liberdade, a avaliação de configurações e um método para a identificação das configurações de melhor desempenho. O método segue o fluxograma apresentado em, por exemplo, Borahel *et al.* (2022).



Figura 29 – Fluxograma da aplicação do método Design Construtal.

Fonte: Elaborado pelo autor. Adaptado de Borahel et al (2022).

3.1 METODOLOGIA – TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM BANCOS DE TUBOS

Passo 1: Definição do sistema de escoamento

Os sistemas utilizados no estudo estão esquematizados na Figura 30. O modelo representa a convecção forçada de um fluido não Newtoniano sobre tubos cilíndricos. Todos os cilindros apresentam temperatura de superfície constante, T_w , e o fluido entra no domínio com temperatura igual a T_0 . O escoamento é dirigido pelo diferencial de pressão ΔP . O tubo principal possui diâmetro fixo D_0 e distâncias à jusante, L_d , e à montante, L_u , baseadas nos recentes

trabalhos da literatura, definidas por $50D_0 e 6D_0$, respectivamente. O sistema, do ponto de vista da análise térmica, é dado pela região hachurada da Figura 30, o qual se baseia na hipótese de simetria nas linhas tracejadas. Tem-se três casos: (a) uma fila de tubos, (b) idem ao (a) mas com a adição de tubos secundários e (c) idem ao (b) mas com a adição de tubos terciários. Os parâmetros geométricos também estão mostrados na Figura 30.

Figura 30 – Configuração do problema e condições de contorno: (a) um grau de liberdade; (b) dois graus de liberdade; (c) quatro graus de liberdade.



Fonte: Elaborado pelo autor. Adaptado de Bello-Ochende e Bejan (2005).

Passo 2: Identificação do escoamento

Neste sistema, há o escoamento do fluido sobre os tubos. Porém, no Método Design Construtal, neste passo identifica-se o que escoa relacionado ao propósito do sistema. Portanto, o propósito do sistema é transferir calor, assim, o foco do método recai sobre o **fluxo de calor** a partir dos tubos.

Passo 3: Definição do indicador de performance

O indicador de desempenho utilizado para avaliar as geometrias é **taxa de transferência de calor**. Como se deseja aumentar a taxa de transferência de calor para um volume constante, utiliza-se como indicador de desempenho para o Método Design Construtal a densidade de transferência de calor adimensional, Q^* , definida pela Equação 17.

$$Q^* = \frac{q' D_0^2}{D_0 (D_0 + S_0) \kappa_f (T_w - T_0)}$$
(17)

onde, q' é a taxa de transferência de calor a partir das paredes dos tubos (por unidade de comprimento de tubo) e k é a condutividade térmica do fluido.

Passo 4: Definição das restrições do sistema

Conforme citado anteriormente, a restrição imposta é o volume do sistema, dado pela região hachurada na Figura 23, além das restrições físicas geométricas relacionadas a não sobreposição dos cilindros.

Com a definição das restrições, ficam definidos os espaços de busca para as melhores configurações, os quais são sumarizados:

- 1) Problema tipo A: $0,100 < S_0/D_0 < 0,600$
- 2) Problema tipo B: $0,200 < S_0/D_0 < 1,000$

 $0,050 < R_I/D_0 < 0,150$

3) Problema tipo C: $0,600 < S_0/D_0 < 1,000$ $0,050 < R_1/D_0 < 0,150$ $0.030 < R_2/D_0 < 0.065$

$$0.050 < K_2/D_0 < 0.005$$

$$0,250 < S_2/D_0 < 0,350$$

Passo 5: Determinação dos graus de liberdade

Os graus de liberdade para variar a configuração dos sistemas a fim de atingir o melhor desempenho são:

- 1) Problema tipo A (Figura 30(a)): um grau de liberdade: espaçamento entre cilindros, S_0 . Este é tratado de forma adimensional como S_0/D_0 .
- 2) Problema tipo B (Figura 30(b)): dois graus de liberdade: espaçamento S_0 e raio do cilindro secundário R_1 . Adimensionalmente, tem-se S_0/D_0 e R_1/D_0 .
- 3) Problema tipo C (Figura 30(c)): quatro graus de liberdade: espaçamento S₀, raio do cilindro secundário R₁, raio do cilindro terciário R₂ e o passo S₂. Adimensionalmente, tem-se S₀/D₀, R₁/D₀, R₂/D₀ e S₂/D₀.

Passo 6: Planejamento dos experimentos (simulações)

O delineamento experimental (DOE) foi realizado utilizando o método Central Composite Design (CCD), recomendada para a maioria das regressões que possam apresentar ajuste tanto de primeira ordem, ou superior. O CCD consiste em um modelo fatorial 2^k , um modelo axial e um ponto central, onde *k* representa o número de fatores. A distribuição dos pontos da técnica CCD permite, já com os primeiros experimentos (*runs*), ter uma ideia geral do comportamento da variável de resposta dentro do espaço experimental. Assim, utilizou-se o CCD para realizar um *screening* do espaço de busca (rastreamento) para encontrar a região de máximo. Determinada a região de máximo, realizam-se planejamentos CCD, considerando regiões sucessivamente mais restritas do domínio, até que se tenha o máximo global. O uso desta metodologia foi feito através da linguagem de programação *R Statistic*, via ambiente de programação *RStudio*. Na Tabela 2 são apresentados os valores utilizados na configuração do modelo CCD.

		Níveis						
Caso	- Variável	Low Axial Level	Low 2 ^k Level	Central Level	High 2 ^k Level	High Axial Level		
1*	S_0^* [-]	0,1*	0,2*	0,3* 0,4*	0,5*	0.6*		
2	S_0^* [-]	0,2	0,317	0,6	0,883	1		
	R ₁ * [-]	0,05	0,065	0,1	0,135	0,15		
3	S ₀ * [-]	0,6	0,7	0,8	0,9	1		
	R ₁ * [-]	0,05	0,075	0,1	0,125	0,15		
	R ₂ * [-]	0,03	0,0388	0,0475	0,0563	0,065		
	S ₂ * [-]	0,25	0,275	0,3	0,325	0,35		

Tabela 2 – Limites das variáveis independentes para determinação do campo experimental inicial para o problema de transferência de calor via CCD.

*Para o Caso 1, não é possível aplicar o método CCD por ter apenas uma variável independente. Portanto, os pontos foram distribuídos uniformemente.

Uma vez que os resultados dos experimentos são obtidos, uma análise é aplicada por meio da metodologia Response Surface (RSM). A superfície de resposta (otimização) é gerada a partir de um modelo de regressão capaz de descrever a relação entre as variáveis independentes e a variável de resposta (Q^*), o que confere uma estimativa do comportamento real do problema. A avaliação do modelo de regressão empregado em cada caso é feita pelo coeficiente de determinação (R^2) e pelo erro absoluto médio (*MAE*). Conforme visto na seção 2.4.3.1, estes parâmetros são calculados, respectivamente, considerando a variável de resposta, por:

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{np} (Q_{real,i}^{*} - Q_{prev,i}^{*})^{2}}{\sum_{i=1}^{np} (Q_{real,i}^{*} - \overline{Q_{real}^{*}})^{2}}$$
(18)

$$MAE = \frac{1}{np} \sum_{i=1}^{np} |Q_{real,i}^* - Q_{pred,i}^*|$$
(19)

onde *Q** representa a densidade de troca térmica (variável de resposta), e os subscritos *pred* e *real* representam os valores previstos pelo modelo de regressão e os valores experimentais, respectivamente; *n* representa o número de dados experimentais utilizados para a construção do modelo. A barra no denominador da equação 18 indica o valor médio da variável em questão.

É importante salientar que, por mais que um modelo tenha atingido os valores satisfatórios, também deve-se identificar o comportamento da superfície de resposta, de forma que os métodos estatísticos e a física do problema trabalhem juntos. É muito possível obter modelos estatísticos com ajustes ideais e erros mínimos, mas com um comportamento que foge do fenômeno físico. Da maneira análoga, um modelo com R^2 mais baixo pode gerar um resultado muito mais coerente. Diante disso, considera-se um modelo satisfatório aquele em que, os modelos estatísticos e os fenômenos físicos estejam em comum acordo.

No caso de um modelo insatisfatório, uma nova seção de experimentos é realizada na região de máximo (área de interesse) encontrada no modelo anterior. Para tal, utiliza-se o ponto máximo do modelo atual e, a partir dele, um novo experimento é realizado. Os resultados são adicionados ao banco de dados para que um novo modelo seja gerado e, a partir disso, um novo ciclo se repete até que um modelo satisfatório seja obtido. Como valores limites de satisfação de um modelo adequado, limitou-se R^2 de, no mínimo, 80% e *MAE* inferior a 5% do valor máximo.

Passo 7: Ambiente de experimentação (simulação numérica)

A determinação da densidade de transferência de calor para cada experimento, neste caso, as simulações numéricas, do DOE foi realizada utilizando um software de CFD, o ANSYS Fluent 2021R2 baseado no Método dos Volumes Finitos (PATANKAR, 1980).

3.1.1 Modelagem matemática

A problemática que envolve o escoamento de fluidos Não Newtonianos em bancos de tubos segue os princípios das equações de balanço, ou seja, conservação de massa, quantidade de movimento e energia. As equações governantes foram adimensionalizadas, respectivamente demonstradas por:

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = 0 \tag{20}$$

$$\frac{Be}{Pr}\left(u^*\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^*\frac{\partial u^*}{\partial y^*}\right) = -\frac{\partial P^*}{\partial x^*} + \mu^*\nabla^2 u^*$$
(21)

$$\frac{Be}{Pr}\left(u^*\frac{\partial v^*}{\partial x^*} + v^*\frac{\partial v^*}{\partial y^*}\right) = -\frac{\partial P^*}{\partial y^*} + \mu^*\nabla^2 v^*$$
(22)

$$Be\left(u^*\frac{\partial T^*}{\partial x^*} + v^*\frac{\partial T^*}{\partial y^*}\right) = \nabla^2 T^*$$
(23)

onde $\nabla^2 \acute{e}$ o campo tensorial, Be é o número de Bejan e Pr é o número de Prandtl, representados respectivamente por:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2}{\partial y^{*2}} \tag{24}$$

$$Be = \frac{\Delta P D_0^2}{\mu_c \alpha} \tag{25}$$

$$Pr = \frac{\mu_c}{\rho\alpha} \tag{26}$$

A forma adimensional para posição, velocidade, pressão, temperatura e viscosidade são definidas, respectivamente, pela Equação 27, e as demais variáveis geométricas do problema, representadas pela Equação 28:

$$(x^*, y^*) = \frac{x, y}{D_0}; \ (u^*, v^*) = \frac{u, v}{\underline{\Delta P D_0}}; \ P^* = \frac{P}{\Delta P}; T^* = \frac{T - T_0}{T_0 - T_w}; \ \mu^* = \frac{\mu}{\mu_c}$$
(27)

$$(L_u^*, L_d^*, D_1^*, D_2^*, S_0^*, S_2^*) = \frac{L_u, L_d, D_1, D_2, S_0, S_2}{D_0}$$
(28)

O parâmetro μ_c representa a viscosidade característica de um fluido Não-Newtoniano. Diferentemente de fluidos Newtonianos, cuja viscosidade é constante, em fluidos não Newtonianos a viscosidade é uma função da taxa de cisalhamento representada por $\dot{\gamma}$. Baseado nisso, a viscosidade característica é a viscosidade à taxa de cisalhamento característica, conforme introduzido por Klein *et al.* (2017a):

$$\mu_c = \mu(\dot{\gamma_c}) \tag{29}$$

$$\dot{\gamma_c} = \sqrt{\frac{\Delta P}{\rho D_0^2}} \tag{30}$$

Para a definição da função da viscosidade, representada na Equação 29, utiliza-se o modelo reológico de Ostwald-de-Waele, mais conhecido como modelo Power Law:

$$\mu(\dot{\gamma}_c) = K \dot{\gamma_c}^{n-1} \tag{31}$$

onde *K* é o índice de consistência do fluido e *n* é o índice de comportamento do fluido.

É importante observar que todos os parâmetros adimensionais são baseados em uma diferença de pressão, proveniente do número adimensional de Bejan, e que essa mesma diferença de pressão faz com que o fluido escoe. A parametrização adotada também foi utilizada por outros autores como (BELLO-CHENDE e BEJAN, 2005), (KLEIN *et. al*, 2017a) e (KLEIN *et. al*, 2017b). Outra observação importante é que, o mesmo valor do número adimensional de Bejan pode resultar em diferentes valores para ΔP , para diferentes valores de *n*.

3.1.2 Modelos de regressão

Os modelos de regressão empregados são caracterizados como modelos exploratórios e preditivos, pois o objetivo principal é identificar e entender os efeitos geométricos na densidade de troca térmica, ao mesmo tempo que sejam bem ajustados, de maneira que consiga se obter previsões precisas. Em geral, eles são constituídos por efeitos principais, isto é, a influência individual das variáveis independentes, e por efeitos de interação, que analisa os efeitos entre

duas ou mais variáveis independentes (FROST, 2019). Os valores dos coeficientes de regressão são calculados conforme a Equação 12.

O caso de um grau de liberdade apresenta apenas uma variável independente, ou seja, não existem termos de interação. Neste caso, buscou-se utilizar uma regressão polinomial, representada pela Equação 32.

$$Q^* = \beta_0 + \beta_1 S_0 + \beta_2 S_0^2 + \ldots + \beta_n S_0^x + \epsilon$$
(32)

Devido a presença de apenas uma variável independente e nenhum termo de interação, não se determinou uma ordem *x*, objetivando dar liberdade ao modelo e garantir o melhor ajuste.

