



FORMAÇÃO E QUEBRA DE GOTAS EM UMA GEOMETRIA T-JUNCTION

JOELSON KALIL COELHO¹, OLDRICH JOEL ROMERO^{1,2}

¹ Engenharia de Petróleo (www.petroleo.ufes.br)

² Programa de Pós-Graduação em Energia (www.energia.ufes.br)

Universidade Federal do Espírito Santo –

Ufes campus São Mateus Rodovia BR 101 Norte, km 60, Litorâneo, CEP 29.932-540, São Mateus, ES, Brasil

(Recibido 29 de enero de 2016, para publicación 1 de junio de 2016)

Resumo – As configurações T-junction e T-junction divergente são utilizadas para estudar a formação de e divisão de gotas óleo em água com auxílio do software Ansys Fluent. O método de captura de interface e seus efeitos no escoamento é o volume of fluid (VOF). O problema tem como características principais que ocorre na microescala, é bidimensional, bifásico, transiente, laminar, de fluidos Newtonianos, incompressíveis e imiscíveis. Uma cuidadosa escolha dos parâmetros físicos, numéricos e geométricos é necessária de tal forma a obter soluções numéricas confiáveis e coerentes. Os resultados alcançados demonstram que a metodologia utilizada é correta, permitindo a descrição do processo de formação das gotas e posteriormente sua divisão em gotas menores na configuração T-junction divergente. É observado que a formação da gota em um processo complexo onde o bloqueio do canal, patamar crítico antecedem a a ruptura. As geometrias utilizadas são eficientes na função de geração e divisão das gotas, processo que é periódico e bastante preciso.

Palavras-chave – Escoamento bifásico, microescoamento, T-junction, volume of fluid, formação de gotas, quebra de gotas.

1. INTRODUÇÃO

Microescoamento é o termo utilizado para designar o escoamento de fluidos, do tipo líquido/líquido e gás/líquido, em canais planos ou axissimétricos em pequenas escalas cujas dimensões variam de 10 µm a 100 µm. Nesta escala o escoamento é laminar com as forças viscosas predominando sobre as de inércia, reduzindo assim as não linearidades. Por ser bifásico e na microescala, o escoamento passa a ser controlado pelas forças de capilaridade introduzindo as não linearidades por conta da presença da interface entre os fluidos imiscíveis [1,2]. A utilização de dispositivos e técnicas com microcanais, denominadas aplicações *lab-on-a-chip*, tem se tornando muito comuns devido à possibilidade de aplicação em dispositivos médicos (MEMS Technologies) [3], fabricação de DNA – *deoxyribonucleic acid*, encapsulação de células na indústria farmacêutica, cristalização proteica, formação de gotas e bolhas, operações de mistura, separação, sensoriamento, reações químicas dentre outras [4,2,5,6]. Independente da aplicação, é muito importante o controle preciso do formato e configuração das gotas geradas. Segundo Vladislavljjevic *et al.* (2012), conforme citação de [7], o tamanho das gotas geradas tem uma variação menor do que 5%, o qual é importante na elevada estabilidade do sistema final [7]. A utilização destes dispositivos tem ainda a vantagem de ser um processo que exige menos energia do que os métodos tradicionais. A depender da geometria utilizada, diversas maneiras de induzir a formação de gotas (líquido/líquido) ou bolhas (gás/líquido) são possíveis. Alguns dos métodos, de acordo com [4], são (i) o fluxo segmentado, através de junções em T ou Y com função de gerar slugs (gotas alongadas) com comprimento maior que a largura da junção; (ii) formação de gotículas através de por exemplo geometrias do tipo cross-junctions, onde a depender das dimensões da junção, haverá uma modificação no comprimento relativo das gotas formadas; e (iii) encapsulação, onde células ou partículas são introduzidas no interior das gotículas, a depender da configuração da junção. Maiores detalhes sobre o tema podem ser encontrados em [2,5,8,9].

A geometria *T-junction* foi primeiro utilizada por Thorsen [1] e é uma das mais difundidas atualmente [9,10,11,12,13,14,15,16]. As gotas são formadas periodicamente com um tamanho maior que aquele da junção. Dois fluidos são injetados, um através do canal principal e que forma a fase contínua, e outro através de um canal secundário que representa a fase dispersa, de modo a verificar os fenômenos de formação e quebra das gotas. Diversos parâmetros como a razão de viscosidades entre os fluidos, a razão entre as vazões, o número de capilaridade, a configuração da geometria, a qualidade da malha utilizada nas simulações podem afetar consideravelmente a produção de gotas, no que diz respeito à variação do tamanho e a modificação de seu padrão de dispersão no meio. Este estudo investiga a influência destes parâmetros no processo de formação prescrevendo para cada caso o tamanho das gotas e o campo de pressão, principalmente. De acordo com [15], o número de capilaridade influencia diretamente nos regimes de formação de gotas, sendo eles: *squeezing*, para baixos valores de Ca , *dripping* para valores intermediários e *jetting* quando Ca atinge valores elevados. Experimentos com micro-PIV [16] mostram que o tamanho da gota diminui com o aumento do número de capilaridade. O presente estudo aborda a formação de gotas na geometria *T-junction* mediante simulação computacional. O objetivo é destacar a importância do estudo na microescala, apresentar a metodologia para resolver o problema de formação e quebra de gotas, e reproduzir alguns resultados existentes na literatura. Os experimentos numéricos são realizados com auxílio do software comercial Ansys Fluent com o método *volume of fluid* (VOF) [17] para determinação da interface entre os fluidos. Em todos os casos, a fase contínua ou carreadora é a água, injetada no canal principal, e a fase dispersa, o óleo.

2. ESPECIFICAÇÃO DO PROBLEMA

É utilizada a geometria plana apresentada na Fig. 1, que é formado por dois canais perpendiculares, um horizontal que é o principal com abertura h e comprimento $41h$, e outro perpendicular ao anterior com largura $h/2$ e comprimento $3h$. Na interseção entre eles é a junção onde as gotas são formadas (Fig. 1a). Esta configuração é similar à utilizada em [3,4]. Uma segunda parte do problema consiste em estudar a divisão, ou quebra, da gota em duas menores. Para isso na configuração inicial é adicionado um canal secundário de $20h$ e $h/2$ que é perpendicular ao principal sendo a interseção em $10h$, conforme detalhado

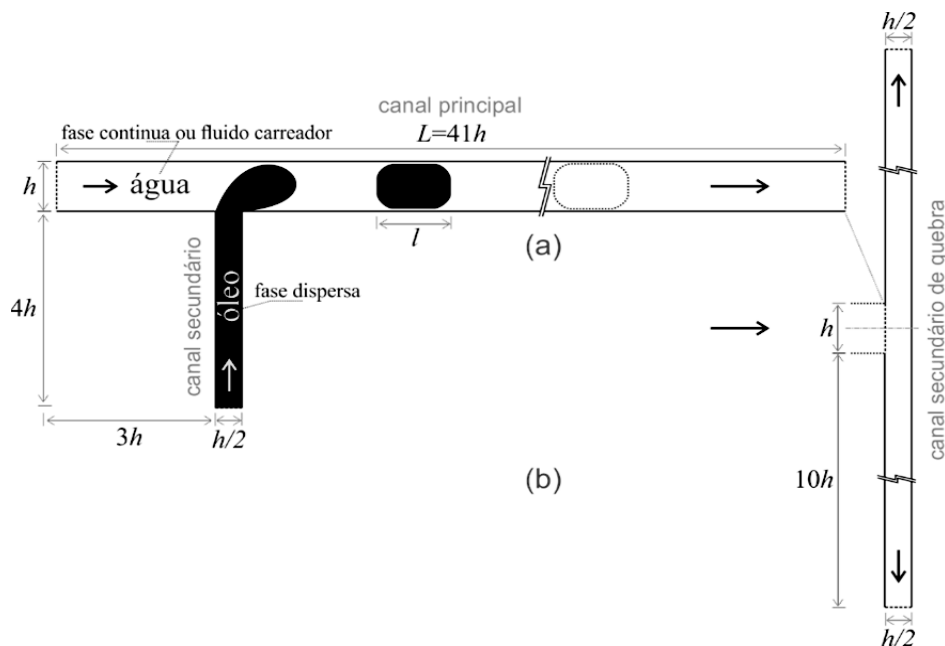


Fig. 1. (a) configuração *T-junction* de formação das gotas (adaptado de [4]) e (b) configuração *T-junction* divergente para a quebra das gotas detalhando as dimensões (adaptado de [3]), sendo $h = 1$ mm..

