

TÍTULO

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE GOTAS EM MICROCANAIS
Pietro Oliveira Machado (IC), Ana Lúcia F. de Lima e Silva (PQ)
Universidade Federal de Itajubá

Palavras-chave: Microfluidica, escoamento bifásico, junção em T, COMSOL *Multyphysics* , método do campo de fase.

Introdução

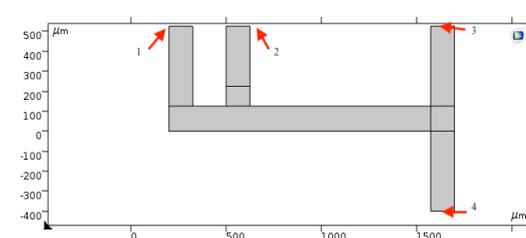
A microfluidica é uma área do conhecimento que possui aplicações crescentes em diversos ramos, como engenharia, química e medicina. Devido à complexidade da realização de estudos experimentais, as simulações numéricas facilitam a análise de casos, como os escoamentos bifásicos, que foram a temática do presente estudo. A compreensão de escoamentos bifásicos em microescala proporciona, por exemplo, melhorar o transporte de massa presente no processo de síntese de medicamentos, produtos químicos em geral e em aplicações de refrigeração de dispositivos eletrônicos em microdissipadores de calor, ect.

Utilizando alguns estudos disponíveis na literatura, foi adquirido o conhecimento necessário para iniciar a pesquisa. Link et al. (2004) [1] estudaram experimentalmente a formação e o rompimento de gotas de água em uma fase contínua de cetano. Lei et al. (2022) [2] também realizaram experimentos analisando o rompimento de gotas, utilizando uma fase dispersa de óleo de silicone e uma fase contínua de água destilada. Além dos estudos experimentais, foram utilizados estudos numéricos como base para essa pesquisa. Malaguera (2018) [3] utilizou o software *OpenFOAM* para compreender o rompimento de bolhas de Taylor, enquanto Coelho e Romero (2016) [4] usaram o *Ansys Fluent* para analisar o comportamento de gotas em microescala. Além dos citados, foram usados outros artigos e publicações para compreender o campo da microfluídica.

Durante o estudo, foi analisado o comportamento de uma gota de fluido escoando por um canal, desde sua formação até o processo de rompimento. A formação da gota acontece no início do canal principal, onde as entradas de fluido (1 e 2) se conectam, formando uma gota, devido a imiscibilidade dos fluidos. Após a formação da gota, seu desenvolvimento acontece ao longo do canal principal, permitindo seu alongamento. No final do canal principal, se encontra uma junção em T, que é caracterizada por dois canais secundários perpendiculares ao primeiro canal, com saída para os

fluidos (3 e 4).

Figura 1 - Geometria usada no estudo



Fonte: Autor

Quando o escoamento passa pela junção em T, existem duas possibilidades: o rompimento da gota em gotas menores ou o não rompimento da gota onde a gota segue um dos braços da junção em T em direção à saída. Foram estudados os parâmetros responsáveis pelo rompimento da gota, como a velocidade de entrada das fases no escoamento e comprimento do canal principal.

Metodologia

Inicialmente foi realizada uma revisão bibliográfica para obter melhor compreensão da temática do estudo. Estudando artigos e publicações, obteve-se informações sobre o comportamento do escoamento. Em seguida, foi estudado o funcionamento do COMSOL *Multiphysics*, o *software* usado neste estudo.

No domínio online do *software*, são disponibilizados os manuais de instrução referentes a cada módulo de estudo disponível. Foi utilizado o módulo *Microfluidics* [5] e o manual do usuário [6], para consultar os comandos e instruções de utilização do programa.

Com algumas simulações já registradas e validadas, foram adquiridos os resultados esperados, com a intenção de compreender o funcionamento e o significado matemático e físico dos resultados.

