

PROJETO DE GRADUAÇÃO

ESTUDO NUMÉRICO DO ESCOAMENTO DE EMULSÕES AO LONGO DE UMA JUNÇÃO EM T

Por,

Juan Linhares Barbosa

Brasília, 20 de setembro de 2022

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
Faculdade de Tecnologia
Departamento de Engenharia Mecânica

PROJETO DE GRADUAÇÃO

ESTUDO NUMÉRICO DO ESCOAMENTO DE EMULSÕES AO LONGO DE UMA JUNÇÃO EM T

Por,

Juan Linhares Barbosa

Relatório submetido como requisito parcial para obtenção
do grau de Engenheiro Mecânico

Banca Examinadora

Taygoara Felamingo de Oliveira,
PhD - ENM/UnB (Orientador) _____

Rafael Gabler Gontijo,
PhD - ENM/UnB (Examinador) _____

Roberto Francisco Bobenrieth Miserda,
PhD - ENM/UnB (Examinador) _____

Brasília 20 de setembro de 2022

Resumo

O estudo do escoamento de emulsões é uma larga área em ascensão e de grande importância para a ciência, visto que muitos processos industriais envolvem a compreensão desse tipo de fenômeno. Dessa forma, o presente trabalho analisa um escoamento de uma gota numa junção T, cuja modelagem do escoamento é feita a partir da solução da equação de Navier-Stokes e a captura da interface é feita através do método de *Level Set*. Foi utilizado um algoritmo que resolve o escoamento transiente incompressível para uma cavidade retangular e modificado para modelar uma junção em T. Além disso, o algoritmo utilizado conta com técnicas sofisticadas de discretização temporal e espacial, como esquemas ENO e WENO, Crank-Nicolson, RTV Runge-Kutta, além de métodos para solução de sistemas lineares como o Gradiente Conjugado com condicionamento do tipo SSOR, os quais, em conjunto, trazem resultados com erros numéricos minimizados. Por fim, foi conferido o funcionamento do algoritmo implementado com trabalhos disponíveis na literatura tanto para a região de entrada da junção em T quanto para as regiões de saída, capturando a ruptura de gotas.

Palavras-chaves: escoamento bifásico. emulsões. junta em T. Level Set.

Abstract

The study of emulsion flow is a wide field rising and it's very important to science, due to many industrial processes that involve the understanding of this phenomenon. That way, the present work analyzes a flow of a drop in a T-junction, which is modeled by solving the Navier-Stokes equation and the interface is captured using the *Level Set* method. An algorithm that solves an incompressible transient flow for a rectangular cavity was utilized and modified to model a T-junction. Besides, the utilized algorithm counts on sophisticated numerical techniques to temporal and spatial discretization such as ENO and WENO schemes, Crank-Nicolson, RTV Runge-Kutta, plus methods to solve linear systems such as Conjugate Gradient with SSOR-type preconditioning which all together bring results with minimized numerical errors. Finally, the correct work of the implemented algorithm is confirmed using works available on the literature for both the inlet region and for the outlet region of the T-junction, which allows to capture droplet breakup.

Key-words: biphasic flow. emulsions. T-junction. Level Set

Lista de Figuras

Figura 1 – Ilustração esquemática do escoamento de uma emulsão numa junção em T.	2
Figura 2 – A) Duas fases imiscíveis (1 e 2), B) Formação da emulsão após agitação, C) Retorno ao estado inicial devido à instabilidade, D) Uso de surfactante para estabilizar a emulsão. Fonte: Adaptado de Vasconcelos (2005)	4
Figura 3 – A) Regime sem ruptura, B) Regime de ruptura com túneis, C) Regime de ruptura com obstrução permanente (JULLIEN et al., 2009)	9
Figura 4 – Volume composto por dois fluidos separados por uma interface.	15
Figura 5 – Representação da função Level Set.	17
Figura 6 – Malha defasada.	22
Figura 7 – Força bruta para representar o T em uma malha retangular.	23
Figura 8 – Distribuição parabólica da velocidade para o escoamento de <i>Hagen-Poiseuille</i>	33
Figura 9 – Distribuição da vazão nos ramos secundários da junção em T.	34
Figura 10 – Simulação do escoamento sem gota ao longo de uma junta em T num domínio 300×300 , $L = 16$ e com $Re = 0,1$. O mapa de cor é referente à distribuição de pressão, onde vermelho \rightarrow maior pressão e azul \rightarrow menor pressão.	35
Figura 11 – Geometria elíptica para uma gota centralizada no canal principal.	36
Figura 12 – Comparação do contorno da gota da simulação realizada com os resultados obtidos por Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) e pela solução teórica desenvolvida por Richardson (1973).	37
Figura 13 – Comparação do contorno da gota da simulação realizada com os resultados obtidos por Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) e pela solução teórica desenvolvida por Richardson (1973).	38

Figura 14 – Comparação da velocidade da gota normalizada pela velocidade média do escoamento no canal principal das simulações realizadas no presente trabalho com as simulações de Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) e com a solução teórica de Hodges, Jensen e Rallison (2004) para $\lambda = 1$ dada pela Eq. (4.4).	39
Figura 15 – Comparação entre a simulação realizada neste trabalho com uma malha 250 x 250 (metade à esquerda) com a simulação realizada por Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) (metade à direita) para $Re = 0,5$, $Ca = 0,05$, $\ell_0/H = 2,0$ e $\gamma = 0,1$	40
Figura 16 – Relação entre a máxima extensão ℓ da gota com seu comprimento inicial $2a$ na forma elíptica. Os dados obtidos ajustam à Eq. (4.5).	41
Figura 17 – Correção na simulação realizada (metade à esquerda) utilizando a relação entre ℓ e $2a$ para obter a máxima extensão da gota antes do rompimento. A meia gota em verde (metade à direita) é referente à simulação de Afkhami, Leshansky e Renardy (2011).	41
Figura 18 – Espessura mínima de filme δ	42
Figura 19 – Relação entre a espessura do filme δ e o número de capilaridade para as simulações realizadas no presente trabalho e as realizadas por Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) para $\lambda = 1$. A curva cheia é dada pela Eq. (4.6).	42
Figura 20 – Comparação da velocidade da gota normalizada pela velocidade média do escoamento no canal principal das simulações realizadas no presente trabalho com os experimentos de Jullien et al. (2009). A curva cheia é um ajuste aos dados experimentais.	43
Figura 21 – Interferência da presença das paredes da junção em T na superfície da gota. As linhas que contornam as gotas são curvas de nível $\phi = 0$ e $\phi = 0,1$	43
Figura 22 – Comparação da evolução temporal da espessura do pescoço de uma gota em regime de ruptura C da simulação realizada com a simulação de Hoang et al. (2013).	44

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Convergência do valor da velocidade máxima do escoamento adimensional.	35
-------------------------------------------------------------------------------------------	----

Lista de abreviaturas e siglas

SSOR	<i>Symmetric Successive Over-Relaxation</i>
TVD	<i>Total Variation Diminishing</i>
ENO	<i>Essentially Non-Oscillatory</i>
WENO	<i>Weighted Essentially Non-Oscillatory</i>
EDP	<i>Equação Diferencial Parcial</i>
VOF-HF	<i>Volume of Fluid - Height Function</i>

Lista de símbolos

U	Velocidade de entrada da junção
L_x	Comprimento do domínio na direção x
L_y	Comprimento do domínio na direção y
γ	Tensão superficial
Re	Número de Reynolds
Ca	Número de Capilaridade
\mathbf{u}	Vetor velocidade do escoamento
\mathbf{u}^*	Vetor velocidade-tentativa do escoamento
u	Componente de velocidade na direção x
v	Componente de velocidade na direção y
u^*	Componente de velocidade-tentativa na direção x
v^*	Componente de velocidade-tentativa na direção y
p	Pressão do escoamento
χ	Pressão auxiliar do escoamento
t	Tempo
Δt	Incremento de tempo
τ	Tempo virtual
$\Delta \tau$	Incremento de tempo virtual
Γ	Superfície da gota
κ	Curvatura da superfície
\mathbf{n}	Vetor normal à superfície

$\delta(x)$	Função Delta de Dirac
$H(x)$	Função Heaviside
Δx	Distância entre dois pontos adjacentes da malha na direção x
Δy	Distância entre dois pontos adjacentes da malha na direção y
R	Raio inicial da gota
x_c	Posição inicial da gota em relação a x
y_c	Posição inicial da gota em relação a y
Ω^+	Domínio fora da gota
Ω^-	Domínio dentro da gota
m	Massa
ϕ	Função Level-Set
σ	Tensor de tensões
ρ	Massa específica
μ	Viscosidade dinâmica
N_x	Número de nós na direção x
N_y	Número de nós na direção y
V	Volume
S	Superfície
\mathbf{g}	Vetor aceleração gravitacional
g	Aceleração gravitacional
\mathbf{I}	Matriz identidade
∇	Operador diferencial nabra
H	Largura do canal da junta em T
u_{max}	Velocidade máxima do escoamento no centro do canal
A_t	Área da seção transversal da junta em T
a	Semieixo horizontal da gota elíptica
b	Semieixo vertical da gota elíptica

λ	Razão de viscosidade
U_d	Velocidade da gota alongada
ℓ_0	Comprimento inicial da gota relaxada
ℓ	Comprimento máximo da gota antes da ruptura
δ	Espessura mínima de filme entre a gota e a parede
d	Espessura do pescoço da gota

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Contextualização Geral	1
1.2	Apresentação do Problema	1
1.3	Objetivos	2
1.4	Objetivo Geral	2
1.4.1	Objetivos específicos	3
1.5	Revisão Bibliográfica	3
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	10
2.1	Ferramentas matemáticas úteis	10
2.1.1	Teorema da Divergência de Gauss	10
2.1.2	Teorema da Localização	10
2.1.3	Teorema de Transporte de Reynolds	10
2.1.4	Colorário da Equação da Continuidade	11
2.2	Equações Governantes	11
2.2.1	Conservação da Massa	11
2.2.2	Equação da Quantidade de Momento Linear	12
2.2.3	Tensão interfacial	14
2.3	Condições de contorno de uma junção em T	15
2.3.1	Nas paredes	15
2.3.2	Na região de entrada da junta	16
2.3.3	Na região de saída da junta	16
2.4	Método de Level Set	16
2.4.1	Pressão modificada	18
2.4.2	Adimensionalização	19
3	METODOLOGIA	21
3.1	Método de Diferenças Finitas	21
3.2	Malha defasada	22
3.3	Técnica para representar a junção em T	23

3.4	Discretização temporal da Equação de Navier-Stokes	23
3.4.1	Método de Euler Explícito	23
3.4.2	Método de Euler Implícito	24
3.4.3	Método de Crank-Nicolson	24
3.5	Método de Projeção	24
3.5.1	Formulação explícita	25
3.5.2	Formulação implícita	25
3.5.3	Formulação semi-implícita (Crank-Nicolson)	26
3.6	Introdução da gota	27
3.7	Método de <i>Level Set</i> Local	27
3.7.1	Esquemas WENO e ENO	27
3.7.2	Reinicialização do <i>Level Set</i>	30
3.7.3	Discretização temporal da equação evolutiva e de reinicialização	30
3.8	Método de solução de sistemas lineares	31
3.8.1	Método do Gradiente Conjugado Pré-Condicionado	31
4	RESULTADOS	33
4.1	Escoamento monofásico	33
4.2	Escoamento bifásico	35
4.2.1	Gotas circulares no centro do canal principal	36
4.2.2	Gotas alongadas no centro do canal principal	37
4.2.3	Ruptura da gota na junção em T	39
4.3	Interferência das condições de contorno na superfície da gota	43
5	CONCLUSÃO	46
	REFERÊNCIAS	47

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização Geral

O estudo de escoamentos de emulsões se faz importante na medida que caracterizar e prever antecipadamente o comportamento das fases presentes nesse tipo de escoamento seria de grande serventia para aprimorar vários processos onde as emulsões estão presentes. Na indústria, as emulsões são amplamente empregadas na criação de alguns fármacos, na produção de produtos de limpeza, na produção de alimentos emulsionados, no processo de recuperação de óleo na extração de petróleo, além de vários outros processos. Um exemplo do emprego das emulsões pode ser dado ao mencionar o trabalho de [Rau et al. \(2001\)](#), o qual estudou o efeito anestésico de uma substância chamada propofol com uma emulsão de triglicerídeos, cujo resultado foi positivo para a diminuição da dor dos pacientes.

Devido a complexidade de um problema de escoamento de emulsões, abordagens numéricas têm sido recorrentes ao tratar desse assunto, o que abre um grande leque de estudo de aspectos fundamentais dos métodos numéricos que se propõem a resolver esse tipo de problema. A escolha dos métodos numéricos depende de algumas características intrínsecas ao fenômeno estudado, o que torna algumas metodologias mais adequadas ou vantajosas em relação a outras, além de que aspectos como a facilidade de implementação, a robustez do método, a taxa de convergência, a acurácia e, sobretudo, como tudo isso reflete no custo computacional é um ponto chave a ser avaliado.

No presente trabalho, o foco principal é validar a implementação de uma rotina numérica que caracteriza o comportamento de uma gota escoando ao longo de uma junção em T, desde o momento em que é inserida no canal principal da junta até o momento de ruptura em duas gotas menores. Tal validação será feita comparando-se os resultados obtidos com resultados de trabalhos que estão à disposição na literatura.

1.2 Apresentação do Problema

A [Figura 1](#) representa o problema a ser estudado por meio de uma simulação computacional. Como é apresentado, o escoamento de um fluido base com massa específica ρ_1 e viscosidade dinâmica μ_1 adentra a junção em forma de T e ocupa a região Ω^+

enquanto uma gota de um outro fluido delimitada pela fronteira Γ , com massa específica ρ_2 , viscosidade dinâmica μ_2 e ocupando a região Ω^- (que não se mistura com o primeiro), é transportada ao longo da junção devido o arrasto provocado pelo fluido base. Algumas definições serão feitas no estudo como o tipo de escoamento, o qual será tratado como incompressível e a simulação que será feita bidimensionalmente.

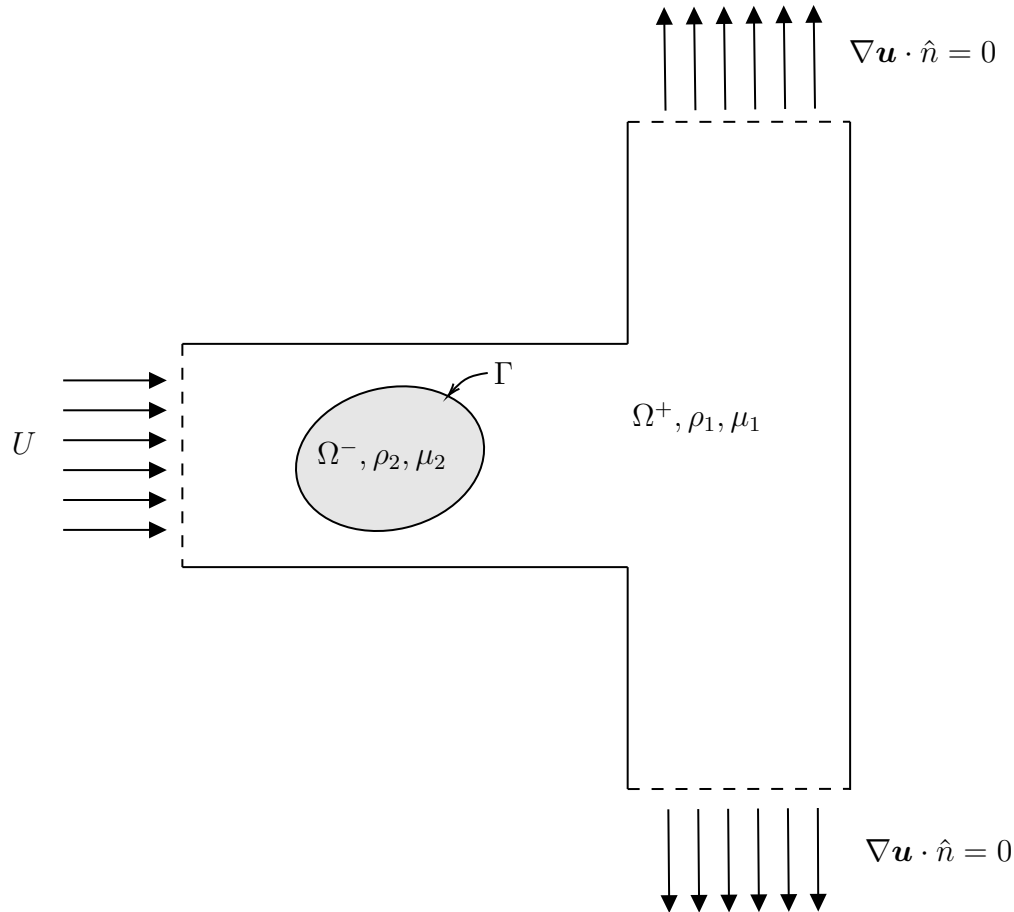


Figura 1 – Ilustração esquemática do escoamento de uma emulsão numa junção em T.

1.3 Objetivos

1.4 Objetivo Geral

O objetivo geral deste trabalho é realizar a simulação numérica para caracterizar o escoamento de gotas ao longo de uma junção em T. Além disso, analisar e comparar a validade da rotina numérica a ser implementada também é foco fundamental deste trabalho.

