

APLICAÇÃO DO MÉTODO CAMPO DE FASE NO ESTUDO NUMÉRICO DO ESCOAMENTO TIPO *SLUG* EM MICROCANAIS COM BIFURCAÇÕES UTILIZANDO COMSOL

Rian Wellisson da Silva (IC)¹, Ana Lúcia Fernandes de Lima E Silva (PQ)¹

¹Universidade Federal de Itajubá.

Palavras-chave: escoamentos multifásicos. Junção em Y. Simulações numéricas.

Introdução

O estudo de escoamentos multifásicos em elementos microfluidicos tem crescido muito com o passar dos anos devido ao fato de estar presente em diversas aplicações como por exemplo condensadores, evaporadores, entre outros, nos mais diversos ramos, medicina, farmácia, indústria petroquímica, etc. No presente trabalho o estudo teve um foco nas junções de tipo Y e no escoamento bifásico tipo *slug* ou escoamento de Taylor que consiste basicamente no escoamento de uma bolha/gota (fase dispersa) através de um outro fluido (fase continua). Para a realização da análise deste escoamento foi utilizado do método do Campo de Fase implementado no software comercial COMSOL *Multiphysics* que é baseado em Elementos Finitos. Um total de 7 casos foram simulados com diferentes parâmetros de velocidade e comprimento de gota e os resultados obtidos foram comparados com os dados da literatura.

Metodologia

Para o estudo deste problema bifásico o fluido foi considerado newtoniano e em cada fase as propriedades físicas massa específica e viscosidade são constantes. As equações de Navier-Stokes como apresentada por White (2011) foram resolvidas para um escoamento bidimensional transiente como apresentada na equação 1.

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{V}) \right) = -\nabla p + \mu (\nabla^2 \mathbf{V}) + \mathbf{F}_{TS} \quad (1)$$

Para a localização da interface entre os fluidos utiliza-se a variável Φ denominada variável campo de fase que é definida como:

$$\begin{cases} \text{Fase continua} \Rightarrow \Phi = -1 \\ \text{Interface} \Rightarrow -1 < \Phi < 1 \\ \text{Fase continua} \Rightarrow \Phi = 1 \end{cases}$$

Com esta definição se faz possível o cálculo da fração de

fase continua (V_{fc}) e a fração de fase dispersa (V_{fd}) com isso é possível calcular as propriedades físicas ao longo de todo escoamento como nas equações 2 e 3:

$$\rho = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)V_{fd} \quad (2)$$

$$\mu = \mu_c + (\mu_d - \mu_c)V_{fd} \quad (3)$$

Para encontrar o valor da variável Campo de Fase Φ o COMSOL resolve a seguinte equação de transporte (equação 4):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\epsilon_{pf}^2} \nabla \psi \quad (4)$$

onde a variável ψ (ψ) é dada pela equação 5:

$$\psi = -\nabla \cdot \epsilon_{pf}^2 \nabla \Phi + (\Phi^2 - 1)\Phi + \frac{\epsilon_{pf}^2}{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \Phi} \quad (5)$$

e λ (λ) é dado pela equação 6:

$$\lambda = \frac{3\epsilon_{pf}\sigma}{\sqrt{8}} \quad (6)$$

γ (γ) é dado pela equação 7:

$$\gamma = \chi \epsilon_{pf}^2 \quad (7)$$

onde ϵ_{pf} é a espessura da interface entre os fluidos.

Para calculo da capilaridade foi utilizada a equação 8:

$$Ca = \frac{\mu_c U_c}{\sigma} \quad (8)$$

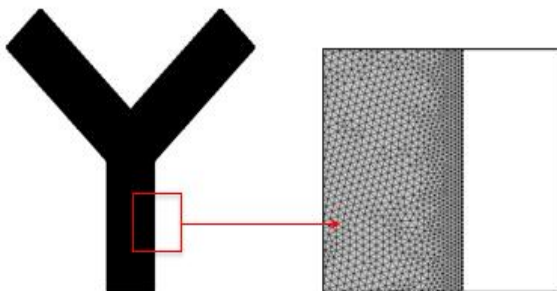
utilizando a viscosidade da fase continua e velocidade também da fase continua neste cálculo.