Com o entendimento do programa, iniciaram-se as simulações independentes. Utilizando a metodologia para rastrear e acompanhar o movimento da interface entre os fluidos. Foram realizados testes para obter

resultados e compará-los com a literatura, garantindo a precisão do programa e das equações utilizadas. Nos testes e nas simulações, o programa resolve as equações de Navier-Stokes e da continuidade para obter os dados relevantes para as soluções. As equações são resolvidas para cada um dos elementos da malha criada pelo programa. Essa malha, cobre todo o domínio do problema, possuindo refinamento local em pontos relevantes, como as paredes dos canais principal e secundários. As equações de Navier-Stokes e da Continuidade assumem as seguintes formas:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] + \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_{st} + \mathbf{F}_{ext}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

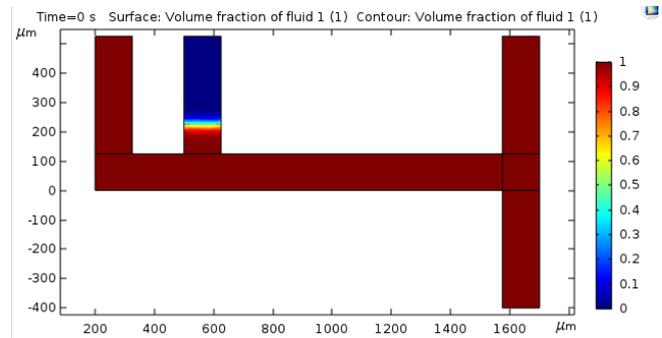
Resultados e discussão

A geometria utilizada foi construída com base no vídeo publicado no canal *Learn with SAI* (7). As entradas possuem largura de 125 μm e comprimento de 400 μm . O canal principal possui comprimento de 1500 μm , enquanto os canais secundários possuem comprimento de 400 μm , e todos possuem largura igual 125 μm . A geometria utilizada pelo autor do vídeo, possui função de gerar uma única gota que escoo pelo canal principal. Para este estudo, foi adaptada para gerar um trem de gotas que escoam em direção a uma junção em T.

Utilizando um computador fornecido pela universidade, com processador Intel® Core™ i7-2600 CPU @ 3.400 GHz, com 8,00 GB de memória RAM, foram utilizadas velocidades de entrada de 0,015 m/s para a fase contínua e 1×10^{-3} m/s para a fase dispersa, entretanto, devido a diferença muito elevada, o escoamento não era capaz de gerar as gotas necessárias. Fixando a velocidade de entrada da fase contínua e elevando a velocidade de entrada da fase dispersa, foi encontrado o valor inicial de formação de gotas de 9×10^{-3} m/s. Entretanto, a geometria não permitia as gotas de atingirem a velocidade ideal para o rompimento na junção em T, então o canal principal foi aumentado para 1700 μm . Utilizando a largura da entrada para o cálculo do número de Reynolds, temos que a fase contínua possui $Re = 2,01$ e a fase dispersa 0,105.

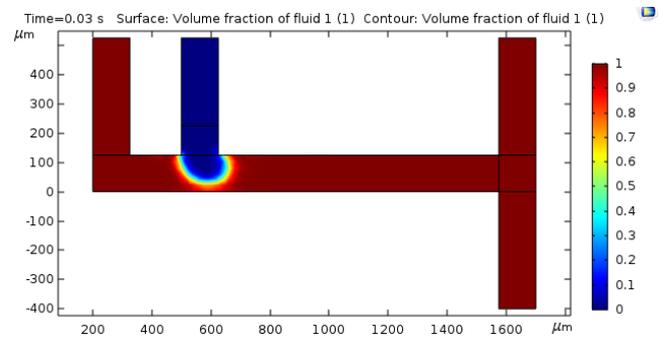
Durante o processo de formação da gota, houve obstrução completa do canal principal, devido ao baixo refinamento da malha nas proximidades da parede do escoamento, como mostrado na Fig. 3. Além disso, o baixo refinamento é responsável pelo não rompimento das gotas, entretanto estará presente no relatório final.

