



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

**Microcanal com junção em T: estudo numérico bidimensional de padrões
bifásicos de gotas usando o Método Campo de Fase**

Mateus Rotiliano Azevedo

Itajubá, agosto de 2021

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

Mateus Rotiliano Azevedo

**Microcanal com junção em T: estudo numérico bidimensional de padrões
bifásicos de gotas usando o Método Campo de Fase**

**Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Mecânica como parte dos requisitos
para obtenção do Título de Mestre em Ciências em
Engenharia Mecânica.**

Área de Concentração: Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo

Orientadora: Prof.^a Dra. Ana Lúcia Fernandes de Lima e Silva

**Agosto de 2021
Itajubá**

AZEVEDO, Mateus Rotiliano

Microcanal com junção em T: estudo numérico bidimensional de padrões bifásicos de gotas usando o Método Campo de Fase / Mateus Rotiliano Azevedo – Itajubá: UNIFEI, 2021.

85p.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Itajubá, 2021.
Orientadora: Prof.^a Dra. Ana Lúcia Fernandes de Lima e Silva

1. Escoamento Bifásicos – Microcanal com Junção em T – Método Campo de Fase – COMSOL

I. Lima e Silva, Ana Lúcia F. II. Universidade Federal de Itajubá
III. Microcanal com junção em T: estudo numérico bidimensional de padrões bifásicos de gotas usando o Método Campo de Fase

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

Mateus Rotiliano Azevedo

Microcanal com junção em T: estudo numérico bidimensional de padrões bifásicos de gotas usando o Método Campo de Fase

Dissertação aprovada por banca examinadora em 30 de agosto de 2021, conferindo ao autor o título de **Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica**.

Banca Examinadora:

Prof.^a Dra. Ana Lúcia Fernandes de Lima e Silva
– UNIFEI (Orientadora)

Prof. Dr. Elisan dos Santos Magalhães – ITA

Prof. Dr. Carlos Barreira Martinez – UNIFEI

Itajubá

2021

Dedicatória

Dedico o presente trabalho à minha família e àqueles que me ajudaram em sua realização.

Agradecimentos

Primeiro de tudo, agradeço aos meus pais, José Roberto e Vânia, e à minha irmã, Mariana, por sempre me apoiarem e por fazerem com que fosse possível a realização deste trabalho.

Agradeço à minha orientadora, Ana, por sempre estar disponível para me ajudar e me acompanhar durante o mestrado.

Agradeço ao pessoal da República Cabana, pela amizade e pelos bons momentos que passei em Itajubá.

Agradeço a toda a minha família e amigos pela ajuda e conselhos prestados.

Agradeço ao pessoal do Laboratório de Transferência de Calor (LabTC), pela ajuda com os computadores do laboratório.

Agradeço aos professores que tive ao longo dos meus estudos, por todo o conhecimento que me foi transmitido.

Agradeço à CAPES pela concessão da bolsa de mestrado, a qual permitiu o desenvolvimento deste trabalho.

Por fim, agradeço à UNIFEI por toda a infraestrutura disponibilizada e, em especial, à Ana e ao Sandro por possibilitarem o uso dos computadores do LabTC.

Resumo

AZEVEDO, M. R. (2021), *Microcanal com junção em T: estudo numérico bidimensional de padrões bifásicos de gotas usando o Método Campo de Fase*, Itajubá, 85p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

Os escoamentos bifásicos são amplamente encontrados nas mais diversas aplicações práticas, tais como sistemas de refrigeração, reatores nucleares, refinarias de petróleo, unidades de geração de energia e muitas outras. Entre os equipamentos que empregam os escoamentos bifásicos, vêm ganhando cada vez mais destaque os dispositivos microfluídicos. Esses dispositivos possuem dimensões da ordem de alguns microns e são empregados em diferentes ramos da indústria (farmacêutica, eletrônica, cosmética, médica, etc.). Nesse contexto, destaca-se a importância de se estudar as características dos escoamentos bifásicos e os processos neles envolvidos, como, por exemplo, a formação, a ruptura e a coalescência de gotas/bolhas. O presente trabalho tem como objetivo estudar o escoamento de uma gota em um microcanal bidimensional com junção em formato de T. Investiga-se o comportamento da gota na junção e os regimes de ruptura ou não-ruptura da gota, assim como a influência que parâmetros como o número de capilaridade e o comprimento da gota exercem sobre seu escoamento. O estudo é conduzido por meio de simulações numéricas realizadas no *software* comercial COMSOL *Multiphysics*®, o qual emprega o Método dos Elementos Finitos para discretizar as equações governantes de um fenômeno físico. O Método Campo de Fase, disponível no COMSOL, é utilizado para representar a interface entre a fase contínua e a fase dispersa do escoamento bifásico. Além disso, são aplicadas técnicas de refinamento local e de refinamento adaptativo da malha computacional em regiões de maior interesse do domínio, como as paredes e a interface entre os fluidos, a fim de melhorar a precisão da solução numérica. Foram estudados diferentes casos, cada qual com uma combinação de número de capilaridade e de comprimento da gota no momento que ela atinge a bifurcação em T. Obteve-se dados como o regime de ruptura da gota e a evolução temporal da espessura mínima do pescoço da gota na junção. Todos os resultados foram comparados com resultados presentes na literatura, a fim de se validar a metodologia empregada. Por fim, constatou-se que os resultados numéricos obtidos apresentaram uma boa concordância com a literatura de referência.

Palavras-chave: Escoamentos bifásicos, Dispositivos microfluídicos, Ruptura de gotas,

Microcanal com junção em T, Método Campo de Fase.

Abstract

AZEVEDO, M. R. (2021), *T-junction microchannel: two-dimensional numerical study of two-phase droplet patterns using the Phase Field Method*, Itajubá, 85p. MSc. Thesis – Mechanical Engineering Institute, Federal University of Itajubá.

Two-phase flows are widely found in the most diverse practical applications, such as refrigeration systems, nuclear reactors, oil refineries, power generation units and many others. Among the equipment employing two-phase flows, microfluidic devices have been gaining more prominence lately. These devices have dimensions on the order of a few microns and are used in different branches of industry (pharmaceutical, electronics, cosmetics, medical, etc.). In this context, the importance of studying the characteristics of two-phase flows is highlighted, as well as the processes involved in them, such as the formation, breakup and coalescence of droplets/bubbles. This work aims to study the flow of a droplet in a two-dimensional microchannel with a T-shaped junction. The behavior of the droplet at the junction and the breakup or non-breakup regimes of the droplet are investigated, as well as the influence of parameters such as capillary number and droplet length on its flow. The study is conducted by means of numerical simulations performed in the commercial software COMSOL Multiphysics®, which uses the Finite Element Method to discretize the governing equations of a physical phenomenon. The Phase Field Method, available in COMSOL, is used to represent the interface between the continuous phase and the dispersed phase of the two-phase flow. In addition, local mesh refinement and adaptive mesh refinement techniques are applied in regions of greater interest in the domain, such as the walls and the interface between the fluids, in order to improve the accuracy of the numerical solution. Different cases were studied, each with a combination of capillary number and droplet length as it reaches the T-junction. Data such as the droplet breakup regime and the temporal evolution of the minimum thickness of the droplet neck at the junction were obtained. All results were compared with results present in the literature, in order to validate the methodology used. Finally, it was found that the numerical results obtained were in good agreement with the literature.

Keywords: Two-phase flows, Microfluidic devices, Droplet breakup, T-junction microchannel, Phase Field Method.

Lista de Figuras

Figura 1.1 – Exemplos de junções em T. (a) Junção em T simétrica. (b) Junção em T assimétrica.	20
Figura 3.1 – Comparação entre dois tipos de interface entre os fluidos. (a) Interface difusa. (b) Interface aguda.	39
Figura 3.2 - Configuração inicial do microcanal com bifurcação em T estudado.	43
Figura 3.3 - Velocidade baricêntrica da gota no momento que ela atinge a bifurcação do microcanal.	47
Figura 3.4 - Tempo inicial ($t = 0$), definido como sendo o momento em que a gota acaba de entrar completamente na bifurcação.	49
Figura 3.5 - Espessura mínima do pescoço da gota (δ).	50
Figura 3.6 – Exemplo de malha de elementos finitos bidimensional com elementos triangulares e nós (ou pontos nodais) localizados nos vértices dos elementos.	51
Figura 3.7 – Tela de escolha dos parâmetros relacionados à discretização temporal no COMSOL. (a) Método de discretização temporal. (b) Modo de controle do passo de tempo da simulação. (c) Ordem máxima utilizada pelo Método BDF. (d) Ordem mínima utilizada pelo Método BDF.	55
Figura 3.8 - Método de refinamento da malha utilizado na região da interface entre os dois fluidos. (a) Elemento de malha sem refinamento. (b) Elemento de malha após ter sido refinado uma vez, formando dois elementos. (c) Elementos de malha após ter sido refinado duas vezes, formando quatro elementos.	56
Figura 3.9 - Refinamento adaptativo da malha. (a) Malha em um instante de tempo qualquer ($t = tn$), imediatamente após um refinamento adaptativo inicial. (b) Mesma malha do item “a”, imediatamente antes de um novo refinamento adaptativo ($t = tn + \Delta t_{adap}$). (c) Nova malha gerada após um refinamento adaptativo ($t = tn + \Delta t_{adap}$).	58
Figura 4.1 - Microcanal com bifurcação em T e posição inicial da gota.	61
Figura 4.2 - Dimensões importantes da gota durante o escoamento através do microcanal. (a) Comprimento da gota no momento que ela atinge a bifurcação (l_0). (b) Espessura (δ_0) da gota no momento em que ela acaba de entrar completamente na bifurcação.	63

Figura 4.3 - Perfis de velocidade obtidos no mesmo instante de tempo ($t = 0,01 s$) e na mesma posição do domínio ($y = 640 \mu m$), para malhas com diferentes graus de refinamento.....	66
Figura 4.4 - Perfis de pressão obtidos no mesmo instante de tempo ($t = 0,01 s$) e na mesma posição do domínio ($y = 640 \mu m$), para malhas com diferentes graus de refinamento.....	66
Figura 4.5 - Exemplo de refinamento local realizado em uma parede (em azul) do microcanal.	67
Figura 4.6 - Perfis de velocidade obtidos no mesmo instante de tempo ($t = 0,01 s$) e na mesma posição do domínio ($y = 640 \mu m$), para malhas com diferentes graus de refinamento nas paredes.	68
Figura 4.7 - Perfis de pressão obtidos no mesmo instante de tempo ($t = 0,01 s$) e na mesma posição do domínio ($y = 640 \mu m$), para malhas com diferentes graus de refinamento nas paredes.	69
Figura 4.8 - Parte da malha computacional utilizada nas simulações, já com o refinamento adaptativo aplicado na região da interface entre os fluidos.....	70
Figura 4.9 - escoamento de gotas em um microcanal com junção em T, obtido por meio do Método Campo de Fase. (a) Regime de ruptura da gota. (b) Regime de não-ruptura da gota.	72
Figura 4.10 - Diagrama de fase mostrando os regimes de ruptura de gotas. A curva tracejada representa a transição entre o regime de não-ruptura (à esquerda da curva - NR) e o regime de ruptura (à direita da curva - R), conforme correlação proposta por Leshansky et al. (2012).....	73
Figura 4.11 - Evolução da espessura adimensional mínima do pescoço da gota ($\delta^* = \delta/w$) em função do tempo dimensional (t) para os Casos 1 a 6.	74
Figura 4.12 - Evolução da espessura adimensional mínima do pescoço da gota ($\delta^* = \delta/w$) em função do tempo adimensional (t^*) para os Casos 7 a 12.....	75
Figura 4.13 – Estágios do processo de ruptura de uma gota em um microcanal com bifurcação em T, de acordo com Sun et al. (2018), para o Caso 3 ($Ca = 0,04212$ e $l_0/w = 1,854$).	77

Figura 4.14 – Estágios do processo de ruptura de uma gota em um microcanal com bifurcação em T, conforme observado nos resultados numéricos obtidos no presente trabalho, para o Caso 3 ($Ca = 0,04212$ e $l_0/w = 1,854$).	78
Figura 4.15 - Evolução da espessura adimensional mínima do pescoço da gota ($\delta^* = \delta/w$) em função do tempo adimensional (t^*) em comparação com os resultados numéricos de Mora (2018).	79

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 - Propriedades físicas dos fluidos utilizados nas simulações.	63
Tabela 4.2 - Razão de viscosidades e coeficiente de tensão superficial para as duas combinações de fluidos empregadas.	64
Tabela 4.3 - Parâmetros e qualidade das malhas utilizadas no teste de refinamento de malha.	65
Tabela 4.4 – Tamanho dos elementos e qualidade das malhas utilizadas no teste de refinamento de malha nas paredes do microcanal.	68
Tabela 4.5 - Números de capilaridade (Ca), comprimentos adimensionais da gota (l_0/w) e números de Reynolds (Re) para cada caso estudado.	71

Lista de Abreviaturas e Siglas

Letras Latinas

d_1	Distância entre a entrada do microcanal e a gota	m
d_2	Distância entre a gota e a entrada da bifurcação	m
f_{mix}	Densidade de energia de mistura	J/m ³
F_{TS}	Vetor de tensão superficial, por unidade de volume	N/m ³
G	Potencial químico	J/mol
l_0	Comprimento da gota no momento que ela atinge a bifurcação	m
L	Comprimento característico	m
L_0	Comprimento inicial da gota	m
L_H	Comprimento do canal horizontal	m
n	Direção perpendicular a uma área	-
p	Pressão	Pa
PI	Discretização usando funções de forma de primeira ordem	-
t	Tempo	s
t_0	Tempo inicial	s
t_n	Instante de tempo qualquer	s
t_{n+1}	Instante de tempo qualquer	s
t^*	Tempo adimensional	-
U	Velocidade característica	m/s
U_b	Velocidade baricêntrica	m/s
v	Componente do vetor velocidade na direção y	m/s
$v_{m\acute{a}x}$	Velocidade máxima de um perfil de velocidade	m/s
$v_{m\acute{e}d}$	Velocidade média de um perfil de velocidade	m/s
V	Vetor velocidade	m/s
V_{fc}	Fração volumétrica da fase contínua	-
V_{fd}	Fração volumétrica da fase dispersa	-
V_n	Componente normal do vetor velocidade	m/s
V_t	Componente tangencial do vetor velocidade	m/s
w	Largura do microcanal	m

x	Coordenada cartesiana x	m
y	Coordenada cartesiana y	m
y_0	Valor inicial de uma variável qualquer	-
y_n	Valor da variável y em um instante de tempo qualquer	-
y_{n+1}	Valor da variável y em um instante de tempo qualquer	-
y_{n-1}	Valor da variável y em um instante de tempo qualquer	-
z	Coordenada cartesiana z	m

Letras Gregas

γ	Mobilidade	$m^3 \cdot s/kg$
δ	Espessura mínima do pescoço da gota	m
δ_0	Espessura da gota no momento em que ela acaba de entrar completamente na bifurcação	m
δ^*	Espessura adimensional da gota	-
Δ	Largura inicial da gota	m
Δt	Passo de tempo da simulação numérica	s
Δt_{adap}	Intervalo de refinamento adaptativo da malha	s
ε	Parâmetro relacionado à espessura da interface	m
λ	Parâmetro relacionado à densidade de energia de mistura	N
λ_{visc}	Razão de viscosidades	-
μ	Viscosidade dinâmica do fluido	Pa·s
μ_c	Viscosidade dinâmica do fluido na fase contínua	Pa·s
μ_d	Viscosidade dinâmica do fluido na fase dispersa	Pa·s
ρ	Massa específica do fluido	kg/m^3
ρ_c	Massa específica do fluido na fase contínua	kg/m^3
ρ_d	Massa específica do fluido na fase dispersa	kg/m^3
σ	Coefficiente de tensão superficial	N/m
ϕ	Variável Campo de Fase	-
χ	Parâmetro de ajuste da mobilidade	$m \cdot s/kg$
ψ	Variável auxiliar usada para decompor a equação de Cahn-Hilliard	-
Ω	Símbolo que representa o domínio fluido	-

Números Adimensionais

<i>Ca</i>	Número de capilaridade	-
<i>Re</i>	Número de Reynolds	-

Siglas

2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
BDF	<i>Backward Differentiation Formula</i>
BDF1	Método BDF de primeira ordem ou Método de Euler Implícito
BDF2	Método BDF de segunda ordem
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CSF	<i>Continuum Surface Force</i>
HFE	<i>Hydrofluoroether</i>
LabTC	Laboratório de Transferência de Calor
<i>Max</i>	Operação máximo
MEF	Método dos Elementos Finitos
<i>Min</i>	Operação mínimo
NR	Regime de não-ruptura da gota
OpenFOAM	<i>Open-Source Field Operation and Manipulation</i>
PIV	<i>Particle Image Velocimetry</i>
PDMS	Polidimetilsiloxano
R	Regime de ruptura da gota
SDS	<i>Sodium dodecyl sulfate</i>
SIV	<i>Saturated-interface-volume</i>
S-CLSVOF	Acoplamento dos Métodos VOF e <i>Level Set</i>
UNIFEI	Universidade Federal de Itajubá
VOF	<i>Volume of Fluid</i>

Sumário

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	19
CAPÍTULO 2 - REVISÃO DA LITERATURA	24
CAPÍTULO 3 - METODOLOGIA	36
3.1. Hipóteses.....	36
3.2. Equações governantes do escoamento	37
3.3. Método Campo de Fase	38
3.4. Condições iniciais e condições de contorno	43
3.5. Números adimensionais relevantes.....	46
3.6. Método numérico	50
3.6.1. Discretização espacial das equações e o Método dos Elementos Finitos.....	51
3.6.2. Discretização temporal das equações e o Método BDF	53
3.6.3. Refinamento adaptativo da malha	55
CAPÍTULO 4 – RESULTADOS.....	60
4.1. Definição da geometria e das propriedades físicas dos fluidos	60
4.2. Definição da malha	64
4.3. Estudo do escoamento de gotas em microcanais com bifurcação em T.....	70
CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES	80
CAPÍTULO 6 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	82

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

Escoamentos bifásicos são aqueles nos quais estão presentes duas substâncias diferentes e imiscíveis ou dois estados (fases) diferentes de uma mesma substância. Eles podem assumir diversas configurações, como, por exemplo, o escoamento de uma bolha de gás ou vapor em um líquido ou o escoamento de dois líquidos imiscíveis, no qual gotas de um líquido são dispersas no outro líquido. Nesse tipo de escoamento, chama-se de fase contínua aquela que ocupa uma região continuamente conectada do espaço e chama-se de fase dispersa aquela que ocupa regiões desconectadas do espaço (WÖRNER, 2003).

Os escoamentos bifásicos podem ser encontrados em uma grande variedade de aplicações práticas, nos mais diversos ramos da indústria. Como exemplo, pode-se citar sistemas de refrigeração, reatores químicos, reatores nucleares, refinarias e poços de petróleo, unidades de geração de energia e muitos outros. Além disso, entre os diversos equipamentos que empregam os escoamentos bifásicos, destacam-se os dispositivos microfluídicos. Trata-se de dispositivos nos quais estão presentes dimensões da ordem de algumas dezenas ou centenas de microns (WÖRNER, 2012).

Os dispositivos microfluídicos apresentam grandes taxas de transferência de calor e de massa, devido à alta razão entre a superfície e o volume e à elevada área de contato desse tipo de equipamento (FU E MA, 2015), em comparação com os dispositivos de escala macro. Nesse contexto, destacam-se os microdissipadores de calor, que são empregados em aplicações que exigem altas taxas de resfriamento em pequenas áreas, como, por exemplo, os componentes eletrônicos de alto desempenho. Nos microdissipadores, devido às elevadas taxas de calor envolvidas, ocorre a vaporização do fluido refrigerante, o que resulta em um padrão de escoamento bifásico, com uma fase líquida e uma fase gasosa.

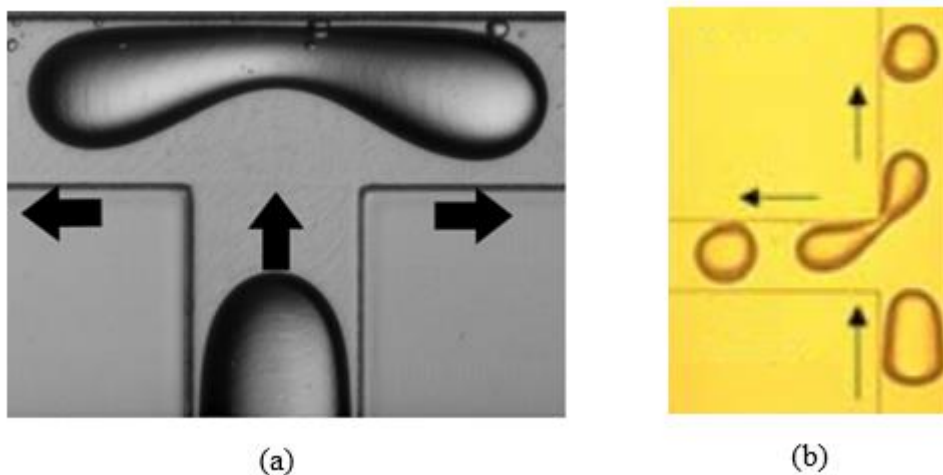
Os dispositivos microfluídicos também possuem a vantagem de permitir a geração e manipulação de bolhas e gotas com tamanhos precisamente controlados e altamente uniformes. Essa característica faz com que esses dispositivos encontrem aplicações, por exemplo, na síntese de materiais e de produtos químicos, nas indústrias farmacêutica, cosmética, médica, alimentícia, entre outras (WÖRNER, 2012 e CERDEIRA *et al.*, 2020).

No projeto e otimização de dispositivos microfluídicos, é importante compreender os principais processos utilizados na geração e manipulação de bolhas e gotas, como, por exemplo, a formação, a ruptura e a coalescência. É importante também estudar os diversos tipos de

elementos que podem ser usados para promover esses processos (CERDEIRA *et al.*, 2020), como as expansões, as contrações, os obstáculos e as junções (em T, em Y, cruzadas, etc.).

O presente trabalho foca especificamente no estudo da ruptura de gotas em um microcanal com junção (ou bifurcação) em T, que é um elemento amplamente encontrado nos mais diversos dispositivos microfluídicos. Esse tipo de junção possui dois tipos de configurações: simétrica e assimétrica. As junções em T simétricas (Figura 1.1a) são aquelas nas quais a gota chega à bifurcação por meio de um canal principal e as gotas resultantes da ruptura se direcionam para dois canais diferentes, que formam um ângulo de 180° entre si. Já as junções em T assimétricas (Figura 1.1b) são aquelas nas quais uma das gotas resultantes da ruptura continua no canal principal após a ruptura e a outra se direciona para um canal diferente, que forma um ângulo de 90° com o principal. Neste trabalho, é empregada uma junção em T do tipo simétrica.

Figura 1.1 – Exemplos de junções em T. (a) Junção em T simétrica. (b) Junção em T assimétrica.



Fonte: Adaptado de Sun *et al.* (2018) e Ma *et al.* (2019).

Com relação às técnicas empregadas no estudo dos escoamentos bifásicos, verifica-se que os trabalhos encontrados na literatura utilizam duas abordagens distintas: experimental e teórica, sendo que a teórica pode ser numérica ou exata. Nos estudos numéricos, os fenômenos físicos são modelados matematicamente e as equações governantes são discretizadas e resolvidas em computadores por meio de métodos numéricos. Essa abordagem, conhecida como Dinâmica dos Fluidos Computacional (do inglês, *Computational Fluid Dynamics* –

CFD), vem ganhando cada vez mais destaque nas últimas décadas, devido à crescente evolução dos computadores e dos métodos numéricos de resolução.

As simulações numéricas possuem algumas vantagens em relação aos testes experimentais, tais quais o menor custo e o menor gasto de tempo. Um exemplo disso acontece nos estudos com várias geometrias distintas, que são muito mais rápidas de serem obtidas em um computador, comparado ao tempo necessário para a fabricação de modelos experimentais. Destaca-se também como vantagem das simulações numéricas a maior facilidade de obtenção de dados sobre o problema estudado.

