

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE
MESQUITA FILHO”
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA DE MATERIAIS**

Felipe Santos Paes da Silva

**ANÁLISE DE SISTEMAS MICROFLUÍDICOS DE GOTAS A
PARTIR DE TÉCNICAS DE DINÂMICA DE FLUIDOS
COMPUTACIONAL (CFD)**

Bauru
2026

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE
MESQUITA FILHO”**
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA DE MATERIAIS**

Felipe Santos Paes da Silva

**ANÁLISE DE SISTEMAS MICROFLUÍDICOS DE GOTAS A
PARTIR DE TÉCNICAS DE DINÂMICA DE FLUIDOS
COMPUTACIONAL (CFD)**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais (POSMAT) da Universidade Estadual Paulista “Julio de Mesquita Filho” como parte dos requisitos para obtenção de título de Mestre em Ciência e Tecnologia de Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Noronha Lisboa Filho

Bauru
2026

Silva, Felipe Santos Paes.

Análise de Sistemas Microfluídicos de Gotas a partir de Técnicas de Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) / Felipe Santos Paes da Silva. - Bauru, 2026
124 p.

Dissertação (Mestrado)-Universidade Estadual Paulista (Unesp), Faculdade de Ciências, Bauru
Orientadora: Prof Dr. Paulo Noronha Lisboa Filho.

1. Microfluídica de gotas. 2. Microdispositivos. 3. Dinâmica de fluidos computacional. 4. Volume de fluido. I. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências. II. Título.

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE FELIPE SANTOS PAES DA SILVA, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS, DA FACULDADE DE CIÊNCIAS - CÂMPUS DE BAURU.

Aos 05 de agosto de 2026, às 14h, por meio de Videoconferência, realizou-se a defesa de DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de FELIPE SANTOS PAES DA SILVA, intitulada "Análise de Sistemas Microfluídicos de Gotas a partir de Técnicas de Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD)". A Comissão Examinadora foi constituída pelos seguintes membros: Prof. Dr. PAULO NORONHA LISBOA FILHO (Orientador(a) - Participação Presencial) do(a) Diretoria / UNESP / Câmpus de Bauru - FC, Prof. Dr. IAGO LESSA DE OLIVEIRA (Participação Presencial) do(a) Departamento de Engenharia Mecânica / UNESP / Câmpus de Bauru - FEB, Profa. Dra. LUCIMARA GAZIOLA DE LA TORRE (Participação Virtual) do(a) Departamento de Engenharia de Materiais e Bioprocessos / Universidade Estadual de Campinas, Após a exposição pelo mestrando e arguição pelos membros da Comissão Examinadora que participaram do ato, de forma presencial e/ou virtual, o discente recebeu o conceito final: -----Aprovado-----. Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que após lida e aprovada, foi assinada pelo(a) Presidente(a) da Comissão Examinadora.

AGRADECIMENTOS

Minha gratidão, antes de tudo, a Deus, por quem vivemos, nos movemos e existimos. Criador de tudo. Que as mentes redimidas devolvam toda a glória a Ele. *Soli Deo Gloria*.

Agradeço aos meus pais e à minha irmã, que, desde cedo, sempre me apoiaram neste caminho de descobertas. Obrigado por fornecerem todas as bases necessárias para que eu chegasse até aqui.

Agradeço à minha noiva, que não mede esforços para estar ao meu lado e que me lembra, das mais diferentes maneiras, o verdadeiro sentido das coisas.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Paulo Noronha Lisboa Filho, que me guiou com maestria durante esta jornada. Admiro a sabedoria que Deus lhe concedeu. Obrigado pelos ensinamentos e conselhos, muitas vezes para além da vida acadêmica.

Agradeço, também, ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais (POSMAT) todo o apoio, em especial, na publicação do artigo científico originado pelos resultados deste trabalho.

Às agências de fomento, meus sinceros agradecimentos. O apoio à pesquisa e construção do conhecimento científico são essenciais.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001 e processo nº 88887.975390/2024-00.

O presente trabalho foi realizado, também, com apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pelo Centro de Desenvolvimento de Materiais Funcionais (CDMF), processo nº 2013/07296-2.

*O eterno mistério do mundo é a sua
compreensibilidade.*

Albert Einstein, *Physics and Reality*
(1936)

RESUMO

Atualmente, o desenvolvimento e a otimização de microdispositivos têm recebido grande atenção por parte da comunidade científica, uma vez que suas aplicações desempenham papéis relevantes para a produção tecnológica, especialmente em aplicações biotecnológicas, como os dispositivos *lab-on-a-chip*. Nesse contexto, o estudo da microfluídica é necessário, uma vez que objetiva compreender fenômenos de fluidos aplicados à microescala, pelos quais tais dispositivos operam. Como uma importante técnica, a microfluídica de gotas surge com vasta aplicabilidade, permitindo a criação, manipulação e análise de pequenas gotas que podem servir como microreatores independentes para diferentes reações químicas, físicas e biológicas. Dessa forma, neste trabalho, objetivamos compreender o funcionamento de dispositivos microfluídicos, no que diz respeito à formação de gotas em microcanais, por meio do emprego de simulações computacionais que envolvam técnicas de dinâmica de fluidos computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*). Para tanto, em um primeiro momento, procuramos avaliar a adequabilidade de um modelo computacional (VOF - *Volume of Fluid*) para o estudo da formação de microgotículas; além disso, com o ferramental computacional proporcionado pelo método VOF, objetivamos compreender como a geração de gotas é influenciada por parâmetros como velocidade de fluido e dimensão geométrica do microcanal. Ademais, procuramos entender, qualitativamente, o mecanismo de divisão de gotas sob condições de assimetria geométrica. As análises nos permitem delinear e classificar os regimes de escoamento em que se atuam os mecanismos de produção de microgotículas em diferentes condições físicas, além de validar o uso de ferramentas computacionais para a compreensão de sistemas microfluídicos.

Palavras-chave: *microfluídica de gotas, microdispositivos, dinâmica de fluidos computacional, volume de fluido.*

ABSTRACT

Currently, the development and optimization of microdevices have received significant attention from the scientific community, as their applications play relevant roles in technological production, especially in biotechnological applications such as lab-on-a-chip devices. In this context, the study of microfluidics is essential, as it aims to understand fluid phenomena applied to the microscale, through which such devices operate. As an important technique, droplet-based microfluidics emerges with vast applicability, enabling the creation, manipulation, and analysis of small droplets that can serve as independent microreactors for different chemical, physical, and biological reactions. Thus, in this work, we aim to understand the operation of microfluidic devices regarding droplet formation in microchannels through the use of computational simulations involving Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques. To this end, we initially seek to evaluate the suitability of a computational model, the Volume of Fluid (VOF) method, for the study of microdroplet formation; furthermore, with the computational tools provided by the VOF method, we aim to understand how droplet generation is influenced by parameters such as fluid velocity and the geometric dimensions of the microchannel. In addition, we seek to qualitatively understand the mechanism of droplet breakup under conditions of geometric asymmetry. The analyses allow us to outline and classify the flow regimes in which the microdroplet production mechanisms operate under different physical conditions, as well as to validate the use of computational tools for understanding microfluidic systems.

Keywords: *droplet-based microfluidics, microdevices, computational fluid dynamics, volume of fluid.*

Sumário

1	Introdução e Fundamentação Teórica	16
1.1	Motivação	16
1.2	Microfluídica	17
1.3	Técnicas em microfluídica	18
1.3.1	Técnicas microfluídicas de <i>patch-clamp</i>	19
1.3.2	Microfluídica de gotas	19
1.4	Dispositivos <i>lab-on-a-chip</i>	21
1.5	Métodos de fabricação	23
1.6	O papel dos métodos computacionais	25
1.7	Princípios físicos da microfluídica	26
1.8	Formação de gotas em microcanais	28
1.8.1	Princípios físicos da geração de gotas em microcanais	29
1.8.2	Produção de gotas em microcanais	30
2	Objetivos	36
3	Metodologia	37
3.1	Mecânica de fluidos em microfluídica	37
3.1.1	Notação de índices	38
3.1.2	Equação da continuidade	39
3.1.3	Equações de Navier-Stokes	41
3.1.4	Equação de Navier-Stokes para fluidos compressíveis	45
3.1.5	Equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis	46
3.2	Técnicas Numéricas em dinâmica de fluidos	47
3.2.1	Formulação de um único fluido	49
3.2.2	<i>Método VOF (Volume of Fluid)</i>	50
3.2.3	Implementação computacional	60
4	Resultados e discussão	67
4.1	Formação de gotas em um microcanal com uma junção em T (<i>T-junction</i>)	68
4.1.1	Procedimento computacional	68
4.1.2	Validação do modelo	71
4.1.3	Resultados	73

4.2	Influência de parâmetros geométricos na formação de gotas em microcanais	81
4.2.1	Procedimento computacional	82
4.2.2	Efeitos da razão de velocidade na formação de gotas	83
4.2.3	Análise comparativa dos resultados das diferentes geometrias	93
4.3	Dinâmica de <i>droplet splitting</i> em microcanal assimétrico	97
4.3.1	Modelagem Geométrica	99
4.3.2	Malha Computacional	100
4.3.3	Configuração da Simulação	101
4.3.4	Dinâmica da divisão assimétrica de gotas	102
4.3.5	Efeito da pressão	102
4.3.6	Distribuição da velocidade	105
5	Conclusões	114
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	126