Para o segundo caso, o qual envolve duas variáveis independentes, propôs-se utilizar um polinômio de ordem quatro, com um termo de interação, representado pela Equação 33.

$$Q^* = \beta_0 + \beta_1 S_0 + \beta_2 R_1 + \beta_3 S_0 R_1 + \beta_4 S_0^2 + \beta_5 R_1^2 + \beta_6 S_0^3 + \beta_7 R_1^3 + \beta_8 S_0^4 + \beta_9 R_1^4 + \epsilon$$
(33)

Este caso é uma modificação do modelo apresentado na Equação 9.2, porém com ordem maior, objetivando produzir resultados mais precisos e um melhor ajuste.

No último caso, que avalia quatro variáveis independentes, empregou-se um modelo polinomial de segunda ordem, com interações entre variáveis de segunda, terceira e quarta ordem, mostrado na Equação 34.

$$Q^{*} = \beta_{0} + \beta_{1}S_{0} + \beta_{2}R_{1} + \beta_{3}R_{2} + \beta_{4}S_{2} + \beta_{5}S_{0}^{2} + \beta_{6}R_{1}^{2} + \beta_{7}R_{2}^{2} + \beta_{8}S_{2}^{2} + \beta_{9}S_{0}R_{1} + \beta_{10}S_{0}R_{2} + \beta_{11}S_{0}S_{2} + \beta_{12}R_{1}R_{2} + \beta_{13}R_{1}S_{2} + \beta_{14}R_{2}S_{2} + \beta_{15}S_{0}R_{1}R_{2} + \beta_{16}S_{0}R_{1}S_{2} + \beta_{17}S_{0}R_{2}S_{2} + \beta_{18}R_{1}R_{2}S_{2} + \beta_{19}S_{0}R_{1}R_{2}S_{2} + \epsilon$$
(34)

Este é um caso que apresenta quatro variáveis independentes, o que aumenta significativamente os efeitos de interação entre as variáveis. Logo, para garantir a maior precisão e melhor ajuste, busca-se considerar todos os termos de interação no modelo de regressão.

3.1.3 Metodologia numérica

Para a solução das equações governantes descritas na seção anterior, o software comercial ANSYS FLUENT 2021 R2 foi utilizado, o qual utiliza o método dos Volumes Finitos (PATANKAR, 1980). O acoplamento pressão-velocidade empregado foi o Coupled, bem como funções de discretização de segunda ordem para pressão, momento e energia, com dupla precisão para todos os cálculos. Como critérios de parada, determinou-se valores de 10⁻⁶ para continuidade e momento e 10⁻⁸ para energia. Fatores de relaxação utilizados foram 0,5 para pressão e momento e 0,75 para energia.

No que concerne às condições de contorno, é utilizada pressão estática de valor ΔP , com fluido escoando a uma temperatura T_0 na face oeste (entrada); condição de simetria nas faces norte e sul; pressão estática igual a zero na face leste (saída); condições de parede não-deslizante e temperatura T_w nas paredes dos cilindros. O escoamento é considerado como laminar, externo, incompressível e em regime permanente.

3.1.3.1 Malha computacional

A malha computacional é constituída por células predominantemente quadrilaterais. Utilizou-se, no cilindro principal, um número predeterminado de divisões (Nm_M). A partir deste valor, determinou-se uma constante para parametrizar as divisões para os demais cilindros, definida por:

$$Km_{ele_M} = \frac{\pi D_0}{Nm_M} \tag{35}$$

onde D_0 é o diâmetro do cilindro principal e o subscrito *M* identifica a malha. Com a determinação da constante Km_{ele} , pode-se determinar o número de divisões para os demais cilindros por meio da seguinte equação:

$$Nm_{M_{cil}} = \frac{2\pi R_{cil}}{Km_{ele_M}} \tag{36}$$

A Equação 36 permite que o número de divisões dos cilindros se modifique de acordo com qualquer alteração geométrica e tenha o mesmo refino do cilindro principal, já que este último possui diâmetro fixo. Para cada refino de malha, tanto o número de divisões (Nm_M), quanto o tamanho de elementos foram refinados em 30%.

Para avaliação das malhas computacionais utilizadas neste trabalho, utilizou-se a metodologia *Grid Convergence Index*, de Celik (2008). Essa metodologia permite avaliar três configurações diferentes de malhas (refinos), uma grosseira, uma intermediária e uma refinada. No caso, aplicou-se o GCI para as três configurações de geometria ilustradas na Figura 30, cujas dimensões foram definidas pelo ponto central do *Central Composite Design*. Também se considerou no teste um fluido newtoniano (n = 1) e um número de Bejan de 10⁴, pois dentre todos os casos estudados, essa configuração apresentou o comportamento mais crítico com relação à malha. Os resultados do teste estão expostos na Tabela 3.

Os resultados do teste mostram, para o primeiro caso, que a malha tem muita pouca influência nos resultados, devido ao valor baixo do GCI. Neste caso, estaria seguro dizer que

qualquer uma das malhas estaria adequada para utilização. Entretanto, o valor do GCI aumenta conforme os cilindros são adicionados, indicando que a malha está influenciando mais.

GCI - Caso 1: So = 0,35 m							
Malha	N_{M}	N _{Mcil1}	N _{Mcil2}	$N_{\text{Elementos}}$	Q^*	GCI (%)	
Refinada (1)	286	-	-	136729	15,212	0.110/	
Interm. (2)	220	-	-	68533	15,227	0,117012	
Grosseira (3)	169	-	-	35832	15,256	0,23%23	
GCI - Caso 2: <i>So</i> = 0 , 6 m / <i>Ri</i> = 0 , 1 m							
Malha	N_M	N _{Mcil1}	N _{Mcil2}	NElementos	Q^*	GCI (%)	
Refinada (1)	286	29	-	164170	19,082	0.67%	
Interm. (2)	220	22	-	82962	19,133	1,000/	
Grosseira (3)	169	17	-	42670	19,201	1,00%23	
GCI - Caso 3: <i>S</i> ₀ = 0,8 m / <i>R</i> ₁ = 0,1 m / <i>R</i> ₂ = 0,0475 m / <i>S</i> ₂ = 0,3 m							
Malha	N _M	N _{Mcil1}	N _{Mcil2}	NElementos	Q^*	GCI (%)	
Refinada (1)	286	29	27	184181	22,688	0.00%	
Interm. (2)	220	22	21	93302	22,816	1 690/	
Grosseira (3)	169	17	16	47987	23,029	1,00%23	

Tabela 3 – Resultados do Grid Convergence Index para o problema de transferência de calor considerando n = 1 e Be = 10^4 .

No artigo publicado por Celik, não existe um valor característico para avaliar o valor do GCI. Severo *et.al* (2021) comenta que valores de até 5% são aceitáveis, baseado na experiência comum. Considerando isso, utilizou-se nesse caso um limite máximo de 2%. As malhas são apresentadas na Figura 31.



Figura 31 – Malhas computacionais utilizadas: (a) Um grau de liberdade; (b) Dois graus de liberdade; (c) Três graus de liberdade; (d) Vista aproximada da malha na região dos cilindros.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Mesmo que todas as malhas testadas tenham sido aprovadas no limite imposto, optouse pela utilização da malha 1 (refinada). O motivo está pelo fato de que, a região em torno dos obstáculos é de extrema importância para o objetivo deste trabalho e, com uma malha mais refinada, garante-se maior precisão nas simulações. Além disso, conforme os graus de liberdade aumentam, a diferença para as malhas mais grosseiras torna-se maior, de forma que o resultado simulado esteja mais distante do resultado real.

3.2 METODOLOGIA – DESIGN DE MICROMISTURADORES

Passo 1: Definição do sistema de escoamento

O sistema a ser analisado é um micromisturador, cujo desenho de referência foi proposto por Mainochi et al. (2022). Duas espécies distintas entram no dispositivo através de duas entradas separadas e misturam-se enquanto escoam na direção da saída, como mostrado na Figura 32(a). O micromisturador é dividido em duas seções principais: as entradas em forma de Y e o canal de mistura. Espécies diferentes entram no dispositivo com a mesma velocidade em cada entrada. O processo de mistura ocorre no canal de mistura, que tem 20 mm de
comprimento e 200 µm de largura. O canal é composto por estruturas semicirculares - *grooves* - e obstáculos circulares, responsáveis pela alteração da trajetória do escoamento e pelo aumento da mistura. A região entre cada dois *grooves* seguintes é considerada uma célula. Os *grooves* são separados por 1000 µm. A Figura 32(b) representa a geometria alternativa introduzida para melhorar o design de referência. A ideia é manter a área ocupada pelos obstáculos constante (e igual a 0,256 mm²), e aumentar o número de obstáculos da configuração inicial, na qual existe um total de 19. Na configuração de referência, os obstáculos estão descentrados em 20 µm, uma vez que este foi o melhor desenho encontrado por Mainochi et al. (2022). Em novas configurações, as posições dos obstáculos são definidas por distâncias horizontais e verticais entre eles, denotadas por *H* e *V*, respectivamente, seguidas por um número que representa o número de obstáculos em cada célula, em cada configuração. Os obstáculos são colocados em configurações escalonadas, centradas pela linha central do canal.

Figura 32 – Desenho esquemático da geometria de referência para o design de micromisturador: (a) Informações gerais sobre o design de referência; (b) Informações gerais sobre o design proposto.



Fonte: Elaborado pelo autor. Adaptado de Mainochi et al. (2022).

Passo 2: Identificação do escoamento

Neste sistema, há o escoamento de uma mistura sobre obstáculos. Porém, no Método Design Construtal, neste passo identifica-se o que escoa relacionado ao propósito do sistema. Portanto, o propósito do sistema é misturar fluidos, assim, o foco do método recai sobre a capacidade de **mistura** do micromisturador.

Passo 3: Definição do indicador de performance

O parâmetro utilizado para avaliar a geometria dos Micromisturadores é quantificar a **mistura** obtida, através **da porcentagem de mistura** (φ), que é medida pelo gradiente de concentração em uma seção vertical do canal principal. No caso, a posição de escolha é **na seção de saída do micromisturador**. Matematicamente, a porcentagem de mistura é expressa por:

$$\varphi = \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_{max}}\right) \cdot 100 \tag{37}$$

onde σ representa o desvio padrão e o subscrito *max* no divisor indica o desvio padrão máximo, que é 0,5 para mistura de duas espécies. O desvio padrão é calculado por meio da seguinte expressão:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N} \left(C_j - \overline{C}_j\right)^2}$$
(38)

onde *N* representa o número de pontos da amostra da seção vertical, C_j é a concentração em um ponto *j* da mostra e $\overline{C_j}$ é o valor médio da concentração, calculado por:

$$\overline{C}_j = \frac{\sum_{j=1}^N C_j}{N} \tag{39}$$

Além da porcentagem de mistura, também será avaliada a diferença de pressão (ΔP) entre a entrada e saída do micromisturador, para critério de comparação com os demais trabalhos da Tabela 1.

Passo 4: Definição das restrições do sistema

A restrição do sistema é a área ocupada pelos obstáculos e as dimensões do micromisturador, tal como descrito na Figura 32(a). Além disso, os valores foram determinados para que os obstáculos não se sobreponham, nem para que o espaço dentro dos *grooves* seja ocupado.

Passo 5: Determinação dos graus de liberdade

A proposta é manter a área ocupada por obstáculos constante e variar o número de obstáculos por célula. Para cada número de obstáculos por célula, os graus de liberdade são a distância horizontal e vertical entre dois obstáculos colineares. Estes são assinalados por $H \, e \, V$, respectivamente, seguidos pelo número de obstáculos numa célula para esse caso específico. Cada configuração, dada por um certo número de obstáculos por célula, e as suas distâncias, $H \, e \, V$, são replicadas ao longo do canal de mistura.

Passo 6: Planejamento dos experimentos (simulações)

O delineamento experimental segue o mesmo procedimento descrito no *Passo 6* da seção 3.1. Além disso, o caso estudado apresenta dois graus de liberdade e, por isso, os modelos de regressão representados pelas Equações 33 e 34 foram empregados. Consoante às variáveis independentes para determinação do campo experimental do problema, estas estão expostas na Tabela 4.

Tabela 4 - Limites das variáveis independentes para determinação do campo experimental inicial para otimização de micromisturador via CCD.

	Níveis									
Variável	Low Axial Level	Low 2 ^k Level	Central Point	High 2 ^k Level	High Axial Level					
V3 [µm]	50	57,32	75	92,68	100					
H3 [µm]	200	258,58	400	541,42	600					

Passo 7: Ambiente de experimentação (simulação numérica)

O ambiente de experimentação empregado é o mesmo descrito no Passo 7 da seção 3.1.

Passo 8: Design Evolutivo do sistema

A Teoria Construtal prevê que, para um sistema sobreviver, deve facilitar os fluxos, com o tempo, de forma a melhorar o seu objetivo. Neste caso, a concepção de um micromisturador deve ser alterada para que o seu objetivo, de misturar espécies (substâncias), seja melhorado. Com base neste princípio, foi proposto modificar a geometria da Figura 32(b), variando um dos graus de liberdade do sistema, o número de obstáculos por célula. Portanto, à medida que o número de obstáculos por célula aumenta, o seu diâmetro deve também mudar de modo a que as restrições relativas ao tamanho finito do dispositivo e à área constante ocupada pelos obstáculos sejam satisfeitas. Por conseguinte, o caminho de evolução proposto é ilustrado na Figura 33.





De acordo com o fluxograma na Figura 29, o processo é repetido de acordo com as etapas descritas acima, ajustadas a cada nível de evolução. Para as evoluções propostas, o único ajustamento necessário é a determinação do espaço de pesquisa para os novos designs; as outras etapas seguem o mesmo procedimento. Seguindo a metodologia e nomenclatura empregada nas etapas anteriores, a Tabela 5 apresenta o espaço de pesquisa das geometrias em cada grau de evolução, ou seja, com cada número de obstáculos por célula.

