



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO  
EM ENGENHARIA QUÍMICA



INVESTIGAÇÃO DA DINÂMICA DE FORMAÇÃO DE  
GOTAS NO INTERIOR DE MICROCANAIS VIA  
TÉCNICAS DE CFD

Igor Lima Chaves

Goiânia  
2020

**TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR  
VERSÕES ELETRÔNICAS DE TESES E DISSERTAÇÕES  
NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG**

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), regulamentada pela Resolução CEPEC nº 832/2007, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a Lei nº 9610/98, o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, *impressão e/ou download*, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

O conteúdo das dissertações e teses disponibilizados são de responsabilidade exclusiva dos autores. Ao encaminhar(em) o produto final, o autor e o orientador firmam o compromisso de que ele não contém nenhuma violação de quaisquer direitos autorais ou outro direito de terceiros.

**1. Identificação do material bibliográfico:**     **Dissertação**         **Tese**

**2. Identificação da Tese ou Dissertação:**

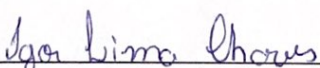
Nome completo do autor: IGOR LIMA CHAVES

Título do trabalho: INVESTIGAÇÃO DA DINÂMICA DE FORMAÇÃO DE GOTAS NO INTERIOR DE MICROCANALIS VIA TÉCNICAS DE CFD

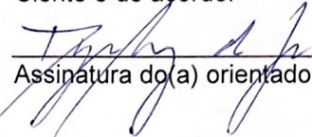
**3. Informações de acesso ao documento:**

Concorda com a liberação total do documento  **SIM**                     **NÃO**<sup>1</sup>

Independente da concordância com a disponibilização eletrônica, é imprescindível o envio do(s) arquivo(s) em formato digital PDF da tese ou dissertação.

  
Assinatura do(a) autor(a)<sup>2</sup>

Ciente e de acordo:

  
Assinatura do(a) orientador(a)<sup>2</sup>  
**Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos**  
**Engenharia Química**  
**Instituto de Química-UFG**  
**SLAPE:2273743**

Data: 26 / 03 / 2020

<sup>1</sup> Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. O documento não será disponibilizado durante o período de embargo.

Casos de embargo:

- Solicitação de registro de patente;
- Submissão de artigo em revista científica;
- Publicação como capítulo de livro;
- Publicação da dissertação/tese em livro.

<sup>2</sup> As assinaturas devem ser originais sendo assinadas no próprio documento, imagens coladas não serão aceitas.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO  
EM ENGENHARIA QUÍMICA



INVESTIGAÇÃO DA DINÂMICA DE FORMAÇÃO DE GOTAS  
NO INTERIOR DE MICROCANAIS VIA TÉCNICAS DE CFD

Igor Lima Chaves

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Goiás como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos

Goiânia – GO

2020

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Lima Chaves, Igor  
INVESTIGAÇÃO DA DINÂMICA DE FORMAÇÃO DE GOTAS NO INTERIOR DE MICROCANALIS VIA TÉCNICAS DE CFD [manuscrito] / Igor Lima Chaves. - 2020.  
viii, 55 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos .  
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química (IQ), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química , Goiânia, 2020.

Bibliografia. Apêndice.

Inclui siglas, fotografias, abreviaturas, símbolos, gráfico, tabelas, lista de figuras, lista de tabelas.

1. Microflúidica. 2. Fluidodinâmica Computacional. 3. CFD. 4. Refinamento de Malha Adaptativo. 5. Escoamento Multifásico. I. Araújo dos Santos , Dyrney , orient. II. Título.

CDU 66.0



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE QUÍMICA

**ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO**

Ata nº **38** da sessão da Defesa de Dissertação de **Igor Lima Chaves**, que confere o título de **Mestre em Engenharia Química**, na área de concentração em **Desenvolvimento de Processos**.

Aos **dezoito de fevereiro de dois mil e vinte**, a partir das **08h30m**, no **Auditório I do IQ II**, realizou-se a sessão pública da Defesa de Dissertação intitulada **"INVESTIGAÇÃO DA DINÂMICA DE FORMAÇÃO DE GOTAS NO INTERIOR DE MICROCANAIS VIA TÉCNICAS DE CFD"**. Os trabalhos foram instalados pelo Orientador, **Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos (IQ/UFG)**, com a participação dos demais membros da Banca Examinadora: Prof. Dr. Wendell Karlos Tomazelli Coltro (IQ/UFG), membro titular externo, e Prof. Dr. Thiago Leandro de Souza (UFG), membro titular interno. Durante a arguição os membros da banca **não** fizeram sugestão de alteração do título do trabalho. A Banca Examinadora reuniu-se em sessão secreta a fim de concluir o julgamento da Dissertação, tendo sido o candidato **aprovado** pelos seus membros. Proclamados os resultados pelo Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos, Presidente da Banca Examinadora, foram encerrados os trabalhos e, para constar, lavrou-se a presente ata que é assinada pelos Membros da Banca Examinadora, aos dezoito de fevereiro de dois mil e vinte.

## TÍTULO SUGERIDO PELA BANCA



Documento assinado eletronicamente por **Dyrney Araújo Dos Santos, Professor do Magistério Superior**, em 18/02/2020, às 11:16, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Thiago Leandro De Souza, Professor do Magistério Superior**, em 18/02/2020, às 11:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Wendell Karlos Tomazelli Coltro, Professor do Magistério Superior**, em 18/02/2020, às 11:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **1170371** e o código CRC **32AE0399**.

---

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, por todas as inúmeras bênçãos que aqui seriam impossíveis de contar, por cuidar, guiar, ser base de fé em minha família.

Aos meus pais, Ana Carmem e Miguel Filho, que mesmo a mais de 1400 quilômetros de distância não desamparam, estão sempre como apoio e guia, sempre prontos para ouvir, não medindo esforços para incentivar os nossos sonhos. Aos meus irmãos, Yuri e Iago, que fazem parte da minha base mais sólida, fazem parte da minha certeza de ter sempre alguém para contar. À Francesca, por ser uma segunda família.

Ao programa Crea Jovem e todos os amigos que lá conquistei, pelos ensinamentos e pela união. Em especial a Nayanne, que me incentivou a correr atrás da minha vontade de conhecer mais sobre a fluidodinâmica computacional, que me apresentou amigos e o programa de pós-graduação da engenharia química.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos (PPGEQ/UFG), por ter me acolhido como aluno, por ser um exemplo de professor, orientador, profissional e amigo. Agradeço por todos os ensinamentos e por confiar em mim para desenvolvermos o presente trabalho. Agradeço por ter me iniciado nos estudos de fluidodinâmica computacional.

Agradeço a todos os amigos que fiz dentro do programa, que me ajudaram a passar pelos momentos difíceis, deram dicas e estiveram sempre presentes para superarmos juntos. Em especial, agradeço à Wanessa, que fui apresentado antes mesmo de iniciar no programa, e à Jéssika, por serem meu grupo e ótimas amigas.

Agradeço a todos os professores do PPGEQ, principalmente aos ilustres Prof. Dr. Thiago e Christian, pelos inúmeros ensinamentos. Ao Prof. Dr. Wendell Coltro e Lucas Duarte (PPGQ/UFG) pelo apoio no laboratório microfluídica. Também aos amigos da EHCD pelo apoio.

À CAPES, pelo apoio financeiro (processo 88882.386521/2019-01).

---

## Resumo

A microfluídica tem origem recente e seu desenvolvimento é baseado em métodos microanalíticos. Definida como a ciência e tecnologia que aborda a manipulação de pequenas quantidades de fluídos escoando no interior de canais de dezenas a centenas de micrómetros, a microfluídica hoje tem uma diversidade de aplicação devido suas características de eficiência de controle. Neste trabalho, é brevemente abordado as aplicações da microfluídica, as características dos fenômenos físicos que a governam são elucidadas identificando as características gerais do escoamento, os fenômenos e adimensionais relevantes em estudos de escoamentos em canais na escala micro, bem como as propriedades interfaciais, que aparecem em sistemas multifásicos. Ainda é abordado a base matemática utilizada para estudo dos fenômenos de escoamento. As técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) são utilizadas como metodologia para o desenvolvimento, na intenção de superar os limites da experimentação em laboratório (observado aqui o controle do valor numérico das propriedades interfaciais). Para o estudo dos escoamentos microfluídicos multifásicos é utilizado o Modelo Multifásico de Volume de Fluido (VOF), o qual permite solucionar o escoamento de forma numérica e observar seu comportamento através das interfaces entre fluídos imiscíveis. Diante disto, neste trabalho, o modelo VOF foi validado com resultados experimentais, tanto quantitativo, quanto qualitativamente, com o intuito de prever todo o processo de geração de gotas no interior de microcanais. Adicionalmente, foi utilizado a técnica de Refino de Malha Adaptativo (AMR) para melhor rastrear a interface entre as fases fluídas. Os efeitos da geometria dos microcanais, das propriedades físicas do fluídos e das condições operacionais, sobre o tamanho e a taxa de geração das gotas foram avaliados por meio da técnica de regressão múltipla. Foi proposta, também, uma correlação adimensional para a previsão do comprimento de gotas no qual o erro relativo foi de 8.2%.

**Palavras-chave:** Microfluídica, Fluidodinâmica Computacional, CFD, Refinamento de Malha Adaptativo, AMR, VOF, Escoamento Multifásico.

---

## Abstract

Microfluidics has a recent origin and its development is based on microanalytical methods. Defined as the science and technology that addresses the manipulation of small amounts of fluids flowing into channels of tens to hundreds of micrometers, microfluidics today has a diversity of applications due to their characteristics of control efficiency. In this work, the microfluidics applications are briefly addressed, the physical characteristics phenomena that govern it are elucidated by identifying the general flow characteristics, the relevant phenomena and dimensionless studies of flow in channels on the micro-scale, as well as the interfacial properties, which appear in multiphase systems. The mathematical basis used to study the flow phenomena is still addressed. Computational fluid dynamics (CFD) techniques are used as a methodology for development, to overcome the limits of laboratory experimentation (observed here the numerical control of the value for interfacial properties). For the study of multiphase microfluidic flows, the Multiphase Fluid Volume Model (VOF) is used, which allows the flow to be solved numerically and to observe its behavior through the interfaces between immiscible fluids. Given this, in this work, the VOF model was validated with experimental results, both quantitatively and qualitatively, to predict the entire process of generating drops within microchannels. Additionally, the Adaptive Mesh Refining (AMR) technique was used to better track the interface between the fluid phases. The effects of the microchannel geometry, the physical properties of the fluids and the operating conditions, on the size and rate of droplet generation were evaluated using the multiple regression techniques. A dimensionless correlation was also proposed for the prediction of droplet length in which the relative error was 8.2%.

**Keywords:** Microfluidics, Computational Fluid Dynamics, CFD, Adaptive Mesh Refinement, AMR, VOF, Multiphase Flow.

---

## LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - DIAGRAMA REOLÓGICO DO COMPORTAMENTO DOS FLUIDOS REFERENTE À TENSÃO DE CISALHAMENTO EM FUNÇÃO DA TAXA DE DEFORMAÇÃO (ADAPTADO DE FOX <i>ET AL.</i> , 2016).	6
FIGURA 2 - PERFIS DE VELOCIDADE CARACTERÍSTICOS DE ESCOAMENTOS NO INTERIOR DE DUTOS: A) ESCOAMENTO LAMINAR E B) ESCOAMENTO TURBULENTO (ÇENGEL E CIMBALA, 2015).	7
FIGURA 3 – PADRÃO DE ESCOAMENTO ENCONTRADO NO INTERIOR DE MICROCANAIS: (A) ESTRATIFICADO; (B) NÃO-ESTRATIFICADO (ADAPTADO DE ALVES, 2015).	8
FIGURA 4 – MODELOS DE MICROCHIP: A) FORMATO “T” (DUARTE <i>ET AL.</i> , 2017); B) PERFIL COM FLUXO FOCALIZADO (SCHIANI, 2012); C) FORMATO “Y” (CHRISTOPHER <i>ET AL.</i> , 2007).	10
FIGURA 5 – INSETO SOBRE A MEMBRANA DE FLUIDO FORMADA PELA A TENSÃO SUPERFICIAL (NILAND, 2018).	11
FIGURA 6 - ILUSTRAÇÃO DAS FORÇAS DE COESÃO EM UMA MOLÉCULA NA SUPERFÍCIE E EM UMA MOLÉCULA NO INTERIOR DO FLUIDO (ADAPTADO DE RAPP, 2017).	12
FIGURA 7 – DIFERENTES TIPOS DE MENISCOS (INTERAÇÃO FLUIDO-PAREDE): A) MENISCO CÔNCAVO ONDE AS FORÇAS DE ADESÃO SÃO MAIORES DO QUE AS DE COESÃO (EX.: ÁGUA); B) MENISCO CONVEXO, ONDE AS FORÇAS DE COESÃO SÃO MAIORES DO QUE AS DE ADESÃO (EX.: MERCÚRIO).	13
FIGURA 8 - REPRESENTAÇÃO DO GRAU DE MOLHABILIDADE DE UMA SUPERFÍCIE A PARTIR DO ÂNGULO DE CONTATO FLUIDO-SUPERFÍCIE. (DAYANE E WILLIAM, 2017).	15
FIGURA 9 – IDENTIFICAÇÃO DO ÂNGULO DE CONTATO ENTRE O LÍQUIDO E A SUPERFÍCIE SÓLIDA, IDENTIFICANDO AS TENSÕES INTERFACIAIS ATUANTES NA SUA FORMAÇÃO (ADAPTADO DE RAPP, 2017).	15
FIGURA 10 – EXEMPLO DE UMA MALHA ESTRUTURADA (ÇENGEL E CIMBALA, 2015)	22
FIGURA 11 – EXEMPLOS DE MALHAS NÃO ESTRUTURADAS TRIANGULAR E QUADRILATERAL (ÇENGEL E CIMBALA, 2015).	22
FIGURA 12 – EXEMPLO DE MALHA HÍBRIDA (ÇENGEL E CIMBALA, 2015)	23

FIGURA 13 – REFINO DE MALHA ADAPTATIVO (ARM) APLICADO NO MODELO VOF (SCHMIDMAYER <i>ET AL.</i> , 2018).....	24
FIGURA 14 – ESQUEMA SIMPLIFICADO DA UNIDADE EXPERIMENTAL DE MICROFLUÍDICA UTILIZADA NESTE TRABALHO .....	27
FIGURA 15 – DETALHAMENTO DA MALHA COMPUTACIONAL 2D UTILIZADA PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO PROPOSTO (SECÇÃO QUADRADA DE 0,5 MM DE LADO): A) MICROCHIP USADO NOS EXPERIMENTOS; B) MALHA COMPUTACIONAL 2D; C) DETALHAMENTO DA MALHA COMPUTACIONAL 2D MOSTRANDO A REGIÃO DE MISTURA.....	28
FIGURA 16 – MALHAS COMPUTACIONAIS COM DIFERENTES ÂNGULOS DE ENTRADA PARA A INVESTIGAÇÃO DA GEOMETRIA DE MICRODISPOSITIVOS: A) 30,03°; B) 54,43°; C) 105°; D) 155,57°; E)179,97°.....	30
FIGURA 17 – DISTRIBUIÇÃO DA FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DA ÁGUA OBTIDAS NO TESTE DE INDEPENDÊNCIA DO NÍVEL DE REFINO DINÂMICO DA MALHA SOBRE A PREVISÃO DA GERAÇÃO DE GOTAS: A) NÍVEL 1, B) NÍVEL 2, C) NÍVEL 3 E D) NÍVEL 4 .....	35
FIGURA 18– DISTRIBUIÇÕES SIMULADAS DA FRAÇÃO VOLUMÉTRICA ÁGUA PARA TRÊS DIFERENTES ÂNGULOS DE CONTATO, JUNTAMENTE COM O FLUXO EXPERIMENTAL (VAZÃO DE ENTRADA DE 20 mL.MIN <sup>-1</sup> , PARA AMBAS AS FASES): A) E B) EXPERIMENTAL, C) 5 °; D) 23 °; E) 37 °.....	36
FIGURA 19 – FENÔMENO EXPERIMENTAL E SIMULADO DA FORMAÇÃO DE GOTAS (VAZÃO DE ENTRADA DE 20 mL.MIN <sup>-1</sup> , PARA AMBAS AS FASES): A) COMPARAÇÃO QUALITATIVA; B) COMPARAÇÃO QUANTITATIVA.....	37
FIGURA 20 – DISTRIBUIÇÕES SIMULADAS DA FRAÇÃO DO VOLUME DE ÁGUA EM FUNÇÃO DA POSIÇÃO LONGITUDINAL DO DISPOSITIVO (A) E DO TEMPO (B), UTILIZADOS PARA O CÁLCULO DO COMPRIMENTO E GERAÇÃO DA GOTA, RESPECTIVAMENTE (CONDIÇÃO 10 NA TABELA 2). .....	39
FIGURA 21 – RESULTADOS SIMULADOS DE TAMANHO DE GOTA E TAXA DE GERAÇÃO COM BASE NAS CONDIÇÕES MOSTRADAS NA TABELA 2. ....	40

---

## LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – MÉTODOS NUMÉRICOS E CONDIÇÕES DE CONTORNO UTILIZADAS NAS SIMULAÇÕES DE CFD.....	30
TABELA 2 – VARIÁVEIS INDEPENDENTES PARA A INVESTIGAÇÃO NUMÉRICA DO COMPRIMENTO DE GOTAS E TAXA DE GERAÇÃO.....	31
TABELA 3 – FORMA ADIMENSIONAL DAS VARIÁVEIS INDEPENDENTES MOSTRADAS NA TABELA 2. .....	32

---

## LISTA DE SÍMBOLOS

$Ca$	Número de Capilaridade
$Ca_{a-o}$	Número de Capilaridade combinado
$Co$	Número de Courrant
$\vec{F}$	Força interfacial entre os fluidos
$g$	Aceleração da gravidade
$D$	Comprimento característico
$\dot{m}_{pq}$	Fluxo de massa entre as fases subscritas
$\hat{n}$	Vetor unitário normal à parede
$p$	Pressão
$Re$	Número de Reynolds
$Re_{a-o}$	Número de Reynolds combinado
$S_\alpha$	Termo de geração da fase
$T$	Comprimento de gota
$\hat{t}$	Vetor unitário tangente à parede
$U_f$	O fluxo volumétrico através da face baseado na velocidade normal.
$\vec{v}$	Velocidade de escoamento
$v$	Velocidade da fase
$V$	Volume da célula computacional;
$\Delta t$	Passo de tempo
$\Delta x$	Comprimento de malha
<b>Símbolos Gregos</b>	
$\alpha$	Fração de volume da fase fluida
$\gamma$	Tensão interfacial
$\gamma_{gas/solido}$	Tensão interfacial entre superfície sólida e gás
$\gamma_{liquido/solido}$	Tensão interfacial entre superfície solida e líquido
$\gamma_{gas/liquido}$	Tensão interfacial entre liquido e gás

$\theta$	Ângulo de contato
$\rho$	Densidade
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$\phi$	Ângulo de entrada da geometria
$\varphi$	Propriedade da mistura
$\zeta$	Taxa de geração de gota

**Subscritos**

a	Fase água
o	Fase óleo
p	Fase p
q	Fase q

# SUMÁRIO

Resumo.....	i
Abstract.....	ii
Lista de Figuras.....	iii
Lista de Tabelas.....	v
Lista de Símbolos.....	vi
Introdução.....	1
Revisão Bibliográfica .....	4
2.1 Fluido como Meio Contínuo e Reologia dos Fluidos.....	4
2.1.1 Escoamento Laminar e Escoamento Turbulento .....	6
2.1.2 Escoamento Multifásico .....	8
2.2 Microfluídica e microdispositivos.....	9
2.2.1 Tensão Superficial e Capilaridade .....	11
2.2.2 Ângulo de Contato Fluido-Parede .....	14
2.3 Abordagem Numérica .....	16
2.3.1 Técnicas de Fluidodinâmica Computacional.....	16
2.3.2 Tratamento Numérico de Escoamentos Multifásicos .....	17
2.3.2.1 Abordagem Euler-Euler.....	17
2.3.2.2 Equações de Transporte Envolvidas no Modelo de Volume de Fluido (VOF).....	19
2.3.2.3 Tratamento do Termo Transiente no Modelo VOF.....	20
2.3.2.4 Características de Malhas Computacionais .....	21
2.3.2.5 Refino de Malha Adaptativo.....	23
2.4 Aplicação de Técnicas Numéricas no Estudo do Escoamento em Microcanais .....	24

Materiais e Métodos .....	26
3.1 Unidade e Metodologia Experimentais .....	26
3.2 Metodologia Numérica.....	27
3.2.1 Construção da malha Computacional .....	28
3.2.3 Investigação numérica do comportamento da geração de gotas de água em óleo	30
Resultados e Discussão.....	34
4.1 Teste de Independência do Refino de Malha Adaptativa (ARM) .....	34
4.2 Análise do ângulo de contato fluido-fluido-parede e validação do modelo VOF .....	36
4.3 Análises numéricas de comprimento de gota e taxa de geração.....	38
Conclusão .....	42
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	43
APÊNDICE .....	47

---

---

# CAPÍTULO 1

---

## Introdução



progresso humano e a necessidade de processos eficientes estimularam o desenvolvimento técnico-científico desde as eras mais remotas, como na idade da pedra com o surgimento das ferramentarias, mas foi na primeira revolução industrial que o desenvolvimento técnico-científico ficou evidente, onde se iniciaram diversas áreas específicas de estudos.

A microfluídica tem origem influenciada pelas seguintes áreas de pesquisa: a análise molecular, a biodefesa e a biologia molecular. Todas estas áreas da química e bioquímica utilizam métodos microanalíticos, sendo esta a maior influência para o desenvolvimento inicial da microfluídica. A necessidade por um controle efetivo e, portanto, por processos mais eficientes impulsionaram o desenvolvimento de dispositivos microfluídicos, amplamente aplicados em estudos de microrreatores, micromisturadores, extração, separação, bioensaio e estudos cinéticos (NISISAKO *et al.*, 2004, SUSANTI *et al.*, 2018, WHITESIDES, 2006, ZHANG *et al.*, 2006, FAUSTINO *et al.*, 2016, MONTEIL *et al.*, 2018).

Whitesides (2006) define a microfluídica como a ciência e tecnologia que trata de processos e manipulações de pequenas quantidades de fluidos escoando no interior de dispositivos contendo canais de dezenas a centenas de micrometros. Estes dispositivos são comumente denominados de dispositivos microfluídicos.

Os dispositivos microfluídicos têm a vantagem de manipular pequenos volumes de fluidos que fluem sob um regime laminar dentro de microcanais, evitando flutuações nas variáveis de transporte e possíveis instabilidades (LO, 2013; PRADO e BORGES, 2018). Por outro lado, a ausência de flutuações turbulentas leva a ineficientes processos de transferência de quantidade de movimento, de massa e energia, o que pode ser superado através do controle do comportamento do escoamento no microcanal.

