

Modelagem matemática e computacional do escoamento de multicomponentes iônicos em meios porosos unidimensionais: uma aplicação à área de biomateriais

Aline de L. Guedes

alinelguedes@yahoo.com.br

Ivan Napoleão Bastos

inbastos@iprj.uerj.br

Gustavo Mendes Platt

gmplatt@iprj.uerj.br

Nélio Henderson

nelio@iprj.uerj.br

Universidade do Estado do Rio de Janeiro – Instituto Politécnico
Departamento de Pós-graduação em Modelagem Computacional
28630-050 – Nova Friburgo, RJ, Brasil

***Resumo:** O objetivo deste trabalho consiste em apresentar alguns resultados de uma formulação computacional e matemática para a convecção, difusão e eletromigração de componentes químicos iônicos em meios porosos unidimensionais. O escoamento de um fluido com multicomponentes iônicos em meios porosos pode ser modelado por equações diferenciais parciais do tipo convecção-difusão. Foi feito um estudo da resolução numérica destas equações diferenciais parciais pela aproximação por diferenças finitas e em seguida foi calculada a concentração de cada espécie química i do fluido em função da posição x do meio poroso e do tempo t . Assim, o método empregado mostrou-se capaz de simular o escoamento de misturas iônicas multicomponentes em meios porosos unidimensionais, e com isto, calcular numericamente a concentração de cada espécie química em regime transiente, para amplas faixas de parâmetros.*

processo de transporte de massa caracterizado pelo movimento de um fluido devido à sua diferença de densidade. A difusão molecular é um fenômeno de transporte de matéria devido aos movimentos das moléculas de um fluido. Além disto, a migração iônica deve ocorrer também para manter a eletroneutralidade da solução[5].

Este problema de escoamento em meios porosos relaciona-se com vários fenômenos de interesse em engenharia, tais como escoamento em rochas-reservatório de petróleo, diagênese de rochas e difusão em biomateriais porosos [4] dentre outros fenômenos e requer ferramentas matemáticas completamente sofisticadas para seu estudo rigoroso. Os modelos matemáticos que representam os escoamentos em meios porosos recaem em sistemas de equações diferenciais parciais de elevado número de variáveis, demandando forte esforço computacional na sua resolução, tendo assim a necessidade da aproximação das soluções dessas equações por procedimentos numéricos.

Neste contexto, se faz necessária à utilização da modelagem computacional como ferramenta adequada à otimização da busca dessas soluções numéricas. Muitas vezes, a única opção de resolução destas equações é através de métodos numéricos desenvolvidos num ambiente computacional, pois, caso

1. Introdução

O estudo do escoamento de multicomponentes iônicos em meios porosos tem despertado interesse em diversos campos da ciência. Este escoamento geralmente ocorre por ação da convecção, difusão e eletroneutralidade. A convecção é um

contrário, seria até impossível ou muito caro testar ou medir as diversas soluções possíveis para este fenômeno a partir de modelos experimentais ou por solução analítica. Em vista disso, percebemos que a modelagem matemática e computacional do escoamento de multicomponentes iônicos em meios porosos se faz necessária para o estudo de diversos ramos da engenharia.

Particularmente, em relação à área de biomateriais, o ferramental matemático/computacional desenvolvido neste trabalho pode ser útil na previsão de fosfatos de interesse biomédico (por exemplo, a hidroxiapatita e fosfato octacálcico) no interior de meios porosos [3]. Uma vez que o sistema computacional é capaz de prever as concentrações iônicas a qualquer tempo e posição do meio poroso, basta, *a posteriori*, um cálculo de produto de concentrações iônicas para verificar-se se a solução está supersaturada em relação a algum fosfato de interesse.

Neste trabalho será analisado um fluido com n_c espécies químicas escoando num meio poroso unidimensional com velocidade constante e de porosidade $\phi = \frac{V_p}{V_T}$

(constante), onde V_p é o volume vazio e V_T é o volume total. Esse escoamento de multicomponentes iônicos em meios porosos será modelado por equações diferenciais parciais do tipo convecção-difusão. Após o estudo da resolução numérica destas equações diferenciais parciais pela aproximação por diferenças finitas será calculada a concentração de cada espécie química i do fluido em função da posição x do meio poroso e do tempo t .