na Fig. 1b. Esta segunda configuração é denominada T-junction divergente. Em todo o trabalho $h = 0,1$ mm.

Água, com viscosidade (μ_w) de 1 cP (1 mPa.s) é injetada na entrada do canal principal e o óleo, de viscosidade (μ_o) de 10 cP (10 mPa.s) na entrada do canal secundário com velocidades V_{mw} e V_{mo} , respectivamente. Ambos fluidos se encontra na junção, T-Junction, onde ocorre o bloqueio inicialmente e a separação do óleo posteriormente na forma de uma gota que ocupa toda a largura do canal. A gota escoar até alcançar o plano de saída. As massas específicas da água (ρ_w) e do óleo (ρ_o) são, respectivamente 1.000 kg/m³ e 900 kg/m³. A tensão interfacial água/óleo (σ_{wo}) utilizado é 0,0003 N/m.

O processo de formação de gotas nas geometrias de entroncamento pode ser descrito como se segue. Primeiramente, os dois fluidos imiscíveis formam uma interface na junção entre as duas entradas. O fluxo da fase secundária penetra no canal principal e uma gota começa a crescer. Durante este processo, o gradiente de pressão e o fluxo da fase primária no canal principal distorce a gota no sentido descendente. A interface no lado ascendente da gota se move no sentido descendente. Devido a esta penetração, a fase secundária bloqueia quase toda a seção transversal do canal principal e a fase primária escoar em finas películas molhantes nas paredes do microcanal, isto leva a um aumento da pressão na parte ascendente da gota emergente e faz com que a interface se aproxime da borda a jusante do canal de entrada da fase secundária, ocorrendo assim a quebra da gota. A gota formada flui em sentido do plano de saída do canal principal, enquanto o fluxo da fase secundária se retrai para a extremidade de entrada e o processo se repete. E ao longo de um grande intervalo de taxas de fluxo das duas fases, este processo gera gotículas de tamanho uniforme.

3. MODELAGEM DO PROBLEMA PELA TÉCNICA *VOLUME OF FLUID*

O problema apresentado que trata de fluidos viscosos Newtonianos, com massas específicas constantes, imiscíveis, incompressíveis, escoando em regime transiente, laminar e bidimensional na microescala, é abordado utilizando o modelo multifásico *Volume of Fluid* – VOF [17]. A técnica consiste em resolver as equações da continuidade, equação (1), e de Navier-Stokes, equação (2), aplicadas em todo o domínio

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) + \rho \vec{g} + \vec{f}_{int}, \quad (2)$$

sendo ρ a massa específica, $\vec{v}$ o vetor velocidade, p a pressão, μ a viscosidade, $\vec{g}$ o vetor aceleração da gravidade, $\nabla \vec{v}$ o tensor gradiente de velocidade com o sobrescrito ^T significando transposta, e $\vec{f}_{int}$ é o termo fonte para a modelagem dos efeitos interfaciais. Adicionalmente, no método VOF para determinar quais das regiões do domínio estão preenchidas por determinado fluido, é resolvido a equação de conservação da massa da fase menos densa, neste caso a do óleo α_o , com massa específica ρ_o

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_o \rho_o) + \nabla \cdot (\alpha_o \rho_o \vec{v}) = 0. \quad (3)$$

A fração volumétrica α_f de um fluido f qualquer pode ser interpretada como o volume de fluido V_f existente no volume total V_T do domínio, $\alpha_f = \frac{V_f}{V_T}$. Neste problema tem-se o escoamento de dois fluidos água ($f = w$) e óleo ($f = o$). Por tanto o método VOF introduz duas novas incógnitas no sistema, α_o e α_w , sua somatória é 1 em qualquer ponto do domínio, isto é

$$\alpha_w + \alpha_o = 1, \quad (4)$$

assim, o sistema fica bem definido quanto ao equilíbrio entre número de incógnitas e número de equações [10]. As novas incógnitas assumem valores que variam entre 0 e 1 ao longo de todo o domínio. Significando que quando $\alpha_o = 0$ o óleo não está presente, apenas a água $\alpha_w = 1$; quando $\alpha_o = 1$ existe apenas óleo e a água não é registrada $\alpha_w = 0$, para $0 < \alpha_w, \alpha_o < 1$ tem-se a presença dos dois fluidos e a interface é trabalhada com o método *Geometric Reconstruction* para melhor visualização.

O termo fonte da equação (2) é função da tensão interfacial σ_{wo} , da massa específica ρ , da curvatura κ da interface, do gradiente de fração volumétrica do óleo $\nabla\alpha_o$ e da massa específica média através do modelo *Continuum Surface Force* – CSF [18]

$$\vec{f}_{int} = \sigma_{wo} \frac{\rho \kappa \nabla\alpha_o}{\frac{1}{2}(\rho_w + \rho_o)}. \quad (5)$$

As equações (2) e (5) são dependentes das frações volumétricas das fases envolvidas através da massa específica ρ e da viscosidade μ em todo o fluido, determinadas, respectivamente, por

$$\rho = \alpha_w \rho_w + \alpha_o \rho_o \quad (6)$$

$$\mu = \alpha_w \mu_w + \alpha_o \mu_o. \quad (7)$$

Esta metodologia, aplicada em problemas similares aos aqui descritos, entretanto com geometrias diferentes, são discutidos em [19,20,21,22].

3.1. Condições de fronteira e condição inicial

As condições de contorno utilizadas neste problema e que definem o domínio de solução do mesmo são aplicadas com auxílio da Fig. 2:

1. na entrada do canal principal a velocidade média da água V_{mw} é prescrita como sendo 0,0004 m/s;
2. na entrada do canal secundário a velocidade média de óleo V_{mo} é prescrita como sendo 0,0002 m/s;
3. na saída, para as duas configurações da Fig. 2a e 2b, a pressão é considerada nula, e havendo fluxo reverso é permitido apenas o retorno de água;
4. nas paredes, considera-se impermeabilidade e não-escorregamento, com o ângulo de adesão θ_{wo} entre água e o óleo, que traduz a molhabilidade, assumindo o valor de 0 rad;

na interface água / óleo é aplicada a equação (5).