No COMSOL o domínio de cálculo pode ser importado ou ainda criado com o auxílio de ferramentas presentes no software. No presente estudo optou-se por criar a geometria da junção em Y no próprio COMSOL. Criada a geometria então configura-se os parâmetros do escoamento como por exemplo, velocidade de entrada, ângulo de contato da gota com as paredes entre outros. Imposta condições de contorno de não escorregamento e de pressão na saída igual a zero também foram estipuladas. Alguns parâmetros também se fazem necessários para o método do Campo de Fase como por exemplo a espessura da interface que no presente trabalho foi adotada como sendo a metade do

tamanho do maior elemento de malha ($h_{\max}/2$). Após os parâmetros do escoamento e do método do Campo de Fase serem devidamente configurados faz-se necessário a discretização do domínio através da criação de malhas.

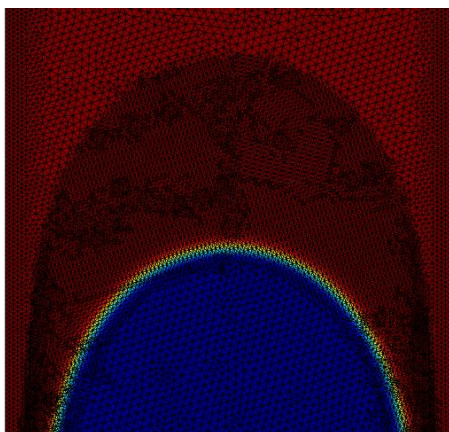
Um teste de independência de malha também foi realizado. Esse teste consistiu na criação de 3 malhas distintas com diferentes refinamentos com isso foi analisada a diferença entre essas malhas a fim de encontrar a malha que gerava um resultado bom e que o custo computacional não fosse tão elevado. Para capturar a fina camada de fluido entre a gota e a parede foi feito também um refinamento da malha localizado nesta região como mostrado na Figura 1.

Figura 1 – Refinamento na parede do microcanal



Testes adicionais foram feitos para escolher a melhor malha que gerasse os melhores resultados com custo computacional não tão elevado. O refinamento adaptativo da malha foi utilizado a fim de diminuir o custo computacional das simulações pois dessa forma refina-se a malha somente em locais de interesse. No presente estudo por exemplo na interface. Na Figura 2 são mostradas imagens do refinamento adaptativo:

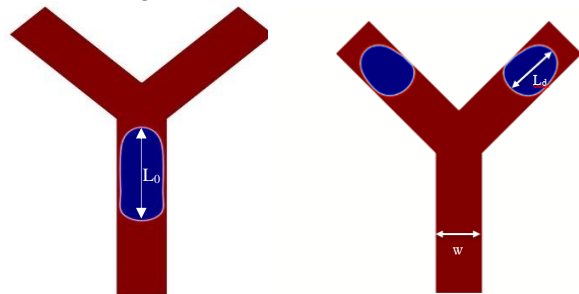
Figura 2 – Refinamento adaptativo



Resultados e discussão

Nesta seção serão apresentados os resultados obtidos através das simulações. A Figura 3 apresenta algumas grandezas.

Figura 3 – Geometria do Microcanal



Onde w é a largura do microcanal, L_d é o comprimento da gota após a junção e L_0 o comprimento da gota antes da junção.

A Tabela 1 apresenta uma comparação entre os dados experimentais da literatura com as simulações, da relação entre o número de capilaridade e o comprimento adimensional da gota após a bifurcação.

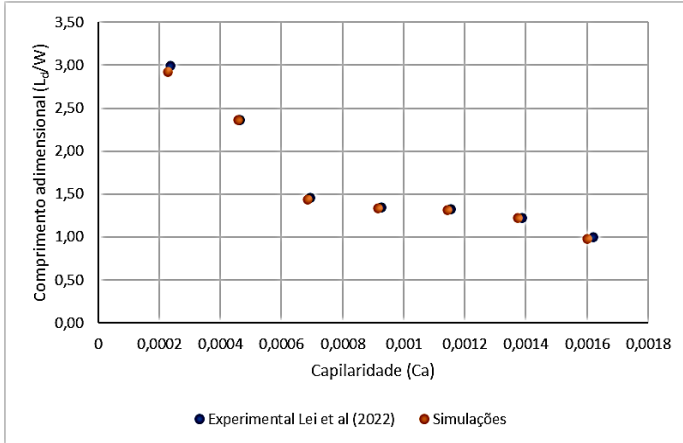
Tabela 1 – Capilaridade vs Comprimento adimensional

Experimental Lei et al. (2022)		Simulações	
Ca	Ld/W	Ca	Ld/W
0,000236	2,99	0,000229	2,92
0,000463	2,36	0,000458	2,36
0,000695	1,46	0,000686	1,44
0,000926	1,35	0,000915	1,34
0,001156	1,32	0,001144	1,31
0,001389	1,22	0,001373	1,22
0,001621	1,00	0,001602	0,98

Observa-se que o comprimento da gota diminui com o aumento da capilaridade. O número de Capilaridade representa a relação entre forças viscosas e forças de tensão superficial. O seu aumento aumenta as forças viscosas da fase contínua e o cisalhamento com a fase dispersa será maior em relação à fase. contínua. Como consequência, a inércia da gota será menor e seu tamanho reduzido.