Além disto, Lo (2013) afirma que a aplicação de microdispositivos no desenvolvimento de processos dispensa a prática de “*scaling up*”, sendo esta uma vantagem em comparação aos processos convencionais. O desafio de intensificar a produção por processos com microdispositivos está diretamente ligado à produção a baixo custo dos mesmos, possibilitando aumentar o número de microdispositivos em operação, produzindo um volume maior com alta eficiência, o que torna o processo economicamente viável.

As aplicações na área de processamento industrial são inúmeras, principalmente nos ramos que envolvem aplicações físicas, químicas e biológicas, tais como: processos com reações altamente exotérmicas e perigosas, processos de fermentação com temperatura e pH controlados, processos de filtração e secagem

É comum a manipulação de fluido em microcanais para geração de gotas, e de acordo com Seemann *et al.* (2011), é um campo de pesquisa interdisciplinar que cresce rapidamente, combinando física de matérias flexíveis, bioquímica e engenharia de microssistemas. Suas aplicações variam de sistemas analíticos rápidos ou a síntese de materiais avançados à cristalização de proteínas e ensaios biológicos para células vivas. O controle preciso dos volumes de gotículas e a manipulação confiável de gotículas individuais, como coalescência, mistura de seu conteúdo e classificação em combinação com ferramentas de análise rápida, permitem realizar reações químicas dentro das gotículas em condições definidas.

A maioria dos estudos microfluídicos está restrita, ainda nos dias atuais, a metodologias experimentais (JIU-SHENG e JIA-HUAN, 2012; COSTA *et al.*, 2017). A fim de superar as limitações impostas pelos experimentos em laboratório, assim como para um melhor entendimento da dinâmica e do comportamento do escoamento multifásico no interior de microcanais, as técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) vêm sendo utilizadas como uma ferramenta promissora.

Dentre os diferentes modelos multifásicos, o modelo de Volume de Fluido (VOF) é largamente utilizado no tratamento de escoamentos envolvendo fluidos imiscíveis. O VOF é

composto por técnicas de rastreamento de interfaces entre diferentes fases, onde os campos de distribuição de velocidades e frações volumétricas de todas as fases envolvidas são resolvidas, numericamente e de forma transiente, em um campo Euleriano ou malha computacional.

Um estudo sistemático envolvendo o comprimento de gotas e a taxa de geração em função das condições operacionais e das dimensões geométricas dos microdispositivos, bem como das propriedades físicas dos fluidos envolvidos, se mostra de grande relevância para aplicações tecnológicas e industriais. Portanto, esta dissertação tem como objetivo aplicar as técnicas de CFD, juntamente com o modelo multifásico VOF e o método AMR, para estudar o comportamento dinâmico da geração de gotas no interior de microcanais. Os efeitos das propriedades físicas do fluido e de molhabilidade da parede do microcanal, assim como os efeitos dos fatores geométricos do dispositivo sobre o comprimento e a taxa de geração das gotas, serão investigados. Além disso, serão analisadas correlações numéricas afim de obter modelos para as previsões do comprimento e da taxa de geração de gotas por meio da técnica de regressão múltipla. Os resultados numéricos serão validados por meio de dados experimentais sob as mesmas condições.

---

---

# CAPÍTULO 2

---

## Revisão Bibliográfica



este capítulo, será contextualizada a abordagem de fluido como meio contínuo, a caracterização de escoamentos básicos e o comportamento geral de escoamentos multifásicos, sendo estes relacionados à classificação em microcanais. Também serão abordados os fenômenos que devem ser considerados ao analisar escoamentos microfluídicos. Trabalhos experimentais e numéricos desenvolvidos na área de microfluídica, nas últimas décadas, serão discutidos ao longo do capítulo. Por fim, o modelo VOF, que será empregado nos estudos do escoamento em microcanais, será detalhado.

### **2.1 Fluido como Meio Contínuo e Reologia dos Fluidos**

Entender o comportamento da dinâmica de fluídos é uma questão antiga, com constatações primordiais desde Arquimedes, que se perdura e se torna cada vez mais particular nos dias atuais.

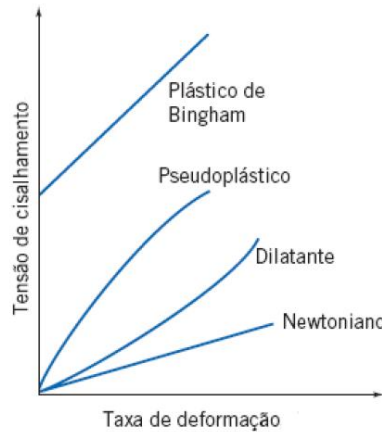
Fox *et al.* (2006) afirmaram que é natural perceber os fluidos como um meio contínuo, devido principalmente aos escoamentos mais presentes na natureza, onde pode-se, por exemplo, observar a água escoando pelo ralo de forma lisa e suave até todo o fluido presente dentro do reservatório acabar. Porém, por mais que possa ser percebido a continuidade do meio fluido, também é sabido que todos os fluidos são compostos por moléculas e que para análises a nível

molecular não se pode considerar uma continuidade, pois há espaços entre uma molécula e outra.

Desta forma, para modelar o escoamento de fluidos por meio da utilização de equações diferenciais, representando-o como um meio contínuo, o fluido deve ser tratado a nível de partícula de fluido, na qual as propriedades materiais dos fluidos, tais como a massa específica e a viscosidade, variam de forma suave, sem a presença de descontinuidades.

Partindo do modelo de fluido como um meio contínuo, pode-se classificar os fluidos com base no comportamento da sua taxa de deformação frente a aplicação de uma tensão cisalhante. O ramo da ciência que estuda este tipo de comportamento dos fluidos é conhecido como Reologia dos Fluidos. Fox *et al.* (2006), expõem quatro classificações comumente abordadas na literatura para o comportamento de fluidos de acordo com sua reologia, como demonstrado na Figura 1 e descritos a seguir:

- a) Fluido newtoniano: são os fluidos mais comuns, como água, ar, gasolina e óleo mineral. Eles apresentam a taxa de deformação proporcional à tensão cisalhante aplicada no fluido, na qual sua constante de proporcionalidade é a viscosidade dinâmica ( $\mu$ );
- b) Fluido dilatante: a deformação neste tipo de fluido não é linear, e a viscosidade aumenta à medida que a tensão cisalhante aplicada aumenta, o que pode ser observado, por exemplo em suspensões de amido;
- c) Fluido pseudoplástico: a deformação neste fluido não é linear, e a viscosidade diminui à medida que a tensão cisalhante aplicada aumenta. Este comportamento é comumente observado em suspensão de polímeros e tintas;
- d) Fluido plástico de Bingham: os fluidos caracterizados por este comportamento reológico requerem uma tensão de cisalhamento crítica para começarem a escoar.



**Figura 1-** Diagrama reológico do comportamento dos fluidos referente à tensão de cisalhamento em função da taxa de deformação (adaptado de Fox *et al.*, 2016).

A equação da tensão cisalhante que age sobre um fluido newtoniano é dada por:

$$\tau_{ij} = \mu \frac{d\vec{V}_i}{dj} \quad (2.1)$$

sendo  $\mu$  a viscosidade dinâmica e  $i$  e  $j$  as direções para um escoamento bidimensional.

Para os fluidos newtonianos, a equação que modela o transporte de quantidade de movimento linear é dada pela equação de Navier-Stokes, identificada a seguir pela Equação 2.2, para massa específica e viscosidade constantes.

$$\rho \left[ \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} \right] = \rho \vec{g} - \nabla p + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (2.2)$$

sendo  $\rho$  a massa específica do fluido,  $\vec{g}$  a aceleração da gravidade e  $p$  a pressão;

### 2.1.1 Escoamento Laminar e Escoamento Turbulento

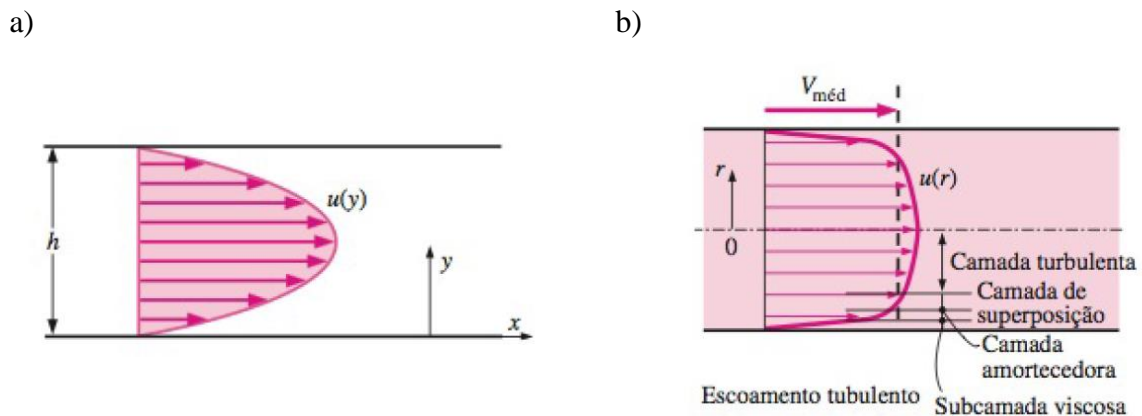
A caracterização do regime de escoamento depende da geometria, da rugosidade da superfície, da velocidade de escoamento, do tipo de fluidos, entre outros fatores. Osborne Reynolds, a partir de experimentos realizados em meados do século 19 envolvendo o escoamento de fluidos no interior de dutos, classificou a natureza do escoamento dos fluidos de acordo com a relação entre as forças inercias e viscosas. A razão entre estas forças passou a ser denominada de número adimensional de Reynolds ( $Re$ ), apresentada na Equação 2.3 a seguir:

$$Re = \frac{\rho v L}{\mu} \quad (2.3)$$

sendo  $\rho$  a massa específica do fluido,  $v$  a velocidade do fluido,  $L$  o comprimento característico do escoamento (no caso de tubos, o seu diâmetro interno) e  $\mu$  a viscosidade dinâmica do fluido.

Sabe-se que, para altos valores de Reynolds, o escoamento é dominado pelos efeitos inerciais, enquanto que para baixos valores de Reynolds o escoamento tem maior influência das forças viscosas. Escoamentos onde as forças viscosas são influentes (baixos valores de Reynolds) tendem a ter um comportamento organizado e previsível, apresentando trajetórias bem definidas, como laminas escoando umas sobre as (Figura 2a). Neste caso, o escoamento é classificado como sendo laminar.

Para escoamentos que apresentam uma dominância das forças inerciais, observa-se a presença de um perfil de velocidade mais “empistonado”, não possuindo trajetórias bem definidas, e de natureza transiente e caótica. Estas são características presentes nos escoamentos classificados como sendo turbulentos (Figura 2b).



**Figura 2** - Perfis de velocidade característicos de escoamentos no interior de dutos: a) Escoamento Laminar e b) Escoamento Turbulento (Çengel e Cimbala, 2015).

Em geral, estes escoamentos podem ser classificados com base em uma faixa de número de Reynolds. No caso de escoamentos internos, consideram-se como escoamentos laminares aqueles cujos números de Reynolds sejam menores do que 2300. Acima de 4000, o escoamento se encontra no regime turbulento. Entre estes valores, o escoamento é dito de transição (Çengel e Cimbala, 2015).

Valores de Reynolds muito pequenos podem ser encontrados em escoamentos cujas dimensões do canal no qual o fluido escoar são muito pequenas ou quando o escoamento se dá em baixíssimas velocidades, ou a combinação de ambos. Quando o escoamento ocorre dentro de pequenas dimensões (1 mm ou menor), os efeitos capilares devem ser levados em consideração como fatores de influência no comportamento do escoamento.

Devido às características supracitadas, o escoamento presente no interior de microcanais é puramente laminar e influenciado pela capilaridade. Estas características são favoráveis

quando se deseja um controle efetivo das variáveis operacionais, tais como velocidade do fluido e distribuição de temperatura, e desfavorável quando o processo de mistura, ou de reação química, no caso de reações lentas, é o objetivo final da utilização de microcanais. Isto se deve ao fato de que, em escoamentos turbulentos a mistura ocorre a nível macroscópico (estruturas turbulentas), ao contrário do regime laminar, onde a difusão molecular é predominante (LO, 2013; RAPP, 2017; WHITESIDES, 2006).

### 2.1.2 Escoamento Multifásico

O escoamento multifásico aparece quando mais de uma fase está envolvida e o comportamento de uma fase material é essencialmente diferente de outras que a suportam, apresentando, desta forma, uma grande interação entre elas. Estas interações entre as fases causa uma profunda modificação na fluidodinâmica do escoamento.

O maior interesse no estudo de um escoamento multifásico é com relação ao comportamento médio do sistema, a fim de avaliar suas tendências. Os escoamentos multifásicos no interior de canais podem ser classificados, de forma geral, em escoamentos estratificados e não estratificados (PARK *et al.*, 2016).

O escoamento estratificado é descrito como bem-comportado, com fases bem separadas em camadas heterogêneas, não havendo formação de micelas. Já no comportamento não estratificado, não se observa a formação de camadas separadas. A característica predominante deste tipo de escoamento é a formação de micelas ou bolhas, podendo ter oscilação de fases no escoamento. A Figura 3 demonstra a caracterização de um escoamento estratificado e não estratificado. A caracterização pormenorizada do comportamento de escoamentos no interior de microcanais pode ser encontrada, de forma detalhada, no trabalho desenvolvido por Bordbar *et al.* (2018).



**Figura 3** – Padrão de escoamento encontrado no interior de microcanais: (a) estratificado; (b) não-estratificado (Adaptado de Alves, 2015).

O uso de mais de uma fase em microcanais comumente aplicado em sistema microfluídicos para a geração de gotas, em que uma das fases molha a parede do dispositivo, encapsulando uma segunda fase, devido a ação de forças interfaciais, e posteriormente a segunda fase é cisalhada pelo fluxo, originando, dessa maneira, gotas (SHANG *et al.*, 2017).

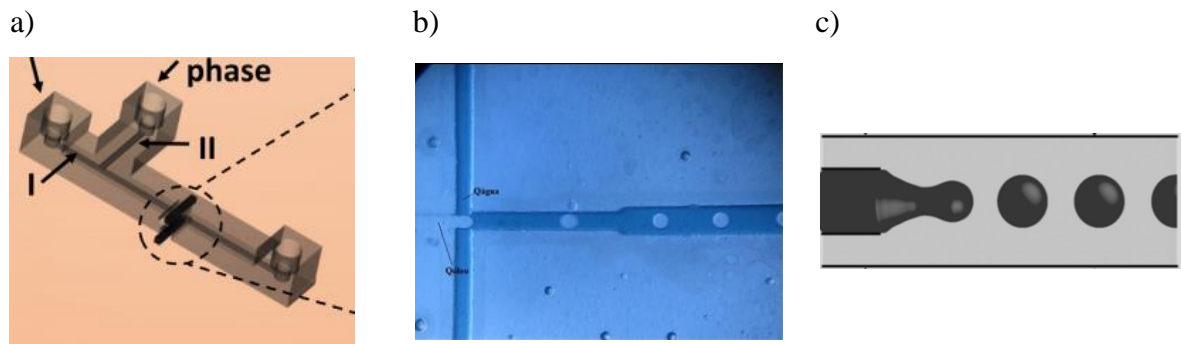
## 2.2 Microfluídica e microdispositivos

A microfluídica é a ciência que estuda e aplica a física de fluidos em escalas de micrometros, já que nestas escalas os fluidos demonstram fenômenos e características particulares. Devido às pequenas dimensões dos microcanais e velocidades de escoamento, os efeitos viscosos (efeitos difusivos), bem como os efeitos de superfícies, são dominantes nestes sistemas (RAPP, 2017).

Devido às características intrínsecas à microfluídica, que possibilita desenvolver atividades a baixo volume de fluido, que implica baixo consumo, e relativa alta eficiência no controle e manipulação de fluidos, esta área de pesquisa vem se expandindo de forma multidisciplinar, envolvendo outras áreas, tais como as diversas engenharias como a química, de materiais, bioengenharia, além de áreas mais tradicionais como a física, a química, a biológica, a biomédica, etc. Além disso, a possibilidade de integração de sistemas microfluídicos facilita a coexistência de várias fases de fluido, essas características abriram caminho para o controle sistemático miniaturizado sobre a manipulação de fluidos individuais e interfaces de fluidos (SHANG *et al.*, 2017).

Quando se trabalha com sistemas multifásicos, cujo intuito é a geração de gotas, podem ser adotados métodos passivos e ativos. Nos métodos ativos, a geração é desencadeada ou favorecida por forças externas adicionadas ao sistema, como por exemplo, métodos elétricos e magnéticos. Já para os métodos passivos, a geração da gota ocorre devido aos efeitos da própria geometria do equipamento, das propriedades dos fluidos envolvidos e das condições operacionais. Para a geração de gotas por método passivo, Shang *et al.* (2017) relatam três diferentes geometrias: fluxo coaxial (*Coflow*), fluxo cruzado (*Cross-Flow*) e fluxo focalizado (*Flow-Focusing*).

A Figura 4 ilustra alguns dos diferentes tipos de geometrias utilizadas na confecção de microchips (Duarte *et al.*, 2017; Schianti, 2012; Christopher e Anna, 2007). Em geral, os nomes dado aos perfis estão relacionados à geometria de encontro das fases fluidas. Na Figura 4a, pode ser observado a geometria de fluxo cruzado, também conhecida como *T-junction*. A Figura 4b demonstra a geometria de fluxo focalizado, podendo ser observado que o fluxo de fluidos se encontra de forma a “forçar” a geração das gotas em um determinado local; esta constrição pode ser feita também por paredes na própria geometria do canal. Já a Figura 4c apresenta a geometria dos dispositivos com fluxo coaxial.



**Figura 4** – Modelos de microchip: a) formato “T” (Duarte *et al.*, 2017); b) perfil com fluxo focalizado (Schianti, 2012); c) Formato “Y” (Christopher *et al.*, 2007).

Diversas técnicas de fabricação e materiais podem ser utilizadas para a obtenção de microdispositivos, sendo que, para cada tipo de material utilizado uma técnica de fabricação específica deve ser empregada. Schianti (2012) descreve as técnicas de extrusão à laser, impressão direta, fotolitografia e corrosão, como as mais comuns para a obtenção dos microchips. O autor afirma que a extrusão à laser e a corrosão são as técnicas mais adequadas para a confecção de microchips em vidro. Já Piccin *et al.* (2014) utilizaram a xurografia e a impressão direta para a fabricação de microcanais. Duarte *et al.* (2017) utilizaram a impressão direta com a prototipação auxiliada por impressora 3D para a fabricação de microcanais em polímero ABS (Acrilonitrila butadieno estireno) com sensor de eletrodo integrado para a medição do tamanho das gotas geradas. Lobo-Júnior *et al.* (2017) descrevem uma técnica de fabricação para a produção de microcanais em PDMS (Polidimetilsiloxano), atribuindo a ela agilidade, facilidade e economia.

Cada geometria e material/metodologia de fabricação de microcanais apresentam características únicas e particulares, na qual a adoção das mesmas deve ser coerente para o estudo. Piccin *et al.* (2014) utilizaram um microchip fabricado em poliéster-toner no formato de “T” para o estudo de geração de gotas de óleo em água e gotas de água em óleo. Já Schianti (2012), utilizou um sistema microfluídico com perfil de fluxo focalizado, fabricado em vidro, na produção de micro e nanopartículas.

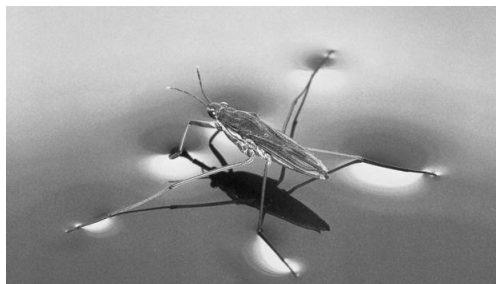
As características moleculares do material utilizado na confecção do microchip influenciam na propriedade de ângulo de contato fluido-parede, devido aos efeitos das forças de adesão e coesão, determinando, desta forma, a capacidade de molhabilidade do líquido sobre a parede do dispositivo, o que interfere na geração de gotas.

Quando se trata de escoamentos em microcanais, fendas e outros meios, cujas dimensões sejam pequenas, algumas propriedades dos fluidos se tornam muito mais influentes no processo de escoamento, tais como: a capilaridade, a tensão superficial e o ângulo de contato fluido-parede. Neste caso, o padrão de escoamento pode ser totalmente modificado pela introdução no sistema de uma simples perturbação, como por exemplo, a adição de agentes tensoativos. A seguir serão descritas as principais propriedades físicas que influenciam na geração de gotas no interior de microcanais.

### 2.2.1 Tensão Superficial e Capilaridade

Na interação entre dois fluidos diferentes ou entre fluidos e uma superfície sólida, que são imiscíveis entre si, é possível notar uma delimitação entre as fases, onde se desenvolve uma membrana elástica devido à tendência das moléculas a manterem a coesão entre si, criando uma tensão superficial (FOX *et al.*, 2006).

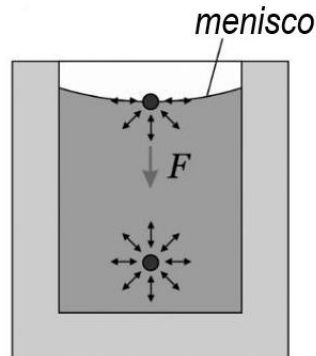
A tensão superficial entre dois fluidos apresenta um aspecto similar a uma malha, a qual é facilmente visível, como por exemplo, em interfaces de água e ar. Esta interface caracteriza o aspecto de manta na superfície da água em um ambiente estático, a qual possibilita que insetos consigam se manter sobre a superfície sem afundar (Figura 5).



**Figura 5** – Inseto sobre a membrana de fluido formada pela a tensão superficial (NILAND, 2018).

Para exemplificar o efeito da tensão superficial na interação fluido-superfície sólida, suponha que é disponível um recipiente aberto, que possui uma quantidade de um líquido no seu interior. A fração que não está preenchida com o líquido está totalmente preenchida com ar. Quando se observa uma molécula deste líquido, que se localiza no interior da fração de líquido existente no recipiente, ela apresenta uma distribuição igual de força de atração para com as demais moléculas do mesmo fluido, sendo este fenômeno chamado coesão. Já para as moléculas presentes na interface entre o líquido e o ar, estas só terão coesão para com as moléculas nas suas laterais e com as moléculas inferiores, já que a parte superior é o ar, não

havendo força de interação entre as moléculas de diferentes fluidos. Esta falta de interação com as moléculas da parte superior gera um desequilíbrio de forças de coesão, resultando, assim, na tensão presente entre as superfícies de fluidos diferentes, nomeada de tensão superficial (RAPP, 2017). É possível observar a ilustração da ação das forças de coesão na Figura 6.