Figura 2 – Simulação em $t=0$



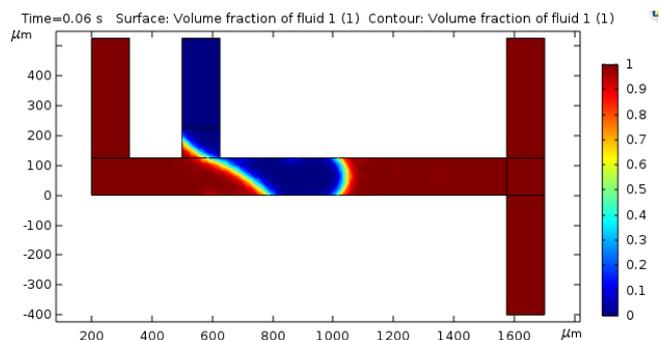
Fonte: Autor

Figura 3 – Processo de formação da gota antes da obstrução do canal principal



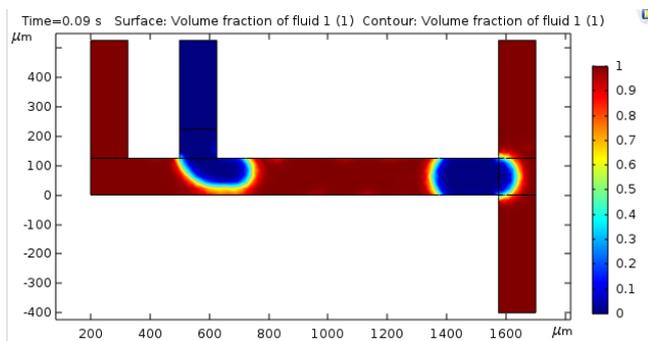
Fonte: Autor

Figura 4 – Processo de formação após a obstrução do canal principal



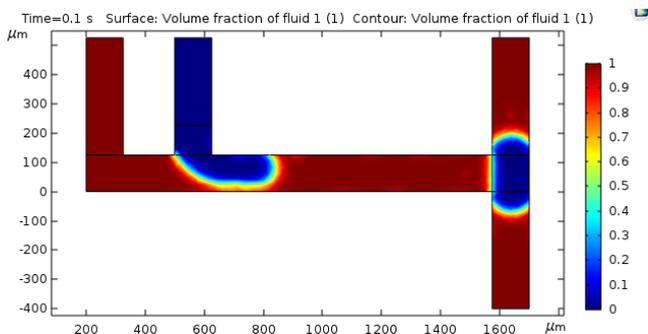
Fonte: Autor

Figura 5 - Gota em desenvolvimento canal principal



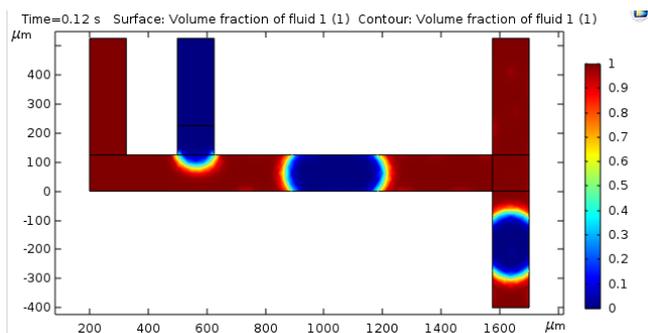
Fonte: Autor

Figura 6 - Gota chegando na junção em T e não sofrendo rompimento



Fonte: Autor

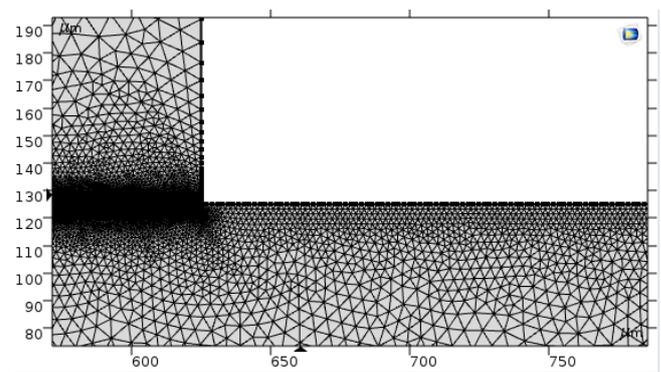
Figura 7 - Gota se direcionando para a saída inferior sem sofrer rompimento