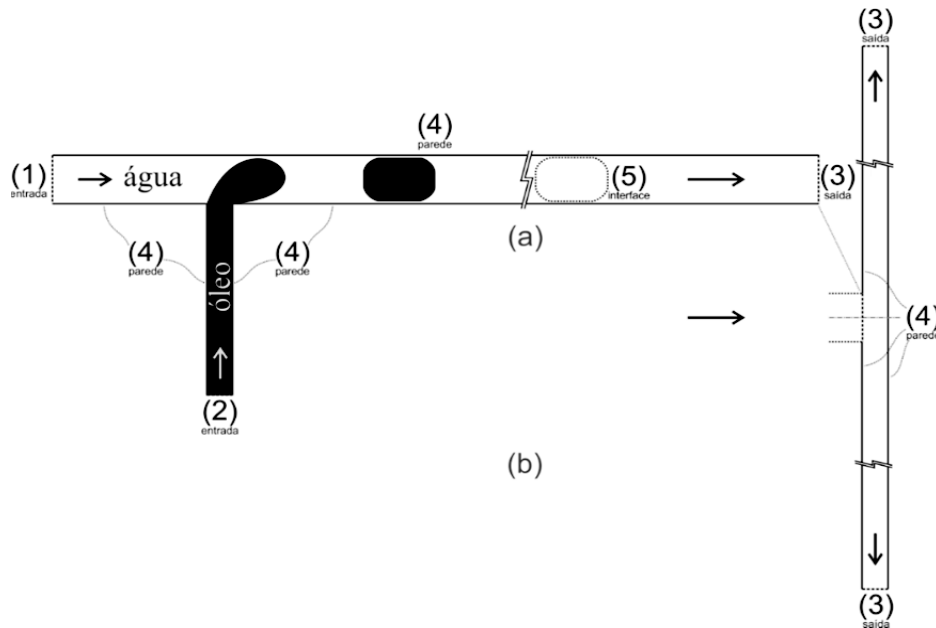


Fig. 2. (a) configuração T-junction de formação das gotas, e (b) configuração T-junction divergente para a quebra das gotas. São identificadas as condições de contorno por números entre parêntesis.

Antes de iniciar a simulação tem-se como condição inicial que toda a geometria é preenchida com água não havendo movimentação, isto é $u = v = 0$ no instante $t = 0$ segundos.

3.2. Parâmetros adimensionais

De acordo com [19] o escoamento depende de características dos fluidos, condições operacionais, parâmetros numéricos e parâmetros geométricos. Estas dependências podem, e na medida do possível devem, ser estudadas mediante números adimensionais. Com esta intenção alguns deles são brevemente discutidos. A tensão interfacial é uma propriedade importante que contribui para a forma adotada pela interface. Em muitos casos a convergência do processo iterativo de solução é função do seu valor. Entretanto deve ser comparada com outra força importante no escoamento, as viscosas, e determinar o quão dominante uma força é em relação à outra. O número de capilaridade Ca , traduz esta relação. As forças viscosas são definidas em função da viscosidade da fase continua, água. As forças de capilaridade dependem da tensão interfacial água/óleo, assim tem-se

$$Ca = \frac{\mu_w V_{mw}}{\sigma_{wo}}. \quad (8)$$

A comparação entre as viscosidades dos dois fluidos envolvidos é realizada através do parâmetro adimensional razão de viscosidades μ_R .

$$\mu_R = \frac{\mu_o}{\mu_w}, \quad (9)$$

neste trabalho as viscosidades são mantidas constantes de tal forma que $\mu_R = 10$.

O número de Reynolds Re traduz a relação entre as forças de inércia representadas pelo grupo $\rho_w V_{mw} h$, com as forças viscosas do fluido deslocante que é a água, μ_w . A expressão é

$$Re = \frac{\rho_w V_{mw} h}{\mu_w}, \quad (10)$$

onde h é a separação entre as placas do canal principal que conduz a água. Em todas as simulações realizadas o número de Reynolds é $Re = 4 \times 10^{-2}$ significando que as forças de inércia são pequenas em relação às viscosas, traduzindo o que acontece nos microcanais [19,20].

A forma com a qual as gotas são formadas ao longo do canal é fortemente influenciada pelo ângulo de adesão $\theta_{w/o}$. Seu valor indica a fase que tem preferência em molhar ou aderir às paredes da superfície sólida, isto é a molhabilidade. Segundo [23] um ângulo de adesão de $\theta_{w/o} = 0$ rad indica completa molhabilidade da fase mais densa (água), $\theta_{w/o} = \pi$ rad indica completa molhabilidade da fase menos densa (óleo) e um ângulo de 90° ($\theta_{w/o} = \pi/2$ rad) significa que nenhuma das fases molha preferencialmente a outra. A escolha nos testes realizados é trabalhar com o sistema água-molhante.

O volume de fluido injetado por unidade de tempo é controlado pela razão de vazões q_R entre o óleo q_o e a água q_w . Como as seções que admitem os fluidos são planas com abertura $h/2$ e h , para uma profundidade p unitária, tem-se

$$q_R = \frac{q_o}{q_w} = \frac{V_{mo} p h / 2}{V_{mw} p h} = \frac{V_{mo}}{2 V_{mw}}. \quad (11)$$

O tempo t , em segundos, é também adimensionalizado para t_D considerando como tempo característico o tempo necessário para que a água com uma certa velocidade V_{mw} se movimente ao longo do canal de comprimento L_b e porosidade ϕ , isto é

$$t_D = \frac{V_{mw} t}{\phi L_b}, \quad (12)$$

considerando que o fluido da fase continua se desloca a uma velocidade média $V_{mw} = 4 \times 10^{-4}$ m/s ao longo do trecho entre a junção e a saída do canal de comprimento $L_b = 37,5h = 3,75$ mm = $3,75 \times 10^{-3}$ m (Fig. 1a), com porosidade $\phi = 1$, da equação (12) obtém-se $t_D = 0,107 t$.

Finalmente, de acordo com [14], o comprimento l das gotas de óleo formadas (Fig. 1a) dependem da razão de vazões q_R , da abertura do canal principal h e de α , que é uma constante função da geometria utilizada. Sendo assim

$$\frac{l}{h} = 1 + \alpha q_R, \quad (13)$$

como pode ser observado, a relação anterior estabelece que as propriedades dos fluidos não influenciam no comprimento l da gota.

4. ABORDAGEM NUMÉRICA

As equações governantes são resolvidas utilizando o *software* comercial Ansys Fluent®[24] com o método VOF para captura da interface. É utilizado volumes finitos com arranjo co-localizado das variáveis (velocidades, pressão e fração volumétrica) para transformar as equações governantes em equações algébricas. No procedimento o campo de pressão precisa ser calculado para cada elemento discretizado do domínio. O gradiente de pressão aparece na equação de Navier-Stokes, equação (2), mas como os fluidos são incompressíveis sua relação com a pressão não pode ser prevista diretamente por uma equação de estado. São necessários algoritmos de acoplamento pressão-velocidade para obter o campo de pressão. Dos três acoplamentos disponíveis no Fluent, foram utilizados no presente trabalho o SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked*) e o SIMPLEC (*SIMPLE Consistent*).

No SIMPLE, em todas iterações o campo de pressão é atualizado usando a correção de pressão. Já o SIMPLEC (*SIMPLE Consistent*) é uma versão aperfeiçoada do SIMPLE. A diferença é por conta da equação de correção da pressão. Isto implica que a convergência da solução com o SIMPLEC é obtida de maneira mais rápida e eficiente quando comparada ao SIMPLE [24].

Os esquemas PRESTO! (*PRESSure STaggering Option*) e *Second Order Upwind* são empregados na interpolação da pressão e da velocidade, respectivamente. Para a avaliação dos gradientes é utilizado o método de mínimos quadrados em cada célula (*Least Squares Cell Based*) que, para malhas não estruturadas, é bastante preciso e menos dispendioso computacionalmente se comparado a outros métodos.