A abordagem numérica também apresenta vantagens em relação à abordagem teórica exata. Pode-se destacar, por exemplo, o fato de que os métodos numéricos são capazes de resolver problemas com geometria e fenômenos físicos complexos, ao passo que a abordagem teórica exata fica normalmente limitada a problemas mais simples. Nesse contexto, optou-se por realizar um estudo numérico no presente trabalho. Optou-se também por utilizar o *software* comercial COMSOL *Multiphysics*® para fazer as simulações numéricas.

No estudo numérico de escoamentos bifásicos, faz-se necessário um método que seja capaz de representar com precisão a interface entre a fase contínua e a fase dispersa. Entre as diversas abordagens que podem ser utilizadas, destacam-se o Método Volume de Fluido (do inglês, *Volume of Fluid – VOF*), o Método *Level Set* e o Método Campo de Fase (do inglês, *Phase Field Method*). No COMSOL, estão disponíveis o Método *Level Set* e o Método Campo de Fase. Em geral, para escoamentos em regime laminar em que a tensão superficial tem grande influência no escoamento (como é o caso de problemas de microfluídica), o Método Campo de Fase é uma boa opção entre os dois (FONTES, 2018). Além disso, por ter que calcular a curvatura da interface para se obter a tensão superficial, o Método *Level Set* requer o uso de passos de tempo menores em relação ao Método Campo de Fase, o que aumenta o tempo de computação. Por essas razões, foi empregado o Método Campo de Fase nas simulações.

O presente trabalho tem como objetivo estudar numericamente o comportamento de gotas escoando em microcanais bidimensionais com junção em T. Para isso, foram realizadas simulações de diferentes casos no *software* COMSOL. O escoamento bifásico estudado é modelado matematicamente por meio das equações da Conservação da Massa e da Quantidade de Movimento, em conjunto com o Método Campo de Fase, utilizado para representar a interface entre as fases. O Método dos Elementos Finitos é empregado na discretização espacial das equações governantes do problema e o Método BDF (do inglês, *Backward Differentiation Formula*) é utilizado na discretização temporal. Além disso, a fim de representar de maneira

precisa a interface entre os fluidos, aplica-se uma técnica de refinamento adaptativo da malha computacional.

Buscou-se investigar os diferentes regimes de ruptura ou não-ruptura de gotas, assim como a evolução da gota ao escoar pela junção. Estudou-se também a influência que parâmetros como o número de capilaridade e o comprimento da gota exercem sobre o processo de ruptura e sobre o regime de ruptura. Cabe destacar que é importante determinar o regime observado para cada condição de escoamento, pois cada aplicação prática pode requerer ou não a ruptura da gota na bifurcação. Além disso, a compreensão do comportamento da gota na junção permite um melhor controle do tamanho e da uniformidade das gotas geradas, o que é de grande importância nas diversas aplicações dos dispositivos microfluídicos.

Os resultados obtidos nas simulações foram analisados e comparados com resultados encontrados na literatura, a fim de se validar a metodologia utilizada. Por fim, destaca-se que este trabalho teve também o objetivo de propiciar a compreensão da estrutura e do funcionamento do COMSOL e das diferentes metodologias numéricas nele empregadas, além de expandir o conhecimento sobre o tema de escoamentos bifásicos.

No Capítulo 2, apresenta-se uma revisão bibliográfica, na qual são mostrados trabalhos relevantes sobre o estudo de escoamentos bifásicos em microcanais com bifurcação em T. São apresentados trabalhos analíticos, numéricos e experimentais, para diferentes condições de escoamento. Para cada trabalho revisado, discute-se as características dos problemas estudados, as metodologias de solução empregadas, os resultados obtidos e as principais conclusões encontradas pelos pesquisadores.

No Capítulo 3, apresenta-se a metodologia utilizada no presente estudo. São mostradas as equações da Conservação da Massa e da Quantidade de Movimento, assim como todas as hipóteses adotadas no trabalho. Apresenta-se também o Método Campo de Fase, comenta-se sobre as condições iniciais e de contorno aplicadas e descreve-se alguns números adimensionais relevantes para o problema estudado. Então, finaliza-se o capítulo apresentando-se os métodos numéricos utilizados na resolução das equações governantes. São destacados o Método dos Elementos Finitos, o Método BDF (*Backward Differentiation Formula*), e a técnica de refinamento adaptativo da malha.

No Capítulo 4, discorre-se sobre a geometria do problema, as propriedades físicas dos fluidos utilizados e o processo de definição da malha computacional. Então, são apresentados os resultados obtidos numericamente, os quais são discutidos e comparados com dados

experimentais da literatura. Por fim, no Capítulo 5, apresentam-se as principais conclusões do estudo realizado, assim como sugestões de trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2 - REVISÃO DA LITERATURA

No presente capítulo, são apresentados trabalhos que estudaram diversos aspectos da dinâmica de ruptura de gotas em microcanais com bifurcação em T. A maioria deles focou no estudo das junções em T simétricas. Entretanto, apresenta-se também alguns trabalhos sobre o processo de ruptura em junções em T assimétricas. Além do mais, destaca-se trabalhos envolvendo a ruptura de bolhas, a qual demonstra um comportamento bastante parecido com a ruptura de gotas.

Inicia-se discutindo o trabalho de Link *et al.* (2004). Nele, foram apresentados dois métodos para realizar a ruptura de gotas em dispositivos microfluídicos, de forma a controlar de maneira precisa o tamanho das gotas resultantes da ruptura. O primeiro dispositivo estudado é um microcanal com bifurcação em T, enquanto que o segundo dispositivo é um microcanal reto onde foi posicionado um obstáculo com o formato de um quadrado. O estudo foi realizado experimentalmente utilizando-se gotas de água dispersas em uma fase contínua de cetano, dentro de dispositivos fabricados em polidimetilsiloxano (PDMS). Verificou-se que, ao escoar pela bifurcação em T, as gotas podem ou não se romper, dependendo do seu comprimento e do número de capilaridade, que é a relação entre as forças viscosas e a força devido à tensão superficial. Desse modo, obteve-se um diagrama relacionando esses parâmetros com a condição de ruptura ou não-ruptura da gota. Os autores concluíram que ambos os dispositivos estudados permitem controlar de maneira precisa o tamanho das gotas formadas. Além disso, chegaram à conclusão de que a bifurcação em T permite um melhor controle do tamanho das gotas do que o microcanal com obstáculo, mas esse último tem a vantagem de ocupar menos espaço, sendo interessante em aplicações nas quais pode-se sacrificar a precisão para se obter maior eficiência.

Leshansky e Pismen (2009), por sua vez, propuseram uma teoria sobre o formato assumido por gotas durante o processo de ruptura em microcanais simétricos com bifurcação em T. O problema foi estudado em uma geometria bidimensional (2D) e considerando-se baixos números de capilaridade. Obteve-se a espessura mínima do filme entre a gota e as paredes do canal em função do número de capilaridade. Os autores também construíram um diagrama de fase que mostra o comportamento da gota (ruptura ou não-ruptura) em função do seu comprimento e do número de capilaridade, além de obterem uma equação para representar a transição entre os regimes de ruptura e não-ruptura da gota. Os resultados teóricos obtidos foram comparados com resultados de simulações numéricas bidimensionais utilizando o Método VOF, apresentando excelente concordância, até mesmo para valores moderados de número de

capilaridade. Além disso, os autores destacaram que é possível estender a teoria para o caso tridimensional (3D), porém a obtenção da geometria 3D é mais complexa.

Assim como fizeram Leshansky e Pismen (2009), Jullien *et al.* (2009) também estudaram o processo de ruptura de gotas em microcanais com junção em T para baixos números de capilaridade, obtendo novas conclusões. Foi realizado um estudo experimental em um microcanal com seção transversal quadrada de $80 \times 80 \mu\text{m}$, fabricado em polidimetilsiloxano (PDMS) por meio do processo de litografia macia. Os experimentos foram realizados para números de capilaridade variando de 0,0004 até 0,2 e para duas combinações diferentes de fluidos, cada qual com uma razão de viscosidades entre a fase dispersa e a fase contínua. Obteve-se a distância mínima entre a gota e as paredes do canal em função do número de capilaridade, assim como a evolução temporal do raio de curvatura, da espessura do pescoço da gota e das posições onde a gota toca as paredes superiores do microcanal. Analisando os resultados, os autores verificaram a existência de dois regimes distintos de ruptura: a ruptura com túneis e a ruptura com obstrução permanente. No primeiro deles, existe um espaço (chamado de túnel) entre a gota e a parede antes da ocorrência da ruptura, enquanto que, no segundo regime, as gotas obstruem completamente a junção em T antes da ruptura. Também se obteve um diagrama de fase que relaciona o regime de ruptura da gota com seu comprimento e com o número de capilaridade, além de apresentar as linhas de transição entre os diferentes regimes. Por fim, concluiu-se que a teoria apresentada por Leshansky e Pismen (2009) apresenta boa concordância com os resultados experimentais. Entretanto, isso só acontece para o regime de ruptura com túneis.

Diferentemente dos trabalhos apresentados anteriormente, Fu *et al.* (2011) investigaram experimentalmente a ruptura de bolhas, ao invés de gotas, em um microcanal com junção em T. O experimento consistia no escoamento de bolhas de gás nitrogênio dispersas em misturas de água e glicerol com diferentes concentrações de dodecil sulfato de sódio (em inglês, *sodium dodecyl sulfate* - SDS). O microcanal possuía seção transversal quadrada de $400 \times 400 \mu\text{m}$ e foi fabricado em polimetilmetacrilato (acrílico). Foram estudados escoamentos com número de capilaridade variando de 0,001 a 0,1 e os dados experimentais foram obtidos por meio de uma câmera digital de alta velocidade e um sistema de velocimetria por imagem de partículas (do inglês, *Particle Image Velocimetry* – PIV). Obteve-se a evolução temporal da espessura mínima do pescoço da bolha e da distância mínima entre a bolha e as paredes do canal para diferentes combinações de fluidos, números de capilaridade e comprimentos da bolha. Além disso, foram construídos diagramas de fase relacionando o regime de ruptura observado para a bolha com o

seu comprimento e com o número de capilaridade, para diferentes razões de viscosidades entre a fase dispersa e a fase contínua. Os autores observaram quatro tipos distintos de comportamentos das bolhas na junção em T. O primeiro deles é a ruptura simétrica de bolhas do tipo I, que é equivalente ao regime de ruptura com obstrução permanente, observado por Jullien *et al.* (2009). O segundo é a ruptura simétrica de bolhas do tipo II, no qual um espaço aparece entre a bolha e as paredes depois de um certo período de tempo. O terceiro regime é a ruptura simétrica de bolhas do tipo III, no qual existe um espaço entre a bolha e as paredes durante todo o processo de ruptura. Por fim, há o regime de não-ruptura das bolhas, no qual a bolha entra na junção e se dirige para um dos braços da bifurcação, sem se dividir. Além disso, comparando-se os resultados experimentais com os trabalhos de Jullien *et al.* (2009), Leshansky e Pismen (2009) e Link *et al.* (2004), concluiu-se que bolhas se comportam de maneira bastante similar a gotas em microcanais com junção em T.

Após apresentarem uma teoria que funciona bem para o regime de ruptura com túneis (LESHANSKY E PISMEN, 2009), Leshansky *et al.* (2012) realizaram uma análise teórica do regime de ruptura de gotas com obstrução permanente em microcanais com bifurcação em T. Nessa análise teórica foi utilizada uma construção geométrica bidimensional para representar o formato da interface entre a fase contínua e a fase dispersa. Obteve-se então uma equação para a espessura mínima do pescoço da gota em função do tempo e do número de capilaridade. Para verificar as previsões da teoria, foram realizadas simulações numéricas diretas da ruptura de gotas bidimensionais com obstrução permanente, utilizando-se o Método VOF. Além disso, obteve-se um diagrama de fase relacionando o regime de ruptura observado nas simulações (ruptura sem obstrução, ruptura com obstrução e não-ruptura) com o número de capilaridade e o comprimento da gota na entrada da bifurcação. No diagrama também é mostrada a linha que marca a transição entre o regime de não-ruptura e o regime de ruptura, assim como a linha de transição entre a ruptura sem obstrução e a ruptura com obstrução, sendo que ambas as linhas foram obtidas por meio de análises teóricas. Por fim, verificou-se que a equação para a espessura do pescoço da gota e as linhas de transição entre os regimes apresentaram excelente concordância com os resultados das simulações numéricas.

Hoang *et al.* (2013a) também estudaram a ruptura de gotas em microcanais com bifurcação em T. O estudo foi realizado numericamente utilizando-se o *software* OpenFOAM (*Open-Source Field Operation and Manipulation*), que é baseado no Método dos Volumes Finitos. A interface entre os fluidos foi representada por meio do Método VOF e foi empregada uma malha hexaédrica com refinamento maior nas paredes, a fim de resolver adequadamente

os finos filmes de lubrificação ao redor das gotas. Obteve-se campos de velocidade e pressão na junção em diferentes instantes de tempo durante a ruptura. Obteve-se também a evolução temporal da espessura mínima do pescoço da gota, para diferentes números de capilaridade, razões de viscosidades e razões entre a altura e a largura do microcanal. Os autores também realizaram simulações nas quais o escoamento é interrompido abruptamente durante a ruptura da gota, obtendo-se então a evolução temporal da espessura da gota após a interrupção. Analisando-se os resultados, concluiu-se que existem dois estágios distintos no processo de ruptura. No primeiro deles, a deformação da gota é menos acentuada e é causada pelo escoamento da fase contínua. Já no segundo estágio, acontece um rápido estrangulamento do pescoço da gota, que é causado pela tensão superficial e é independente do escoamento da fase contínua. Além disso, por meio dos estudos com interrupção do escoamento, foi possível constatar que, se a interrupção acontece durante o primeiro estágio da ruptura, a gota retorna ao seu formato original. Entretanto, se a interrupção ocorre após uma determinada espessura crítica do pescoço da gota (que marca o início do segundo estágio), a gota irá sempre se romper. Por fim, concluiu-se que a espessura crítica do pescoço depende fortemente da razão entre a altura e a largura do microcanal, mas é pouco dependente do número de capilaridade e da razão de viscosidades entre a fase dispersa e a fase contínua.

Hoang *et al.* (2013b) voltaram a estudar o escoamento bifásico de gotas e bolhas em microcanais, a fim de analisar o desempenho do Método VOF, presente no OpenFOAM, na modelagem desse tipo de problema. Foram estudados três casos distintos: o movimento de bolhas em um canal bidimensional reto, a formação de bolhas em junções bidimensionais e tridimensionais em formato de T e a ruptura de bolhas/gotas em bifurcações tridimensionais em formato de T. Para o primeiro caso, obteve-se a espessura do filme (distância entre a interface da bolha e as paredes dos canais) e a velocidade das bolhas para diferentes números de capilaridade. Além disso, para os outros dois casos, obteve-se a evolução temporal da espessura das bolhas para diferentes números de capilaridade e comprimentos da bolha. Os resultados foram comparados com estudos encontrados na literatura. Os autores concluíram que o estudo do movimento, da formação e da ruptura de bolhas e gotas em sistemas microfluídicos usando o Método VOF mostrou excelente concordância com dados experimentais e analíticos da literatura, sendo que a diferença entre os resultados obtidos foi sempre inferior a 8%.

Fu *et al.* (2014), por sua vez, estudaram o processo de ruptura de bolhas em microcanais com bifurcação em T em uma montagem experimental distinta da utilizada nos demais estudos apresentados até aqui. Eles utilizaram o chamado *loop* assimétrico, que é uma configuração na

qual os canais de saída da bifurcação possuem comprimentos diferentes. Dessa forma, é possível analisar a resistência hidrodinâmica induzida pela presença de bolhas na jusante de microcanais. O estudo foi realizado experimentalmente em um dispositivo fabricado em acrílico, com seção transversal quadrada de $400 \times 400 \mu\text{m}$. As imagens das bolhas foram capturadas por uma câmera de alta velocidade em conjunto com um microscópio. Utilizou-se no experimento gás nitrogênio disperso em diferentes soluções de água deionizada e glicerol. Uma das grandezas calculadas no estudo foi o volume das bolhas resultantes da ruptura (bolhas filhas), em cada ramo da bifurcação em T. Obteve-se então gráficos mostrando a razão entre os volumes das bolhas filhas em função de diversos parâmetros, como a vazão de líquido e de gás, a razão entre as vazões e o comprimento da bolha mãe. Os autores concluíram que a dinâmica da ruptura de bolhas é, de fato, influenciada pela resistência hidrodinâmica adicional causada pela presença de bolhas a jusante. Essa resistência, assim como a razão entre os volumes das bolhas filhas, depende das vazões de gás e de líquido e da viscosidade do líquido. Por fim, os autores destacaram que a resistência deve ser levada em consideração ao projetar dispositivos microfluídicos e propuseram um modelo teórico para prever o tamanho das bolhas formadas nas bifurcações em T.

Wang *et al.* (2014) também estudaram o processo de ruptura de bolhas em microcanais com junção em T, porém abordando uma nova configuração de junção. Nos demais trabalhos revisados até aqui, estudou-se a configuração simétrica da junção. Entretanto, no trabalho de Wang *et al.* (2014), foi estudada a configuração assimétrica, conforme apresentado no capítulo de Introdução. O estudo foi realizado experimentalmente em três dispositivos de acrílico com diferentes seções transversais ($400 \times 400 \mu\text{m}$, $400 \times 600 \mu\text{m}$ e $400 \times 800 \mu\text{m}$), em conjunto com uma câmera de alta velocidade e uma lente de aumento. Utilizou-se gás nitrogênio disperso em uma solução de água deionizada com dodecil sulfato de sódio. O trabalho resultou em diagramas de fase relacionando o regime de ruptura encontrado com alguns parâmetros, como a vazão de gás, a vazão de líquido, o número de capilaridade, o comprimento da bolha e o tipo de seção transversal do canal. Obteve-se também a evolução temporal de parâmetros geométricos da bolha durante o processo de ruptura. Os autores concluíram que a ruptura de bolhas ocorre com maior facilidade na junção em T assimétrica em comparação com a junção em T simétrica. Além disso, os resultados mostraram que o comportamento de ruptura ou não-ruptura de bolhas observado em junções assimétricas é similar ao comportamento de bolhas em junções simétricas e ao comportamento de gotas em junções assimétricas.

Wang *et al.* (2015a) avançaram no estudo do processo de ruptura de bolhas em microcanais com junção em T assimétrica, dessa vez focando mais especificamente na análise do regime de ruptura com obstrução permanente. O estudo foi realizado experimentalmente utilizando-se os mesmos dispositivos e fluidos usados no trabalho de Wang *et al.* (2014). Entretanto, foi empregado somente o microcanal de 400 x 400 μm dessa vez e utilizou-se diferentes concentrações de glicerol para variar as propriedades físicas da fase contínua. Obteve-se a evolução temporal da espessura mínima do pescoço da bolha e da taxa de afinamento da bolha durante o processo de ruptura, para diferentes valores de viscosidade da fase contínua, de comprimento da bolha e de velocidade superficial do fluido que entra na junção. Também foram obtidos gráficos relacionando a taxa de afinamento e o tempo total de ruptura da bolha com a velocidade superficial do fluido que entra na junção e com o comprimento da bolha. Verificou-se que o processo de ruptura pode ser dividido em três estágios. O primeiro deles é o estágio de alongamento (do inglês, *squeezing*), no qual a taxa de afinamento do pescoço da bolha diminui não-linearmente com o tempo. Já o segundo estágio é o estágio de transição, no qual a taxa de afinamento da bolha é praticamente constante. Por fim, no terceiro estágio, chamado de *pinch-off*, ocorre um aumento não-linear na taxa de afinamento. Os autores concluíram que a velocidade superficial do fluido que entra na junção possui grande impacto sobre a taxa de afinamento do pescoço da gota durante todo o processo de ruptura. Além disso, constatou-se que um aumento na viscosidade da fase contínua pode acelerar a taxa de afinamento nos estágios de alongamento e de transição, ao mesmo tempo em que desacelera essa taxa no estágio de *pinch-off*. Finalmente, concluiu-se que o comprimento da bolha não possui nenhum efeito nos estágios de ruptura.

Enquanto Wang *et al.* (2015a) estudaram o regime de ruptura de bolhas com obstrução permanente em microcanais com junção em T assimétrica, Wang *et al.* (2015b) estudaram a dinâmica do regime de ruptura com obstrução parcial em uma junção em T simétrica. O regime de ruptura com obstrução parcial é equivalente à ruptura simétrica de bolhas do tipo II, apresentada por Fu *et al.* (2011), na qual um espaço aparece entre a bolha e as paredes depois de um certo período de tempo. O estudo foi realizado experimentalmente utilizando-se nitrogênio e água deionizada com dodecil sulfato de sódio como a fase dispersa e a fase contínua, respectivamente. Um microscópio equipado com uma câmera de alta velocidade foi utilizado para capturar a ruptura da bolha na junção em T. Obteve-se a evolução temporal da espessura do pescoço da bolha e os resultados foram comparados com a teoria de Leshansky *et al.* (2012), nos momentos anteriores ao surgimento de túneis. Constatou-se uma divergência entre os resultados, possivelmente causada pelo fato de que os experimentos apresentaram

bolhas com pescoço em formato de hipérbole, ao passo que Leshansky *et al.* (2012) aproximou o pescoço por meio de um arco de círculo. Além disso, os autores verificaram a presença de dois estágios diferentes durante a ruptura da bolha: o estágio de alongamento e o estágio de *pinch-off*, conforme descrito em Wang *et al.* (2015a). Obteve-se então as espessuras da bolha nas quais ocorre a transição entre os estágios da ruptura, para diferentes números de capilaridade e comprimentos da bolha. Por fim, concluiu-se que o número de capilaridade e o comprimento da bolha têm grande influência sobre o seu comportamento durante o estágio de alongamento. Entretanto, no estágio de *pinch-off*, verificou-se que há influência somente do número de capilaridade.

Diferentemente da maioria dos trabalhos revisados até aqui, Liu *et al.* (2016) estudaram a ruptura de bolhas em microcanais com junção em T que não possuem largura constante: o canal principal possui uma determinada largura, enquanto que a bifurcação possui uma largura diferente. Utilizou-se um modelo numérico bidimensional de escoamento bifásico de gás e líquido. Além disso, empregou-se o Método VOF para representar a interface entre os fluidos. Foram obtidos campos de pressão e de velocidade, assim como a evolução temporal da espessura mínima do pescoço da bolha. Também foram construídos diagramas de fase relacionando o regime de ruptura da bolha com seu comprimento e com o número de capilaridade, para diferentes razões de viscosidades entre as fases. Os autores verificaram a existência dos mesmos estágios do processo de ruptura da bolha identificados por Wang *et al.* (2015b): o estágio de alongamento e o estágio de *pinch-off*. Além disso, eles nomearam de estágio de extensão o momento no qual a bolha entra na bifurcação e os lados da interface da bolha crescem ao longo das ramificações da junção. Por fim, concluiu-se que a razão entre a largura do canal principal e a largura da bifurcação possui uma influência significativa no processo de deformação e ruptura da bolha. Para razões menores, a tendência é que a bolha não apresente ruptura, enquanto que para razões maiores, costuma-se observar a ruptura da bolha.