	Níveis										
Variável	Low Axial Level	Low 2 ^k Level	Central Level	High 2 ^k Level	High Axial Level						
V4 [µm]	70	77,32	95	112,68	120						
H4 [µm]	150	193,93	300	406,06	450						
V5 [µm]	80	85,86	100	114,14	120						
H5 [µm]	170	196,36	260	323,64	350						
V6 [µm]	70	77,32	95	112,68	120						
H6 [µm]	140	160,50	210	259,50	280						
V7 [µm]	70	77,32	95	112,68	120						
H7 [µm]	160	171,72	200	228,28	240						

Tabela 5 – Limites das variáveis independentes para determinação do campo experimental inicial para otimização das novas geometrias.

3.2.1 Modelagem matemática

Escoamentos de misturas são modelados numericamente a partir da solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e equação da convecção-difusão de espécies, apresentadas respectivamente na sequência. Diferentemente do primeiro problema, as equações modeladas aqui são dimensionais.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{40}$$

$$\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y}\right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \nabla^2 u \tag{41}$$

$$\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y}\right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu\nabla^2 v \tag{42}$$

$$u\frac{\partial C_i}{\partial x} + v\frac{\partial C_i}{\partial y} = D_i \nabla^2 C_i$$
(43)

onde ∇^2 é o campo tensorial, definido na Equação 24, C_i representa a concentração da espécie *i* e D_i representa o coeficiente de difusão.

3.2.2 Metodologia Numérica

Novamente, o ambiente de simulação utilizado é o mesmo descrito na seção 3.1.3. Contudo, modificou-se alguns parâmetros para readequação das soluções numéricas para o caso de misturas. Utilizou-se o modelo Coupled para acoplamento pressão-velocidade. Em relação às funções de discretização, o modelo PRESTO (*Pressure Staggering Option*) foi empregado para pressão, modelo QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*) para momento e Third Order MUSCL (*Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws*) para a equação de espécies. O uso destes modelos foi baseado nos resultados dos trabalhos de Kouadri *et al.* (2021) e Ortega-Casanova (2017), os quais apresentaram maior fidelidade quando comparados a dados experimentais. Os critérios de parada adotados foram, 10⁻⁶ para continuidade, 10⁻⁸ para o momento e 10⁻⁷ para espécie e os fatores de relaxação foram 0,5 para pressão e momento e 0,75 para espécie.

Com relação as condições de contorno, os fluidos escoam a partir de suas respectivas entradas (*inlet 1 e 2*) com velocidade prescrita V_{in} , calculada a partir de Re = 1 (Equação 44), bem como diferentes concentrações *C*. Na saída do micromisturador, é considerada pressão manométrica constante de 0 Pa e para o restante, condição de parede não-deslizante é empregada. O escoamento é considerado laminar, interno, incompressível e em regime permanente. A Figura 34 apresenta as condições de contorno na geometria.

$$Re = \frac{\rho W V_{in}}{\mu} \tag{44.1}$$

$$V_{in} = \frac{Re\mu}{\rho W} \tag{44.2}$$

W representa a espessura do canal principal, 200 µm. Neste problema, a massa específica (ρ) e viscosidade (μ) da **mistura** são, respectivamente, 998 kg/m³ e 8,9.10⁻⁴ Pa.s, enquanto que o coeficiente de difusão (D_i) é 1.10⁻⁹ m²/s.



Figura 34 – Desenho esquemático das condições de contorno adotadas no problema de design de Micromisturadores.

Fonte: Elaborado pelo autor

3.2.2.1 Malha computacional

A malha computacional adotada neste problema é mais simplificada em relação ao problema anterior. Neste caso, determinou-se um tamanho de elemento padrão para o canal principal, e, em torno dos obstáculos, aplicou-se um *inflation* para melhor organização da malha.

O valor adotado para o tamanho de elemento segue a metodologia *Batchelor's scale*, empregada nos trabalhos de Rahmannezhad e Mirbozorgi (2019) e Mainochi *et al.* (2022). Em resumo, a técnica é uma estimativa do tamanho de elemento máximo para problemas de concentração de espécies. O valor estimado do tamanho de elemento para os trabalhos em questão é de, no máximo, 6 µm.

No presente trabalho, devido à similaridade com os demais estudos, utilizou-se o valor de 6 µm como referência para a determinação do tamanho de elemento da malha e aplicou-se a metodologia GCI para avaliação de refinos subsequentes. Conforme reportado por Ortega-Casanova (2017) e Rahmannezhad e Mirbozorgi (2019), a malha apresenta grande influência, e configurações mais grosseiras tendem a subestimar o valor da mistura. Inclusive, conforme observados nos trabalhos citados, valores abaixo do determinado pelo *Batchelor's scale*, ainda podem apresentar diferenças significativas no resultado. Os valores do teste GCI são apresentados na Tabela 6.

		GCI 1 - Cer	ntral Point	- 3 obstácul	0S	
Malha	Qtd. elem.	Τ. elemento [μm]	φ[%]	<i>DP</i> [Pa]	GCI _{mistura}	GCIpressão
1	479406	3,078	66,895	165,347	2 21604	0.464%
2	293022	4,000	67,998	165,035	2,2107012	0,4047012
3	177530	5,200	70,179	164,554	4,208% ₂₃	0,701%23
		GCI 2 - Cer	ntral Point	- 4 obstácul	0S	
Malha	Qtd. elem.	Τ. elemento [μm]	φ [%]	<i>DP</i> [Pa]	GCI mistura	GCIpressão
1	505925	3,078	67,665	163,336	4.0000/	0.2660/
2	301705	4,000	68,930	163,026	4,000% ₁₂	0,366%12
3	179032	5,200	70,958	162,509	6,221% ₂₃	0,605%23
		GCI 3 - Cer	ntral Point	- 5 obstácul	OS	
Malha	Qtd. elem.	T. elem. [μm]	φ[%]	<i>DP</i> [Pa]	GCI _{mistura}	GCIpressão
1	489126	3,078	68,725	178,703	1.0010/	0.40004
2	296731	4,000	69,932	178,310	1,001%12	0,423%12
3	184516	5,200	71,852	177,702	2,616%23	0,699%23
		GCI 4 - Cer	ntral Point	- 6 obstácul	0S	
Malha	Qtd. elem.	T. elem. [μm]	φ[%]	DP [Pa]	GCI mistura	GCIpressão
1	497019	3,078	69,160	234,592		1 45004
2	301722	4,000	70,328	233,769	2,977% ₁₂	1,4/3%12
3	183993	5,200	72,301	232,712	5,003%23	1,919%23
		GCI 5 - Cer	ntral Point	- 7 obstácul	0S	
Malha	Qtd. elem.	T. elem. [μm]	φ[%]	DP [Pa]	GCI _{mistura}	GCIpressão
1	501822	3,078	69,311	251,968	1.02004	0 47504
2	303094	4,000	70,422	251,180	1,838%12	0,4/5%12
3	181865	5,200	72,787	249,719	3,781% ₂₃	0,869%23

Tabela 6 - Resultados do Grid Convergence Index para o problema de design de micromisturadores considerando Re = 1.

No teste de GCI realizado, considerou-se a análise da porcentagem de mistura (φ) na seção de **saída** e a diferença de pressão (*DP*) entre os *inlets* e a saída do micromisturador. Percebe-se que *DP* é pouco afetada pelos refinos da malha, visto que o máximo valor encontrado no teste, considerando todos os casos, foi de 1,919%, indicando que a influência da malha nesta variável é relativamente pequena.

Por outro lado, a influência da malha em φ é muito maior, chegando a 6,221%. Esse efeito da malha, conforme mencionado anteriormente, é observado em demais trabalhos da literatura. Uma das possibilidades para tal influência é na maneira de como a variável é determinada (Equação 37). Considerando que são apresentados na equação, tanto média, quanto desvio padrão, uma maior quantidade de pontos tende a produzir resultados mais dispersos. Isso significa que uma malha mais refinada terá mais pontos na seção de análise, influenciando na porcentagem de mistura. Diante do exposto acima, optou-se pela utilização da configuração mais refinada (1) para a malha computacional. As imagens das malhas estão expostas na Figura 35. Figura 35 – Malhas computacionais utilizadas no problema de design de Micromisturadores: (a) Malha em torno do obstáculo; (b) Malha entre obstáculos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

4 RESULTADOS

Esta seção é destinada à apresentação dos resultados dos problemas estudados, cuja metodologia foi descrita no capítulo anterior

4.1 ANÁLISE DO PROBLEMA DE TRASFERÊNCIA DE CALOR EM BANCOS DE TUBOS

O esquema de apresentação de resultados para este problema inicia com a verificação da modelagem matemática empregada e, na sequência, a análise de cada caso do problema é subdivido em diferentes seções.

4.1.1 Verificação da modelagem matemática

A verificação da modelagem matemática foi feita para fluidos Newtonianos e não Newtonianos. Primeiramente verificou-se o modelo Power-Law aplicado a fluidos newtonianos, considerando n = 1. Neste caso, os resultados foram comparados com os de Razera *et al.* (2019), o qual estudou bancos de tubos com variação na razão de aspecto, submetidos ao escoamento de fluido newtoniano com número de Prandtl de 0,72, para diferentes números de Bejan. Utilizou-se como referência a simulação numérica realizada com razão de aspecto igual 1, ou seja, um cilindro, resultando em uma geometria idêntica ao caso de um grau de liberdade deste trabalho. Os resultados estão mostrados na Figura 36, onde podese observar que, para os quatro casos apresentados, os valores ficaram muito próximos, com variação pouco acentuada, cerca de 2% de diferença percentual máxima, para o caso de número de Be = 10^4 , a mais perceptível entre os casos avaliados. Porém, o comportamento segue o padrão esperado.

Figura 36 – Gráfico referente à verificação da modelagem Power-Law para fluidos Newtonianos (n = 1 e Pr = 0,72).



Fonte: Elaborado pelo autor.

A segunda verificação foi feita com base nas simulações numéricas realizadas por Klein *et al.* (2017a), as quais avaliaram o grupo de parâmetros adimensionais utilizados na modelagem de fluidos não Newtonianos em problemas baseados em diferença de pressão. A geometria utilizada foi a mesma da verificação anterior. Foram utilizados três diferentes fluidos não Newtonianos, e, para cada fluido, parâmetros termo físicos foram variados, de forma a verificar se tal variação afetaria no resultado. Os resultados obtidos estão expostos na coluna amarela da Tabela 7 e as diferenças percentuais estão apresentadas na coluna verde.

Par	âmetro				Pará	àmetros			R	esultados	
Adin	nensior	ais			Dime	ensionais			Adi	mensiona	ais
Be	Pr	п	Δ <i>P</i> [Pa]	ρ [kg m ⁻³]	K [Pa s ⁿ]	Ср [J kg ⁻¹ К ⁻¹]	<i>k</i> [W m ⁻¹ K ⁻¹]	D [m]	<i>Q</i> * [Klein <i>et</i> <i>al</i> . 2017].	Q*	Dif (%)
10 ³	0,5	0,6	1,0	2000	0,014	50,0	1	1	5,53	5.56	0,71
			1,0	2000	0,014	500,0	10	1	5,53	5,56	0,71
			0,1	2000	0,003	158,1	1	1	5,52	5,56	0,85
10 ⁴	1	0,8	1,0	2000	0,005	223,6	1	1	14,91	15,01	0,63

Tabela 7 – Resultados comparativos referentes à verificação do modelo Power-Law para fluidos não Newtonianos

		1,0	2000	0,005	2236,1	10	1	14,91	15,01	0,63
		0,1	2000	0,001	707,1	1	1	14,91	15,01	0,63
10 ⁵	1,2 0,5	1,0	2000	0,002	774,6	1	1	32,04	32.07	0,09
		1,0	2000	0,002	7746,0	10	1	32,04	32,07	0,09
		0,1	2000	4e10 ⁻⁴	2449,5	1	1	32,02	32,07	0,16

Por meio da tabela, as diferenças percentuais são maiores para o menor número de Bejan (Be), e, conforme Be aumenta, a diferença diminui, chegando a menos de 0,1%. De qualquer forma, as diferenças apresentadas não passam de 1%, acarretando uma métrica extremamente satisfatória. Os resultados apresentados na verificação demonstram grande confiança na modelagem utilizada, mostrando-se adequada para aplicação neste trabalho.

4.1.2 Caso 1 – Um grau de liberdade

O primeiro caso analisado se trata do conjunto de tubos com um grau de liberdade, o espaçamento entre cilindros (S_0^*). Por se tratar de um problema de apenas uma variável independente, a superfície de resposta é representada via gráfico *plot*, representado pelas Figuras 37(a, b), os quais apresentam a variação da densidade de transferência de calor em função espaçamento entre cilindros, para n = 0,4, 0,7 e 1, para Be = 10^4 e 10^5 , respectivamente.

Nos gráficos apresentados, cada fluido estudado é representado por uma linha. Observase que para ambos Be, o fluido que melhor apresentou o maior Q^* foi o de índice de escoamento n = 0,4 e conforme o índice cresce, o desempenho é inferior. Também é possível identificar a diferença da geometria do ponto ótimo de cada fluido. Em geral, percebe-se que, quando o índice de escoamento aumenta, o espaçamento entre cilindros também tende a ser maior, tendência apresentada em ambos os Be. Por fim, conforme Be aumenta, identifica-se que os espaçamentos entre cilindros são menores para maximizar a densidade de troca térmica.



Figura 37 – Superfície de resposta referente ao Caso 1: (a) $Be = 10^4$; (b) $Be = 10^5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

É importante salientar que, cada linha do gráfico (Figura 37) foi construída com o modelo de regressão específico de cada fluido. A Figura 38 ilustra o plot de ajuste, o qual compara os valores previstos pelos modelos (pontos vermelhos) e os valores simulados, indicados pela linha, que representa o ajuste ideal. No canto inferior direito, são apresentados os valores de R^2 e *MAE* de cada modelo.