Por fim, de modo a melhor definição da interface formada entre as frações volumétricas de óleo e da água, utiliza-se o método *Geometric Reconstruction (Geo-Reconstruct)* [25] devido à razão de viscosidades entre os fluidos envolvidos não ser muito grande.

4.1. Discretização espacial do domínio

A transformação do domínio contínuo em um domínio discreto formado por vários pequenos elementos é efetuado com o *software* Ansys Meshing. A resposta de três níveis de refinamento (malha 1 com 1.120 elementos, malha 2 com 4.300 elementos, e malha 3 com 5.420 elementos) para o comprimento das gotas assim como tempo de simulação gasto em cada caso são comparados. O tamanho da gota obtida com cada malha é representada na Fig. 3. As malhas 2 e 3 tem praticamente o mesmo comprimento da gota, 0,19 mm, entretanto como mostrado na Tabela 1, o tempo de simulação necessário com a malha 3 é maior.

O comprimento da gota obtida analiticamente com a equação (13) para $h = 0,1$ mm, $\alpha = 4$ e $q_R = 0,25$, é de aproximadamente 0,20 mm. A coerência com o resultado numérico é muito boa. Com o refinamento gradual da malha, é possível perceber que a solução converge para um mesmo valor de comprimento de gota, porém, devido ao tempo de simulação ser maior para a configuração da malha 3, optou-se pela utilização da malha 2 com 4.300 elementos (Fig. 4), menos dispendiosa computacionalmente e com resultados numéricos similares.

4.2. O passo de tempo

Conforme apresentado em [19,20,21,22] um dos principais parâmetros descritos na literatura para obter a solução convergida com a abordagem explícita em problemas dependentes do tempo é o número de Courant (C_o), definido por $C_o = \frac{V_m \Delta t}{\Delta x}$, onde V_m é a velocidade média (da fase continua neste estudo) na

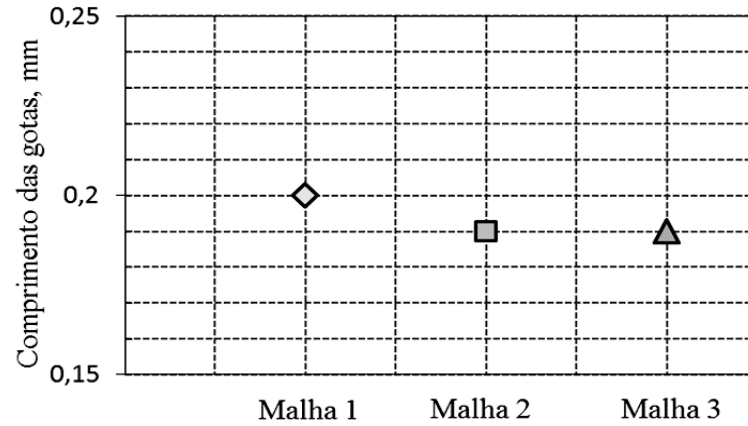


Fig. 3. Estudo de malha tendo como parâmetro comparativo o comprimento das gotas geradas.

Tabela 1. Detalhe das malhas para o caso 2 e as respostas obtidas.

Malha	Nº de elementos	Comprimento das gotas, mm	Tempo de simulação, min
1	1.120	0,20	40
2	4.300	0,19	52
3	5.420	0,19	70

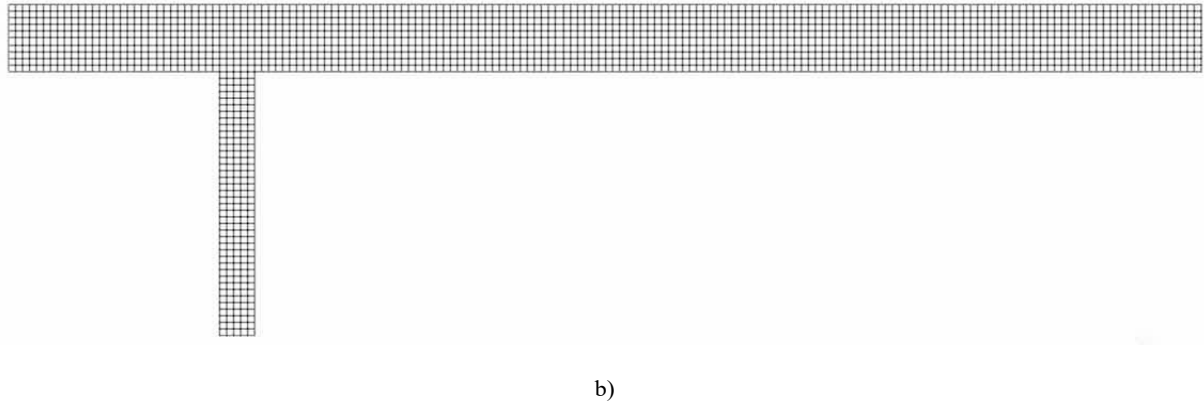
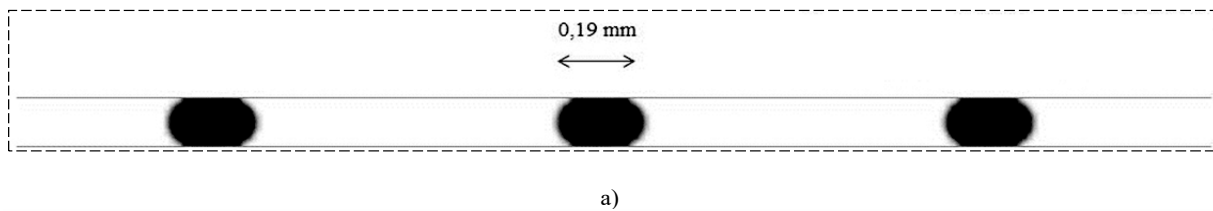


Fig. 4. a) Comprimento das gotas geradas durante simulação numérica para a malha 2; b) nível de refinamento da malha 2 utilizada nas simulações.

entrada e Δx é o tamanho de um elemento representativo da malha. Desta forma o passo de tempo, no contexto de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL), é governado por

$$\Delta t_{CFL} = \frac{Co \Delta x}{V_{mw}}, \quad (14)$$

o número de Courant deve ser menor do que 1,0 ($Co < 1,0$) para garantir a convergência do processo iterativo de solução [26].

A fim de destacar os efeitos da tensão interfacial, massa específica e/ou viscosidade, outras propostas de passo de tempo são apresentadas [19,20]. Um deles é o tempo capilar de Brackbill [18] $\Delta t_B = \left(\frac{\rho_w \Delta x^3}{2\pi\sigma_{wo}} \right)^{0,5}$, e para número de Reynolds baixos e médios tem-se a proposta de Galusinski e Vigneaux [27] $\Delta t_V = \frac{\mu_w \Delta x}{\sigma_{wo}}$. Utilizando $Co = 0,1$, $\Delta x = \Delta x_{médio} = 10^{-5}$ m, $\sigma_{w/o} = 3 \times 10^{-4}$ N/m, $V_{mw} = 4 \times 10^{-4}$ m/s, $\rho_w = 1.000$ kg/m³ e $\mu_w = 1$ cP = 1 mPa.s, tem-se os passos de tempo recomendados de $\Delta t_{CFL} = 0,0025$ s, $\Delta t_B = 2,3 \times 10^{-5}$ s e $\Delta t_V = 3,3 \times 10^{-5}$ s, porém como os resultados convergiram para uma solução com o patamar de resíduo de 10^{-3} , após cinco iterações, em média, com $\Delta t = 0,002$ s este valor foi selecionado devido ao menor tempo gasto nas simulações.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Conforme comentado, a formação e quebra de gotas é estudada nas configurações T-Junction e T-junction divergente, descritas graficamente nas Figs. 1a e 1b com os parâmetros correspondentes aos casos 1 e 2 da tabela 2, respectivamente.