Lu *et al.* (2016) também investigaram a dinâmica da ruptura de bolhas em um microcanal com junção em T, dessa vez focando no estudo da reversibilidade do processo de ruptura. Foram feitos testes experimentais em um canal com seção transversal quadrada de 400 x 400 μm , fabricado em uma placa de acrílico por meio de usinagem de precisão. Utilizou-se gás nitrogênio disperso em terebintina e a ruptura da bolha foi observada por meio de uma câmera digital de alta velocidade em conjunto com um microscópio. Assim como em outros trabalhos, Lu *et al.* (2016) identificaram quatro regimes diferentes da bolha na bifurcação em T: ruptura com obstrução permanente, ruptura com obstrução parcial, ruptura com túneis

permanentes e não-ruptura. Para diferentes regimes, obteve-se a evolução temporal dos seguintes parâmetros geométricos da bolha ao escoar pela junção: a espessura mínima do pescoço; o comprimento total; o comprimento da região de depressão; a largura da região de depressão; a curvatura do pescoço; a curvatura da extremidade da bolha; a espessura máxima da extremidade da bolha e a espessura do túnel formado entre a extremidade da bolha e a parede do microcanal. Os autores chegaram à conclusão de que existe uma espessura crítica do pescoço da bolha. Caso a espessura mínima do pescoço for maior do que o valor crítico, a ruptura é reversível e o afinamento da bolha é lento. Porém, se a espessura do pescoço for menor do que esse valor, a ruptura é irreversível e o afinamento da bolha é rápido. Além disso, os resultados sugeriram que o estágio de ruptura lenta é impulsionado pela fase contínua do fluido e depende do regime de ruptura observado. Já no estágio de ruptura rápida, a tensão superficial e a inércia do líquido desempenham um papel maior no processo de ruptura.

Sun *et al.* (2018), por sua vez, investigaram a dinâmica da ruptura de gotas com túneis e a formação de gotas satélite em um microcanal com junção em T. Assim como no trabalho de Lu *et al.* (2016), foi utilizado um microcanal de seção transversal quadrada com 400 μm de largura por 400 μm de altura, fabricado em uma placa de acrílico por meio de usinagem de precisão. Utilizou-se uma câmera digital de alta velocidade acoplada com um microscópio para capturar o escoamento da gota. Nos experimentos, foi usado um óleo mineral como a fase contínua e diferentes concentrações de uma solução de glicerol como a fase dispersa (gota). Obteve-se a evolução da espessura mínima do pescoço da gota em função do tempo, para diferentes combinações de razão de viscosidades, número de capilaridade e comprimento da gota. De acordo com o comportamento da gota na bifurcação ao longo do tempo, os autores identificaram e estudaram quatro estágios sequenciais no processo de ruptura da gota: o estágio de alongamento (*squeezing*), o estágio de transição, o estágio de *pinch-off* e o estágio de ruptura de filamento. Nesse último estágio, são formadas as gotas satélites, que são bem menores do que as duas gotas principais geradas no processo de ruptura. A formação de gotas satélites é indesejada, pois elas podem se acumular na bifurcação, prejudicando o processo de ruptura de novas gotas e dificultando o controle do tamanho das gotas principais. Os autores concluíram que a velocidade superficial do fluido que escoar para dentro da bifurcação e a viscosidade da gota possuem grande influência na quantidade de gotas satélites geradas e no seu tamanho. Menores velocidades do fluido e viscosidades da gota resultam em uma quantidade menor de gotas satélites. Por fim, os resultados obtidos sugerem que a ruptura de gotas em um microcanal com junção em T é um processo mais complexo do que a ruptura de bolhas.

Mora *et al.* (2019) também estudaram os mecanismos de ruptura de gotas escoando em um líquido em um microcanal com bifurcação em T, avaliando a eficácia de um método numérico diferente do Método VOF, que foi utilizado nos trabalhos numéricos apresentados anteriormente. O estudo foi realizado usando o *software* OpenFOAM, no qual foi implementado o Método S-CLSVOF, que é um acoplamento dos Métodos VOF e *Level Set*. Identificou-se dois regimes de ruptura de gotas: com obstrução e sem obstrução, sendo este último subdividido em ruptura parcialmente obstruída e ruptura com túnel permanente. Além disso, obteve-se a distância entre a interface da gota e a parede, assim como a espessura do pescoço da gota em função do tempo. Os autores concluíram que as condições de ruptura obtidas são consistentes com as predições encontradas na literatura. Concluiu-se também que o processo de ruptura no regime não obstruído apresentou comportamento similar ao regime obstruído nos primeiros momentos da ruptura. Posteriormente, a gota pode obstruir o escoamento parcialmente ou então abrir um túnel permanente, o qual diminui a velocidade do processo de ruptura. Finalmente, foi possível concluir que quanto menor for o número de capilaridade, maior é a formação do túnel permanente.

Diferentemente de Wang *et al.* (2014) e Wang *et al.* (2015a), que estudaram a ruptura de bolhas em microcanais com junção em T assimétrica, Ma *et al.* (2019) investigaram a ruptura de gotas nesse tipo de junção, focando mais especificamente no estudo da distribuição de tamanho das gotas formadas. O estudo foi realizado experimentalmente utilizando-se um dispositivo fabricado em acrílico com seção transversal quadrada de 400 x 400 μm . Empregou-se um microscópio invertido conectado a uma câmera de alta velocidade para capturar o processo de ruptura das gotas. Foi utilizado um óleo mineral para a fase contínua e diferentes soluções de água e glicerol para a fase dispersa. O principal parâmetro estudado pelos autores foi a razão de distribuição de volume, que é igual à razão entre o volume da gota filha que se dirige para o canal secundário e o volume da gota filha que se dirige para o canal principal. Obteve-se então a variação da distribuição de volume em função das vazões volumétricas da fase contínua e da fase dispersa, para diferentes combinações de fluidos. Obteve-se também a variação da distribuição de volume em função do volume da gota mãe, do número de Reynolds e do número de capilaridade. Os autores concluíram que a razão de distribuição de volume decresce inicialmente e depois cresce conforme aumenta o número de Reynolds da fase contínua. Já um aumento no número de Reynolds da fase dispersa provoca uma diminuição na razão de distribuição de volume. Além disso, com relação ao número de capilaridade, observou-se que quanto maior for seu valor, maior é a razão de distribuição de volume. Finalmente, os

autores propuseram correlações para prever a razão de distribuição de volume e os resultados calculados apresentaram boa concordância com dados experimentais.

Jangir e Jana (2019), por sua vez, avaliaram o desempenho do Método *Level Set*, disponível no *software* COMSOL *Multiphysics*®, no estudo da ruptura de gotas em microcanais com bifurcação em T. Para a fase contínua, utilizou-se as propriedades físicas de dois tipos de óleo de silicone, enquanto que, para a fase dispersa, utilizou-se as propriedades da água. Em primeiro lugar, foram realizadas simulações para investigar o mecanismo de formação de gotas em um microcanal com junção em T. Os resultados obtidos foram então comparados com dados da literatura, a fim de se validar o modelo numérico. Em seguida, o modelo foi estendido para a simulação da ruptura de gotas em junções em T. Como resultado, obteve-se um diagrama de fase relacionando a condição de ruptura ou não-ruptura da gota observada nas simulações com seu comprimento e com o número de capilaridade. Obteve-se também uma linha de transição entre a condição de ruptura e de não-ruptura da gota. Por fim, os autores concluíram que os resultados obtidos numericamente se mostraram similares aos resultados de Link *et al.* (2004) e de Jullien *et al.* (2009).

Já Sun *et al.* (2019) investigaram a dinâmica da ruptura de gotas viscoelásticas em comparação com gotas Newtonianas em um microcanal com junção em T. O estudo foi feito experimentalmente em um microcanal de seção transversal quadrada de 400 x 400 μm , fabricado em acrílico, e as imagens das gotas foram capturadas por meio de uma câmera de alta velocidade em conjunto com um microscópio. Foi utilizado um óleo mineral como fase contínua e, para a fase dispersa, utilizou-se soluções de óxido de polietileno com diferentes massas moleculares, assim como uma solução de 50% de glicerol. Tanto para as gotas viscoelásticas quanto para as gotas Newtonianas, observou-se os mesmos quatro estágios sequenciais no processo de ruptura da gota, conforme descrito no trabalho de Sun *et al.* (2018). Obteve-se a evolução temporal da espessura mínima do pescoço da gota para diferentes combinações de fluidos. Além disso, analisou-se a evolução temporal da taxa de deformação do pescoço da gota e do comprimento do filamento no estágio de ruptura de filamento. Os autores concluíram que a maior diferença entre o comportamento das gotas viscoelásticas e das gotas Newtonianas acontece no estágio final do processo de ruptura, que é o de ruptura de filamento. Nesse estágio, devido ao alongamento elástico do filamento, a taxa de afinamento do pescoço em gotas viscoelásticas é muito menor do que nas gotas Newtonianas. Além disso, constatou-se que a ruptura de gotas Newtonianas produz gotas satélite maiores. Por fim,

concluiu-se que a taxa de alongamento do filamento nas gotas viscoelásticas não varia com a elasticidade, mas é proporcional à vazão do escoamento bifásico.

Yu *et al.* (2020) estudaram o processo de formação de gotas satélite em microcanais com bifurcação em T com número de capilaridade variando de 0,039 a 0,32. O estudo foi realizado experimentalmente em um dispositivo com canais de seção transversal quadrada (400 x 400 μm) fabricados por meio de usinagem de precisão em uma placa de acrílico. As gotas foram visualizadas por meio de um sistema de microscópio invertido equipado com uma câmera de alta velocidade. Para a fase contínua, utilizou-se um óleo mineral, enquanto que, para a fase dispersa, utilizou-se água deionizada. Como resultado, obteve-se a evolução temporal da espessura mínima do pescoço e do volume do filamento do pescoço da gota, para diferentes valores de vazão da fase contínua e da fase dispersa. Obteve-se também o volume total das gotas satélite em função do número de capilaridade da fase contínua. Os autores concluíram que as forças inerciais, viscosas e capilares desempenham um forte papel no processo de formação das gotas satélite. Concluíram também que a ruptura do filamento da gota sempre acontece em dois pontos do filamento. Por fim, constatou-se que o tamanho das gotas satélite aumenta conforme o número de capilaridade cresce.

Por fim, Yan *et al.* (2021) investigaram o regime de ruptura e a transferência de calor por mudança de fase de uma bolha de vapor escoando em um microcanal com bifurcação em T. O estudo foi feito numericamente utilizando-se o *software* comercial ANSYS FLUENT 17.0 em conjunto com funções definidas pelos próprios autores. O Método VOF foi usado para capturar a interface entre os fluidos e o Método CSF (do inglês, *Continuum Surface Force*) foi empregado no tratamento da força de tensão superficial. Utilizou-se também o modelo SIV (do inglês, *saturated-interface-volume*) para representar a mudança de fase por evaporação que ocorre na interface entre os fluidos. O líquido empregado no estudo é o HFE-7100 (do inglês, *Hydrofluoroether*) saturado. Como resultado, obteve-se um diagrama de fase representando o regime de ruptura da bolha observado em função do seu diâmetro e do fluxo de calor imposto nas paredes do microcanal. Obteve-se também campos de temperatura e de velocidade para diferentes combinações de fluxo de calor e de diâmetro da bolha. Por fim, foram construídos gráficos mostrando a variação do coeficiente de transferência de calor ao longo de todo o microcanal. Por meio desses gráficos, foi possível comparar o desempenho da transferência de calor com mudança de fase com o desempenho da transferência de calor de um escoamento monofásico (no qual somente a fase líquida está presente). Os autores concluíram que as características de transferência de calor locais são intimamente relacionadas ao crescimento da

bolha no microcanal de entrada e ao regime de ruptura da bolha na junção em T. Além disso, o maior coeficiente de transferência de calor encontrado para o escoamento com mudança de fase foi cerca de 4 vezes maior do que o coeficiente obtido para o escoamento sem mudança de fase.

CAPÍTULO 3 - METODOLOGIA

Neste capítulo são apresentadas as equações que governam o problema estudado, assim como as hipóteses que foram consideradas para se chegar a essas equações. Apresentam-se as equações da Conservação da Massa e da Quantidade de Movimento (equações de Navier-Stokes). Além disso, são mostradas também as equações do Método Campo de Fase, que é utilizado para prever a posição da interface entre as fases.

Em seguida, descreve-se as condições iniciais e as condições de contorno aplicadas na solução das equações diferenciais parciais estudadas, assim como alguns números adimensionais relevantes utilizados no presente trabalho. Por fim, são feitas considerações sobre os métodos numéricos empregados para discretizar e resolver as equações, com destaque para o Método dos Elementos Finitos, o Método BDF e o refinamento adaptativo da malha.

3.1. Hipóteses

As equações de Navier-Stokes são resolvidas para um escoamento bifásico, laminar, no regime transiente, de um fluido Newtoniano. As hipóteses adotadas para o estudo do problema são descritas a seguir:

- 1) **Escoamento bidimensional (2D):** a coordenada z é desconsiderada, assim como todos os efeitos relacionados a essa coordenada. Por exemplo: a componente do vetor velocidade na direção z é desprezada.
- 2) **Fluido Newtoniano:** nesse tipo de fluido, as tensões viscosas são proporcionais à viscosidade e às taxas de deformação de um elemento de fluido.
- 3) **Escoamento em regime laminar:** os escoamentos estudados no presente trabalho possuem baixos valores de número de Reynolds ($Re \ll 10$), o que caracteriza escoamentos em regime laminar. Portanto, dispensa-se a utilização de modelos de turbulência.
- 4) **Escoamento em regime transiente:** o problema estudado é um escoamento multifásico, no qual a interface entre as fases se movimenta com o tempo. Desse

modo, não é possível assumir que o escoamento é em regime permanente e desprezar as derivadas temporais nas equações governantes.

- 5) **Campo gravitacional desprezível:** desconsidera-se os efeitos da força gravitacional no escoamento.
- 6) **Escoamento incompressível:** considera-se que a massa específica é constante em cada fase do fluido. Desse modo, pode-se escrever a equação da Conservação da Massa como sendo o divergente do campo de velocidades.
- 7) **Escoamento sem transferência de calor:** considerando-se essa hipótese, não é necessário resolver a equação diferencial da Energia.
- 8) **Viscosidade constante:** considera-se que o escoamento não apresenta variações de viscosidade. Desse modo, pode-se simplificar o divergente do tensor de tensões viscosas nas equações da Quantidade de Movimento.

3.2. Equações governantes do escoamento

Inicialmente, parte-se das equações da Conservação da Massa e da Quantidade de Movimento (equações de Navier-Stokes). Em seguida, considerando-se as hipóteses apresentadas anteriormente, pode-se simplificar essas equações. Desse modo, obtém-se, respectivamente, as seguintes equações:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (3.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{V}) \right) = -\nabla p + \mu (\nabla^2 \mathbf{V}) + \mathbf{F}_{TS} \quad (3.2)$$

onde ρ é a massa específica do fluido [kg/m^3]; \mathbf{V} é o vetor velocidade [m/s]; t é o tempo [s]; p é a pressão [Pa]; μ é a viscosidade dinâmica do fluido [$\text{Pa}\cdot\text{s}$] e \mathbf{F}_{TS} é o vetor de tensão superficial, por unidade de volume [N/m^3]. Essa força aparece nos escoamentos bifásicos devido à tensão superficial que age na interface entre os fluidos. Portanto, ela deve ser modelada matematicamente e adicionada ao somatório de forças das equações de Navier-Stokes (Equação

3.2). No presente trabalho foi utilizado o Método Campo de Fase (YUE *et al.*, 2006) para o cálculo da força interfacial, conforme será apresentado na Seção 3.3.

3.3. Método Campo de Fase

Em um escoamento bifásico, faz-se necessário localizar a posição da interface entre os dois fluidos de interesse. Isso pode ser feito de diferentes formas, utilizando-se métodos eulerianos, métodos lagrangeanos ou até mesmo métodos que combinam os dois tipos de abordagem. Entre os métodos eulerianos de localização da interface, destacam-se os métodos de Captura da Interface, como o Método VOF, o Método S-CLSVOF, o Método *Level Set* e o Método Campo de Fase. Nesses métodos, a posição da interface entre os fluidos não é localizada diretamente. Ao invés disso, utilizam-se variáveis de campo para representar a interface.

Conforme explicado no capítulo de Introdução, optou-se por utilizar o Método Campo de Fase no presente trabalho. Nesse método, a posição da interface é localizada por meio de uma função, que recebe o nome de variável Campo de Fase (ϕ). A variável Campo de Fase (ϕ) é adimensional e pode assumir qualquer valor entre -1 e 1 . Nas regiões do domínio fluido que estão preenchidas somente pela fase contínua, o ϕ é igual a -1 . Já nas regiões que estão preenchidas somente pela fase dispersa, o ϕ é igual a 1 . Por fim, ao longo da fina interface entre os dois fluidos, a variável Campo de Fase varia de maneira contínua entre -1 e 1 .

Pode-se calcular a fração volumétrica da fase contínua em cada ponto do domínio fluido por meio da seguinte equação:

$$V_{fc} = \min\left(\max\left(\frac{(1 - \phi)}{2}, 0\right), 1\right) \quad (3.3)$$

onde V_{fc} é a fração volumétrica da fase contínua [-] e ϕ é a variável Campo de Fase [-].

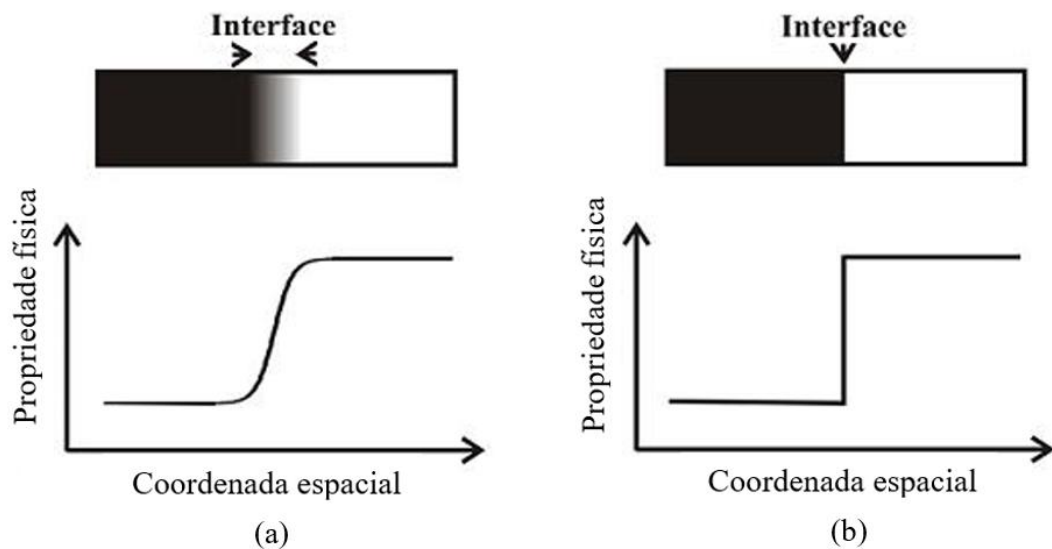
Já a fração volumétrica da fase dispersa é igual a:

$$V_{fd} = \min\left(\max\left(\frac{(1 + \phi)}{2}, 0\right), 1\right) \quad (3.4)$$

onde V_{fd} é a fração volumétrica da fase dispersa [-]. As operações mínimo (*min*) e máximo (*max*) são utilizadas para garantir que a fração volumétrica tenha um limite inferior igual a 0 e um limite superior igual a 1.

No Método Campo de Fase, considera-se a interface entre dois fluidos imiscíveis como sendo uma fina camada de mistura (em inglês, *mixing layer*), ao longo da qual as propriedades físicas variam rapidamente, porém de maneira contínua (YUE *et al.*, 2006). Desse modo, o Método Campo de Fase é considerado um método de interface difusa, conforme exemplificado na Figura 3.1a. Em contrapartida, existem os métodos de interface aguda (Figura 3.1b), nos quais a interface é tratada como sendo uma descontinuidade dentro do domínio. Nesse caso, as propriedades físicas dos fluidos variam abruptamente na região do encontro entre as duas fases.

Figura 3.1 – Comparação entre dois tipos de interface entre os fluidos. (a) Interface difusa. (b) Interface aguda.



Fonte: Adaptado de Moelans *et al.* (2008).

Partindo da ideia de interface difusa, podemos então calcular, respectivamente, a massa específica e a viscosidade dinâmica na interface entre os fluidos a partir das seguintes equações:

$$\rho = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)V_{fd} \quad (3.5)$$

$$\mu = \mu_c + (\mu_d - \mu_c)V_{fd} \quad (3.6)$$

onde ρ e μ são, respectivamente, a massa específica e a viscosidade dinâmica na interface entre os dois fluidos; ρ_c e μ_c são, respectivamente, a massa específica e a viscosidade dinâmica do fluido na fase contínua e ρ_d e μ_d são, respectivamente, a massa específica e a viscosidade dinâmica do fluido na fase dispersa.

Feitas essas definições básicas, precisamos então saber como é calculada a variável Campo de Fase (ϕ). Conforme dito anteriormente, quando dois fluidos imiscíveis entram em contato, uma pequena quantidade dos fluidos se mistura dentro da fina interface entre eles. A energia livre dessa mistura é igual à chamada “energia de mistura”, que representa a interação molecular entre as duas fases. Essa energia pode ser descrita pela equação da densidade de energia de mistura de Ginzburg-Landau (YUE *et al.*, 2006):

$$f_{mix}(\phi, \nabla\phi) = \frac{1}{2}\lambda|\nabla\phi|^2 + \frac{\lambda}{4\varepsilon^2}(\phi^2 - 1)^2 \quad (3.7)$$

onde f_{mix} é a densidade de energia de mistura [J/m³]; λ é um parâmetro relacionado à densidade de energia de mistura e possui dimensão de força [N] e ε é um parâmetro relacionado à espessura da interface [m]. No COMSOL, o valor de ε pode ser escolhido pelo usuário. Por padrão, ele é definido como sendo igual a metade do maior tamanho de elemento de malha na região onde a interface entre os dois fluidos está localizada. No presente trabalho, utilizou-se essa definição. O parâmetro λ se relaciona ao parâmetro ε por meio da seguinte equação:

$$\lambda = \frac{3\varepsilon\sigma}{2\sqrt{2}} \quad (3.8)$$

onde σ é o coeficiente de tensão superficial [N/m]. O valor do coeficiente de tensão superficial (σ) deve ser fornecido ao COMSOL pelo usuário e varia de acordo com os fluidos que estão sendo estudados. Esse coeficiente pode ser medido, por exemplo, por meio de um tensiômetro (FU *et al.*, 2011). Assim, de posse do coeficiente de tensão superficial (σ) e da espessura da interface (ε), pode-se calcular o parâmetro λ por meio da equação 3.8.

É importante também definir o potencial químico (G) de uma substância, que representa o quanto a energia livre de um sistema varia conforme se altera a quantidade de átomos ou moléculas dessa substância no sistema (CHEN, 2019). No Método Campo de Fase, essa grandeza pode ser escrita por meio da seguinte equação:

$$G = \frac{D \int f_{mix} d\Omega}{D\phi} = \lambda \left[-\nabla^2 \phi + \frac{\phi(\phi^2 - 1)}{\varepsilon^2} \right] \quad (3.9)$$

onde G é o potencial químico [J/mol] e Ω representa o domínio fluido.

O comportamento da variável Campo de Fase (ϕ) é governado por uma equação diferencial parcial chamada de equação de Cahn-Hilliard:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \gamma \nabla G \quad (3.10)$$

onde γ é um parâmetro conhecido como mobilidade [$\text{m}^3 \cdot \text{s} / \text{kg}$]. A mobilidade (γ) determina a escala de tempo da difusão da equação de Cahn-Hilliard. No COMSOL, a mobilidade é relacionada à espessura da interface (ε) e é determinada por meio da seguinte expressão:

$$\gamma = \chi \varepsilon^2 \quad (3.11)$$

onde χ é o parâmetro de ajuste da mobilidade [$\text{m} \cdot \text{s} / \text{kg}$]. O parâmetro de ajuste da mobilidade (χ) pode ser escolhido pelo usuário do programa. Esse parâmetro deve ser escolhido de forma que a mobilidade (γ) não seja nem tão grande nem tão pequena. Se a mobilidade tiver um valor muito pequeno, não é possível manter uma espessura interfacial constante. Já se a mobilidade tiver um valor muito alto, os termos convectivos da equação de Cahn-Hilliard acabam sendo excessivamente amortecidos. Por padrão, ele é definido como sendo igual a 1.