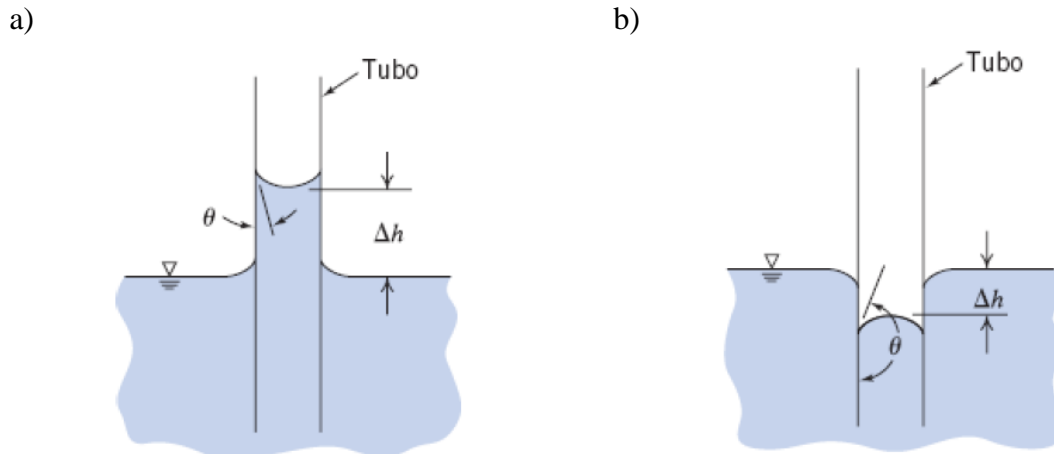


**Figura 6** - ilustração das forças de coesão em uma molécula na superfície e em uma molécula no interior do fluido (Adaptado de RAPP, 2017).

As forças de adesão são ocasionadas pela interação das moléculas de fluido e da superfície sólida, sendo melhor representadas aqui como a resultante da interação entre as tensões superficiais que vão indicar a capacidade do fluido de molhar a parede (esta é melhor explicada no item 2.2.2).

A depender das forças de coesão e adesão, pode haver a formação de meniscos côncavos ou convexos. Por exemplo, no caso da água no interior de um recipiente de vidro (um tubo de ensaio) forma-se um menisco côncavo porque as forças de adesão (entre as moléculas de  $H_2O$  e a parede de vidro) são maiores do que as forças de coesão (entre as moléculas de  $H_2O$ ), ou seja, a água molha a superfície de vidro. O contrário ocorre quando se tem, por exemplo, o mercúrio no interior de um tubo de ensaio de vidro, devido as forças de coesão das moléculas de Hg serem maiores do que as forças de adesão (entre as moléculas de Hg e a superfície de vidro). Logo, o mercúrio tende a não molhar a superfície (se mantém quase que no formato de gotas sobre a superfície), o que caracteriza a formação do menisco convexo.

A formação dos diferentes tipos de meniscos (interação fluido-parede) é ilustrada na Figura 7. Estes fenômenos de interface é o que possibilita a geração de gotas, como anteriormente comentado, apreciadas na pesquisa e desenvolvimento de dispositivos microfluídicos com diversas finalidades.



**Figura 7** – Diferentes tipos de meniscos (interação fluido-parede): a) menisco côncavo onde as forças de adesão são maiores do que as de coesão (Ex.: água); b) menisco convexo, onde as forças de coesão são maiores do que as de adesão (Ex.: mercúrio)  
(Adaptado de Fox *et al.*, 2016)

Garstecki *et al.* (2006) propuseram uma correlação para prever o comprimento das gotículas em função da largura do canal e a taxa de vazão de dois fluidos por meio de experimentos. No entanto, a correlação proposta foi restrita a aplicações em que a razão entre o comprimento da gota e a largura do microcanal é maior que 1. Além disso, outras variáveis importantes na dinâmica do fluxo multifásico, como os efeitos interfaciais e os efeitos da viscosidade, não foram avaliadas.

Piccin *et al.* (2014) realizaram experimentos em microdispositivos para gerar gotas de água em óleo e em hexadecano, assim como gerar gotas de óleo e gotas de hexadecano em água. Os autores mostraram que, nas condições de trabalho apresentadas, só foi possível a geração de gotas, em ambos os experimentos, diminuindo a tensão interfacial através da adição de tensoativo em ambas as fases. Duarte *et al.* (2017) também utilizaram tensoativo para diminuir a tensão interfacial e obter geração de gotas de óleo em água e gotas de água em óleo, em um microchip com geometria semelhante ao utilizado por Piccin *et al.* (2014).

Sabe-se que, a formação de gotas de uma fase líquida em outra é facilitada pela diminuição da tensão interfacial. Devido a isso é muito comum a adição de surfactantes à fase contínua para facilitar e estabilizar a geração de gotas. Baret (2012) atribui aos surfactantes um papel essencial na tecnologia microfluídica baseada em geração de gotas. Porém, a análise experimental da influência da tensão interfacial sobre as características de geração e tamanho de gotas por meio da adição de tensoativos se mostra inviável, visto que há um limite físico de diminuição da tensão com o aumento da concentração de tensoativos (DALTIM, 2011).

Para a investigação do comportamento fluidodinâmicos no interior de microcanais, pode-se utilizar uma análise adimensional. Os principais números adimensionais relacionados a este tipo de fenômeno, são: o número de Reynolds ( $Re$ ), definido como a razão entre a força inercial e a força viscosa; o número de Capilaridade ( $Ca$ ), isto é, a razão entre a força viscosa e a força interfacial; e o número de Weber ( $We$ ), ou seja, a relação entre a força inercial e a força interfacial (PRADO e BORGES, 2018).

O número de Capilaridade ( $Ca$ ) correlaciona as forças viscosas e as forças interfaciais, como mostrado na Equação 2.4, sendo  $v$  a velocidade de escoamento,  $\mu$  a viscosidade e  $\gamma$  a tensão interfacial entre os fluidos.

$$Ca = \frac{v\mu}{\gamma} \quad (2.4)$$

Valores altos do número de Capilaridade indicam que o escoamento é dominado pelas forças viscosas, enquanto que baixos valores indicam uma maior ação das forças interfaciais.

O número de Weber ( $We$ ) é derivado da multiplicação entre o número de Reynolds e o número de Capilaridade. Este adimensional correlaciona as forças inerciais e as forças interfaciais (Equação 2.5)

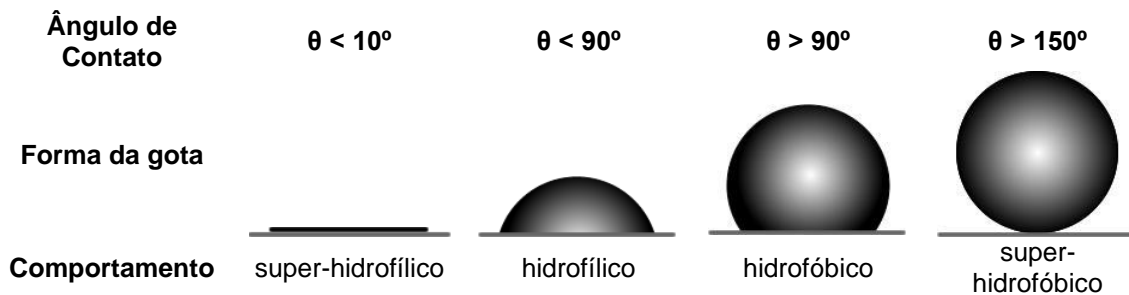
$$We = Re \cdot Ca = \frac{\rho v^2 L}{\gamma} \quad (2.5)$$

sendo  $\rho$  a massa específica do fluido,  $v$  a velocidade de escoamento,  $L$  o comprimento característico do canal e  $\gamma$  a tensão interfacial.

### 2.2.2 Ângulo de Contato Fluido-Parede

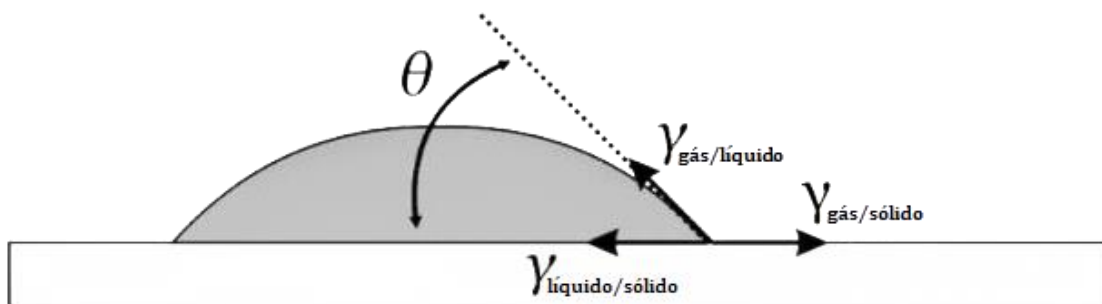
Quando uma gota de um determinado líquido é depositada sobre uma superfície sólida, ela tende a interagir com esta superfície por meio da ação conjunta das forças de coesão e adesão, formando, após o equilíbrio entre estas forças, um ângulo característico entre o contorno da gota e a superfície.

Geralmente, utiliza-se a água como fluido padrão na determinação do grau de molhabilidade de uma determinada superfície. Quando o contorno da gota de água forma um ângulo menor do que  $90^\circ$ , diz-se que a água molha bem a superfície, sendo esta superfície classificada como hidrofílica. Por outro lado, quando o contorno forma um ângulo maior do que  $90^\circ$ , a superfície é classificada como hidrofóbica, demonstrando que a água não consegue molhar bem a superfície sólida (Figura 8).



**Figura 8** - Representação do grau de molhabilidade de uma superfície a partir do ângulo de contato fluido-superfície. (DAYANE e WILLIAM, 2017)

Na Figura 9 é possível verificar como é caracterizada a medição do ângulo de contato entre o fluido e a superfície, assim como as tensões envolvidas no fenômeno. Esta mesma composição é o que define o formato do menisco em canais capilares, como mostrado, anteriormente, na Figura 7.



**Figura 9** – Identificação do ângulo de contato entre o líquido e a superfície sólida, identificando as tensões interfaciais atuantes na sua formação (Adaptado de RAPP, 2017).

O ângulo de contato fluido-superfície pode ser estimado por meio da equação de Young (Equação 2.6):

$$\cos \theta = \frac{(\gamma_{gás/sólido} + \gamma_{líquido/sólido})}{\gamma_{gás/líquido}} \quad (2.6)$$

sendo  $\gamma_{gás/sólido}$  a tensão interfacial entre o ar e a superfície,  $\gamma_{líquido/sólido}$  a tensão interfacial entre o líquido e a superfície,  $\gamma_{gás/líquido}$  a tensão interfacial entre as fases fluidas ar e líquido.

O ângulo de contato gera influência nas características de geração de gotas em microcanais, no qual, geralmente, utiliza-se o líquido com menor ângulo de contato com a superfície, devido a melhor molhabilidade da mesma, como a fase líquida contínua do sistema e o segundo fluido é utilizado como fase dispersa.

## 2.3 Abordagem Numérica

Esta seção tem por objetivo apresentar os conceitos fundamentais da modelagem multifásica utilizando as ferramentas de Fluidodinâmica Computacional (CFD), juntamente com os principais métodos numéricos e condições de contorno. Serão apresentados os tipos de modelagem multifásica, dando ênfase ao Modelo Multifásico de Volume de Fluidos (VOF), o qual foi aplicado neste trabalho para a previsão do escoamento presente no interior de microcanais. As principais equações de transporte e constitutivas do VOF serão descritas e discutidas.

### 2.3.1 Técnicas de Fluidodinâmica Computacional

A simulação numérica é um viável artifício para as análises de engenharia, que tem como característica o uso de códigos para solucionar de forma numérica problemas físicos matematicamente modelados. Quando a simulação numérica é aplicada em escoamento de fluidos, trata-se dela como execução de códigos de CFD (*Computational Fluid Dynamics*, em português Fluidodinâmica Computacional) que são responsáveis por solucionar as equações diferenciais parciais que descrevem o escoamento de fluidos com auxílio de computador. Esta abordagem vem para auxiliar e complementar o desenvolvimento e pesquisa, como abordado por Çengel e Cimbala (2015). A simulação numérica é comumente tratada como uma terceira via de análise, complementando a experimentação em laboratório e as investigações analíticas (Maliska, 2014).

Patankar (1980) apresenta as principais vantagens de usar simulação via técnicas de CFD, tais como: baixo custo de aplicação, menor tempo de execução de projeto (quando comparado à confecção de protótipos e experimentação em laboratório), maior nível de detalhamento dos fenômenos envolvidos, possibilidade de realizar simulações com as condições realísticas e condições ideais.

Por outro lado, esta abordagem apresenta algumas limitações, como por exemplo, o alto custo computacional característico de simulações complexas envolvendo escoamentos multifásicos com transferência simultânea de massa e energia, assim como em escoamentos turbulentos, onde equações adicionais de transporte devem ser levadas em consideração.

A seguir, serão discutidos os tipos de modelos multifásicos, dando ênfase ao modelo utilizado para o tratamento de escoamentos envolvendo fluidos imiscíveis, tema deste trabalho.

### 2.3.2 Tratamento Numérico de escoamentos Multifásicos

Para a solução numérica de um escoamento multifásico, é necessário primeiro escolher qual a abordagem descreve melhor o regime de escoamento que vai representar o problema que será analisado. Atualmente, existem duas abordagens para o tratamento dos escoamentos multifásicos: a abordagem Euler-Euler e a abordagem Euler-Lagrange.

Na abordagem Euler-Lagrange, o campo de velocidade e outras propriedades da fase fluida são calculados por meio das equações diferenciais parciais médias de Navier-Stokes, enquanto que a fase de partícula sólida (ou gotas dispersas) é “rastreada” individualmente por meio da integração da segunda lei de Newton ao longo do tempo. Neste caso, as interações partícula-partícula e partícula-parede devem ser tratadas por meio de modelos de contato adequados. Esta abordagem oferece uma maneira mais natural de simular o escoamento fluido-sólido ou fluido-gotas, porém, exige um alto custo computacional, especialmente quando o número de partículas ou gotas presentes no sistema se torna grande.

Já na abordagem Euler-Euler, ambas as fases, fluido ou sólido (ou gotas) são tratadas como contínuas e interpenetrantes com suas respectivas equações diferenciais de transporte resolvidas em um campo fixo Euleriano, diminuindo, substancialmente, o custo computacional envolvido (SANTOS, 2015).

Neste trabalho, será empregada a abordagem Euler-Euler, a qual será descrita, com maiores detalhes, a seguir.

#### 2.3.2.1 Abordagem Euler-Euler

Como mencionado anteriormente, na abordagem Euler-Euler, as fases são matematicamente tratadas como contínuas e interpenetrantes, na qual o volume de uma fase não pode ocupar o volume de outra fase, introduzindo, assim, o conceito de fração volumétrica de fases. Neste caso, assume-se que a fração volumétrica é contínua, dependente do espaço e do tempo, e a soma das frações volumétricas de todas as fases envolvidas deve ser igual a 1. A equação de conservação pode ser construída para cada fase, sendo similar para as fases, em função da fração volumétrica (SANTOS, 2015).

No tratamento de um escoamento multifásico pela abordagem Euler-Euler, três modelos diferentes são comumente utilizados, sendo eles: o Modelo Multifásico de Mistura, o Modelo Euleriano Granular Multifásico (MEGM) e o Modelo de Volume de Fluido (VOF, do inglês “Volume of Fluid”), descritos a seguir:

- **Modelo Multifásico de Mistura:** este modelo é utilizado para o tratamento de escoamentos compostos por duas ou mais fases, podendo estas serem fluidos ou partículas. O Modelo de Mistura resolve a equação de momento para a mistura e prescreve as velocidades relativas para descrever as fases dispersas. As aplicações deste modelo incluem: fluxos carregados de partículas com baixas carga, fluxo de bolhas, separadores ciclones, dentre outros;
- **Modelo Euleriano Granular Multifásico:** este é o modelo multifásico mais complexo dentre os três apresentados, sendo que neste modelo são resolvidas as equações de transferência de quantidade de movimento e continuidade para cada uma das fases envolvidas. O acoplamento entre elas é possível através da pressão e dos coeficientes de troca interfásica. O modo pelo qual ocorre o acoplamento depende das fases envolvidas, sendo diferente quando se trata de um fluxo granular (fluido-sólido) e de um fluxo não granular (fluido-fluido). O MEGM é comumente aplicado em colunas de bolhas, suspensão de partículas, leitos fluidizados, leitos de jorro, dentre outros;
- **Modelo de Volume de Fluido:** o modelo VOF é uma técnica de rastreamento de superfície aplicada em campos Eulerianos. Neste tipo de modelo são utilizados dois ou mais fluidos imiscíveis, sendo o interesse identificar e descrever a posição da interface entre os fluidos. Neste modelo, apenas uma única equação de momento é solucionada para os fluidos, e a fração de volume em cada célula computacional é rastreada através do domínio. Este modelo é comumente aplicado em fluxos estratificados, fluxos de superfícies livres, preenchimento, movimentos de bolhas largas em líquidos, dentre outros.

Ressalta-se que o modelo VOF é principalmente usado pela importância de visualizar as fronteiras ou interfaces entre os fluidos imiscíveis presentes em um determinado escoamento, o que não seria possível com os dois primeiros modelos descritos anteriormente. Existem, também, na literatura, estudos numéricos que envolvem o acoplamento entre dois ou mais modelos de mistura (FONDELLI *et al.*, 2015; TROFA *et al.*, 2019).

Todas as equações presentes no modelo VOF serão detalhadas nos próximos tópicos.

### 2.3.2.2 Equações de Transporte Envolvidas no Modelo de Volume de Fluido (VOF)

Como mencionado anteriormente, o modelo VOF pode modelar duas ou mais fases imiscíveis resolvendo uma única configuração de equação de quantidade de movimento e rastreando as frações de volume de cada fluido através do domínio.

Uma única equação de quantidade de movimento é resolvida através do domínio e o campo de velocidade resultante é distribuído para as fases de fluido. A equação da quantidade de movimento para o VOF, mostrada na Equação 2.7, depende da fração de volume e das propriedades de massa específica e viscosidade da mistura, estas em termos gerais para o escoamento.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2.7)$$

sendo  $\vec{v}$  a velocidade da mistura (em termos totais do escoamento),  $\vec{g}$  a aceleração da gravidade,  $\mu$  a viscosidade da mistura,  $\rho$  a densidade da mistura e  $\vec{F}$  a força de interação entre as fases devido à tensão interfacial.

Em um sistema bifásico, utilizando os subscritos “p” e “q” para denotar cada fase, as propriedades de mistura em cada célula computacional são calculadas de acordo com a Equação 2.8, podendo a variável  $\varphi$  ser substituída por  $\vec{v}$ ,  $\rho$  ou  $\mu$ .

$$\varphi = \alpha_p \varphi_p + (1 - \alpha_p) \varphi_q \quad (2.8)$$

Para “n” fases presentes no escoamento, as propriedades da mistura podem ser determinadas, de uma forma geral, conforme a Equação 2.9.

$$\varphi = \sum \alpha_n \varphi_n \quad (2.9)$$

Em cada célula computacional, é possível encontrar as seguintes situações, de acordo com os valores das frações volumétricas dos fluidos contidas na mesma:

- $\alpha_q = 0$ : a célula está vazia (para o fluido “q”);
- $\alpha_q = 1$ : a célula está preenchida (para o fluido “q”);
- $0 < \alpha_q < 1$ : a célula contém uma interface entre os fluidos (com relação ao fluido “q”).

O rastreamento das interfaces entre as fases é realizado pela solução da equação da continuidade (para uma ou mais fases) em cada célula computacional do volume de controle. A partir da solução da equação da continuidade para cada fase, é possível distribuir as frações volumétricas e quantidade de movimento das mesmas em cada célula, tornando possível

delimitar o comportamento de cada fase. Para a fase “q”, a equação da continuidade é escrita como:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[ \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (2.10)$$

sendo  $\rho_q$  a densidade da fase “q”,  $\alpha_q$  a fração volumétrica da fase “q”,  $\vec{V}_q$  o vetor velocidade da fase “q”,  $S_{\alpha_q}$  o termo fonte para a fase “q”, relacionado à geração ou consumo, e  $\dot{m}_{pq}$  a transferência de massa entre as fases “q” e “p” (caso houver).

A força devido a tensão interfacial entre os fluidos, mostrada na Equação 2.7, é modelada pelo método CFS (Força de Superfície Contínua, do inglês *Continuous Surface Force*) proposto por Brackbill *et al.* (1992), de acordo com as equações:

$$\vec{F} = \frac{\gamma(\rho_p \nabla \alpha_p)}{\left( \frac{1}{2}(\rho_p + \rho_q) \right)} \quad (2.11)$$

$$\kappa = \nabla n \quad (2.12)$$

$$n = \hat{n}_p \cos \theta + \hat{t}_p \sin \theta \quad (2.13)$$

sendo  $n$ ,  $\hat{n}_p$ ,  $\hat{t}_p$ ,  $\theta$  e  $\gamma$  o vetor unitário, o vetor unitário normal da fase “p” com a parede, o vetor unitário tangencial da fase “p” com a parede, o ângulo de contato fluido-parede e a tensão interfacial fluido-fluido, respectivamente.

### 2.3.2.3 Tratamento do Termo Transiente no Modelo VOF

A maioria dos escoamentos que utilizam a modelagem VOF são simulados de forma transiente, ou seja, ao longo do tempo (estado não estacionário). Para o tratamento do termo transiente na equação da continuidade do modelo VOF, geralmente é utilizado o esquema explícito, que soluciona a equação para o tempo seguinte com base nas informações que são obtidas do tempo anterior (Equação 2.14).

$$\frac{\alpha_q^{n+1} \rho_q^{n+1} - \alpha_q^n \rho_q^n}{\Delta t} V + \sum_f (\rho_q U_f^n \alpha_{q,f}^n) = \left[ \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_{\alpha_q} \right] V \quad (2.14)$$

sendo  $n+1$  o novo passo de tempo (atual),  $n$  o passo de tempo anterior,  $\alpha_{q,f}^n$  o valor da fração de volume da fase “q” computada na face da célula computacional,  $V$  o volume da célula e  $U_f$  o fluxo volumétrico, baseado na velocidade normal através da face computacional.

Como afirmou Patankar (1980) e Maliska (2014), esta abordagem não requer a solução iterativa para a equação de transporte em cada passo de tempo, pois, neste caso é obtida a solução exata para o passo de tempo seguinte.