Na Figura 4 os dados da Tabela 1 foram transformados em um gráfico para melhor visualização.

Figura 4 – Comprimento adimensional da bolha filha em função do número de Capilaridade para $Q_d = 10 \text{ ml/h}$



Pode-se notar que o comprimento adimensional é mais sensível a variação da capilaridade para números de capilaridade abaixo de 0,0008. Observa-se que as simulações numéricas foram bem próximas aos dados experimentais.

A seguir na Figura 6 é apresentada a evolução temporal da gota para as simulações e a evolução temporal experimental obtida por Lei et al (2022) na figura 5.

Figura 5 – Evolução temporal da gota (Lei et al 2022)

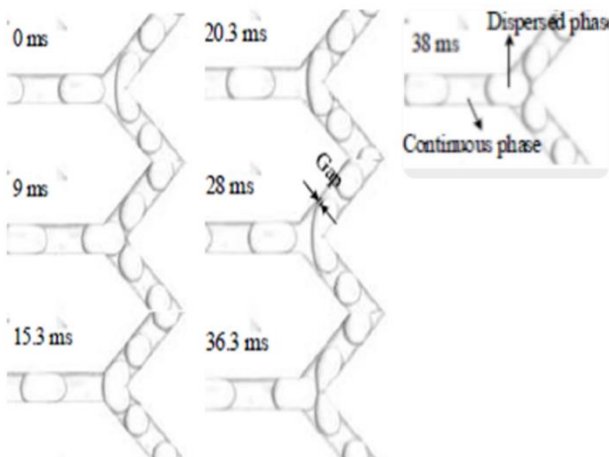
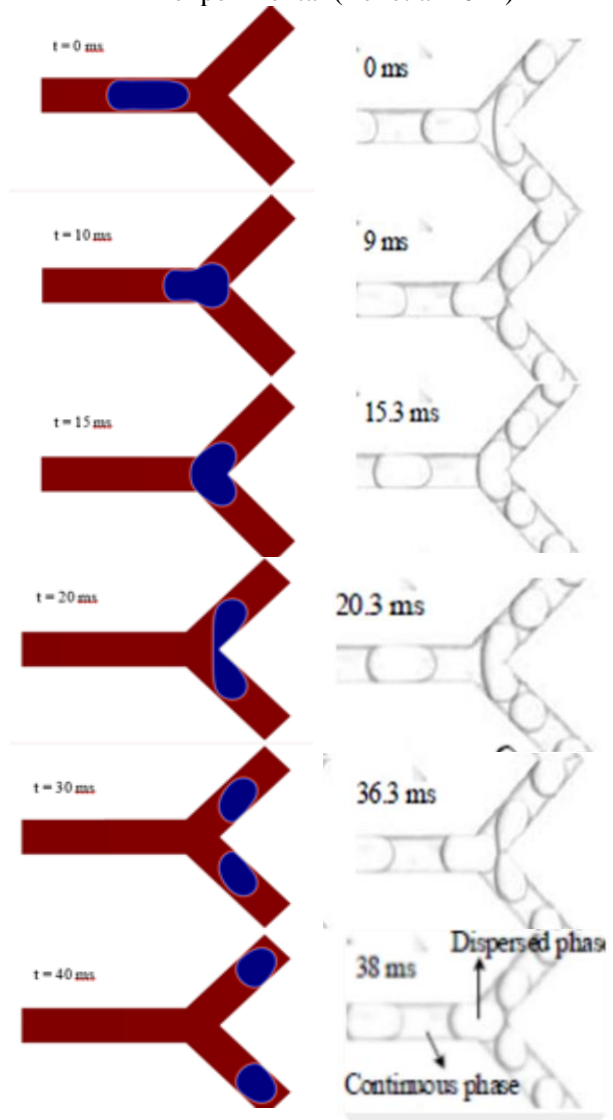