A equação de Cahn-Hilliard (Equação 3.10) é uma equação diferencial parcial de quarta ordem. A fim de facilitar sua resolução, essa equação pode ser decomposta em duas equações diferenciais parciais de segunda ordem. Para isso, substitui-se a definição de potencial químico (G) da Equação 3.9 na Equação 3.10:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \gamma \nabla \left(\lambda \left[-\nabla^2 \phi + \frac{\phi(\phi^2 - 1)}{\varepsilon^2} \right] \right) \quad (3.12)$$

Manipulando a Equação 3.12, obtém-se:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \gamma \nabla \left(\lambda \left[\frac{-\varepsilon^2 \nabla^2 \phi + \phi(\phi^2 - 1)}{\varepsilon^2} \right] \right) \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\varepsilon^2} \nabla (-\nabla \cdot \varepsilon^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi) \quad (3.14)$$

Em seguida, define-se uma variável auxiliar (ψ) como sendo igual a:

$$\psi = -\nabla \cdot \varepsilon^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi \quad (3.15)$$

Então, substituindo a variável ψ na Equação 3.14, obtém-se:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\varepsilon^2} \nabla \psi \quad (3.16)$$

Desse modo, foi possível decompor a equação de Cahn-Hilliard (Equação 3.10) em duas equações diferenciais parciais de segunda ordem (Equação 3.15 e Equação 3.16). Essas duas equações devem ser resolvidas, em cada instante de tempo (t), para se obter as variáveis dependentes (ϕ e ψ).

Por fim, cabe destacar que, no Método Campo de Fase, a força de tensão superficial é implementada por meio da seguinte equação:

$$\mathbf{F}_{TS} = G \nabla \phi \quad (3.17)$$

Alternativamente, pode-se escrever:

$$\mathbf{F}_{TS} = \left(\frac{\lambda}{\varepsilon^2} \psi \right) \nabla \phi \quad (3.18)$$

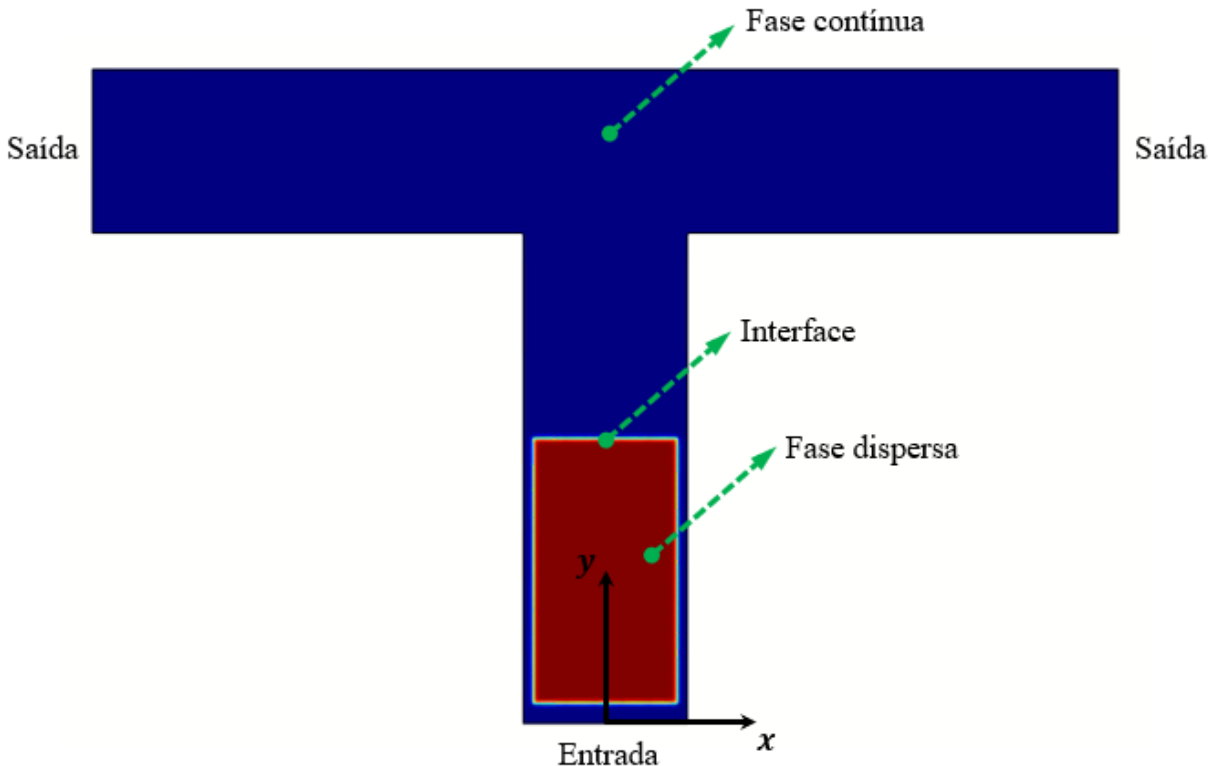
A força de tensão superficial é então utilizada no cálculo das equações de Navier-Stokes (Equação 3.2).

3.4. Condições iniciais e condições de contorno

Para resolver as equações diferenciais parciais que governam o escoamento, faz-se necessário especificar condições iniciais e condições de contorno. As condições iniciais são os valores que as variáveis dependentes assumem no início da simulação ($t = 0$). Assim, deve-se especificar os valores iniciais da pressão (p), da velocidade (\mathbf{V}) e da variável Campo de Fase (ϕ). Já as condições de contorno são restrições aplicadas às fronteiras do domínio fluido como, por exemplo, valores fixos que uma variável deve assumir nas fronteiras.

A Figura 3.2 mostra a configuração inicial do microcanal com bifurcação em T, com a indicação do posicionamento da entrada, das saídas, da fase contínua, da fase dispersa e da interface entre os fluidos. As demais fronteiras do domínio são fronteiras sólidas (paredes).

Figura 3.2 - Configuração inicial do microcanal com bifurcação em T estudado.



Fonte: Elaborada pelo autor.

No presente estudo, foram aplicadas as seguintes condições iniciais:

- 1) Nas regiões do domínio fluido inicialmente preenchidas pela fase contínua, estipulou-se que a pressão seria igual a 0 e que a velocidade também seria igual a 0 para todos os casos estudados. Além disso, foi especificado também que a variável Campo de Fase (ϕ) seria igual a -1 nessa região.
- 2) Nas regiões do domínio fluido inicialmente preenchidas pela fase dispersa, estipulou-se que a pressão seria igual a 0 e que a componente y da velocidade estaria em uma faixa entre 0,002 e 0,005 m/s, de acordo com o número de capilaridade que desejava-se obter para cada caso. Além disso, foi especificado também que a variável Campo de Fase (ϕ) seria igual a 1 nessa região.
- 3) Na fronteira entre a fase contínua e a fase dispersa, especificou-se um valor inicial igual a 0 para a variável Campo de Fase (ϕ), pois é nessa fronteira que está localizada a interface entre os fluidos.

Também foram aplicadas as seguintes condições de contorno:

- 1) Nas fronteiras sólidas (paredes), aplicou-se a condição de não deslizamento (*no-slip condition*). Essa condição especifica que a velocidade do fluido imediatamente em contato com a fronteira sólida deve ser igual à velocidade da fronteira sólida. Assim, se a parede está em repouso, então a velocidade do fluido em contato com a parede deve ser igual a 0. Isso se aplica tanto para a componente tangencial (V_t) quanto para a componente normal (V_n) da velocidade do fluido na parede.
- 2) Na entrada do domínio, foi adotado um perfil de velocidade característico de um escoamento laminar totalmente desenvolvido entre placas paralelas (WHITE, 2011).

$$v = v_{m\acute{a}x} \left(1 - \frac{x^2}{\left(\frac{W}{2}\right)^2} \right) \quad (3.19)$$

onde v é a componente y do vetor velocidade [m/s], x é uma coordenada cartesiana [m], conforme mostrado na Figura 3.2, w é a largura do microcanal [m] e $v_{m\acute{a}x}$ é a velocidade máxima do perfil de velocidade [m/s], que ocorre na linha de centro do microcanal ($x = 0$).

No COMSOL, o usuário deve estabelecer qual é a velocidade média ($v_{m\acute{e}d}$) do perfil de velocidade que se quer impor como condição de contorno. A partir da velocidade média, pode-se obter a velocidade máxima:

$$v_{m\acute{a}x} = \frac{3}{2}v_{m\acute{e}d} \quad (3.20)$$

Faz-se necessário também impor condições de contorno para a variável Campo de Fase (ϕ) e para a pressão na entrada do domínio fluido. Para tanto, estipulou-se que a variável Campo de Fase (ϕ) seria igual a -1 na entrada, pois o fluido que está entrando no domínio é o fluido que constitui a fase contínua ($\phi = -1$). Especificou-se também que a pressão seguiria uma condição de contorno de Neumann do tipo “zero gradiente”. Assim, na entrada é imposta a seguinte condição de contorno para a pressão:

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0 \quad (3.21)$$

onde n é a direção perpendicular à área de entrada.

- 3) Nas saídas do domínio, estipulou-se que a pressão seria igual a 0 (pressão atmosférica) e que a velocidade e a variável Campo de Fase (ϕ) seguiriam a condição de contorno de “zero gradiente”. Assim, nas saídas são impostas as seguintes condições de contorno para a velocidade e para a variável Campo de Fase (ϕ):

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial n} = 0 \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad (3.23)$$

3.5. Números adimensionais relevantes

Na Mecânica dos Fluidos, é muito comum reduzir-se o número e a complexidade das variáveis que afetam determinado escoamento através da análise dimensional (WHITE, 2011). Se um determinado problema é caracterizado por uma quantidade x de variáveis dimensionais, a análise dimensional é capaz de reduzir a quantidade de variáveis envolvidas a apenas y variáveis adimensionais, também conhecidas como números adimensionais. Além dessa redução na quantidade de variáveis, os números adimensionais permitem que seja possível comparar escoamentos com diferentes valores dos parâmetros físicos, geométricos, etc. (massa específica, viscosidade, escala). Basta que os escoamentos estudados possuam os mesmos valores para os números adimensionais.

No estudo do escoamento de gotas em microcanais, são utilizados normalmente os seguintes números adimensionais:

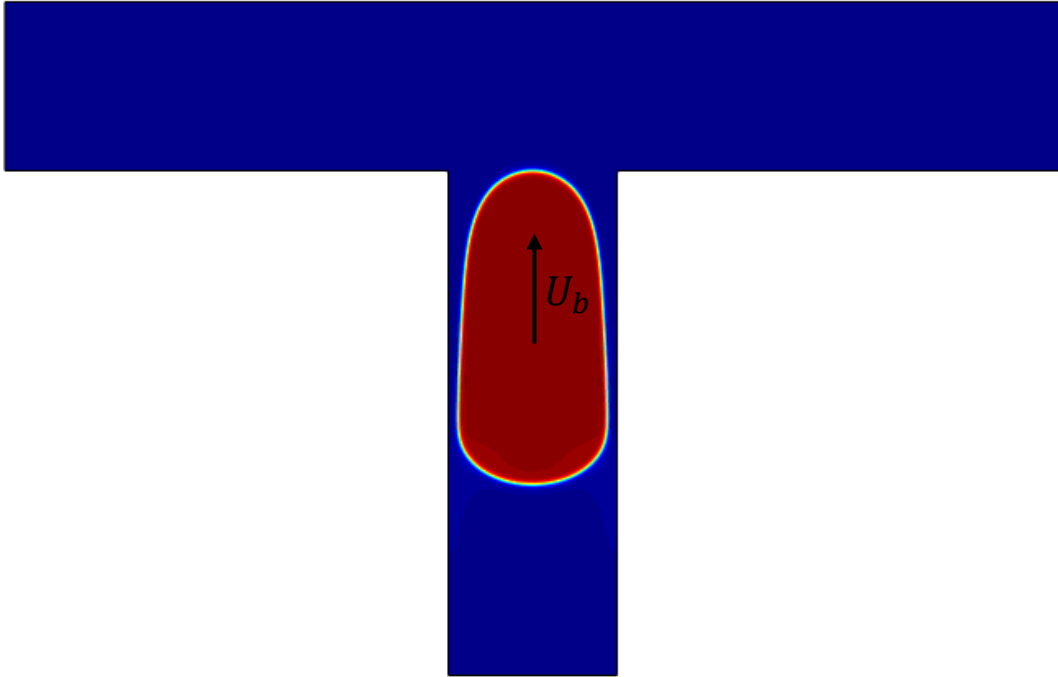
1. **Número de capilaridade (Ca):** representa a relação entre as forças viscosas e a força devido à tensão superficial que aparece na interface entre dois líquidos imiscíveis ou na interface entre um líquido e um gás.

Quanto maior é o número de capilaridade, mais as forças viscosas predominam sobre os efeitos da tensão superficial. Em contrapartida, quanto menor é o número de capilaridade, mais os efeitos da tensão superficial predominam no escoamento sobre os efeitos devidos à viscosidade. No presente trabalho, os escoamentos estudados possuem baixos valores do número de capilaridade e, portanto, os efeitos da tensão superficial são bastante importantes. O número de capilaridade (Ca) é definido como:

$$Ca = \frac{\mu U}{\sigma} \quad (3.24)$$

onde U é uma velocidade característica [m/s]. No estudo do movimento de gotas em microcanais, a velocidade característica é comumente definida como sendo a velocidade baricêntrica da gota no momento que ela atinge a bifurcação do microcanal, conforme ilustrado na Figura 3.3.

Figura 3.3 - Velocidade baricêntrica da gota no momento que ela atinge a bifurcação do microcanal.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A velocidade baricêntrica da gota é calculada a partir da seguinte equação:

$$U_b = \frac{\int v \, d\Omega}{\int V_{fd} \, d\Omega} \quad (3.25)$$

onde v é a componente do vetor velocidade na direção y [m/s]; Ω é a região do domínio fluido onde a variável Campo de Fase é maior do que 0 ($\phi > 0$) e V_{fd} é a fração volumétrica da fase dispersa [-]. A integração é feita somente na região em que ϕ é maior do que 0, pois é nessa região que está localizada a fase dispersa (gota).

Com relação à viscosidade dinâmica (μ), normalmente utiliza-se a viscosidade da fase contínua para o cálculo do número de capilaridade. Nesse caso, calcula-se o chamado “número de capilaridade da fase contínua”. Portanto, no presente trabalho, utilizou-se:

$$Ca = \frac{\mu_c U_b}{\sigma} \quad (3.26)$$

- 2. Número de Reynolds (Re):** representa a relação entre as forças inerciais e as forças viscosas. Esse número adimensional recebe o nome do físico e engenheiro irlandês Osborne Reynolds, que foi quem popularizou seu uso.

Quanto maior é o número de Reynolds, mais as forças inerciais predominam sobre os efeitos das forças viscosas. Em contrapartida, quanto menor é o número de Reynolds, mais as forças viscosas predominam no escoamento sobre as forças inerciais.

O número de Reynolds (Re) é definido como:

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (3.27)$$

onde U é uma velocidade característica [m/s] e L é um comprimento característico [m]. Assim como acontece no cálculo do número de capilaridade, a velocidade característica (U) é definida como sendo a velocidade baricêntrica da gota (U_b) no momento que ela chega na bifurcação. Além disso, o comprimento característico (L) é normalmente representado pela largura do microcanal (w). É comum também utilizar a massa específica (ρ) e a viscosidade dinâmica (μ) da fase contínua no cálculo do número de Reynolds. Portanto, no presente trabalho:

$$Re = \frac{\rho_c U_b w}{\mu_c} \quad (3.28)$$

- 3. Razão de viscosidades:** é um parâmetro muito utilizado em estudos de escoamentos bifásicos, pois ele influencia o comportamento da gota ou da bolha. É definido como sendo a razão entre a viscosidade da fase dispersa e a viscosidade da fase contínua:

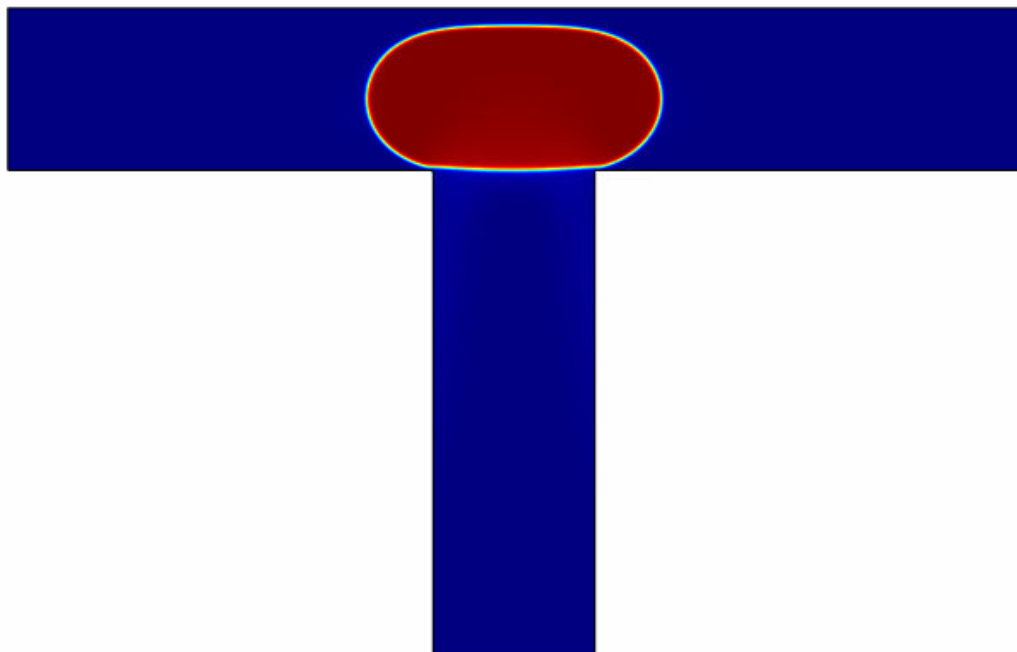
$$\lambda_{visc} = \frac{\mu_d}{\mu_c} \quad (3.29)$$

- 4. Tempo adimensional:** é definido da seguinte maneira:

$$t^* = \frac{Ut}{w} \quad (3.30)$$

onde t é o tempo dimensional [s]; U é uma velocidade característica [m/s] e w é a largura do microcanal [m]. Assim como acontece no cálculo do número de capilaridade, a velocidade característica (U) é definida como sendo a velocidade baricêntrica da gota (U_b) no momento que ela chega na bifurcação. Além disso, no estudo da ruptura de gotas em bifurcações, o tempo inicial ($t = 0$) é definido como sendo o momento em que a gota acaba de entrar completamente na bifurcação, conforme a Figura 3.4.

Figura 3.4 - Tempo inicial ($t = 0$), definido como sendo o momento em que a gota acaba de entrar completamente na bifurcação.



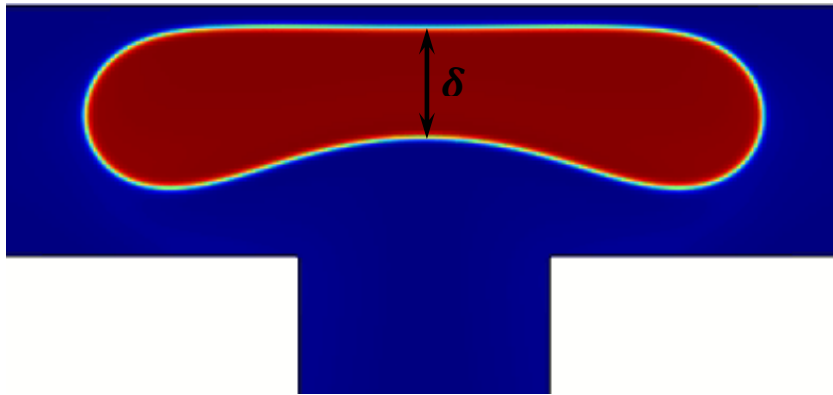
Fonte: Elaborada pelo autor.

- 5. Espessura adimensional da gota:** é um parâmetro muito utilizado no estudo da ruptura de gotas em bifurcações, pois ele permite avaliar a evolução da gota independentemente do tamanho do canal. A espessura adimensional é definida como:

$$\delta^* = \frac{\delta}{w} \quad (3.31)$$

onde δ é a espessura mínima do pescoço da gota [m] e w é a largura do microcanal [m]. A Figura 3.5 mostra como é medida a espessura mínima do pescoço da gota (δ). Esse valor pode ser determinado por meio das ferramentas de pós-processamento do COMSOL.

Figura 3.5 - Espessura mínima do pescoço da gota (δ).



Fonte: Elaborada pelo autor.

3.6. Método numérico

As leis da física são expressas por meio de modelos matemáticos, os quais comumente são escritos na forma de equações diferenciais parciais. Como exemplos de equações desse tipo, podemos citar as equações de Navier-Stokes, apresentadas anteriormente neste capítulo. As equações diferenciais parciais somente possuem solução analítica para casos muito específicos como, por exemplo, em algumas situações em que a geometria do problema é muito simples e nos casos em que é possível utilizar várias hipóteses simplificadoras. Entretanto, para a imensa maioria dos problemas estudados, a geometria é complicada e as equações não podem ser muito simplificadas. É nesse contexto que entram os métodos numéricos para solução de equações diferenciais parciais.

Os métodos numéricos subdividem um domínio em diversas partes menores e mais simples. O domínio que se obtém ao subdividir o espaço físico é chamado de malha computacional. Após a construção da malha, as equações diferenciais são discretizadas, resultando em um sistema de equações algébricas. Ao resolver esse sistema de equações, obtém-se uma solução discreta que é uma aproximação para a solução do modelo matemático utilizado. Quanto mais refinada for a malha, ou seja, quanto maior for a quantidade de subdivisões do domínio, mais a solução discreta se aproxima da solução real.

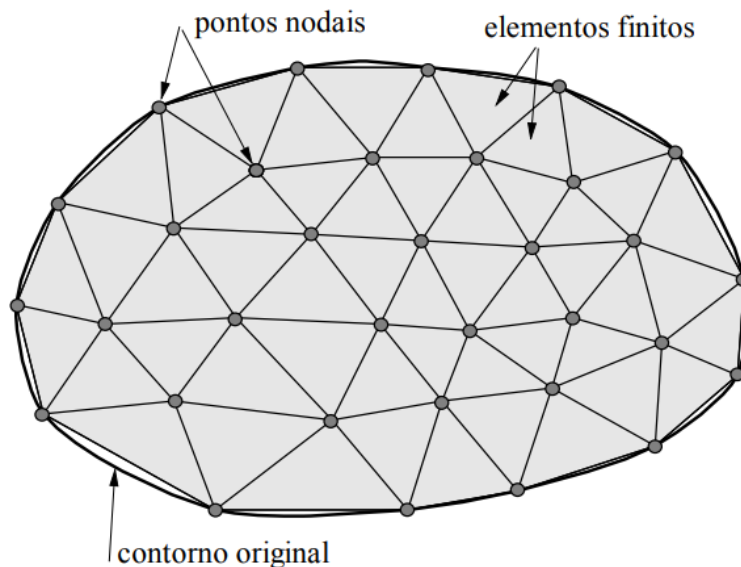
Existem vários métodos que podem ser utilizados para discretizar as equações diferenciais no espaço. Entre eles, destacam-se o Método das Diferenças Finitas, o Método dos Volumes Finitos e o Método dos Elementos Finitos. No presente trabalho, será abordado somente o Método dos Elementos Finitos, pois esse é o método de discretização utilizado pelo COMSOL.

3.6.1. Discretização espacial das equações e o Método dos Elementos Finitos

No Método dos Elementos Finitos (MEF), o domínio estudado é subdividido em uma quantidade finita de células, as quais recebem o nome de elementos. Em problemas bidimensionais, os elementos costumam assumir formas triangulares ou quadrilaterais, com lados retilíneos ou curvados. Já em problemas tridimensionais, os elementos costumam ser tetraédricos, hexaédricos, prismáticos ou piramidais.

A solução do problema é calculada nos chamados pontos nodais ou nós, que podem ser, por exemplo, os vértices ou os pontos médios dos elementos. A Figura 3.6 exemplifica um corpo bidimensional sobre o qual foi construída uma malha de elementos finitos triangulares com nós localizados nos vértices dos elementos.