1.4.1 Objetivos específicos

1. Estudar os Métodos de Euler Implícito e Explícito para a discretização temporal do problema (sem gota);
2. Implementar o Método de Euler Explícito (para a discretização temporal) e o Método de Diferenças Finitas (para a discretização espacial) nas equações de Navier-Stokes;
3. Estudar e implementar o Método da Projeção para resolver as equações da Continuidade e de Navier-Stokes (sem gota);
4. Estabelecer e discretizar as condições de contorno considerando o problema da cavidade e depois da junção em T;
5. Estudar e implementar o método de Gauss-Seidel para a resolução de sistemas lineares;
6. Simular o escoamento monofásico (sem emulsão) e analisar o resultado;
7. Repetir a mesma simulação utilizando o Método de Euler Implícito;
8. Estudar o método de *Level Set* e acrescentar uma gota ao escoamento ao longo da junção em T;
9. Modificar as equações governantes, adicionando os termos referentes à adição da gota;
10. Implementar o Método de Crank-Nicolson no lugar do Método de Euler para a discretização temporal das equações de Navier-Stokes modificadas;
11. Estudar outros métodos de solução de sistemas lineares como o Método do Gradiente, Método do Gradiente Conjugado e o Método de Sobre-Relaxação Sucessiva para acelerar a convergência;
12. Analisar os resultados e comparar com o que houver disponível na literatura;
13. Analisar o comportamento da gota para diferentes parâmetros do problema.

1.5 Revisão Bibliográfica

Há várias décadas, o estudo de emulsões tem se tornado cada vez mais recorrente e compreender que uma emulsão é definida como a mistura bifásica de dois líquidos que não se misturam é um ponto de partida fundamental. Além disso, do ponto de vista termodinâmico, as emulsões são sistemas fora do equilíbrio, portanto são instáveis. Consequentemente, elas não são formadas espontaneamente, necessitando de um ação externa

(como um agitador) para formá-las e, depois de um tempo sem perturbação, as gotas tendem a voltar às fases originais conforme apresentado na Figura 2. As emulsões mais comuns são água-em-óleo (W/O) - a água se dispersa no óleo - e óleo-em-água (O/W) - o óleo se dispersa na água (FORGIARINI et al., 2001). Para conferir estabilidade à formação das gotas, é comum o uso de um agente emulsificante (surfactante ou tensoativo). Esse componente é responsável por criar um filme adsorvido que envolve as gotas, diminuindo a propensão à coalescência e floculação, os quais são fenômenos que ocorrem naturalmente e desfazem as emulsões.

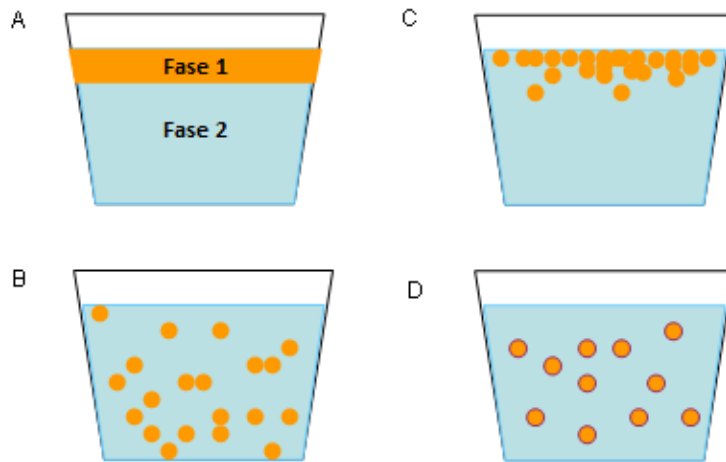


Figura 2 – A) Duas fases imiscíveis (1 e 2), B) Formação da emulsão após agitação, C) Retorno ao estado inicial devido à instabilidade, D) Uso de surfactante para estabilizar a emulsão. Fonte: Adaptado de Vasconcellos (2005)

Já tratando-se do escoamento de emulsões, é importante entender que este é um caso particular de escoamentos multifásicos, o qual pode ser definido como uma mistura que escoar e é composta por mais de uma fase. Uma fase é uma região delimitada por uma superfície de espessura infinitesimal que envolve um conteúdo com propriedades materiais homogêneas. Vale lembrar que essas misturas podem compreender fases com iguais ou diferentes estados da matéria como por exemplo um escoamento de gás, óleo e areia, o qual reúne 3 fases com cada uma em um estado da matéria distinto (gasoso, líquido e sólido) ou as já citadas emulsões compostas por duas fases no mesmo estado físico. Um outro ponto importante a ser destacado é que a modelagem de um escoamento multifásico aplica-se para o caso em que a razão entre as dimensões características das fases e das dimensões da escala molecular é várias ordens de magnitude maior do que a unidade, afinal as abordagens metodológicas que estudam esse tipo de escoamento, na sua grande maioria, são feitas do ponto de vista da mecânica dos meios contínuos (ROSA, 2012). Devido a alta complexidade dos escoamentos desse gênero, simulações numéricas são altamente utilizadas neste estudo, muito embora alguns estudiosos já haviam flertado com escoamento multifásicos de forma teórica e experimental há algum tempo atrás.

Um dos primeiros trabalhos de grande destaque que podem-se citar é o de [Taylor \(1932\)](#), o qual teve como base o trabalho de [Einstein \(1906\)](#) sobre o cálculo da viscosidade de um fluido com pequenas partículas esféricas sólidas diluídas para propor um modelo matemático da viscosidade de um fluido com gotas esféricas diluídas. Para que isso fosse possível, Taylor teve que considerar que as gotas são pequenas o suficiente para que seu formato esférico permaneça praticamente inalterado, além de considerar que as gotas possuísem alta tensão superficial, o que ajuda a minimizar as distorções no formato. Um tempo depois, [Taylor \(1934\)](#) fez sua primeira abordagem experimental de escoamentos com gotas com diferentes viscosidades. Ele constatou que para pequenas velocidades do escoamento, as gotas se comportam de acordo com o previsto pela teoria para pequenas deformações, já para grandes velocidades - que levaram a maiores distorções - verificou-se que o comportamento do escoamento depende fortemente da razão de viscosidade das duas fases presentes e de um parâmetro adimensional que reúne a viscosidade, a tensão superficial e o raio da gota, medida esta que também quantifica a deformação da gota. Subsequentemente, [Schowalter, Chaffey e Brenner \(1968\)](#) derivou uma equação constitutiva para uma emulsão diluída de dois fluidos newtonianos em que tal modelo leva em conta uma primeira ordem de correção no formato das gotas, possibilitando capturar efeitos não-lineares como diferenças de tensões normais, associadas a um grau de elasticidade dos fluidos. Na mesma linha, [Frankel e Acrivos \(1970\)](#) também propôs um modelo constitutivo para emulsões diluídas, mas considerando pequenas gotas livremente suspensas num escoamento cisalhante variável no tempo, donde constatou-se efeitos de memória em regimes com altas tensões interfaciais e moderadas razões de viscosidades ou moderadas tensões interfaciais e altas razões de viscosidade. [Frankel e Acrivos \(1970\)](#) mostrou, também, que seu modelo recupera o comportamento reológico da teoria de [Schowalter, Chaffey e Brenner \(1968\)](#) quando a dependência temporal do escoamento é pequena. A tratar de regimes de pequenas deformações, [Rallison \(1984\)](#) sintetizou o entendimento de escoamentos cisalhantes de baixo Reynolds, reunindo diversos trabalhos teóricos e experimentais de sua época e propôs áreas de aplicação desses estudos como a recuperação de óleo em rochas porosas, em que gotas de óleo suspensas em água são sugadas através dos poros, interagindo com as superfícies sólidas das rochas. Nesse caso, o efeito de condições de contorno sólidas envolvendo as gotas deve ser levado em consideração. Outra aplicação envolve o fenômeno de coalescência de gotas causado pelo cisalhamento e que é importante em processos de formação de emulsões. Uma terceira aplicação útil diz respeito ao estudo da deformação e hematólise de glóbulos vermelhos, os quais são descritos como cápsulas (gotas envolvidas por uma membrana elástica imersas num fluido-base).

Estudos teóricos sobre a geometria de bolhas bidimensionais submetidas a um escoamento de Stokes para regimes de cisalhamento simples e cisalhamento puro foram realizados por [Richardson \(1968\)](#) a partir de métodos de transformações conformes de variáveis complexas, em que, para ambos os regimes, foi verificado que as bolhas assumem formato elíptico. Em sequência, [Richardson \(1973\)](#) fez o mapeamento da superfície

de bolhas bidimensionais submetidas a um escoamento com campo parabólico de velocidades utilizando a mesma técnica de transformações conformes de variáveis complexas. Nesse estudo, [Richardson \(1973\)](#) obteve uma forte dependência do tamanho da bolha e do número de capilaridade com o formato da superfície, além de ter observado que bolhas posicionadas no centro do escoamento parabólico movem mais rapidamente em relação ao próprio escoamento não-perturbado. Outros estudos teóricos e numéricos sobre a geometria de gotas foram realizados por [Barthès-Biesel e Acrivos \(1973\)](#) e [Frankel e Acrivos \(1970\)](#) para regimes de escoamento diferentes. [Barthès-Biesel e Acrivos \(1973\)](#) conduziram seus estudos a partir de uma metodologia teórica para prever a deformação e as condições de ruptura de gotas líquidas suspensas em escoamento cisalhante linear, donde obtiveram formatos estáveis para gotas com grandes e pequenas razões de viscosidade, tanto numa análise de primeira ordem quanto numa de segunda ordem. Para regimes com razões de viscosidade moderadas, há um número de capilaridade crítico, para o qual a teoria estudada não tem solução. Já [Frankel e Acrivos \(1970\)](#) desenvolveram soluções numéricas para bolhas pequenas submetidas a escoamentos extensionais permanentes, mas o modelo se mostrou mais interessante para análises qualitativas do que quantitativas, dado a não-convergência dos resultados. Na área experimental, [Hakimi e Schowalter \(1980\)](#) validaram a teoria de pequenas deformações de emulsões diluídas comparando com dados experimentais, obtendo bons resultados para números de capilaridade de até 0,4. Mais tarde, efeitos elásticos em emulsões concentradas foram verificados através de técnicas experimentais por [Mason, Bibette e Weitz \(1995\)](#).

No campo de simulações numéricas, a formulação integral de contorno para escoamento de Stokes descrita por [Ladyzhenskaya \(1969\)](#) foi amplamente utilizada dada a sua vantagem de transformar um problema volumétrico do escoamento ao redor da gota em um problema de superfície, reduzindo o custo computacional. Os trabalhos de [Youngren e Acrivos \(1975\)](#) fizeram emprego dessa técnica para estudar o escoamento de Stokes ao redor de uma partícula rígida enquanto [Rallison e Acrivos \(1978\)](#) estudaram a deformação e condições de ruptura de uma gota em escoamentos cisalhantes por meio da formulação integral de contorno. Mais tarde, [Loewenberg e Hinch \(1996\)](#) realizaram uma simulação numérica de uma emulsão concentrada em escoamento cisalhante para condições de baixo Reynolds e número de capilaridade finita, donde obtiveram um comportamento reológico complexo e grandes tensões normais associadas à microestrutura anisotrópica das gotas. Logo mais, [Oliveira \(2007\)](#) também empregou uma formulação integral de contorno para determinar a forma da superfície de uma gota submetida a um escoamento específico.

No que diz respeito a generalidade das simulações numéricas, existem os mais variados métodos numéricos para aplicações distintas. A abordagem de um estudo numérico de um escoamento bifásico se divide, basicamente, em duas grandes partes: a modelagem do escoamento ao longo do domínio analisado e a captura da interface que divide ambos os fluidos ao longo do escoamento. Cada uma dessas grandes partes é um campo de estudo a parte recheado de inúmeros trabalhos de intelectuais que desenvolveram e continuam

desenvolvendo métodos cada vez mais aprimorados. A grande maioria das equações que governam um fenômeno físico são equações diferenciais, podendo-se citar várias metodologias que abordam esse tipo de equações como o método das diferenças, elementos finitos, volumes finitos, entre outros. A se tratar de aproximar derivadas de EDP, a clássica diferenças finitas serve como base para métodos mais complexos e refinados, como esquemas *upwinding*, *ENO* e *WENO* para obter aproximações de ordens elevadas, principalmente de equações diferenciais hiperbólicas. Para o caso de escoamentos transientes e incompressíveis, destaca-se o Método de Projeção, como o apresentado por [Kim e Moin \(1985\)](#), cujo objetivo é desacoplar o campo de velocidade do campo de pressão, oferecendo, assim, uma solução para as equações de Navier-Stokes. Além disso, juntamente do Método de Projeção, é comum utilizar métodos implícitos para a evolução temporal das equações de Navier-Stokes incompressível, como o método de Euler ou de Crank-Nicolson, e esquemas *ENO* para a discretização espacial do termo convectivo.

Já para a captura da interface que separa os dois fluidos num escoamento bifásico, um dos métodos mais usuais é o de *Level Set*, proposto por [Osher e Sethian \(1988\)](#). Este método funciona a partir da definição de uma função escalar cuja finalidade é calcular a distância dos pontos do domínio do escoamento em relação à interface, de forma que a interface seja capturada quando esta função assume valor nulo. O método de *Level Set* é vantajoso, pois é capaz de lidar com grandes alterações na geometria da interface, como no caso de ruptura e coalescência de gotas, além de sua fácil implementação. Ao longo dos anos, o método foi sendo melhorado como feito pela contribuição de [Sussman, Smereka e Osher \(1994\)](#) que apresentou um algoritmo de reinicialização da função do *Level Set* para mantê-la como uma função distância durante todo o escoamento. Embora a melhoria apresentado por Sussman tenha sido de grande valia, o algoritmo de reinicialização provoca uma perda de massa da gota devido a erros numéricos, problema este que veio a ser contornado após a adição de uma correção ao algoritmo de reinicialização para forçar uma conservação de massa ([SUSSMAN et al., 1998](#)). Uma outra forma de preservar a conservação de massa foi proposto por [Enright et al. \(2002\)](#), a qual consiste numa metodologia que preenche a região próxima da interface com partículas marcadoras que são advectadas pelo escoamento, sendo bastante eficientes em casos em que a interface é drasticamente esticada e rasgada (como em fenômenos de ruptura de gotas). Além disso, [Enright et al. \(2002\)](#) apontado que este método *Particle Level Set* apresenta resultados comparáveis aos métodos *Volume of Fluid* no quesito conservação de massa. Uma contribuição muito útil para a redução do custo computacional foi a de [Adalsteinsson e Sethian \(1995\)](#) que propuseram o conceito de tubo sendo uma região ao redor da interface onde a função distância do *Level Set* é calculada e evoluída. Outra metodologia para implementação do *Level Set* consideravelmente mais simples é desenvolvida por [Peng et al. \(1999\)](#) que também reúne as melhorias do algoritmo de reinicialização proposto por [Sussman, Smereka e Osher \(1994\)](#).

No estudo de gotas confinadas em capilares ou tubos, podem-se citar trabalhos

teóricos, experimentais e numéricos. [Bretherton \(1961\)](#) desenvolveu uma teoria para determinar a velocidade de gotas alongadas com viscosidade desprezível em tubos capilares para baixo Reynolds e número de capilaridade, demonstrando um excesso de velocidade da gota em relação à velocidade média do escoamento proporcional a uma potência do número de capilaridade. Subsequentemente, [Schwartz, Princen e Kiss \(1986\)](#) obteve, de forma experimental, a relação entre a velocidade da gota e o número de capilaridade para gotas com razões de viscosidade arbitrárias e mostrou que para gotas cujo comprimento não excede 20 vezes o raio do tubo a teoria de [Bretherton \(1961\)](#) é recuperada. Tempos depois, [Hodges, Jensen e Rallison \(2004\)](#) mostraram que a teoria de [Bretherton \(1961\)](#) é válida para qualquer razão de viscosidade, desde que corrigida com um coeficiente de ordem unitária que depende tanto do número de capilaridade quanto da razão de viscosidade dos fluidos. Para determinar esse coeficiente, [Hodges, Jensen e Rallison \(2004\)](#) utilizaram a teoria de lubrificação considerando um fino filme cuja espessura é medida entre a superfície da gota e a parede do tubo capilar. Anos mais tarde, [Afkhami, Leshansky e Renardy \(2011\)](#) realizaram simulações numéricas bidimensionais utilizando uma malha adaptativa que aumenta a resolução espacial em regiões de gradiente de velocidade elevado, além de utilizar uma metodologia VOF-HF para rastrear a superfície de gotas escoando num tubo. Com isso, [Afkhami, Leshansky e Renardy \(2011\)](#) obtiveram a relação entre a velocidade da gota e o número de capilaridade e a velocidade da gota e a espessura de filme entre a gota e a parede do canal bidimensional para diversos valores de razão de viscosidade, o que permitiu comparar com as teorias de [Bretherton \(1961\)](#) e [Hodges, Jensen e Rallison \(2004\)](#), apresentando boa concordância.

Processos de formação, manipulação e mistura de gotas têm sido uma área em constante crescimento em virtude das inúmeras aplicações industriais, tecnológicas e médicas, em que dispositivos microfluídicos têm sido cada vez mais relevantes para esse uso. A exemplo de processos que podem se aproveitar desses dispositivos podem-se citar processos biológicos como análise de DNA, encapsulamento e dissolução de células, reações químicas como fluoração, sulfonação e oxidação, entre outros ([GÜNTHER; JENSEN, 2006](#)). Com isso em vista, um dos dispositivos microfluídicos mais importantes para esses processos são as junções em T, sendo o tipo de junção em T de interesse para este trabalho a junção em T simétrica divergente. Para entender o comportamento de gotas e bolhas ao longo dessas juntas, vários experimentos e simulações numéricas foram realizados, além de algumas teorias para regimes específicos de escoamento que também foram elaboradas. [Leshansky e Pismen \(2009\)](#) propuseram uma teoria de ruptura de gotas em juntas em T 2D combinando uma construção geométrica do formato da gota com uma análise de lubrificação para um filme estreito entre a superfície da gota e a parede próximo do momento da ruptura da gota. Essa teoria teve sua validade comprovada a partir de simulações numéricas para pequenos números de capilaridade, mas também mostrou bons resultados para moderados números de capilaridade. Em consequente, [Jullien et al. \(2009\)](#) e [Fu et al. \(2011\)](#) realizaram experimentos de ruptura de gotas e bolhas, respectivamente, em juntas

em T e obtiveram boa concordância com a teoria de [Leshansky e Pismen \(2009\)](#). Além disso, [Jullien et al. \(2009\)](#) observaram 3 regimes de ruptura de gotas, apresentados na [Figura 3](#), cuja manifestação de cada um depende do tamanho alongado e do número de capilaridade da gota.