Fonte: Autor

Nota-se que a gota simulada se encontra pouco otimizada, com a interface muito espessa e apresenta contato com as paredes do escoamento. Mesmo com o refinamento local nas paredes do escoamento, uma malha triangular com 80494 elementos, como mostra a Fig. 5, acredita-se que seja necessário maior refinamento para melhorar as condições do escoamento.

Figura 8 - Malha com refinamento local nas proximidades das paredes



Fonte: Autor

Além disso, o rompimento das gotas não foi alcançado, o que pode ser atribuído a falta de uma malha que acompanha a interface das gotas, uma malha adaptativa.

Conclusões

- O rompimento das gotas não foi alcançado. Acredita-se que a causa é associada ao refinamento local da malha nas paredes.
- O estudo proporcionou aprendizado intenso na construção de textos científicos e utilização do *software* COMSOL;
- Necessita-se de melhor refinamento da malha para atingir resultados mais condizentes com a literatura.

Agradecimentos

Agradeço à minha família, pelo grande incentivo ao estudo desde a infância. Agradeço a meus pais, por me proporcionarem as oportunidades de chegar onde cheguei. Agradeço a Universidade Federal de Itajubá, por me trazer o conhecimento para realizar o presente estudo, e agradeço a CNPq pelo auxílio financeiro durante toda a realização deste estudo.

Referências

1. D. R. Link, S. L. Anna, D. A. Weitz, H. A. Stone. Geometrically mediated breakup of drops in microfluidic devices. The American Physics Society, Estados Unidos, v. 92, n. 5, p. 1 – 4, fevereiro 2004.

Disponível em:
<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/14995311/>

micrometros
Ou comprimento da entrada: 400 micrometros

2. L. Lei, Y. Zhao, J. An, B. Zhang, J. Zhang. Breakup dynamics of droplets in symmetric Y-junction microchannels. *Applied Sciences.*, v. 12, n. 4011, p. 1- 10, abril 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/app12084011>
3. A. E. Malaguera M. Numerical study of the dynamics of a droplet in a microchannel with T junction using OpenFOAM, Brasil, 2018. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009250918307978>
4. J. K. Coelho, O. J. Romero. Formação e quebra de gotas em uma geometria T-Junction. *Revista Iberoamericana de Ingeniería Mecánica, Espanha*, v. 20, n. 2, p. 91 – 104, junho 2016. Disponível em: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=5749894>
5. *Microfluidics Module: User's Guide*. Disponível em: <https://doc.comsol.com/5.3/doc/com.comsol.help.mfl/MicrofluidicsModuleUsersGuide.pdf>
6. *Material Library: User's guide*. Disponível em: <https://doc.comsol.com/6.1/doc/com.comsol.help.matl/MaterialLibraryUsersGuide.pdf>
7. Lern with SAI, COMSOL Tutorial 3| simulation of droplet generation in a T-junction microchannel | Two Phase Flow. Disponível em: <https://youtu.be/AQ2gH55nxPQ?si=jFRMYcry3CL5aL0w>

Número de elementos da malha: 80494 elementos
Elemento triangular, Solver estacionário e time-dependent, regime de escoamento laminar.

Informações para cálculo do número de Reynolds:

Fase contínua:

Massa específica: 1000 kg/m³

Viscosidade dinâmica: 1.24x10⁻³ Pa.s

Comprimento relativo: largura da entrada 125 micrometros

Velocidade de entrada: 0.02 m/s

Fase dispersa:

Velocidade de entrada: 9x10⁻³ m/s

Massa específica: 750 kg/m³

Viscosidade dinâmica: 8x10⁻³ Pa.s

Comprimento relativo: largura da entrada: 125