Figura 3.6 – Exemplo de malha de elementos finitos bidimensional com elementos triangulares e nós (ou pontos nodais) localizados nos vértices dos elementos.



Fonte: Souza (2003).

No Método dos Elementos Finitos, para se obter um sistema de equações algébricas, é necessário efetuar algumas manipulações nas equações diferenciais que governam o problema estudado. Em primeiro lugar, é feito o produto escalar dos termos das equações por funções peso. Em seguida, a equação obtida é integrada por partes sobre todo o domínio. Então, a equação integral é discretizada sobre a malha computacional. Deste modo, obtém-se uma equação aproximada escrita na forma de somatórios. A equação discretizada possui como incógnitas os valores das variáveis dependentes em cada nó da malha. Essa equação, em conjunto com as condições de contorno, forma um sistema de equações algébricas.

No caso das equações de Navier-Stokes, é obtido um sistema de equações não-lineares, o que dificulta muito a solução do sistema matricial utilizando-se de método diretos de inversão de matrizes. Portanto, costuma-se empregar métodos iterativos para resolver o sistema. Esses métodos se baseiam na redução do resíduo das equações até que seu valor se torne menor do que a tolerância especificada.

No Método dos Elementos Finitos, a solução das equações é calculada somente nos nós. Desse modo, faz-se necessária uma maneira de calcular a solução para os demais pontos do domínio (fora dos pontos nodais), para que se obtenha os campos de velocidade, de pressão, etc. Isso é feito combinando-se a solução discretizada com as funções de forma (em inglês, *shape functions* ou *basis functions*).

As funções de forma servem para interpolar a solução entre os valores discretos obtidos nos nós da malha. Cada nó possui uma ou mais funções de forma associadas a ele. As funções de forma recebem esse nome devido ao fato de que elas dependem do formato do elemento. Além disso, essas funções podem ser de diferentes ordens: primeira ordem (lineares), segunda ordem (quadráticas), terceira ordem (cúbicas), e assim por diante. Quanto maior a ordem das funções de forma, maior é a precisão da interpolação e, conseqüentemente, da própria solução. Em contrapartida, quanto maior a ordem das funções de forma, maior é o custo computacional.

O COMSOL costuma utilizar funções de forma de Lagrange e, por padrão, a ordem da função é determinada automaticamente pelo programa de acordo com o tipo de problema que está sendo estudado (mecânica estrutural, mecânica dos fluidos, transferência de calor, eletromagnetismo, etc.). Entretanto, o usuário também é livre para escolher qual será a ordem das funções de forma utilizadas para cada variável dependente do problema.

No presente trabalho, utilizou-se as ordens padrão determinadas pelo COMSOL. Desse modo, foram usadas funções de forma de primeira ordem (lineares) tanto para a velocidade

quanto para a pressão. O COMSOL usa a nomenclatura P1+P1 para se referir a esse tipo de discretização no qual tanto a velocidade quanto a pressão têm funções de primeira ordem. Já para a variável Campo de Fase (ϕ), foram utilizadas funções de forma de segunda ordem (quadráticas).

Por fim, é importante destacar que, para simulações transientes, além da discretização espacial das equações diferenciais que governam um problema, faz-se necessário também a discretização temporal das equações. Ou seja, da mesma maneira que a geometria do problema é subdividida em partes menores, o tempo total do problema estudado também é subdividido em intervalos de tempo menores, os chamados passos de tempo (em inglês, *timesteps*). Desse modo, a solução é obtida somente para determinados valores de tempo (t), devendo ser interpolada para os demais tempos.

3.6.2. Discretização temporal das equações e o Método BDF

No COMSOL, estão disponíveis diferentes métodos de discretização temporal, tais quais os Métodos Alpha Generalizado, os Métodos Runge-Kutta e o Método de Diferenças Finitas Atrasadas Implícito, mais conhecido como Método BDF (do inglês, *Backward Differentiation Formula*).

Os Métodos Alpha Generalizado são os métodos padrão utilizados pelo COMSOL em aplicações que são sensíveis a dissipação excessiva, como por exemplo em problemas de mecânica estrutural e de acústica. Já os Métodos Runge-Kutta são comumente utilizados em sistemas de equações diferenciais ordinárias, não sendo tão eficientes para problemas que envolvem equações diferenciais parciais. Por fim, para aplicações de transporte, como as equações de Navier-Stokes, o COMSOL utiliza como padrão o Método BDF, devido a sua maior robustez, estabilidade e versatilidade. Portanto, no presente trabalho, utilizou-se o Método BDF para realizar a discretização temporal.

Para ilustrar o Método BDF, considera-se o seguinte problema de valor inicial:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad \text{com } y(t_0) = y_0 \quad (3.32)$$

onde y é uma variável qualquer, y_0 é o valor inicial dessa variável, t é o tempo e t_0 é o tempo inicial. Além disso, define-se o passo de tempo (Δt) da simulação numérica como sendo igual a:

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n \quad (3.33)$$

onde t_n e t_{n+1} são dois instantes de tempo consecutivos quaisquer.

O Método BDF pode ser de diversas ordens, de acordo com o grau dos polinômios de interpolação de Lagrange utilizados para aproximar a derivada temporal. No Método BDF de primeira ordem (BDF1), também conhecido como Método de Euler Implícito, a incógnita y é calculada da seguinte maneira:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \cdot f(t_{n+1}, y_{n+1}) \quad (3.34)$$

onde y_n e y_{n+1} são os valores da variável y em dois instantes de tempo consecutivos quaisquer.

Já no Método BDF de segunda ordem (BDF2), utiliza-se a seguinte expressão:

$$y_{n+1} = \frac{4}{3}y_n - \frac{1}{3}y_{n-1} + \frac{2}{3} \cdot \Delta t \cdot f(t_{n+1}, y_{n+1}) \quad (3.35)$$

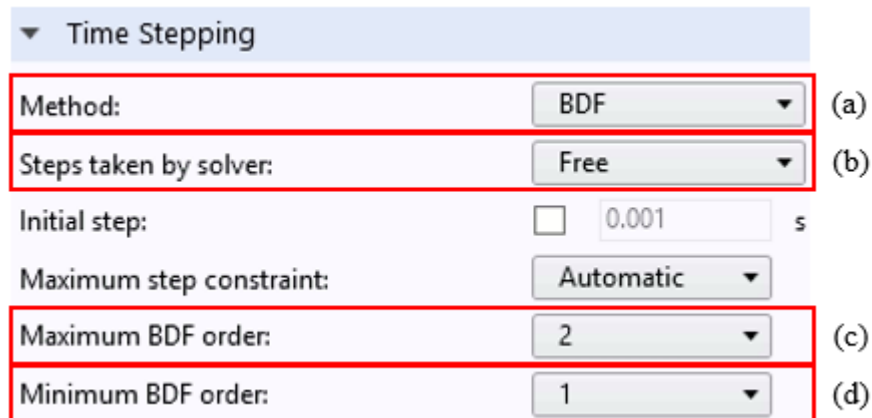
onde y_{n-1} também representa o valor da variável y em um instante de tempo qualquer, imediatamente anterior ao instante t_n .

É importante destacar que o Método BDF é um método implícito, pois a nova aproximação (y_{n+1}) aparece nos dois lados da equação. Desse modo, faz-se necessário um método iterativo para resolver a equação.

No COMSOL, é possível escolher qual será a ordem mínima e a ordem máxima utilizadas pelo Método BDF, podendo ser qualquer ordem entre 1 e 5. A partir disso, o programa escolhe qual ordem será utilizada a cada passo de tempo. Em momentos da simulação em que as variações temporais são elevadas, utiliza-se ordens maiores, devido à maior precisão necessária. Por outro lado, são utilizadas ordens menores sempre que for preciso aumentar a estabilidade da solução. No presente trabalho, utilizou-se o Método BDF de primeira e de segunda ordem.

Por fim, é importante notar que o COMSOL permite ao usuário decidir como será controlado o passo de tempo utilizado em uma simulação. Entre os modos de controle do passo de tempo disponíveis, destacam-se o Modo Manual e o Modo Livre. No Modo Manual, o usuário pode escolher o valor de passo de tempo que será utilizado. Já no Modo Livre, o próprio programa decide quais serão os valores dos passos de tempo. Nesse caso, o COMSOL tentará sempre utilizar o maior valor possível para o passo de tempo, a fim de minimizar o custo computacional. Entretanto, o programa irá automaticamente reduzir o passo de tempo sempre que for necessário. Isso acontece, por exemplo, quando a solução estiver variando rapidamente no tempo ou quando a simulação não estiver convergindo. No presente estudo, utilizou-se o Modo Livre para o controle do passo de tempo. A Figura 3.7 ilustra a escolha dos parâmetros relacionados à discretização temporal no COMSOL.

Figura 3.7 – Tela de escolha dos parâmetros relacionados à discretização temporal no COMSOL. (a) Método de discretização temporal. (b) Modo de controle do passo de tempo da simulação. (c) Ordem máxima utilizada pelo Método BDF. (d) Ordem mínima utilizada pelo Método BDF.



Fonte: Elaborada pelo autor.

3.6.3. Refinamento adaptativo da malha

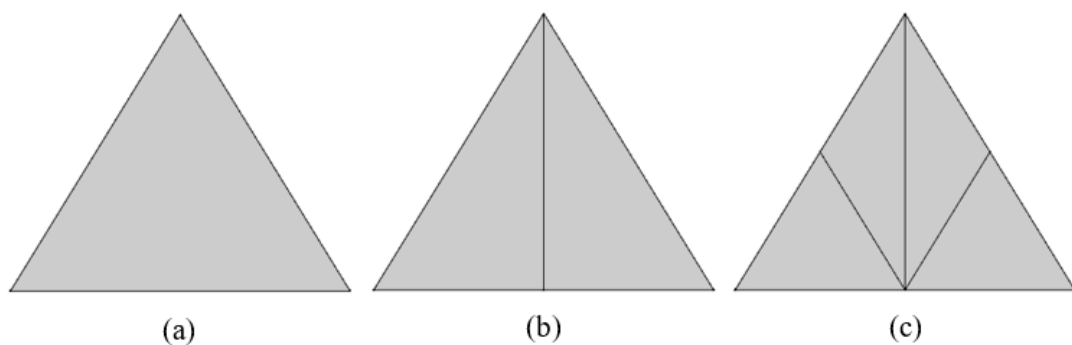
Ao implementar o Método Campo de Fase, é necessário retratar apropriadamente a interface entre dois fluidos imiscíveis. A espessura dessa interface está na ordem de dezenas de nanômetros. Entretanto, a escala dos escoamentos que normalmente são estudados costuma ser

maior do que a escala da interface. Portanto, essa disparidade de escalas acaba sendo um dos maiores desafios para o Método Campo de Fase (YUE *et al.*, 2006).

Para representar corretamente o tamanho da interface, é necessário utilizar uma malha bastante refinada ao longo do domínio fluido. Entretanto, essa exigência de refinamento faz com que a solução desse tipo de problema seja muito demorada e computacionalmente custosa, mesmo para problemas bidimensionais (2D). Uma estratégia interessante para contornar esse problema é o chamado refinamento adaptativo da malha. Com essa técnica, é possível concentrar o refinamento da malha somente nas regiões com maiores gradientes das propriedades, como é o caso da interface entre os fluidos. Desse modo, pode-se utilizar uma malha bem menos refinada nas demais regiões do domínio fluido, o que faz com que a solução do problema fique mais rápida e menos custosa.

A seguir, será explicado o processo utilizado pelo COMSOL para realizar o refinamento adaptativo da malha. Em primeiro lugar, o usuário do programa deve definir de quanto em quanto tempo será realizado o refinamento adaptativo da malha. Chamaremos esse intervalo de Δt_{adap} . Além disso, o usuário também deve definir a maneira com que será feito o refinamento da malha. No presente trabalho, o refinamento foi feito dividindo-se ao meio o maior lado de um elemento de malha, conforme a Figura 3.8. Definiu-se também que cada elemento de malha seria refinado duas vezes. Portanto, cada elemento origina quatro elementos.

Figura 3.8 - Método de refinamento da malha utilizado na região da interface entre os dois fluidos. (a) Elemento de malha sem refinamento. (b) Elemento de malha após ter sido refinado uma vez, formando dois elementos. (c) Elementos de malha após ter sido refinado duas vezes, formando quatro elementos.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Por fim, deve-se determinar também qual será o critério utilizado para escolher os elementos da malha que serão refinados, conforme será mostrado mais adiante.

O refinamento adaptativo da malha funciona por meio do seguinte algoritmo:

1. As equações governantes do problema são resolvidas sobre a última malha que foi gerada. Na primeira iteração do algoritmo (quando $t = 0$), as equações são resolvidas sobre a malha inicial, ou seja, a malha que foi construída pelo usuário do programa (também chamada de malha base). Nas demais iterações, as equações são resolvidas sobre a malha adaptada obtida no refinamento anterior.
2. Estima-se o erro da solução em todos os elementos da malha. A estimativa do erro é feita de acordo com um critério definido pelo usuário do programa. É comum utilizar-se como indicador de erro a norma euclidiana do gradiente de variáveis dependentes. Por exemplo, pode-se utilizar o gradiente da temperatura em problemas de transferência de calor ou o gradiente da velocidade em escoamentos com grandes variações dessa grandeza.
3. Refina-se um subconjunto dos elementos da malha base de acordo com os indicadores de erro, de modo a obter uma nova malha. Nos locais em que o erro é maior, a malha sofre um refinamento maior. Já nos locais onde o erro é menor, a malha é pouco refinada ou simplesmente não é refinada.
4. A solução que foi obtida usando a malha inicial é então mapeada para a nova malha (malha adaptada).
5. As equações governantes do problema são resolvidas sobre a nova malha e o programa começa a “avançar no tempo”, dando sucessivos passos de tempo (*timesteps*), até terminar o intervalo (Δt_{adap}) definido pelo usuário.
6. Retorna-se então ao início do algoritmo, para que seja criada uma nova malha adaptada, de acordo com os novos valores dos indicadores de erro.

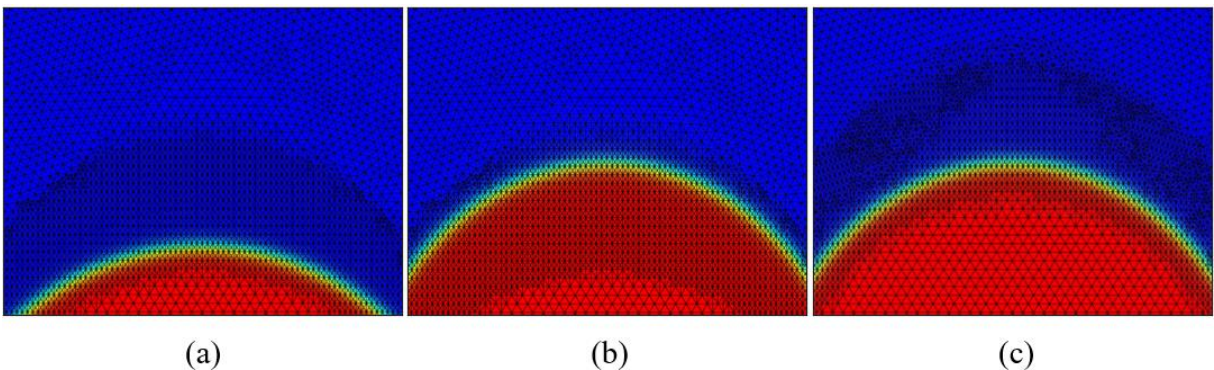
No presente trabalho, utilizou-se como indicador de erro a norma euclidiana do gradiente da variável Campo de Fase (ϕ):

$$\sqrt{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)^2} \quad (3.36)$$

onde x e y são coordenadas cartesianas [m].

Desse modo, nas regiões do domínio fluido em que o gradiente da variável Campo de Fase é maior, a malha sofre um refinamento maior. Já nos locais em que o gradiente é menor, a malha é pouco refinada ou simplesmente não é refinada. Conforme mostrado anteriormente neste capítulo, ao longo da fina interface entre os dois fluidos, a variável Campo de Fase varia entre -1 e 1 , sendo constante no resto do domínio ($\phi = 1$ para a fase dispersa e $\phi = -1$ para a fase contínua). Desse modo, o gradiente de ϕ é elevado na região onde está localizada a interface e é igual a 0 nas demais regiões. Conseqüentemente, o refinamento adaptativo acontece somente na região da interface entre as duas fases, conforme mostrado na Figura 3.9.

Figura 3.9 - Refinamento adaptativo da malha. (a) Malha em um instante de tempo qualquer ($t = t_n$), imediatamente após um refinamento adaptativo inicial. (b) Mesma malha do item “a”, imediatamente antes de um novo refinamento adaptativo ($t = t_n + \Delta t_{adap}$). (c) Nova malha gerada após um refinamento adaptativo ($t = t_n + \Delta t_{adap}$).



Fonte: Elaborada pelo autor.

Pode-se perceber que a região na qual o refinamento adaptativo ocorre é maior do que a região da interface. Isso se deve ao intervalo de tempo (Δt_{adap}) que existe entre um e outro

refinamento adaptativo da malha. Como a interface está se movimentando ao longo desse intervalo de tempo, o refinamento da malha deve cobrir toda a região pela qual a interface irá passar. Analisando a Figura 3.9, verifica-se que a interface se move ao longo da região refinada até chegar próximo à parte superior dessa região (Figura 3.9b). Nesse momento, é feito um novo refinamento adaptativo, o qual muda a posição da região refinada, fazendo com que ela volte a ficar à frente da interface (Figura 3.9c). Normalmente, o campo de velocidades do escoamento é utilizado para determinar o quanto a interface irá se mover e em qual direção. Então, com base nisso, refina-se a malha logo à frente da interface.

Se o intervalo (Δt_{adap}) escolhido for muito grande, o refinamento adaptativo irá refinar uma extensa região do domínio fluido, já que a interface entre os fluidos tende a se mover mais durante esse longo intervalo de tempo. Com isso, as malhas geradas ficam com uma grande quantidade de elementos e, conseqüentemente, a simulação fica mais demorada. Em contrapartida, se o intervalo (Δt_{adap}) escolhido for muito pequeno, o refinamento adaptativo irá refinar uma reduzida região do domínio fluido, já que a interface entre os fluidos tende a se mover menos durante esse curto intervalo de tempo. Com isso, as malhas geradas ficam com menos elementos e, conseqüentemente, a simulação fica mais rápida. Entretanto, ao utilizar essa abordagem, haverá a necessidade de gerar uma grande quantidade de malhas. Isso faz com que o arquivo da simulação ocupe muito espaço em disco, o que pode inviabilizar essa abordagem.

No presente trabalho, foi escolhido um valor intermediário (0,01 s) para o intervalo de tempo (Δt_{adap}) entre os refinamentos da malha, de modo que a simulação não fique muito demorada e que o espaço ocupado em disco não fique muito grande. Esse intervalo de tempo resultava na geração de 50 a 100 malhas para cada caso estudado, dependendo do tempo total do caso.

CAPÍTULO 4 – RESULTADOS

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos nas simulações do escoamento bidimensional de uma gota de Taylor em um microcanal com bifurcação em T (em inglês, *T-junction*). O objetivo foi estudar o comportamento da gota na junção do microcanal, analisando-se a evolução temporal da espessura mínima do seu pescoço e a presença ou não de ruptura da gota. Os resultados obtidos foram comparados com dados teóricos e experimentais retirados da literatura.

As simulações foram feitas utilizando o *software* comercial COMSOL *Multiphysics*®, que é um programa que utiliza o Método dos Elementos Finitos para resolver as equações governantes de diversos tipos de fenômenos físicos. Na fase inicial do trabalho, foram realizados alguns casos testes disponibilizados pelo COMSOL, com o objetivo de familiarizar-se com o programa e entender seu funcionamento. Nesse momento, estudou-se os processos de definição de geometria, malha, condições iniciais e condições de contorno no COMSOL, assim como alguns dos métodos numéricos utilizados e as ferramentas de pós-processamento oferecidas pelo programa.

Todas as simulações foram realizadas em um computador localizado no Laboratório de Transferência de Calor (LabTC) da Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI). O computador utilizado possui um processador Intel® Core™ i7-4770 de 3,40 GHz e uma memória RAM de 12,0 GB.

O presente capítulo inicia apresentando a geometria utilizada nas simulações e as propriedades físicas dos fluidos presentes no escoamento bifásico. Em seguida, são mostrados os procedimentos realizados para a confecção da malha de elementos finitos no COMSOL, destacando-se os testes de refinamento de malha executados e o refinamento local que foi feito em regiões importantes do domínio. Por fim, os resultados obtidos nas simulações são apresentados, discutidos e comparados com dados da literatura.

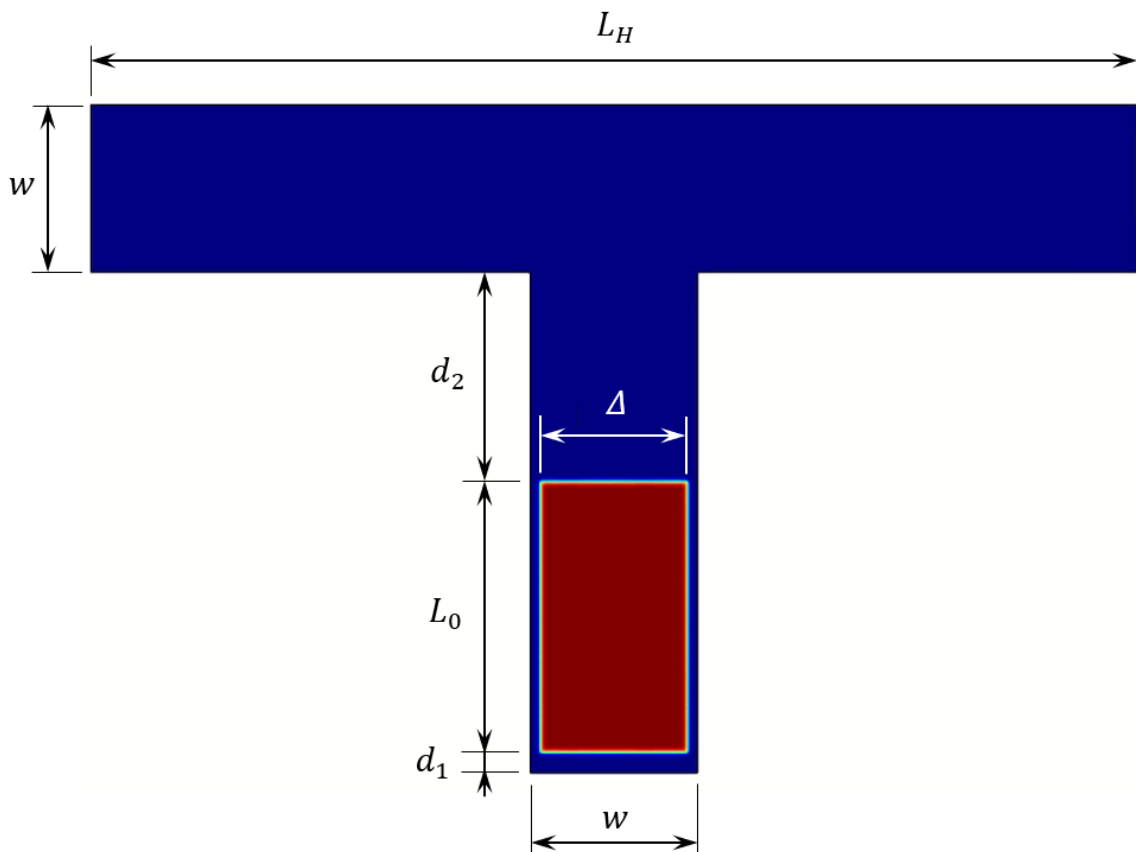
4.1. Definição da geometria e das propriedades físicas dos fluidos

Ao iniciar um modelo no COMSOL, deve-se definir a dimensão do problema estudado (tridimensional, bidimensional, unidimensional ou zero-dimensional), os fenômenos físicos envolvidos (mecânica dos fluidos, mecânica estrutural, acústica, transferência de calor, etc.) e se o problema é em regime permanente ou transiente. Para as simulações realizadas no presente trabalho, foi selecionado o módulo de escoamento bifásico laminar usando o Método Campo

de Fase (descrito na Seção 3.3) do COMSOL, em um modelo bidimensional e em regime transiente. Após essa fase inicial, prosseguiu-se com a definição da geometria do problema.