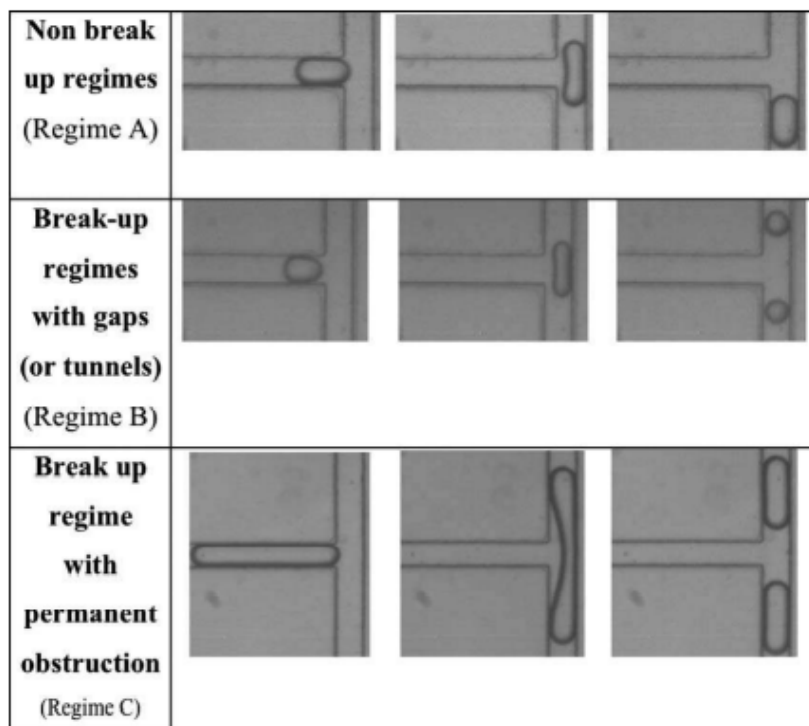


Figura 3 – A) Regime sem ruptura, B) Regime de ruptura com túneis, C) Regime de ruptura com obstrução permanente ([JULLIEN et al., 2009](#))

O processo de ruptura de gotas também foi intensivamente estudado do ponto de vista computacional por [Afkhami, Leshansky e Renardy \(2011\)](#), os quais confirmaram a teoria de [Leshansky e Pismen \(2009\)](#) para razões de viscosidade arbitrárias no limite de baixo número de capilaridade. Foi constatado, também, que a "lei de ruptura" de gotas obedece a relação obtida por [Leshansky e Pismen \(2009\)](#) para a extensão da gota em função do número de capilaridade para outras razões de viscosidade, precisando ser corrigida apenas por um coeficiente de ordem unitária a depender da razão de viscosidade.

2 Fundamentação Teórica

2.1 Ferramentas matemáticas úteis

2.1.1 Teorema da Divergência de Gauss

Seja \mathcal{R} uma região fluida e supõe-se que $V(t)$ seja um volume de \mathcal{R} , S a superfície que delimita esse volume e \mathcal{F} um campo vetorial contínuo e diferenciável definido na vizinhança de $V(t)$, então,

$$\oint_S \mathcal{F} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \nabla \cdot \mathcal{F} dV. \quad (2.1)$$

Nota-se que essa expressão faz a equivalência entre a integral de superfície de um campo vetorial que atravessa a superfície com a integral no volume do divergente desse campo vetorial.

2.1.2 Teorema da Localização

Seja $\mathcal{R}(t)$ uma região fluida tridimensional arbitrária fechada e $\phi(\mathbf{x}, t)$ uma função escalar. O Teorema da Localização (também conhecido como Lema de du Bois-Reymond) estabelece que se $V(t)$ é um volume de controle arbitrário de $\mathcal{R}(t)$ e

$$\int_V \phi(\mathbf{x}, t) dV = 0 \quad (2.2)$$

então

$$\phi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.3)$$

em $\mathcal{R}(t)$. Este resultado também é válido para campos vetoriais e tensoriais (LOPES, 2020).

2.1.3 Teorema de Transporte de Reynolds

Se $V(t)$ é uma região fluida tridimensional fechada limitada por uma superfície $S(t)$ que se move com velocidade \mathbf{u} , \mathbf{x} é o vetor posição, e $\phi(\mathbf{x}, t)$ é uma função escalar,

então o Teorema de Transporte de Reynolds estabelece que

$$\frac{D}{Dt} \int_V \phi(\mathbf{x}, t) dV = \int_V \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \oint_S (\phi \mathbf{u}) \cdot n dS. \quad (2.4)$$

Em outras palavras, esse teorema relaciona a derivada material da integral de ϕ num volume com a integral da taxa de variação local de ϕ no volume adicionado ao fluxo de saída de ϕ através da superfície S que delimita o volume.

Aplicando o Teorema da Divergência de Gauss à Eq. (2.4) e reunindo as duas integrais no volume, obtém-se

$$\frac{D}{Dt} \int_V \phi(\mathbf{x}, t) dV = \int_V \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) \right] dV. \quad (2.5)$$

2.1.4 Colorário da Equação da Continuidade

Considere $\varphi(\mathbf{x}, t)$ uma função arbitrária. Então, pelo colorário,

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho \varphi dV = \int_V \frac{D}{Dt} \rho \varphi dV. \quad (2.6)$$

O mesmo resultado também é válido para função vetorial ou tensorial (LOPES, 2020). Por sua vez, a Equação da Continuidade em si será abordada em uma seção futura.

2.2 Equações Governantes

2.2.1 Conservação da Massa

Considera-se uma superfície fechada $S(t)$ que envolve um volume $V(t)$ totalmente preenchido por fluido. Se ρ é a massa específica do fluido na posição \mathbf{x} e no instante t , a massa de fluido confinado pela superfície S é dada por (BATCHELOR, 2000)

$$m = \int_V \rho dV. \quad (2.7)$$

A taxa de variação de massa, portanto, é dada por

$$\frac{Dm}{Dt} = \frac{D}{Dt} \int_V \rho dV. \quad (2.8)$$

No caso em que não há fonte ou sumidouro adicionando ou retirando massa do volume V , a massa de fluido no interior do volume delimitado por S se conserva, portanto $\frac{Dm}{Dt} = 0$, logo tem-se que

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho dV = 0, \quad (2.9)$$

e, aplicando o Teorema de Transporte de Reynolds, obtém-se

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] dV = 0. \quad (2.10)$$

Por sua vez, o Teorema da Localização estabelece que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.11)$$

e é válida para todos os pontos do fluido. Além disso, a Eq. (2.11) tem validade para qualquer $\rho(\mathbf{x}, t)$ e é chamada de *Equação da Continuidade*.

No entanto, para fluidos incompressíveis, ou seja, aqueles cuja densidade não varia no tempo nem no espaço, a Equação da Continuidade resume-se a

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.12)$$

uma vez que $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ e $\nabla \rho = \mathbf{0}$.

2.2.2 Equação da Quantidade de Momento Linear

Considera-se o mesmo volume fluido $V(t)$ delimitado pela região $S(t)$ citado anteriormente. Pela segunda lei de Newton, sabe-se que a força resultante \mathbf{f} aplicada num elemento de fluido de massa m é igual à taxa temporal de variação do seu momento linear, ou seja,

$$\mathbf{f} = \frac{D\mathbf{q}}{Dt}, \quad (2.13)$$

em que \mathbf{q} é o momento linear do elemento de massa m de fluido e é dado por

$$\mathbf{q} = \int \mathbf{u} dm. \quad (2.14)$$

Para computar o momento linear total da região fluida, basta integrar em todo o volume $V(t)$:

$$\mathbf{q} = \int_V \rho \mathbf{u} dV. \quad (2.15)$$

Substituindo a Eq. (2.15) na Eq. (2.13), tem-se

$$\mathbf{f} = \frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV. \quad (2.16)$$

Pelo Corolário da Equação da Continuidade,

$$\mathbf{f} = \int_V \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} dV. \quad (2.17)$$

É conhecido que as forças atuantes na região fluida se dividem em forças de campo e forças de superfície, de modo que

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_{superfície} + \mathbf{f}_{campo}. \quad (2.18)$$

em que as forças de superfície podem ser obtidas integrando o *vetor de tensões* ao longo da superfície $S(t)$, ou seja,

$$\mathbf{f}_{superfície} = \oint_S \mathbf{t} dS, \quad (2.19)$$

donde $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões, logo

$$\mathbf{f}_{superfície} = \oint_S \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} dS. \quad (2.20)$$

Considerando que a força gravitacional é a única força de campo atuante, tem-se

$$\mathbf{f}_{campo} = \int_V \rho \mathbf{g} dV. \quad (2.21)$$

Substituindo a Eq.(2.17), (2.20) e (2.21) na Eq. (2.18), encontra-se

$$\int_V \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} dV = \oint_S \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} dS + \int_V \rho \mathbf{g} dV. \quad (2.22)$$

Aplicando o Teorema da Divergência à integral de superfície,

$$\oint_S \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} dS = \int_V \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV, \quad (2.23)$$

donde segue que

$$\int_V \left[\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \rho \mathbf{g} \right] dV = 0. \quad (2.24)$$

. Aplicando o *Teorema da Localização* e rearranjando a expressão, obtém-se a *Equação do Movimento de Cauchy*, dada por

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}. \quad (2.25)$$

O tensor $\boldsymbol{\sigma}$ é denominado *tensor de tensão de Cauchy* e caracteriza o estado de tensão de um material em um ponto, portanto depende da natureza do material. Para o caso de fluidos Newtonianos, isto é, que atendem os seguintes critérios:

- A relação entre τ_{ij} e $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ é linear;
- O fluido é homogêneo;
- A relação entre τ_{ij} e os gradientes de velocidade é isotrópica, ou seja, as propriedades físicas do fluido não variam com a direção;

- O tensor de tensões é simétrico, isto é, $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$.

o tensor de tensões de Cauchy resume-se a

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}, \quad (2.26)$$

em que $p = (x, t)$ é o campo de pressão, \mathbf{I} é a matriz identidade e μ é a viscosidade dinâmica do fluido. Além disso, da Eq. (2.26), identifica-se $-p\mathbf{I}$ como a pressão estática, $\mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right]$ como o termo das tensões de cisalhamento e $-\frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}$ como o termo das tensões viscosas normais. Substituindo esse tensor na Eq. (2.25), tem-se

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \right\} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.27)$$

a qual é designada *Equação de Navier-Stokes*.

O tensor de tensões ainda pode ser simplificado para o caso de escoamento incompressível ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$) com viscosidade constante, levando à *Equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis*, dada por

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.28)$$

donde identifica-se

- $\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt}$: força de inércia;
- $\mu \nabla^2 \mathbf{u}$: força viscosa;
- $-\nabla p$: força de pressão;
- $\rho \mathbf{g}$: força gravitacional,

em que todas elas são dadas por unidade de volume.

2.2.3 Tensão interfacial

Considera-se dois fluidos imiscíveis separados por uma interface Γ . Na presença de curvatura nessa interface, ocorre um salto de pressão entre os dois fluidos em decorrência da tensão interfacial. Esse salto de pressão é entendido como uma diferença de pressão na direção normal para fora da superfície como representada na Figura 4 e descrita pela *Equação de Young-Laplace* dada por

$$\Delta p_\Gamma = -\gamma \kappa, \quad (2.29)$$

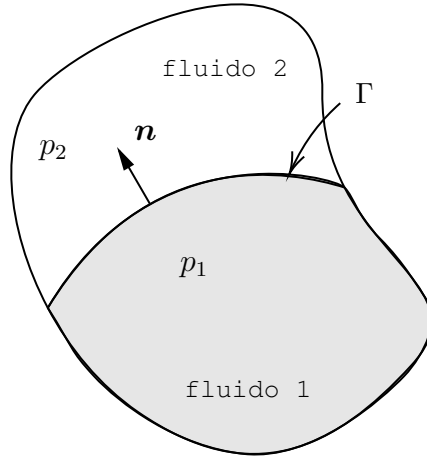


Figura 4 – Volume composto por dois fluidos separados por uma interface.

em que γ é a tensão superficial e κ é a curvatura da interface. Para que a tensão interfacial seja inserida na Equação de Navier-Stokes, é necessário que esse salto de tensão seja localizado na região fluida, isto é, a diferença de pressão deve assumir valor não-nulo somente na interface. Para tanto, é introduzida a função *Delta de Dirac* definida por

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) = \begin{cases} \infty, & \mathbf{x} = \mathbf{x}_\Gamma \\ 0, & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_\Gamma, \end{cases} \quad (2.30)$$

com a qual define-se o gradiente do salto de tensão

$$\nabla p_\Gamma = -\gamma\kappa\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma)\mathbf{n}, \quad (2.31)$$

em que \mathbf{n} é a direção normal na qual ocorre a diferença de pressão entre os fluidos. Uma vez desenvolvido a contribuição da tensão interfacial na forma de um gradiente de pressão, soma-se a Eq. (2.31) à Eq. (2.28) de forma a obter

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} - \gamma\kappa\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma)\mathbf{n}, \quad (2.32)$$

a qual modela o escoamento de fluidos imiscíveis com a presença de uma interface de separação Γ .

2.3 Condições de contorno de uma junção em T

2.3.1 Nas paredes

Escoamentos confinados por paredes imóveis obedecem a condição de não-deslizamento nas paredes, isto é

$$\mathbf{u} = 0. \quad (2.33)$$

Além disso, o gradiente de pressão na direção das paredes é nulo, de modo que

$$\nabla p \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (2.34)$$

dado pela condição de impenetrabilidade de fluido através das paredes.

2.3.2 Na região de entrada da junta

Na região de entrada de uma junta, a velocidade é definida e igual a U , portanto, considerando uma superfície permeável na região de entrada, a condição de contorno é dada por

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = U. \quad (2.35)$$

2.3.3 Na região de saída da junta

Já na região de saída da junta, é esperado a continuidade do escoamento, portanto não há alteração na velocidade do fluido na direção de saída, ou seja,

$$\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (2.36)$$

2.4 Método de Level Set

A existência de um escoamento bifásico com a presença de uma interface móvel - como no caso das emulsões - cria a necessidade de se implementar alguma técnica para capturar a posição dessa interface. Com esse objetivo, o *Método de Level Set*, popularizado por [Osher e Sethian \(1988\)](#), permite calcular numericamente a posição da interface no domínio considerado e sua geometria. Uma das grandes vantagens desse método é que, além de ser de fácil implementação, lidar com fenômenos de ruptura e coalescência de gotas é uma de suas capacidades. Para um escoamento com uma gota delimitada por uma interface Γ , define-se uma função $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$, chamada de *Level Set*, a qual mede a menor distância de cada ponto do domínio do escoamento em relação à interface de modo que

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}, t) > 0, & \mathbf{x} \in \Omega^+ \\ \phi(\mathbf{x}, t) = 0, & \mathbf{x} \in \Gamma \\ \phi(\mathbf{x}, t) < 0, & \mathbf{x} \in \Omega^- \end{cases} \quad (2.37)$$

em que Ω^+ é a região do domínio do lado externo da gota e Ω^- é a região do lado interno conforme apresentado na Figura 5.

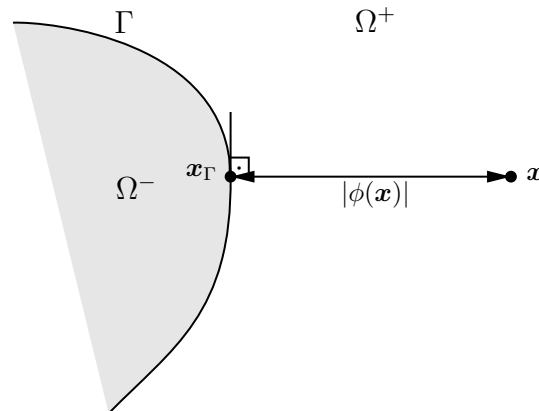


Figura 5 – Representação da função Level Set.