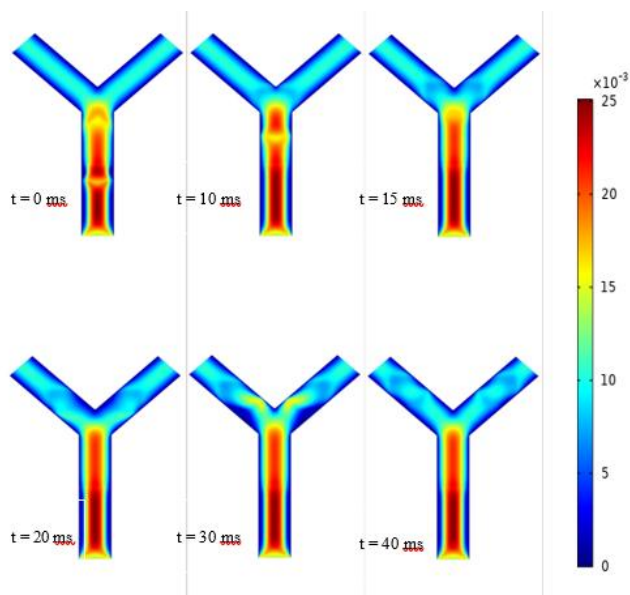
Figura 6 - Comparação entre a simulação e o experimental (Lei et al 2022)



A comparação qualitativa do formato da gota mostra resultados próximos da literatura, que indicam que as simulações numéricas reproduzem satisfatoriamente os dados experimentais.

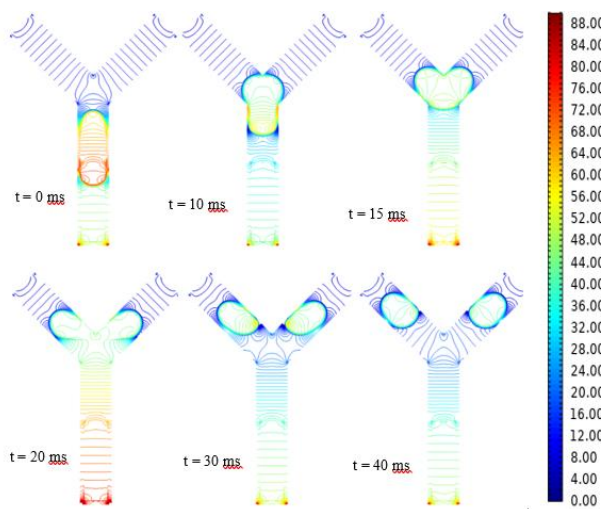
Através das simulações foi possível obter dados da evolução da gota. Na figura 7 são apresentados os campos de velocidade no tempo e na figura 8 os campos de isolinhas de pressão com o tempo para o mesmo caso apresentado anteriormente.

Figura 7 – Evolução temporal do campo de velocidades



Das simulações foi possível ainda obter o comportamento do campo de pressão como mostrado no gráfico apresentado na figura 8:

Figura 8 – Evolução temporal das isolinhas de pressão



Pode-se observar que tanto os dados dos números adimensionais quanto o comportamento temporal da gota são muito parecidos com os dados experimentais.

Conclusões

No presente estudo realizou-se a análise de um escoamento bidimensional bifásico em um microcanal com junção em Y. Através de simulações numéricas realizadas com o software COMSOL *Multiphysics*, foi possível entender o processo de ruptura de uma gota e sua relação com os parâmetros do escoamento.

Conclui-se primeiramente que o software se mostra muito eficaz na caracterização do comportamento da evolução da interface pois pode-se observar que a evolução temporal da gota das simulações teve comportamento muito próximo com os dados experimentais da literatura. Porém vale ressaltar que as simulações foram realizadas para uma faixa restrita de números de capilaridade e que mais simulações são necessárias para verificar a eficiência do COMSOL e do método Campo de Fase para este tipo de estudo.

Foi possível observar também que conforme o número de Capilaridade aumenta o comprimento das gotículas diminui e esta diminuição é menor para valores cada vez maiores de Capilaridade

Como proposta para trabalhos futuros tem-se a análise de escoamentos bifásicos em dispositivos microfluidicos, para diferentes tipos de junções como junções em Y assimétricas ou junções em T. Além disso, o estudo tridimensional possibilitará uma compreensão mais realista dos fenômenos envolvidos.

Agradecimento

Os autores agradecem à FAPEMIG pela concessão da bolsa de Iniciação Científica do primeiro autor.

Referências

LEI, Li et al. Breakup Dynamics of Droplets in Symmetric Y-Junction Microchannels. *Applied Sciences*, v. 12, n. 8, p. 4011, 2022.

WHITE, F. M. *Mecânica dos Fluidos*, 6ª. AMGH Editora, Porto Alegre, 2011.