No COMSOL, é possível importar a geometria que foi feita em algum outro programa. Entretanto, como a geometria do problema estudado é bastante simples, optou-se por utilizar as ferramentas do próprio COMSOL para construí-la. Além da geometria do canal em si, é necessário também definir o formato inicial e a posição da gota (fase dispersa) dentro do microcanal. A Figura 4.1 mostra a geometria do microcanal com bifurcação em T, juntamente com a posição inicial da gota. Na figura, são definidas as seguintes medidas do microcanal: a largura do microcanal (w), a distância entre a entrada do microcanal e a gota (d_1), a distância entre a gota e a entrada da bifurcação (d_2) e o comprimento do canal horizontal (L_H). Com relação à gota, ela é definida, no instante de tempo $t = 0$, como tendo um formato retangular com um comprimento inicial L_0 e uma largura inicial Δ .

Figura 4.1 - Microcanal com bifurcação em T e posição inicial da gota.



Fonte: Elaborada pelo autor.

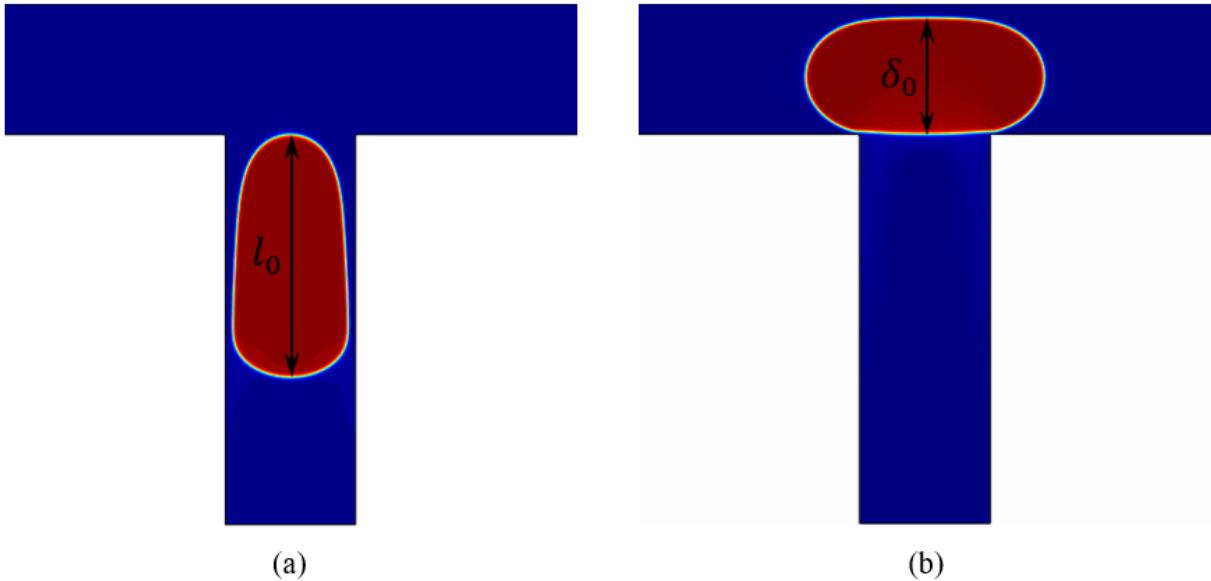
A largura do microcanal (w) foi definida como sendo igual a 400 μm . Já a distância entre a entrada do microcanal e a gota (d_1) é igual a 50 μm .

Conforme a gota se movimenta através do canal de entrada, seu formato vai se modificando, deixando de ser retangular para assumir um formato arredondado. Após certo tempo, ela atinge um estado de equilíbrio, no qual seu formato não se modifica mais. Para efeito de comparação com a literatura, é importante que a gota esteja nesse estado de equilíbrio no momento que ela atinge a bifurcação. Portanto, a distância entre a gota e a entrada da bifurcação (d_2) deve ser grande o suficiente para que a gota atinja sua forma de equilíbrio antes de chegar na junção. Ao mesmo tempo, essa distância não deve ser excessivamente grande, o que acarretaria em um aumento da quantidade de elementos da malha. Desse modo, foram realizados testes preliminares a fim de se determinar um valor adequado para d_2 . Esses testes consistiam em simulações nas quais verificava-se qual era a distância necessária para que a gota atingisse seu estado de equilíbrio e, a partir disso, definia-se o valor da distância d_2 . O valor escolhido foi de 500 μm , que atende bem aos requisitos acima, para todos os casos estudados.

O comprimento do microcanal horizontal (L_H) também deve ser grande o suficiente para que se possa observar toda a fase de ruptura ou não ruptura da gota. Entretanto, da mesma forma que acontece com a distância entre a gota e a entrada da bifurcação (d_2), o comprimento L_H não deve ser desnecessariamente longo, a fim de diminuir a quantidade de elementos da malha. Foi utilizado o valor de 2500 μm para todas as simulações, valor esse que foi escolhido por meio de testes preliminares, como os realizados para determinar a distância d_2 . É importante também mencionar que foram adicionados pequenos raios nos dois cantos onde o microcanal vertical se encontra com o microcanal horizontal. Esse arredondamento foi feito para se evitar a presença de cantos vivos no domínio computacional, suavizando o escoamento nesta região.

O comprimento inicial (L_0) e a largura inicial (Δ) da gota variam de acordo com o caso que está sendo estudado e devem ser determinados por meio de testes. O comprimento inicial da gota (L_0) deve ser escolhido de modo que o comprimento da gota no momento que ela atinge a bifurcação (l_0) tenha um valor próximo do utilizado na literatura de referência (SUN *et al.*, 2018), para cada caso simulado. A Figura 4.2a mostra a definição do comprimento l_0 , o qual é determinado na etapa de pós-processamento. Da mesma forma, a largura inicial da gota (Δ) deve ser escolhida de modo que a espessura (δ_0) da gota no momento em que ela acaba de entrar completamente na bifurcação (Figura 4.2b) atinja um valor próximo do encontrado na literatura de referência, para cada caso simulado.

Figura 4.2 - Dimensões importantes da gota durante o escoamento através do microcanal. (a) Comprimento da gota no momento que ela atinge a bifurcação (l_0). (b) Espessura (δ_0) da gota no momento em que ela acaba de entrar completamente na bifurcação.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Finalizada a construção da geometria, procedeu-se à definição das propriedades físicas dos fluidos. No presente estudo, utilizou-se as mesmas propriedades dos fluidos empregados no trabalho experimental de Sun *et al.* (2018). Para a fase contínua, empregou-se um óleo mineral com uma concentração de 4% em massa de Monolaurato de Sorbitan (conhecido como Span 20). Já para a fase dispersa, foram utilizadas soluções de 50% e de 60% de glicerol. Na Tabela 4.1, apresentam-se as propriedades físicas dos fluidos utilizados nas simulações.

Tabela 4.1 - Propriedades físicas dos fluidos utilizados nas simulações.

Fluido	Massa específica (ρ)	Viscosidade dinâmica (μ)
	[kg/m ³]	[mPa·s]
Óleo mineral + 4% de Span 20	853,0	22,30
Solução de 50% de glicerol	1123,5	5,00
Solução de 60% de glicerol	1150,0	8,64

No presente trabalho, foram estudados 12 casos, sendo que nos casos 1 a 6 utilizou-se a solução de 50% de glicerol como a fase dispersa e nos casos 7 a 12 utilizou-se a solução de

60% de glicerol como a fase dispersa. Em todos os casos, o óleo mineral é o fluido que compõe a fase contínua. A Tabela 4.2 mostra a razão de viscosidades entre a fase dispersa e a fase contínua para as duas combinações de fluidos, assim como o coeficiente de tensão superficial.

Tabela 4.2 - Razão de viscosidades e coeficiente de tensão superficial para as duas combinações de fluidos empregadas.

Fluido que compõe a fase contínua	Fluido que compõe a fase dispersa (gota)	Razão de viscosidades (λ_{visc}) [-]	Coefficiente de tensão superficial (σ) [N/m]
Óleo mineral + 4% de Span 20	Solução de 50% de glicerol	0,224	$1,8 \times 10^{-3}$
	Solução de 60% de glicerol	0,387	$1,7 \times 10^{-3}$

Em seguida, foram aplicadas as condições iniciais e as condições de contorno, conforme apresentado na Seção 3.4. Feito isso, prosseguiu-se com a confecção da malha computacional.

4.2. Definição da malha

No COMSOL, assim como acontece com a geometria, é possível importar malhas construídas em outros programas ou então construir a malha usando as ferramentas oferecidas pelo próprio COMSOL. Ao criar uma malha dentro do COMSOL, existem dois tipos de malhas disponíveis: a malha controlada pelo usuário (do inglês, *User-controlled mesh*) e a malha controlada pela física do problema (do inglês, *Physics-controlled mesh*). A malha controlada pelo usuário permite a escolha de diversos parâmetros da malha, como o tipo de elemento, o tamanho dos elementos, a posição e o tipo de refinamentos locais, etc. Já a malha controlada pela física do problema é uma malha gerada automaticamente pelo COMSOL, de acordo com os fenômenos físicos envolvidos no problema estudado e as condições de contorno aplicadas. Nessa configuração, o usuário pode controlar somente o nível geral de refinamento da malha.

No presente trabalho, foi escolhida a opção de malha controlada pelo usuário. Feita essa escolha, deve-se determinar o tipo de elemento e os parâmetros da malha relacionados ao tamanho dos elementos, como, por exemplo, os tamanhos máximo e mínimo e a taxa de crescimento máxima. Optou-se por utilizar uma malha com elementos triangulares de três nós, localizados nos vértices dos elementos. Já o tamanho dos elementos foi determinado por meio de testes de refinamento de malha, que serão discutidos a seguir.

Sabe-se que, quanto mais refinada for a malha, mais a solução discreta se aproxima da solução real do problema estudado. Nesse contexto, é importante destacar o teste de refinamento de malha, também conhecido como teste de independência de malha. Trata-se de um estudo que tem como objetivo determinar o quão refinada deve ser a malha para que se obtenha resultados satisfatórios. Para isso, o modelo estudado é resolvido mais de uma vez, em malhas cada vez mais refinadas, e os resultados obtidos são comparados entre si. Então, em determinado momento, é possível perceber que refinamentos adicionais da malha produzem mudanças insignificantes nos resultados. Quando isso acontece, diz-se que a malha convergiu e a solução numérica não mais varia de acordo com o refinamento da malha. Então, utilizando-se uma malha convergida, pode-se obter resultados precisos sem que a malha tenha que ser desnecessariamente refinada.

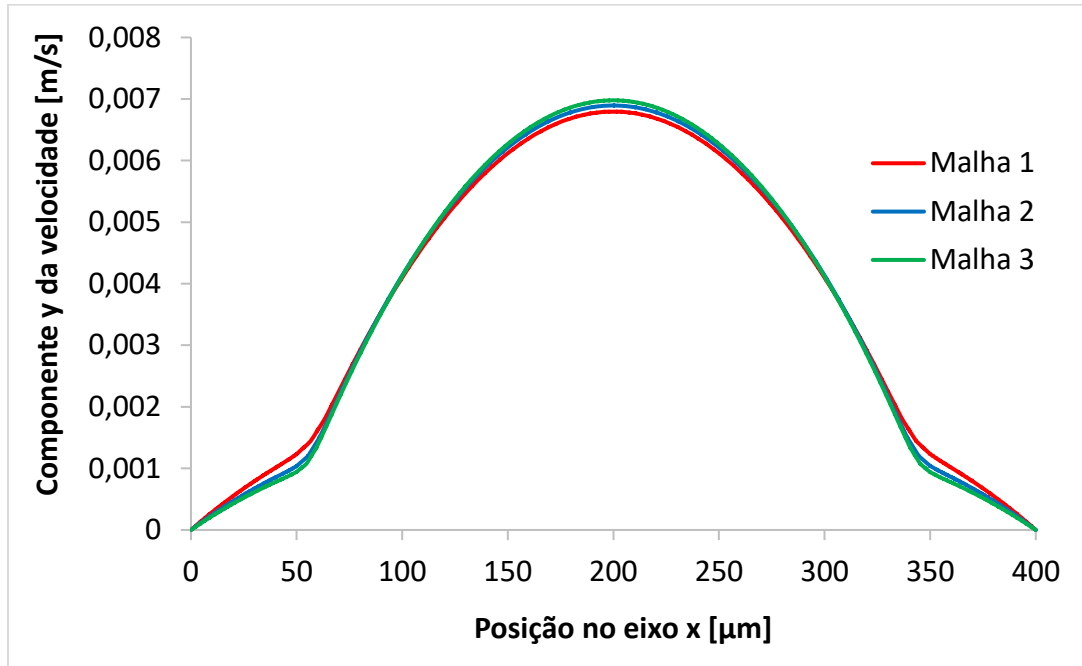
No presente trabalho, o teste de refinamento de malha foi realizado utilizando-se três malhas diferentes, cujos parâmetros são mostrados na Tabela 4.3. Além disso, também é mostrada a qualidade dos elementos das malhas, que é uma medida da regularidade da forma dos elementos. Trata-se de uma grandeza escalar que varia entre 0 e 1, sendo que 0 representa um elemento degenerado e 1 representa um elemento perfeitamente regular. É importante avaliar essa medida na confecção de uma malha, pois elementos de baixa qualidade podem causar problemas de convergência da solução numérica.

Tabela 4.3 - Parâmetros e qualidade das malhas utilizadas no teste de refinamento de malha.

Malha	Tamanho máximo do elemento [μm]	Tamanho mínimo do elemento [μm]	Taxa máxima de crescimento do elemento [-]	Número de elementos	Qualidade mínima dos elementos [-]	Qualidade média dos elementos [-]
1	8,2	0,11	1,12	56020	0,6837	0,9521
2	6,7	0,085	1,085	83304	0,6436	0,9556
3	5,8	0,07	1,07	110177	0,6666	0,9616

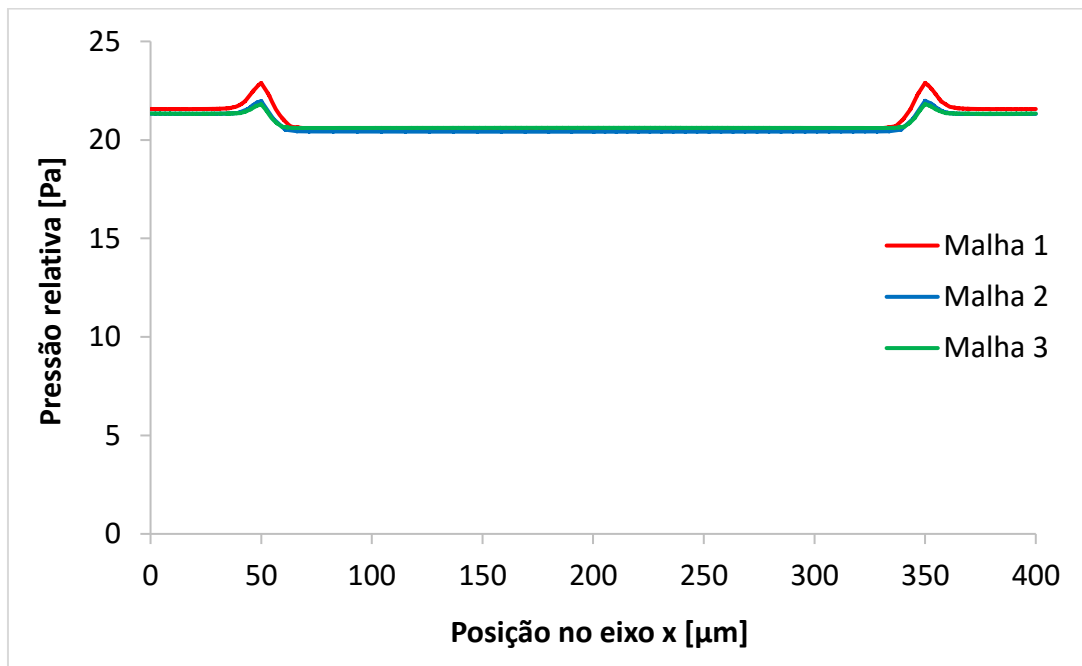
Optou-se por comparar os perfis de velocidade e de pressão obtidos para as 3 malhas, tomados no mesmo instante de tempo e na mesma posição do domínio. A Figura 4.3 e a Figura 4.4 mostram, respectivamente, os perfis de velocidade e de pressão obtidos para cada uma das malhas ($Ca = 0,05493$ e $Re = 0,06784$).

Figura 4.3 - Perfis de velocidade obtidos no mesmo instante de tempo ($t = 0,01\text{ s}$) e na mesma posição do domínio ($y = 640\ \mu\text{m}$), para malhas com diferentes graus de refinamento.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 4.4 - Perfis de pressão obtidos no mesmo instante de tempo ($t = 0,01\text{ s}$) e na mesma posição do domínio ($y = 640\ \mu\text{m}$), para malhas com diferentes graus de refinamento.

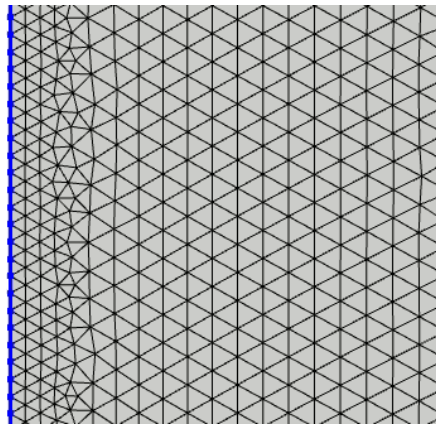


Fonte: Elaborada pelo autor.

Pode-se perceber que a diferença máxima entre os perfis de velocidade da malha 1 e da malha 2 é aproximadamente igual a 18,5%. Já a diferença máxima entre os perfis de velocidades da malha 2 e da malha 3 é de aproximadamente 1,2%. Para os perfis de pressão, constatou-se uma diferença máxima de aproximadamente 3,6% entre a malha 1 e a malha 2 e de aproximadamente 0,95% entre a malha 2 e a malha 3. Desse modo, optou-se por utilizar os parâmetros da malha 2, pois ela apresenta resultados mais precisos em relação à malha 1 e, ao mesmo tempo, não há uma diferença significativa de precisão entre a malha 2 e a malha 3.

Outro aspecto importante de se considerar na confecção da malha é a necessidade de refinamento local em determinadas partes do domínio. No problema estudado, é importante que se aplique um refinamento maior próximo às paredes do microcanal, a fim de modelar de maneira precisa a camada de fluido lubrificante existente entre a gota (fase dispersa) e a parede. O COMSOL oferece algumas ferramentas de refinamento local da malha. Entre elas, destaca-se a função Distribuição (do inglês, *Distribution*), que permite que o usuário determine o tamanho dos elementos da malha nas fronteiras do domínio. Por meio dessa função, foi feito um refinamento próximo às paredes do microcanal, conforme exemplo mostrado na Figura 4.5.

Figura 4.5 - Exemplo de refinamento local realizado em uma parede (em azul) do microcanal.



Fonte: Elaborada pelo autor.

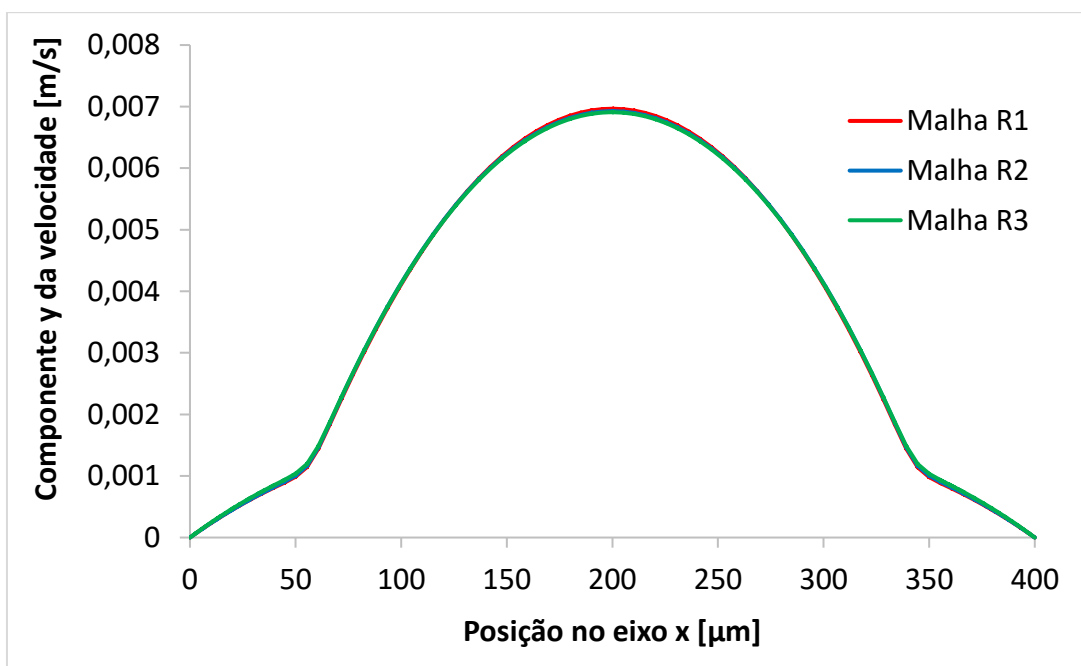
Feito esse refinamento, faz-se necessário realizar um outro teste de refinamento de malha, variando-se somente o tamanho dos elementos nas paredes. Para isso, foram construídas três novas malhas, cujos tamanhos dos elementos nas paredes são mostrados na Tabela 4.4. É importante destacar que, para as 3 malhas, foram utilizados os mesmos parâmetros da malha 2, que foi a escolhida no primeiro teste de refinamento de malha.

Tabela 4.4 – Tamanho dos elementos e qualidade das malhas utilizadas no teste de refinamento de malha nas paredes do microcanal.

Malha	Tamanho dos elementos localizados nas paredes do microcanal [μm]	Número de elementos	Qualidade mínima dos elementos [-]	Qualidade média dos elementos [-]
R1	4,0	96902	0,6425	0,9359
R2	3,5	103022	0,5994	0,9377
R3	3,0	113234	0,6112	0,9304

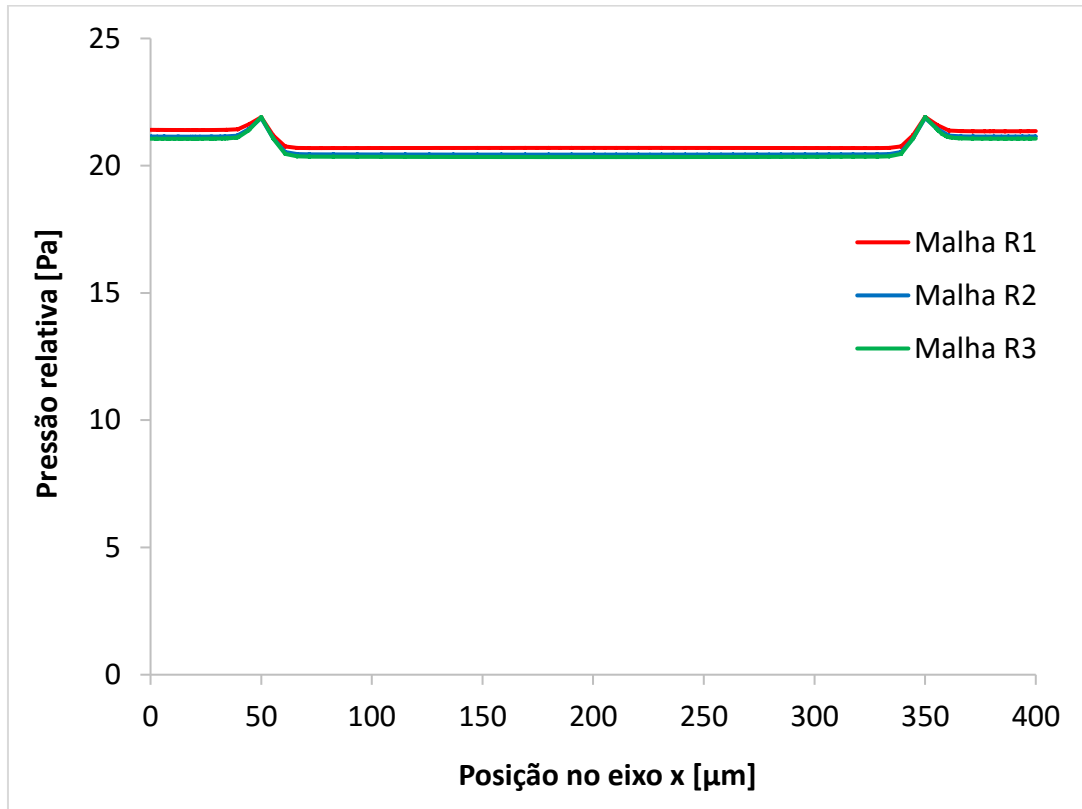
A Figura 4.6 e a Figura 4.7 mostram, respectivamente, os perfis de velocidade e de pressão obtidos para cada uma das malhas ($Ca = 0,05442$ e $Re = 0,06721$), tomados no mesmo instante de tempo e na mesma posição do domínio.