Ainda no esquema explícito, existem algumas precauções que devem ser tomadas por questões de instabilidade numérica e coerência física dos resultados. Neste caso, deve-se garantir que o “passo de tempo numérico” seja menor ou igual que o “passo de tempo físico”, ou seja, o número adimensional de Courant ( $Co$ ) deve ser menor ou igual a 1 (Equação 2.15).

$$Co = \frac{\vec{V}\Delta t}{\Delta x} \quad (2.15)$$

O adimensional de Courant (Equação 2.15) é definido pela razão da distância percorrida pelo fluido (em função do produto da velocidade  $\vec{V}$  e o espaço de tempo  $\Delta t$ ) sobre o comprimento de célula da malha computacional ( $\Delta x$ ) que o fluido vai percorrer no espaço de tempo. Para que o volume de fluido em uma determinada célula não deixe de ser computado, é necessário o uso de um passo de tempo (“time step”) menor do que o tempo decorrido para que o fluido possa percorrer uma distância equivalente ou menor que o espaçamento da malha, o que induz o adimensional de Courant ser menor ou igual a 1 (Patankar, 1980).

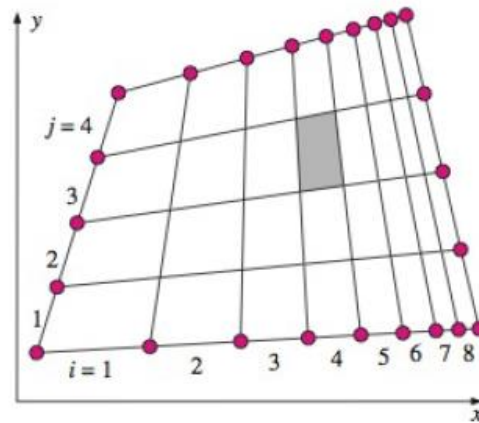
#### 2.3.2.4 Características de Malhas Computacionais

A malha computacional é a representação do volume de controle em domínios de cálculos, podendo estes serem em duas dimensões (2D) ou três dimensões (3D). Cada célula computacional é vista como um minúsculo volume de controle, onde as equações discretizadas de conservação e transporte são resolvidas (Çengel e Cimbala, 2015).

A malha tem o papel fundamental na coerência dos resultados obtidos no cálculo computacional. Malhas muito refinadas, geralmente apresentam melhores resultados, pois contém um número suficiente de células ou volumes computacionais para garantir que as funções de interpolação representem o escoamento. Porém, malhas muito refinadas demandam um alto custo computacional, uma vez que envolvem sistemas contendo um grande número de equações algébricas lineares que devem ser resolvidas simultaneamente. Malhas pouco refinadas apresentam um custo computacional menor, devido ao menor número de células computacionais para resolver as equações, porém, podem vir a não representar bem o escoamento.

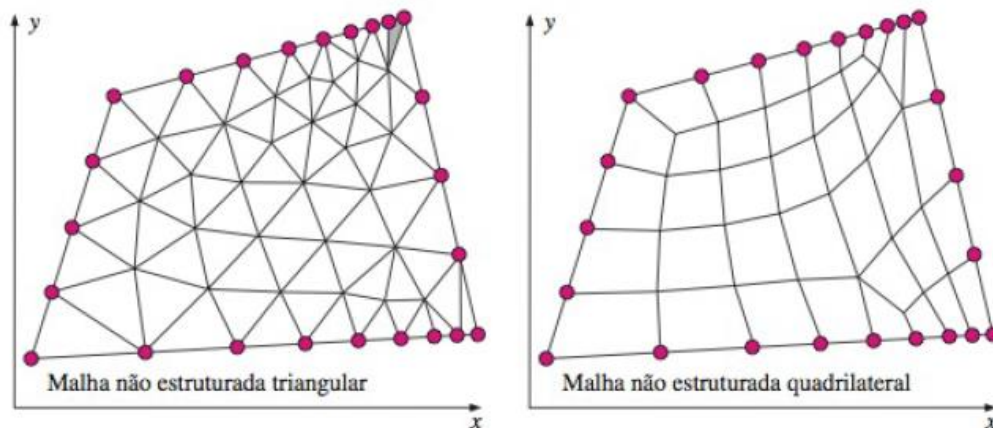
Çengel e Cimbala (2015), apresentam três tipos básicos de malhas computacionais:

- a) **Malha Estruturada:** tem por característica principal ser bem definida e os vértices ou os seus volumes serem facilmente identificados em termos de coordenadas, o que facilita os cálculos computacionais e as convergências numéricas. Este tipo de malha possui elementos quadriláteros (2D) ou hexaédricos (3D) (Figura 10).



**Figura 10** – Exemplo de uma malha estruturada (Çengel e Cimbala, 2015)

- b) **Malha Não-Estruturada:** apresentam diversos formatos, sendo os mais comuns os quadriláteros e o triângulos não regulares (2D). Apresenta uma dificuldade ou impossibilidade de indicar seus vértices em termos de coordenadas, o que dificulta os cálculos computacionais e a convergência, porém são mais fáceis de gerar e é muito comum em geometrias mais complexas (Figura 11).



**Figura 11** – Exemplos de malhas não estruturadas triangular e quadrilateral (Çengel e Cimbala, 2015)

- c) **Malha Híbrida:** combina regiões de malha estruturada e não estruturada, sendo muito utilizada para permitir diferentes níveis de refino. A Figuras 12 a seguir exemplifica uma

malha híbrida, onde pode-se observar uma alta resolução (refino) próxima à parede com malha estruturada (o que facilita a convergência dos altos gradientes), sem exigir alto refino longe da parede.



**Figura 12** – Exemplo de Malha Híbrida (Çengel e Cimbala, 2015)

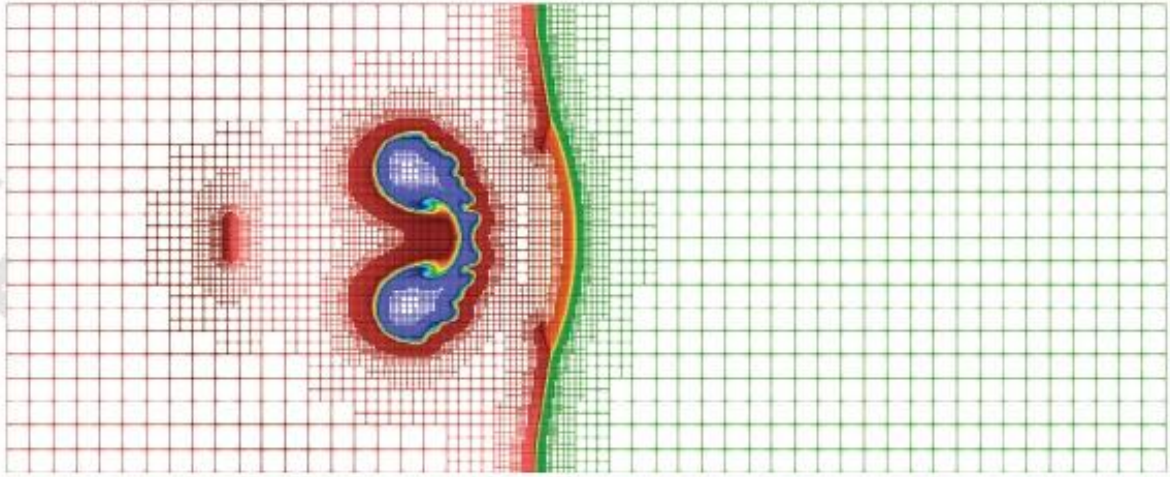
### 2.3.2.5 Refino de Malha Adaptativo

O refino de malha adaptativo (do inglês AMR, *Adaptive Mesh Refinement*) é utilizado com o intuito de reduzir o custo computacional, sendo que o mesmo possibilita o refino adaptativo em altos gradientes, identificando as células e aplicando a divisão das células de modo automático, em passos de tempos determinados. Esta técnica de refino já foi utilizada no trabalho de Jiang *et al.*, (2012), que combinaram o refino adaptativo com o método de conservação de elemento e solução de elemento, demonstrando a precisão da técnica quando comparada a métodos de refinamentos tradicionais.

O refino atribuído atua na célula ou volume computacional de forma que, a dimensão da célula (comprimento) é reduzida pelo fator de  $2^n$ , onde  $n$  é o nível escolhido. Exemplificando, para o nível de refino 1 a célula tem suas dimensões reduzidas em  $2^1$ ; para o nível de refino igual a 4, as dimensões serão reduzidas a um fator de  $2^4$ , o que resulta em uma célula com dimensão resultante 16 vezes menor que a da célula original, e assim por diante. Para maiores detalhes acerca do método ARM, ver Tryggvason e Lu (2009) e Versteeg e Malalasekera (2007).

O refino adaptativo vem sendo atualizado e aprimorado para consumir cada vez menos recurso computacional, como mostrado por Schmidmayer *et al.* (2018), que demonstraram a capacidade do método e trouxeram exposições da capacidade de rastreamento do refino de malha adaptativo para a técnica de VOF quando aplicado para rastreamento de interface de fluido. Como

pode ser exemplificado na Figura 13, apenas a interface entre os dois fluidos recebeu o refino diferenciado (maior número de células computacionais), a qual foi rastreada com base no gradiente da fração volumétrica (Schmidmayer *et al.*, 2018).



**Figura 13** – Refino de malha adaptativo (ARM) aplicado no modelo VOF (Schmidmayer *et al.*, 2018).

Azarmanesh *et al.* (2016) aplicaram a técnica AMR em seus estudos, avaliando o refino nos níveis de 4 a 6. Devido à não influência do refino nos resultados obtidos, os autores optaram por trabalhar com o nível 4 de refino na simulação de um microcanal com duplo fluxo focalizado para a geração de dupla emulsão, garantindo, assim, menor custo computacional. Eles estudaram a influência dos números adimensionais de Weber e de Capilaridade sobre a geração de gotas, obtendo uma representação fidedigna do escoamento.

#### **2.4 Aplicação de Técnicas Numéricas no Estudo do Escoamento em Microcanais**

Qian e Lawal (2006), utilizaram, de forma satisfatória, as técnicas de CFD com o intuito de avaliar a formação de gotas de ar em água no interior de microcanais, sob diferentes condições operacionais e variações na geometria. Os autores puderam verificar a não influência da ação da gravidade, e propuseram uma correlação para a previsão do tamanho da gota em função das dimensões do canal. Contudo, a variação geométrica utilizada na pesquisa se dá apenas com relação à largura do canal da geometria de fluxo cruzado (canal em T), não levando em consideração o ângulo entre os canais.

Outros trabalhos também foram desenvolvidos com a aplicação da técnica de CFD a fim de obter informações mais precisas sobre o escoamento interno em microdispositivos, como é o caso do trabalho desenvolvido por Gupta *et al.* (2009), que utilizaram malhas com alto grau

de refino (comprimento de célula em torno de  $1,67 \mu\text{m}$ ) e validaram seu modelo através da espessura de filme líquido formado entre a gota e a parede. Os autores propuseram uma correlação para a previsão da pressão na gota gerada por unidade de comprimento.

Considerando o ângulo de contato da parede de óleo igual a zero e negligenciando a influência das propriedades da água, Diouf e Romero (2017) observaram que o refinamento computacional da malha influenciava a região de gotejamento da geração de gotas, pois quanto maior o nível da malha de refinamento, mais distante era o desprendimento da gota gerada. No entanto, os autores não abordaram os efeitos das propriedades de molhabilidade da parede (por exemplo, o ângulo de contato fluido-parede).

A fim de avaliar o comportamento de um reator microestruturado com formato em T para a geração de gotas líquido-líquido, Kashid *et al.* (2010) modelaram a geração de gotas utilizando o modelo VOF, investigando o comportamento da molhabilidade dos fluidos e validou o modelo através da espessura de líquido da fase contínua existente entre a gota gerada e a parede. A fim de aumentar o volume das gotas, os autores avaliaram o crescimento do tamanho da gota variando o diâmetro do canal, e foi observado um crescimento linear apenas para canais com diâmetros de 0,05 a 0,5 mm.

Nazari *et al.* (2018) utilizaram o método de *lattice-Boltzmann* para simular o processo de geração de gotas em microcanais com formato em “T”. Eles analisaram as influências do número de Capilaridade, da vazão volumétrica dos fluídos, da razão de viscosidade dos fluídos e de parâmetros geométricos na quebra, tamanho e tempo de descolamento das gotas. Foi possível observar que o aumento dos valores de número de Capilaridade influenciou na distância de quebra da gota, tornando-a maior. Os autores também concluíram que, para números de Capilaridade menores do que 0,04, o tamanho da gota é independente da razão de viscosidade dos fluídos, mas, para valores acima deste, o tamanho da gota sofreu variação devido à razão de viscosidades. Yu e Fan (2009) também utilizaram o método de *lattice-Boltzmann* aplicando a técnica ARM para demonstrar o potencial do método, demonstrando que a simulação dos escoamentos multifásicos de bolhas está em concordância com os dados experimentais da literatura.

O modelo que será aplicado no presente trabalho para o estudo da dinâmica de gotas no interior de microcanais será o modelo VOF, já utilizado e validado por diversos outros autores no estudo da microfluídica ( ROSENGARTEN *et al.*, 2006; GUO *et al.*, 2016; GUO *et al.*, 2017; LI e ANGELI, 2017).

---

---

# CAPÍTULO 3

---

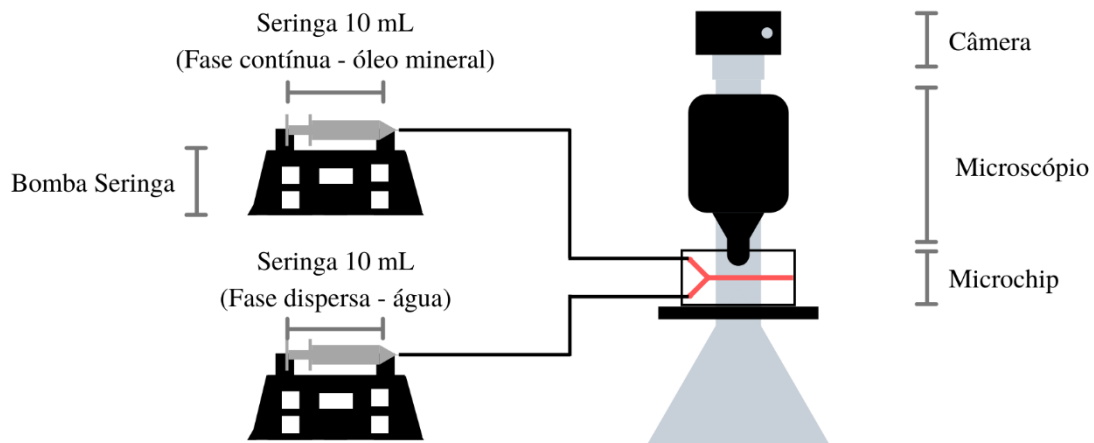
## Materiais e Métodos



Esta seção é voltada para a apresentação dos materiais que foram utilizados no desenvolvimento do presente trabalho, bem como são apresentados os métodos utilizados na estruturação dos experimentos e das simulações.

### 3.1 Unidade e Metodologias Experimentais

Para a realização da investigação experimental da geração de gotas no interior de microcanais, foi utilizada a aparelhagem experimental do “Laboratório de Microfluídica e Eletroforese” do Instituto de Química da Universidade Federal de Goiás (UFG), composta por: um microscópio óptico COLEMAN (modelo XSZ-N107T, Santo André, SP, Brasil) conectado a uma câmera digital (modelo HDCE 50bto), um microchip fabricado (com técnica de litografia macia) em PDMS com geometria de fluxo cruzado (formato em “Y”) e canal de secção transversal, aproximadamente quadrado de 0,5 mm de lado, fixado em base de vidro com superfície de contato recoberta por PDMS, duas seringas de 10 mL acopladas a duas bombas seringas independentes (modelo NE 300, *New Era Pump Systems*), como ilustrado na Figura 14.



**Figura 14** – Esquema simplificado da unidade experimental de microfluídica utilizada neste trabalho

Para o estudo do escoamento baseado na geração de gotas, foram realizados experimentos utilizando como fluidos imiscíveis a água ( $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 998 \text{ kg.m}^{-3}$ ;  $\mu_{\text{H}_2\text{O}} = 0,001 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ) e o óleo mineral ( $\rho_{\text{óleo}} = 845,0 \text{ kg.m}^{-3}$ ;  $\mu_{\text{óleo}} = 0,16 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ), em condições ambiente de temperatura e pressão, cujo valor de tensão interfacial (água-óleo) é de  $0,032 \text{ N/m}$  (propriedades físico-químicas fornecidas pelo fabricante).

Para o estudo experimental da dinâmica da geração de gotas no interior do microcanal, foram capturadas imagens durante todo o processo de geração de gotas de água em óleo. Estas imagens foram então tratadas por meio do software livre de tratamento de imagens “ImageJ” para o posterior cálculo dos comprimentos médios das gotas geradas e das taxas médias de geração. Neste caso, foram empregadas vazões fixas e iguais para ambos os fluidos no valor de  $20 \mu\text{L}.\text{min}^{-1}$ .

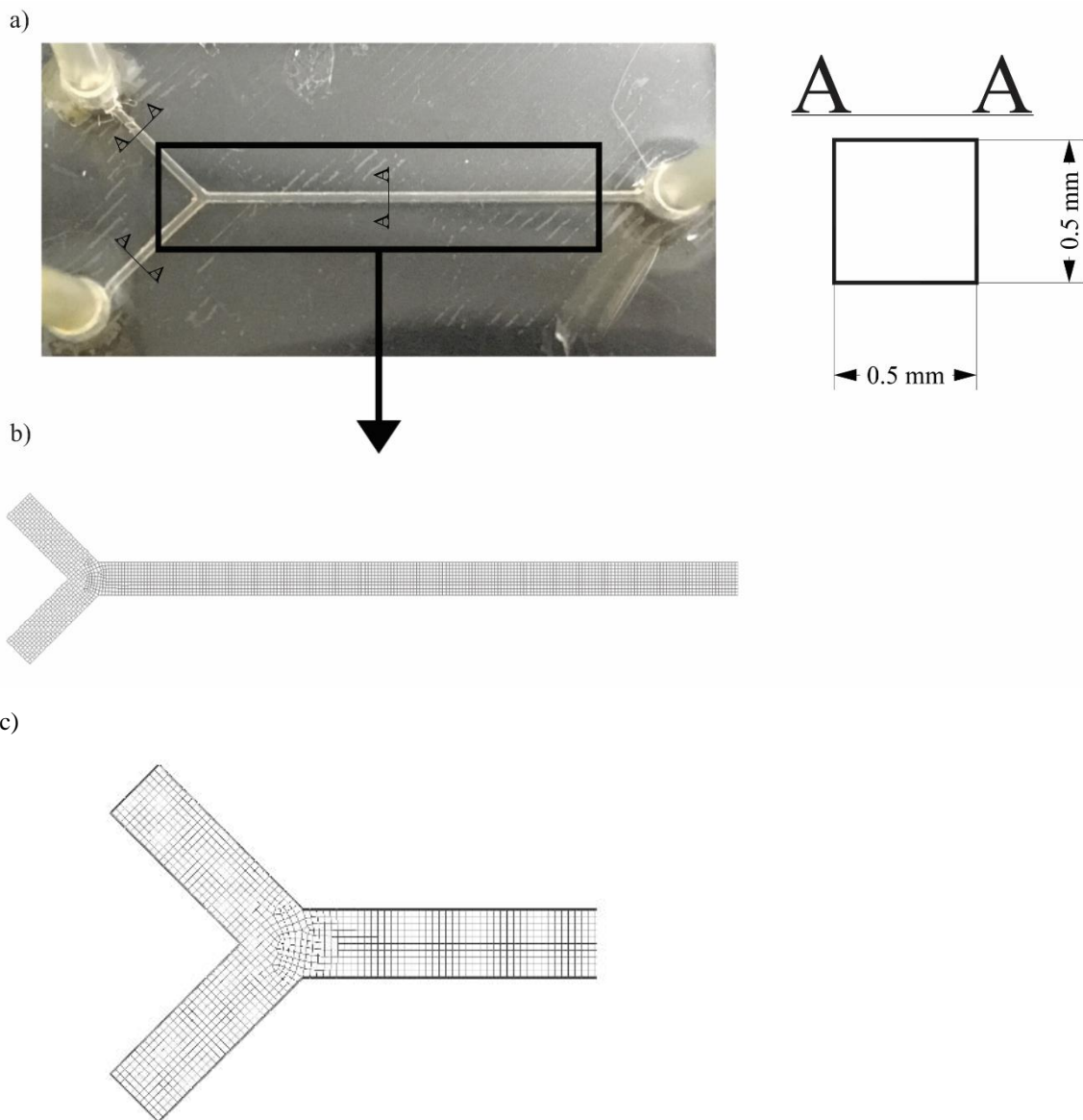
O estudo experimental observado tem por fim fornecer dados para validar o modelo numérico utilizado para previsão de geração de gotas, possibilitando instigar os efeitos das condições operacionais, propriedades dos fluidos e geometrias dos microdispositivos.

### 3.2 Metodologia Numérica

Todas as simulações foram executadas utilizando o pacote comercial Ansys Fluent<sup>®</sup>, versão acadêmica 19,2, instalado em um microcomputador contendo um processador com quatro núcleos físicos (Intel<sup>®</sup> I7-7700, 3,60 GHz) e 8 GB de RAM.

### 3.2.1 Construção da malha Computacional

A malha computacional do microchip foi construída através do software de construção de geometria e malha presente no pacote computacional ANSYS acadêmico. Para o modelo de validação proposto, uma malha computacional fixa bidimensional (2D) foi construída com base na geometria do microchip usado nos experimentos (Figura 15).



**Figura 15** – Detalhamento da malha computacional 2D utilizada para a validação do modelo proposto (secção quadrada de 0,5 mm de lado): a) microchip usado nos experimentos; b) malha computacional 2D; c) detalhamento da malha computacional 2D mostrando a região de mistura.

A malha fixa mostrada na Figura 15 continha 6630 células computacionais, sendo classificada como híbrida, apresentando, apenas na região de mistura, malha quadrilateral não estruturada.

### 3.2.2 Teste de Independência do ARM e Validação do modelo VOF

Sabe-se que o refino da malha desempenha um importante papel nas simulações de CFD, visto que malhas mais refinadas produzem soluções mais precisas. Assim, antes de tudo, para a validação do modelo VOF aqui proposto, foram avaliados os efeitos de quatro diferentes níveis de refino,  $n = 1, 2, 3$  e  $4$  aplicado na interface água-óleo, sobre o comportamento do escoamento multifásico. Com relação ao ângulo de contato água-óleo-parede, o mesmo foi inicialmente fixado em  $37^\circ$  para esta análise. Uma vazão de  $20 \mu\text{L}\cdot\text{min}^{-1}$  foi utilizada para ambas as fases.