De acordo com [10] para $Ca < 0,002$ tem-se o regime *squeezing* e para $0,01 < Ca < 0,3$ o regime *dripping*, por tanto os três casos considerados se enquadram na primeira categoria de regime.

5.1. Formação de gotas

A formação das gotas na configuração T-junction se dá quando a fase dispersa (óleo) invade a região do canal principal entrando em contato com a fase contínua (água). A competição, na junção dos canais, entre a elevada tensão de cisalhamento, que tendem a produzir a quebra, com as tensões interfaciais, que resistem à quebra (Fig. 5a, Fig. 5b), é vencida pelas primeiras resultando nas gotas de óleo sendo carreadas pela água (Fig. 5c). Como a injeção é contínua nos dois canais, o processo se repete gerando gotas alongadas de igual comprimento l e uniformemente espaçadas, tal que no instante $t_D = 1,07$ (Fig. 5d) o escoamento já tem um padrão definido, as gotas estão separadas a uma mesma distância entre si, e os tamanhos das gotas são iguais ao longo de todo o canal principal à jusante da junção, o que está de acordo com a regularidade da formação das gotas comentada em [7].

A formação das gotas é melhor visualizada utilizando os campos de pressão na Fig. 6. As linhas de corrente são apresentadas para observar a dinâmica do escoamento. Na Fig. 6a, o menisco óleo/água começa a invadir o canal principal criando uma alteração no escoamento da água. Como $q_R = 0,25$, e de acordo com a equação (12), o óleo tem uma velocidade menor do que a água. Isso somado com a resistência criada pela interface curva, resulta em uma obstrução ao escoamento que tende a aumentar na medida que a gota cresce ocupando a largura h do canal (Fig. 6b). A área aberta ao fluxo diminui gradativamente enquanto a gota se alonga até alcançar uma tensão crítica em que há a ruptura do filamento e gota de óleo se separa pela predominância do gradiente de pressão, ficando dispersa na água (Fig. 6c, Fig. 6d). Esta sequência identifica o fenômeno de *squeezing* e que de acordo com [15] ocorre para pequenos valores de Ca , com o tamanho das gotas sendo dependentes da razão de vazões como estabelecido pela equação (14). A pressão, até aqui com comportamento crescente, entre o plano de entrada e a junção (Figs. 6a-d), diminui uma vez que a gota já separada é arrastada livremente ao longo do trecho da junção até o plano

Tabela 2. Parâmetros utilizados nos dois casos simulados.

Casos	Algoritmo de discretização	Geometria	Ca	q_R	μ_R	Re
1	SIMPLE	Fig. 1a	0,0013	0,25	10	4×10^{-2}
2	SIMPLE	Fig. 1b	0,0013	0,25	10	4×10^{-2}

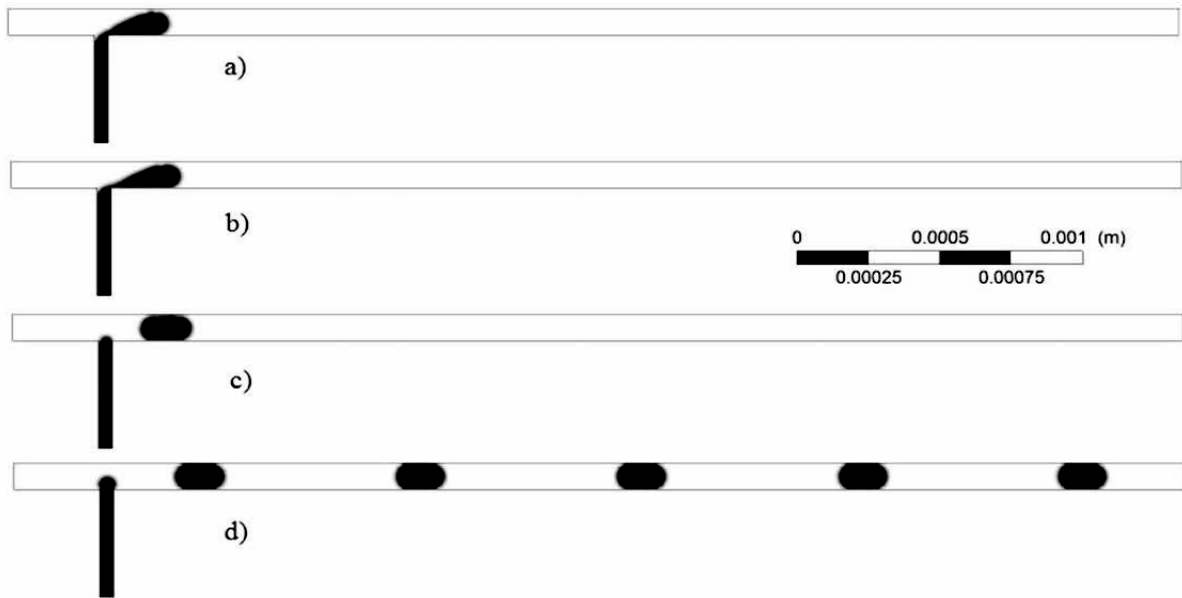


Fig. 5. Gotas de óleo em água formadas na T-Junction para o caso 1, com $Ca = 1,3 \times 10^{-3}$ e tempos adimensionais t_D de: a) 0,364, b) 0,375, c) 0,385 e d) 1,07. Note que em (d) existem cinco gotas com tamanho e espaçamento entre elas constantes.

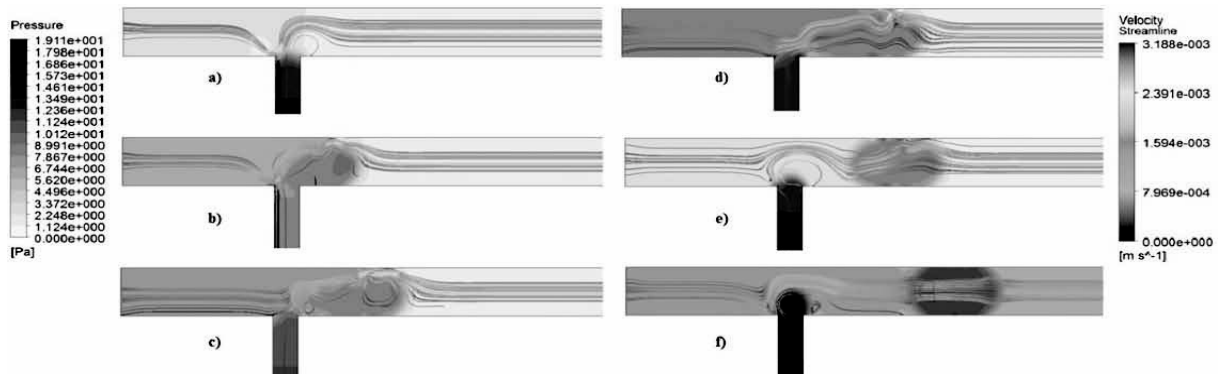


Fig. 6. Detalhe dos campos de pressão na região da junção para o caso 1 com $Ca = 1,3 \times 10^{-3}$ e tempos adimensionais t_D : a) 0,214, b) 0,321, c) 0,364 d) 0,375 e) 0,385 e f) 1,07. De (a) até (d) corresponde ao processo de formação da gota 1. Em (e) e (f) a gota 1 está completa e a gota 2 está em formação.

de saída (Figs. 6e,f). O aumento e diminuição da pressão de forma periódica é a resposta do escoamento para manter as vazões constantes, de acordo com os valores apresentados na subseção §3.1.