Lista de Figuras

1	Aplicações de técnicas de microfluídica em gotas.	21
2	Componentes de um sistema <i>lab-on-a-chip</i>	22
3	Comparação entre métodos convencionais e dispositivos <i>organ-on-a-chip</i> em relação ao controle experimental e relevância.	23
4	Etapas de uma simulação numérica em fluidodinâmica computacional . . .	26
5	Geometria <i>T-junction</i> para a formação de gotas em microcanais.	32
6	Geometria <i>flow-focusing</i> para a formação de gotas em microcanais	34
7	Geometria <i>coflowing</i> para formação de gotas em microcanais.	35
8	Representação do campo de densidade $\rho \mathbf{v}$ fluindo através de uma região arbitrária Ω . Uma área infinitesimal da é associada a um vetor unitário $\mathbf{n}$ perpendicular à superfície.	40
9	Etapas procedimentais de uma simulação numérica	48
10	Duas fases de fluidos (Ω_1 e Ω_2) separadas por uma interface ($\partial\Omega$).	49
11	Representação de uma interface por meio de uma função indicadora $I(x)$, uma função Heavside $H(x)$, uma fração de vazio $C(x)$ e uma função <i>level-set</i> $\phi(x)$	50
12	Reconstrução de interface em distintos métodos em sistema multifásico bidimensional. (a) representa a interface original. (b) representa a reconstrução pelo método SCLIC. (c) representa a reconstrução pelo método VOF proposto por Hirt e Nichols. (d) representa a reconstrução pelo método PLIC.	53
13	Reconstrução da interface por meio do método PLIC.	54
14	Método de Young para determinação da normal à interface na reconstrução baseada por PLIC.	55
15	Caso padrão para reconstrução de interface pelo método PLIC. O fluido 1 está preenchendo a região destacada e $m_1, m_2 \geq 0$	56
16	Método não fracionado de Rider e Kother para determinar a advecção da fração de vazio.	58
17	Algoritmo do método de solução baseado em pressão.	62
18	Volume de controle para a discretização de uma equação de transporte escalar.	63
19	Dimensões dos canais na geometria de junção em T utilizada nas simulações. O canal de entrada para a fase dispersa possui largura de $60 \mu\text{m}$, enquanto o canal de entrada para a fase contínua possui largura de $100 \mu\text{m}$	69
20	Malha aplicada à geometria modelada.	69

21	Estudo de independência de malha. Uma malha de $5\ \mu\text{m}$ foi selecionada por oferecer um bom equilíbrio entre precisão e custo computacional, sem diferenças significativas no parâmetro analisado em comparação com malhas mais refinadas.	70
22	Comparação do tamanho adimensional da gota formada no microcanal para diferentes razões de velocidade entre o presente estudo e o modelo de validação numérica avaliado.	72
23	Diâmetro das gotas geradas para diferentes valores da razão das velocidades (U_c/U_d). Observa-se uma tendência geral de diminuição no tamanho das gotas à medida que a razão U_c/U_d aumenta, exceto próximo de $U_c/U_d \approx 4$, onde um comportamento irregular surge com um aumento inesperado no comprimento das gotas.	74
24	Comparação do comprimento adimensional das gotas para diferentes razões de velocidade do presente estudo e do modelo de comparação.	75
25	Diagrama dos regimes de geração de gotas em dependência às velocidades dos fluidos.	76
26	Rompimento de gotas para diferentes números de capilaridade. Os instantes de rompimento da fase dispersa na junção foram registrados sob diferentes condições de número de capilaridade (Ca). Essas observações fornecem informações valiosas sobre os regimes de formação de gotas em função do número de capilaridade.	77
27	Comprimento adimensional da gota para diferentes números de capilaridade.	78
28	Diagrama de regime de fluido para a formação de gotas em diferentes valores do número de capilaridade (Ca).	80
29	Geometrias para a formação de gotas em um dispositivo de focalização de fluxo, implementadas nas simulações numéricas. O canal horizontal principal é a entrada para o fluido da fase dispersa (álcool), enquanto os dois canais que se encontram na junção são as entradas para o fluido da fase contínua (água). A Geometria A possui um ângulo de junção de 90° , enquanto as demais — B, C e D — possuem ângulos de junção de 60° , 45° e 30° , respectivamente.	82
30	Dimensões da geometria A: os canais de entrada e saída possuem largura de $300\ \mu\text{m}$ e um canal de afunilamento de $105\ \mu\text{m}$. A distância do funilamento até a junção é de $255\ \mu\text{m}$, e o comprimento do canal principal é $1200\ \mu\text{m}$. Os canais fazem um ângulo de 90°	84
31	Rompimento da fase dispersa e gotas monodispersas formadas no canal da geometria A para diferentes valores de razão de velocidade U_d/U_c	85
32	Valores do diâmetro da gota gerada e da frequência de formação em função da razão de velocidade U_d/U_c para a geometria A.	86

33	Dimensões da geometria B: os canais de entrada e saída possuem largura de $300\ \mu\text{m}$ e um canal de afunilamento de $105\ \mu\text{m}$. A distância do funilamento até a junção é de $225\ \mu\text{m}$ para o maior lado e $165\ \mu\text{m}$ para o menor lado. O comprimento do canal principal é $1200\ \mu\text{m}$. Na junção, os canais fazem um ângulo de 60° em relação à horizontal.	86
34	Rompimento da fase dispersa e gotas monodispersas formadas no canal da geometria B para diferentes valores de razão de velocidade U_d/U_c	87
35	Valores do diâmetro da gota gerada e da frequência de formação em função da razão de velocidade U_d/U_c para a geometria B.	88
36	Dimensões da geometria C: os canais de entrada e saída possuem largura de $300\ \mu\text{m}$ e um canal de afunilamento de $105\ \mu\text{m}$. A distância do funilamento até a junção é de $255\ \mu\text{m}$. O comprimento do canal principal é $1200\ \mu\text{m}$. Na junção, os canais fazem um ângulo de 45° em relação à horizontal. . . .	88
37	Rompimento da fase dispersa e gotas monodispersas formadas no canal da geometria C para diferentes valores de razão de velocidade U_d/U_c	89
38	Valores do diâmetro da gota gerada e da frequência de formação em função da razão de velocidade U_d/U_c para a geometria C.	89
39	Dimensões da geometria D: os canais de entrada e saída possuem largura de $300\ \mu\text{m}$ e um canal de afunilamento de $105\ \mu\text{m}$. A distância do funilamento até a junção é de $495\ \mu\text{m}$ para o maior lado e $315\ \mu\text{m}$ para o menor lado. O comprimento do canal principal é de $1200\ \mu\text{m}$. Na junção, os canais fazem um ângulo de 30° em relação à horizontal.	90
40	Rompimento da fase dispersa e gotas monodispersas formadas no canal da geometria D para diferentes valores de razão de velocidade U_d/U_c	91
41	Formação precoce de gota para $U_d/U_c = 0,25$. Inicialmente, a separação da gota ocorre como esperado. No entanto, pouco depois, uma gota subsequente se forma em um curto intervalo de tempo. A gota precoce, então, se funde com a gota formada anteriormente em uma única gota.	92
42	Formação de duas gotas precoces na razão de velocidades de $U_d/U_c = 0,17$	92
43	Valores do diâmetro da gota gerada e da frequência de formação em função da razão de velocidade U_d/U_c para a geometria D.	93
44	Diâmetro da gota em função da razão de velocidade U_d/U_c para cada geometria.	94
45	Frequência de formação de gotas para cada geometria em função dos valores de U_d/U_c	95
46	Classificação do processo de geração de gotas em relação ao regime de formação para as geometrias estudadas. Três tipos de regimes são observados: estrangulamento, gotejamento e jateamento, assim como faixas de transição entre eles. Os regimes são fortemente dependentes da razão de velocidades dos fluidos e podem ser classificados por meio da caracterização do processo de formação das gotas.	96

47	Dimensões da geometria utilizada.	100
48	Malha quadrilateral aplicada à geometria.	101
49	Processo de divisão de uma gota em um microcanal assimétrico. Inicialmente, a gota se aproxima da bifurcação e, ao atingir a junção, observa-se uma distribuição desigual de seu volume, culminando em sua ruptura assimétrica.	103
50	Perfil de pressão ao longo da linha central durante a aproximação da gota à junção.	104
51	Perfil de pressão ao longo da linha central na região da junção.	104
52	Perfil de pressão ao longo da linha central no momento da ruptura assimétrica da gota.	105
53	Contornos de velocidade em três diferentes estágios do processo de divisão da gota.	106
54	Campo vetorial de velocidades na região da junção dos ramos.	106
55	Vórtices de tamanhos distintos gerados pela diferença nos comprimentos dos canais de saída. L_L representa o ramo inferior e L_u o ramo superior.	107
56	Perfil de velocidade no primeiro estágio do processo de divisão para a região superior do canal de saída.	109
57	Perfil de velocidade no segundo estágio do processo de divisão para a região superior do canal de saída.	109
58	Perfil de velocidade no terceiro estágio do processo de divisão para a região superior do canal de saída.	110
59	Perfil de velocidade no primeiro estágio do processo de divisão para a região inferior do canal de saída.	111
60	Perfil de velocidade no segundo estágio do processo de divisão para a região inferior do canal de saída.	111
61	Perfil de velocidade no terceiro estágio do processo de divisão para a região inferior do canal de saída.	112

Lista de Tabelas

1	Resultados do estudo de convergência de malha para o diâmetro da gota. .	70
2	Propriedades físicas dos fluidos usados nas simulações de canal <i>T-junction</i> .	71
3	Propriedades físicas dos fluidos usados nas simulações para geometria <i>flow-focusing</i>	83
4	Propriedades físicas dos fluidos utilizados nas simulações.	102

1 Introdução e Fundamentação Teórica

1.1 Motivação

O desenvolvimento de microdispositivos tem desempenhado um importante papel em diferentes áreas do conhecimento e da produção tecnológica, especialmente em aplicações biomédicas, como a produção e otimização de dispositivos conhecidos como *lab-on-a-chip* ou *organ-on-a-chip*, os quais, atualmente, apresentam-se como essenciais na análise e manipulação de fenômenos biológicos em microescala (CASTILLO-LEÓN, 2014).

Nesse contexto, muitos microdispositivos operam e são fundamentados em conceitos advindos da microfluídica, definida como o conjunto de técnicas desenvolvidas para o controle de volume de fluidos em microescala (WHITESIDES, 2006). O desenvolvimento da microfluídica como uma área de intersecção entre a teoria de dinâmica de fluidos aplicada à microescala e a otimização de dispositivos que partem de tais princípios potencializa o estudo e a análise do comportamento de fluidos biológicos, possibilitando o entendimento de parâmetros e propriedades físicas dos fluidos em microcanais a fim de desenvolver sistemas funcionais.