Como a interface faz parte do escoamento, ela se movimenta de acordo com \mathbf{u} e obedece a expressão $\phi(\mathbf{x}, t) = 0$, portanto é possível obter a equação evolutiva de ϕ derivando essa mesma expressão em relação ao tempo tal que

$$\frac{D\phi}{Dt} = 0 \quad (2.38)$$

ou

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = 0. \quad (2.39)$$

Percebe-se que a evolução de ϕ se dá a partir de uma equação adjectiva, a qual exige técnicas mais sofisticadas para encontrar sua solução numérica tais como esquemas *upwinding*. Além disso, é esperado que $\nabla\phi$ seja normal à interface (visto que ϕ é a menor distância de um ponto até a interface e essa distância aumenta à medida que se afasta dela), logo pode-se definir o vetor normal como

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}. \quad (2.40)$$

Sabendo disso, pode-se definir a curvatura da interface em termos de ϕ , uma vez que

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}, \quad (2.41)$$

logo

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right). \quad (2.42)$$

Para acoplar o Level Set à Equação de Navier-Stokes, é preciso associar ϕ ao termo da tensão superficial. Para tanto, pode-se definir a função Delta de Dirac em função de ϕ juntamente de uma função *Heaviside* $H(\phi)$, a qual se relaciona com o Delta de Dirac por meio da equação

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) = \nabla H(\phi) \cdot \mathbf{n} \quad (2.43)$$

para pontos na interface, uma vez que nela $\phi = 0$ e $\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma = 0$. Expandindo com a regra da cadeia, tem-se

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) = H'(\phi(\mathbf{x}))\nabla\phi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = H'(\phi(\mathbf{x}))\nabla\phi(\mathbf{x}) \cdot \frac{\nabla\phi(\mathbf{x})}{|\nabla\phi(\mathbf{x})|}. \quad (2.44)$$

Simplificando, $\nabla\phi \cdot \nabla\phi = |\nabla\phi|^2$ e, por definição, $H'(\phi) = \delta(\phi)$, o que resulta em

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) = \delta(\phi)|\nabla\phi|. \quad (2.45)$$

É conveniente estabelecer $|\nabla\phi| = 1$, a fim de facilitar a implementação do Level Set. Sendo assim,

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Gamma) = \delta(\phi). \quad (2.46)$$

Com a finalidade de suavizar o salto de pressão na interface da gota, define-se $H(\phi)$ de modo que

$$H(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{se } \phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \text{sen} \frac{\pi\phi}{\epsilon} \right], & \text{se } -\epsilon \leq \phi \leq \epsilon \\ 1, & \text{se } \phi > \epsilon, \end{cases} \quad (2.47)$$

em que ϵ é metade da espessura da interface.

Por sua vez, o Delta de Dirac é dado por

$$\delta(\phi) = \frac{\partial H(\phi)}{\partial \phi} = \begin{cases} 0, & \text{se } \phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon} \left[1 + \cos \frac{\pi\phi}{\epsilon} \right], & \text{se } -\epsilon \leq \phi \leq \epsilon \\ 0, & \text{se } \phi > \epsilon. \end{cases} \quad (2.48)$$

Sabendo que $\mathbf{n} = \nabla\phi$ (para $|\nabla\phi| = 1$), finalmente é possível reescrever a Eq. (2.32) com a tensão interfacial em termos de ϕ para capturar a posição da interface:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} - \gamma \kappa \delta(\phi) \nabla\phi. \quad (2.49)$$

2.4.1 Pressão modificada

Para simplificar a Equação de Navier-Stokes e reduzir um termo da equação, é conveniente introduzir o conceito da pressão modificada. Como a força gravitacional $\rho \mathbf{g}$ é

uma força conservativa, há uma função potencial (que nada mais é que a energia potencial) associada tal que

$$\rho \mathbf{g} = \nabla U_g, \quad (2.50)$$

em que $U_g = \rho g y$ (considerando que a aceleração gravitacional está na direção do eixo y). Substituindo a Eq. (2.50) na Eq. (2.49), tem-se

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla U_g - \gamma \kappa \delta(\phi) \nabla \phi, \quad (2.51)$$

na qual os dois gradientes do lado direito da igualdade podem ser somados, obtendo-se

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla(p + \rho g y) + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \gamma \kappa \delta(\phi) \nabla \phi, \quad (2.52)$$

donde se tira que

$$-\nabla(p + \rho g \Delta y) = -\nabla p', \quad (2.53)$$

em que $p' = p + \rho g y$ é a pressão modificada. No entanto, a escrita com '(aspas simples) será suprimida para simplificar a notação daqui em diante. Por fim,

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \gamma \kappa \delta(\phi) \nabla \phi. \quad (2.54)$$

2.4.2 Adimensionalização

Adimensionalizar o problema é uma boa prática quando se trabalha com equações com vários parâmetros, uma vez que a adimensionalização permite reduzir o número de parâmetros e definir grandezas adimensionais que facilitam o estudo e análise do problema como as que serão definidas adiante. Inicialmente, define-se os seguintes parâmetros adimensionais:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{u_c}; \quad \tilde{t} = \frac{t}{t_c}; \quad \tilde{p} = \frac{p}{p_c}; \quad \tilde{\nabla} = \frac{\nabla}{\nabla_c}; \quad \tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{\kappa_c} \quad \text{e} \quad \tilde{\delta} = \frac{\delta}{\delta_c},$$

em que u_c , t_c , p_c , ∇_c , κ_c e δ_c são grandezas características do problema dadas por

$$u_c = U; \quad t_c = H/U; \quad p_c = \rho U^2 \quad \text{e} \quad \nabla_c = \kappa_c = \delta_c = 1/H;$$

em que U é a velocidade na região de entrada da junção em T e H a largura do canal da junta em T.

Antes de iniciar a adimensionalização, expande-se a derivada material da Eq. (2.54)

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \gamma \kappa \delta(\phi) \nabla \phi. \quad (2.55)$$

Inserindo os parâmetros adimensionais, tem-se

$$\frac{\rho U^2}{H} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}} \right] = -\frac{\rho U^2}{H} \tilde{\nabla} \tilde{p} + \frac{\mu U}{H^2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{u}} - \frac{1}{H^2} \gamma \tilde{\kappa} \tilde{\delta}(\phi) \nabla \phi. \quad (2.56)$$

Vale lembrar que $\nabla\phi$ não sofreu alterações, pois já se encontra adimensional. Realizando todas as manipulações algébricas necessárias, obtém-se

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}} = -\tilde{\nabla} \tilde{p} + \frac{1}{Re} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{u}} - \frac{1}{Re Ca} \tilde{\kappa} \tilde{\delta}(\phi) \nabla \phi. \quad (2.57)$$

em que Re é o *Número de Reynolds* definido como

$$Re = \frac{\rho U R}{\mu} \quad (2.58)$$

e pode ser interpretado como a razão entre as forças de inércia e as forças viscosas. Já o parâmetro Ca é o *Número de Capilaridade* definido como

$$Ca = \frac{\mu U}{\gamma}, \quad (2.59)$$

o qual é entendido como a razão entre as forças viscosas e as forças capilares.

Uma outra adimensionalização comumente utilizada no estudo de escoamentos bi-fásicos pode ser obtida a partir da definição de mais um parâmetro adimensional chamado de razão de viscosidades expresso por

$$\lambda = \frac{\mu_{int}}{\mu_{ext}}, \quad (2.60)$$

em que μ_{int} e μ_{ext} são a viscosidade dinâmica do fluido da gota e do fluido externo, respectivamente. Utilizando este parâmetro juntamente dos definidos anteriormente na (2.54), obtém-se

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{u}} = -\tilde{\nabla} \tilde{p} + \frac{\lambda}{Re} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\mathbf{u}} - \frac{1}{Re Ca} \tilde{\kappa} \tilde{\delta}(\phi) \nabla \phi. \quad (2.61)$$

Por fim, o til sinalizando as grandezas adimensionais será suprimido para aliviar a notação.

Por sua vez, a Equação da Continuidade, para escoamento incompressível, mantém o mesmo formato após adimensionalizada. Então, depois de suprimir o til, ela se mantém como a Eq. (2.12).

3 Metodologia

3.1 Método de Diferenças Finitas

O Método de Diferenças Finitas é uma ferramenta matemática usado para a discretização de equações diferenciais através de aproximações de derivadas por diferenças finitas. É chamado assim, pois a formulação pode ser obtida por uma expansão em série de Taylor de uma função $f(x)$ em torno de um ponto $x + \Delta x$, o que leva a expressar $f^{(n)}(x)$ como uma diferença de termos finitos, admitindo um erro cuja ordem está associado ao truncamento. Portanto, expandindo $f(x + \Delta x)$, tem-se

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{f''(x)(\Delta x)^2}{2} + \frac{f'''(x)(\Delta x)^3}{6} + \mathcal{O}((\Delta x)^4), \quad (3.1)$$

em que $\mathcal{O}((\Delta x)^4)$ é o termo de erro de 4º ordem, associado ao truncamento dos termos de ordem superior a este.

A partir da Eq. (3.1), tem-se

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x), \quad (3.2)$$

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x), \quad (3.3)$$

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (3.4)$$

e

$$f''(x) = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.5)$$

em que as Eqs. (3.2), (3.3) e (3.4) são aproximações das derivadas primeiras adiantadas, atrasadas e centradas, respectivamente. Já a Eq. (3.5) é a aproximação da derivada segunda. Percebe-se que as derivadas primeira centrada e segunda têm precisão de segunda ordem, portanto são as que mais minimizam o erro dentre as aproximações apresentadas.

3.2 Malha defasada

Para a utilização do Método de Diferenças Finitas, é necessário discretizar o domínio, ou seja, reparti-lo num número finito de pontos, compondo uma malha. No presente trabalho, utilizou-se a malha deslocada utilizada por [Kim e Moin \(1985\)](#), onde as componentes vetoriais (velocidades) são dispostas nas arestas da célula e as componentes escalares (pressão) são colocadas no centro da célula, como bem apresentado na [Figura 6](#).

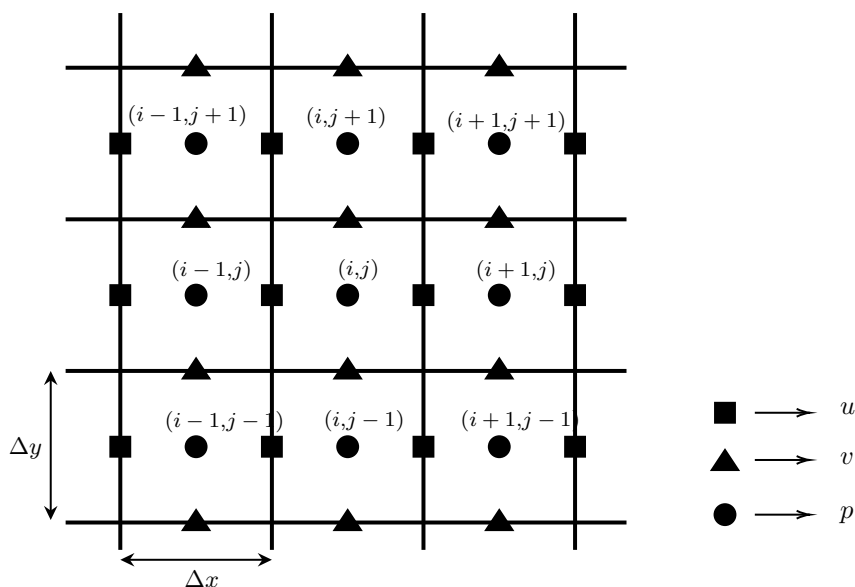


Figura 6 – Malha defasada.

Após a discretização, as aproximações das derivadas por diferenças finitas são escritas

$$f'_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x} \quad \text{ou} \quad f'_{i,j} = \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j}}{\Delta y}, \quad (3.6)$$

$$f'_{i,j} = \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x} \quad \text{ou} \quad f'_{i,j} = \frac{f_{i,j} - f_{i,j-1}}{\Delta y}, \quad (3.7)$$

$$f'_{i,j} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} \quad \text{ou} \quad f'_{i,j} = \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2\Delta y} \quad (3.8)$$

e

$$f''_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \quad \text{ou} \quad f''_{i,j} = \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{(\Delta y)^2}, \quad (3.9)$$

em que $f_{i,j}$ pode ser as componentes u , v e p calculadas na posição (i, j) da malha e $f'_{i,j}$ a derivada das componentes calculadas em relação a x ou y .

3.3 Técnica para representar a junção em T

Para modelar a junção em T, foi criado um domínio retangular $L_x \times L_y$ com a malha defasada apresentada na Figura 6. A técnica utilizada para conferir o formato de T ao escoamento consistiu em anular o campo de velocidade e de pressão nas regiões fora do domínio Ω^+ , conforme apresentado na Figura 7. Como trata-se de uma imposição, chamou-se esta técnica de Força Bruta, a qual é aplicada nas condições de contorno do problema. Uma outra limitação da implementação atual - mas que pode ser alterada no futuro - reside na definição do tamanho da junta. A região de entrada e de saída foram definidas como $1/3$ de L_x (para a região de entrada ou L_y (para a região de saída)). Portanto, para alterar o valor dessas regiões, tem-se que alterar o tamanho do domínio retangular como um todo.

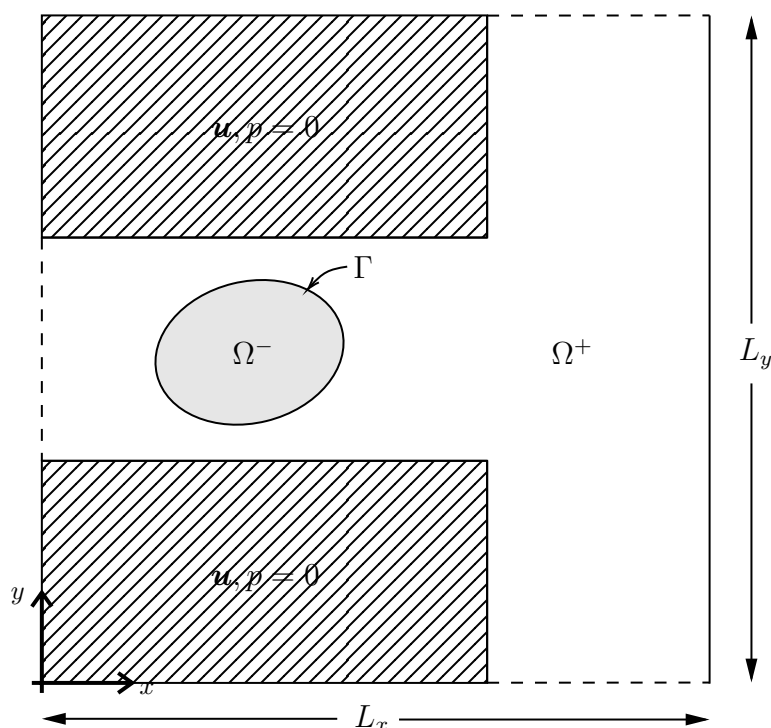


Figura 7 – Força bruta para representar o T em uma malha retangular.

3.4 Discretização temporal da Equação de Navier-Stokes

3.4.1 Método de Euler Explícito

Para a discretização no tempo das equações de Navier-Stokes, o Método de Euler é um dos mais recorrentes a ser utilizado. Empregando o método em sua versão explícita, as equações ficam:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^n - \nabla p^n + \frac{1}{Re} (\nabla^2 \mathbf{u})^n. \quad (3.10)$$

Considerando que o estado anterior de \mathbf{u} é n , então os novos valores a serem calculados são os termos $n + 1$. Dessa forma, pode-se calcular facilmente o termo em $n + 1$, uma vez que ele depende unicamente de termos anteriores em n .

3.4.2 Método de Euler Implícito

Por sua vez, a formulação implícita é escrita como:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+1} - \nabla p^{n+1} + \frac{1}{Re} [\nabla^2 \mathbf{u}]^{n+1}, \quad (3.11)$$

cuja diferença reside no fato de que o cômputo dos termos em $n + 1$ depende tanto de termos anteriores em n quanto de termos em $n + 1$, portanto chega-se num sistema linear a ser resolvido. A complexidade adicional embutida neste método é justificada quando a versão explícita exige passos de tempo absurdamente pequenos para manter a estabilidade numérica do método, o que já não é grande problema para a formulação implícita.

3.4.3 Método de Crank-Nicolson

O Método de Crank-Nicolson é semelhante ao Método de Euler com a diferença de que trata-se de um método de segunda ordem por utilizar uma aproximação por derivada centrada. Invés da derivada temporal depender dos termos em $n + 1$ ou n , este método utiliza os termos centrais $n + \frac{1}{2}$. Dessa forma, a equação de Navier-Stokes fica:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+\frac{1}{2}} - \nabla p^{n+1} + \frac{1}{Re} [\nabla^2 \mathbf{u}]^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.12)$$

3.5 Método de Projeção

Uma das maiores dificuldades de se resolver as equações de Navier-Stokes se deve ao fato de que velocidade e pressão são duas variáveis dependentes entre si, ou seja, para encontrar o campo de velocidade, é necessário conhecer-se o campo de pressão a cada passo de tempo. Uma das formas de contornar essa dificuldade, é a utilização do *Método de Projeção*, proposto por [Chorin \(1968\)](#), cujo objetivo é desacoplar a pressão da velocidade. Para isso, o método propõe dividir as equações de Navier-Stokes em duas, em que uma delas carrega o campo de velocidade e a outra carrega o campo de pressão. Além disso, faz-se uso de um vetor auxiliar, \mathbf{u}^* , chamado de velocidade tentativa que não se trata do campo de velocidade real do escoamento, mas uma velocidade intermediária a ser calculada num dos passos do método.

3.5.1 Formulação explícita

A Método da Projeção explícito consiste em substituir \mathbf{u}^{n+1} por \mathbf{u}^* e associar ∇p^n a uma segunda equação de forma que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^n + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^n \\ \text{e} \\ \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla p^n. \end{array} \right. \quad (3.13a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^n + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^n \\ \text{e} \\ \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla p^n. \end{array} \right. \quad (3.13b)$$

Somando-se as Eqs. (3.13a) e (3.13b), retorna-se a Eq. (3.10), portanto é observado que o método trabalha a mesma equação com uma abordagem diferente.