Percebe-se que todos os modelos, além de atingirem as exigências de satisfação, estão próximos do ajuste ideal, devido ao fato de conseguirem explicar, praticamente, qualquer variação da variável independente, devido ao elevado coeficiente de determinação (R^2). Além disso, os valores do *MAE* indicam que o modelo consegue prever valores precisos, com uma diferença muito pequena, em relação aos dados simulados. Na prática, isto pode ser observado pela distância dos pontos em relação à linha de ajuste: quanto mais pontos estão próximos dela, menor é o *MAE*. Por fim, os gráficos da Figura 37 apresentam o comportamento esperado, o que satisfaz o fenômeno físico do problema, o que adequa todos os modelos utilizados.



Figura 38 – Qualidade de ajuste: RSM (modelo) vs CFD (Simulados) referentes ao Caso 1: (a) Be = 10^4 ; (b) Be = 10^5 .

Fonte: Elaborado pelo autor.

A configuração de n = 0.4 e Be $= 10^5$ obteve o menor R^2 , maior *MAE* e a menor ordem. A modelagem deste caso foi, de certa forma, complexa, pois, aumentando-se a ordem, os valores de R^2 e *MAE* também aumentavam e diminuíam respectivamente. Porém, o comportamento da superfície de resposta ficava inadequado, apresentando oscilações, algo completamente fora do esperado, incoerente com o fenômeno físico. A utilização de uma ordem menor resultava em um ajuste menos preciso, e, consequentemente, um erro maior. Para corrigir estes problemas, seriam necessários mais pontos, aumentando assim a quantidade de simulações e o esforço computacional. Diante disso, optou-se por manter o modelo da forma atual, pois as condições de satisfação haviam sido alcançadas. Através da Figura 37 é possível identificar informações sobre densidade de transferência de calor máxima (Q^*_{max}) e o espaçamento ótimo ($S_0^*_{,opt}$) de cada fluido. Tais informações estão expostas na Tabela 8.

Be	n	So*, opt	Diferença entre S ₀ *, _{opt}	Q* _{max,} RSM	Q* _{max,} CFD	Dif
	0,4	0,255	-	22,41	22,37	0,18%
10 ⁴	0,7	0,319	+25,10%	17,98	17,97	0,06%
	1,0	0,366	+43,53%	15,24	15,21	0,20%
	0,4	0,217	-	43,30	43,21	0,21%
10 ⁵	0,7	0,229	+5,53%	36,47	36,43	0,11%
	1,0	0,273	+25,81%	30,66	30,60	0,20%

Tabela 8 - Tabela de valores máximos e otimizados referentes ao Caso 1.

Observa-se que, para ambos os números de Be, o valor da densidade de troca térmica máxima (Q^*_{max}) aumenta conforme o índice de escoamento (n) diminui, maximizando com o fluido "mais" pseudoplástico (n = 0,4). O que explica tal efeito é o fato de que, fluidos pseudoplásticos, quando submetidos a uma tensão cisalhante, a viscosidade diminui, de forma a facilitar o escoamento e, em consequência disto, aumentando a advecção, e, quanto maior a pseudoplasticidade, maior é este efeito. Ao aumentar o número de Be, percebe-se um aumento significativo em Q^* e diminuição no valor de $S_0^*,_{opt}$, indicando a tendência de que os tubos devem se aproximar conforme a diferença de pressão aumenta. É importante salientar e entender a importância do espaçamento entre os cilindros. Para isso, a Figura 39 ilustra as linhas de corrente ou *streamlines* (parte superior) e campos de temperatura (parte inferior) referente ao fluido Power-Law de n = 0,4, para Be = 10^4 e Be = 10^5 .





Fonte: Elaborado pelo autor.

Os contornos referentes a Be = 10^4 e $S_0^* = 0.1$, mostram que o fluido contorna todo o cilindro devido a sua baixa inércia, de forma que nenhuma região de esteiras seja formada. Nota-se que a temperatura do fluido atinge o valor máximo na metade do cilindro, e que o restante do cilindro não está mais afetando na troca térmica. Em termos de densidade de troca térmica (Q^*) e nos princípios da Lei Construtal, este é um efeito negativo, pois existe uma zona que não contribui na transferência de calor e está sendo considerada na região de estudo. Considerando a forma de adimensionalização da densidade de transferência de calor (Equação 17), espaçamentos menores são inversamente proporcionais à Q^* . Esta adimensionalização, ou seja, o significado da densidade de troca térmica, introduzida por Bejan (2000), quer dizer que a maior densidade ocorrerá na melhor distribuição dos tubos dentro de um volume disponível, onde escoamentos que não contribuem com a performance geral são eliminados. Ou seja, mesmo para um S_0^* baixo, como o de 0,1, obteve-se um valor muito baixo de Q^* , justamente pelo fato da presença de zonas que não estão contribuindo com o escoamento, resultando em um empacotamento ineficiente. Ao analisar o campo de temperaturas, as camadas limites térmicas são muito maiores que S_0^* , significando que a camada limite térmica dos cilindros adjacentes estão afetando intensamente, causando um efeito negativo na performance geral, pois parte do cilindro não está mais contribuindo na transferência de calor.

Já para o caso $Be = 10^4 e S_0^* = 0,6$, percebe-se que o aumento no espaçamento resulta no aumento da inércia do fluido, que consequentemente, resulta na criação de uma zona de recirculação à jusante do cilindro. O fato de aumentar o espaçamento para que o fluido escoa já é um bom indicativo, já que os efeitos advectivos são beneficiados. Porém, nota-se que as camadas limites térmicas são significativamente menores que S_0^* , ou seja, os cilindros adjacentes não estão influenciando na transferência de calor. Isso traz como consequência a presença de uma zona que não favorece com a troca térmica, representada pelo escoamento em cor azul escura, entre os cilindros.

Logo, baseado no que foi exposto nos parágrafos anteriores, o espaçamento ótimo é aquele que seja suficiente para o fluido escoar, beneficiando efeitos advectivos. Também deve ser suficiente para que as camadas limites térmicas dos cilindros influenciem positivamente na transferência de calor, de maneira que nenhuma zona indesejada seja criada, de forma a originar um "empacotamento ótimo" da geometria. Essa combinação de fatores pode ser observada na Figura 39, quando o valor de S_0 * é ótimo.

Foi constatado, por meio da Tabela 8 que, conforme Be aumenta, há uma tendência de aproximação dos cilindros adjacentes, já que o valor de $S_0 *_{,opt}$ diminui. O motivo desta redução está relacionado com a redução da espessura da camada limite térmica, a qual pode ser observada comparando-se os campos de temperatura entre os diferentes Be. Isso quer dizer que, para que as camadas limites dos fluidos adjacentes influenciem positivamente na troca térmica, o espaçamento deve ser menor. Outra constatação feita anteriormente é o aumento da taxa de escoamento, causada pela maior diferença de pressão, oriunda do número de Be, causando um efeito positivo global, já que a densidade de transferência de calor aumenta para todos os fluidos. Isso é uma consequência do aumento dos efeitos advectivos, ou seja, há mais transporte de propriedades pelo escoamento, o que é extremamente benéfico para a transferência de calor.

Um resumo do Caso 1 pode ser observado na Figura 40. Em geral, Q^* aumenta com a diminuição do índice Power-Law *n*, e quanto menor este índice, maiores são os efeitos pseudoplásticos do fluido. A pseudoplasticidade é um efeito no qual a viscosidade de um fluido diminui conforme as tensões de cisalhamento são maiores, e isso traz efeitos positivos ao escoamento, principalmente na transferência de calor. Os espaçamentos ótimos são influenciados pelo número de Be, com a tendência de diminuírem conforme a diferença de pressão aumenta, pois, a espessura da camada limite térmica é menor, de forma a intensificar a transferência de calor quando os cilindros se encontram mais próximos. Aumentando-se Be, também se aumenta Q^* , já que a taxa de escoamento também aumenta. Este é um efeito positivo

global, já que afeta todos os fluidos. Uma maior taxa de escoamento intensifica os efeitos advectivos, aumentando assim a performance geral.



Figura 40 – Densidade de transferência de calor e configuração ótima em função do índice de escoamento para o Caso 1: (a) $Be = 10^4$; (b) $Be = 10^5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.1.3 Caso 2 – Dois graus de liberdade

O segundo caso envolve a geometria com dois graus de liberdade: o espaçamento entre cilindros (S_0^*) e o raio do cilindro intermediário (R_1^*). A superfície de resposta resultante pode ser representada por um gráfico tridimensional e uma projeção bidimensional deste gráfico. A variável dependente (Q^*) é uma função das variáveis independentes ($S_0^* e R_1^*$), conforme mostrado na Figura 41, de forma que a interação entre elas resulta na superfície de resposta.

As superfícies de resposta projetadas, ilustradas na parte esquerda da Figura 41, permitem visualizar e identificar a influência das variáveis independentes na variável dependente em todo o campo de simulações, de modo que as linhas com números representam o valor de Q^* . A coloração mais clara representa o valor máximo, e, combinando a análise com a perspectiva (direita), é possível encontrar o pico da superfície de resposta, região que atende aos objetivos da pesquisa.



Figura 41 – Superfícies de Resposta referentes ao Caso 2: (a) $Be = 10^4$; (b) $Be = 10^5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Com a presença do cilindro intermediário na geometria, notou-se que a densidade de troca térmica ficou mais sensível a alterações geométricas, principalmente para fluidos pseudoplásticos. O modelo empregado permitiu acompanhar a mudança sutil de Q^* nas diferentes configurações geométricas, possibilitando a construção de superfícies de resposta que permitem a visualização geral do problema. No caso de Be = 10^4 e n = 0,4, houve a necessidade de expandir o espaço de simulação, pois, durante a etapa de criação do modelo, um dos pontos máximos localizou-se no limite máximo de S_0^* , levando a introdução de um ponto além do espaço de busca inicial, para que a região de máximo global fosse determinada pelo modelo. Logo, de acordo com a metodologia empregada, o ponto foi verificado e adicionado ao banco de dados para a criação de um novo modelo. Na Figura 42, estão mostrados os plots de ajuste que permitem avaliar o desempenho estatístico dos modelos empregados no Caso 2.



Figura 42 – Qualidade de ajuste: RSM (modelo) vs CFD (Simulados) referentes ao Caso 2: (a) Be = 10^4 ; (b) Be = 10^5 .

Fonte: Elaborado pelo autor.

Nota-se que, mesmo com o incremento do número de variáveis, ainda foi possível manter um ajuste elevado e, apesar do *MAE* ter aumentado em relação ao Caso 1, os valores estão satisfatórios para o propósito do trabalho, indicando adequação do modelo. Da mesma forma que no Caso 1, o modelo com menor R^2 e maior *MAE* foi para n = 0,4 e Be = 10⁵, o qual apresenta o maior Q^*_{max} até então. Os valores ótimos do Caso 2, previstos pelo modelo, estão expostos na Tabela 9.

Be	n	So*, opt	Diferença de S ₀ *, _{opt} comparado ao Caso 1	R 1*, opt	Q* _{max,} RSM	Q* _{max,} CFD	Dif	Aumento de Q* _{max} comparado ao Caso 1
	0,4	0,415	+0,160	0,123	30,43	30,35	0,26%	35,79%
10^{4}	0,7	0,475	+0,160	0,105	23,50	23,30	0,86%	30,70%
	1,0	0,500	+0,134	0,090	19,06	19,20	0,73%	25,07%
	0,4	0,220	+0,003	0,125	64,54	64,99	0,69%	49,05%
10^{5}	0,7	0,300	+0,071	0,115	50,66	50,94	0,55%	38,92%
	1,0	0,350	+0,077	0,105	40,48	40,60	0,30%	32,03%

Tabela 9 – Tabela de valores máximos e otimizados referentes ao Caso 2.

Como esperado, o maior valor de Q^* foi obtido para *n* mais baixo e Be mais alto. A presença do cilindro intermediário foi benéfica na performance geral, pois as áreas de cisalhamento e de troca térmica foram aumentadas, e com isso, a densidade de troca térmica foi superior ao Caso 1, obtendo-se um aumento em uma faixa de 25 a 49 %.

Um fato intrigante apresentando na Tabela 9 é a diferença de $S_0*_{,opt}$ comparado ao Caso 1, principalmente para n = 0,4 e Be = 10^5 , que é de apenas +0,003. Para Be elevado, o escoamento é maior, e o fluido com o menor n é cisalhado com maior intensidade, afinando-se o suficiente para que baixos espaçamentos S_0* sejam necessários. As superfícies de resposta da Figura 41 ilustram este fenômeno. Observa-se em todos os fluidos que, para Be = 10^4 , em valores baixos de S_0 , o cilindro praticamente não influencia no comportamento de Q* e seus efeitos não são aproveitados. Conforme S_0* aumenta a partir do ponto ótimo, os efeitos do cilindro começam a aparecer de modo que um R_1 ótimo também surja, de maneira que S_0* seja maior para maximizar Q*. A Figura 43 apresenta as *streamlines* (superior) e campo de temperatura (inferior) para n = 0,4, Be = 10^4 , $R_1* = R_1*_{,opt}$ e $S_0* = 0,2$, $S_0* = S_0*_{,opt}$ (Caso 1) e $S_0*_{,opt}$ (Caso 2).