Diante da importância do entendimento da dinâmica de fluidos em microescala para a otimização de microdispositivos funcionais, as técnicas computacionais emergem como uma ferramenta essencial. A Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics* - *CFD*) é caracterizada pela aplicação de robustos métodos computacionais para a modelagem e simulação de sistemas físicos que envolvam mecânica de fluidos, permitindo descrever condições de fluxo de fluido, predizendo aspectos de transferência de calor, massa e momento (MAO, 2007).

Este trabalho busca, por meio da aplicação de técnicas computacionais e simulações numéricas, compreender e analisar a dinâmica de fluidos envolvidos em microdispositivos com aplicações biotecnológicas, bem como identificar os principais parâmetros físicos que influenciam os sistemas microfluídicos estudados. Nesse sentido, buscamos a compreensão de como variados fatores, como as dimensões de geometrias trabalhadas, propriedades dos fluidos e condições iniciais dos sistemas estudados, determinam o comportamento do fluido em microcanais destinados a tarefas específicas. Além disso, é de grande interesse avaliar

a adequabilidade dos métodos e modelos computacionais empregados nas simulações de dinâmica de fluidos aplicada ao contexto de otimização de dispositivos microfluídicos.

Para tanto, em um primeiro momento, exploraremos a adequabilidade de um específico método numérico em CFD (*Volume of Fluid Method - VOF*) no contexto de formação funcional de gotas em um microcanal de uma determinada geometria (com junção T). Dada a devida validação do modelo empregado, objetivamos aplicá-lo para o estudo da influência de parâmetros geométricos em geometrias do tipo *flow focusing* na formação de microgotículas, identificando possíveis variações em forma e frequência de formação. Além disso, procuraremos delinear, de maneira qualitativa, o mecanismo de divisão de gotas (*droplet splitting*) em um microcanal assimétrico.

O presente trabalho torna-se favorável ao contexto de pesquisa do *Grupo de Física Aplicada à Medicina e Nanotecnologia* (GFAMN), uma vez que procura explorar conceitos fundamentais de novas abordagens de pesquisa, já que a utilização de microdispositivos à base de microfluídica é bem aplicada ao cenário da biotecnologia.

1.2 Microfluídica

As tecnologias que envolvem e aplicam conceitos da microfluídica em suas operações têm sido amplamente analisadas e constituem-se em grande interesse na comunidade científica, uma vez que apresentam capacidades úteis em muitos contextos, como a habilidade de uso de pequenas quantidades de amostras e reagentes, e de realizar separações e detecções com alta sensibilidade; baixo custo de otimização; tempo diminuto para análises; e tamanhos minimizados de dispositivos (WHITESIDES, 2006).

Historicamente, o estudo da microfluídica tem sido explorado por quatro grandes áreas voltadas às aplicações tecnológicas: análise molecular, biodefesa, biologia molecular e microeletrônica. Como uma primeira motivação para o desenvolvimento de dispositivos microfluídicos, destaca-se a necessidade de métodos microanalíticos para que, em análises químicas, seja possível garantir altas sensibilidade e resolução em pequenas quantidades de amostras. Outro fator que exerceu influência no desenvolvimento da microfluídica esteve relacionado com o advento de armas biológicas e químicas - especialmente devido à Guerra Fria. O incentivo, muitas vezes governamentais, à criação de detectores de ameaças

químicas e biológicas estimulou o estudo da microfluídica no meio acadêmico. Ainda, o advento da genômica, na década de 1980, fomentou o desenvolvimento de abordagens microanalíticas no campo de biologia molecular, corroborando o interesse em microfluídica. Por fim, uma grande motivação para a otimização de dispositivos microfluídicos advém da microeletrônica, a qual trouxe abordagens de fotolitografia associadas a tecnologias aplicadas a sistemas microeletromecânicos (*MEMS - Microelectromechanical Systems*), sobre os quais a microfluídica pode ser aplicada diretamente (WHITESIDES, 2006).

Futuramente, espera-se que os avanços na compreensão do comportamento de fluidos em microescala contemplem amplas aplicações factíveis em diversas áreas e campos que integrem as tecnologias de microfluídica (BATTAT; WEITZ; WHITESIDES, 2022). Destaca-se, nesta perspectiva futura de pesquisas, a microfluídica como ferramenta importante no diagnóstico biomédico (SCHORK, 2015); no desenvolvimento de tratamentos diversos (DITTRICH; MANZ, 2006); no controle de qualidade de produtos alimentícios, agrícolas e de consumo (NEETHIRAJAN et al., 2011); e na produção de materiais funcionais que apresentem controle de fluxo preciso. Apontam-se, neste contexto, as vantagens de técnicas de emulsões múltiplas utilizadas para a síntese de partículas funcionais, como as que contenham agentes farmacêuticos ativos ou compostos cosméticos (UTADA et al., 2005).

Os recentes avanços no desenvolvimento de tecnologias microfluídicas contribuíram para a integração de tecnologias de biosensores com leituras baseadas em microscopia (NEUŽIL et al., 2012). Nesse sentido, a microfluídica pode fornecer ferramentas para a realização de ensaios laboratoriais complexos com maior qualidade de informação ao se combinar com sistemas automatizados de processamento e armazenamento de dados. Ademais, os dispositivos otimizados com tecnologias microfluídicas permitem o isolamento, purificação, manipulação e transporte de partículas, biomoléculas, bacteriófagos e células (KANG et al., 2008).

1.3 Técnicas em microfluídica

A vasta aplicação das tecnologias microfluídicas faz necessária a existência de diferentes técnicas que pressupõe contextos e aplicações específicas e possibilitam o bom funcionamento de plataformas microfluídicas otimizadas para fins específicos. Assim, procura-

se delinear duas principais técnicas em microfluídica, aperfeiçoadas, especialmente, para aplicações biotecnológicas.

1.3.1 Técnicas microfluídicas de *patch-clamp*

As técnicas microfluídicas de *patch-clamp* são utilizadas para estudar e analisar a atividade elétrica das células. A medição da corrente elétrica através de canais iônicos nas membranas celulares é fundamental para o desenvolvimento de novos medicamentos. No entanto, as técnicas convencionais são complexas e têm baixo rendimento. Em contrapartida, ao associar essas técnicas à tecnologia microfluídica, como microplacas compatíveis com sistemas de alto rendimento, é possível integrar facilmente dispositivos microfluídicos robustos que conseguem administrar doses de medicamentos de forma mais eficiente (CHEN et al., 2011).

1.3.2 Microfluídica de gotas

A microfluídica de gotas consitui uma técnica de grande interesse, a medida que permite a criação, manipulação e a análise de pequenas gotas que podem servir como microreatores independentes para diferentes reações químicas e biológicas (TALY; KELLY; GRIFFITHS, 2007). Nestes sistemas, as gotas podem ser geradas por meio da inserção de amostras aquosas em um meio imiscível, como um composto hidrofóbico. O controle preciso do tamanho, forma e frequência de formação das gotas com certa monodispersidade é um desafio importante na garantia de ensaios de alto rendimento e precisão.

Os métodos hidrodinâmicos para a formação das gotas utilizam das geometrias dos microcanais e as características do escoamento do fluido para controlar a geração de gotículas. Tais métodos exploram a relação entre as forças de cisalhamento e as forças de tensão superficial nos fluidos, determinadas pelas características físico-químicas das geometrias dos canais, bem como dos fluidos trabalhados (UTADA et al., 2005). Além disso, técnicas ativas para geração de gotas têm sido utilizadas, como a utilização de tecnologias eletrohidrodinâmicas por meio da geração de sinais elétricos de eletrodos integrados às plataformas microfluídicas (YIN et al., 2020).

A microfluídica de gotas abrange uma série de aplicações e abordagens biotecnológicas

amplamente utilizadas em análises de alvos biológicos individuais como células, bactérias e vírus com alta precisão (CLAUSELL-TORMOS et al., 2008); no estudo de secreções de moléculas e produtos metabólicos por meio de detecção fluorescente (TEREKHOV et al., 2017); e, também, na análise de interações biológicas entre células usando mecanismos de encapsulação (BROUZES et al., 2009).

A geração de gotas nos microcanais de dispositivos microfluídicos tem outras vastas aplicações, como mostra a Figura 1, dentre as quais podemos destacar a detecção molecular (LAI; YANG; LEE, 2015); as análises por imagem (RADEMEYER et al., 2015); aplicações em transporte de fármacos (*drug delivery*) (VLADISAVLJEVIĆ et al., 2013); e o auxílio em diagnósticos (WANG; ZHANG; CHU, 2014).

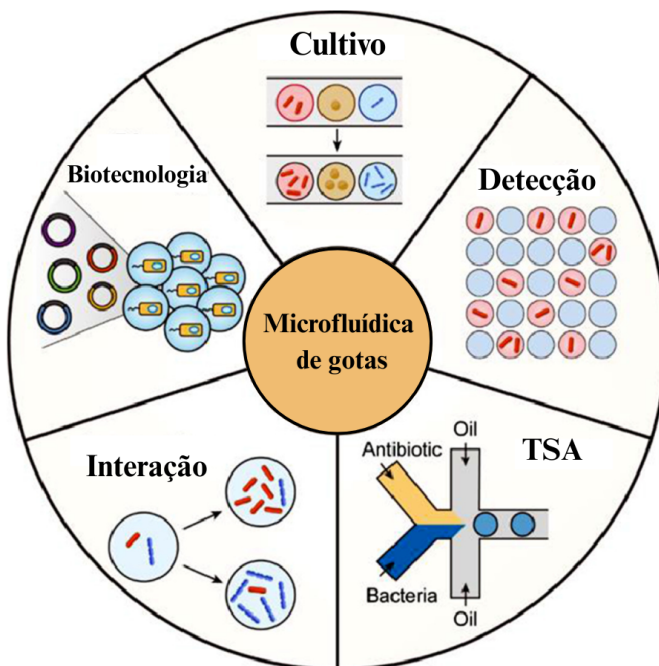
As técnicas de formação de gotas em dispositivos microfluídicos auxiliam a detecção molecular através da substituição de procedimentos laboratoriais complexos por sistemas miniaturizados. Além disso, oferecem maior controle sobre o manuseio de líquidos em volumes em microescala, reduz o uso de reagentes e possibilitam análises de alto rendimento. A microfluídica de gotas, atualmente, permite a manipulação e detecção de moléculas individuais para o estudo de macromoléculas biológicas, a fim de obter informações genéticas essenciais para análises complexas (ZHAO et al., 2013).