Tomando o divergente de ambos os lados da Eq. (3.13b), obtém-se

$$\nabla \cdot \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla^2 p^n, \quad (3.14)$$

mas, dada a incompressibilidade do escoamento, isto é,

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (3.15)$$

obtem-se uma equação diferencial para a pressão dada por

$$\nabla^2 p^n = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t}, \quad (3.16)$$

a qual pode ser resolvida empregando-se algum método de resolução de sistemas lineares (a ser discutido posteriormente) aliado ao Método das Diferenças Finitas para a discretização espacial. Após a determinação de u^* e p , o campo de velocidade é evoluído a partir de

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla p^n. \quad (3.17)$$

3.5.2 Formulação implícita

A Método da Projeção implícito consiste em substituir \mathbf{u}^{n+1} por \mathbf{u}^* e $\nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}$ por $\nabla^2 \mathbf{u}^*$, além de associar o campo de pressão com uma variável auxiliar numa segunda equação. Desse modo, segue que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+1} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^* \\ \text{e} \\ \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla \chi^{n+1}, \end{array} \right. \quad (3.18a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+1} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^* \\ \text{e} \\ \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla \chi^{n+1}, \end{array} \right. \quad (3.18b)$$

em que χ é uma pressão auxiliar necessária nesta implementação a ser corrigida, uma vez que ao somar as Eqs. (3.18a) e (3.18b), obtêm-se

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+1} - \nabla \chi^{n+1} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^*, \quad (3.19)$$

mas $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \nabla \chi^{n+1}$, portanto

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+1} - \nabla \chi^{n+1} + \frac{1}{Re} \nabla^2 (\mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \nabla \chi^{n+1}). \quad (3.20)$$

Após as manipulações algébricas necessárias, chega-se em

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+1} - \nabla \left(\chi^{n+1} - \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{Re} \right) + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}, \quad (3.21)$$

donde nota-se que

$$p^{n+1} = \chi^{n+1} - \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{Re} \quad (3.22)$$

é a correção necessária no campo de pressão para retornar a formulação implícita da Eq. (3.11). O termo convectivo da Eq. (3.18b) pode ser obtido por uma extrapolação dada por

$$[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+1} = 2[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^n - [\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n-1}. \quad (3.23)$$

Para obter a equação para o campo de pressão auxiliar χ , toma-se o divergente dos dois lados da Eq. (3.18b) e faz $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$ de forma a encontrar

$$\nabla^2 \chi^{n+1} = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t}, \quad (3.24)$$

Tanto a Eq. (3.18b) quanto a Eq.(3.24) devem ser resolvidas por algum método de resolução de sistemas lineares juntamente da discretização espacial oferecida pelo Método das Diferenças Finitas.

Por fim, a evolução do campo de velocidade é dada por

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla \chi^{n+1}. \quad (3.25)$$

3.5.3 Formulação semi-implícita (Crank-Nicolson)

O método da projeção com a discretização de Crank-Nicolson utilizado foi proposto por [Brown, Cortez e Minion \(2001\)](#). De forma semelhante às formulações anteriores, tem-se

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2Re} \nabla^2 [\mathbf{u}^* + \mathbf{u}^n] \end{array} \right. \quad (3.26a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{e} \\ \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla \chi^{n+1}, \end{array} \right. \quad (3.26b)$$

em que χ é a pressão auxiliar igualmente corrigida pela Eq. (3.22). Por sua vez, o campo de velocidade é evoluído pela Eq. (3.25). Como o termo em $n + \frac{1}{2}$ não está definido na malha da [Figura 6](#), pode-se obtê-lo através de uma extrapolação no tempo utilizando termos em instantes já calculados como descrita por Adam-Bashforth tal que

$$[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} [\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^n - \frac{1}{2} [\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n-1}. \quad (3.27)$$

3.6 Introdução da gota

A introdução da gota requer a adição do termo relativo à tensão superficial. Para este caso, utilizou-se o Método de Projeção com a formulação semi-implícita de Crank-Nicolson. A Eq. (2.57), então, fica:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}]^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2Re} \nabla^2 [\mathbf{u}^* + \mathbf{u}^n] - \frac{1}{Re Ca} [\kappa \delta(\phi) \nabla \phi]^{n+\frac{1}{2}} \\ \text{e} \\ \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla \chi^{n+1}, \end{array} \right. \quad (3.28a)$$

$$(3.28b)$$

em que $[\kappa \delta(\phi) \nabla \phi]^{n+\frac{1}{2}}$ é obtido facilmente por interpolação. Nota-se que da Eq. (3.28a), o termo relativo à tensão superficial não depende de \mathbf{u}^* , portanto em nada irá influenciar na solução do sistema linear para a velocidade-tentativa, sendo somente mais um termo a ser somado. O campo de pressão auxiliar da Eq. (3.28b) é encontrado pela mesma Eq. (3.24) do método implícito.

3.7 Método de *Level Set* Local

A estrutura do método de *Level Set* utilizado foi a mesma utilizado por Peng et al. (1999), em que é introduzida uma função na Eq. (2.39) com o objetivo de fazer com que a função ϕ seja calculada somente próxima da superfície, evitando oscilações numéricas e esforço computacional desnecessário. Primeiramente, define-se uma espécie de tubo com largura λ ao redor da interface Γ , tal que

$$T = \{x : |\phi(x)| < \lambda\}. \quad (3.29)$$

Então, define-se $c(\phi)$, chamada de *cut-off*, de forma que

$$c(\phi) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\phi| \leq \beta \\ (|\phi| - \lambda)^2 (2|\phi| + \lambda - 3\beta) / (\lambda - \beta)^3, & \text{se } \beta < |\phi| \leq \lambda \\ 0, & \text{se } |\phi| > \lambda, \end{cases} \quad (3.30)$$

em que β delimita uma região dentro do tubo mais próxima à interface. O *cut-off* é útil, também, para suavizar ϕ nos arredores do tubo. Com a adição do *cut-off*, a Eq. (2.39) fica:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c(\phi) \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (3.31)$$

3.7.1 Esquemas WENO e ENO

Para a discretização espacial do termo convectivo da equação de Navier-Stokes e da equação evolutiva e de reinicialização do *Level Set*, foi utilizado os esquemas ENO e

WENO, uma vez que o Método das Diferenças Finitas é de baixa ordem e seu uso não é recomendado para os tipos de funções envolvidas no trabalho. Para começar, utilizou-se um esquema ENO de segunda ordem apresentado por [Osher e Fedkiw \(2004\)](#) para o termo convectivo da Eq. (2.57).

Para a componente de velocidade u e utilizando-se uma variável auxiliar k , em que $k = i - 1$ para o cálculo de u_x^- (derivada primeira atrasada de u em relação a x), ou $k = i$ para o cálculo de u_x^+ (derivada primeira adiantada de u em relação a x), define-se

$$\begin{cases} D_{k+\frac{1}{2}}^1 = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}, \\ D_k^2 = \frac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{2\Delta x}, \\ D_{k+1}^2 = \frac{u_{k+2} - 2u_{k+1} + u_k}{2\Delta x}. \end{cases}$$

A escolha de qual discretização utilizar tem-se como critério aquela que for mais suave, portanto define-se uma segunda variável b como $b = D_k^2$ para o caso em que $|D_k^2| > |D_{k+1}^2|$ ou como $b = D_{k+1}^2$ para o caso em que $|D_k^2| > |D_{k+1}^2|$. Deste modo, a aproximação para a derivada fica

$$\begin{cases} Q'_1 = D_{k+\frac{1}{2}}^1, \\ Q'_2 = b[2(i - k) - 1]\Delta x, \\ u_x = Q'_1 + Q'_2. \end{cases}$$

Para a componente de velocidade v , também valem as mesmas aproximações.

Para a aproximação das derivadas das equações provenientes do método de *Level Set*, é necessário uma discretização de ordem maior, visto que as aproximações de segunda ordem por meio do esquema ENO leva a maiores erros numéricos que culminam numa aparente perda de massa da gota. Dessa forma, utilizou-se o esquema WENO descrito por [Osher e Fedkiw \(2004\)](#), os quais utilizaram um estêncil de seis pontos para obter uma aproximação de quinta ordem. Este esquema, por sua vez, é uma média ponderada de todos os valores obtidos num esquema ENO, portanto, para o cálculo da derivada de ϕ , define-se os parâmetros v_1, v_2, v_3, v_4 e v_5 , tais que, para ϕ_x^+ (derivada primeira adiantada de ϕ em relação a x),

$$\begin{cases} v_1 = \frac{\phi_{i+3} - \phi_{i+2}}{\Delta x}, \\ v_2 = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}, \\ v_3 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}, \\ v_4 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}, \\ v_5 = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}, \end{cases}$$

e, para ϕ_x^- ,

$$\left\{ \begin{array}{l} v_1 = \frac{\phi_{i-2} - \phi_{i-3}}{\Delta x}, \\ v_2 = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}, \\ v_3 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}, \\ v_4 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}, \\ v_5 = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}. \end{array} \right.$$

Com os parâmetros devidamente definidos, para ambas as derivadas, define-se três aproximações possíveis para elas, obtidas por um esquema ENO de mesmo estêncil:

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_x^1 = \frac{v_1}{3} - \frac{7v_2}{6} + \frac{11v_3}{6}, \\ \phi_x^2 = -\frac{v_2}{6} + \frac{5v_3}{6} + \frac{v_4}{3}, \\ \phi_x^3 = \frac{v_3}{3} - \frac{5v_4}{6} - \frac{v_5}{6}. \end{array} \right.$$

A seguir, é feita uma média ponderada das três aproximações, porém, antes, é preciso definir os pesos de cada aproximação. Para tanto, define-se as suavidades dos estênceis associados a cada uma das aproximações como

$$\left\{ \begin{array}{l} S_1 = \frac{13}{12}(v_1 - 2v_2 + v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_1 - 4v_2 + 3v_3)^2, \\ S_2 = \frac{13}{12}(v_2 - 2v_3 + v_4)^2 + \frac{1}{4}(v_2 - v_4)^2, \\ S_3 = \frac{13}{12}(v_3 - 2v_4 + v_5)^2 + \frac{1}{4}(3v_3 - 4v_4 + v_5)^2, \end{array} \right.$$

as quais são utilizadas para calcular os parâmetros

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 = \frac{0,1}{(S_1 + \epsilon)^2}, \\ \alpha_2 = \frac{0,6}{(S_2 + \epsilon)^2}, \\ \alpha_3 = \frac{0,3}{(S_3 + \epsilon)^2}, \\ \epsilon = 10^{-6}. \end{array} \right.$$

Em seguida, os parâmetros α são normalizados pela soma dos três de forma que

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}, \\ \omega_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3}, \\ \omega_3 = \frac{\alpha_3}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \end{array} \right.$$

são os pesos a serem utilizados no esquema WENO para aproximar a derivada de ϕ . Assim, tem-se que

$$\phi_x = \omega_1 \phi_x^1 + \omega_2 \phi_x^2 + \omega_3 \phi_x^3. \quad (3.32)$$

3.7.2 Reinicialização do *Level Set*

Para garantir que a função do *Level Set* se mantenha como uma função distância dos pontos nas proximidades da interface durante toda a simulação, é necessário empregar um mecanismo de reinicialização de ϕ . Desse modo, implementou-se o algoritmo de reinicialização utilizado por Peng et al. (1999) baseado na solução da equação de Hamilton-Jacobi que se segue:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + S(\phi)(|\nabla \phi| - 1) = 0, \quad (3.33)$$

em que $S(\phi)$ é uma função sinal e τ é um tempo virtual, cuja configuração utilizada no passo de tempo virtual foi $\Delta \tau = \frac{1}{2} \Delta x$. A função sinal, por sua vez, foi aproximada como

$$S(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + D\phi^2 \Delta x^2}}, \quad (3.34)$$

donde segue que

$$D\phi = \sqrt{\left[\frac{\partial \phi}{\partial x}\right]^2 + \left[\frac{\partial \phi}{\partial y}\right]^2}, \quad (3.35)$$

cujas derivadas podem ser aproximadas por Diferenças Finitas de primeira ordem.

Embora seja de suma importância para a conservação do *Level Set* como uma função distância para todos os pontos, a sua reinicialização pode gerar erros numéricos e interferir na conservação de volume da gota, portanto foi necessário estabelecer uma frequência de reinicializações, cuja escolha deve ser orientada pelo número mínimo de reinicializações para que ϕ seja mantida como uma função distância. No presente trabalho, foi configurado uma repetição de 3 vezes para a reinicialização a cada passo de tempo Δt .

3.7.3 Discretização temporal da equação evolutiva e de reinicialização

Para a evolução no tempo da equação de ϕ e da equação da reinicialização, foi utilizado um esquema TVD *Runge-Kutta* de terceira ordem, como recomendado por Peng et al. (1999). O uso desse se deve ao fato de que as equações a serem evoluídas possuem condições de estabilidade fortemente atreladas a esquemas de *upwinding*, dispensando o uso de métodos implícitos (como o de Euler implícito ou o semi-implícito de Crank-Nicolson). Outra vantagem do uso de um esquema de *Runge-Kutta* está no fato de que este é um método explícito, aliviando o custo computacional com a solução de sistemas lineares. Assim, para implementar este método, define-se uma equação genérica

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L(\phi, t). \quad (3.36)$$

em que $L(\phi, t)$ é um operador genérico dado por

$$\begin{cases} L(\phi, t) = -\mathbf{u}(t) \cdot \nabla \phi, & \text{para a evolução de } \phi, & (3.37a) \\ L(\phi) = S(\phi)(|\nabla \phi| - 1), & \text{para a reinicialização de } \phi. & (3.37b) \end{cases}$$

Dessa forma, a função *Level Set* aproximada em passos de tempo entre n e $n + \frac{3}{2}$ é

$$\begin{cases} \phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t L(\phi^n, t^n), \\ \phi^{n+2} = \phi^{n+1} + \Delta t L(\phi^{n+1}, t^n + \Delta t), \\ \phi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{4}\phi^n + \frac{1}{4}\phi^{n+2}, \\ \phi^{n+\frac{3}{2}} = \phi^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t L(\phi^{n+\frac{1}{2}}, t^n + \frac{1}{2}\Delta t), \\ \phi^{n+1} = \frac{1}{2}\phi^n + \frac{2}{3}\phi^{n+\frac{3}{2}}. \end{cases}$$

3.8 Método de solução de sistemas lineares

Como comentado anteriormente, as equações resultados do método da projeção com uma discretização temporal implícita e de Crank-Nicolson resultam em sistemas lineares para o campo de velocidade tentativa \mathbf{u}^* e para o campo de pressão auxiliar Ξ . Para tanto, optou-se por utilizar o Método do Gradiente Conjugado Pré-Condicionado.

3.8.1 Método do Gradiente Conjugado Pré-Condicionado

Este método usa um preconditionador do tipo SSOR e soluciona o sistema linear do tipo

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (3.38)$$

em que \mathbf{A} é uma matriz positiva definida, isto é, $x^T A x > 0 \forall x \neq 0$ e seus autovalores são maiores que zero. Dessa forma, para a implementação do método, tem-se

- \mathbf{r} : é o resíduo da iteração;
- \mathbf{M} : é a matriz pré-condicionadora;
- \mathbf{z} : é o resíduo pós multiplicado pela matriz condicionadora;
- β : é o erro.

O algoritmo do Método do Gradiente Conjugado, portanto, fica:

1. $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$;
2. $\mathbf{z}^0 = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{r}^0$;
3. $\mathbf{d}^0 = \mathbf{z}^0$;
4. $\alpha = \frac{\mathbf{r}^k \cdot \mathbf{z}^k}{\mathbf{d}^k \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{d}^k}$;

5. $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k$;
6. $\mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{A}^k - \alpha \mathbf{A} \cdot \mathbf{d}^k$;
7. $\mathbf{z}^{k+1} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{r}^{k+1}$;
8. $\beta = \frac{\mathbf{r}^{k+1} \cdot \mathbf{z}^{k+1}}{\mathbf{r}^k \cdot \mathbf{z}^k}$;
9. $\mathbf{d}^{k+1} = \mathbf{z}^{k+1} + \beta \mathbf{d}^k$;

Inicia-se com um chute inicial \mathbf{x}^0 na iteração $k = 0$. Após a primeira iteração, apenas os passos de 4 a 9 que devem ser repetidos até a convergência do resíduo \mathbf{r} para um valor melhor que a tolerância desejada.

A matriz preconditionadora \mathbf{M} é definida como

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\omega(2 - \omega)} (\mathbf{D} + \omega \mathbf{L}) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \omega \mathbf{L}^T), \quad (3.39)$$

em que \mathbf{D} é a diagonal principal da matriz \mathbf{A} , \mathbf{L} é a matriz triangular inferior de \mathbf{A} e ω é um parâmetro de relaxação, cujo valor ótimo pode ser obtido por

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \pi h} \quad (3.40)$$

em que foi utilizado $h = \Delta x$.

4 Resultados

4.1 Escoamento monofásico

A primeira validação do código se baseou na comparação da simulação de um escoamento sem gota com o escoamento de *Hagen-Poiseuille* ao longo de duas placas planas estacionárias. A solução para o campo de velocidade desse escoamento resulta na distribuição parabólica dada por

$$\frac{u(y)}{U} = \frac{3}{2} \left[1 - 4 \left(\frac{y}{H} \right)^2 \right], \quad (4.1)$$

onde U é a velocidade média do escoamento e H é a distância entre as placas mostrada na [Figura 8](#).

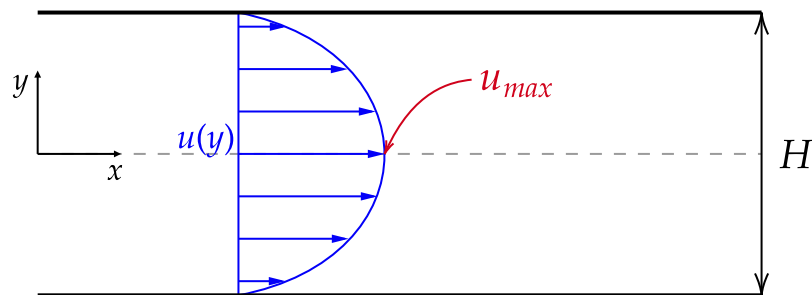


Figura 8 – Distribuição parabólica da velocidade para o escoamento de *Hagen-Poiseuille*.