A aplicação deste estudo do escoamento de íons num meio poroso unidimensional desenvolvido em regime transiente será feita na difusão de um fluido iônico em biomateriais, tendo como exemplo a imersão do titânio poroso em soluções que simulam o fluido corpóreo, como a SBF, para obter a formação de tecido ósseo a partir da precipitação de hidroxiapatita.

2. Formulação Matemática

O problema proposto consiste em prever a variação da concentração de cada espécie i com o passar do tempo t em todo o domínio espacial e não haverá troca de massa entre o sólido e o fluido.

Sem levar em consideração a transferência de massa entre as fases sólida e líquida, a equação de conservação de massa de uma dada espécie i pode ser escrita como segue,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi C_i) + \frac{\partial(C_i v)}{\partial x} + \frac{\partial(J_i)}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

onde

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi C_i) = \text{Termo temporal};$$

$$\frac{\partial(C_i v)}{\partial x} = \text{fluxo convectivo (massa se deslocando devido à velocidade);}$$

$$\frac{\partial(J_i)}{\partial x} = \text{Fluxo difusivo (massa se deslocando devido à difusão).}$$

Para uma mistura iônica tem-se:

$$J_i = J_i^{\text{difusão molecular}} + J_i^{\text{migração}}, \quad (2)$$

com

$$J_i^{\text{difusão molecular}} = -\phi D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \quad (3)$$

e

$$J_i^{\text{migração}} = \phi z_i D_i C_i E^*, \quad (4)$$

onde

$$-\phi D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} = \text{Lei de Fick}; \quad (5)$$

D_i = Coeficiente de difusão da espécie i ;

z_i = Carga elétrica da espécie i ;

E^* = Campo elétrico modificado.

Por hipótese, tem-se que a carga total se anula em cada ponto do escoamento.

Assim:

$$\sum_{i=1}^{n_c} z_i C_i = 0 \quad (6)$$

Substituindo (3), (4), (5) e (6) em (2) obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\phi C_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(C_i v) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\phi D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \\ + \frac{\partial}{\partial x}\left(\phi z_i D_i C_i E^*\right) = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Observando que ϕ pode ser dividido em todos os membros da equação, pois ϕ é constante, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(C_i \frac{v}{\phi}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \\ + \frac{\partial}{\partial x}\left(z_i D_i C_i E^*\right) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, n_c. \end{aligned} \quad (8)$$

Esta fórmula produz um sistema com $n_c + 1$ equações e $n_c + 1$ variáveis (E^*, C_1, \dots, C_{n_c}).

Dentre os termos do sistema produzido pela Eq. (8) são conhecidos ϕ, v, D_i e $z_i \quad \forall i = 1, \dots, n_c$.

Multiplicando (8) por z_i obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial(z_i C_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(z_i C_i \frac{v}{\phi}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(z_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \\ + \frac{\partial}{\partial x}\left(z_i^2 D_i C_i E^*\right) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, n_c. \end{aligned} \quad (9)$$

Somando (9) com relação a i

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{i=1}^{n_c} z_i C_i\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{v}{\phi}\left(\sum_{i=1}^{n_c} z_i C_i\right)\right) - \\ \frac{\partial}{\partial x}\left(\sum_{i=1}^{n_c} z_i C_i \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\sum_{i=1}^{n_c} z_i^2 D_i C_i E^*\right) = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\sum_{i=1}^{n_c}\left(z_i^2 D_i C_i E^*\right) - \sum_{i=1}^{n_c}\left(z_i C_i \frac{\partial C_i}{\partial x}\right)\right] = 0 \quad (11)$$

que pode ser escrita como

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = 0, \quad (12)$$

onde

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n_c}\left(z_i^2 D_i C_i E^* - z_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}\right). \quad (13)$$

Com isso, o sistema mostrado na Eq. (10) pode ser reescrito na forma

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(C_i \frac{v}{\phi}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \\ + \frac{\partial}{\partial x}\left(z_i D_i C_i E^*\right) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, n_{c-1} \end{cases} \quad (14)$$

Esse sistema tem agora n_c equações e n_c variáveis ($E^*, C_1, C_2, \dots, C_{n-1}$).