A microfluídica de gotas tem se consolidado como técnica auxiliadora em análises por imagens, principalmente, ao oferecer a produção controlada de gotas e partículas fluorescentes que sirvam como agentes de contraste (SHEERAN et al., 2015). A monodispersidade de gotas com tamanhos controlados torna o contraste, como em ultrassom, mais bem definido em comparação a técnicas convencionais (DHANALIWALA et al., 2013).

Os dispositivos microfluídicos, especialmente aqueles que se baseiam em técnicas de formação de gotas, constituem-se como plataformas promissoras e funcionais para o transporte de fármacos (GAÑÁN-CALVO et al., 2013). Os sistemas de liberação controlada de fármacos permitem mais estabilidade, proteção contra degradação e controle na liberação de medicamentos (IWANAGA et al., 2013).

A microfluídica de gotas é ideal, também, para diagnósticos por meio de plataformas miniaturizadas que oferecem testes clínicos rápidos e com consumo diminuto de reagentes (KALER; PRAKASH, 2014).

Figura 1: Aplicações de técnicas de microfluídica em gotas.



Fonte: Adaptado de HE, Z. *et al.* (2022)

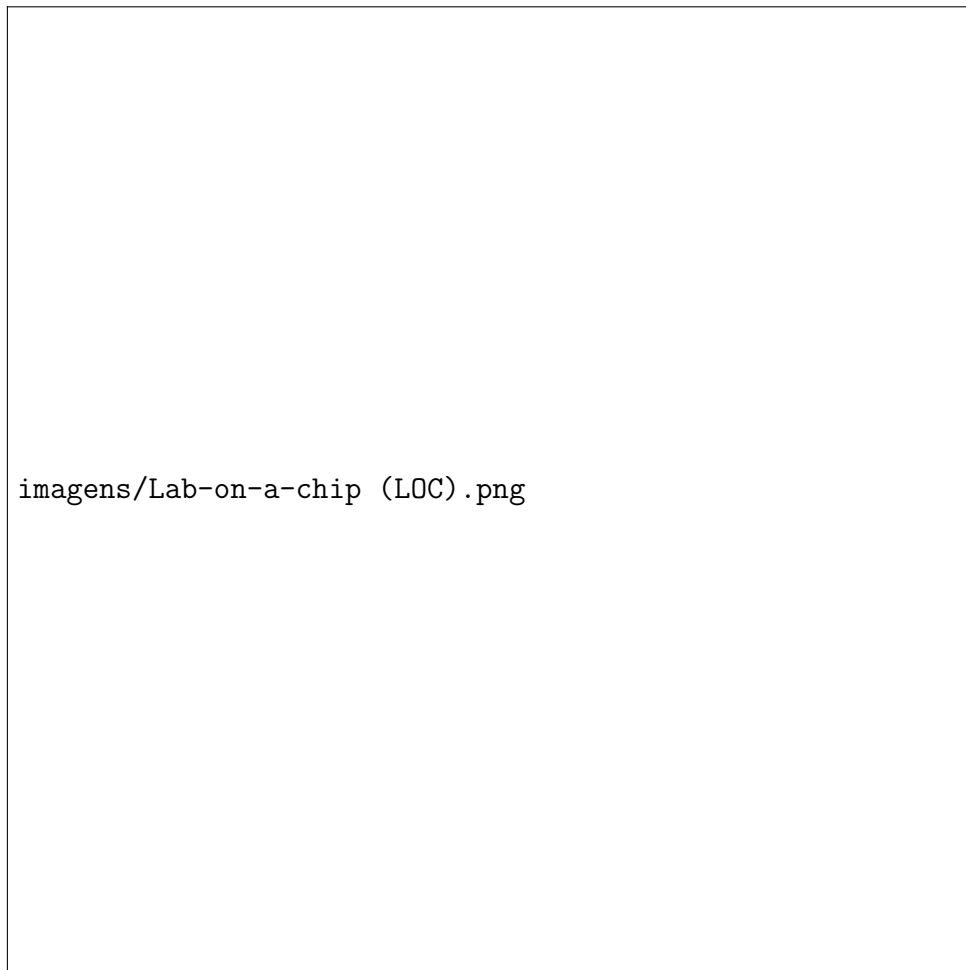
1.4 Dispositivos *lab-on-a-chip*

Muito do que se conhece sobre microfluídica tem sido implementado para a otimização dos chamados dispositivos *lab-on-a-chip* (LOC), essenciais para adaptação de métodos laboratoriais clássicos a fenômenos biológicos em microescala (CASTILLO-LEÓN, 2014). Esses dispositivos podem ser definidos como a miniaturização de processos químicos e biológicos, que envolvem sistemas micro eletromecânicos integrados capazes de lidar com diferentes estágios de processos bioquímicos (LIM; KOUZANI; DUAN, 2010).

O surgimento da tecnologia, também referenciada como *micro total analysis systems* (μ TAS), esteve relacionado, a partir da década de 1990, ao desenvolvimento de estruturas microfluídicas, como microválvulas e *micropumps*, viabilizadas pela microfabricação em silício. Tais avanços lançaram bases para a automação de manipulação de fluidos por meio de tecnologias microfluídicas (MARK et al., 2010).

A otimização de dispositivos LOC (*lab-on-a-chip*) pressupõe a integração entre as etapas de um processo laboratorial em uma plataforma (Figura 2). Para tanto, o processo de miniaturização atua sobre diversos componentes laboratoriais e sobre os sistemas de

Figura 2: Componentes de um sistema *lab-on-a-chip*.



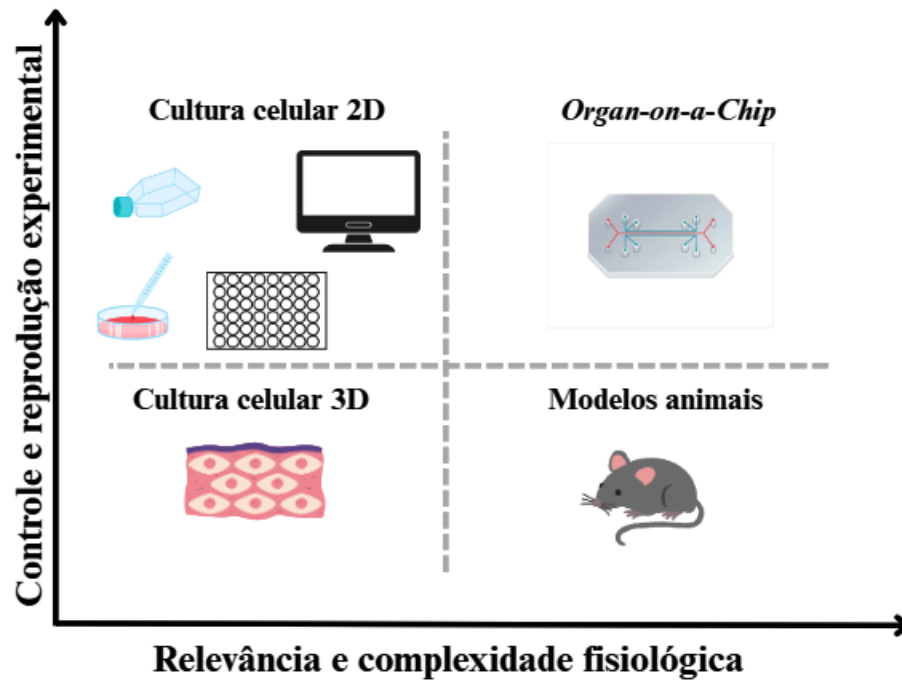
Adaptado de FRANCESKO, A. *et al* (2019)

detecção, que incluem sensores ópticos, magnéticos e elétricos (DITTRICH; MANZ, 2006), e os estágios procedimentais que garantem a boa funcionalidade de plataformas LOC incluem a amostragem, pré-tratamento de amostragem, reações químicas, separação e isolamento de produtos, sistema de detecção e análise de dados (BJÖRNMALM; YAN; CARUSO, 2014).

Os dispositivos LOC são capazes de oferecer uma melhor representação das condições fisiológicas de sistemas complexos quando comparados aos ensaios *in vitro* convencionais em macroescala (FRANCESKO; CARDOSO; LANCEROS-MÉNDEZ, 2019). No contexto de desenvolvimento de plataformas LOC, tornam-se viáveis a modelagem de ambientes biológicos junto à mimetização de sistemas complexos. Um exemplo notável são os sistemas *organ-on-a-chip*, projetados para reproduzir interações biológicas entre tecidos e órgãos, sendo amplamente utilizados para acelerar as fases iniciais da descoberta

de fármacos e reduzir a necessidade de testes em animais (Figura 3) (ZHENG et al., 2016; LEE; SUNG, 2013).

Figura 3: Comparação entre métodos convencionais e dispositivos *organ-on-a-chip* em relação ao controle experimental e relevância.



Fonte: Elaborado pelo autor

Sistemas *organ-on-a-chip* objetivam sintetizar unidades mínimas funcionais que reproduzam funções atribuídas a tecidos e órgãos. Estes sistemas incorporam aspectos físicos como escoamento de fluido, tensão de cisalhamento e compressão mecânica, viabilizando a análise de respostas de órgãos a medicamentos, substâncias e outras condições e fatores do ambiente (BHATIA; INGBER, 2014).

1.5 Métodos de fabricação

As técnicas de fabricação de dispositivos microfluídicos incluem microusinagem, litografia suave, micro modelagem e outros métodos.