Complementando a análise descrita no parágrafo anterior e de forma similar a Menach e colaboradores (2008) [2], na Fig. 7 é mostrada a variação com o tempo da pressão no plano de entrada do canal principal, distante $3h$ à montante da junção, isto é no lado da água. A pressão é constante em 2,5 Pa até 2,1 s,

tempo necessário para o óleo percorrer a distância $4h$ do canal secundário. Quando o menisco invade o canal principal a pressão diminui em $\sim 0,3$ Pa e imediatamente começa a aumentar, é o início do processo de formação da Gota 1, e na medida que esta invade o canal principal e é alongada o bloqueio então torna-se evidente, trecho (I). O alongamento da gota ocorre até 3,35 s com a pressão na entrada alcançando 8,5 Pa. Conforme detalhe da Fig. 8, após o trecho I a pressão oscila em torno de um valor constante por um curto período de tempo (de 3,35 s até 3,5 s), é o que estamos identificando como trecho II. A área aberta ao fluxo que até então vinha diminuindo, atinge seu valor mínimo e o equilíbrio entre as forças de pressão e de capilaridade é perdido, originando a quebra da gota de óleo que se reflete em uma diminui-

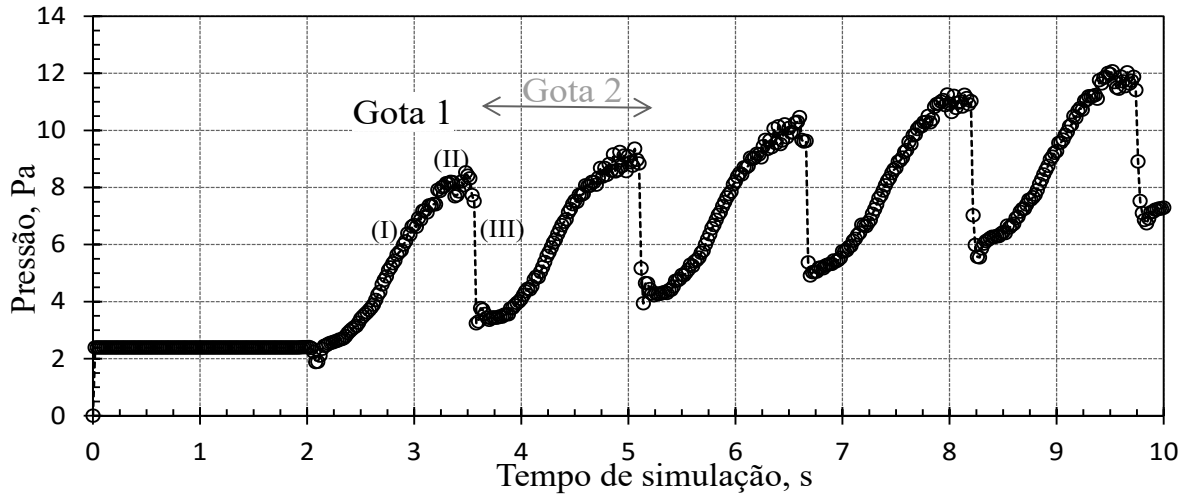


Fig. 7. Comportamento periódico crescente da pressão no plano de entrada ao longo do tempo identificando as cinco gotas de óleo formadas. Os trechos I, II e III se repetem para cada gota. O detalhe pontilhado (em vermelho na versão online) é apresentado na Fig. 8.

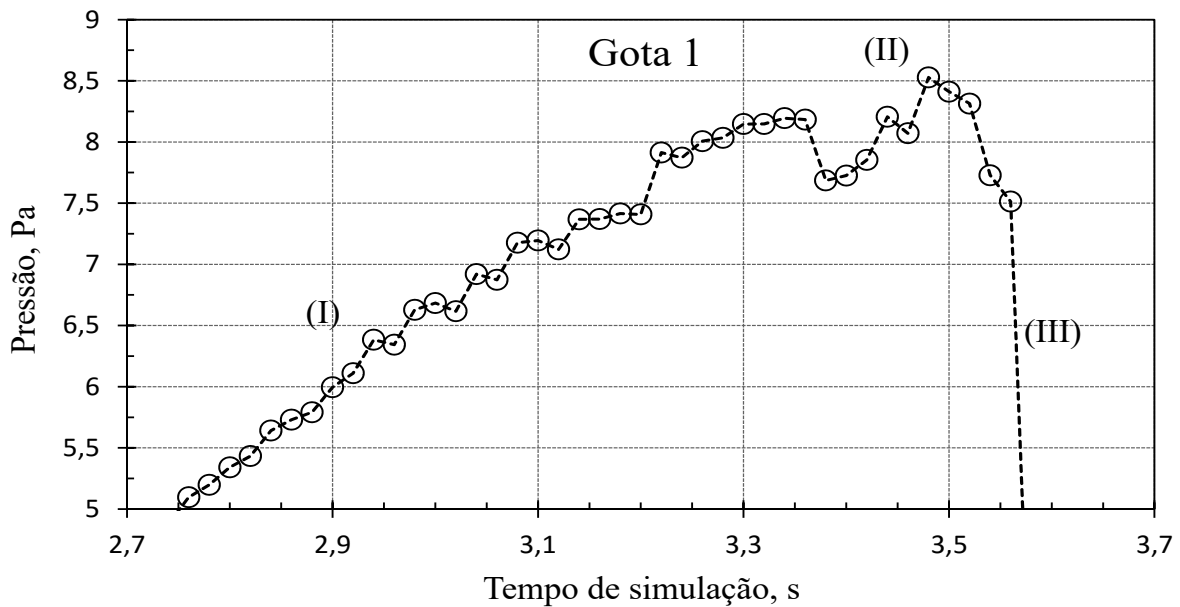


Fig. 8. Pressão no plano de entrada, com o detalhe pontilhado da Fig. 7 mostrando o final do bloqueio (trecho I), o momento crítico antes da ruptura (trecho II) e o instante da ruptura (trecho III) da gota 1.

ção brusca da pressão, trecho III das Figs. 7 e 8. No trecho III, que começa em $\sim 3,5$ s e termina em $\sim 3,55$ s, a pressão cai de 8,5 Pa para 3,3 Pa. A formação da primeira gota ocorre em um total de $\Delta t_{Gota\ 1} = 3,55s - 2,1s = 1,45s$. Ao final do trecho III da gota 1 o processo se repete dando início à formação da gota 2, o tempo necessário para a formação da segunda gota é $\Delta t_{Gota\ 2} = 5,1s - 3,6s = 1,5s$. A regularidade do processo é realmente notória.

A pressão tem um comportamento periódico porém crescente. Isso ocorre porque gotas de óleo dez vezes mais viscoso do que a água ($\mu_R = 10$, tabela 1), estão sendo carregadas ao longo do comprimento do canal com o consequente aumento da perda de carga.