O valor da variável C_{n_c} é dado por

$$C_{n_c} = -\frac{\sum_{i=1}^{n_c-1} z_i C_i}{z_{n_c}}. \quad (15)$$

A condição de contorno para a

equação $\frac{\partial \Psi}{\partial x} = 0$ é dada por $\Psi = 0$ em $x = 0$ e $x = L \quad \forall t > 0$, ou seja, a corrente é nula na fronteira:

$$\sum_{i=1}^{n_c} z_i J_i = 0 \quad (16)$$

Assim, por integração

$$\int_0^x \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) dx = 0, \quad \forall x \in (0, L), \quad (17)$$

onde

$$\Psi(x) - \Psi(0) = 0, \quad \forall x \in (0, L), \quad (18)$$

isto é,

$$\Psi(x) = \Psi(0) \equiv 0, \quad \forall x \in (0, L). \quad (19)$$

Ou seja, a corrente elétrica é nula em todo o campo do escoamento.

Logo é possível escrever

$$\sum_{i=1}^{n_c} z_i^2 D_i C_i E^* - \sum_{i=1}^{n_c} z_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} = 0. \quad (20)$$

Colocando E^* em evidência, tem-se

$$E^* = \frac{\sum_{i=1}^{n_c} z_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}}{\sum_{i=1}^{n_c} z_i^2 D_i C_i} \quad (21)$$

Onde será substituído na Eq. (14).

Seja

$$v = \frac{\nu}{\phi} + z_i D_i E^*. \quad (22)$$

Então, substituindo a Eq. (22) na Eq. (14), a equação diferencial parcial de convecção-difusão a ser estudada será dada por (Boucheau, 2004):

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(C_i v) - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, n_{c-1} \quad (23)$$

onde:

$$v = \frac{\nu}{\phi} + z_i D_i \frac{\sum_{i=1}^{n_c} z_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}}{\sum_{i=1}^{n_c} z_i^2 D_i C_i} \quad (24)$$

e

$$C_{nc} = - \frac{\sum_{i=1}^{n_c-1} z_i C_i}{z_{nc}} \quad (25)$$

com:

ν = velocidade da mistura,

C_i = concentração da espécie i ,

n_c = número de espécies químicas,

ϕ = porosidade,

z_i = carga elétrica da espécie i ,

D_i = coeficiente de difusão da espécie i .

Esta formulação apresenta as seguintes condições:

Condições iniciais:

$$C_i(x, t=0) = C_0, \quad \forall x \in [0, L] \\ e \quad \forall i = 1, \dots, n_{c-1} \quad (26)$$

Condições de contorno: (1º bloco)

$$C_i(x=0, t) = C_i, \quad \forall t > 0 \quad e \quad \forall i = 1, \dots, n_{c-1} \quad (27)$$

(Último bloco)

$$\frac{\partial C_i}{\partial x}(x=L, t) = 0, \quad \forall t > 0 \\ e \quad \forall i = 1, \dots, n_{c-1} \quad (28)$$

Onde: t = tempo,

x = posição do domínio,

i = contador do domínio,

L = tamanho do domínio.

3. Resolução Numérica

Será feita a discretização das equações diferenciais apresentadas na seção anterior. Foi utilizado o método numérico das diferenças finitas que é um método que se baseia na aproximação de derivadas por diferenças finitas. Esta fórmula de aproximação obtém-se da série de Taylor da função derivada. Esta resolução numérica foi implementada em Matlab 7 para a obtenção dos resultados do problema proposto.

3.1. Equação de Convecção-difusão

A EDP de interesse é a Eq. (23) dada

$$\text{por } \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial C_i v}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) = 0.$$

Esta EDP será escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x, t) = F(x, t) + G(x, t), \quad (29)$$

onde

$$F(x, t) = - \frac{\partial(v, C)}{\partial x} \quad (30)$$

e

$$G(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (31)$$

Para resolver esta EDP será feita a discretização de cada uma das partes da Eq.(29).

3.2. Discretização espacial da EDP

Para fazer a discretização espacial da EDP apresentada na Eq. (23), será utilizada uma grade de blocos centrados, como mostra a Fig.(1):

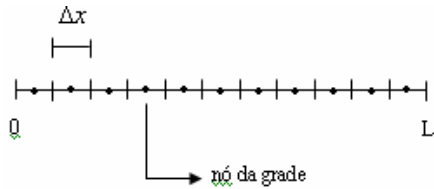


Figura 1: Grade de blocos centrados

Onde:

$$\Delta x = \frac{L}{N} \text{ e } N = \text{número de blocos da grade}$$

3.3. Discretização temporal da EDP

Para fazer a discretização temporal da EDP apresentada na Eq. (23), será utilizada uma grade de no domínio espaço-tempo, como mostra a Fig.(2):