Microusinagem

Os sistemas microeletromecânicos (*MEMS*) podem ser otimizados por meio de técnicas de microusinagem à base de silício. Tais técnicas constituem os primeiros modos de microfabricação desenvolvidos e podem lidar com a otimização de diversos sistemas comple-

xos (MAHALIK, 2006). Ainda que tenham sido amplamente empregadas, as técnicas de manufatura à base de silício podem apresentar dificuldades relacionadas às características físico-químicas do silício, como a opacidade óptica, e outras dificuldades, como o alto custo de produção e os desafios na integração de componentes (BEEBE; MENSING; WALKER, 2002).

Litografia suave

O uso extensivo de dispositivos microfluídicos para aplicações biológicas influenciou a necessidade de novos métodos de produção que sejam mais rápidos e de baixo custo. Assim, com o desenvolvimento de técnicas de litografia suave (*soft lithography*), microcanais de microdispositivos passaram a ser otimizados por meio da padronização de superfícies através de técnicas de carimbagem.

A litografia suave envolve a moldagem de um polímero chamado de polidimetilsiloxano (PDMS) por meio de moldes mestres. Esses moldes são, geralmente, fabricados por fotolitografia a fim de garantir um determinado padrão. As técnicas de litografia suave permite a criação de micro e nanoestruturas por meios práticos, mas eficientes, seja diretamente em superfícies ou no interior de microcanais (KIM et al., 2008).

Ainda existem diversas limitações quanto ao uso do PDMS na fabricação de dispositivos microfluídicos, especialmente, em relação às etapas que demandam os moldes feitos por fotolitografia, que consiste em um processo complexo e de alto custo (KAMEI et al., 2015).

Micromoldagem

As técnicas de moldagem por injeção surgem como alternativa eficiente e de baixo custo para a otimização de dispositivos microfluídicos. O processo consiste em tornar polímeros maleáveis através de aquecimento e, então, depositá-los em moldes desejados, onde ocorre o resfriamento do material para obter a peça final.

Alguns desafios estão relacionados à técnica de micromoldagem, como, por exemplo, a própria fabricação do molde mestre, que envolve processos de custos elevados. Ainda assim, o método se destaca pelo tempo diminuto de produção e em sua escalabilidade (BEEBE; MENSING; WALKER, 2002).

1.6 O papel dos métodos computacionais

O estudo da dinâmica de fluidos é de grande importância em qualquer processo de otimização de dispositivos microfluídicos, pois os mecanismos físicos envolvidos, que regem o bom funcionamento dos dispositivos desenvolvidos, constituem o entendimento de como fluidos se comportam nos microcanais modelados. Nesse sentido, a utilização de técnicas computacionais de simulação em dinâmica de fluidos possibilita o avanço e a otimização de materiais que sejam funcionais, poupando, muitas vezes, esforços laboratoriais.

A Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) apresenta importantes técnicas e ferramentas, bem como métodos que se enquadram em condições específicas de fluidos, como é o caso da microfluídica. Nesse sentido, métodos numéricos foram, e têm sido, desenvolvidos e empregados para garantir boas abordagens de problemas que envolvem microssistemas (ERICKSON, 2005; SONTTI; ATTA, 2017; AHMED et al., 2021; KHAN et al., 2020).

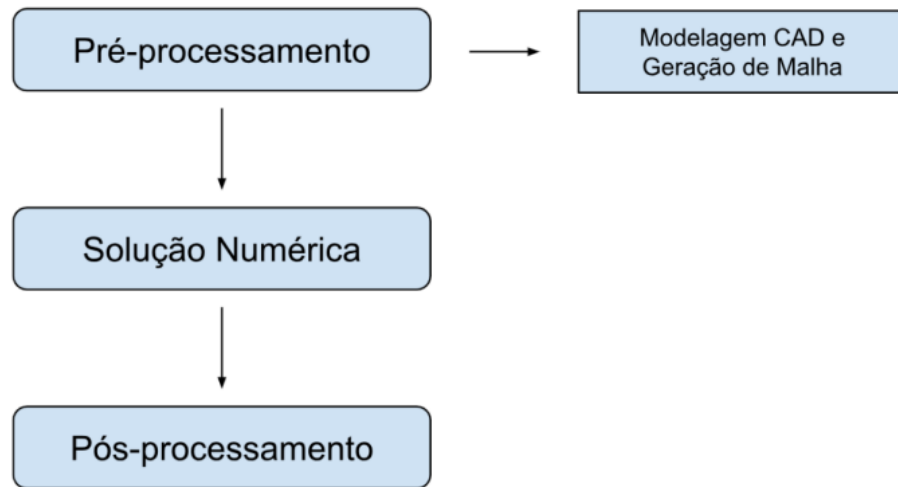
O emprego de técnicas computacionais no contexto de dispositivos microfluídicos envolve importantes passos que interligam os métodos de fabricação, desde o processo de modelagem dos dispositivos, à sua validação funcional, identificando parâmetros que interferem nos resultados desejados das aplicações.

As simulações numéricas assumem grande importância, também, no estudo de formação de gotas em microcanais, visto que possibilitam modelar sistemas multifásicos com ótimas abordagens (WÖRNER, 2012).

As simulações de CFD podem ser organizadas em três principais passos, exemplificados na Figura 4. O primeiro passo refere-se ao pré-processamento, relacionado à definição de uma região de interesse, geração de malha, definições de condições iniciais e condições de contorno, modelagem matemática e definição de esquemas numéricos. A etapa seguinte refere-se à resolução da simulação, que, basicamente, trata das soluções numéricas dos sistemas de equação do escoamento. Por fim, está a etapa do pós-processamento, relacionada à análise e ao tratamento de dados.

Os métodos computacionais, especialmente as ferramentas de CFD, são importantes no desenvolvimento de dispositivos microfluídicos, uma vez que auxiliam na identificação de variáveis e no entendimento sobre como suas influências alteram o funcionamento dos

Figura 4: Etapas de uma simulação numérica em fluidodinâmica computacional



Fonte: Elaborado pelo autor.

microdispositivos.

1.7 Princípios físicos da microfluídica

Existem certos fenômenos analisados em fluidodinâmica que ocorrem, predominantemente, em microescala, o que interfere no modo de otimização, produção e utilização de microdispositivos (BEEBE; MENSING; WALKER, 2002). Tal fato nos leva a considerar a necessidade do entendimento acerca das características e propriedades de sistemas microfluídicos de tal forma que a compreensão dos princípios fluidodinâmicos em microescala possibilite um caminho para a otimização funcional dos dispositivos microfluídicos. Nesse contexto, é fundamental apresentar os conceitos da dinâmica de fluidos aplicados à microescala, a fim de identificar como diferentes efeitos podem dominar os regimes em dimensões micrométricas.

Os fenômenos físicos em microescala envolvem princípios e conceitos que os tornam diferentes daqueles observados em sistemas de macroescala. Dentre os efeitos que se tornam dominantes em microfluídica, destacam-se o escoamento laminar, difusão, resistência de fluido, razão entre área superficial e volume, bem como tensão superficial (BEEBE; MENSING; WALKER, 2002).

Número de Reynolds

O número de Reynolds (Re) é um número adimensional que descreve e classifica o regime de escoamento de um fluido em laminar, em transição ou turbulento. Diferentemente do escoamento laminar, o escoamento turbulento torna a predição da posição de uma partícula de fluido em função do tempo um processo caótico. Calcula-se o número de Reynolds por:

$$Re = \frac{\rho v D_h}{\mu} \quad (1)$$

onde ρ é a densidade do fluido, v é a velocidade característica do escoamento, D_h é o diâmetro hidráulico (dependente da geometria da seção transversal do canal), e μ é a viscosidade dinâmica do fluido. Em tubos, para valores de $Re < 2300$, considera-se um regime de escoamento laminar. À medida em que o número de Reynolds se aproxima de 2300, o escoamento do fluido passa a apresentar característica de um estado de transição para um regime turbulento. Para valores maiores que 2300, o escoamento é considerado turbulento. Há de se notar, ainda, a presença de um regime de transição entre o fluxo laminar e turbulento.

Escoamento Laminar

A condição que determina o escoamento laminar é o movimento das partículas de fluido em trajetórias bem definidas, como lâminas (camadas) paralelas sem mistura significativa entre elas. Nestas condições, a viscosidade amortece as instabilidades no escoamento.

Dado o tamanho reduzido dos canais em microdispositivos, o escoamento é sempre laminar (WHITE, 1991). Uma das consequências do escoamento em microcanais se apresentar como laminar é a separação de dois ou mais fluidos correntes em contato, que não se misturam exceto por meio de difusão.

Difusão

A difusão é o processo pelo qual um grupo de partículas, dado um certo volume, espelham-se, por meio de movimento Browniano, mantendo a concentração média de partículas ao longo do volume constante. Para uma dimensão, a difusão pode ser modelada

por meio da equação:

$$d^2 = 2Dt \quad (2)$$

em que d é a distância percorrida por uma partícula dado um tempo t , e D é o coeficiente de difusão da partícula. Como a distância varia quadraticamente, a difusão torna-se um efeito interessante para a microfluídica.

Tensão superficial

A tensão superficial é resultado da coesão existente entre moléculas líquidas na interface entre líquidos ou gases. Nesse sentido, a energia livre de superfície de um líquido pode ser medida com base na quantidade de tensão contida em sua superfície. Em microescala, a tensão superficial desempenha um papel crucial no surgimento de fenômenos característicos da microfluídica. Em microcanais, com dimensões muito reduzidas, as distâncias percorridas por líquidos por meio de forças de natureza capilar podem ser significativas.

A equação de Yong-Laplace descreve a pressão gerada por uma superfície líquida com raios de curvatura perpendiculares R_1 e R_2 :

$$\Delta P = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (3)$$

em que γ é o coeficiente de tensão superficial entre os dois fluidos.

1.8 Formação de gotas em microcanais

O uso de gotas em dispositivos microfluídicos está, em muito, relacionado à minimização de dificuldades sobre a manipulação e dispersão presentes em condições de fase única, além de favorecer o controle sobre a mistura de substâncias químicas (BAROUD; GALLAIRE; DANGLA, 2010).