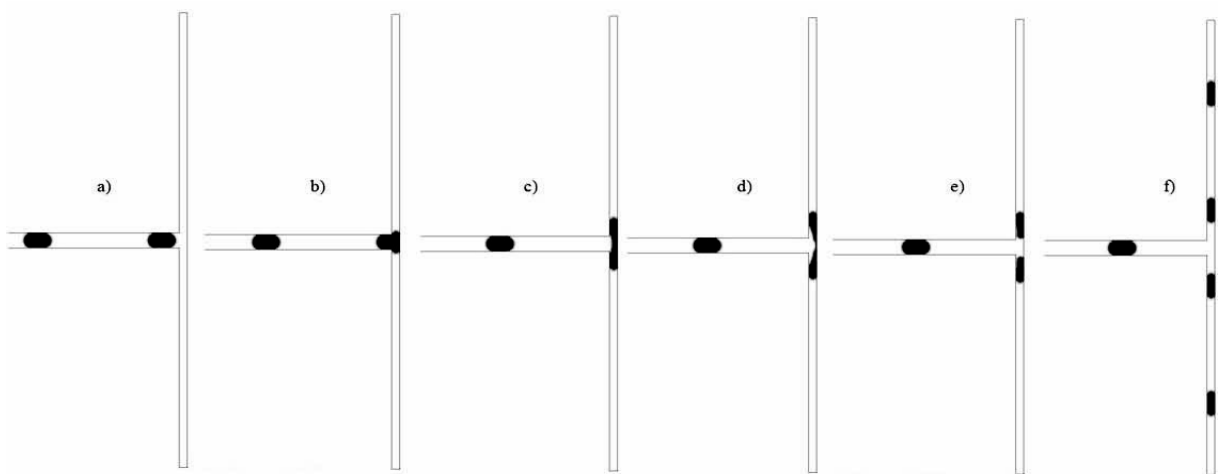


Fig. 9. Divisão das gotas na configuração T-Junction divergente para os tempos adimensionais t_D de: a) 1,13 b) 1,15 c) 1,17, d) 1,18, e) 1,20 e f) 1,37. A região pontilhada de (a) é detalhada na Fig. 10.

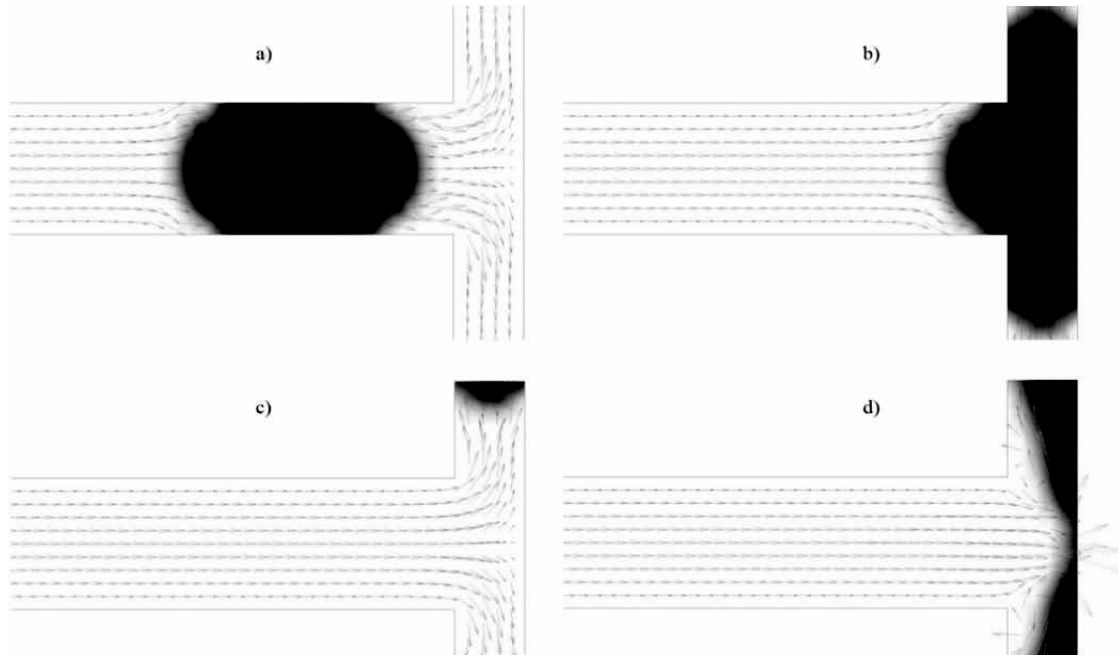


Fig. 10. Detalhe do processo de divisão simétrica da gota em duas menores com os vetores velocidade que corresponde à região pontilhada da Fig. 9.

5.2. Divisão das gotas

Nesta subseção apresenta-se a divisão de cada gota em duas gotas menores. É utilizada a geometria T-junction divergente (Fig. 1b) com as condições de contorno segundo Fig. 2b, é o caso 2 da Tabela 2.

A evolução para seis instantes de tempo é mostrada na Fig. 9 e para quatro etapas na Fig. 10 que apresenta também os vetores velocidade. A gota 1 da Fig. 5d aproxima-se da junção (Fig. 9a, Fig. 10a), e começa a se deformar preenchendo os canais secundários de saída perpendiculares ao canal principal (Fig.

9b). O fluido é obrigado a escoar parte dele 90 graus no sentido anti-horário e parte dele 90 graus no sentido horário. Como os canais de saída tem abertura e comprimentos iguais, a simetria é esperada.

Quando a gota invade a junção, e de acordo com o detalhe da Fig. 10b, existe um bloqueio ao escoamento. A pressão, embora não mostrada, tem um aumento significativo. Como a injeção de água é mantida constante a gota se deforma tal que na Fig. 9c está completamente inserida no canal secundário de abertura $h/2$. O estrangulamento na linha de simetria é mais acentuado, Fig. 9d e Fig. 10c, com a interface sendo empurrada contra a parede oposta do canal secundário.

As forças advindas da pressão que comprimem perpendicularmente e esticam a gota em sentidos opostos e a longo dos dois braços do canal de saída, competem com a tensão interfacial que oferece a resistência à quebra. A manutenção da forma contínua da gota se torna insustentável iniciando-se sua divisão em duas outras gotas menores (Fig. 9e, Fig. 10 d), que se deslocam em sentidos opostos no canal secundário (Fig. 9f). As gotas formadas, que preenchem toda a abertura $h/2$ dos canais secundários de saída, tem comprimento l igual ao gota original (Fig. 9e).

Este processo repete-se, de forma contínua, permitindo a divisão de gotas de forma eficiente através desta configuração. A periodicidade e a simetria [11,12] é novamente evidenciado na Fig. 9f.

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Foi avaliado, qualitativa e quantitativamente, o processo de formação de gotas mediante a configuração T-Junction, assim como a divisão das mesmas na geometria T-junction divergente para número de capilaridade igual a 0,0013. De modo a obter a formação e divisão das gotas é necessário, além da correta dimensionalização da configuração, o controle preciso de parâmetros físicos, representados através de números adimensionais como razão de viscosidades, razão de vazões, número de capilaridade, número de Reynolds além de parâmetros numéricos.

Como principais conclusões do estudo apresentado, destacam-se:

1. A metodologia adotada se mostrou viável, sendo possível reproduzir resultados existentes na literatura;
2. A correlação apresentada em [15] foi aplicada com sucesso para determinar o comprimento das gotas;
3. A formação da gota é um processo complexo constituído por bloqueio, patamar crítico e ruptura;
4. A geração das gotas com a geometria T-junction ocorre de forma periódica e bastante precisa;
5. A pressão no canal principal tem comportamento periódico com incrementos associados com o alongamento da gota e diminuições abruptas na quebra da mesma. Os valores máximos aumentam de um ciclo para outro na medida que mais gotas são geradas.
6. A divisão das gotas com a geometria T-junction divergente se mostrou eficiente. Gotas menores e iguais são formadas também de forma periódica.
7. A regularidade do processo de geração e divisão das gotas é notório.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem aos gestores da Ufes campus São Mateus por permitir a utilização das instalações do Laboratório de Simulação Numérica da Engenharia de Petróleo para desenvolver esta atividade acadêmica; ao Programa de Pós-Graduação em Energia pela permissão para utilizar a licença comercial do software Ansys Fluent e ao capítulo estudantil SPE Ufes <spe.ufes.br> pela gestão do uso gratuito da plataforma OnePetro® <onepetro.org> da SPE – Society of Petroleum Engineers.