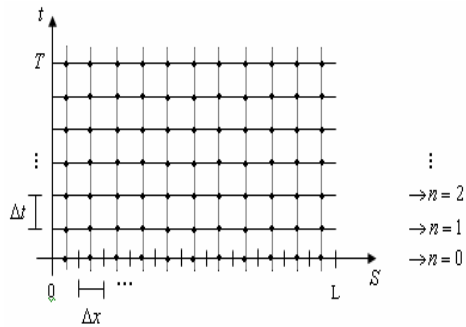


Figura 2: Grade no domínio espaço-tempo

Onde:

- n = níveis de tempo
- Δt = passo de tempo
- T = tempo máximo $\rightarrow T = n \cdot \Delta t$
- N = número de blocos da grade
- L = tamanho do domínio $\rightarrow L = N \cdot \Delta x$

Cada célula da grade de blocos centrados é representada por $x_i, \forall i = 1, \dots, N$ conforme mostrado na Fig.(3)

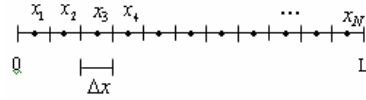


Figura 3: Representação de cada célula

Notações: $L = N \cdot \Delta x$

$$x_1 = \frac{1}{2} \cdot \Delta x$$

$$x_2 = \frac{1}{2} \cdot \Delta x + \Delta x = \frac{3}{2} \cdot \Delta x$$

$$x_3 = \frac{1}{2} \cdot \Delta x + 2\Delta x = \frac{5}{2} \cdot \Delta x \quad \vdots$$

$$x_i = \frac{1}{2} \cdot \Delta x + (i-1)\Delta x, \quad i = 1, \dots, N$$

Considere um bloco centrado no ponto x_i no instante t_n , conforme a célula genérica da Fig(4):

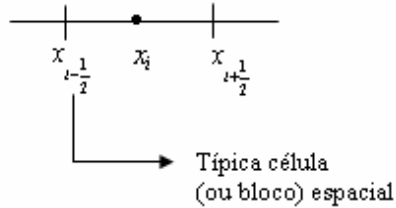


Figura 4: Célula genérica

Assim, têm-se:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_i^n \approx \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = F_i^n + G_i^n \quad (32)$$

Isto é:

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta t (F_i^n + G_i^n), \quad \forall i = 2, \dots, N$$

$$\text{e } \forall n = 0, \dots, M \quad (33)$$

- Onde: i = posição na malha
- n = tempo
- N = comprimento total da malha
- M = tempo máximo

3.4 – Discretização do termo G_i^n

$$G_i^n \approx \frac{D}{(\Delta x)^2} (C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n)$$

\rightarrow termo difusivo

$$(34)$$

3.5 – Discretização do termo F_i^n

$$F_i^n = \frac{1}{\Delta x} \left(v_{i-\frac{1}{2}}^n C_{i-\frac{1}{2}}^n - v_{i+\frac{1}{2}}^n C_{i+\frac{1}{2}}^n \right) \rightarrow$$

termo convectivo (35)

Assim, a discretização temporal mostrada na Eq. (32), $C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta t (F_i^n + G_i^n)$, ficará da seguinte forma:

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta t \left(\frac{1}{\Delta x} \left(v_{i-\frac{1}{2}}^n C_{i-\frac{1}{2}}^n - v_{i+\frac{1}{2}}^n C_{i+\frac{1}{2}}^n \right) + \frac{D}{(\Delta x)^2} (C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n) \right), \quad (36)$$