Os resultados obtidos nas simulações foram comparados com os dados experimentais sob as mesmas condições, sendo que o nível de refino que melhor representou fisicamente o escoamento multifásico foi escolhido para dar continuidade à investigação numérica.

Após a escolha do melhor nível de refino a ser utilizado, o efeito do ângulo de contato água-óleo-parede, que representa uma importante propriedade de molhabilidade da parede, sobre a dinâmica da formação das gotas no interior do microcanal foi analisado. Devido à grande dificuldade em se medir experimentalmente, com consistência e precisão, o ângulo de contato fluido-fluido-superfície em um sistema água-óleo-PDMS, o valor adequado foi estimado via simulação numérica pelo processo de tentativa e erro.

Como valor inicial do ângulo de contato do sistema água-óleo-parede para o processo de tentativa e erro, foi utilizada a equação de Young (Equação 2.6), juntamente com os valores de referência de tensão superficial fornecidos por Rapp (2017). Ressalta-se que a propriedade para o gás na Equação 2.6, foi substituída pela propriedade da água.

O valor adequado do ângulo de contato para o sistema água-óleo-PDMS foi escolhido baseando-se na comparação qualitativa e quantitativa entre os resultados numéricos e os dados experimentais.

Os métodos numéricos e condições de contorno utilizados em todas as simulações estão resumidos na Tabela 1. O passo de tempo (*time step*) utilizado variou de  $1,0 \times 10^{-5}$  a  $1,0 \times 10^{-7}$ , para garantir estabilidade numérica (número de Courant ( $Co$ )  $< 0,25$ ).

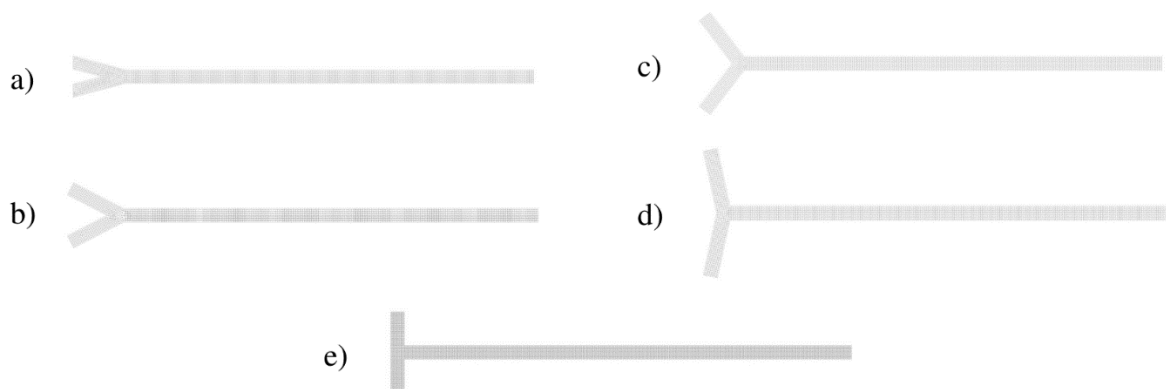
**Tabela 1** – Métodos numéricos e condições de contorno utilizadas nas simulações de CFD.

Método de Desratização	Método dos Volumes Finitos
Acoplamento pressão–velocidade:	<i>PISO</i>
Interpolação da pressão:	<i>PRESTO</i>
Método de interpolação espacial:	<i>Up-wind</i> de segunda ordem
Método de interpolação temporal:	Método de Euler
Condição de contorno de parede:	Condição de não deslizamento
Condição de contorno das entradas:	Entrada de Velocidade ( <i>Velocity inlet</i> )
Condição de contorno da saída:	<i>Escoamento completamente desenvolvido (Outflow)</i>
Interpolação interfacial:	Método de reconstrução geométrica
Formulação de força de corpo:	Força de corpo implícita

### 3.2.3 Investigação numérica do comportamento da geração de gotas de água em óleo

O modelo previamente validado foi utilizado para a análise numérica dos efeitos das condições operacionais e das propriedades físicas dos fluidos sobre o tamanho e taxa de geração das gotas no interior do microcanal.

Para a investigação do fator geométrico, cinco geometrias com diferentes ângulos de entrada foram adotadas ( $30,03^\circ$ ,  $54,43^\circ$ ,  $105^\circ$ ,  $155,57^\circ$  e  $179,97^\circ$ ), que correspondem às malhas computacionais demonstradas na Figura 16.



**Figura 16** – Malhas computacionais com diferentes ângulos de entrada para a investigação da geometria de microdispositivos: a)  $30,03^\circ$ ; b)  $54,43^\circ$ ; c)  $105^\circ$ ; d)  $155,57^\circ$ ; e)  $179,97^\circ$ .

Os valores dos ângulos de entrada, bem como todas as condições para cada simulação, estão resumidos na Tabela 2.

**Tabela 2** – Variáveis independentes para a investigação numérica do comprimento de gotas e taxa de geração.

Simulações	Ângulos de entrada (°)	$v_o \times 10^2$ (m/s)	$v_a \times 10^2$ (m/s)	$\gamma \times 10^2$ (N/m)
1	54,43	0,551	0,322	3,200
2	54,43	0,781	0,093	3,200
3	54,43	0,551	0,322	0,824
4	54,43	0,781	0,093	0,824
5	54,43	2,141	1,252	12,429
6	54,43	3,032	0,361	12,429
7	54,43	2,141	1,252	3,200
8	54,43	3,032	0,361	3,200
9	155,57	0,551	0,322	3,200
10	155,57	0,781	0,093	3,200
11	155,57	0,551	0,322	0,824
12	155,57	0,781	0,093	0,824
13	155,57	2,141	1,252	12,429
14	155,57	3,032	0,361	12,429
15	155,57	2,141	1,252	3,200
16	155,57	3,032	0,361	3,200
17	30,03	1,781	0,353	3,200
18	179,97	1,781	0,353	3,200
19	105,00	0,222	0,044	0,399
20	105,00	3,339	0,661	6,001
21	105,00	1,781	0,353	25,694
22	105,00	1,781	0,353	1,706
23	105,00	0,191	1,943	3,200
24	105,00	1,939	0,194	3,200
25	105,00	1,781	0,353	3,200

Os resultados numéricos da Tabela 2 foram tratados usando a técnica de regressão múltipla para a análise dos efeitos simples, quadráticos e de interação de todas as variáveis consideradas sobre o comprimento e a taxa de geração das gotas.

Adicionalmente, foi realizada uma análise adimensional com o intuito de propor uma correlação para a previsão do comprimento médio das gotas. Para tanto, as variáveis independentes apresentadas na Tabela 2 foram reescritas na forma adimensionalizada e estão representadas na Tabela 3.

**Tabela 3** – Forma adimensional das variáveis independentes mostradas na Tabela 2.

Simulações	$Re_o \times 10^2$ (-)	$Re_a \times 10^2$ (-)	$Ca_o \times 10^3$ (-)	$Ca_a \times 10^3$ (-)
1	1,46	161,18	27,56	0,10
2	2,06	46,51	39,03	0,03
3	1,46	161,18	107,04	0,39
4	2,06	46,51	151,58	0,11
5	5,65	626,01	27,56	0,10
6	8,01	180,66	39,03	0,03
7	5,65	626,01	107,04	0,39
8	8,01	180,66	151,58	0,11
9	1,46	161,18	27,56	0,10
10	2,06	46,51	39,03	0,03
11	1,46	161,18	107,04	0,39
12	2,06	46,51	151,58	0,11
13	5,65	626,01	27,56	0,10
14	8,01	180,66	39,03	0,03
15	5,65	626,01	107,04	0,39
16	8,01	180,66	151,58	0,11
17	4,70	176,30	89,03	0,11
18	4,70	176,30	89,03	0,11
19	0,59	21,96	89,03	0,11
20	8,82	330,64	89,03	0,11
21	4,70	176,30	11,09	0,01
22	4,70	176,30	166,97	0,21
23	0,50	971,34	9,53	0,61
24	5,12	96,95	96,97	0,06
25	4,70	176,30	89,03	0,11

Neste caso, os seguintes adimensionais foram empregados:

- **Número de Reynolds (Re):** O número de Reynolds foi avaliado na região de entrada de fluido, para cada uma das fases fluidas. O Comprimento característico

considerado foi o lado (L) do canal, sendo este equivalente ao diâmetro hidráulico. Para a densidade ( $\rho$ ), a viscosidade ( $\mu$ ) e velocidade ( $v$ ), foram utilizados os valores da fase líquida que estará sendo avaliada, em que os subscritos “a” e “o” representam as fases água e óleo, respectivamente.

$$Re_a = \frac{\rho_a V_a L}{\mu_a} \quad (3.1)$$

$$Re_o = \frac{\rho_o V_o L}{\mu_o} \quad (3.2)$$

- **Número de Reynolds Combinado ( $Re_{a-o}$ ):** O número de Reynolds combinado foi definido aqui pela razão entre o número de Reynolds da fase dispersa (água) e o número de Reynolds da fase contínua (óleo).

$$Re_{a-o} = \frac{Re_a}{Re_o} \quad (3.3)$$

- **Número de Capilaridade (Ca):** O número de Capilaridade foi avaliado na região de entrada de fluido, para cada fase fluida. Para a viscosidade ( $\mu$ ) e a velocidade ( $v$ ), foram utilizados os valores da fase líquida que estará sendo avaliada, onde os subscritos “a” e “o” representam as fases água e óleo, respectivamente. A tensão interfacial ( $\gamma_{ao}$ ) foi considerada com sendo a tensão entre as fases fluidas óleo e água.

$$Ca_a = \frac{V_a \mu_a}{\gamma_{ao}} \quad (3.4)$$

$$Ca_o = \frac{V_o \mu_o}{\gamma_{ao}} \quad (3.5)$$

- **Número de Capilaridade Combinado ( $Ca_{a-o}$ ):** O número de Capilaridade combinado foi definido aqui pela soma dos números de Capilaridade das fases água e óleo.

$$Ca_{a-o} = Ca_a + Ca_o \quad (3.6)$$

---

---

# CAPÍTULO 4

---

## Resultados e Discussão

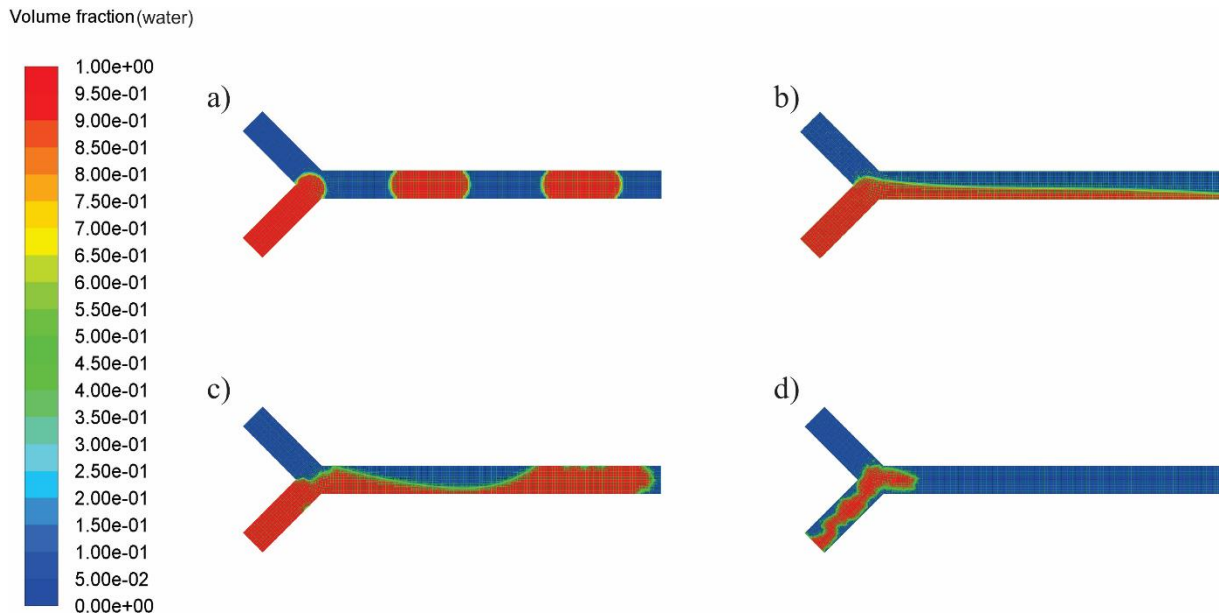


este capítulo serão apresentados e discutidos os resultados obtidos utilizando os métodos abordados e descritos nos capítulos anteriores. Estarão inclusos aqui, os resultados da validação do modelo VOF, destacando-se os efeitos dos diferentes níveis de refino e do ângulo de contato fluido-parede, tanto de forma qualitativa, quanto de forma quantitativa. Serão expostos, também, os resultados obtidos nas simulações para a avaliação dos efeitos das condições operacionais e das propriedades físicas dos fluidos, assim como da geometria dos microdispositivos, sobre o tamanho e taxa de geração das gotas.

### **4.1 Teste de Independência do Refino de Malha Adaptativa (ARM)**

Para analisar o efeito da técnica de refino de malha utilizado (AMR) sobre o comportamento do escoamento multifásico em microcanais, foram utilizados quatro níveis diferentes de refino ( $n = 1-4$ ), cujas distribuições simuladas da fração volumétrica de água são mostradas na Figura 17.

Vale ressaltar que, sob a condição operacional usada nas simulações (ou seja, vazão de entrada de  $20 \mu\text{Lmin}^{-1}$ , para ambas as fases), observou-se experimentalmente um fluxo baseado em geração de gotas (gotas de água em óleo).



**Figura 17** – Distribuição da fração volumétrica da água obtidas no teste de independência do nível de refino dinâmico da malha sobre a previsão da geração de gotas: a) Nível 1, b) Nível 2, c) Nível 3 e d) Nível 4

Contrário ao que foi afirmado em trabalhos anteriores da literatura (Azarmanesh *et al.*, 2016), de acordo com a Figura 17, o nível de refino aplicado no AMR mostrou-se como um importante parâmetro na previsão do comportamento do escoamento multifásico dentro de um microcanal. No nível de refino igual a 1 (Figura 17a), ou seja, cada célula computacional foi dividida em duas na interface água-óleo, o comportamento do escoamento simulado foi similar ao observado experimentalmente, onde ocorreu a geração de gotas de água em óleo.

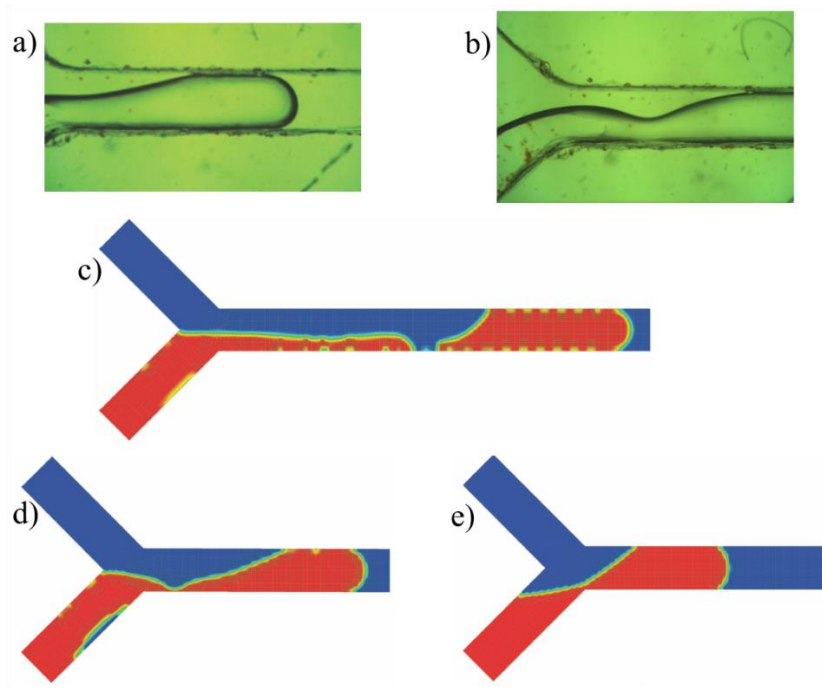
Por outro lado, sob o nível de refino igual a 2 (cada célula computacional dividida por quatro), um fluxo estratificado foi formado, o que não está de acordo com os experimentos (Figura 17b). Além disso, os níveis de refinamento iguais a 3 (cada célula computacional dividida por oito) e 4 (cada célula computacional dividida por dezesseis), não demonstraram comportamentos físicos adequados (Figura 17c-d).

Assim, levando em consideração a concordância do comportamento físico, juntamente com a economia de recursos computacionais, o nível de refinamento  $n = 1$  foi fixado para a análise subsequente do ângulo de contato fluido-fluido-parede.

#### 4.2 Análise do ângulo de contato fluido-fluido-parede e validação do modelo VOF

Antes de investigar os efeitos das condições operacionais e das propriedades físicas dos fluidos sobre o comprimento e taxa de geração das gotas, o ângulo de contato água-óleo-parede adequado foi determinado numericamente. Como mencionado anteriormente, foi utilizado um procedimento numérico de tentativa e erro, com base na equação de Young (Equação 2.6) e alguns valores de referência de propriedades de interação parede-fluido e fluido-fluido (Rapp, 2017), diversos valores de ângulo de contato foram simulados.

Para ilustrar o efeito do ângulo de contato no comportamento do fluxo no interior do microcanal, a Figura 18 mostra as distribuições simuladas da fração volumétrica de água para três ângulos de contato do sistema parede-óleo-água, ou seja,  $5^\circ$ ,  $23^\circ$  e  $37^\circ$  (Figura 18c-e), juntamente com o padrão de fluxo experimental (Figura 18a-b).



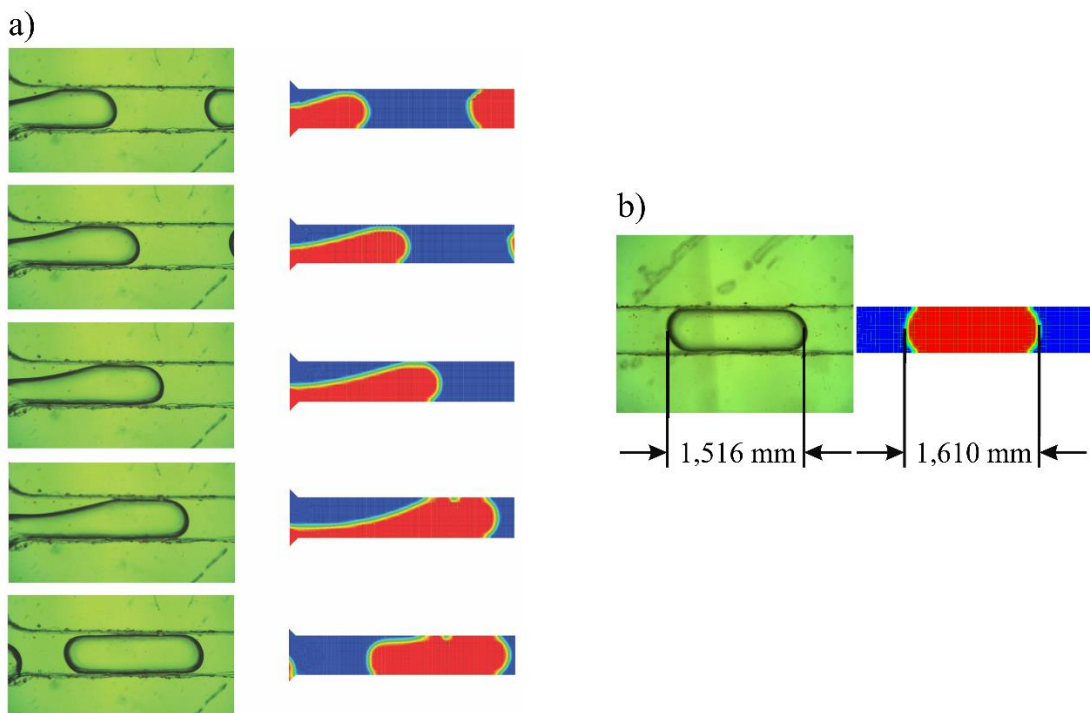
**Figura 18**– Distribuições simuladas da fração volumétrica água para três diferentes ângulos de contato, juntamente com o fluxo experimental (vazão de entrada de  $20 \mu\text{L}\cdot\text{min}^{-1}$ , para ambas as fases): a) e b) experimental, c)  $5^\circ$ ; d)  $23^\circ$ ; e)  $37^\circ$ .

A formação experimental de gotas de água em óleo e o estreitamento do “pescoço” do filme de água, exatamente antes da gota ser desconectada, podem ser vistos nas Figuras 18a e

18b, respectivamente. À medida que o ângulo de contato água-óleo-parede aumenta, sob as mesmas condições operacionais, a distância simulada de descolamento da gota diminui (Figura 18c-e). Isso pode ser atribuído a uma combinação entre as forças adesivas e coesivas que atuam no fluido mais próximo da parede, onde o decréscimo do ângulo de contato fluido-parede fornece um efeito inverso na molhabilidade.

De um modo geral, a comparação entre os resultados numéricos e os dados experimentais revela que, entre todas as simulações realizadas para a análise do ângulo de contato fluido-parede, a simulação usando um ângulo de contato de 23° (Figura 18d) melhor representou todo o processo de formação da gota, incluindo o comportamento do estreitamento do “pescoço” do filme de água observado experimentalmente.

Finalmente, para avaliar melhor o modelo VOF validado, o fenômeno experimental da formação de gotas de água em óleo foi avaliado passo a passo, próximo à região da mistura de água com óleo no microchip e foi comparado com as correspondentes distribuições de fração volumétrica de água simuladas. A avaliação qualitativa da dinâmica de formação de gotas experimental e pelo modelo validado podem ser observadas na Figura 19a, enquanto a Figura 19b mostra uma análise quantitativa por meio da comparação dos comprimentos de gota experimental e simulado.



**Figura 19** – Fenômeno experimental e simulado da formação de gotas (vazão de entrada de  $20 \mu\text{L}\cdot\text{min}^{-1}$ , para ambas as fases): a) comparação qualitativa; b) comparação quantitativa.

Foi possível identificar, por meio dos experimentos e simulações numéricas, todo o processo de formação de gotas no interior do microcanal. A fase dispersa entra na região da mistura e se desenvolve na direção axial ao longo do canal principal, preenchendo gradualmente a seção transversal do canal. Enquanto isso, o filme de água tende a ficar mais estreito até a desconexão das gotas (Figura 19a).