Figura 43 – Streamlines (superior) e campos de temperatura (inferior) referente ao fluido Power-Law de n = 0,4, Be = 10^4 e $R_1^* = R_1^*$, opt nos espaçamentos S_0^* : (a) $S_0^* = 0,2$; (b) $S_0^* = S_0^*$, opt (Caso 1); (c) $S_0^* = S_0^*$, opt (Caso 2).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 43 (a), a camada limite térmica dos cilindros intermediários é maior do que o vão com o cilindro principal, influenciando na camada limite térmica deste último, o que acaba afetando a troca térmica na região. Além disso, devido à baixa pressão, o fluido necessita de mais espaço para escoar, e esta configuração não concede espaço suficiente, de modo que praticamente toda transferência de calor é realizada na parte frontal dos cilindros, necessitando apenas uma fração do restante do cilindro na transferência de calor. Reitera-se que, em termos de densidade de transferência de calor, é um péssimo indicativo, já que existem áreas que não estão colaborando com a troca térmica. Já na Figura 43 (b), o espaçamento ótimo encontrado

no Caso 1 ainda não é suficiente para aproveitar os efeitos do cilindro intermediário, pois ainda há uma influência negativa entre as camadas limites térmica dos cilindros, uma vez que o vão entre os cilindros ainda é pequeno para escoamento do fluido. Por fim, na Figura 43 (c), a qual ilustra a configuração ótima, pode-se observar que as dimensões de S_0 *, aliado à R_1 *, deve ser suficiente para que as camadas limites dos cilindros intermediários e cilindros principais adjacentes não influenciem negativamente na troca térmica, deve proporcionar um espaçamento adequado para o escoamento e que nenhuma região que não contribua com a transferência de calor seja originada.

Para Be = 10^5 , também há um aumento de $S_0^*,_{opt}$ com a inclusão do cilindro intermediário na geometria. Entretanto, para n = 0,4, ao contrário de Be = 10^4 , esse aumento muda de 63% (maior diferença geral) para apenas 1% (menor diferença geral). Observando as superfícies de resposta da Figura 41, o cilindro já apresenta um R_1^* ótimo, mesmo para S_0^* baixos, algo extremamente benéfico para o empacotamento ótimo da geometria. Além disso, a Tabela 9 mostra que R_1^* aumenta com Be, indicando novamente uma tendência de que os cilindros devem ficar mais próximos. A Figura 44 apresenta as *streamlines* (superior) e campo de temperatura (inferior) de Be = 10^5 , $S_0^* = S_0^*,_{opt}$ e $R_1^* = R_1^*,_{opt}$, para os fluidos de n = 0,4, 0,7 e 1.

Baseando-se no comportamento das streamlines, quanto menor o índice do escoamento (*n*), maior é a região de recirculação na parte traseira do cilindro, indicando maior quantidade de movimento do fluido. Conforme mencionado anteriormente, isso é uma tendência recorrente das características reológicas dos fluidos pseudoplásticos, que apresentam um aumento na viscosidade, proporcional à tensão de cisalhamento aplicada. Esta tensão de cisalhamento é intensificada devido ao incremento da área de cisalhamento (paredes) proporcionada pelo cilindro adicional. Logo, o aumento de $R_1*_{,opt}$ para maiores Be está diretamente associado a este efeito. Outro fator que propicia o aumento dos cilindros é o fato da presença de uma camada limite térmica é mais fina, de forma que os cilindros intermediários sejam maiores e o valor de $S_0*_{,opt}$ seja menor. Por fim, valores maiores de $R_1*_{,opt}$ também garantem o aumento da área de transferência de calor. O resumo geral do Caso 2 está exposto na Figura 45.



Figura 44 – Streamlines (superior) e campos de temperatura (inferior) para Be = 10^5 , $R_1^* = R_1^*, opt \in S_0^* = S_0^*, opt$ do Caso 2 referente aos fluidos: (a) n = 0.4; (b) n = 0.7; (c) n = 1.

Fonte: Elaborado pelo autor.

O Caso 2 envolve a transformação do sistema, através da inclusão de um semicilindro nos eixos de simetria da geometria, com o objetivo de aprimorar a transferência de calor na área de interesse do problema. Observa-se que quanto mais pseudoplástico é o fluido, maior deve ser o cilindro intermediário, de forma a garantir a densidade de troca térmica. Isso ocorre porque, além de um cilindro maior aumentar a área de transferência de calor, também se aumenta a área de cisalhamento, o que beneficia os fluidos pseudoplásticos. Fluidos newtonianos não se beneficiam de nenhum efeito que envolve efeitos de tensão de cisalhamento, logo o tamanho do cilindro tende a ser menor. Para Be menores, a diferença de pressão é menor, o que exige mais espaço para o escoamento. Por isso, S_0^* tende a ser maior, enquanto R_1^* é menor. Em contrapartida, quando a diferença de pressão é maior, os espaçamentos podem ser menores, já que a quantidade de movimento é maior.



Figura 45 – Densidade de transferência de calor e configuração ótima em função do índice de escoamento para o Caso 2: (a) $Be = 10^4$; (b) $Be = 10^5$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.1.4 Caso 3 – Quatro graus de liberdade

O último caso analisado envolve a geometria com quatro graus de liberdade, marcada pela inclusão de cilindros secundários de raio R_2^* , e o espaçamento entre estes cilindros e o eixo de simetria do problema, S_2^* . Os demais graus de liberdade do problema são os parâmetros S_0^* e R_1^* , previamente determinados. Diante disso, a densidade de troca térmica, Q^* , é dependente das quatro variáveis (S_0^* , R_1^* , R_2^* e S_2^*), de forma que o número de interações entre as variáveis independentes seja maior, totalizando seis neste caso.

Por se tratar de um caso de quatro dimensões, é necessário determinar uma posição fixa de duas variáveis, de forma realizar um corte, para gerar uma superfície de resposta das outras duas variáveis, o que contabiliza um total de 36 contornos entre todos os casos. Por se tratar de uma grande quantidade de imagens, optou-se pela apresentação dos contornos que mostram a relação entre as novas variáveis deste caso (S_2 * e R_2 *) no plano de corte que corresponde aos valores ótimos de S_0 * e R_1 *, bem como o caso inverso. Estes contornos estão apresentados na Figura 46.



Figura 46 – Superfícies de Resposta referentes ao Caso 3: (a) $Be = 10^4$; (b) $Be = 10^5$.



A presença de mais variáveis independentes resultou em mudanças significativas na modelagem do problema. Devido à maioria dos pontos máximos se localizarem nos limites de alguma das variáveis, houve a necessidade de expandir o espaço de simulação original (Tabela 2) para determinar uma região de máximo bem definida, e, consequentemente, encontrar uma configuração geométrica ótima, resultando em um aumento significativo na quantidade de pontos, comparado aos demais casos, para determinação do modelo definitivo. O desempenho estatístico do modelo definitivo pode ser observado por meio dos *fit plots* ilustrados na Figura 47.



Figura 47 – Qualidade de ajuste: RSM (modelo) vs CFD (Simulados) referentes ao Caso 3: (a) Be = 10^4 ; (b) Be = 10^5 .

Fonte: Elaborado pelo autor.

Percebe-se, pelas métricas apresentadas nos gráficos, que foi possível obter modelos com valores de R^2 elevados e *MAE* relativamente baixos, considerando o número de graus de liberdade e quantidade de simulações necessários. Comparado aos demais casos estudados, os resultados obtidos aqui são satisfatórios, principalmente devido à complexidade do problema. A ressalva vai para o caso Be = 10^5 e n = 0,4, que apresentou um desempenho inferior aos demais, devido ao baixo R^2 (0,80) e elevado *MAE* (2,98). Esta situação, que também foi observada no Caso 2, se deve ao fato da sensibilidade da densidade da troca térmica em relação

às mudanças geométricas. Neste caso, a presença de mais parâmetros geométricos, o fenômeno torna-se ainda mais sensível que no caso anterior, o que dificulta o ajuste do modelo matemático, resultando em previsões distantes do valor real (*outliers*). A presença de *outliers* faz com que o valor de R^2 diminua e, quanto maior a diferença entre os resultados reais e previstos, maior é o *MAE*. Entretanto, mesmo que os parâmetros estatísticos estejam abaixo das condições de satisfação, o modelo ainda é viável pelo fato de que, na região de interesse, os valores estão de acordo e os *outliers* estão em uma região fora do interesse desta pesquisa. Considerando que foi possível obter uma região ótima bem definida, com valores adequados, não foram realizadas modificações na modelagem. Os valores ótimos estão expostos na Tabela 10.

Be	п	S_0^* , opt	${R_1}^*$, opt	${old R_2}^*$, opt	S_2^* , opt	Q [*] max, RSM	Q [*] max, CFD	Q [*] max Diff	Q [*] _{max} em relação ao Caso 2	Q [*] _{max} em relação ao Caso 1
	0,4	0,750	0,075	0,056	0,250	37,85	37,96	0,29%	24,40%	68,91%
10 ⁴	0,7	0,780	0,075	0,034	0,280	28,32	27,92	1,43%	20,51%	57,48%
	1,0	0,850	0,075	0,039	0,300	22,89	22,14	3,36%	20,05%	50,22%
	0,4	0,440	0,083	0,068	0,256	86,84	87,89	1,19%	34,54%	100,56%
10 ⁵	0,7	0,500	0,087	0,061	0,270	65,09	65,41	0,49%	28,47%	78,48%
	1,0	0,560	0,090	0,054	0,283	50,39	50,58	0,38%	24,49%	64,36%

Tabela 10 - Tabela de valores máximos e otimizados referentes ao Caso 3.

Observa-se que, para o menor valor de Be, o raio do cilindro intermediário (R_1^*) permanece constante para todos os fluidos, enquanto os demais parâmetros se ajustam conforme o comportamento reológico de cada fluido. Já para maior Be, o raio do cilindro intermediário diminui conforme o aumento de *n*, enquanto o raio do cilindro secundário (R_2^*) aumenta. Os espaçamentos $S_0^* e S_2^*$ tendem a ser menores para fluidos pseudoplásticos, indicando que os cilindros devam ficar mais próximos um do outro, uma tendência já observada nos casos anteriores. Algo que chama a atenção é a diferença entre os máximos observados entre os diferentes Be. Como constatado, o aumento do número de Be resulta em maior quantidade de movimento, e adição de mais cilindros é benéfica e traz mais impactos para o escoamento. Ainda sobre a questão da densidade de troca térmica máxima, é extremamente significativa a melhoria deste último caso comparado aos demais, chegando a aumentar em mais de 100% a densidade de troca térmica em relação ao primeiro, para o fluido de melhor desempenho (n = 0.4). Isso mostra que, com a aplicação dos princípios da Teoria Construtal neste problema, tornou-se possível modificar e evoluir o sistema, resultando na melhoria do indicador de performance. As modificações geométricas deste caso podem ser observadas na Tabela 11.

Be	n	$S_{0^{*}.opt}$	Diferença de $S_{0^*.opt}$ comparado ao Caso 2	Diferença de S ₀ *. _{opt} comparado ao Caso 1	R ₁ *. opt	Diferença de R ₁ * _{. opt} comparado ao Caso 2
	0,4	0,750	+0,335	+0,495	0,075	-0,048
104	0,7	0,780	+0,305	+0,461	0,075	-0,030
	1,0	0,850	+0,350	+0,484	0,075	-0,015
	0,4	0,440	+0,220	+0,223	0,083	-0,042
105	0,7	0,500	+0,200	+0,271	0,087	-0,028
	1,0	0,560	+0,210	+0,287	0,090	-0,015

Tabela 11 - Comparação dos parâmetros geométricos ótimos em relação aos demais casos.

Nota-se que para o sistema evoluir, o espaçamento entre os cilindros principais (S_0^*) teve que aumentar consideravelmente. Considerando a Equação 17, esse aumento indica um aspecto negativo, pois quanto maior o espaçamento, maior será a área ocupada, o que resulta na redução da densidade de troca térmica, significando um 'empacotamento' menor do que o desejável. Entretanto, como foram adicionados cilindros intermediários e secundários dentro da área de estudo, o aumento de S_0^* é inevitável, o que garante espaço necessário para a 'evolução' destes cilindros. Como observado nos casos 2 e 3, esse aumento foi compensado pelo aumento das áreas de transferência de calor e cisalhamento oriundas dos cilindros, resultando na melhoria contínua da densidade de troca térmica. Na transformação do Caso 2 para o 3, o raio do cilindro intermediário (R_1^*) teve que ser reduzido, pois da mesma forma que S_0^* , houve a necessidade de reajuste, para garantir espaço aos cilindros secundários do último caso. É importante ressaltar que, para o último caso (quatro graus de liberdade), tanto S_0^* , quanto R_I^* se reajustaram considerando duas variáveis, $R_2^* \in S_2^*$, de forma a garantir liberdade para estes últimos se desenvolverem. O resultado destas transformações pode ser observado na Figura 48, a qual ilustra as streamlines (superior) e campos de temperatura (inferior) nas configurações ótimas de cada problema.





Analisando visualmente as configurações ótimas, é notável a diferença no espaçamento S_0^* entre os diferentes Be. Mesmo que adicionar os cilindros secundários provou ser benéfico para o aumento da densidade de troca térmica, a presença destes causa impacto no escoamento, pois, para menores valores de Be, maior é o espaço necessário para o fluido escoar, já que a diferença de pressão é menor. Isso faz com que a geometria ótima tenha que se ajustar para garantir este espaçamento. Logo, o resultado deste ajuste são cilindros intermediários e secundários menores – causando menos resistência ao escoamento, e, como mencionado, espaçamento S_0^* maior. O espaçamento S_2^* é levemente alterado entre os Be, mas a interação com S_0^* faz com que os cilindros intermediários e secundários fiquem mais próximos, para Be inferior, originando um vão, entre estes cilindros e o cilindro principal, que fornece mais espaço para o escoamento. Para Be superiores, este efeito já não aparenta ocorrer, uma vez que o fluido escoa com maior diferença de pressão, e, neste caso, o espaçamento necessário tende a ser

menor. Com isso, a geometria evolui de maneira que favorece o tamanho dos cilindros – resultando em maior área de troca térmica e de cisalhamento – e um menor espaçamento S_0^* , o que intensifica a densidade de troca térmica ao atingir um empacotamento ótimo. O resumo geral do Caso 3 pode ser observado na Figura 49.