Para garantir a funcionalidade de dispositivos baseados em mecanismos de formação de gotas, é necessária a compreensão sobre os componentes físicos que atuam no processo de geração das gotas, especialmente acerca de questões relativas à dinâmica de fluidos nos

microcanais. A elucidação dessas perspectivas físicas corrobora o surgimento de soluções e iniciativas criativas para a otimização de novos dispositivos funcionais.

1.8.1 Princípios físicos da geração de gotas em microcanais

A presença de gotas em microcanais microfluídicos impõe novas condições de comportamento sobre os fluidos. Uma das principais consequências, do ponto de vista físico, da introdução das gotas está relacionada à tensão superficial, que admite duas principais interpretações.

Podemos tratar a tensão interfacial como uma força por unidade de comprimento, de intensidade σ (N/m), com tendência a atrair a interface. A variação espacial de σ promove um fluxo ao longo da interface com sentido de regiões de menores para regiões de maiores valores de tensão interfacial. A esse fenômeno, denomina-se escoamento de Marangoni. Fatores diversos podem influir tal tipo de escoamento. A variação de temperatura provoca um tipo de fluxo termocapilar, enquanto que a presença de tensoativos, um fluxo solutocapilar (BAROUD; GALLAIRE; DANGLA, 2010).

Uma outra abordagem em relação à tensão interfacial a entende como energia por unidade de área (J/m^2). Nesse sentido, a tensão interfacial tende a minimizar a área da superfície a fim de diminuir a energia livre da interface. Essa interpretação possibilita a explicação do porquê as gotas admitem um formato esférico. Mesmo quando confinadas em microcanais, a presença de paredes faz com que as gotas se adaptem, mas, ainda, mantendo a interface curva. Uma diferença de pressão entre o interior e o exterior da gota, denominada de pressão de Laplace, é provocada pela curvatura. A equação de Young-Laplace (equação (3)) permite calcular tal variação de pressão.

A presença de mecanismos de formação de gotas em microcanais acarreta em novas condições de contornos cinemáticas e dinâmicas no escoamento do fluido. Uma dessas condições relaciona-se ao fato de que a componente normal da velocidade de cada fluido deve ser igual à velocidade da interface no mesmo ponto. Além disso, as velocidades tangenciais à interface devem ser contínuas ao longo da gota. Por fim, as forças de cisalhamento tangenciais, também, devem estar em equilíbrio na interface. Isso estabelece que a variação da velocidade tangencial (v_{tan}) em relação à direção normal deve ser balanceada dentro e fora da gota:

$$\mu_{dentro} \partial_r \mathbf{v}_{tan} = \mu_{fora} \partial_r \mathbf{v}_{tan} \quad (4)$$

No presente trabalho, a representação de variáveis dentro da gota será denominada pelo subíndice *disperso*, representando o fluido da fase dispersa. Já para fora da gota, utilizaremos o subíndice *contínuo*, representando o fluido da fase contínua. As características e a classificação dos fluidos com os quais as simulações foram empregadas serão delineados posteriormente.

Números adimensionais

Em dinâmica de fluidos, valores adimensionais são utilizados para representar relações entre variáveis físicas e as próprias condições de comportamento do fluido. Um exemplo é o número de Reynolds, escrito pela equação (1), que possibilita classificar o regime de escoamento dos fluidos.

Outro fator adimensional tão importante para a descrição do processo de formação de gotas em microcanais é o número de Capilaridade (Ca), que representa a relação entre forças viscosas e a tensão interfacial atuante na interface de fluidos distintos. O número de Capilaridade pode ser descrito como:

$$Ca = \frac{\mu V}{\sigma} \quad (5)$$

em que μ é a viscosidade dinâmica, V , a velocidade característica do escoamento (para a fase contínua), e σ , a tensão interfacial. Valores baixos do número de capilaridade indicam a sobreposição da tensão interfacial sobre as tensões viscosas. Altos valores de Ca indicam que os efeitos das forças viscosas sobressaem-se.

1.8.2 Produção de gotas em microcanais

Mecanismos passivos de produção de gotas em microcanais.

As técnicas mais empregadas em microfluídica para a formação de gotas são capazes de gerar fentolitros a nanolitros de volume. Isso torna-se possível devido às técnicas deno-

minadas passivas, que atuam na produção das gotas por meio de mecanismos mecânicos, como geometria, velocidades e tensão interfacial (CHRISTOPHER; ANNA, 2007).

Três principais modos de geração de gotas têm sido observados e analisados, especificamente, quanto à maneira de rompimento da fase dispersa em formato de uma gota em microcanais (ZHU; WANG, 2017). Os modos mais fundamentais são classificados em estrangulamento (*squeezing*), gotejamento (*dripping*) e formação em jato (*jetting*).

O regime de estrangulamento ocorre em condições de baixos valores do número de capilaridade, como em torno de $Ca < 10^{-2}$. Para a formação da gota nessas condições, a saliência do fluido da fase dispersa cresce até obstruir parcialmente a região da junção nos microcanais das geometrias, limitando o escoamento do fluido da fase contínua ao seu redor. Esse processo causa o aumento da pressão ao longo da interface. À medida em que o gradiente de pressão gerado supera a pressão interna da fase dispersa, a interface passa a ser comprimida (estrangulada), formando uma gota com formato alongado. Tal aumento da pressão é, então, responsável pela quebra da fase dispersa.

O regime de gotejamento (*dripping*) é percebido à medida em que o número de capilaridade, Ca , aumenta. A transição do modo de estrangulamento para gotejamento é acompanhada pela dominância das forças viscosas, que arrastam a interface até o rompimento, sobre os efeitos de tensão interfacial, que tende a estabilizar a gota contra o processo de rompimento. Nesse regime, a quebra da fase dispersa ocorre antes que esta obstrua o canal principal, devido à forte intensidade da força de cisalhamento viscoso. A possibilidade de alta monodispersidade, isto é, a formação esférica homogênea das gotas, é uma importante característica do regime de gotejamento.

O regime de escoamento em jato (*jetting*) passa a ser identificado com o aumento da vazão do fluxo do fluido da fase contínua ou do fluido disperso. Nessas condições, emite-se um jato líquido contínuo do fluido da fase dispersa até o seu rompimento em gotas devido à instabilidade de Rayleigh-Plateau. O regime pode estar submetido à formação de gotas polidispersas, justamente, devido às instabilidades que o caracterizam.

No contexto de produção de gotas por métodos passivos, desenvolveram-se algumas abordagens que levam em conta diferentes geometrias de microcanais capazes de gerar gotas com certa monodispersidade. Os métodos, assim, podem ser divididos, quanto à forma do microcanal, em: produção em microcanal *T-junction* (junção em T), produção

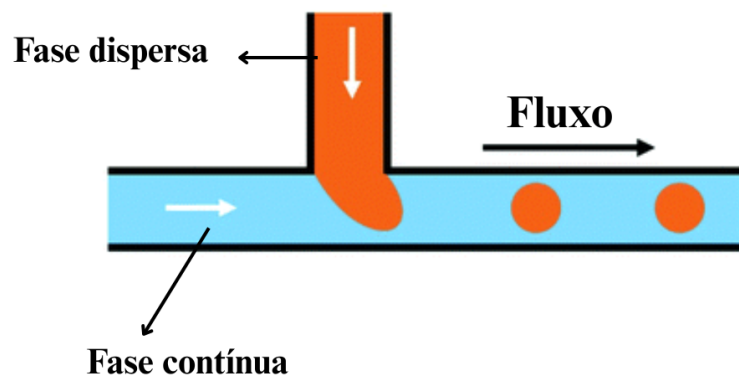
em microcanal *flow-focusing* (focalização de fluxo), produção em microcanal *co-flowing* (coescoamento de fluxo).

Junção em T

A formação de gotas em microdispositivos com geometria na forma de junção em T (*T-junction*) ocorre tal como exemplificada na Figura 5.

A primeira proposta da utilização deste formato em microdispositivos fora proposta por Thorsen *et al.* (2001), fazendo uso de gradientes de pressão para o controle da produção de gotas de água em tipos distintos de óleos (THORSEN *et al.*, 2001).

Figura 5: Geometria *T-junction* para a formação de gotas em microcanais.



Fonte: Adaptado de LIU, D. *et al.* (2022)

A formação de gotas neste tipo de geometria ocorre, sumariamente, em três regimes diferentes, os quais são influenciados pela razão entre os tamanhos dos canais de entrada e saída dos fluidos, bem como pela razão entre as diferentes velocidades dos fluxos das fases do sistema.

À medida em que o tamanho do canal de saída se torna maior que o canal de entrada (da fase dispersa), e o número de capilaridade Ca é relativamente alto, ou seja, as forças viscosas são dominantes sobre as forças interfaciais, as gotas são produzidas antes que seus tamanhos possam bloquear o canal. Nestas situações, a produção ocorre devido à ação das tensões de cisalhamento sobre o fluido da fase dispersa. Geralmente, este regime de formação é denominado como regime de gotejamento (*dripping*), em que a quebra do fluido da fase dispersa em gotas ocorre quando a tensão de cisalhamento viscosa supera

a tensão interfacial (BAROUD; GALLAIRE; DANGLA, 2010).

Quando a dimensão do canal de saída se aproxima à dimensão do canal de entrada da fase dispersa, outro regime passa a ser identificado. Nestas condições, quando o número de capilaridade Ca torna-se baixo, o fluxo da fase dispersa obstrui o canal principal de saída, restringindo o fluxo da fase contínua. Nessas condições, a pressão dinâmica é aumentada, levando à curvatura da interface e à decorrente quebra em gota da fase dispersa. Ocorre, assim, a produção de gotas em um regime de estrangulamento (*squeezing*) (GARSTECKI et al., 2006).

Há, ainda, um terceiro regime de produção de gotas em canais com junção em T. Denominado como escoamento em jato (*jetting*), esse domínio de produção de gotas é caracterizado pelas condições de altas razões de fluxo, baixa tensão interfacial, o que implica em altos valores do número de capilaridade Ca . À medida em que o número de capilaridade é incrementado, a quebra da fase dispersa em forma de gota tende a ocorrer mais adiante à junção, formando um jato de produção de gotas (MENECH et al., 2008).