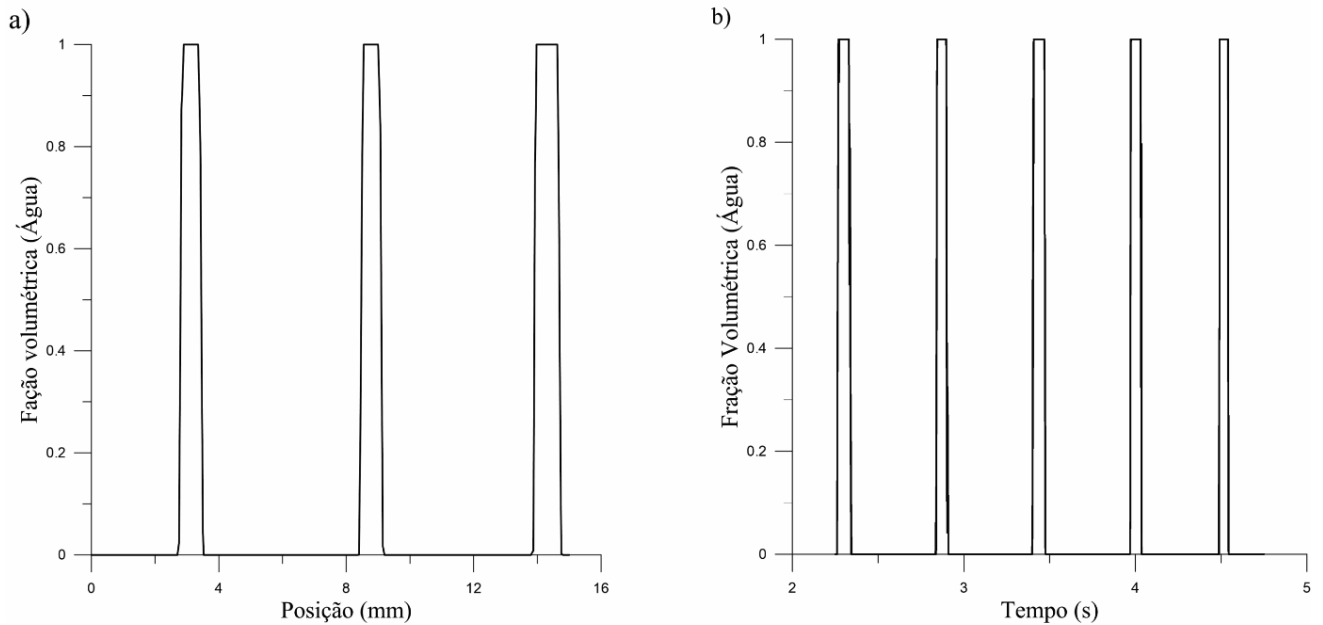
Além disso, para a validação quantitativa do modelo, seis gotas foram consideradas para o cálculo do comprimento médio, tanto experimental, quanto por meio de simulações, cujos valores correspondentes são mostrados na Figura 19b. Observa-se, também, uma concordância satisfatória, com um erro experimental relativo igual a 6,2%.

Assim, o modelo VOF validado foi utilizado para a investigação das condições operacionais e dos efeitos das propriedades do fluido no comprimento das gotas e na taxa de geração, realizados neste trabalho.

### **4.3 Análises numéricas de comprimento de gota e taxa de geração**

Como mencionado anteriormente, simulações numéricas adicionais para investigação do comportamento do escoamento, levando em consideração diferentes ângulos de entrada do dispositivo, propriedades do fluido e condições operacionais, foram realizadas com base na Tabela 2.

Para calcular o comprimento médio das gotas, uma linha de referência central foi criada ao longo do canal principal e a fração volumétrica de água foi plotada contra a posição axial. Por outro lado, para o cálculo da taxa média de geração de gotículas, um ponto de referência (“sonda”) foi posicionado no meio do canal principal para a medição da fração volumétrica de água ao longo do tempo. Para fins ilustrativos, a Figura 20 mostra as distribuições da fração volumétrica em função da posição axial do dispositivo (Figura 20a) e do tempo (Figura 20b), na Condição da simulação 10 (consulte os valores de ângulo de entrada ( $\phi$ ), velocidade da fase água ( $v_a$ ), fase óleo ( $v_o$ ) e tensão interfacial ( $\gamma$ ) na Tabela 2). Todos os resultados observados podem ser encontrados no apêndice.



**Figura 20** – Distribuições simuladas da fração do volume de água em função da posição longitudinal do dispositivo (a) e do tempo (b), utilizados para o cálculo do comprimento e geração da gota, respectivamente (Condição 10 na Tabela 2).

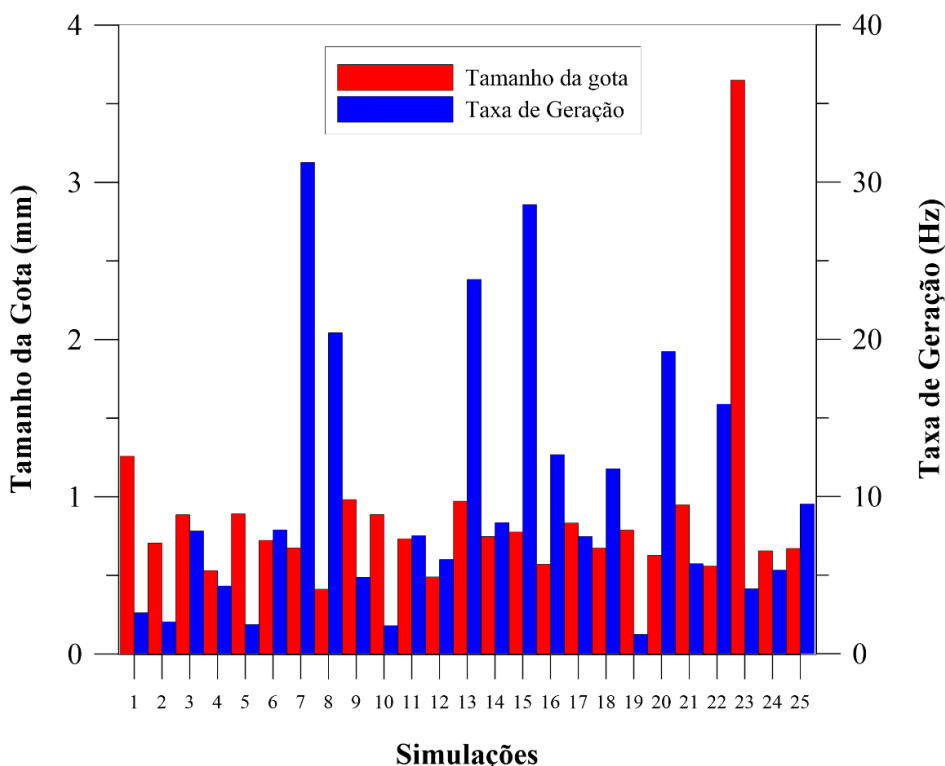
Como pode ser visto na Figura 20, cada pico da fração volumétrica de água representa uma gota de água. Portanto, a taxa de geração de gotículas pode ser medida dividindo o número de picos pela duração total do intervalo de tempo (Figura 20b). Além disso, o comprimento da gota pode ser calculado diretamente medindo a largura do pico (Figura 20a).

O mesmo procedimento foi realizado para todas as condições apresentadas na Tabela 2, cujos resultados estão representados na Figura 21.

A partir dos resultados simulados mostrados na Figura 21, duas equações foram obtidas por regressões múltiplas para quantificar os efeitos simples, de interações e quadráticos das variáveis independentes sobre o comprimento das gotas (Equação 4.1) e sobre a taxa de geração de gotas. (Equação 4.2). Em um intervalo de confiança de 95%, os coeficientes de correlação ( $R^2$ ) para as Equações 4.1 e 4.2 foram de 0,96 e 0,92, respectivamente.

$$T = 0,74 - 37,32v_o + 162,04v_a + 1,69\gamma - 6676,19v_o v_a + 1167,91v_a^2 \quad (4.1)$$

$$\zeta = 3,7 + 689,72v_o - 308,8\gamma - 4,6\phi v_o + 4,7\phi v_a + 1,6\phi\gamma + 88300,7v_o v_a - 10779,7v_a\gamma - 579,9\gamma^2 \quad (4.2)$$



**Figura 21** – Resultados simulados de tamanho de gota e taxa de geração com base nas condições mostradas na Tabela 2.

Como pode ser observado na Equação 4.1, contrariamente às observações experimentais de Liu *et al.* (2007) em um dispositivo de geometria com fluxo focalizado, o ângulo de entrada ( $\phi$ ) não afetou o comprimento da gota ( $T$ ), no caso de um microchip de geometria de fluxo cruzado. Esse fato também pode ser verificado através das simulações 6, 14, 18 e 25 na Figura 21. O comprimento da gota ( $T$ ) aumenta com o aumento da velocidade de entrada da água (termo “ $v_a$ ”), enquanto que para a velocidade do óleo (termo “ $v_o$ ”) é demonstrado um comportamento contrário, apresentando um efeito de valor negativo no comprimento da gota, diminuindo-a, o que implica que a interação entre a quantidade de movimento entre as duas fases exercem grande influência na dinâmica de geração de gota. Observações semelhantes foram descritas por Xu *et al.* (2008).

O efeito quadrático da velocidade da água (termo “ $v_a^2$ ”) também afetou positivamente o comprimento da gota. Por outro lado, o termo de interação “ $v_a v_o$ ” foi favorável à diminuição do tamanho das gotas e apresentou o maior coeficiente estimado.

Em relação à taxa de geração de gotículas ( $\zeta$  na Equação 4.2), não foi observado um efeito direto do ângulo de entrada ( $\phi$ ), mas sim efeitos positivos e negativos combinados com as velocidades da água e do óleo (termos “ $\phi v_a$ ” e “ $\phi v_o$ ”), respectivamente. O incremento de

velocidade, para as duas fases, afetou fortemente a taxa de geração de gotículas de maneira positiva (termos “ $v_o$ ” e “ $v_o v_a$ ”) (simulações 7, 13 e 15 na Figura 21).

Enquanto que o aumento da tensão interfacial aumentou levemente o comprimento das gotas, a taxa de geração das gotículas diminuiu significativamente (ver Equações 4.1 e 4.2 e simulações 5, 14 e 21 na Figura 21). Esses efeitos também foram observados experimentalmente por Piccin *et al.* (2014), que usaram surfactantes para diminuir a tensão interfacial e gerar gotas em condições que, inicialmente sem surfactantes, não geravam gotas.

Por fim, com base em uma análise adimensional e levando em consideração os efeitos significativos discutidos anteriormente, a seguinte expressão para a previsão do comprimento da gota ( $T$ ) foi aqui proposta:

$$T = 0,13 (Re_{a-o})^{0,33} (Ca_{a-o})^{0,161} \quad (4.3)$$

Todos os parâmetros na Equação 4.3 foram obtidos por meio de uma regressão não linear usando as condições de simulação na Tabela 3, juntamente com os resultados correspondentes mostrados na Figura 23. O coeficiente de correlação ( $R^2$ ) para a Equação 4.3 foi de 0,94.

A correlação proposta (Equação 4.3) foi usada para calcular o comprimento da gota sob uma vazão de entrada de  $20 \mu\text{L}\cdot\text{min}^{-1}$ , para as fases de água e óleo mineral. Vale ressaltar que, apesar dessa condição operacional ser a mesma utilizada para a validação do modelo (seção 4.2), essa condição não foi considerada para o ajuste da correlação (Tabelas 2 e 3). O correspondente erro relativo experimental da comparação do comprimento das gotículas foi de 8,2%.

## Conclusão



Como disposto no presente trabalho, foi possível aplicar com sucesso simulações numéricas usando o modelo VOF e o método de refinamento de AMR, juntamente com experimentos, para investigar o fluxo baseado em gotas dentro de um microchip de seção quadrada de geometria de fluxo cruzado (junção em T). Foi realizada uma validação do modelo VOF, tanto qualitativa, quanto quantitativamente. Os efeitos das condições operacionais, das propriedades físicas do fluido e dos fatores geométricos do dispositivo sobre o comprimento e a taxa de geração das gotas foram analisados por meio de regressões múltiplas.

O comprimento das gotículas e a taxa de geração mostraram-se fortemente dependentes das condições operacionais e das propriedades físicas do fluido, enquanto que o ângulo de entrada do dispositivo não teve efeito significativo.

Considerando os efeitos significativos da análise de regressão múltipla, uma correlação, baseada nos números adimensionais que dominam os escoamentos microfluídicos, foi proposta aqui para a previsão do comprimento da gota (T). O erro relativo experimental correspondente foi de 8,2%.

Espera-se que em trabalhos futuros possa ser investigado a influência da diminuição de tensão interfacial nas propriedades de molhabilidade fluido-parede, explorando de forma numérica a significância destes resultados na reprodução da física observada. A dinâmica de geração de gotas apresenta um grau maior de dificuldade acerca da previsibilidade da taxa de geração, devido a presença de maior quantidade de fatores de influencia identificados, demonstrando necessidade de estudos direcionados e aprofundados para melhor entendimento.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALVES, R. Estudo experimental do escoamento bifásico líquido gás em golfadas com leve mudança de direção. Dissertação (Mestrado) **Universidade Tecnológica Federal do Paraná**, Curitiba, 2015. 104p.
- AZARMANESH, M.; FARHADI, M.; AZIZIAN, P. Double emulsion formation through hierarchical flow-focusing microchannel. **Physics of Fluids**, v. 28, n. 3, 2016.
- BARET, J. C. Surfactants in droplet-based microfluidics. **Lab on a Chip**, v. 12, n. 3, p. 422–433, 2012.
- BORDBAR, A. et al. Slug flow in microchannels: Numerical simulation and applications. **Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, v. 62, p. 26–39, 2018.
- BRACKBILL, J. U.; KOTHE, D. B.; ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, v. 100, n. 2, p. 335–354, 1992.
- ÇENGEL, Y.; CIMBALA, J. **Mecânica dos Fluidos fundamentos e aplicações**. [s.l.] Mc Graw Hill, 2015.
- CHRISTOPHER, G. F.; ANNA, S. L. Microfluidic methods for generating continuous droplet streams. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 40, n. 19, 2007.
- COSTA, A. L. R.; GOMES, A.; CUNHA, R. L. Studies of droplets formation regime and actual flow rate of liquid-liquid flows in flow-focusing microfluidic devices. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 85, p. 167–175, 2017.
- DALTIN, D. **Tensoativos**. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 2011.
- DIOUF, M. M. L.; ROMERO, O. J. Numerical study of droplet formation in a y-junction microchannel. **Journal of Theoretical and Applied Mechanics (Poland)**, v. 55, n. 1, p. 317–330, 2017.
- DUARTE, L. C. et al. 3D printing of microfluidic devices with embedded sensing electrodes for generating and measuring the size of microdroplets based on contactless conductivity detection. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 251, p. 427–432, 2017.
- FAUSTINO, V. et al. Biomedical microfluidic devices by using low-cost fabrication techniques: A review. **Journal of Biomechanics**, v. 49, n. 11, p. 2280–2292, 2016.
- FONDELLI, T.; ANDREINI, A.; FACCHINI, B. Numerical simulation of dam-break problem using an adaptive meshing approach. **Energy Procedia**, v. 82, p. 309–315, 2015.
- FOX, R.; MCDONALD, A.; PRITCHARD, P. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 6<sup>o</sup> ed ed.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

- Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2006.
- GARSTECKI, P. et al. Formation of droplets and bubbles in a microfluidic T-junction - Scaling and mechanism of break-up. **Lab on a Chip**, v. 6, n. 3, p. 437–446, 2006.
- GUO, Z.; FLETCHER, D. F.; HAYNES, B. S. Numerical simulation of annular flow hydrodynamics in microchannels. **Computers and Fluids**, v. 133, p. 90–102, 2016.
- GUO, Z.; HAYNES, B. S.; FLETCHER, D. F. Simulation of microchannel flows using a 3D height function formulation for surface tension modelling. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 89, p. 122–133, 2017.
- GUPTA, R.; FLETCHER, D. F.; HAYNES, B. S. On the CFD modelling of Taylor flow in microchannels. **Chemical Engineering Science**, v. 64, n. 12, p. 2941–2950, 2009.
- JIANG, C.; CUI, S.; FENG, X. Solving the Euler and Navier-Stokes equations by the AMR-CESE method. **Computers and Fluids**, v. 54, n. 1, p. 105–117, 2012.
- JIU-SHENG, C.; JIA-HUAN, J. Droplet microfluidic technology: Mirodroplets formation and manipulation. **Fenxi Huaxue/ Chinese Journal of Analytical Chemistry**, v. 40, n. 8, p. 1293–1300, 2012.
- KASHID, M. N.; RENKEN, A.; KIWI-MINSKER, L. CFD modelling of liquid-liquid multiphase microstructured reactor: Slug flow generation. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 88, n. 3, p. 362–368, 2010.
- LI, Q.; ANGELI, P. Experimental and numerical hydrodynamic studies of ionic liquid-aqueous plug flow in small channels. **Chemical Engineering Journal**, v. 328, n. July, p. 717–736, 2017.
- LIU, K. et al. Injection angle dependence in flow focusing based droplet formation. **2007 1st International Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering, ICBBE**, n. Cv, p. 1121–1124, 2007.
- LO, R. C. Chemical Engineering & Process Techniques Application of Microfluidics in Chemical Engineering. **Chem Eng Process Tech**, v. 1, p. 1002, 2013.
- LOBO-JÚNIOR, E. O. et al. Simple, rapid and, cost-effective fabrication of PDMS electrophoresis microchips using poly(vinyl acetate) as photoresist master. **Electrophoresis**, v. 38, n. 2, p. 250–257, 2017.
- MALISKA, C. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2.ed ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.
- MONTEIL, H. et al. A review on efficiency and cost effectiveness of electro- and bio-electro-Fenton processes: Application to the treatment of pharmaceutical pollutants in water. **Chemical Engineering Journal**, 2018.
- NAZARI, M. et al. Different stages of liquid film growth in a microchannel: Two-phase lattice boltzmann study. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 35, n. 3, p. 977–

994, 2018.

NILAND, J. **O que é o salto hidráulico, o fenômeno observado por Da Vinci que só agora a ciência conseguiu explicar.** Disponível em: <<https://www.bbc.com/portuguese/geral-45122542>>. Acesso em: 18 abr. 2019.

NISISAKO, T.; TORII, T.; HIGUCHI, T. Novel microreactors for functional polymer beads. **Chemical Engineering Journal**, v. 101, n. 1–3, p. 23–29, 2004.

PARK, K. H.; CHINAUD, M.; ANGELI, P. Transition from stratified to non-stratified oil-water flows using a bluff body. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 76, p. 175–184, 2016.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**, New York: Hemisphere Publishing Corp, 1980.

PICCIN, E. et al. Sensors and Actuators B: Chemical Generation of water-in-oil and oil-in-water microdroplets in polyester-toner microfluidic devices. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 196, n. 0925–4005, p. 525–531, 2014.

PRADO, R. C.; BORGES, E. R. MICROBIOREACTORS AS ENGINEERING TOOLS FOR BIOPROCESS DEVELOPMENT. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 35, n. 04, p. 1163–1182, 2018.

QIAN, D.; LAWAL, A. Numerical study on gas and liquid slugs for Taylor flow in a T-junction microchannel. **Chemical Engineering Science**, v. 61, n. 23, p. 7609–7625, 2006.

RAPP, B. **Microfluidics: Modelling, Mechanics and Mathematics**. 1st editio ed. [s.l.] Elsevier, 2017.

ROSENGARTEN, G.; HARVIE, D. J. E.; COOPER-WHITE, J. Contact angle effects on microdroplet deformation using CFD. **Applied Mathematical Modelling**, v. 30, n. 10, p. 1033–1042, 2006.

SANTOS, D. A. **ESTUDO EXPERIMENTAL E NUMÉRICO DA DINÂMICA DE PARTÍCULAS GRANULARES EM UM TAMBOR ROTATÓRIO**. [s.l.] UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA, 2015.

SCHIANTI, J. N.; SEABRA, P. D. A. C. **Sistemas microfluídicos aplicados na produção de micro e nanopartículas**. [s.l.] Universidade de São Paulo, 2012.

SCHMIDMAYER, K.; PETITPAS, F.; DANIEL, E. Adaptive mesh refinement algorithm based on dual trees for cells and faces for multiphase compressible flows. **Journal of Computational Physics**, n. March, p. Under revisions, 2018.

SHANG, L.; CHENG, Y.; ZHAO, Y. Emerging Droplet Microfluidics. **Chemical Reviews**, v. 117, n. 12, p. 7964–8040, 2017.

SUSANTI et al. Modelling studies of enantioselective extraction of an amino acid derivative in slug flow capillary microreactors. **Chemical Engineering Journal**, v. 354, n. April,

p. 378–392, 2018.

TROFA, M. et al. CFD-DEM simulations of particulate fouling in microchannels. **Chemical Engineering Journal**, v. 358, p. 91–100, 2019.

TRYGGVASON, G.; LU, J. DIRECT NUMERICAL SIMULATIONS OF GAS–LIQUID MULTIPHASE FLOWS Accurately. p. 313–338, 2009.

VERSTEEG, H.; MALALASEKERA, W. **Conservation laws of fluid motion and boundary conditions**. [s.l: s.n.]. v. M

WHITESIDES, G. M. The origins and the future of microfluidics. **Nature**, v. 442, n. 7101, p. 368–73, 2006.

XU, J. H. et al. Correlations of droplet formation in T-junction microfluidic devices: From squeezing to dripping. **Microfluidics and Nanofluidics**, v. 5, n. 6, p. 711–717, 2008.

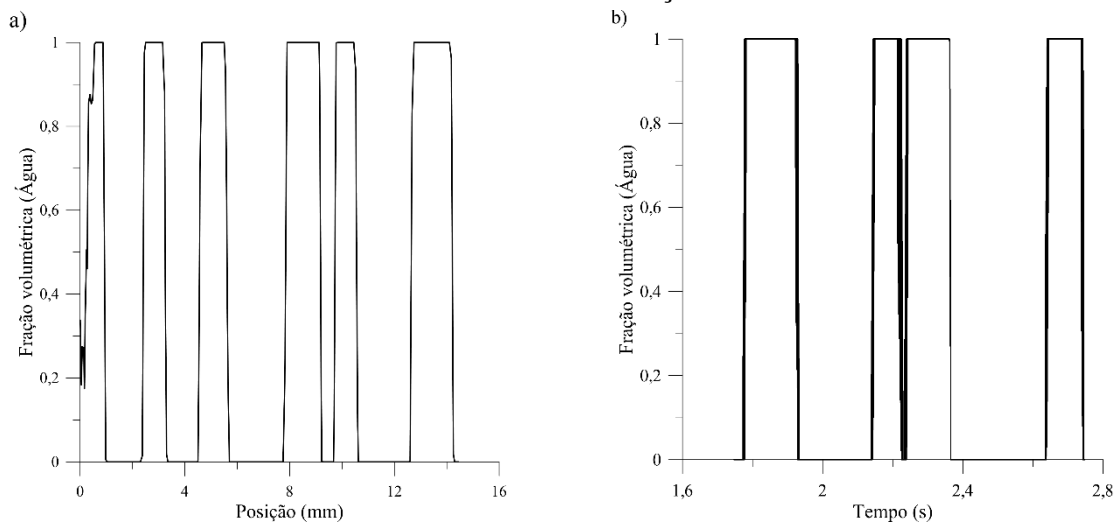
YU, Z.; FAN, L. S. An interaction potential based lattice Boltzmann method with adaptive mesh refinement (AMR) for two-phase flow simulation. **Journal of Computational Physics**, v. 228, n. 17, p. 6456–6478, 2009.