O último caso estudado propõe uma segunda modificação no sistema original - de um grau de liberdade (S_0^*) – adicionando dois graus de liberdade, R_2^* e S_2^* , juntamente com R_1^* , oriundo da primeira modificação. Conforme o número de graus de liberdade aumenta, maiores são as interações entre as variáveis, originando uma dependência mútua entre elas para a buscar a configuração ótima. Para Be mais baixos, o raio do cilindro intermediário (R_1^*) permanece constante para todos os fluidos, indicando um tamanho ideal, o que dá espaço para que as demais variáveis possam se modificar. O raio do cilindro secundário (R_2^*) não apresenta uma tendência bem definida, reajustando-se mediante as demais variáveis, conforme o comportamento reológico do fluido muda. Os espaçamentos S_0^* e S_2^* apresentam uma relação direta, e tendem a aumentar conforme índice de escoamento aumenta - porém são menores quando Be aumenta. Ainda para Be maiores, nota-se que ambos os cilindros intermediário e secundário são maiores, e possuem uma relação direta: R_1^* tende a aumentar e R_2^* tende a diminuir conforme o valor de n cresce. Logo, de maneira geral, ao aumentar-se Be e n, os parâmetros S_0^* , $S_2^* \in R_1^*$ tendem a crescer e R_2^* tende a diminuir, o que significa um trocador de calor maior. A depender do espaço e/ou custo disponível, a utilização de um cilindro secundário pode ser inviável, pois, considerando o comportamento de Q^* , para ambos Be, há uma queda brusca de desempenho, conforme n aumenta, obrigando o uso de fluidos

pseudoplásticos. Entretanto, se nem espaço e custo são problemas, considera-se a utilização deste último caso, pois o ganho na densidade de troca térmica compensa.

4.2 ANÁLISE DO PROBLEMA DE DESIGN DE MICROMISTURADORES

Nesta seção, são apresentados um caso de validação e outro de verificação do modelo matemático empregado no estudo dos micromisturadores. Na sequência, apresenta-se a análise das geometrias propostas.

4.2.1 Validação da modelagem matemática

A validação do modelo matemático e numérico foi realizada pela comparação com resultados experimentais de Wang *et al.* (2012), cujo experimento foi mencionado e apresentado na Figura 25. A comparação com os resultados da simulação numérica utilizando a modelagem matemática descrita na seção 3.2.1 é mostrada na Figura 50.

Figura 50 – Comparação entre resultados numéricos do presente trabalho e resultados experimentais da literatura para o perfil de concentração em um micromisturador.



Fonte: Elaborado pelo autor.

No gráfico, confronta-se o perfil de concentração das duas espécies utilizadas no estudo. Como descrito na metodologia de Wang *et al.* (2012), os dados experimentais foram obtidos por meio de análise de imagens da mistura e, por diferença de cores, foi possível determinar a concentração em cada ponto da seção transversal do canal, a uma distância de 16 mm do ponto de junção dos fluidos, considerando Re = 1. Os autores fizeram experimentos com diferentes geometrias e comparou-se em relação ao caso de geometria idêntica à apresentada na Figura 32, sem a presença dos obstáculos (Design 3 da Figura 24).

O gráfico da Figura 50 mostra que há semelhança entre os perfis. Na região de baixa concentração é apresentada a mais acentuada diferença, onde a simulação numérica previu um valor próximo a 0,2, enquanto o experimento é em torno de 0,1. Essa diferença pode ser atrelada a inúmeros fatores como malha numérica, modelos de discretização empregados, ou até mesmo na obtenção dos dados experimentais. Nos trabalhos de Rahmannezhad e Mirbozorgi (2019) e Mainochi *et al.* (2021), essa diferença também é apresentada. É importante salientar que um perfil mais achatado, isto é, com uma diferença de concentrações menores (menor desvio padrão) indicam uma maior mistura. Baseando-se nos dados obtidos, a porcentagem de mistura, calculada por meio da Equação 37 resulta em 39,1% para o caso experimental e 41,7% para o caso numérico. No escopo do presente trabalho, o resultado obtido é satisfatório para validar o modelo.

4.2.2 Verificação da modelagem matemática

As geometrias propostas neste trabalho são comparadas com resultados de origem numérica. Por conta disso, além da validação apresentada na seção anterior, considera-se também certificar que a metodologia matemática adotada aqui está a par com as demais, e vice-versa.

Novamente, os trabalhos considerados para comparação são os de Rahmannezhad e Mirbozorgi (2019), denominado de Ref.1 e Mainochi *et al.* (2021), denominado Ref.2, conforme identificado na Tabela 12. As variáveis utilizadas como comparação foram a diferença de pressão (*DP*) e a porcentagem de mistura (ϕ) em função do diâmetro do obstáculo (*OD*) e *offset* (*OF*). Em relação ao primeiro artigo, comparou-se quatro casos distintos (incluindo o ótimo), enquanto que o último, comparou-se apenas o caso ótimo, onde o subscrito *ref* representa o resultado de referência, enquanto *CFD* representa o resultado obtido conforme metodologia descrita neste trabalho.

Tabela 12 – Resultados comparativos referentes a validação do modelo matemático de mistura.

Parâm	etros	Var	iáveis de	comparae	Dife			
Geome	tricos							Doforâncio
OD	OF	DP_{ref}	DP_{CFD}	$arphi_{\mathit{ref}}$	φ_{CFD}		(0.110	Referencia
[µm]	[µm]	[Pa]	[Pa]	[%]	[%]	DI dif	Ψdıf	
110,75	30	143,24	144,31	64,00	62,06	0,75%	3,03%	Ref.1

131	20	227,67	226,22	57,98	58,20	0,64%	0,38%	Ref.2*
90	0	141,27	142,47	54,81	53,66	0,85%	2,10%	Ref.1
105	22,5	151,14	152,96	62,92	61,00	1,20%	3,05%	Ref.1
90	30	108,69	109,09	60,14	58,87	0,37%	2,11%	Ref.1

Ref.1 : Rahmannezhad e Mirbozorgi (2019)

Ref.2 : Mainochi, et al. (2022)

*Os resultados extraídos desta referência foram obtidos a uma distância de 16 mm do ponto de junção entre os fluidos. Os demais resultados foram retirados na seção de saída do canal.

Os valores em negrito representam os casos ótimos. Nota-se que as maiores diferenças estão na porcentagem de mistura, principalmente em relação à Ref.1. Essa diferença já era esperada, principalmente por conta da malha numérica, que, conforme demonstrado pelos mesmos autores, apresenta influência em função do tamanho de elemento (refino), especialmente por conta do cálculo do desvio padrão, necessário para determinar a porcentagem de mistura. Já *DP* não apresenta diferenças significativas. Em relação à Ref.2, nota-se maior proximidade nos resultados, o que indica maior semelhança na malha e métodos empregados. Em geral, os resultados aqui expostos atendem o escopo do projeto.

4.2.3 Análise dos designs de micromisturador

Conforme descrito na seção 3.2, os casos estudados aqui representam geometrias de dois graus de liberdade: distância vertical entre obstáculos (*V*) e distância horizontal entre obstáculos (*H*). As variáveis de resposta utilizadas para avaliar as geometrias são a porcentagem de mistura (φ), e a diferença de pressão (*DP*), avaliadas na seção de saída dos micromisturadores. Para criação das superfícies, utilizou-se modelo de ordem 3 (Equação 34) no caso de três obstáculos e ordem 2 (Equação 33) para as demais. Diante disso, as superfícies de resposta da porcentagem de φ (esquerda) e *DP* (esquerda) são representadas em função de *H* e *V*, conforme mostra a Figura 51.

Com relação às superfícies da porcentagem de mistura, é possível notar que para os casos (a), (b) e (c), foi possível determinar uma região ótima definida, enquanto que para os casos (d) e (e), ficam mais próximos do limite máximo de H. Isso é um indício de que os obstáculos devem estar mais separados horizontalmente para garantir uma boa mistura.

Figura 51 – Superfícies de Resposta referentes a porcentagem de mistura (esquerda) e diferença de pressão (direita) para: (a) 3 obstáculos; (b) 4 obstáculos; (c) 5 obstáculos; (d) 6 obstáculos; (e) 7 obstáculos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Optou-se por um modelo de ordem 3 no primeiro caso devido ao melhor ajuste deste em relação à modificação das variáveis independentes, o que garantiu métricas mais precisas. Para os demais casos, houve pouca diferença entre as ordens, e, por isso, utilizou-se um modelo de ordem 2. Com relação às variáveis dependentes, nota-se que o distanciamento horizontal *V* apresenta maior influência em relação ao distanciamento vertical *H* na porcentagem de mistura, o qual aumenta conforme o número de obstáculos aumenta, uma vez que no caso (e), o efeito
de H é muito pequena, uma vez que o gradiente de φ está praticamente em direção de V. Em relação à pressão, para os casos (a) e (b), a tendência inverte, de forma que H tem efeito significativo, especialmente nos limites inferiores. Conforme H aumenta a partir da região ótima, o efeito de V se torna maior, uma vez que a partir deste ponto, para maiores de V, os obstáculos ficam mais separados, reduzindo consideravelmente DP. Para os demais casos, os efeitos de H e V são praticamente equivalentes. As superfícies de reposta analisadas podem ser avaliadas a partir dos gráficos na Figura 52.

Figura 52 – Qualidade do ajuste para porcentagem de mistura (esquerda) e diferença de pressão (direita): (a) 3 obstáculos; (b) 4 obstáculos; (c) 5 obstáculos; (d) 6 obstáculos; (e) 7 obstáculos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 52 mostra que foi possível obter modelos de elevado ajuste e precisão. O caso (b), referente a porcentagem de mistura, é o que apresentou métricas mais longínquas dos demais. Observa-se que os pontos vermelhos, tendem a ficar mais distantes da reta na faixa de valores inferiores ao máximo, o que contribui para um menor ajuste e maior *MAE*. Entretanto,

pontos próximos a região de interesse, ou seja, o máximo, estão muito próximos da linha, o que é satisfatório.

No caso (a), os pontos estão mais distantes da reta na região de máximo, porém, esta diferença é pequena, uma vez que o *MAE* é baixo. Os valores de *MAE* dos gráficos de *DP* possuem valores maiores que os de φ , por conta da diferença de escala, onde, novamente, o maior *MAE* é referente ao caso (b). É importante salientar que o mesmo modelo matemático foi utilizado para modelagem das superfícies de resposta de φ e *DP*. Em geral, nota-se que os modelos tiveram mais facilidade em acompanhar a variação de *DP* do que φ , indicando que a porcentagem de mistura é mais sensível a alterações geométricas. Em suma, os modelos obtiveram métricas suficientes para se adequarem ao escopo do trabalho. Os valores ótimos da porcentagem de mistura estão expostos na Tabela 13, com seu *DP* respectivo.

Cil.	$V_{n,opt}$ [μ m]	<i>H_{n,opt}</i> [μm]	Ømax,CFD [%]	DP _{max,CFD} [Pa]	Фтах,RSM [%]	DP _{max,RSM} [Pa]	φ dif.	DP dif.
3	86,8	311,6	67,12	165,48	67,35	162,98	0,34%	1,51%
4	91,6	287,1	67,93	174,01	67,88	177,73	0,07%	2,14%
5	96,5	251,0	68,90	191,01	68,80	192,14	0,15%	0,59%
6	93,9	262,6	69,55	195,82	69,60	197,26	0,07%	0,74%
7	98,2	240,0	70,30	208,49	70,26	211,60	0,06%	1,49%

Tabela 13 – Tabelas de valores máximos e ótimos dos designs de micromisturador.

Os dados de diferença percentual da tabela mostram que os valores obtidos pelo modelo estão próximos dos valores simulados, especialmente para a porcentagem de mistura. *DP* apresenta diferenças maiores, mesmo apresentando métricas mais precisas, conforme visto na Figura 52, mas ainda assim são satisfatórias.

Com relação às configurações geométricas ótimas, percebe-se uma tendência de aumento no espaçamento vertical e diminuição do espaçamento horizontal conforme o número de obstáculos aumenta. O espaçamento *H* diminui por conta da presença de mais obstáculos, o que limita a faixa de variação. É importante salientar que, mesmo com área constante, conforme o número de obstáculos aumenta, o diâmetro destes diminui. No que concerne ao aumento de *V*, este pode ser associado também a perda de carga do sistema, uma vez que, com mais obstáculos, maior é *DP*. Com isso, a geometria teve que evoluir de forma a fornecer mais espaço para o escoamento garantir a mistura. Por fim, nota-se que φ também aumenta conforme o número de obstáculos, da mesma forma que *DP*. Na Figura 53 estão ilustrados os contornos de concentração, nas configurações ótimas.

Figura 53 – Contornos de concentração nas regiões de entrada (esquerda) e saída (direita) do micromisturador: (a) 3 obstáculos; (b) 4 obstáculos; (c) 5 obstáculos; (d) 6 obstáculos; (e) 7 obstáculos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os contornos de concentração na região de entrada do micromisturador (esquerda) mostram que a região de mistura entre os dois fluidos (camada limite de concentração no eixo central) começa estreita, e conforme esta alcança o primeiro *groove*, acontece um leve distúrbio no escoamento, que ocasiona um aumento da região de mistura. Este se intensifica quando a mistura adentra a "seção de mistura" (arranjo de obstáculos), que causam distúrbios mais significativos no escoamento. Ao chegar no segundo *groove*, a espessura da camada limite é maior que no primeiro, relevando o efeito positivo dos obstáculos e, conforme o escoamento avança, é nítido o aumento da camada limite de concentração.

Na seção de saída, nota-se que a interface do eixo central está verde, indicando 100% de mistura, ou seja, uma intensidade de concentração equivalente entre as espécies, conforme pode ser analisado pela barra de cores. Além disso, comparado à região inicial, não existem mais regiões de uma espécie única (coloração vermelha ou azul escuro), e sim misturas "concentradas", ou seja, uma mistura onde uma espécie se sobressai sobre a outra.