Focalização de fluxo (flow-focusing)

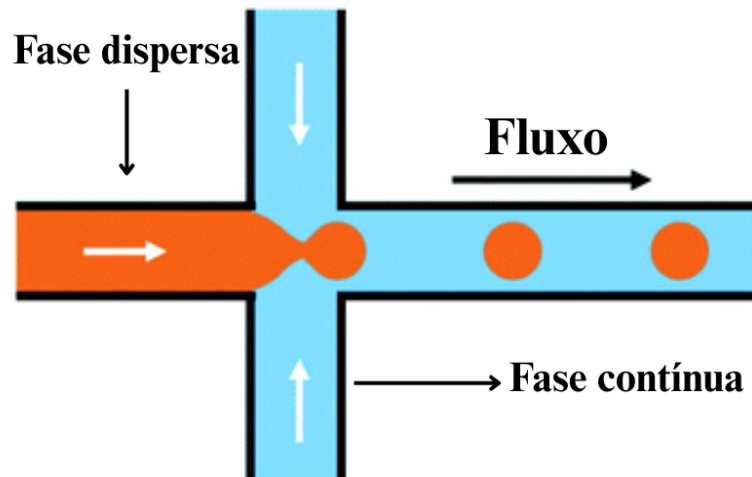
As primeiras propostas de uma geometria que pudesse focalizar o fluxo para produzir gotículas foram feitas por Anna *et al.* (2003) e Dreyfus *et al.* (2003). Nessas condições geométricas, a fase dispersa é estrangulada pelos fluxos da fase contínua, como mostra a Figura 6.

Podemos identificar, assim como nas condições geométricas anteriores, três principais regimes de formação de gotas. Entretanto, em condições específicas de parâmetros físicos, um quarto regime pode ser identificado, denominado como regime de filamento (BAROUD; GALLAIRE; DANGLA, 2010).

Na formação de gotas em condições de estrangulamento, o processo de rompimento da fase dispersa em forma de gotícula ocorre em duas etapas: devido ao efeito das forças hidrodinâmicas do escoamento, o fluido da fase dispersa começa a ser afinado quase estaticamente. Quando o canal é mais alongado, a duração desta primeira etapa é maior. Depois, quando o filamento da fase dispersa atinge um tamanho com dimensões parecidas com a profundidade do canal principal, uma forma cilíndrica é percebida e, então, há um rápido incremento na instabilidade capilar (também conhecida por instabilidade de

Rayleigh-Plateau). Dessa forma, ocorre a quebra e o desprendimento da gota (DOLLET et al., 2008).

Figura 6: Geometria *flow-focusing* para a formação de gotas em microcanais



Fonte: Adaptado de LIU, D. *et al.* (2022)

Coescoamento de fluxo (coflowing)

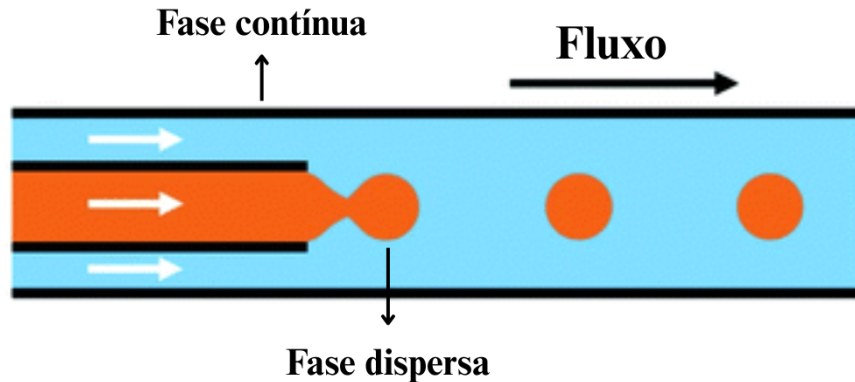
A primeira proposta para sistemas líquido-líquido de produção de gotas por meio de mecanismos de coescoamento foi promovida por Umbanhowar *et al.* (2000) (UMBANHOWAR; PRASAD; WEITZ, 2000). O esquema geométrico envolve o encontro entre a fase dispersa e a fase contínua em correntes de fluxo paralelas, como mostra a Figura 7.

Nessas condições geométricas, predominam dois principais regimes de formação de gotas: o regime de gotejamento, em que gotículas são comprimidas nas proximidades do tubo capilar, e o regime de jato, em que as gotas se juntam ao um fio de fluido que se estende a partir da ponta do tubo. A transição entre os dois regimes ocorre à medida em que a velocidade da fase contínua ultrapassa um valor considerado crítico. Sabe-se que tal valor depende da taxa de fluxo da fase dispersa e dos valores de viscosidade e tensão interfacial (CRAMER; FISCHER; WINDHAB, 2004).

Mecanismos ativos de produção de gotas em microcanais

Maiores precisão e controle da produção de gotas em microcanais, especialmente, no que diz respeito às formas e à frequência de produção requerem o emprego de técnicas que superem os desafios da produção passiva de gotas. Nesse sentido, mecanismos ativos

Figura 7: Geometria *coflowing* para formação de gotas em microcanais.



Fonte: Adaptado de LIU, D. *et al.* (2022)

têm sido propostos para o refinamento de sistemas microfluídicos (XI et al., 2017).

A geração ativa de gotas é capaz de oferecer maior flexibilidade no controle do tamanho e da taxa de produção de gotas, proporcionando, em muitos casos, a geração sob demanda. Além disso, há uma redução significativa no tempo de estabilização da produção de gotas em comparação aos mecanismos passivos (ZHU; WANG, 2017).

Controle elétrico

Dentre os métodos ativos que têm sido propostos, destaca-se a utilização de campos elétricos para a manipulação dos sistemas microfluídicos de produção de gotas. Para tanto, a aplicação consiste na associação do dispositivo microfluídico com eletrodos, uns conectados à alta tensão, e outros, aterrados (LINK et al., 2006). Nesses sistemas, que combinam forças de diferentes origens, as configurações espaciais da geometria e do posicionamento dos eletrodos se tornam fundamentais, uma vez que o campo elétrico deve estar alinhado com as forças mecânicas e com as junções geométricas que focalizam o fluxo (GANÁN-CALVO, 2007).

Diversas limitações associadas à geração de gotas em microcanais por métodos passivos podem ser superadas por meio do controle elétrico. Entre essas limitações estão: a dificuldade em controlar com precisão o tamanho e a frequência de formação das gotas; a coalescência ineficiente de gotas estabilizadas com surfactantes; a limitação na divisão de gotas maiores em alíquotas menores; e a impossibilidade de direcionar seletivamente gotas individuais para diferentes canais. A aplicação de campos elétricos possibilita o controle

preciso desses processos, permitindo a geração sob demanda, o direcionamento individual de gotas, a manipulação eficiente de coalescência e divisão, além do ajuste fino do volume e da frequência de formação, promovendo maior reprodutibilidade e flexibilidade em dispositivos microfluídicos (LINK et al., 2006).

Os mecanismos ativos de geração de microgotas que envolvem a aplicação de um campo elétrico podem ser categorizados em relação ao tipo de corrente elétrica aplicada. O controle por corrente contínua (CC) caracteriza-se pela tensão constante, já o controle por corrente alternada (CA) corresponde à oscilação da tensão em uma frequência diferente daquela em que as gotas são geradas (CHONG et al., 2016).

Nesse contexto, estudos têm apontado que tanto a aplicação de corrente contínua, bem como alternada, influencia significativamente a formação de gotas em microcanais, especialmente em geometrias que apresentam a modelagem do tipo de focalização de fluxo (*flow-focusing*). As condições de parâmetros como tensão, frequência e o tipo de corrente correspondem aos objetivos experimentais e simulacionais pretendidos, bem como às propriedades dos fluidos utilizados.

Como exemplo, a aplicação de corrente contínua, com a presença de um campo elétrico usado para carregar gotículas com cargas opostas durante a formação, é capaz de forçar a coalescência de gotas provenientes de diferentes canais de fluxo, além de induzir uma formação precisa de pares de gotas (LINK et al., 2006). Identifica-se, também, que a presença de corrente alternada de alta frequência aplicada à geometria de focalização de fluxo favorece o ajuste fino do tamanho das gotas independente das condições hidrodinâmicas (TAN; SEMIN; BARET, 2014). Além disso, as gotas produzidas podem ser eletricamente carregadas e, assim, direcionadas ou desviadas em direção aos eletrodos com polaridade oposta, favorecendo o direcionamento seletivo por diferentes ramificações em microcanais (GUO et al., 2010).

2 Objetivos

Este trabalho busca, por meio de técnicas computacionais de CFD, analisar os principais parâmetros envolvidos na formação de gotas em microcanais de dispositivos microfluídicos. Para tanto, procuramos:

- avaliar a adequabilidade de um modelo computacional para o estudo da formação de gotas em microcanais por meio da comparação com um método numérico alternativo;
- entender como a relação entre as velocidades de fluido da fase dispersa e contínua influenciam a geração de gotas no que diz respeito ao seu tamanho, forma e frequência de formação;
- compreender como os aspectos de dimensões geométricas dos microcanais alteram os mecanismos de formação de gotas, bem como suas características;
- delinear e classificar os regimes de fluido em que se atuam os mecanismos de formação de gotas em diferentes condições físicas;
- entender, qualitativamente, a dinâmica do processo de divisão de gotas sob condições de assimetria geométrica.

Nesse sentido, procuramos dividir este trabalho em três frentes, que fazem referência aos escopos cobertos pelos nossos objetivos. A primeira frente, assim, versa sobre a adequabilidade de um método de CFD para o estudo em microfluídica de gotas; a segunda frente, sobre a influência de parâmetros geométricos no processo de formação de microgotículas, e, por fim, na terceira frente, nos debruçamos no entendimento de um processo de divisão de gotas em uma geometria com características assimétrica.