Figura 4.6 - Perfis de velocidade obtidos no mesmo instante de tempo ($t = 0,01$ s) e na mesma posição do domínio ($y = 640 \mu\text{m}$), para malhas com diferentes graus de refinamento nas paredes.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 4.7 - Perfis de pressão obtidos no mesmo instante de tempo ($t = 0,01\text{ s}$) e na mesma posição do domínio ($y = 640\ \mu\text{m}$), para malhas com diferentes graus de refinamento nas paredes.

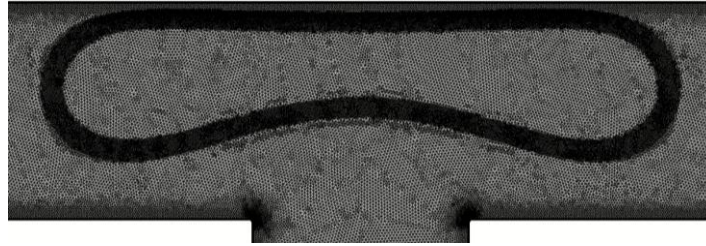


Fonte: Elaborada pelo autor.

Pode-se perceber que a diferença máxima entre os perfis de velocidade da malha R1 e da malha R2 é aproximadamente igual a 0,6%. Já a diferença máxima entre os perfis de velocidades das malhas R2 e R3 é de aproximadamente 0,3%. Para os perfis de pressão, constatou-se uma diferença máxima de aproximadamente 1,3% entre a malha R1 e a malha R2 e de aproximadamente 0,5% entre as malhas R2 e R3. Desse modo, optou-se por utilizar a malha R2 nas simulações, pois ela apresenta resultados mais precisos em relação à malha R1 e, ao mesmo tempo, não há uma diferença significativa de precisão entre a malha R2 e a malha R3.

Por fim, além das regiões próximas às paredes do microcanal, é importante também realizar um refinamento na interface entre os fluidos. Isso foi feito por meio da técnica de refinamento adaptativo da malha, conforme discutido na Seção 3.6.3. A Figura 4.8 mostra um exemplo de malha utilizada nas simulações.

Figura 4.8 - Parte da malha computacional utilizada nas simulações, já com o refinamento adaptativo aplicado na região da interface entre os fluidos.



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.3. Estudo do escoamento de gotas em microcanais com bifurcação em T

No presente trabalho, foi estudado o escoamento de uma gota através de um microcanal com bifurcação em T e comparou-se os resultados numéricos obtidos com os resultados experimentais do trabalho de Sun *et al.* (2018). Foram feitas simulações de 12 casos distintos. Em média, o tempo de simulação gasto para cada caso foi de aproximadamente 31 horas. Já o passo de tempo máximo utilizado pelo COMSOL foi de aproximadamente 0,001 s, sendo menor nos momentos em que a solução variava rapidamente no tempo.

Para efeito de comparação, buscou-se realizar as simulações utilizando-se os mesmos números de capilaridade (Ca) e comprimentos adimensionais da gota (l_0/w) apresentados no trabalho de Sun *et al.* (2018). Também buscou-se obter valores parecidos para a espessura (δ_0) da gota no momento em que ela acaba de entrar completamente na bifurcação. Para isso, foi necessário escolher valores apropriados para a velocidade média do fluido na entrada do domínio e para o comprimento (L_0) e largura (Δ) iniciais da gota. Esses valores iniciais foram obtidos por meio de testes realizados para cada caso estudado. Os testes consistiam em estipular valores para essas grandezas e então realizar a simulação durante algumas horas, até o momento em que a gota chegasse na bifurcação, para que fosse possível calcular Ca , l_0/w e δ_0 . Cabe destacar que o número de capilaridade (Ca) é calculado conforme o que foi mostrado na Seção 3.5, a partir da velocidade baricêntrica da gota no momento que ela atinge a bifurcação do microcanal. Já o comprimento da gota (l_0) e a espessura da gota (δ_0) são obtidos por meio das ferramentas de pós-processamento do COMSOL. Os valores de Ca , l_0/w e δ_0 são comparados com os valores de Sun *et al.* (2018). Então, para cada simulação, a velocidade média na entrada e o comprimento (L_0) e largura (Δ) iniciais da gota são ajustados até que os valores de Ca , l_0/w e δ_0 encontrados estejam próximos dos valores de Sun *et al.* (2018).

A Tabela 4.5 mostra os números de capilaridade (Ca), os comprimentos adimensionais da gota (l_0/w) e os números de Reynolds (Re) utilizados no trabalho de Sun *et al.* (2018) e nas simulações realizadas no presente trabalho, para cada um dos 12 casos estudados.

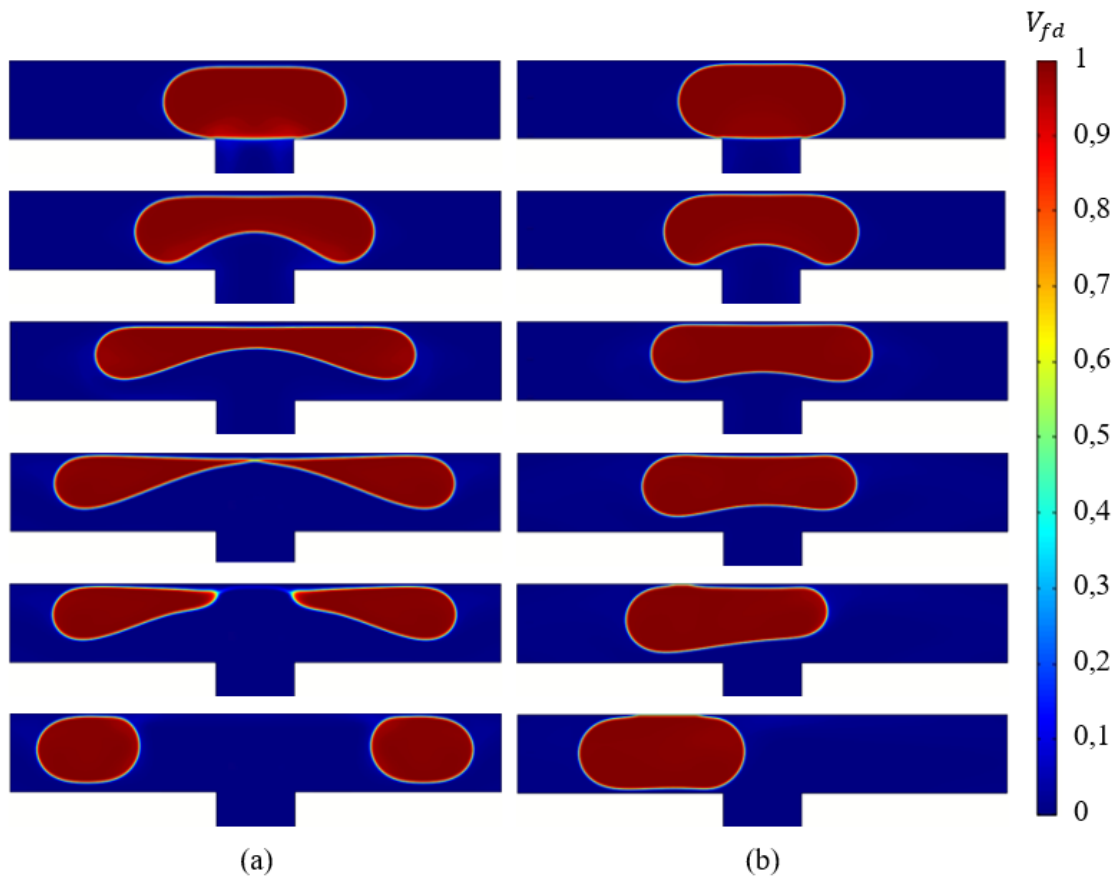
Tabela 4.5 - Números de capilaridade (Ca), comprimentos adimensionais da gota (l_0/w) e números de Reynolds (Re) para cada caso estudado.

Caso	Número de capilaridade Ca [-] (SUN <i>et al.</i> , 2018)	Número de capilaridade Ca [-] (simulações)	Comprimento adimensional da gota l_0/w [-] (SUN <i>et al.</i> , 2018)	Comprimento adimensional da gota l_0/w [-] (simulações)	Número de Reynolds Re [-] (SUN <i>et al.</i> , 2018)	Número de Reynolds Re [-] (simulações)
1	0,06	0,05998	1,87	1,902	0,0741	0,07408
2	0,054	0,05367	1,87	1,858	0,0667	0,06628
3	0,043	0,04212	1,87	1,854	0,0531	0,05202
4	0,039	0,03844	1,87	1,891	0,0482	0,04686
5	0,035	0,03483	1,87	1,849	0,0432	0,04301
6	0,032	0,03176	1,87	1,896	0,0395	0,03922
7	0,057	0,05660	2,00	1,979	0,0665	0,06601
8	0,057	0,05711	1,81	1,829	0,0665	0,06661
9	0,057	0,05721	1,70	1,731	0,0665	0,06673
10	0,057	0,05767	1,43	1,482	0,0665	0,06727
11	0,057	0,05648	1,33	1,356	0,0665	0,06588
12	0,057	0,05738	1,20	1,233	0,0665	0,06692

A maior diferença entre o número de capilaridade obtido na simulação e o número de capilaridade usado por Sun *et al.* (2018) foi igual a 2,05%, no caso 3. Já em relação ao comprimento adimensional da gota, a maior diferença observada foi de 3,64%, para o caso 10. Portanto, conclui-se que os parâmetros Ca e l_0/w utilizados no presente trabalho são suficientemente próximos dos parâmetros utilizados por Sun *et al.* (2018), o que permite a comparação entre os resultados dos dois trabalhos.

No escoamento de uma gota através de uma bifurcação, é possível que a gota se rompa, formando duas gotas distintas, que se direcionam cada uma delas para um lado diferente da bifurcação. Esse é o chamado regime de ruptura (R) da gota. Por outro lado, também é possível que a gota não se rompa e se direcione somente para um dos lados da bifurcação. Esse é o chamado regime de não-ruptura (NR) da gota. A Figura 4.9a mostra o exemplo de uma gota que se rompeu ao passar pela bifurcação, enquanto que a Figura 4.9b mostra uma gota que não se rompeu, direcionando-se para o lado esquerdo da junção.

Figura 4.9 - Escoamento de gotas em um microcanal com junção em T, obtido por meio do Método Campo de Fase. (a) Regime de ruptura da gota. (b) Regime de não-ruptura da gota.

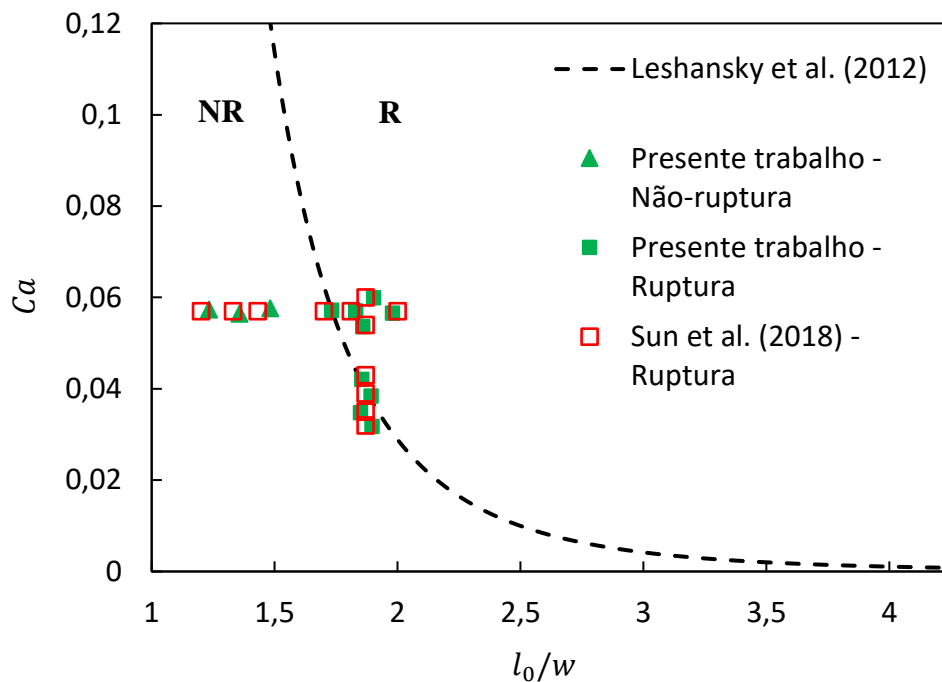


Fonte: Elaborada pelo autor.

Conforme destacado no capítulo de Introdução, é importante determinar qual é o regime encontrado para cada condição de escoamento, pois algumas aplicações práticas requerem a ruptura da gota na junção em T, enquanto outras não. A ruptura ou não-ruptura da gota é diretamente influenciada pelo número de capilaridade (Ca) e pelo comprimento da gota no momento em que ela chega na bifurcação, em relação ao tamanho do microcanal (l_0/w).

Existem alguns estudos analíticos, numéricos e experimentais que buscam relacionar o comportamento da gota na bifurcação com esses parâmetros. Um desses estudos foi apresentado por Leshansky *et al.* (2012), no qual são feitas análises analíticas e numéricas do escoamento de gotas através de bifurcações em T, utilizando uma construção geométrica da forma da interface em conjunto com a Lei de Tanner para o cálculo do ângulo de contato local. Como resultado, obteve-se um diagrama de fase que relaciona o regime da gota (ruptura ou não-ruptura) com os parâmetros Ca e l_0/w . Na Figura 4.10 são mostrados os regimes obtidos no presente trabalho em comparação com o diagrama de Leshansky *et al.* (2012), a fim de se avaliar a capacidade do Método Campo de Fase de prever a ruptura ou não-ruptura da gota.

Figura 4.10 - Diagrama de fase mostrando os regimes de ruptura de gotas. A curva tracejada representa a transição entre o regime de não-ruptura (à esquerda da curva - NR) e o regime de ruptura (à direita da curva - R), conforme correlação proposta por Leshansky *et al.* (2012).

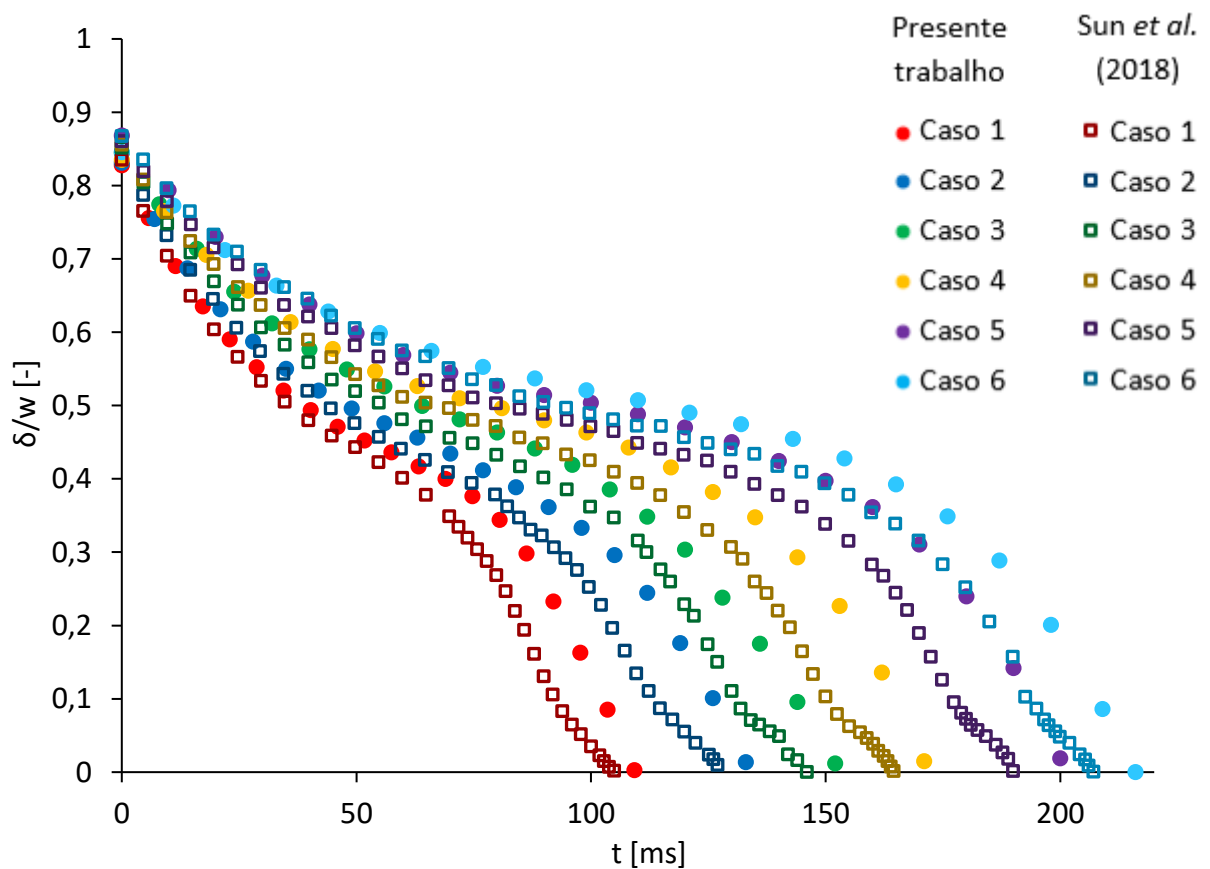


Analisando a Figura 4.10, pode-se perceber que a maioria dos casos simulados que apresentaram ruptura está localizada na zona de ruptura (R) ou na linha de transição do diagrama de Leshansky *et al.* (2012). Somente os casos 5 e 6 apresentaram ruptura e estão localizados na zona de não-ruptura (NR) do diagrama. Entretanto, pode-se perceber que ambos estão posicionados bem próximos à linha de transição entre os regimes, o que pode explicar a

ocorrência de ruptura da gota nessas simulações. Já os casos 10, 11 e 12 não apresentaram ruptura nas simulações e estão localizados na zona de não-ruptura (NR) do diagrama. Além disso, analisando os casos 7 a 12, pode-se perceber que, quanto maior o comprimento adimensional da gota (l_0/w), maior é a tendência de a gota apresentar ruptura. É importante notar também que, em todos os casos experimentais de Sun *et al.* (2018), houve ruptura da gota na bifurcação. A ruptura aconteceu até mesmo nos casos 10, 11 e 12, os quais estão localizados na zona de não-ruptura (NR) e longe da linha de transição entre os regimes do diagrama de Leshansky *et al.* (2012). A diferença acontece, possivelmente, devido ao fato de que as análises teóricas de Leshansky *et al.* (2012) foram baseadas em uma gota bidimensional.

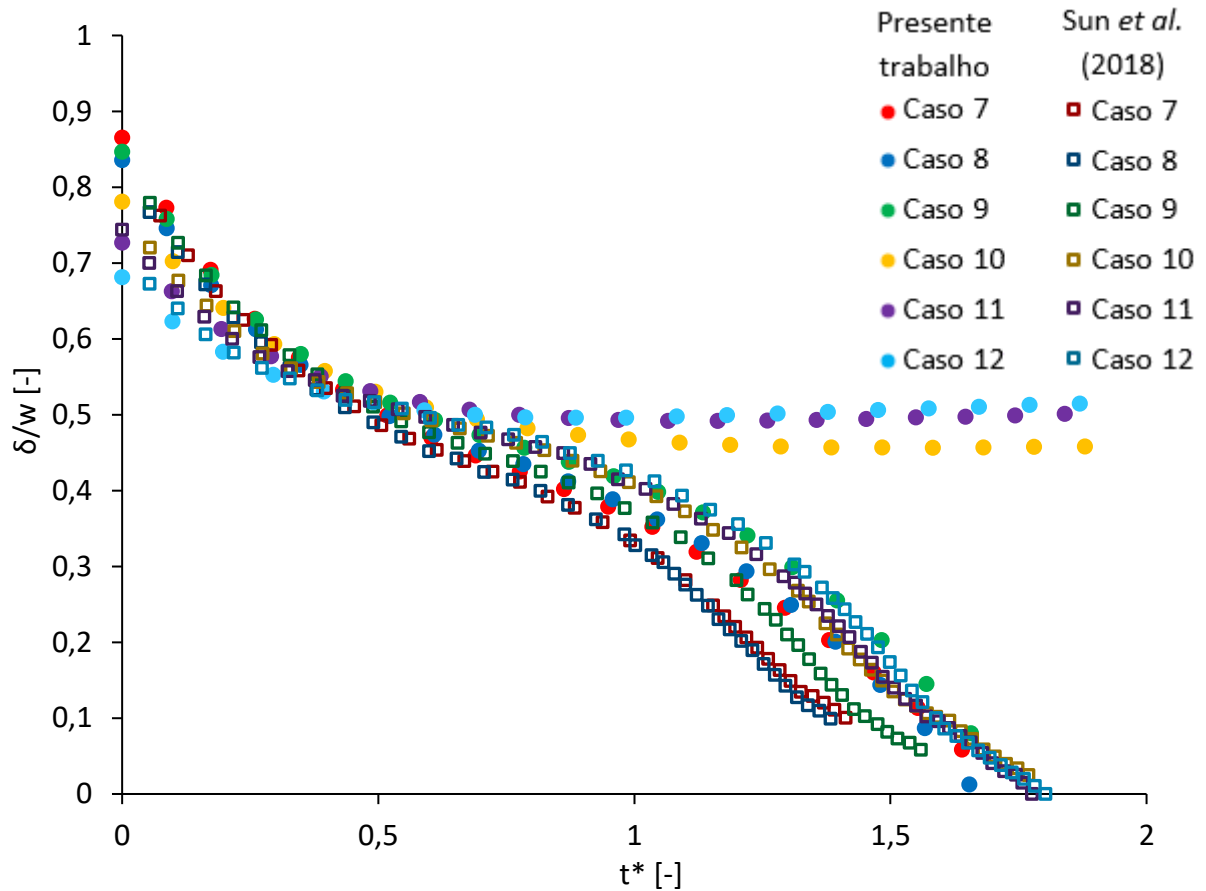
A Figura 4.11 e a Figura 4.12 apresentam a evolução da espessura adimensional mínima do pescoço da gota (δ^*) para cada um dos casos estudados, comparando-se os resultados obtidos no COMSOL com os resultados experimentais de Sun *et al.* (2018).