onde

$$\left. \begin{array}{l} \bullet C_i^n + \frac{1}{2} \phi \left(r_{i+\frac{1}{2}}^n \right) (C_{i+\frac{1}{2}}^n - C_i^n) \\ r_{i+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{C_{i+\frac{1}{2}}^n - C_i^n}, & \text{se } v_{i+\frac{1}{2}}^n \geq 0 \text{ e } C_{i+\frac{1}{2}}^n \neq C_i^n \\ \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{C_{i+\frac{1}{2}}^n - C_i^n + 10^{-5}}, & \text{se } v_{i+\frac{1}{2}}^n \geq 0 \text{ e } C_{i+\frac{1}{2}}^n = C_i^n \end{cases} \\ \bullet C_{i+\frac{1}{2}}^n + \frac{1}{2} \phi \left(r_{i+\frac{1}{2}}^n \right) (C_i^n - C_{i+\frac{1}{2}}^n) \\ r_{i+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \frac{C_{i+\frac{1}{2}}^n - C_{i+\frac{1}{2}}^n}{C_{i+\frac{1}{2}}^n - C_i^n}, & \text{se } v_{i+\frac{1}{2}}^n \leq 0 \text{ e } C_{i+\frac{1}{2}}^n \neq C_i^n \\ \frac{C_{i+\frac{1}{2}}^n - C_{i+\frac{1}{2}}^n}{C_{i+\frac{1}{2}}^n - C_i^n + 10^{-5}}, & \text{se } v_{i+\frac{1}{2}}^n \leq 0 \text{ e } C_{i+\frac{1}{2}}^n = C_i^n \end{cases} \end{array} \right\} C_{i+\frac{1}{2}}^n \quad (37)$$

$$\left. \begin{array}{l} \bullet C_{i-1}^n + \frac{1}{2} \phi \left(r_{i-\frac{1}{2}}^n \right) (C_i^n - C_{i-1}^n) \\ r_{i-\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \frac{C_{i-1}^n - C_{i-2}^n}{C_i^n - C_{i-1}^n}, & \text{se } v_{i-\frac{1}{2}}^n \geq 0 \text{ e } C_i^n \neq C_{i-1}^n \\ \frac{C_{i-1}^n - C_{i-2}^n}{C_i^n - C_{i-1}^n + 10^{-5}}, & \text{se } v_{i-\frac{1}{2}}^n \geq 0 \text{ e } C_i^n = C_{i-1}^n \end{cases} \\ \bullet C_i^n + \frac{1}{2} \phi \left(r_{i-\frac{1}{2}}^n \right) (C_{i-1}^n - C_i^n) \\ r_{i-\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \frac{C_{i-1}^n - C_i^n}{C_i^n - C_{i-1}^n}, & \text{se } v_{i-\frac{1}{2}}^n \leq 0 \text{ e } C_i^n \neq C_{i-1}^n \\ \frac{C_{i-1}^n - C_i^n}{C_i^n - C_{i-1}^n + 10^{-5}}, & \text{se } v_{i-\frac{1}{2}}^n \leq 0 \text{ e } C_i^n = C_{i-1}^n \end{cases} \end{array} \right\} C_{i-1}^n \quad (38)$$

e ϕ é o limitador de fluxo *superbee* [1] dado por $\phi = \max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)]$. (39)

4. Resultados

Para implementação de resultados, foi considerada uma mistura binária, com componente 1 e componente 2, cujas concentrações serão C1 e C2.

Desta forma, as equações (23), (24) e (25) sofreram algumas alterações para registrar o escoamento com duas componentes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{\partial(C_1 v)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1 \frac{\partial C_1}{\partial x} \right) = 0 \\ \text{onde} \\ v_i = \left(\frac{v}{\phi} \right) + z_1 D_1 \frac{z_1 D_1 \left(\frac{\partial C_1}{\partial x} \right)_i + z_2 D_2 \left(\frac{\partial C_2}{\partial x} \right)_i}{z_1^2 D_1 (C_1)_i + z_2^2 D_2 (C_2)_i} \\ e \\ C_2 = -\frac{z_1 C_1}{z_2} \end{array} \right. \quad (40)$$

Foi implementado um programa em Matlab 7 que calcula a variação da concentração $C_i(x, t)$ de uma substância em um regime transiente em todo o domínio x de um meio poroso inicialmente preenchido com outra substância, ambas sem cargas elétricas.

Para geração de resultados, foram considerados os seguintes valores:

L = 100 m (tamanho do domínio);

Tf = 100 h (tempo total);

$\Delta t = 0,1$ h (variação do tempo);

$\Delta x = 1$ m (espaçamento no domínio);

$v = 10$ m/s (velocidade do escoamento).

$v/\phi = 1$

Carga 1 = 1+

Carga 2 = 2-

Foram gerados alguns resultados utilizando três diferentes valores para o coeficiente de difusão (D): $D_1 = 1.10^{-20}$ m²/s, $D_2 = 1.10^{-10}$ m²/s e $D_3 = 1.10^{-5}$ m²/s.