Essa comparação é válida para o canal principal da junção em T para pontos do escoamento plenamente desenvolvido, ou seja, longe o suficiente da região de entrada e longe o suficiente da bifurcação. Como o campo de velocidade das equações governantes utilizadas na simulação é adimensional, espera-se uma velocidade máxima no centro e paralelo ao canal com módulo igual a 1,5, uma vez que $\frac{u(0)}{U} = u_{max} = 3/2$, pela Eq. (4.1).

Já para a região da junção em T, após a bifurcação, o escoamento se desenvolve até que a distribuição de velocidade seja parabólica novamente. Considerando uma junção em T simétrica com canais secundários de largura H , a vazão mássica é dividida igualmente entre os ramos de forma que a equação da continuidade fica

$$\rho A_t U_{in} = 2\rho A_t U_{out}, \quad (4.2)$$

em que $U_{in} = U$ é a velocidade média do escoamento no ramo principal, U_{out} a velocidade média do escoamento nos ramos secundários e A_t a área da seção transversal da junta em T. Logo, $U_{out} = \frac{U}{2}$ e, substituindo este resultado na Eq. (4.1) para os ramos secundários, tem-se

$$\frac{u_s(x')}{U} = \frac{3}{4} \left[1 - 4 \left(\frac{x'}{H} \right)^2 \right], \quad (4.3)$$

donde u_s é o campo de velocidade parabólico para o escoamento ao longo dos ramos secundários em função da posição x' (Figura 9) e $u_{s,max} = 3/4$.

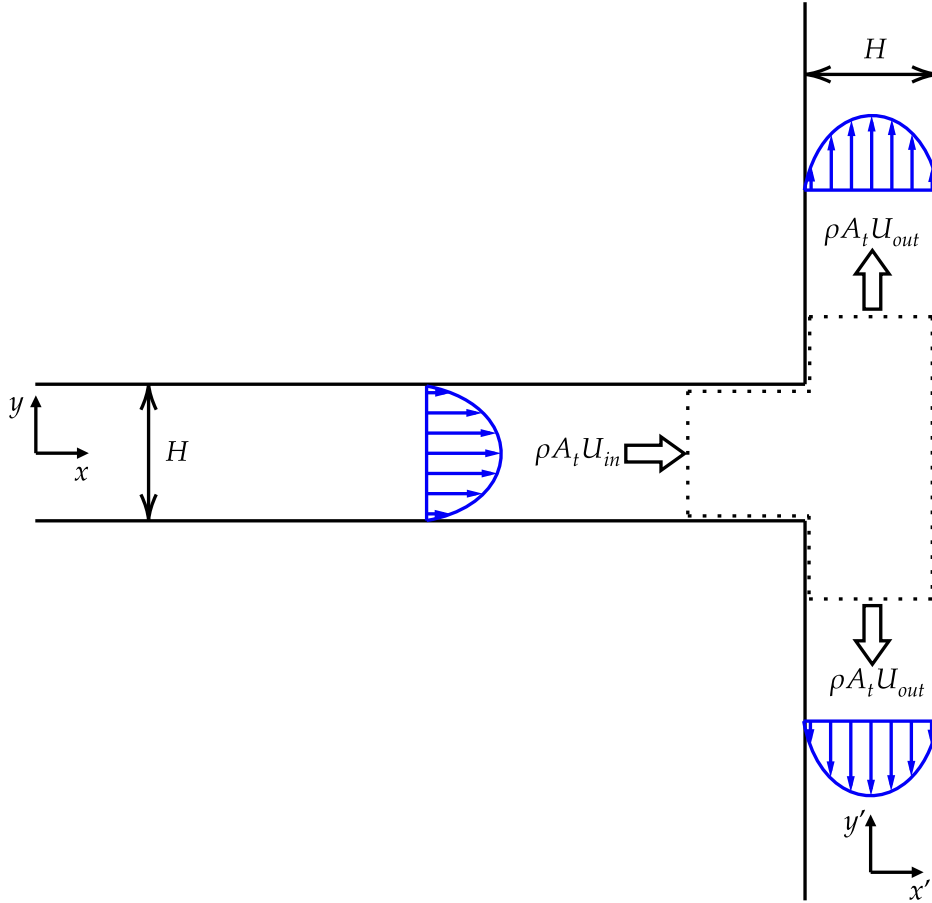


Figura 9 – Distribuição da vazão nos ramos secundários da junção em T.

A Tabela 1 apresenta a convergência do valor da velocidade máxima adimensional, tanto para o ramo principal quanto para o ramo secundário, à medida que se aumenta a resolução espacial da malha. Nesta análise, foi utilizada uma junção em T definida pelo domínio quadrado 16×16 , com $H = 2$ e $\Delta t = 10^{-3}$. Nota-se que para uma malha 200×200 , a diferença relativa para o valor exato é de 0,87%, tendendo a ser menor para domínios menores e Δt menores também. Então, isso leva a crer que o escoamento estará bem representado com um erro inferior a 1% para qualquer malha com tamanho mínimo

de 200×200 , logo todas as simulações realizadas neste trabalho foram feitas obedecendo esta premissa.

Malha	u_{max}	$u_{s,max}$	$u_{max}/u_{s,max}$
100×100	1,47188	0,730888	2,0138
200×200	1,48691	0,713070	2,0852
300×300	1,48973	0,724473	2,0562
400×400	1,49147	0,745717	2,0000
500×500	1,49173	0,745673	2,0005
600×600	1,49188	0,735967	2,0271

Tabela 1 – Convergência do valor da velocidade máxima do escoamento adimensional.

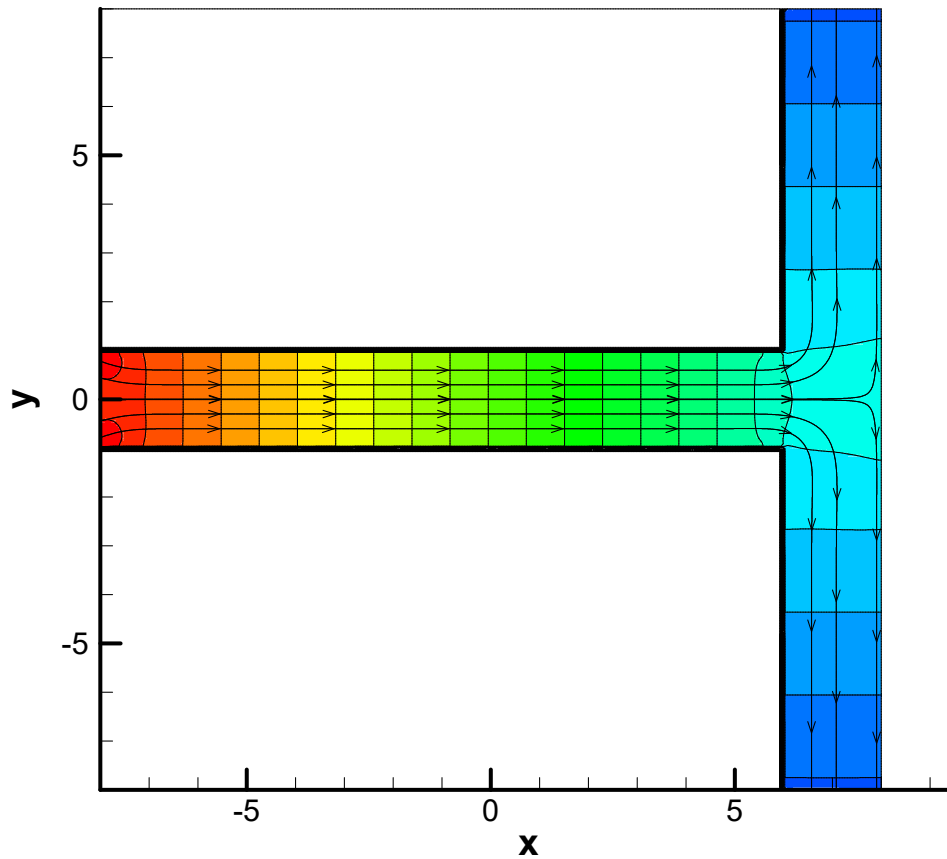


Figura 10 – Simulação do escoamento sem gota ao longo de uma junta em T num domínio 300×300 , $L = 16$ e com $Re = 0,1$. O mapa de cor é referente à distribuição de pressão, onde vermelho \rightarrow maior pressão e azul \rightarrow menor pressão.

4.2 Escoamento bifásico

A validação dos resultados da simulação com presença de gotas foi feita em duas etapas: (i) verificação do formato das gotas escoando no ramo principal da junção em T, comparando-se o formato de suas interfaces com trabalhos de referência e (ii) verificação do fenômeno de ruptura da gota na junção em T comparando-se com trabalhos de referência.

De modo geral, as simulações foram conduzidas com uma gota elíptica 2D caracterizada pelos parâmetros a e b , posicionada no centro do canal principal, como mostrado na Figura 11. Em outras palavras, a gota é inicialmente inserida num escoamento de *Hagen-Poiseuille* e, após um certo tempo, sua superfície assume um formato "definido". Este período de tempo que a gota leva para assumir esse formato é chamado de tempo de relaxação e varia com os parâmetros de entrada do escoamento e geométricos.

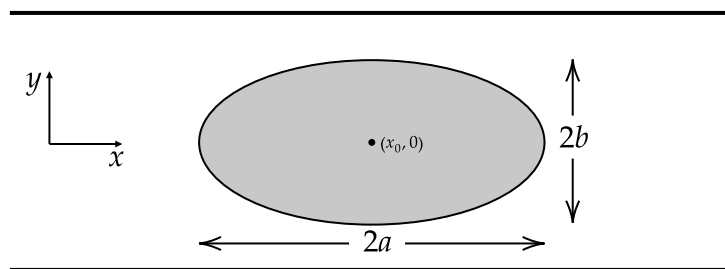
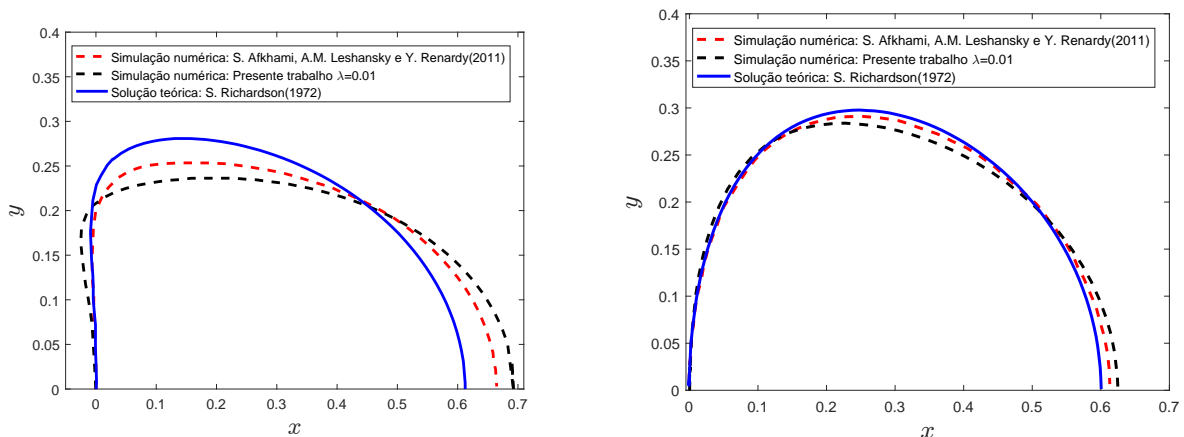


Figura 11 – Geometria elíptica para uma gota centralizada no canal principal.

4.2.1 Gotas circulares no centro do canal principal

O trabalho de Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) foi utilizado para fins de comparação. Neste estudo, Afkhami, Leshansky e Renardy utilizaram o método de *Volume of Fluid* juntamente de uma metodologia com uso de "height-function" para capturar e representar a interface de gotas com alta tensão interfacial em coordenadas cartesianas. Em uma das etapas do trabalho, Afkhami, Leshansky e Renardy analisaram a influência do confinamento de uma gota circular 2D no formato da sua interface quando submetido ao escoamento de *Hagen-Poiseuille* no centro do canal principal. Para reproduzir a gota circular centralizada em $(x_0, 0)$, estabeleceu-se $a = b$ para todas simulações nesta subseção, uma vez que uma elipse com semieixos iguais retorna um círculo de raio a . Para avaliar o confinamento, tomou-se a razão a/H , em que $a/H \approx 0,5$ representa uma gota bastante confinada e $a/H \ll 0,5$ representa uma gota pouco confinada. A Figura 12a apresenta a comparação da interface de uma gota com $a/H = 0,3$ da simulação realizada com a simulação feita por Afkhami, Leshansky e Renardy e percebe-se que ambas simulações se afastam da solução desenvolvida por Richardson (1973), a qual vale para uma gota não-confinada, o que era um efeito esperado pela grande influência do confinamento. Já a Figura 12b apresenta a comparação da interface entre as duas simulações para uma gota de mesmo tamanho ($a/H = 0,3$), mas com um número de capilaridade 4 vezes menor, o que indica que quando as forças interfaciais são grandes em relação às forças viscosas, a gota resiste à influência das paredes e se deforma menos, aproximando-se da teoria de não-confinamento. Uma outra questão que é considerada nesta análise é que as simulações foram conduzidas para uma razão de viscosidades λ muito pequena, o que é concordante

com a teoria de Richardson, a qual foi desenvolvida para gotas/bolhas invíscidas (na prática, $\lambda \ll 1$).



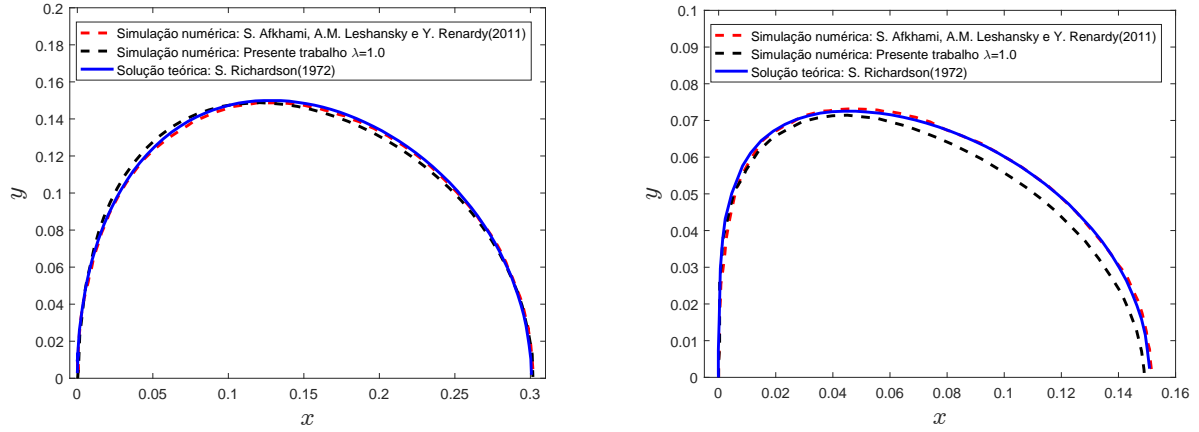
(a) Para $Re = 0,5$, $Ca = 1,5$ e $a/H = 0,3$. (b) Para $Re = 0,5$, $Ca = 0,375$ e $a/H = 0,3$.

Figura 12 – Comparação do contorno da gota da simulação realizada com os resultados obtidos por Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) e pela solução teórica desenvolvida por Richardson (1973).

A Figura 13a apresenta o comparativo do contorno da gota com $a/H = 0,15$ (relativamente menor que na comparação anterior) e, portanto, é esperado que o efeito do confinamento seja muito pequeno, o que é visualizado tanto na simulação de Afkhami, Leshansky e Renardy quanto na realizada neste trabalho, pois ambas se aproximaram da teoria de Richardson. É importante mencionar que esta simulação foi feita para $\lambda = 1$, diferente da simulação de Afkhami, Leshansky e Renardy ($\lambda = 0,01$), porque gotas com $a/H \ll 0,5$, posicionadas no centro do canal, estão sujeitas a uma taxa de cisalhamento menor sendo que, no limite $a/H \rightarrow 0$, tem-se $\frac{\partial u}{\partial y} \rightarrow 0$, logo os efeitos viscosos são muito pequenos, sendo este caso pouco sensível ao valor de λ utilizado (desde que não seja grande demais). Já para o caso apresentado na Figura 13b, em que $a/H = 0,075$, apesar dos efeitos viscosos serem bastante pequenos, eles têm mais peso que os da comparação anterior devido ao fato de que o número de capilaridade é grande. Dessa forma, os efeitos da tensão superficial são muito pequenos comparados com os das tensões viscosas, logo a simplificação $\lambda = 1$ já não é tão razoável, o que explica a diferença obtida no formato do contorno da gota.

4.2.2 Gotas alongadas no centro do canal principal

Outra análise realizada e comparada com os resultados obtidos por Afkhami, Leshansky e Renardy diz respeito aos efeitos do confinamento em gotas alongadas no canal principal. Diferente da análise para gotas circulares, as gotas alongadas assumem esse formato quando seu tamanho é grande demais para ser um círculo, precisando preencher o espaço na direção longitudinal do canal. Dessa forma, utilizou-se $2b = H$ e $2a > 2b$ para todas as simulações nesta subseção para garantir gotas alongadas. A Fi-



(a) Para $Re = 0,5$, $Ca = 1,2$ e $a/H = 0,15$. (b) Para $Re = 0,5$, $Ca = 15,02$ e $a/H = 0,075$.