É nítido que, com a presença de mais obstáculos, o escoamento tem mais distúrbios, para desviar dos obstáculos, o que em tese seria um efeito significativo para melhoria da Para determinação de um design ideal, os dados da Tabela 13 fornecem informações suficientes para tal, pois, ao introduzir o conceito de *Mixing Energy Cost (MEC)*, ou seja, o custo energético necessário para misturar, revela-se um parâmetro intuitivo, que enfatiza a questão de que um bom design de micromisturador é associado a uma elevada porcentagem de mistura e baixa diferença de pressão. O *MEC* é representado matematicamente por:

$$MEC = \frac{Q_v DP}{\varphi} \left[\frac{W}{\%_{mix}} \right]$$
(45)

onde Q_v representa a vazão volumétrica, em m^3/s . Considerando que a vazão é a mesma para todos os designs, na determinação do *MEC* considera-se a razão entre *DP* e φ , em *Pa/%_{mix}*. Com isso, considerando os designs deste trabalho, e os de referência (Tabela 12), a Tabela 14 ilustra o comparativo geral.

Caso	φ[%]	<i>DP</i> [Pa]	MEC [Pa/% _{mix}]	Diferença MEC [%]
Ref. 1 _{opt}	62,06	144,31	2,33	-
Ref. 2 _{opt}	58,20	226,22	3,87	-
3 obstáculos	67,12	165,48	2,47	6,01%
4 obstáculos	67,93	174,01	2,56	3,65%
5 obstáculos	68,90	191,01	2,77	8,20%
6 obstáculos	69,55	195,82	2,81	1,44%
7 obstáculos	70,30	208,49	2,97	5,69%

Tabela 14 – Comparação do Mixing Energy Cost (MEC) entre os designs avaliados.

Para o sistema em análise, menores valores de *MEC* representam melhor desempenho. Neste caso, as referências adotadas apresentam o melhor e o pior caso. Considerando o melhor caso (Ref.1), os valores obtidos para os designs propostos nesse trabalho são competitivos. Com o caso de 3 obstáculos, foi possível aumentar, em relação a Ref.1, em 8% a mistura, contra um aumento de 6% do *MEC*, o que é um indício positivo. O design com 4 obstáculos apresentou um aumento de 9,46% a para a mistura e 9,87% para o *MEC*, algo que já se torna indesejável. Nos casos de 3 e 7 obstáculos, há um aumento de 4,74% em φ , contra 20,24% no *MEC*, mostrando que o primeiro design (3 obstáculos), em termos de *MEC*, é o mais eficiente. Além disso, considerando o caso da Ref.2, cujo resultado foi obtido a uma distância de 16 mm do ponto de junção, o design com 3 obstáculos obteve uma porcentagem de mistura de 57.10%, com *DP* de 136.14 Pa na mesma região, uma redução de 39.82%.

Na última coluna da tabela é apresentada a diferença entre *MEC* do design correspondente em relação ao anterior. A transição entre 5 e 6 obstáculos apresentou uma diferença de apenas 1,44%, enquanto que a maior diferença é entre o design de 4 e 5 obstáculos. Tais métricas apresentam um indicativo que se aumentou muito a diferença de pressão global, para pouca porcentagem de mistura, o que não compensa o uso deste design (5 obstáculos).

A análise da diferença de pressão em micromisturadores é algo que pode ser facilmente realizado utilizando o CFD. Mesmo que a pressão em microescala seja relativamente baixa, foi apresentado um parâmetro importante para avaliação da eficiência de designs de micromisturadores.

Conforme as substâncias utilizadas no processo de mistura, existe a possibilidade de ocorrer reações químicas que podem culminar com a geração de particulados no escoamento. Conforme o micromisturador é utilizado, os particulados podem se acumular em locais de escoamento menos intenso, dificultando cada vez mais a passagem de fluido, o que demanda maior energia no processo. Com isso em mente, designs que oferecem menor resistência (*DP*) podem atenuar este efeito. Este princípio e totalmente associada nas perspectivas da Teoria Construtal de facilitação do escoamento e garantia de sobrevivência do sistema. Na Figura 54 estão expostos os campos de pressão para os casos de 3 e 7 obstáculos, considerando a mesma escala.





Fonte: Elaborado pelo autor.

A pressão, em ambos os casos, não apresenta nenhuma região específica de elevado gradiente, apresentando uma distribuição praticamente uniforme ao longo da direção do escoamento. Esse comportamento é benéfico para ambos os designs já que, pelas imagens, não é possível detectar nenhuma região de risco para obstruções. O comportamento da diferença de pressão é apresentado graficamente na Figura 55.



Figura 55 – Perfil de queda de pressão ao longo do canal principal.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Os gráficos mostram que a queda de pressão é muito mais íngreme, globalmente, para o design de 7 obstáculos. Contudo, a distribuição é mais uniforme do que o design de 3 obstáculos. A imagem também traz a informação da diferença de pressão em cada unidade de mistura. A princípio esta diferença parece ser relativamente pequena. Entretanto, a cada vez que o fluido passa por uma unidade de mistura, ele precisa vencer tal perda de carga. Considerando que ambos os designs consistem em 19 unidades de mistura, a diferença de *DP* global entre eles tende a aumentar linearmente conforme o número de unidades aumenta.

As regiões onde a pressão apresenta um comportamento praticamente constante representam a seção entre grooves e arranjos. Nota-se que para o caso de 3 obstáculos, a região de pressão constante é maior, devido a maior distância entre os arranjos de obstáculos. Por conta disso, a diferença de pressão na unidade de mistura é levemente mais íngreme. Tal fenômeno pode indicar aspectos tanto positivos quanto negativos. O aspecto positivo é que, essa maior distância entre groove e arranjo de obstáculos contribui globalmente para *DP* inferiores, já que pouca energia é necessária para o fluido escoar, já que essas regiões são predominantes neste design. Contudo, o comportamento mais íngreme na região no arranjo de obstáculos indica maior perda de carga local. O gráfico da Figura 56 apresenta informações a respeito da unidade de mistura.



Figura 56 – Queda de pressão local para cada unidade de mistura.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Conforme demostrado nos gráficos, o comprimento real de cada unidade de mistura se difere, pois com mais obstáculos, o espaçamento ocupado é maior. Neste sentido, as perdas de carga localizadas estão mais bem distribuídas. O comprimento de cada unidade de mistura está exposto na Figura 56, indicadas pela variável *x*.

Analisando a diferença de pressão em função do comprimento, é possível determinar o quanto de pressão é necessário que o escoamento deve vencer ao passar por cada unidade de mistura, através da razão DP_n/x_n . Logo, para o caso de 7 obstáculos, a métrica obtida aproximada é de 13,45 Pa/mm contra 21,08 Pa/mm para o caso de 3 obstáculos. Isso traz a informação de que, a unidade de mistura de 3 obstáculos pode estar mais suscetível a obstruções oriundas de particulados de reações entre misturas ou de qualquer outra natureza, prejudicando a funcionalidade do equipamento. Sob esta perspectiva, é possível dizer que a unidade de mistura do design de 7 obstáculos é mais eficiente. A Figura 57 ilustra os contornos de

magnitude de velocidade e streamlines nas unidades de mistura das configurações ótimas dos designs com 3 e 7 obstáculos.



Figura 57 – Campos de magnitude de velocidade com *streamlines*: (a) 3 obstáculos; (b) 7 obstáculos.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados mostram que nenhuma região de recirculação foi originada, por conta da baixa quantidade de movimento (Re = 1) em que o escoamento se encontra. Levando em conta o campo de velocidade, o escoamento encontra-se ligeiramente mais rápido na região de mistura (coloração vermelha), no design (a). Aliando isto com o movimento das *streamlines*, a região entre os obstáculos é onde a velocidade muda de direção, justamente por conta da presença dos obstáculos, fazendo com que uma substância mova em direção a outra, essencial para aprimoramento da mistura.

É notável a semelhança entre os contornos de velocidade e de concentração (Figura 53). As regiões de maior velocidade são as regiões nas quais a mistura está completa (100%). Por ter menos distúrbios no escoamento, o design com três obstáculos compensa em uma menor resistência, o que resulta em velocidade maior na região de mistura, deixando-a mais intensa. Em contrapartida, o design de sete obstáculos oferece mais obstáculos, de forma que os fluidos mudem de direção mais vezes, e tenha um desempenho superior na porcentagem de mistura. Outra questão a ser observada em ambos os designs são as regiões de baixa velocidade, presentes especialmente nas partes superior e inferior do canal. De acordo com a Teoria Construtal, tais regiões não agregam para o propósito do sistema, e o afastam de um "empacotamento ótimo". Estas regiões superior e inferior pouco contribuem na mistura das substâncias pois a velocidade é extremamente baixa, e a interface entre uma e outra é longínqua. Logo, essas zonas estagnadas se misturam com a região central, puramente por difusão, resultando em um processo de mistura muito mais lento, originando um elevado gradiente de concentração e, consequentemente, menor porcentagem de mistura.

Um resumo geral dos casos estudados neste capítulo está exposto na Figura 58. O gráfico (a) apresenta o desempenho dos designs avaliados e percebe-se que o aumento da porcentagem de mistura é proporcional ao aumento da diferença de pressão. Enquanto que a porcentagem mistura tende a aumentar uniformemente com o aumento dos obstáculos, *DP* apresenta um comportamento menos organizado, com seções íngremes, como a transição dos casos 4 e 5 obstáculos e 6 e 7 obstáculos. Os melhores designs são aqueles em que a distância vertical entre os pontos de φ e *DP* são maiores, visto que é possível identificar a inclinação da curva: quanto mais inclinada a curva de φ em relação a *DP*, mais eficiente é o design. Visualmente, os casos que apresentam a maior distância vertical entre os pontos é o de 4 e 6 obstáculos.

O gráfico da evolução geométrica (b) mostra que H e V possuem efeito oposto conforme o número de obstáculos aumenta. Assim, uma quantidade de obstáculos exige que o espaçamento horizontal (H) seja reduzido para que o conjunto caiba no espaçamento desejado. O aumento de V indica que os obstáculos ficam mais distantes verticalmente, compensando o espaço reduzido de H, o que garante espaço para a mistura escoar. Contudo, o design de 6 obstáculos apresenta ser um caso que foge do padrão, já que o espaçamento vertical teve uma queda, enquanto que o espaçamento horizontal teve um aumento em relação ao caso anterior. Isso trouxe aspectos positivos para o design, já que, como identificado no parágrafo anterior, o aumento da porcentagem de mistura compensou o aumento da diferença de pressão global. Uma vez que se identificou o design de 5 obstáculos como o menos eficiente, pode ser que este tenha sido um ponto fora da curva, e não o de 6 obstáculos.

O gráfico (c) apresenta o comportamento do *MEC* (em azul), comparado com as demais referências (verde e vermelho). Neste caso, identifica-se como melhores designs aqueles em que o *MEC* se mantém praticamente constante em relação ao caso anterior. Da mesma forma que no gráfico (a), os casos com 4 e 6 obstáculos mantém um *MEC* praticamente constante em

117

relação ao design anterior, o que fornece mais opções de escolha. Em geral, todos os designs propostos ficaram abaixo da Ref.2 (linha vermelha), a qual originou a geometria de referência.





Fonte: Elaborado pelo autor.

Por fim, o gráfico (d) apresenta a diferença de pressão local entre os designs estudados. Novamente pode ser observado que o design 5 apresenta um comportamento indesejado em termos de (DP/x) mantendo-se praticamente constante em relação ao caso anterior, onde o ideal seria uma redução mais significativa. Tendência similar é apresentada entre os designs 6 e 7. Conforme visto nas análises anteriores, a perda de pressão local é um aspecto negativo no design de um micromisturador e deve ser minimizada. A variação mais intensa é entre os designs com 3 e 4 obstáculos. Isso pode ser interpretado da seguinte forma: não há um empacotamento ideal da unidade de mistura do primeiro design, já que a pressão apresenta maiores gradientes nesta região. Nos princípios da Teoria Construtal, a geometria ideal é aquela que melhor distribui os gradientes.

Considerando os objetivos do trabalho, os designs propostos para os micromisturadores atenderam o objetivo, e, de acordo com a variável mais importante (φ ou *MEC*), um dos designs pode ser selecionado. Contudo, é importante salientar que sempre haverá um design que apresentará melhor performance que outro, em algum aspecto específico. Neste sentido, é de fundamental importância analisar os parâmetros de cada design para escolher aquele que mais se adequa a sua função.

5. CONCLUSÕES

Este trabalho trouxe como foco principal a aplicação do Método Design Construtal e sua importância na análise de problemas de engenharia. Duas classes de problemas foram abordadas: a densidade de transferência de calor (Q^*) de fluidos pseudoplásticos em fileiras de tubos e o design de micromisturadores.

No primeiro problema, tratou-se de um sistema com uma única fileira de tubos e, neste caso, o grau de liberdade associado é o espaçamento entre cilindros. O segundo caso consistiu na adição de cilindros secundários em posições fixas, objetivando aumentar a área de transferência de calor. Nisso, avaliou-se o diâmetro destes novos cilindros, e a influência deles no espaçamento entre os cilindros principais. O último caso analisado propôs a adição de conjunto de cilindros terciários, com o mesmo intuito do caso anterior. Porém, em contrapartida, estes cilindros terciários não possuem diâmetro, nem posição fixas. Com isso, o espaçamento entre eles e seus diâmetros foram analisados. Além disso, a presença destes cilindros terciários fez com que o diâmetro dos cilindros secundários e o espaçamento dos cilindros principais também fossem analisados.

Já o segundo problema abordado envolveu o estudo de obstáculos em micromisturadores, utilizados para causar distúrbios no escoamento e aprimorar a intensidade de mistura. Comparando a uma geometria de referência, testou-se cinco diferentes designs com diferentes quantidades de obstáculos, na qual avaliou-se os efeitos dos espaçamentos vertical de horizontal dos obstáculos na porcentagem de mistura (φ) e diferença de pressão (*DP*).