ZHANG, Q.; XU, J. J.; CHEN, H. Y. Glucose microfluidic biosensors based on immobilizing glucose oxidase in poly(dimethylsiloxane) electrophoretic microchips. **Journal of Chromatography A**, v. 1135, n. 1, p. 122–126, 2006.

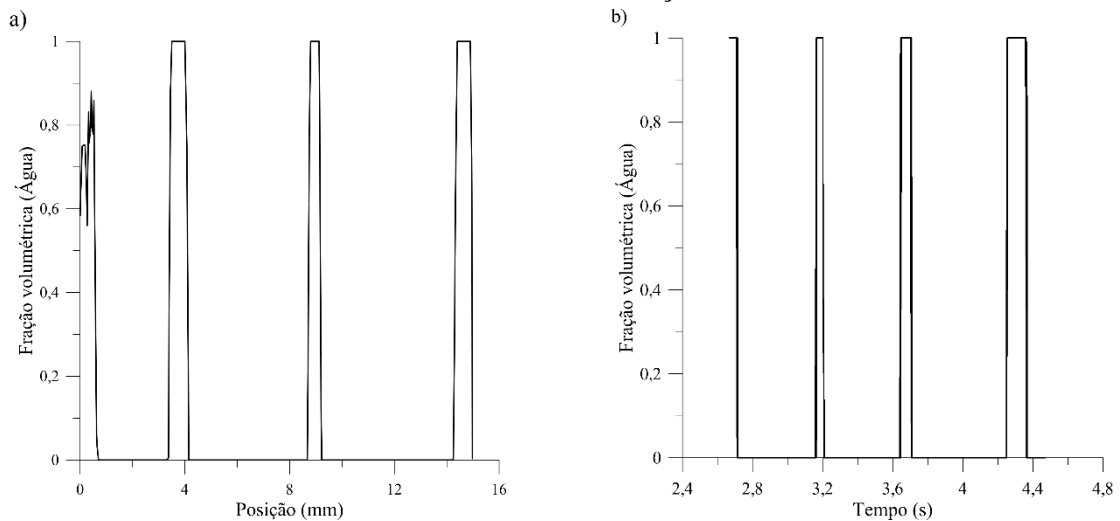
# APÊNDICE

Os resultados dos gráficos gerados para analisar o comprimento de gotas ao longo do microcanal e da taxa de geração de gotas em função do tempo, correspondentes às condições das simulações resumidas na Tabela 2, serão dispostos aqui e identificados. Em todas as figuras, as representadas pela letra a) são os gráficos de distribuição de fração volumétrica ao longo do microcanal; as figuras representadas pela letra b) são os gráficos de distribuição de fração volumétrica ao longo do tempo.