Figura 13 – Comparação do contorno da gota da simulação realizada com os resultados obtidos por Afkhani, Leshansky e Renardy (2011) e pela solução teórica desenvolvida por Richardson (1973).

Figura 14 apresenta a relação entre a velocidade da gota U_d normalizada pela velocidade média do escoamento U e o número de capilaridade tanto para as simulações realizadas quanto para as simulações de Afkhani, Leshansky e Renardy. A somar, tem-se, também, a solução teórica de Hodges, Jensen e Rallison (2004) válida para λ intermediários, a qual é dada por

$$\frac{U_d}{U} \approx 1 + 0,51(3Ca)^{2/3} \quad (4.4)$$

e é válida para gotas 2D escoando entre placas paralelas. Vale mencionar que, para o presente trabalho, os valores de velocidade da gota foram calculados tomando-se a razão entre o deslocamento do ponto mais à direita da gota pelo intervalo de tempo desse deslocamento, portanto há algumas flutuações nesse cálculo, muito embora o resultado encontra-se bem coerente com as referências comparadas.

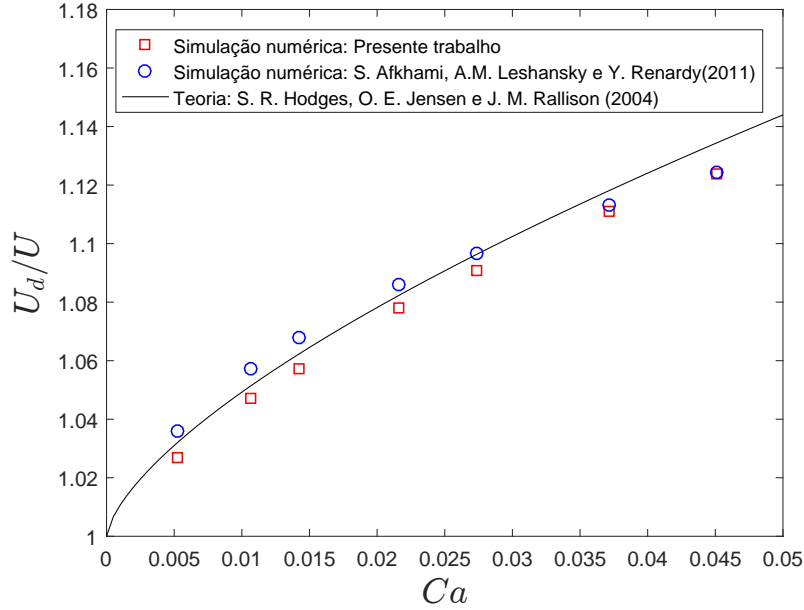


Figura 14 – Comparação da velocidade da gota normalizada pela velocidade média do escoamento no canal principal das simulações realizadas no presente trabalho com as simulações de Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) e com a solução teórica de Hodges, Jensen e Rallison (2004) para $\lambda = 1$ dada pela Eq. (4.4).

4.2.3 Ruptura da gota na junção em T

Quando gotas alongadas adentram a região da junção em T, três regimes de ruptura podem acontecer como comentado na seção 1.5 e apresentado na Figura 3. Para gotas com comprimento relaxado ℓ_0 intermediário, o regime B costuma ser predominante e foi este o escolhido para validação do código numérico. A Figura 15 apresenta um comparativo visual da simulação realizada no presente trabalho com a simulação de Afkhami, Leshansky e Renardy para uma gota com comprimento adimensional $\ell_0/H = 2$ desde o momento em que a gota chega na junta em T (Figura 15a) até a ruptura em duas gotas "filhas" (Figura 15e).

Pela Figura 15d, nota-se que a máxima extensão da gota original, atingida na iminência de se romper em duas, é ligeiramente menor na simulação realizada comparada com a simulação de Afkhami, Leshansky e Renardy. Isso se deve ao fato de que foi utilizado como parâmetro de entrada $2a/H = 2$, mas $2a$ é o comprimento da elipse que é gerada inicialmente no centro do canal e ℓ_0 é o comprimento da gota após o tempo de relaxação. Devido à maneira como a gota é inserida no escoamento e a como ela evolui (sem dispor do tempo necessário para relaxar), a informação a respeito de ℓ_0 não é útil para reproduzir a simulação de referência, portanto foi desenhada uma relação entre o parâmetro $2a/H$ e ℓ/H , sendo ℓ a máxima extensão da gota mensurada ligeiramente antes do seu rompimento. Esta relação é apresentada na Figura 16 para uma gota com $Ca = 0,05$, cujo ajuste aos dados é dada por

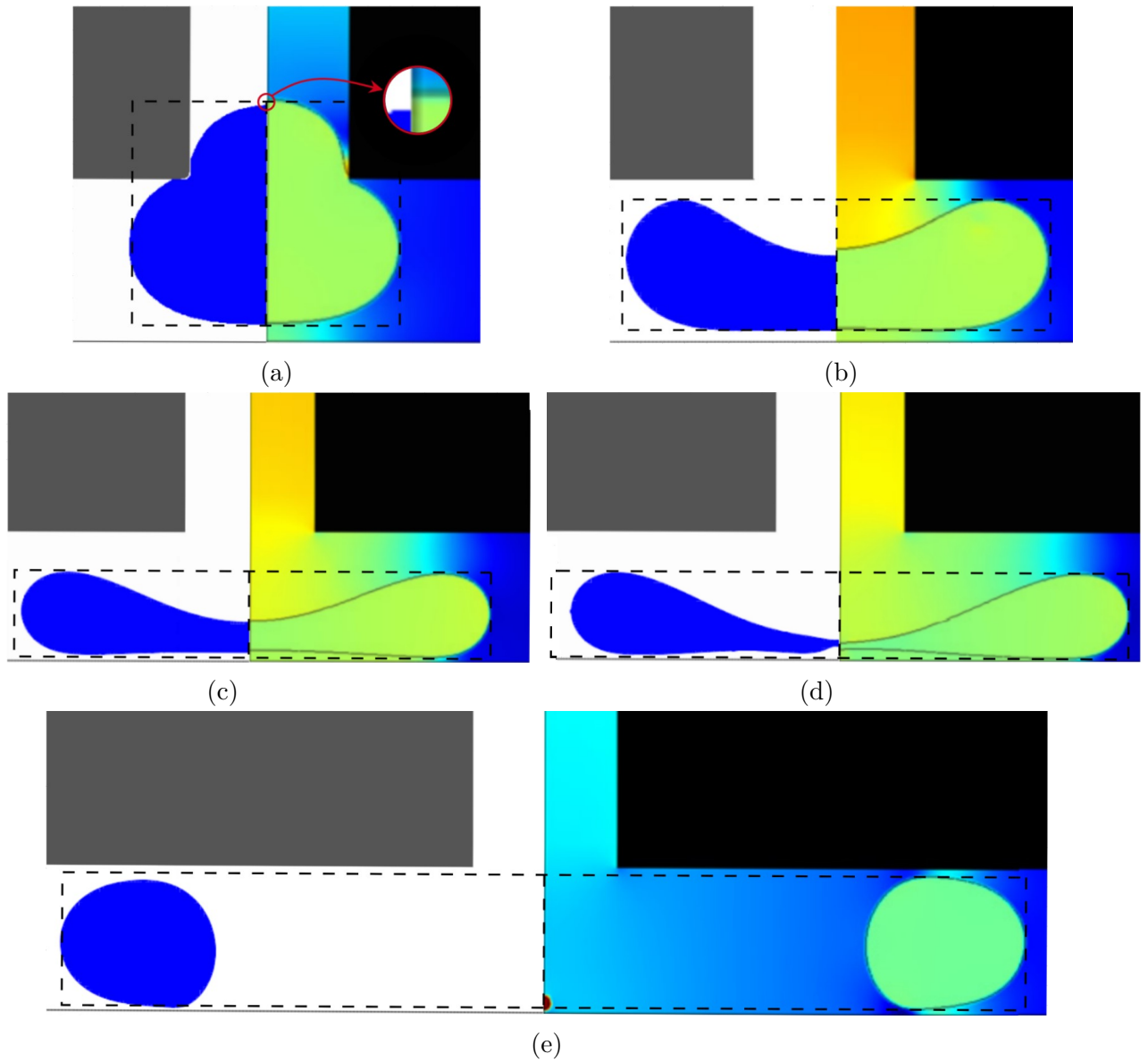


Figura 15 – Comparação entre a simulação realizada neste trabalho com uma malha 250 x 250 (metade à esquerda) com a simulação realizada por Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) (metade à direita) para $Re = 0,5$, $Ca = 0,05$, $\ell_0/H = 2,0$ e $\gamma = 0,1$.

$$\frac{\ell}{H} \approx 2,06 \left(\frac{2a}{H} \right) + 0,28. \quad (4.5)$$

A Figura 17 apresenta o comparativo entre as mesmas simulações anteriores, mas para uma gota corrigida pela relação da Equação (4.5), a qual resultou numa gota com $2a/H \approx 2,05$ para obter uma extensão $\ell/H \approx 4,511$, compatível com a extensão da gota da simulação de Afkhami, Leshansky e Renardy.

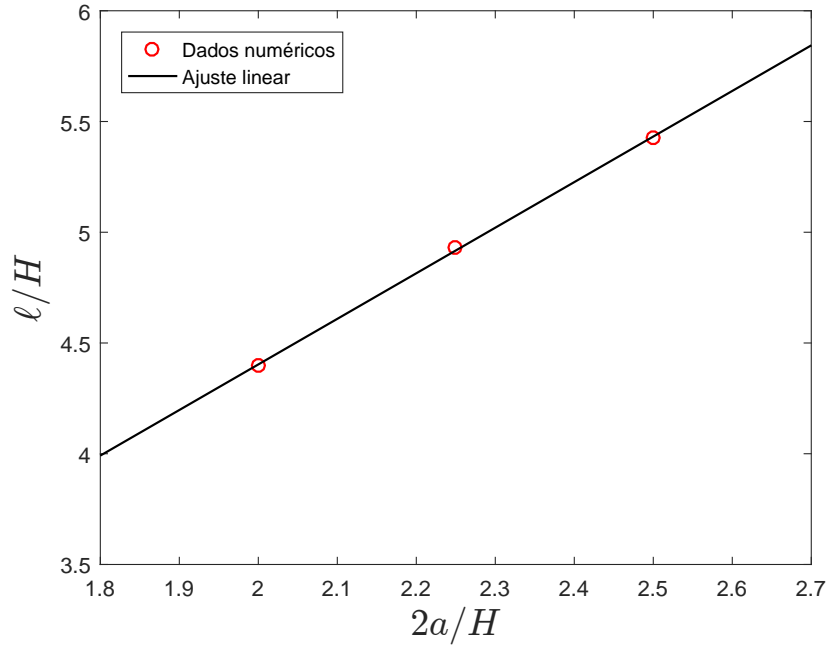


Figura 16 – Relação entre a máxima extensão l da gota com seu comprimento inicial $2a$ na forma elíptica. Os dados obtidos ajustam à Eq. (4.5).

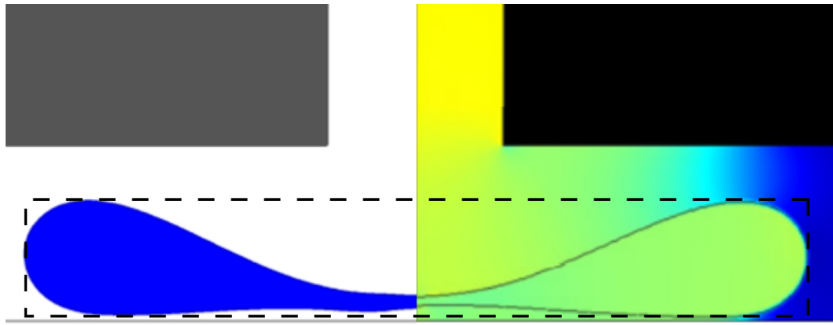


Figura 17 – Correção na simulação realizada (metade à esquerda) utilizando a relação entre l e $2a$ para obter a máxima extensão da gota antes do rompimento. A meia gota em verde (metade à direita) é referente à simulação de Afkhami, Leshansky e Renardy (2011).

Outro aspecto de interesse em fenômenos de ruptura do regime B, é o tamanho do "túnel" mensurado pela espessura de filme δ , visualizada na Figura 18. A Figura 19 apresenta a relação da espessura de filme δ com o número de capilaridade para as simulações realizadas e para as simulações de Afkhami, Leshansky e Renardy. Nota-se que os resultados são bem próximos, mas também foi constatado que a espessura de filme δ varia levemente com Re e com o comprimento da gota $2a$, informações estas que não estão disponíveis no trabalho de Afkhami, Leshansky e Renardy. Apesar disso, no limite $Ca^{1/5} \ll 1$, a espessura de filme obtida obedece a relação teórica dada pela equação

$$\delta/H \approx 1,08Ca^{2/5}. \quad (4.6)$$

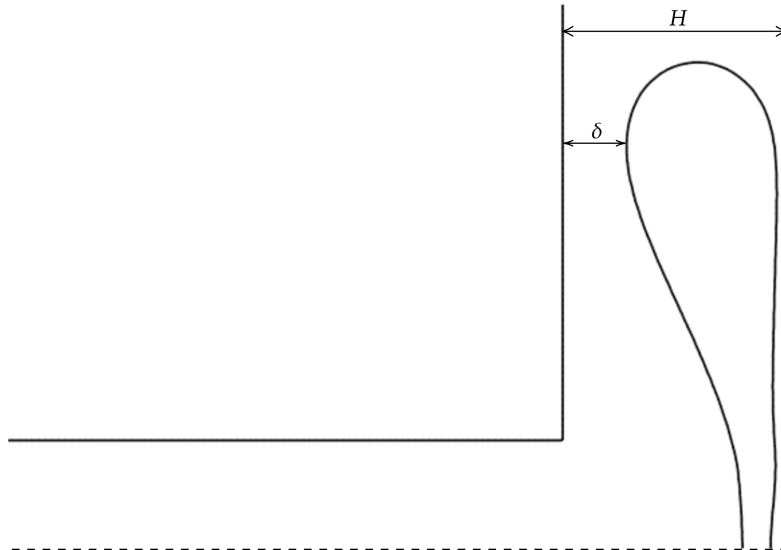


Figura 18 – Espessura mínima de filme δ .

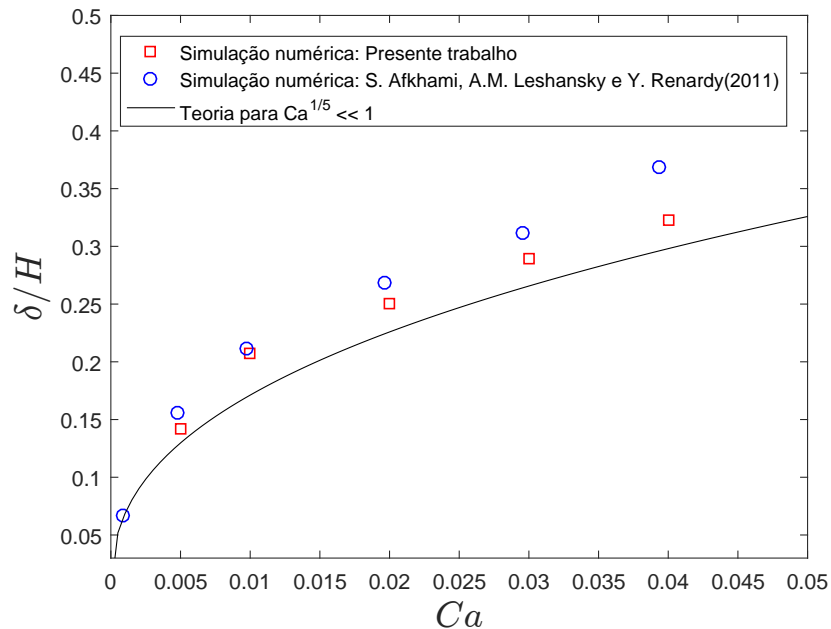


Figura 19 – Relação entre a espessura do filme δ e o número de capilaridade para as simulações realizadas no presente trabalho e as realizadas por Afkhami, Leshansky e Renardy (2011) para $\lambda = 1$. A curva cheia é dada pela Eq. (4.6).

A fim de se validar o desempenho do código numérico com a física real, utilizou-se como referência o trabalho experimental de Jullien et al. (2009), os quais conduziram experimentos de rompimento de gotas em juntas em T. Jullien et al. utilizaram dois sistemas fluidos sendo um deles gotas de óleo fluorado em uma solução de água deionizada com dodecil sulfato sódico a 1% p/p , cuja razão de viscosidades é $\lambda = 1,67$. Sendo assim, a espessura de filme δ em regime B de ruptura em função do número de capilaridade é apresentada na Figura 20, de onde percebe-se um desvio padrão relativamente grande, muito embora a maioria das simulações realizadas conferiram com os resultados experimentais dentro do intervalo de incerteza.