Para alcançar a melhor geometria de cada problema, fez-se uso da combinação de três metodologias: Método Design Construtal (MDC), Design of Experiments (DOE) e Response Surface Methodology (RSM). A primeira segue os princípios da Lei Construtal e as melhorias propostas nos problemas são oriundas de tal filosofia. Por intermédio do MDC, definiu-se restrições, graus de liberdade e o indicador de performance que avalia os sistemas. A sequência do processo de otimização seguiu com a aplicação das outras duas metodologias, DOE e RSM, através de um código aberto programado no ambiente Rstudio. O uso de um código aberto propiciou mais liberdade na modelagem dos problemas, resultando em predições mais precisas e coerentes com o fenômeno físico.

Os resultados para o problema de banco de tubos, examinando o primeiro caso, mostraram que o espaçamento entre cilindros tem grande impacto na densidade de transferência de calor: para todos os fluidos estudados, a densidade de transferência de calor tende a aumentar até o ponto ótimo e depois tendem a decair. Observou-se também que, quanto maior a pseudoplasticidade do fluido, menor é o espaçamento necessário do ponto ótimo, culminando em um maior Q^* . Por conta dos efeitos shear-thinning dos fluidos pseudoplásticos, eles oferecem menor resistência ao escoamento, o que propiciam espaçamentos menores para escoarem. O segundo caso propiciou um aumento em Q*, variando de 25%, para fluido Newtoniano (n = 1) em baixo diferencial de pressão, até 49% para fluido pseudoplástico (n =0.4) considerando um alto diferencial de pressão. A presença do cilindro secundário fez com que as áreas de transferência de calor e cisalhamento aumentassem, o que afetou positivamente no indicador de performance do sistema. Por fim, no último caso, considerando cilindros terciários, foi possível obter um aumento que varia entre 20% e 34% em relação ao segundo caso e 50% a 100% em relação ao primeiro caso.

No problema dos micromisturadores, foi identificado que a presença de mais obstáculos contribui para o aumento de φ , porém, em contrapartida, a diferença de pressão também se eleva. De forma avaliar o desempenho de cada design, introduziu-se o conceito de *Mixing Energy Cost (MEC)*, que representa a razão entre *DP* e φ . Dentre os designs propostos, o caso com três cilindros na região de mistura mostrou-se o mais eficiente, com um *MEC* de 2,47, originados de uma porcentagem de mistura de 67,12% e uma *DP* de 165,48 Pa. O design que apresentou o maior φ foi com sete cilindros, 70,30%, um aumento de 4,74%. Entretanto, este mesmo design provou ser o menos eficiente, resultando em um *MEC* de 2,97, em razão de uma *DP* elevada, 208,49 Pa, cerca de 26% maior que o caso de três cilindros. Já em relação aos designs de referência, com design de três cilindros obteve um *MEC* relativamente superior a Ref.1, cerca de 6%; contudo, a porcentagem de mistura foi 8,15% maior, o que é um resultado positivo. Em relação a Ref.2, os resultados foram ainda melhores, de forma que uma porcentagem equivalente pudesse ser obtida, 57,10% contra 58,20%, com uma redução de 39,82% na *DP*.

Os problemas estudados apresentaram a perspectiva da Teoria Construtal sobre a modificação e evolução de sistemas buscando sempre facilitar o escoamento e garantir sua sobrevivência. Neste sentido, a alteração dos graus de liberdade, permitiu que cada sistema evoluísse de maneira a aumentar a performance e garantir a sobrevivência, deixando designs anteriores defasados. Seguindo este princípio, na medida que o sistema for livre para evoluir, não haverá um design definitivo, levando ao sistema atual adotar novos graus de liberdade para aprimorar ainda mais a performance. Logo, através dos problemas distintos avaliados neste trabalho, foi possivel observar que os princípios previstos pela Teoria Construtal são universais, corroborando o princípio evolutivo presente na natureza.

6. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como possibilidades a serem dadas para os sistemas deste trabalho evoluir, a utilização de tubos elípticos mostrou-se propícios no aumento da transferência de calor e podem ser considerados na evolução do design dos bancos de tubos. No estudo de micromisturadores, modificar a quantidade, tamanho e formato de obstáculos podem trazer alternativas para um design eficiente.

Em cada sistema de escoamento específico, geometrias com o melhor design tornam as demais obsoletas, o que resulta em um ciclo evolutivo, o qual traz a possibilidade de sistemas de desempenho melhor até que a liberdade para mudar de forma seja impedida.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BEJAN, A. Constructal-theory network of conducting paths for cooling a heat generating volume. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 40, p. 799-816, 1997.

BEJAN, A. **Shape and Structure, from Engineering to Nature**. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

BEJAN, A.; LORENTE, S. Constructal law of design and evolution: Physics, biology, technology, and Society, **Journal of Applied Physics**, v. 113, 2013.

BEJAN, A.; ZANE, J. P. Design in Nature: How the Constructal Law Governs Evolution in Physics, Biology, Technology, and Social Organization. Doubleday, New York, 2012.

BELLO-OCHENDE, T.; BEJAN, A. Constructal multi-scale cylinders in cross-flow. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 1373-1383, 2005.

BERGMAN, L.B.; LAVINE, A.B. Incropera: Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa, 8. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2019.

BHARTI, R. P.; SIVAKUMAR, P.; CHHABRA, R. P. Forced convection heat transfer from an elliptical cylinder to Power-Law fluids. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 51, p. 1838-1853, 2008.

BLOSS, V. PROGRAMA DE P.P.G EM E.M. Estudo do Desempenho de um Conversor de Energia tipo Coluna de água oscilante utilizando um modelo computacional tridimensional e Design Construtal com três graus de liberdade, 2020. 88. f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Pós-Graduação em Engenharia Mecânica – PPGEM, Universidade do Vale do Rio dos Sinos, 2020.

BORAHEL, R.S.; ZINANI, F.S.F.; ROCHA, L.A.O.; DOS SANTOS, E.D.; ISOLDI, L.A.; BISERNI, C. Geometric optimization of a rectangular isothermal block inside a lid-driven cavity by means of constructal design. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 139, 2022.

CAI, G.; XUE, L.; ZHANG, H.; LIN, J. A Review on Micromixers. Micromachines 2017, 8, 274.

CELIK, I.B.; GHIA, U.; ROACHE, P.J.; FREITAS, C.J.; COLEMAN, H.; RAAD, P.E. Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications, v. 130, **ASME Journal of Fluids Engineering**, 2008.

ÇENGEL, Y. A.; GHAJAR, A.J. Tranferência de calor e massa : uma abordagem prática.4. ed. Porto Alegre: AMGH Editora Ltda., 2012.

ÇENGEL, Y.A.; CIMBALA, J.M. Mecânica dos Fluidos: Fundamentos e aplicações, 3. Ed. Porto Alegre: AMGH Editora Ltda., 2015.

CETKIN, E. MIGUEL, A.F. Constructal branched micromixers with enhanced mixing efficiency: Slender design, sphere mixing chamber and obstacles. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 131, 2019.

CHEN, X; LV, H. New insights into the micromixer with Cantor fractal obstacles through genetic algorithm. **Sci Rep** 12, 4162 (2022).

CHHABRA, R. P.; RICHARDSON, J. F. Non-Newtonian Flow and Applied Rheology. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2008.

FANG, Y.; YE, Y.; SHEN, R.; ZHU, P.; GUO, R.; HU, Y.; WU, L. Mixing enhancement by simple periodic geometric features in microchannels. **Chemical Engineering Journal**, v. 187, 2012.

FEIJO, B.C.; PAVLOVIC, A.; ROCHA, L.A.O.; ISOLDI, L.A.; LORENTE, S.; DOS SANTOS, E.D. Geometrical investigation of microchannel with two trapezoidal blocks subjected to laminar convective flows with and without boiling. **Reports in Mechanical Engineering**, v. 3, p. 20-36, 2021.

FROST, J. Regression Analysis, An intuitive guide for using and interpreting linear models. Statistics By Jim Publishing, 2019.

HERMANY,L.; LORENZINI, G.; KLEIN, R.J.; ZINANI, F.F.; DOS SANTOS, E.D.; ISOLDI, L.A.; ROCHA, L.A.O. Constructal design applied to elliptic tubes in convective heat transfer cross-flow of viscoplastic fluids. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 116, p. 1054-1063, 2018.

KLEIN, R.J.; LORENZINI, G.; ZINANI, F.S.F.; ROCHA, L.A.O. Dimensionless pressure drop number for Non-Newtonian fluids applied to Constructal Design of heat exchangers. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 115, p. 910-914, 2017 b.

KLEIN, R.J.; BISERNI, C.; ZINANI, F.S.F.; ROCHA, L.A.O. Constructal design of tube arrangements for heat transfer to non-Newtonian fluids. **International Journal of Mechanical Sciences**, v. 133, p. 590-597, 2017 b.

KLEIN, R.J. **Constructal Design of Tube Arrangements for Heat Transfer to Non-Newtonian Fluids**. 2017. 79 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos. 2017 c.

KOUADRI, A.; DOUROUM, E.; LASBET, Y.; NASS, T.T.; KHELLADI, S.; MAKHLOUF, M. Comparative study of mixing behaviors using non-Newtonian fluid flows in passive micromixers. **International Journal of Mechanical Sciences**, v. 201, 2021.

LEE, C.Y; FU, L.M. Recent advances and applications of micromixers. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 259, 2018.

LI, Z.; ZHANG, B; DANG, D.; YANG, X.; YANG, W.; LIANG, W. A review of microfluidicbased mixing methods. **Sensors and Actuators A: Physical**, v. 344, 2022.

LIENHARD, J.H. Synopsis of lift, drag, and vortex frequency data for rigid circular cylinders. Technical Extension Service, Washington State University, Washington, 1966.

MAINOCHI, D.O.; AINSTEN, L.; DOS SANTOS, F.P; JUNIOR, M.B.S. Computational fluid dynamics and machine learning as tools for optimization of micromixers geometry. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 194, 2022.

MALISKA, C.R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

MOLLER, S.V; SILVESTRINI, J.H. **Turbulência**, v. 4. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, 2004.

MONTGOMERY, D.; PECK, E.A.; VINING, G.G. Introduction to Linear Regression Analysis, 5 ed. John Wiley & Sons, New Jersey, 2012 a.

MONTGOMERY, D.C. Design and Analysis of Experiments, 8. Ed., John Wiley & Sons, New Jersey, 2012 b.

NGUYEN, N.T. Micromixers Fundamentals, Design and Fabrication. 2. Ed. Imprint: William Andrew, 2011.

ORTEGA-CASANOVA, J. Application of CFD on the optimization by response surface methodology of a micromixing unit and its use as a chemical microreactor. **Chemical Engineering & Processing: Process Intensification**, v. 117, 2017.

PATANKAR, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. McGraw-Hill, New York, 1980.

RAHMANNEZHAD.J.; MIRBOZORGI, S.A. CFD analysis and RSM-based design optimization of novel grooved micromixers with obstructions, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 140, p. 483-497, 2019.

RAO, P.K.; SASMAL, C.; SAHU, A.K.; CHHABRA, R.P.; ESWARAN, V. Effect of Power-Law fluid behavior on momentum and heat transfer characteristics of an inclined square cylinders in steady flow regime. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 54, p. 2854-2867, 2011.

RAZERA, A.L.; QUEZADA, L.A.; FAGUNDES, T.M.; ISOLDI, L.A.; DOS SANTOS, E.D.; BISERNI, C.; ROCHA, L.A.O, Fluid flow and heat transfer maximization of elliptic cross-section tubes exposed to forced convection: A Numerical approach motivated by Bejan's theory. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 109, 2019.

RAZERA, A.L; DA FONSECA, R.J.C.; ISOLDI, L.A.; DOS SANTOS, E.D.; ROCHA, L.A.O.; BISERNI, C. A constructal approach applied to the cooling of semi-elliptical blocks assembled into a rectangular channel under forced convection. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 184, 2022.

ROCHA, L.A.O; LORENTE, S; BEJAN, A. Constructal Theory in Heat Transfer. In: Handbook of thermal Science and Engineering. [S.1]: Springer, p. 329-370, 2017.

SARKAR, S. SINGH, K.K.; SHANKAR, V.; SHENOY, K.T. Numerical simulation of mixing at 1-1 and 1-2 microfluidic junctions. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 85, 2014.

SEVERO, L.F.; ZINANI, F.F.; ROCHA, L.A.O. Constructal design analysis of viscoplastic cross-flow over a row of cylinders. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 122, 2021.

TEIXEIRA, F.B.; BISERNI, C.; CONDE, P.V.; ROCHA, L.A.O.; ISOLDI, L.A.; DOS SANTOS, E.D. Geometrical investigation of bluff bodies array subjected to forced convective flows for different aspect ratios of frontal body. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 161, 2021.

TRIVEDI, M.; NIRMALKAR, N. GUPTA, A.K.; CHHABRA, R.P. Effect of Non-Newtonian Fluid Behavior on Forced Convection from a Cluster of Four Circular Cylinders in a Duct, Part I: Power-Law Fluids. **Heat Transfer Engineering**, 2020. VERSTEEG, H.K., MALALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics. Longman Scientific and Technical, 2007.

WANG, L.; LIU, D.; WANG, X.; HAN, X. Mixing enhancement of novel passive microfluidic mixers with cylindrical grooves. **Chemical Engineering Science**, v. 81, 2012.

WASHINGTON, S.P.; KARLAFTIS, M.G.; MANNERING, F.L. Statistical and Econometric Methods for Transportation Data Analysis, 2. Ed., Chapman & Hall/CRC, 2011.

WILLMOTT, C.J.; MATSUURA.K. Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance, **Climate Research**, v. 30, p. 79-82, 2005.