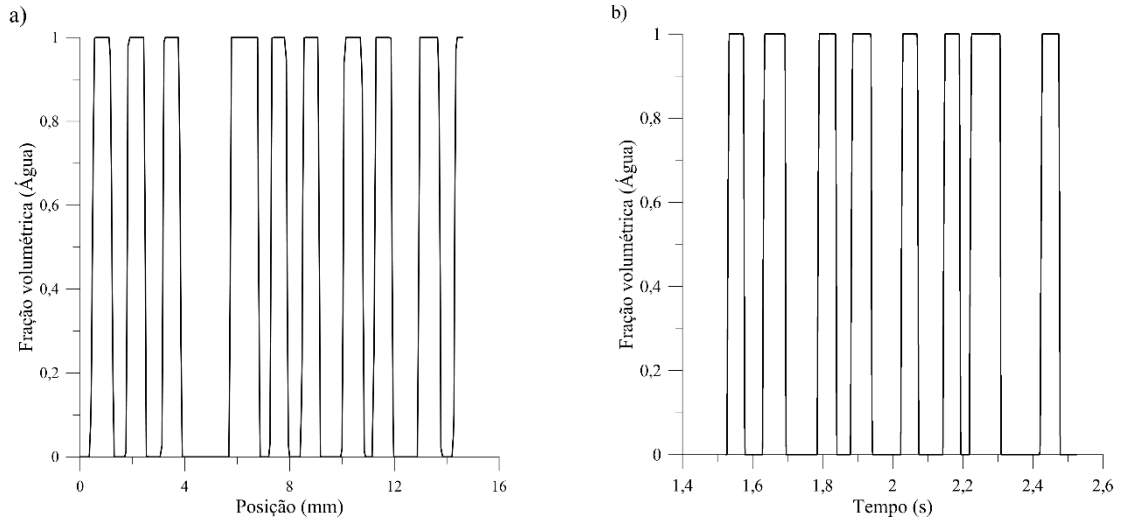
## Resultados da simulação 1



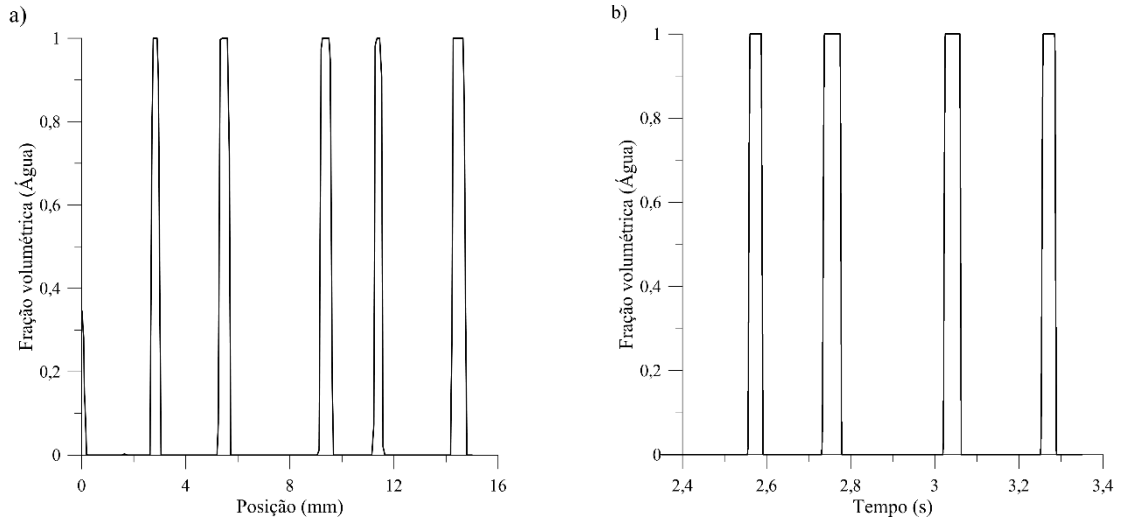
## Resultados da simulação 2



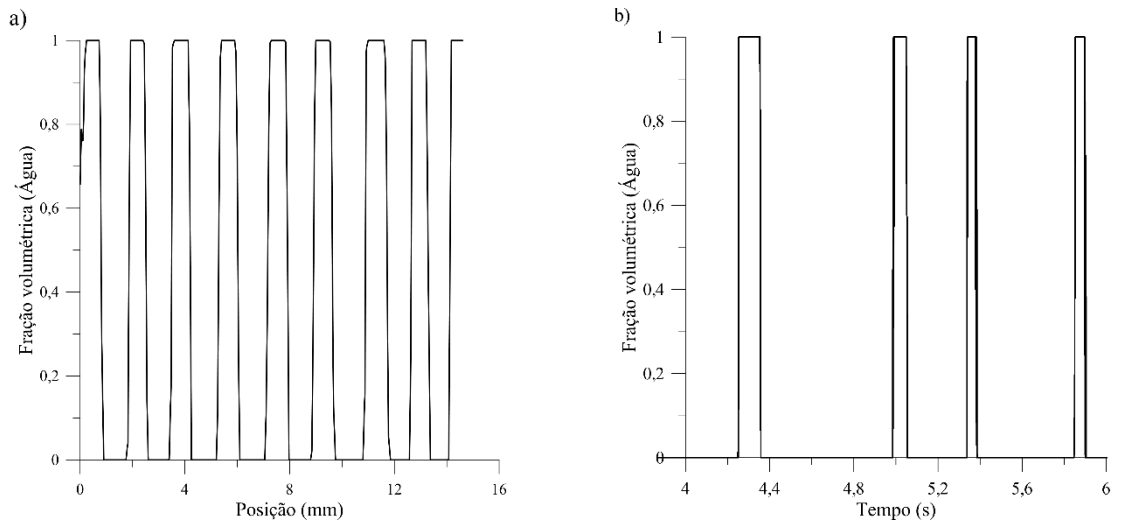
Resultados da simulação 3



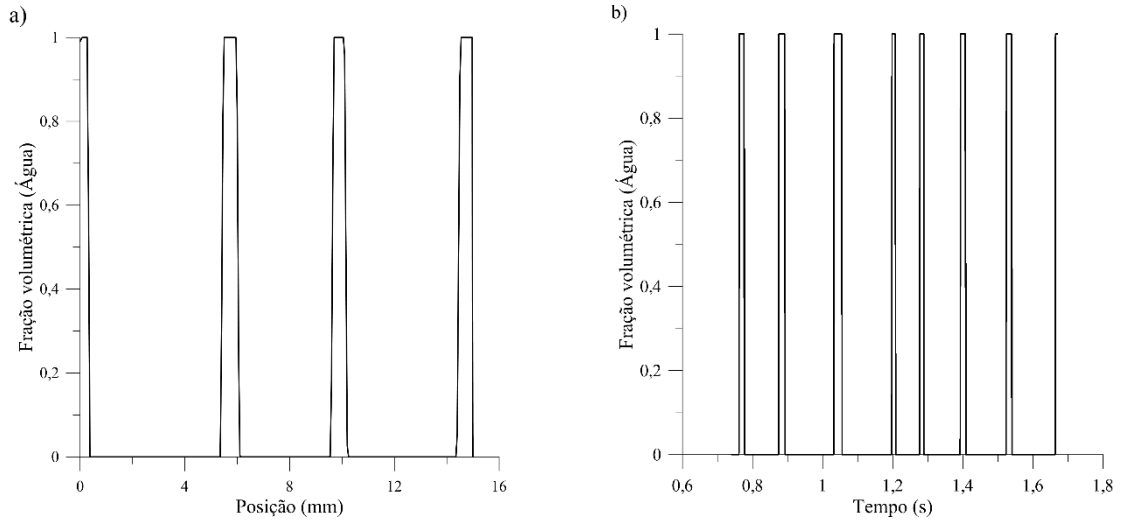
Resultados da simulação 4



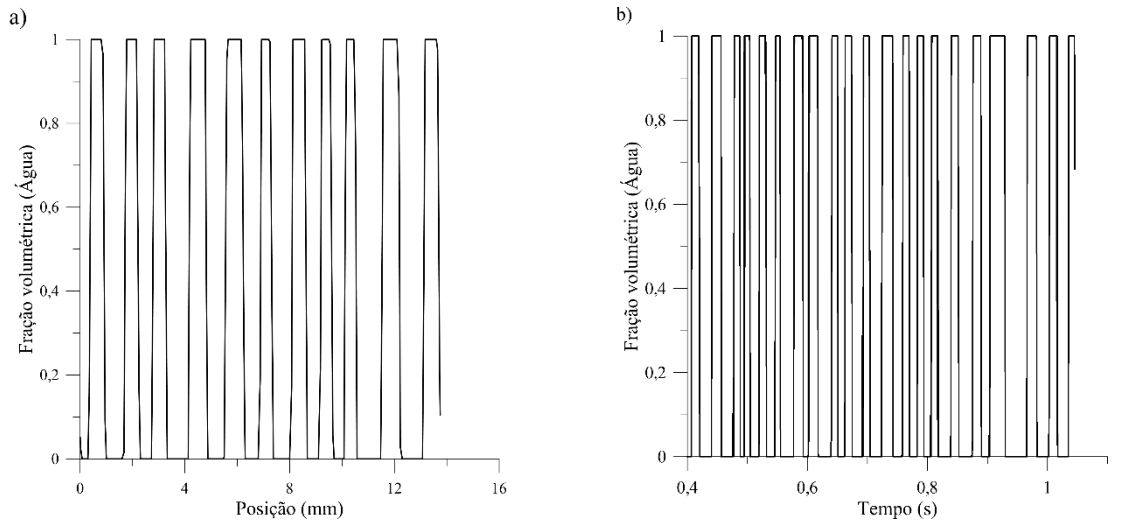
Resultados da simulação 5



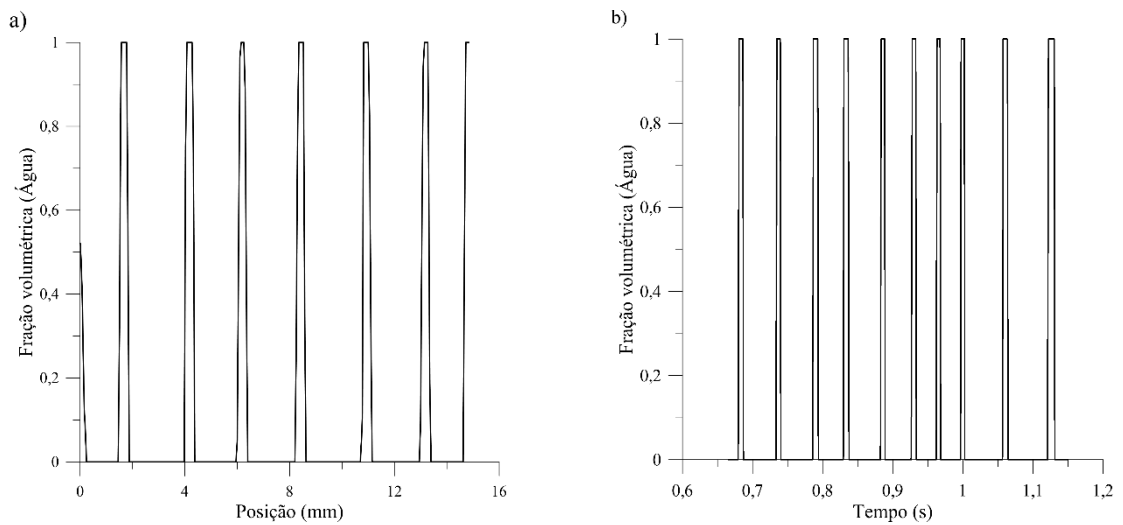
Resultados da simulação 6



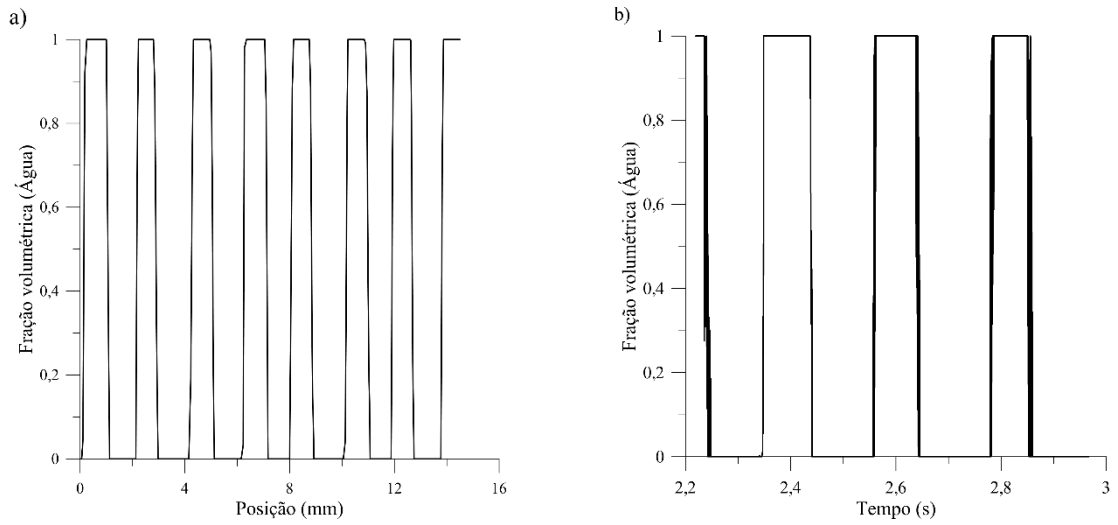
Resultados da simulação 7



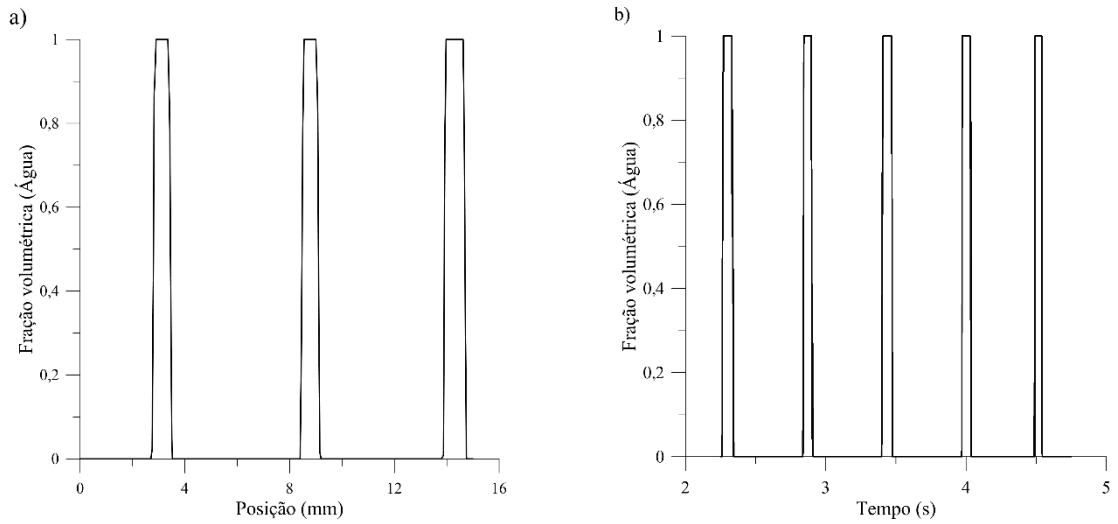
Resultados da simulação 8



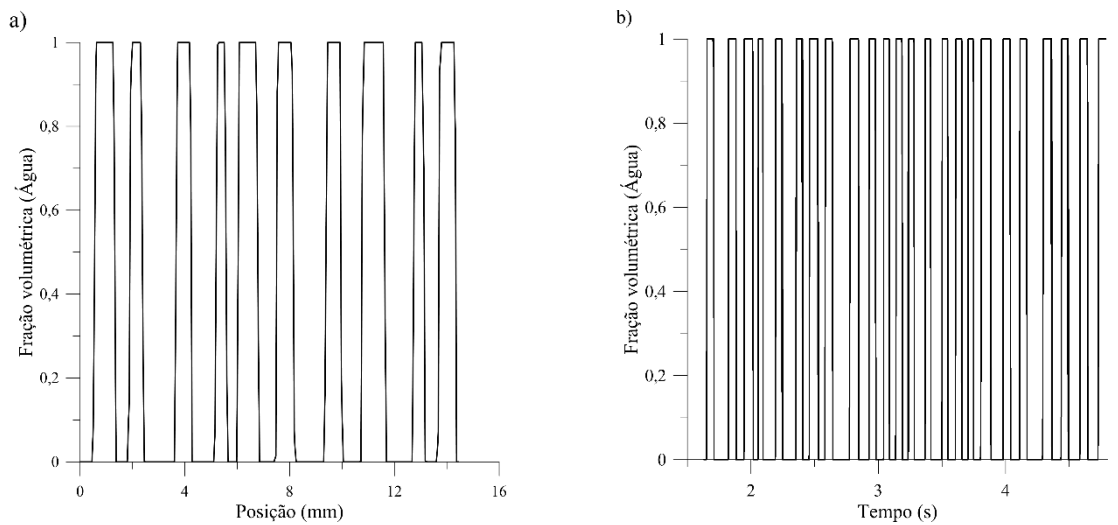
Resultados da simulação 9



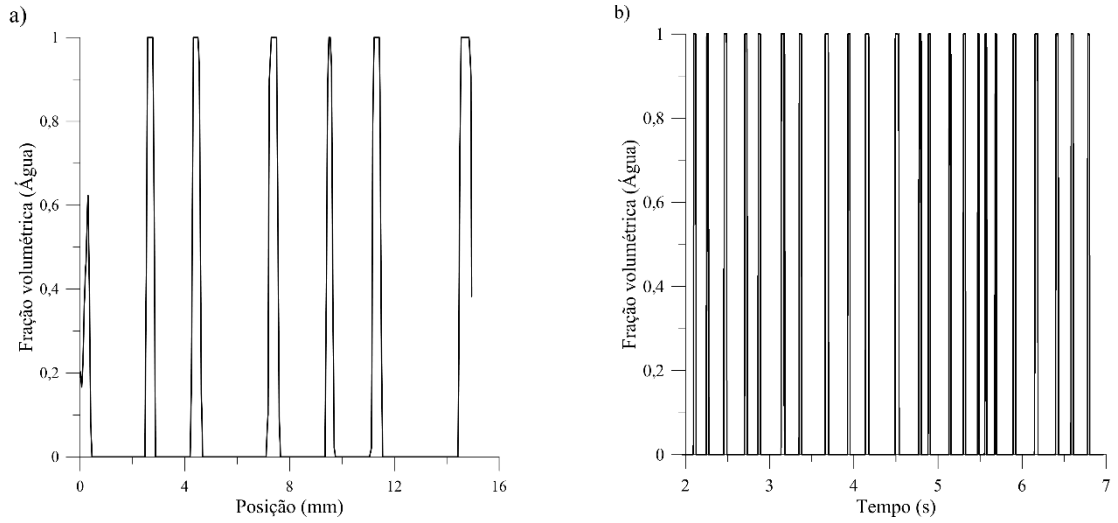
Resultados da simulação 10



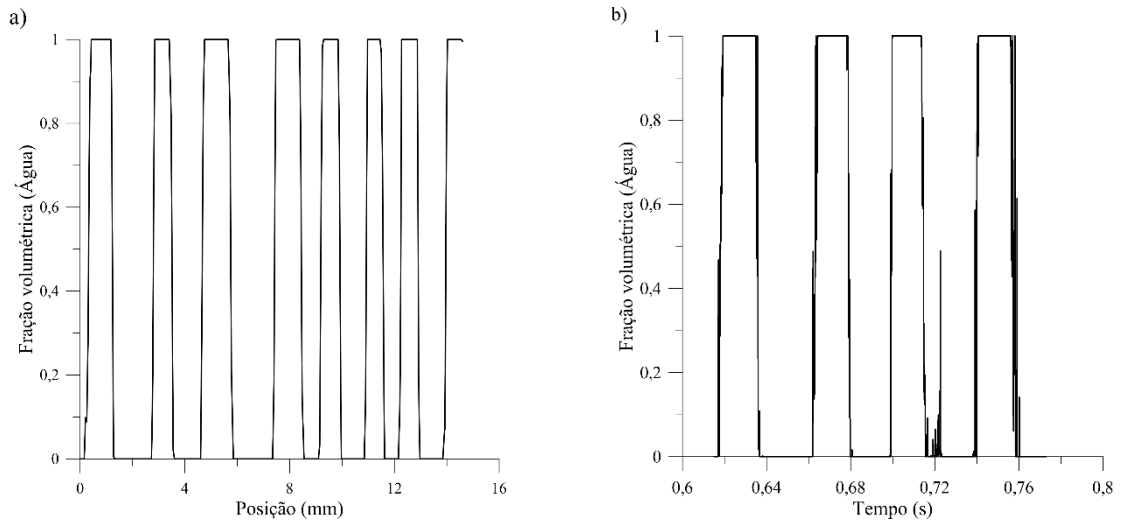
Resultados da simulação 11



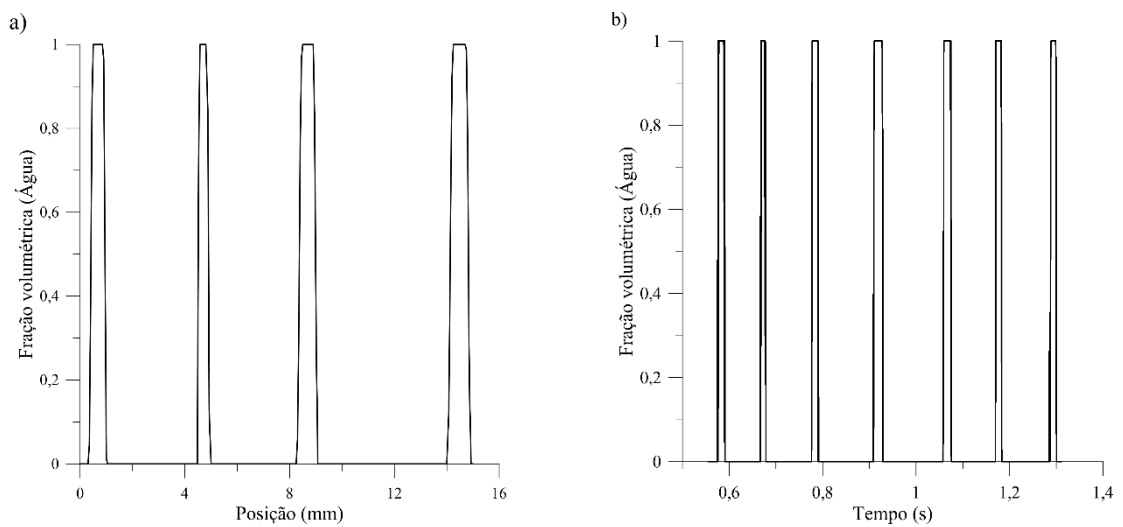
Resultados da simulação 12



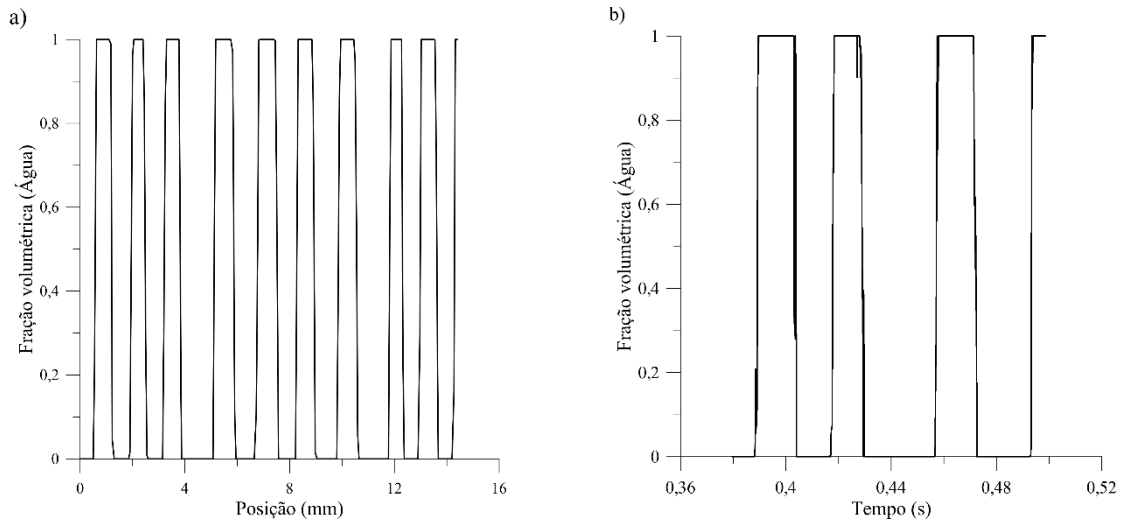
Resultados da simulação 13



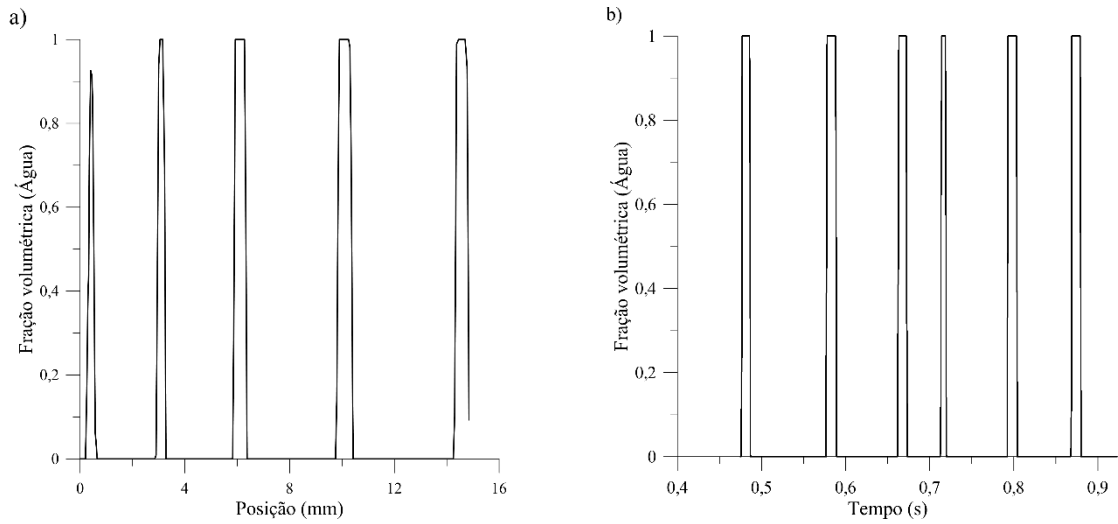
Resultados da simulação 14



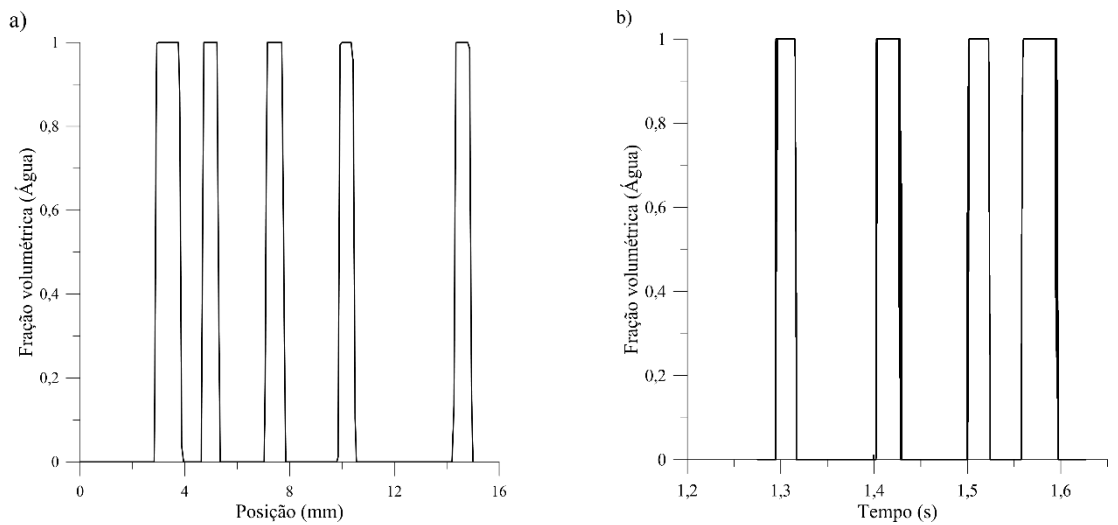
Resultados da simulação 15



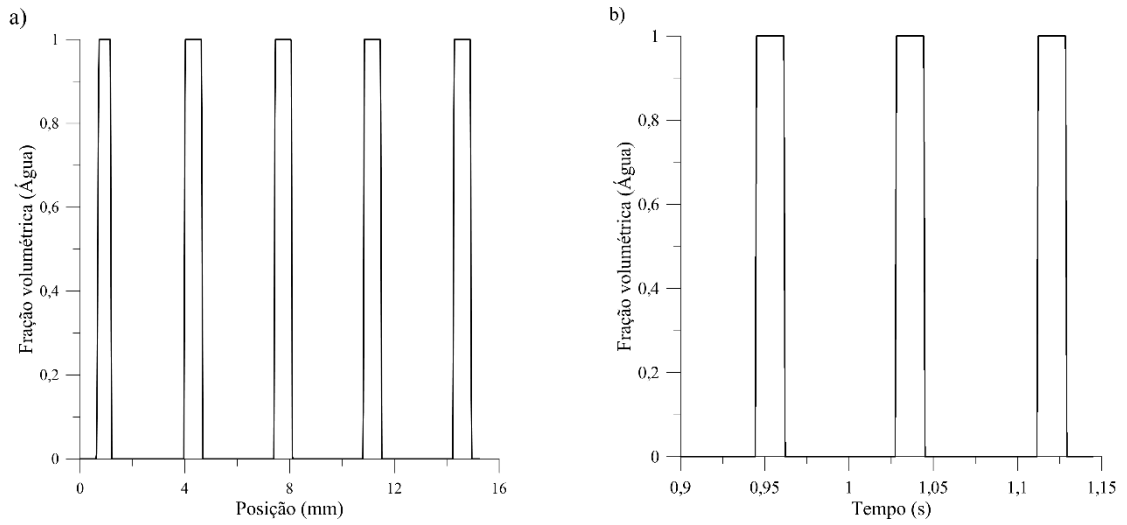
Resultados da simulação 16



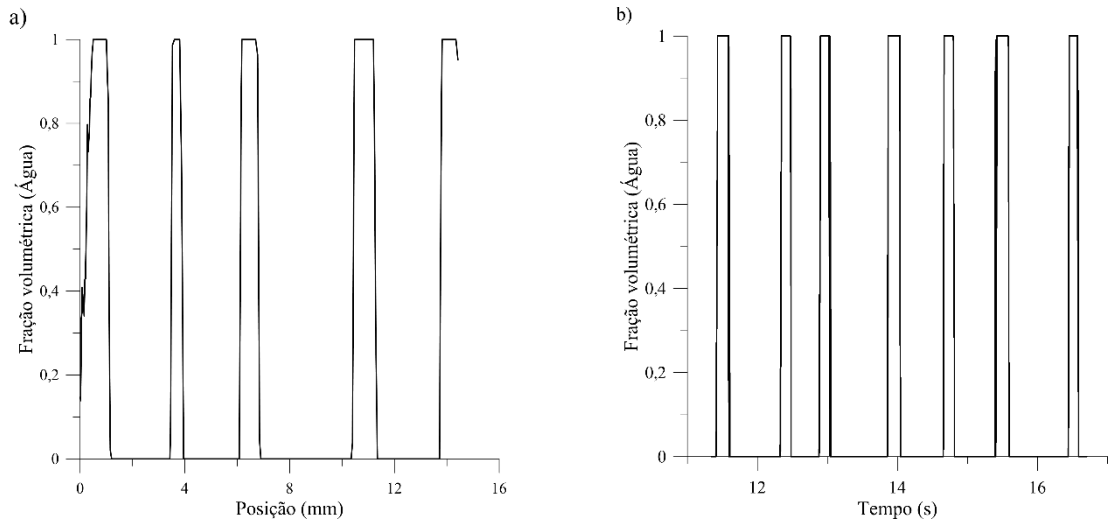
Resultados da simulação 17



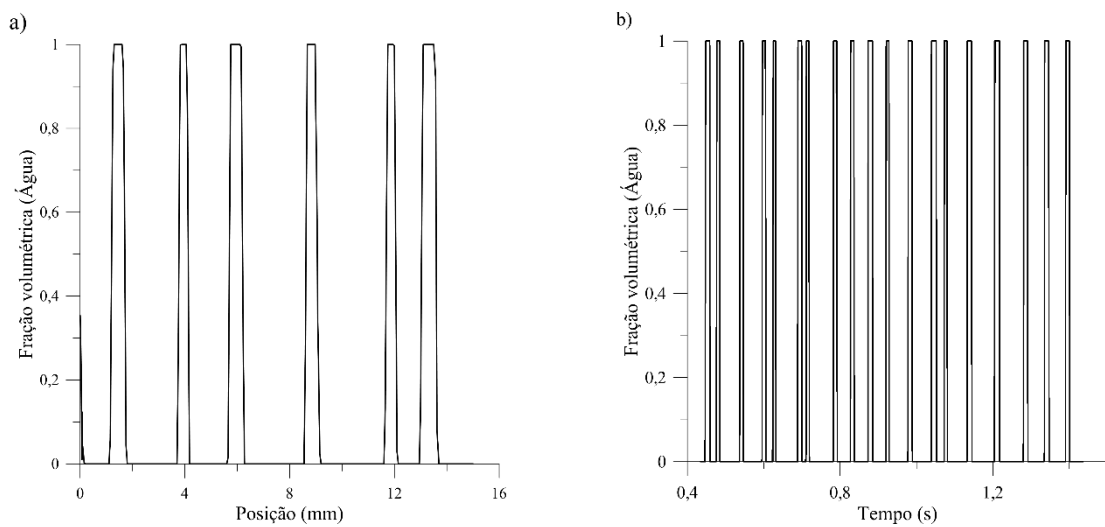
Resultados da simulação 18



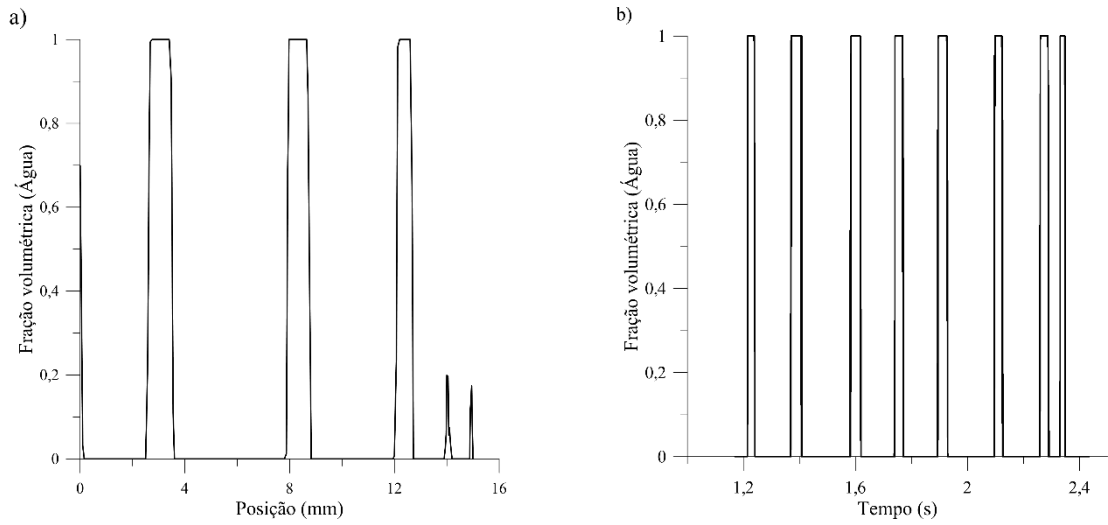
Resultados da simulação 19



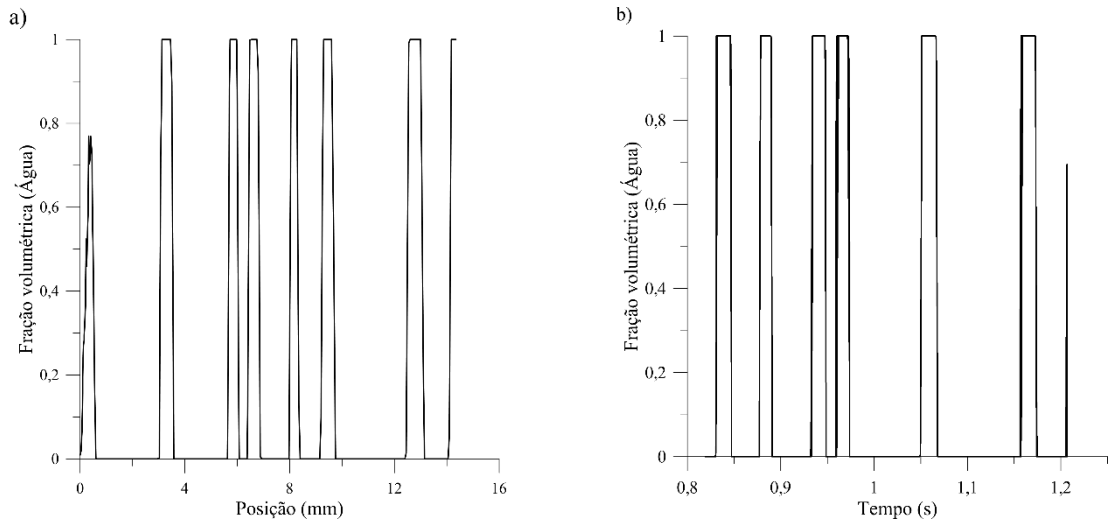
Resultados da simulação 20



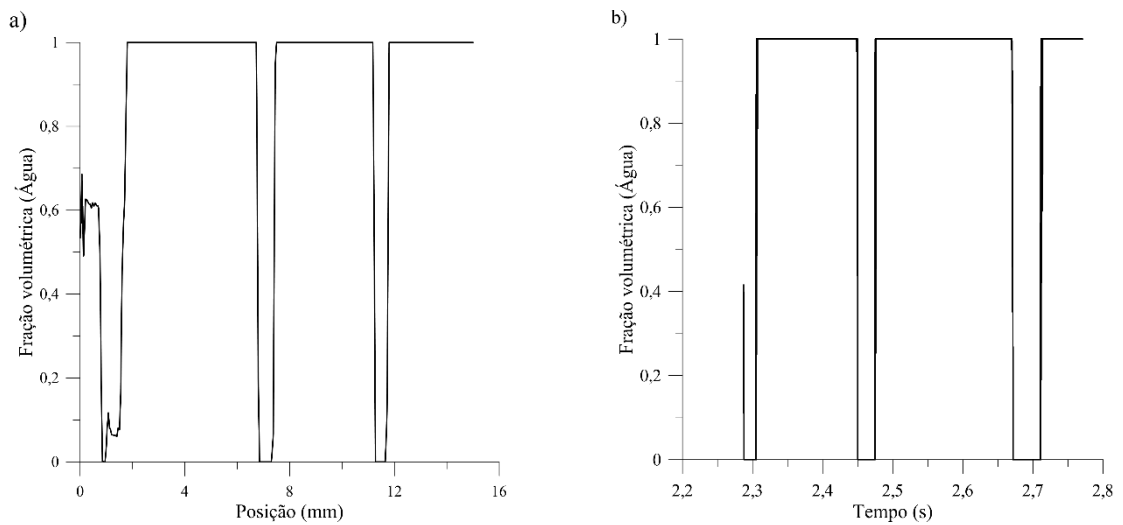
Resultados da simulação 21



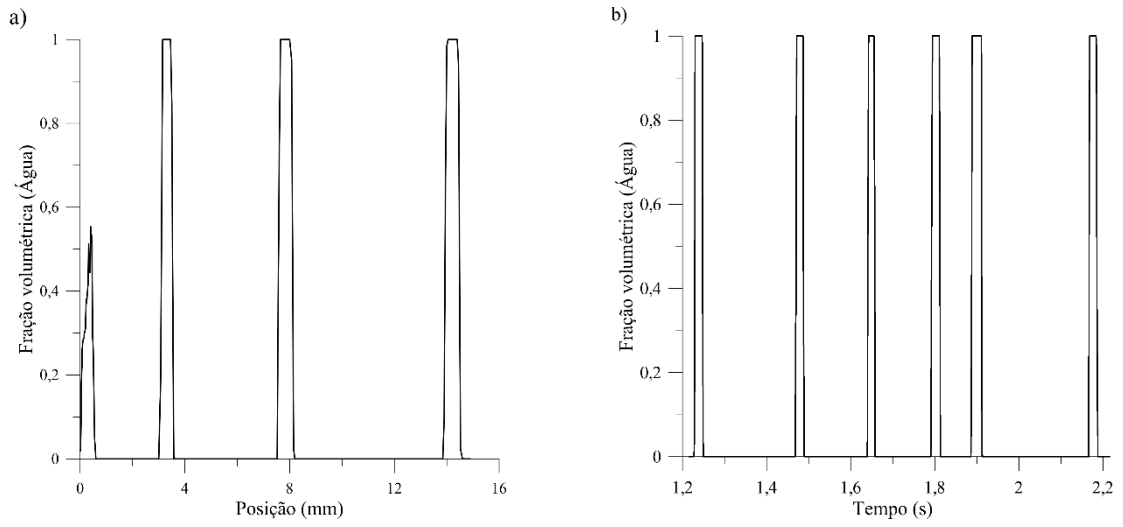
Resultados da simulação 22



Resultados da simulação 23



Resultados da simulação 24



Resultados da simulação 25