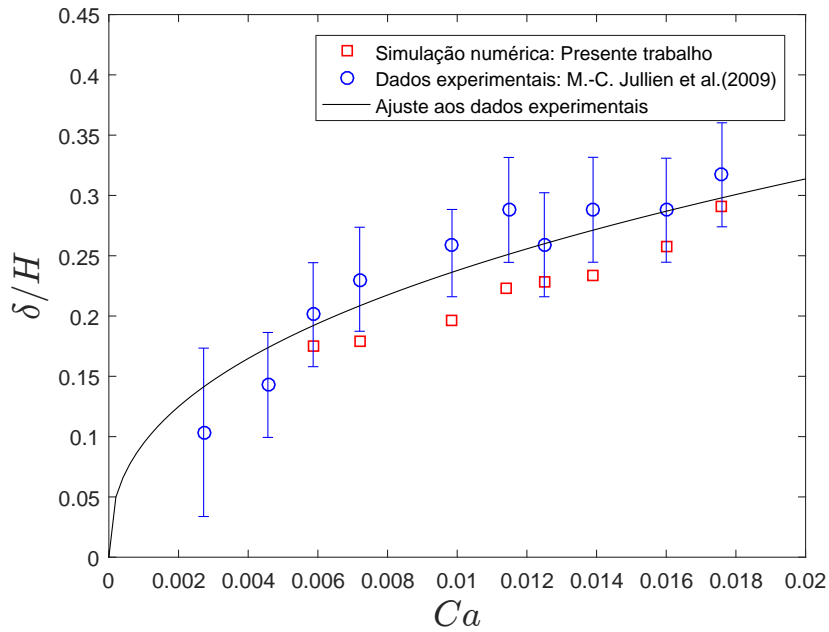


Figura 20 – Comparação da velocidade da gota normalizada pela velocidade média do escoamento no canal principal das simulações realizadas no presente trabalho com os experimentos de [Jullien et al. \(2009\)](#). A curva cheia é um ajuste aos dados experimentais.

4.3 Interferência das condições de contorno na superfície da gota

Um dos problemas encontrados nas simulações realizadas pode ser visualizado na [Figura 21](#). Percebe-se que alguns pontos da superfície da gota "grudam" nas paredes da junção em T, devido a uma falha na metodologia numérica utilizada que não representa a física do fenômeno. Essa falha faz com que curvas de $\phi = \text{constante}$ se cruzem em algumas regiões.

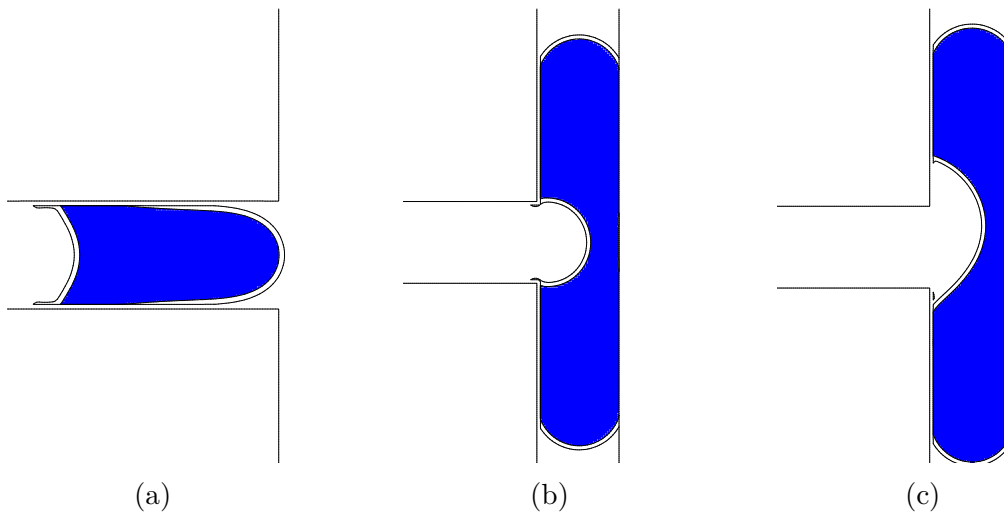


Figura 21 – Interferência da presença das paredes da junção em T na superfície da gota. As linhas que contornam as gotas são curvas de nível $\phi = 0$ e $\phi = 0,1$.

Pela [Figura 21a](#), é possível notar que a traseira da gota gruda nas paredes, o que faz com que ocorra a perda da suavidade da superfície nessas regiões de interferência. Percebe-se, também, que a gota avança ao longo do canal principal enquanto esses pontos extremos ficam grudados, mas isso não atrapalha a evolução da simulação já que em algum momento o efeito elástico da gota tende a puxar esses pontos da superfície para onde deveriam estar. Por sua vez, durante o empescoçamento de gotas muito longas, como mostrado na [Figura 21b](#), a superfície da gota permanece grudada por tempo suficiente para perturbar os resultados da simulação como será visto adiante. O que se observou é que, eventualmente, essas regiões grudadas tendem a desgrudar como é visto no instante da [Figura 21c](#), em que a parte superior da gota desgrudou primeiro que a parte inferior, resultando numa assimetria do seu formato.

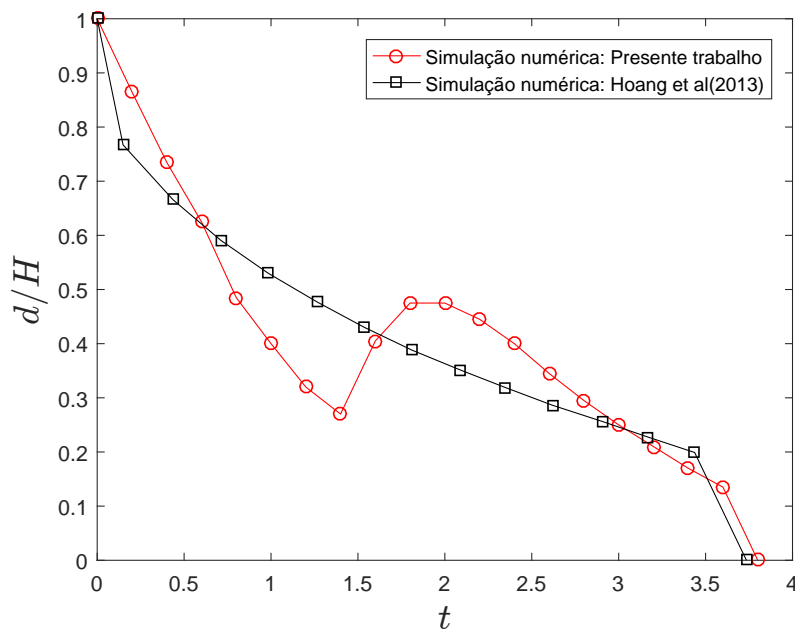


Figura 22 – Comparação da evolução temporal da espessura do pescoço de uma gota em regime de ruptura C da simulação realizada com a simulação de [Hoang et al. \(2013\)](#).

Esse problema foi mais recorrente em simulações com gotas em regime de ruptura C, as quais são longas o bastante para obstruir permanentemente os canais de saída da junção em T. Para gotas em regime de ruptura A ou B, a interferência da parede também ocorria, mas, após o desgrude, o formato da gota era corrigido rapidamente, o que não afetou a evolução consistente das simulações nem os resultados obtidos (como foi observado nas análises anteriores). Para análises da evolução da espessura do pescoço no tempo, esse problema distorce significativamente os resultados como mostrado na [Figura 22](#). Nota-se que no intervalo de $t = 0$ a $t = 1,5$, a espessura do pescoço cai rapidamente para menos da metade, o que distoia bastante da curva de [Hoang et al. \(2013\)](#). Esse decréscimo acentuado acontece devido ao grude da superfície da gota nesse intervalo e, logo após o instante $t = 1,5$, percebe-se que a espessura aumenta abruptamente (momento do desgrude) até $d/H \approx 0,5$ e depois volta a decrescer suavemente. No final, a gota chegou a se

romper quase no mesmo instante comparado com a simulação de Hoang, mas a análise temporal é comprometida, porque o grude atrasa a evolução do pescoço.

Esse comportamento inesperado acontece na interação entre a superfície da gota e a parede, onde estão impostas condições de contorno no modelo numérico. Supõe-se que os esquemas de alta ordem na discretização das derivadas espaciais da função ϕ possam ser o problema, uma vez que eles utilizam estênceis de vários pontos do domínio, inclusive pontos fora da junção em T, os quais podem estar acumulando erros numéricos e "falhando" o cálculo de ϕ na sua evolução. Para que seja feita a correção desse problema, é necessário uma investigação aprofundada no que de fato acontece na interação superfície-parede. Apesar disso, os resultados apresentados aqui neste capítulo mostram boa validade com as referências consideradas.

5 Conclusão

Neste trabalho, foi desenvolvido um código numérico para simulações de escoamento de gotas em uma junta em T bidimensional. O código herdou a metodologia numérica de um código anterior de simulações de gotas em cavidade retangular com tampa cisalhante, mantendo suas características primárias como sendo de segunda ordem no tempo. Também foi validado a capacidade do código de simular escoamentos monofásicos e escoamentos bifásicos.

Para as simulações de escoamentos monofásicos, foi comparado o valor da velocidade máxima atingida no centro do canal com o valor teórico do escoamento de *Hagen-Poiseuille*, apresentando uma convergência para o valor exato com o nível de discretização da malha. Já para o caso do escoamento com gota, a validação ocorreu tanto no trecho do canal principal quanto na junta em si, capturando o processo de ruptura. Em ambos os casos, os resultados obtidos tiveram boa concordância com os trabalhos de referência.

Por fim, foi discutido um problema encontrado nos resultados para situações específicas de simulação, cuja origem ainda é desconhecida, embora a análise atenciosa do problema e a que casos se aplicam permite o uso do código sem grandes alardes.

Para trabalhos futuros, propõe-se a intensiva investigação do problema relatado para que o trabalho seja estendido para incluir campos magnéticos, visto que o uso de campo magnético em escoamento de gotas sensíveis a esse campo permite um maior controle dos processos de mistura, separação e formação de novas gotas, o que é um estudo com grande potencial dado a sua larga aplicação industrial e tecnológica.

Além disso, é de interesse do autor o emprego de técnicas da *Computação de Alto Desempenho* na otimização do código por meio da implementação de diretivas *OpenMP* e *SIMD* para permitir processos paralelos em laços independentes do código, além de outras técnicas de paralelização específicas que abordam métodos implícitos. Dessa forma, será possível tirar o máximo proveito de poder computacional e diminuir substancialmente o custo computacional das simulações.

Referências

- ADALSTEINSSON, D.; SETHIAN, J. A. A fast level set method for propagating interfaces. *Journal of Computational Physics*, v. 118, n. 2, p. 269–277, 1995. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999185710984>>. Citado na página 7.
- AFKHAMI, S.; LESHANSKY, A.; RENARDY, Y. Numerical investigation of elongated drops in a microfluidic t-junction. *Physics of Fluids - PHYS FLUIDS*, v. 23, 02 2011. Citado 11 vezes nas páginas iv, v, 8, 9, 36, 37, 38, 39, 40, 41 e 42.
- BARTHÈS-BIESEL, D.; ACRIVOS, A. Deformation and burst of a liquid droplet freely suspended in a linear shear field. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 61, n. 1, p. 1–22, 1973. Citado na página 6.
- BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2000. ISBN 9780521663960,0521663962. Disponível em: <<http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=559298a3542165cf63af1854a3f18906>>. Citado na página 11.
- BRETHERTON, F. P. The motion of long bubbles in tubes. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 10, n. 2, p. 166–188, 1961. Citado na página 8.
- BROWN, D. L.; CORTEZ, R.; MINION, M. L. Accurate projection methods for the incompressible navier–stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 168, n. 2, p. 464–499, 2001. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999101967154>>. Citado na página 26.
- CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, American Mathematical Society, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968. ISSN 00255718, 10886842. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2004575>>. Citado na página 24.
- EINSTEIN, A. Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. (German) [A new determination of molecular dimensions]. *J-ANN-PHYS-1900-4*, v. 324, n. 2, p. 289–306, 1906. ISSN 0003-3804. Citado na página 5.
- ENRIGHT, D. et al. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational Physics*, v. 183, n. 1, p. 83–116, 2002. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999102971664>>. Citado na página 7.
- FORGIARINI, A. et al. Formation of nano-emulsions by low-energy emulsification methods at constant temperature. *Langmuir*, v. 17, n. 7, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/la001362n>>. Citado na página 4.

- FRANKEL, N. A.; ACRIVOS, A. The constitutive equation for a dilute emulsion. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 44, n. 1, p. 65–78, 1970. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 6.
- FU, T. et al. Dynamics of bubble breakup in a microfluidic t-junction divergence. *Chemical Engineering Science*, v. 66, n. 18, p. 4184–4195, 2011. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250911003733>>. Citado na página 8.
- GÜNTHER, A.; JENSEN, K. F. Multiphase microfluidics: from flow characteristics to chemical and materials synthesis. *Lab Chip*, The Royal Society of Chemistry, v. 6, p. 1487–1503, 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/B609851G>>. Citado na página 8.
- HAKIMI, F. S.; SCHOWALTER, W. R. The effects of shear and vorticity on deformation of a drop. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 98, n. 3, p. 635–645, 1980. Citado na página 6.
- HOANG, D. et al. Dynamics of droplet breakup in a t-junction. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 717, p. R4, 02 2013. Citado 2 vezes nas páginas v e 44.
- HODGES, S. R.; JENSEN, O. E.; RALLISON, J. M. The motion of a viscous drop through a cylindrical tube. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 501, p. 279–301, 2004. Citado 4 vezes nas páginas v, 8, 38 e 39.
- JULLIEN, M.-C. et al. Droplet breakup in microfluidic t-junctions at small capillary numbers. *Physics of Fluids*, v. 21, p. 072001, 2009. Citado 6 vezes nas páginas iv, v, 8, 9, 42 e 43.
- KIM, J.; MOIN, P. Application of a fractional-step method to incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 59, n. 2, p. 308–323, 1985. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999185901482>>. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 22.
- LADYZHENSKAYA, O. *The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow: Mathematics and its applications*. 2nd. ed. [S.l.]: Gordon and Breach, 1969. Citado na página 6.
- LESHANSKY, A.; PISMEN, L. Breakup of drops in a microfluidic t junction. *Physics of Fluids - PHYS FLUIDS*, v. 21, 02 2009. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 9.
- LOEWENBERG, M.; HINCH, E. J. Numerical simulation of a concentrated emulsion in shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 321, p. 395–419, 1996. Citado na página 6.
- LOPES, A. v. B. *Notas de aula do curso de Mecânica dos Fluidos 2*. [S.l.]: Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 11.
- MASON, T. G.; BIBETTE, J.; WEITZ, D. A. Elasticity of compressed emulsions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 75, p. 2051–2054, Sep 1995. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.2051>>. Citado na página 6.
- OLIVEIRA, T. F. de. *Microhidrodinâmica e Reologia de Emulsões*. Tese de Doutorado — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2007. Citado na página 6.

- OSHER, S.; FEDKIW, R. *The Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. [S.l.: s.n.], 2004. v. 57. xiv+273 p. ISBN 0-387-95482-1. Citado na página 28.
- OSHER, S.; SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, v. 79, n. 1, p. 12–49, 1988. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999188900022>>. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 16.
- PENG, D. et al. A pde-based fast local level set method. *Journal of Computational Physics*, v. 155, n. 2, p. 410–438, 1999. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999199963453>>. Citado 3 vezes nas páginas 7, 27 e 30.
- RALLISON, J. M. The deformation of small viscous drops and bubbles in shear flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 16, n. 1, p. 45–66, 1984. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev.fl.16.010184.000401>>. Citado na página 5.
- RALLISON, J. M.; ACRIVOS, A. A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 89, n. 1, p. 191–200, 1978. Citado na página 6.
- RAU, J. et al. Propofol in an emulsion of long- and medium-chain triglycerides: The effect on pain. *Anesthesia and analgesia*, v. 93, p. 382–4, 3rd contents page, 09 2001. Citado na página 1.
- RICHARDSON, S. Two-dimensional bubbles in slow viscous flows. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 33, n. 3, p. 475–493, 1968. Citado na página 5.
- RICHARDSON, S. Two-dimensional bubbles in slow viscous flows. part 2. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 58, n. 1, p. 115–127, 1973. Citado 6 vezes nas páginas iv, 5, 6, 36, 37 e 38.
- ROSA, E. S. Conceitos básicos em escoamentos multifásicos. In: *Escoamento Multifásico Isotérmico*. Porto Alegre: [s.n.], 2012. v. 19, n. 3, p. 1–2. Citado na página 4.
- SCHOWALTER, W.; CHAFFEY, C.; BRENNER, H. Rheological behavior of a dilute emulsion. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 26, n. 2, p. 152–160, 1968. ISSN 0021-9797. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002197976890307X>>. Citado na página 5.
- SCHWARTZ, L. W.; PRINCEN, H. M.; KISS, A. D. On the motion of bubbles in capillary tubes. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 172, p. 259–275, 1986. Citado na página 8.
- SUSSMAN, M. et al. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers and Fluids*, v. 27, n. 5, p. 663–680, 1998. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793097000534>>. Citado na página 7.
- SUSSMAN, M.; SMEREKA, P.; OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, v. 114, n. 1, p. 146–159, 1994. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184711557>>. Citado na página 7.

TAYLOR, G. I. The viscosity of a fluid containing small drops of another fluid. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, The Royal Society, v. 138, n. 834, p. 41–48, 1932. ISSN 09501207. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/96007>>. Citado na página 5.

TAYLOR, G. I. S. The formation of emulsions in definable fields of flow. *Proceedings of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 146, p. 501–523, 1934. Citado na página 5.

VASCONCELLOS, F. *Fases de uma emulsão*. 2005. <<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Emulsions.png>>. Citado 2 vezes nas páginas iv e 4.

YOUNGREN, G. K.; ACRIVOS, A. Stokes flow past a particle of arbitrary shape: a numerical method of solution. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 69, n. 2, p. 377–403, 1975. Citado na página 6.