REFERÊNCIAS

- [1] Thorsen, T., Roberts, R., Arnold, F.H., Quake, S.R., “Dynamic pattern formation in a vesicle-generating microfluidic device”, *Phys Rev Lett*, **86**, 4163–4166 (2001)
- [2] Menech M.D., Garstecki P., Jousse F., Stone H.A., “Transition from squeezing to dripping in a microfluidic T-shaped junction”, *J. Fluid Mech*, **595**, 141–161 (2008)
- [3] Lih, F.L., Miao, J.M., “Effect of junction configurations on microdroplet formation in a T-Junction micro-channel”, *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, **56**(2), 220-230 (2015)
- [4] Dolomite. Droplet microfluidics brochure for biology, food & cosmetics, drug discovery, chemistry. Disponível em: http://www.dolomite-microfluidics.com/images/stories/PDFs/flyer/Droplets_Brochure.pdf. Acesso em 15/dezembro/2015
- [5] Teh, S.Y., Lin, R., Hung, L.H., LeE, A.P., “Droplet microfluidics”, *Lab Chip*, **8**, 198–220 (2008)
- [6] Cubaud, T., Mason, T.G., “Capillary threads and viscous droplets in square microchannels”, *Physics Ff Fluids*, **20**, 53302/1-53302/11 (2008)
- [7] Ushikubo, F.Y., Birribilli, F.S., Oliveira, D.R.B., Cunha, R.L., “Y- and T-junction microfluidic devices: effect of fluids and interface properties and operating conditions”, *Microfluid Nanofluid*, **17**, 711–720 (2014)
- [8] Garstecki, P., Gañán-Calvo, A.M., Whitesides, G.M., “Formation of bubbles and droplets in microfluidic systems”, *Bulletin of the Polish Academy of Sciences Technical Sciences*, **53**(4), (2005)
- [9] Guillot, P., Colin, A., “Stability of parallel flows in a microchannel after a T junction”, *Phys. Rev. E*, **72**, 066301 (2005)
- [10] Xu, J.H., Li, S.W., Tan, J., Luo, G.S., “Correlations of droplet formation in T-junction microfluidic devices: from squeezing to dripping”, *Microfluid Nanofluid*, **5**, 711–717 (2008)
- [11] Fu, T., Ma, Y., Li, H.Z., “Hydrodynamic feedback on bubble breakup at a T-junction within an asymmetric loop”, *AIChE Journal*, **60**(5), 1920-1929 (2014)
- [12] Fu, T., Ma, Y., Funfschilling, D., Li, H.Z., “Dynamics of bubble breakup in a microfluidic T-junction divergence”. *Chemical Engineering Science*, **66**, 4184–4195 (2011)
- [13] Abate, A.R., Poitzsch, A., Hwang, Y., Lee, J., Czerwinska, J., Weitz, D.A., “Impact of inlet channel geometry on microfluidic drop formation”, *Physical Review E*, **80**, 26310/1-26310/5 (2009)
- [14] Gartescki, P., Fuerstman, M.J., Stone, H.A., Whitesides, G.M., “Formation of droplets and bubbles in a microfluidic T-junction—scaling and mechanism of break-up”, *Lab on a chip*, **6**, 437-446, (2006)
- [15] Tarchichi, N., Chollet, F., Manceau, J., “New regime of droplet generation in a T-Shape microfluidic junction”, *Journal of Microfluidics and Nanofluidics*, **14**(1), 45-51 (2013)
- [16] Oishi, M., Kinoshita, H., Fujii, T., Oshima, M., “Investigation of droplet formation mechanism in micro t-shaped junction using confocal micro-piv measurement”, 10th International Conference on Fluid Control, Measurement, and Visaulization, August 17-21, Moscu, Rusia (2009)
- [17] Hirt, C.W., Nichols, B.D., “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries”, *Journal of Computational Physics*, **39**, 201-225 (1981)
- [18] Brackbill, J.U., Kothe, D.B., Zemach, C., “A continuum method for modeling surface tension”, *Journal of Computational Physics*, **100**, 335–354 (1992)
- [19] Santos, K.B., Romero, O.J., Meneguelo, A.P., Ribeiro, D.C., “A numerical investigation of immiscible water-oil displacement in simplified porous media”, *IEEE America Latina*, **14**(5), 2175 - 2183 (2016). DOI: 10.1109/TLA.2016.7530411
- [20] Coelho, J.K., Pena, M.D., Romero, O.J., “Pore-scale modeling of oil mobilization trapped in a square cavity” *IEEE America Latina*, **14**(4), 1800 - 1807 (2016). DOI: 10.1109/TLA.2016.7483518
- [21] Romero, O.J., Fejoli R. F. “Fluxo de uma gota de óleo em um microcanal reto e com garganta”, *Revista Iberoamericana de Ingeniería Mecánica*, **19**(2), 71-81 (2015)
- [22] Morais, C.L., Romero, O.J., Ribeiro, D.C., Pereira, F.A.R., “Influência das forças viscosas e de capilaridade na saturação de óleo residual contido em um microcanal com obstruções”, *Petro & Química*, aceito (2016)
- [23] Jamaloei, B.Y., Kharrat, R., Asghari, K., “The influence of pore wettability on the microstructure of residual oil in surfactant-enhanced water flooding in heavy oil reservoirs: Implications for pore-scale flow characterization”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **7**(1), 121–134 (2011)
- [24] Fluent User’s Guide, ANSYS Fluent 14.5 (2012)

- [25] Pan, Z., Weibel, J.A., Garimella, S.V., “Spurious Current Suppression in VOF-CSF Simulation of Slug Flow through Small Channels” *CTRC Research Publications*. Paper 243 (2015) <http://dx.doi.org/10.1080/10407782.2014.916109>
- [26] Bethke, C.M., “Geochemical and Biogeochemical Reaction Modeling”, Second Edition, Cambridge University Press, p. 297 (2008)
- [27] Galusinski, C., Vigneaux, P., “On stability condition for bifluid flows with surface tension: Application to microfluidics”, *Journal of Computational Physics*, **227**, 6140-6164 (2008)

FORMATION AND BREAKUP OF DROPLETS IN A MICROFLUIDIC T-JUNCTION

Abstract – T-junction and T-junction divergent configurations are used to study the formation and breakup of oil in water droplets. The governing equations and the influence of interfacial effects in the flow field are solved with Ansys Fluent commercial software coupled with volume of fluid technique. The problem occurs in the micro scale, is two-dimensional, biphasic, in transient and laminar regime. The viscous fluids are Newtonian, incompressible and immiscible. A carefully choice of physical, numerical and geometrical parameters is necessary in order to obtain reliable and coherent numerical solutions. We conclude that the methodology employed to solve the problem is correct, allowing the description of formation and breakup of droplets. Also, it is verified the complexity of the process, where the channel blockage and a critical limit precedes the breakup of oil/water interface. The two geometries used are efficient to generate droplets, which is periodic and very well controlled process.

Keywords – Two-phase flow, Microchannel, T-junction, Volume of fluid, Droplet formation, Droplet breakup.