A partir destas alterações, foram obtidos os seguintes resultados:

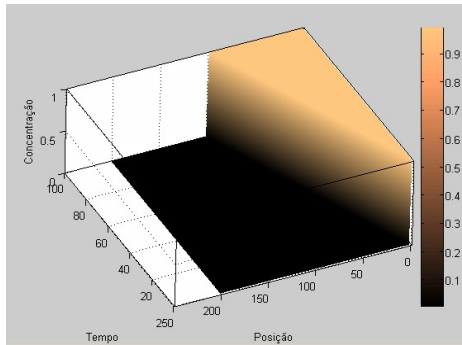


Figura 5: Concentração para o coeficiente de difusão $D_1 = 1.10^{-20} \text{ m}^2/\text{s}$

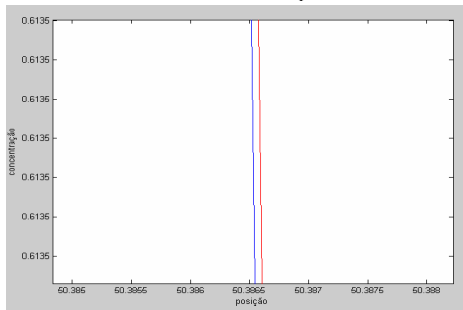


Figura 6: Coeficientes de difusão $D_2 = 1.10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ (azul) e $D_3 = 1.10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ (vermelho)

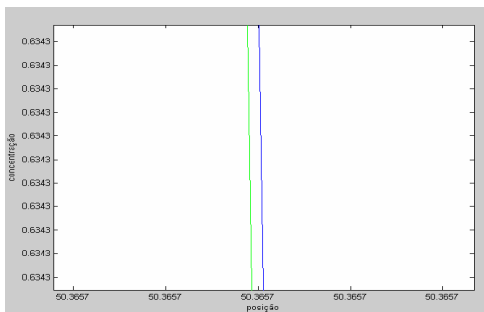


Figura 7: Coeficientes de difusão $D_1 = 1.10^{-20} \text{ m}^2/\text{s}$ (verde) e $D_2 = 1.10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ (azul)

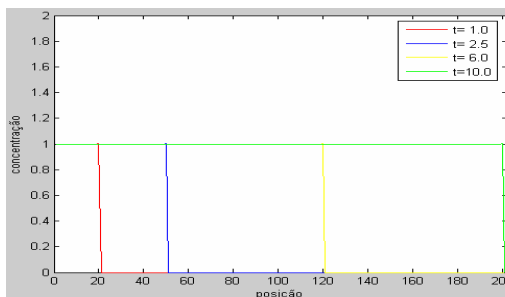


Figura 8: Concentração em relação à posição e ao tempo. $D_2 = 1.10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$

Os resultados preliminares indicam que não há problema de estabilidade e nem oscilação numérica e mais ainda, estão consistente com o que se espera nesta análise, ou seja, o aumento do coeficiente de difusão implica em uma frente de concentração mais avançada para um mesmo tempo de simulação, como pode ser observado nas figuras 5,6,7 e 8.

5. Conclusões

A formulação matemática é consistente com um fenômeno que envolve difusão, convecção e eletromigração. Estes processos estão presentes em diversas situações de engenharia, conforme exemplos citados ao longo do texto. Os resultados mostraram-se coerentes e sem problema numérico para as faixas de valores estudados.

6. Referências

- [1] Alhumaizi, Khalid (2006), “Flux-limiting solution techniques for simulation of reaction–diffusion–convection system”, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol 12, 953–965.
- [2] Boucheau, Bernard P., Meysman, Filip J.R., Middelburg, Jack J. (2004), “Multicomponent ionic diffusion in porewaters: Coulombic effects revisited”, *Earth and Planetary Science Letters*, vol 222, 653-666.
- [3] Guedes, Aline; BASTOS, Ivan N., PLATT, Gustavo M., SOARES, Glória D.. Ionic Diffusion in Porous Titanium. VI Congresso Internacional de Química e Ingeniería Química, Cuba, 2006.
- [4] Khaled, A.-R.A., Vafai, K., (2003), “The role of porous media in modeling flow and heat transfer in biological tissues”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol 46, 4989-5003.
- [5] Machado, Ana Cristina Posch. Biocompatibilidade *in vivo* de implantes de titânio submetidos ao processo biomimético. 2008. Tese de Doutorado em Biopatologia Bucal – Faculdade de Odontologia de S.J.C., Universidade Estadual Paulista, 2008.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.win2pdf.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.
This page will not be added after purchasing Win2PDF.