Figura 4.11 - Evolução da espessura adimensional mínima do pescoço da gota ($\delta^* = \delta/w$) em função do tempo dimensional (t) para os Casos 1 a 6.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 4.12 - Evolução da espessura adimensional mínima do pescoço da gota ($\delta^* = \delta/w$) em função do tempo adimensional (t^*) para os Casos 7 a 12.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Conforme pode ser observado nos gráficos, as simulações obtidas para os casos 1 a 9 apresentaram ruptura da gota. Em todos eles, a ruptura total demorou mais a acontecer em comparação com os dados experimentais. A maior diferença entre os tempos totais até a ruptura foi igual a, aproximadamente, 5,3%, para o caso 5. Nos casos 10 a 12, observou-se que, em determinado momento, a espessura mínima do pescoço para de diminuir, mantendo-se praticamente constante durante um tempo. Em seguida, a espessura passa a aumentar aos poucos, enquanto a gota retorna a sua forma original e se direciona para um dos lados da bifurcação. Esse comportamento caracteriza o regime de não-ruptura da gota, conforme pode ser observado na Figura 4.9b. Cabe destacar que os resultados obtidos por Sun *et al.* (2018) apresentaram ruptura da gota, o que pode indicar a contribuição de efeitos tridimensionais para a ruptura, os quais não ocorrem nas simulações bidimensionais.

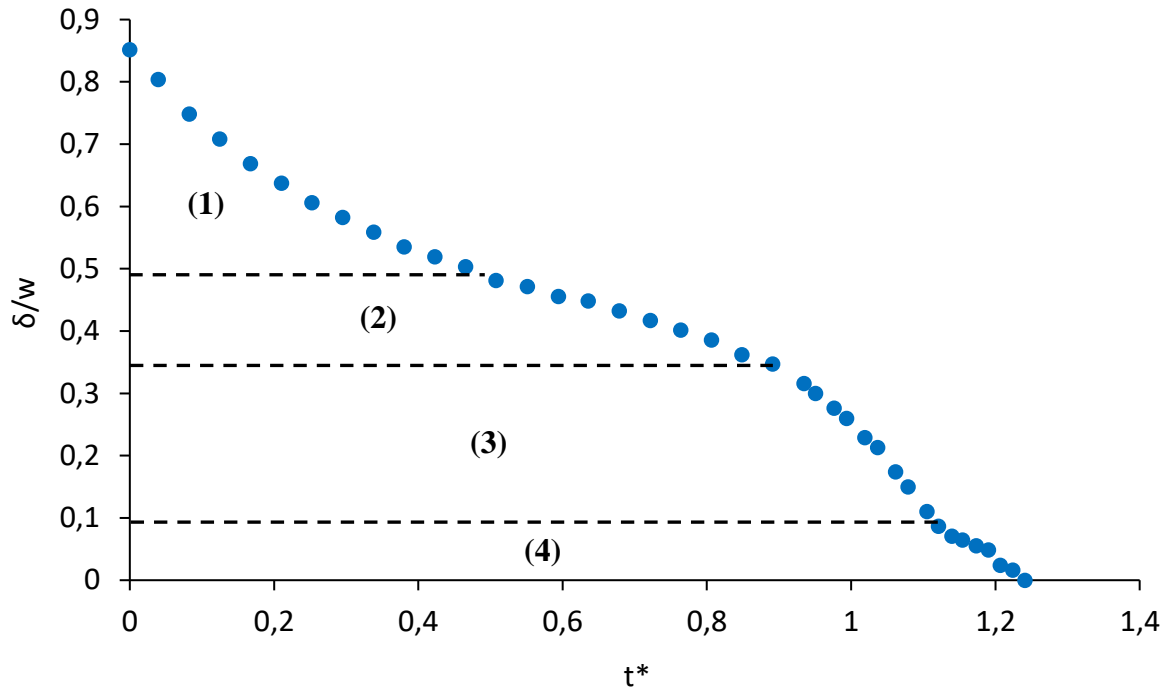
Analisando a Figura 4.11, é possível notar que, quanto maior o número de capilaridade (Ca), menor é o tempo total decorrido até a ruptura. Isso pode ser explicado pelo fato de que o número de capilaridade é diretamente proporcional à velocidade da gota quando ela chega na bifurcação (Equação 3.26). A velocidade da gota, por sua vez, aumenta conforme se aumenta a velocidade do fluido que compõe a fase contínua. Então, quanto maior a velocidade da fase contínua, maior é a pressão exercida sobre o pescoço da gota na bifurcação, o que eleva a taxa de afinamento da gota e, conseqüentemente, favorece a ocorrência do processo de ruptura. Esse comportamento também pode ser constatado no diagrama de Leshansky *et al.* (2012), no qual nota-se a maior tendência de a gota se romper para números de capilaridade elevados.

Conclui-se também que, em todos os casos estudados, os resultados numéricos apresentaram excelente concordância com os resultados experimentais na fase inicial do escoamento da gota na bifurcação. Entretanto, com o passar do tempo, a curva numérica vai se afastando da curva experimental até que, na fase final da ruptura (casos 1 a 9), há uma diferença bem mais significativa entre as espessuras do pescoço da gota obtidas numérica e experimentalmente. Isso pode ser devido à diferença entre os parâmetros Ca , l_0/w e δ_0 obtidos no presente trabalho e os do trabalho de Sun *et al.* (2018). Além disso, o fato de a geometria estudada no COMSOL ser bidimensional também contribui para a diferença observada em relação aos dados experimentais.

Sun *et al.* (2018) dividem o processo de ruptura da gota em estágios sequenciais, conforme mostrado na Figura 4.13. O primeiro deles é o estágio de alongamento (do inglês, *squeezing*), no qual a taxa de afinamento do pescoço da gota diminui gradualmente. Em seguida, vem o estágio de transição, o qual apresenta a menor taxa de afinamento do pescoço da gota. O terceiro estágio é chamado de *pinch-off*, em que a espessura mínima do pescoço da gota passa a diminuir mais rapidamente. Por fim, há o estágio de ruptura de filamento, que acontece a partir de $\delta^* \approx 0,1$. Nesse estágio, o pescoço da gota assume a forma de um filamento cilíndrico, que encolhe na direção radial até se romper.

Figura 4.13 – Estágios do processo de ruptura de uma gota em um microcanal com bifurcação em T, de acordo com Sun *et al.* (2018), para o Caso 3 ($Ca = 0,04212$ e $l_0/w = 1,854$).

(1) Estágio de alongamento. (2) Estágio de transição. (3) Estágio de *pinch-off*. (4) Estágio de ruptura de filamento.



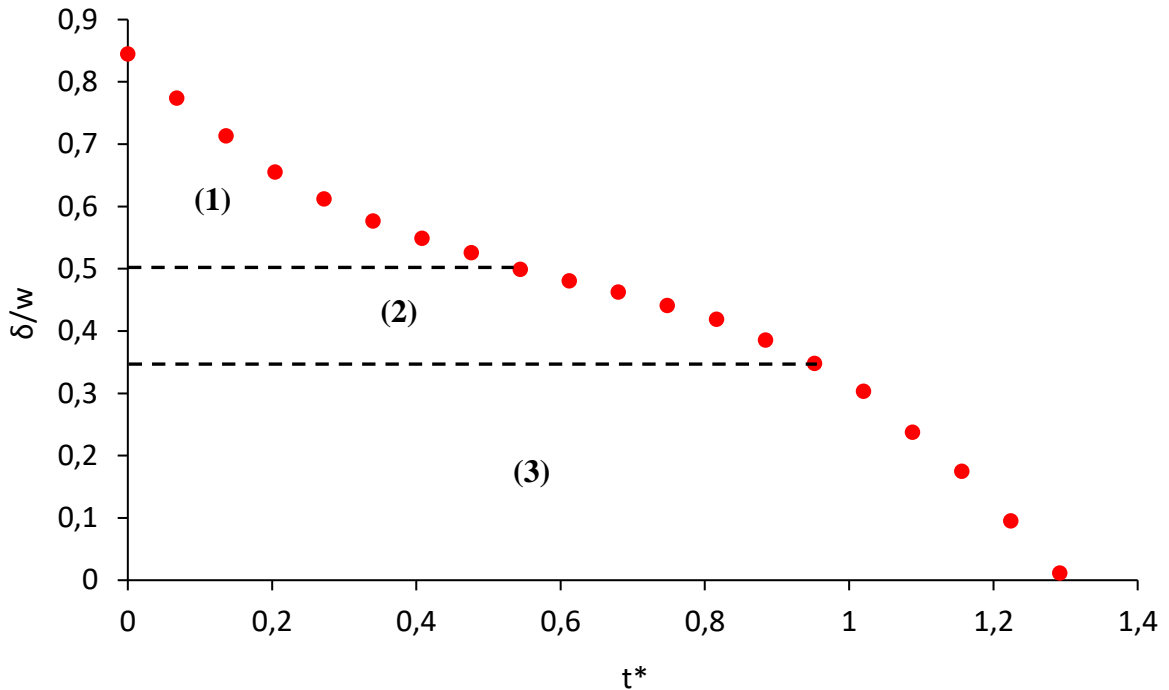
Fonte: Adaptado de Sun *et al.* (2018).

Nos resultados numéricos obtidos no presente trabalho, foi possível observar três dos quatro estágios mencionados por Sun *et al.* (2018), conforme a Figura 4.14. No primeiro estágio (alongamento), observa-se uma diminuição gradual da taxa de afinamento do pescoço da gota. No segundo estágio (transição), a taxa de afinamento se mantém aproximadamente constante e é a menor taxa de todo o processo de ruptura. Já no terceiro estágio (*pinch-off*), percebe-se um aumento na taxa de afinamento. Além disso, observou-se que as transições entre os estágios aconteceram em momentos parecidos (valores próximos de δ/w) nos casos simulados e nos casos experimentais. Cabe destacar também que não foi constatado o estágio de ruptura de filamento em nenhum dos casos simulados.

Figura 4.14 – Estágios do processo de ruptura de uma gota em um microcanal com bifurcação em T, conforme observado nos resultados numéricos obtidos no presente trabalho, para o

Caso 3 ($Ca = 0,04212$ e $l_0/w = 1,854$).

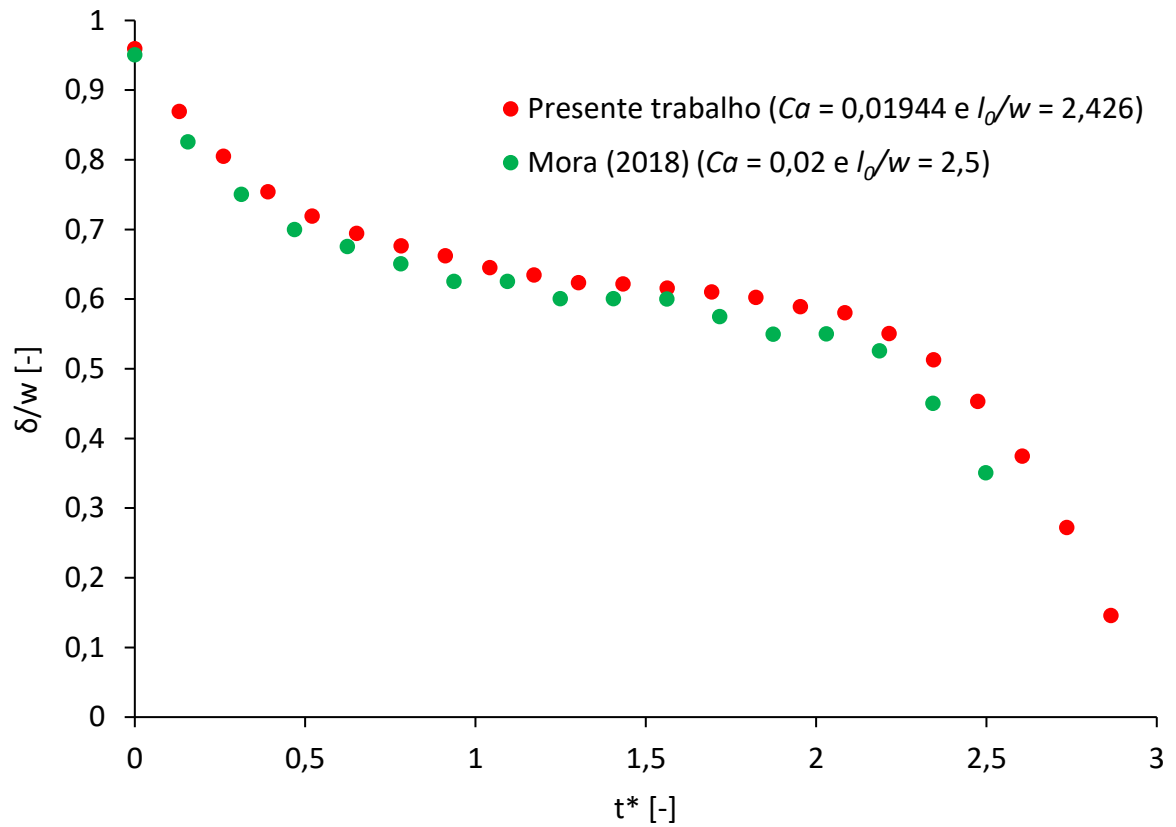
(1) Estágio de alongamento. (2) Estágio de transição. (3) Estágio de *pinch-off*.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Por fim, é feita uma comparação entre os resultados obtidos por dois métodos numéricos distintos de representação da interface entre as fases. A Figura 4.15 mostra a evolução da espessura mínima do pescoço de uma gota durante o processo de ruptura na junção em T. Compara-se os resultados numéricos obtidos no presente trabalho, utilizando o Método Campo de Fase, com os resultados numéricos obtidos por Mora (2018), que utilizou o Método S-CLSVOF em uma geometria tridimensional. Pode-se perceber que os resultados apresentaram boa concordância durante os estágios de alongamento e de transição, com uma maior diferença no estágio de *pinch-off*, possivelmente devido a efeitos tridimensionais.

Figura 4.15 - Evolução da espessura adimensional mínima do pescoço da gota ($\delta^* = \delta/w$) em função do tempo adimensional (t^*) em comparação com os resultados numéricos de Mora (2018).



Fonte: Elaborada pelo autor.

CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES

Neste trabalho, estudou-se o escoamento bifásico de uma gota em um microcanal bidimensional com junção em T. O estudo foi feito por meio de simulações numéricas realizadas no *software* COMSOL *Multiphysics*®, que se baseia no Método dos Elementos Finitos para discretizar as equações governantes de um fenômeno físico. A fim de representar a interface entre as fases contínua e dispersa, empregou-se o Método Campo de Fase, disponível no COMSOL. Além disso, a técnica de refinamento adaptativo da malha computacional foi utilizada com o intuito de melhor representar a interface. Aplicou-se também um refinamento da malha nas paredes do microcanal, a fim de modelar com precisão a camada de fluido existente entre a gota e a parede.

Foram estudados 12 casos, com diferentes números de capilaridade e comprimentos adimensionais da gota. Os resultados obtidos permitiram o estudo do comportamento da gota na junção do microcanal, por meio da análise da evolução temporal da espessura mínima do pescoço da gota na junção e do regime de ruptura ou não-ruptura observado. Os resultados do presente trabalho foram comparados com resultados experimentais e teóricos encontrados na literatura, a fim de se validar a metodologia empregada. Além disso, um caso adicional foi estudado com o objetivo de se comparar os resultados com um outro método numérico de representação da interface entre os fluidos.

Concluiu-se que o comportamento da gota é diretamente influenciado pelo número de capilaridade e pelo comprimento da gota no momento em que ela chega na bifurcação, em relação ao tamanho do microcanal. Quanto maior for esse comprimento adimensional da gota e o número de capilaridade, maior é a tendência de a gota se romper, formando duas gotas. Os regimes de ruptura observados apresentaram boa concordância com um diagrama de fase teórico presente na literatura.

Analisando-se a evolução temporal da espessura mínima do pescoço da gota, foi possível perceber a presença de três estágios (alongamento, transição e *pinch-off*) no processo de ruptura, cada qual com um comportamento distinto em relação à taxa de afinamento da gota. Esses três estágios também estão presentes nos resultados experimentais encontrados na literatura. Entretanto, alguns autores reportam a ocorrência de um quarto estágio (ruptura de filamento) nos experimentos, algo que não foi constatado nas simulações do presente trabalho.

A evolução temporal da espessura da gota apresentou boa concordância com os dados experimentais, especialmente nos dois primeiros estágios do processo de ruptura (alongamento e transição). Entretanto, no estágio de *pinch-off*, há uma discrepância mais significativa entre os resultados numéricos e experimentais e, por essa razão, o tempo total até a ruptura da gota foi até 5,3% maior nas simulações. Esse comportamento pode ter sido causado pela pequena diferença entre os parâmetros Ca , l_0/w e δ_0 usados no presente trabalho e os usados nos trabalhos experimentais. Além disso, o fato de a geometria estudada ser bidimensional também contribui para a diferença observada em relação aos experimentos. Comparando-se os resultados do presente estudo com trabalhos numéricos tridimensionais da literatura, também se constatou uma diferença parecida no comportamento da gota, especialmente no estágio de *pinch-off*.

Com base nos resultados obtidos e na comparação com dados da literatura, pode-se concluir que o Método Campo de Fase disponível no COMSOL se mostrou eficaz na previsão do regime de ruptura ou não-ruptura da gota na junção em T, modelando de forma correta as mudanças topológicas da gota. Obteve-se também boa concordância em relação à evolução temporal da espessura da gota na bifurcação, durante grande parte do processo de ruptura. Entretanto, vale ressaltar a importância de se realizar novos estudos usando uma geometria 3D, a fim de analisar possíveis efeitos tridimensionais no comportamento da gota.

Por fim, destaca-se algumas sugestões de trabalhos futuros relacionados ao escoamento bifásico em dispositivos microfluídicos. Pode-se, por exemplo, estudar o processo de ruptura de gotas/bolhas em microcanais com junções de diferentes formatos (em Y, cruzadas, assimétricas, etc.) e seções transversais, os quais são frequentemente encontrados nas mais diversas aplicações práticas. Outra sugestão de trabalho a ser realizado é o estudo de escoamentos bifásicos com transferência de calor, que estão presentes nos microdissipadores de calor, cada vez mais empregados na refrigeração de componentes eletrônicos de alto desempenho.

CAPÍTULO 6 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CERDEIRA, A. T. S.; CAMPOS, J. B. L. M.; MIRANDA, J. M.; ARAÚJO, J. D. P. Review on Microbubbles and Microdroplets Flowing through Microfluidic Geometrical Elements. *Micromachines* 11(2) (2020), 201.

CHEN, L. Chemical potential and Gibbs free energy. *MRS Bulletin* 44 (2019), 520-523.

FONTES E. Two Methods for Modeling Free Surfaces in COMSOL Multiphysics® (2018). Disponível em: <https://br.comsol.com/blogs/two-methods-for-modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics/>. Acesso em: 16/06/2021.

FU, T.; MA, Y. Bubble formation and breakup dynamics in microfluidic devices: A review. *Chemical Engineering Science* 135 (2015), 343-372.

FU, T.; MA, Y; FUNFSCHILLING, D.; LI, H. Z. Dynamics of bubble breakup in a microfluidic T-junction divergence. *Chemical Engineering Science* 66 (2011), 4184-4195.

FU, T.; MA, Y; LI, H. Z. Hydrodynamic feedback on bubble breakup at a T-junction within an asymmetric loop. *AIChE Journal* 60 (2014), 1920-1929.

HOANG, D. A.; PORTELA, L. M.; KLEIJN, C. R.; KREUTZER, M. T.; VAN STEIJN, V. Dynamics of droplet breakup in a T-junction. *Journal of Fluid Mechanics* 717 (2013a).

HOANG, D. A.; VAN STEIJN, V.; PORTELA, L. M.; KREUTZER, M. T.; KLEIJN, C. R. Benchmark numerical simulations of segmented two-phase flows in microchannels using the Volume of Fluid method. *Computers & Fluids* 86 (2013b), 28-36.

JANGIR, P.; JANA, A. K. CFD simulation of droplet splitting at microfluidic T-junctions in oil–water two-phase flow using conservative level set method. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering* 41 (2019).

JULLIEN, M.-C.; TSANG MUI CHING, M.-J.; COHEN, C.; MENETRIER, L.; TABELING, P. Droplet breakup in microfluidic T-junctions at small capillary numbers. *Physics of Fluids* 21 (2009).

LESHANSKY, A. M.; AFKHAMI, S.; JULLIEN, M.-C.; TABELING, P. Obstructed Breakup of Slender Drops in a Microfluidic T Junction. *Physical Review Letters* 108 (2012).

LESHANSKY, A. M.; PISMEN, L. M. Breakup of drops in a microfluidic T junction. *Physics of Fluids* 21 (2009).

LINK, D. R.; ANNA, S. L.; WEITZ, D. A.; STONE, H. A. Geometrically Mediated Breakup of Drops in Microfluidic Devices. *Physical Review Letters* 92 (2004).

LIU, X.; ZHANG, C.; YU, W.; DENG, Z.; CHEN, Y. Bubble breakup in a microfluidic T-junction. *Science Bulletin* 61 (2016), 811-824.

LU, Y.; FU, T.; ZHU, C.; MA, Y.; LI, H. Z. Dynamics of bubble breakup at a T junction. *Physical Review E* 93 (2016).

MA, P.; FU, T.; ZHU, C.; MA, Y. Asymmetrical breakup and size distribution of droplets in a branching microfluidic T-junction. *Korean Journal of Chemical Engineering* 36 (2019), 21-29.

MOELANS, N.; BLANPAIN, B.; WOLLANTS, P. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution. *Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* 32 (2008), 268-294.

MORA, A. E. M. Estudo numérico do transporte de bolhas/gotas em fluidos Newtonianos através das metodologias VOF e S-CLSVOF utilizando o OpenFOAM. Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, Brasil (2018).

MORA, A. E. M.; LIMA E SILVA, A. L. F.; LIMA E SILVA, S. M. M. Numerical study of the dynamics of a droplet in a T-junction microchannel using OpenFOAM. *Chemical Engineering Science* 196 (2019), 514-526.

SOUZA, R. M. O Método dos Elementos Finitos Aplicado ao Problema de Condução de Calor. *Núcleo de Instrumentação e Computação Aplicada à Engenharia – Universidade Federal do Pará* (2003).

SUN, X.; ZHU, C.; FU, T.; MA, Y.; LI, H. Z. Dynamics of droplet breakup and formation of satellite droplets in a microfluidic T-junction. *Chemical Engineering Science* 188 (2018), 158-169.

- SUN, X.; ZHU, C.; FU, T.; MA, Y.; LI, H. Z. Breakup dynamics of elastic droplet and stretching of polymeric filament in a T-junction. *Chemical Engineering Science* 206 (2019), 212-223.
- WANG, X.; ZHU, C.; FU, T.; MA, Y. Critical lengths for the transition of bubble breakup in microfluidic T-junctions. *Chemical Engineering Science* 111 (2014), 244-254.
- WANG, X.; ZHU, C.; FU, T.; MA, Y. Bubble breakup with permanent obstruction in an asymmetric microfluidic T-junction. *AIChE Journal* 61 (2015a), 1081-1091.
- WANG, X.; ZHU, C.; WU, Y.; FU, T.; MA, Y. Dynamics of bubble breakup with partly obstruction in a microfluidic T-junction. *Chemical Engineering Science* 132 (2015b), 128-138.
- WHITE, F.M. *Mecânica dos Fluidos*, AMGH, 6ª Edição, Porto Alegre (2011).
- WÖRNER, M. A Compact Introduction to the Numerical Modeling of Multiphase Flows. *Forschungszentrum Karlsruhe GmbH* (2003).
- WÖRNER, M. Numerical modeling of multiphase flows in microfluidics and micro process engineering: a review of methods and applications. *Microfluidics and Nanofluidics* 12 (2012), 841-886.
- YAN, Z.; LI, L.; PAN, Z. Breakup regime and heat transfer of a vapor bubble within T-shaped branching microchannel. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 175 (2021).
- YU, X.; WU, Y.; LI, Y.; YANG, Z.; MA, Y. The formation of satellite droplets in micro-devices due to the rupture of neck filament. *Chemical Engineering Research and Design* 153 (2020), 435-442.
- YUE, P.; ZHOU, C.; FENG, J. J.; OLLIVIER-GOOCH, C. F.; HU, H. H. Phase-field simulations of interfacial dynamics in viscoelastic fluids using finite elements with adaptive meshing. *Journal of Computational Physics* 219 (2006), 47-67.