3 Metodologia

3.1 Mecânica de fluidos em microfluídica

A análise das características físicas de sistemas microfluídicos pressupõe o entendimento da dinâmica de fluidos aplicada à microescala. Assim, dados os conceitos centrais acima, torna-se fundamental discorrer acerca das equações de governança de fluidos em microescala.

3.1.1 Notação de índices

Os problemas que envolvem a microfluídica pressupõe um tratamento matemático complexo dada a natureza das equações de governança, as quais incluem escalares, campos vetoriais e campos tensoriais. Assim, a fim de simplificar as descrições das expressões matemáticas posteriores, adotamos algumas notações específicas, detalhadas a seguir.

Primeiramente, para o sistema Cartesiano de coordenadas (x, y, z) , escrevemos os seguintes vetores unitários correspondentes: $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$. O vetor posição, $\mathbf{r}$, pode ser escrito como:

$$\mathbf{r} = r_x \mathbf{e}_x + r_y \mathbf{e}_y + r_z \mathbf{e}_z \quad (6)$$

Durante todo o referencial teórico demonstrado, utilizamos a convenção de Einstein (notação de Einstein) para as representações matemáticas. Como exemplo, mostra-se o seguinte produto escalar:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{u} = v_i u_i \quad (7)$$

Para as derivadas parciais espaciais de uma função $F(\mathbf{r}, t)$, utilizamos o símbolo ∂_i , em que i pode admitir os valores de x, y, z . Para as derivadas parciais temporais, usamos ∂_t . Dessa maneira:

$$\partial_x F \equiv \frac{\partial F}{\partial x} \quad \text{e} \quad \partial_t F \equiv \frac{\partial F}{\partial t} \quad (8)$$

Para a derivada temporal total, nos casos em que se considera uma descrição Lagrangiana de uma função $F(\mathbf{r}(t), t)$ seguindo uma partícula de fluido, usamos o símbolo d_t :

$$d_t F \equiv \frac{dF}{dt} = \partial_t F + (\partial_t r_i) \partial_i F = \partial_t F + v_i \partial_i F \quad (9)$$

Já o operador nabla, ∇ , que contenha as derivadas espaciais, pode ser descrito, em coordenadas Cartesianas, como:

$$\nabla \equiv \mathbf{e}_x \partial_x + \mathbf{e}_y \partial_y + \mathbf{e}_z \partial_z = \mathbf{e}_i \partial_i \quad (10)$$

Na mecânica de fluidos, é comum o trabalho com vetores e tensores. Assim, torna-se conveniente a adoção de símbolos especiais, dentre os quais estão o delta de Kronecker (δ_{ij}) e o símbolo de Levi-Civita (ϵ_{ijk}).

Quanto ao delta de Kronecker, escrevemos:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (11)$$

Para o símbolo de Levi-Civita, escrevemos:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{se } (ijk) \text{ for uma permutação par de } (123) \text{ ou } (xyz), \\ -1, & \text{se } (ijk) \text{ for uma permutação ímpar de } (123) \text{ ou } (xyz), \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (12)$$

O símbolo de Levi-Civita aparece de forma direta na definição de produto vetorial, como exemplo:

$$(\mathbf{u} \times \mathbf{v})_i \equiv \epsilon_{ijk} u_j v_k \quad (13)$$

E, também, na definição do rotacional $\nabla \times \mathbf{v}$ de um vetor $\mathbf{v}$:

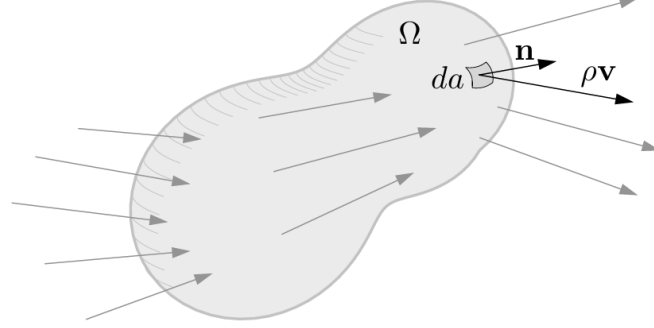
$$(\nabla \times \mathbf{v})_i \equiv \epsilon_{ijk} \partial_j v_k \quad (14)$$

3.1.2 Equação da continuidade

A equação da continuidade expressa a conservação de massa em mecânica clássica.

Inicialmente, consideremos um fluido compressível, isto é, um fluido em que a densidade ρ pode variar em função do espaço e do tempo. Para uma forma arbitrária e fixa (Figura 8), Ω , a massa total $M(\Omega, t)$, dentro de Ω , pode ser expressa por meio de uma integral de volume sobre a densidade ρ :

Figura 8: Representação do campo de densidade $\rho \mathbf{v}$ fluindo através de uma região arbitrária Ω . Uma área infinitesimal da é associada a um vetor unitário $\mathbf{n}$ perpendicular à superfície.



Fonte: BRUUS, H. (2007)

$$M(\Omega, t) = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (15)$$

em que escrevemos o volume infinitesimal de integração como $d\mathbf{r}$. Na mecânica não-relativística, a massa não pode aparecer ou desaparecer espontaneamente, assim a variação de $M(\Omega, t)$ ao longo do tempo só pode ocorrer com movimento de massa entrando ou saindo da região Ω por meio da sua fronteira $\partial\Omega$.

A densidade de corrente de massa $\mathbf{J}$ representa o fluxo de massa por unidade de área e por unidade de tempo. Tal grandeza é dada pelo produto da densidade de massa ρ pela velocidade de convecção $\mathbf{v}$:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \quad (16)$$

Como a região Ω é fixa, a derivada temporal da massa $M(\Omega, t)$ pode ser calculada como uma integral de volume. Dessa forma, pela equação (15):

$$\partial_t M(\Omega, t) = \partial_t \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \int_{\Omega} \partial_t \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (17)$$

Podemos, também, escrever a derivada temporal da massa como uma integral de superfície sobre $\partial\Omega$ da densidade de corrente de massa com o uso da equação (16):

$$\partial_t M(\Omega, t) = - \int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot (\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)) \, da = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)) \, d\mathbf{r} \quad (18)$$

A última equação pode ser obtida através da aplicação do teorema de Gauss. Nela, o sinal negativo representa a diminuição da massa na região Ω quando $\mathbf{v}$ é paralelo ao vetor normal $\mathbf{n}$.

Das equações (17) e (18), segue-se:

$$\int_{\Omega} [\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t))] \, d\mathbf{r} = 0 \quad (19)$$

Tal resultado é verdadeiro para qualquer que seja a região Ω . Em sua forma diferencial, a equação da continuidade é:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad \text{ou} \quad \partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (20)$$

Nos casos que envolvem a microfluídica, as velocidades de fluxo são pequenas, e o fluido pode ser tratado como incompressível, ou seja, com ρ constante no espaço e no tempo. Dessa maneira, a equação da continuidade se torna:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (21)$$

3.1.3 Equações de Navier-Stokes

As equações de Navier-Stokes são a representação da segunda lei de Newton para partículas de fluidos.

Para uma partícula ordinária de massa m , em que atuam forças externas $\sum_j \mathbf{F}_j$, a segunda lei de Newton é descrita como:

$$m \, d_t \mathbf{v} = \sum_j \mathbf{F}_j \quad (22)$$

Em mecânica de fluidos, ao invés de trabalharmos com partículas de fluido individualmente, abordamos os conceitos de densidade, ρ , e densidade de força, $\mathbf{f}_j$.

É, também, importante salientar o cuidado ao trabalhar com a derivada temporal do campo de velocidade $\mathbf{v}$, pois, para um campo Euleriano, a velocidade não representa a velocidade de uma partícula de fluido individual, mas descreve o fluxo em cada ponto do espaço. Assim, a fim de obter uma equação de movimento fisicamente correta, utilizamos do conceito de derivada material, D_t , que considera tanto a variação temporal quanto a variação espacial da velocidade. Dessa forma, pode-se escrever, inicialmente, uma equação para o balanço de momento linear como:

$$\rho D_t \mathbf{v} = \sum_j \mathbf{f}_j \quad (23)$$

Derivada material

A derivada material, também chamada de derivada substancial, descreve a taxa de variação de uma grandeza a partir de uma descrição Lagrangiana, ou seja, seguindo o movimento de uma partícula fluida. Para tanto, leva-se em consideração a variação temporal e a variação espacial de uma determinada quantidade (grandeza), diferentemente da descrição Euleriana, em que o campo de velocidade é observado por um ponto fixo no espaço.

A derivada material de uma grandeza representada pela função $F(\mathbf{r}, t)$ é:

$$d_t F(\mathbf{r}(t), t) = \partial_t F + (\mathbf{v} \cdot \nabla) F \quad (24)$$

Aplicando para o campo de velocidade $\mathbf{v}$, temos:

$$\rho D_t \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \equiv \rho d_t \mathbf{v}(\mathbf{r}(t), t) \equiv \rho [\partial_t \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)] \quad (25)$$

Podemos obter o mesmo resultado pela variação infinitesimal do campo de velocidades $\mathbf{v}$ Euleriano como:

$$d\mathbf{v} = dt \partial_t \mathbf{v} + (d\mathbf{r} \cdot \nabla) \mathbf{v} \quad (26)$$

Ao calcularmos a variação devido ao movimento de uma partícula fluida particular, devemos ter que:

$$d\mathbf{r} = \mathbf{v}dt \quad (27)$$

Combinando a equação (27) à equação (16), obtemos a mesma equação (25).

Para um fluxo variável, podemos fazer a mesma análise, concluindo que, assim, a derivada material é dada por:

$$D_t = \partial_t + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \quad (28)$$

De tal forma que a equação de Navier-Stokes seja:

$$\rho(\partial_t + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}) = \sum_j \mathbf{f}_j \quad (29)$$

Assim, precisamos determinar as expressões para as densidades de força, isto é, a força por unidade de volume atuando em um fluido.

Forças de corpo

As forças de corpo representam forças externas que atuam em todo corpo de uma partícula de fluido. Para o presente contexto, podemos abordá-las considerando-as como a força gravitacional e a força elétrica. A densidade de força resultante pode, então, ser escrita como:

$$\mathbf{f}_{\text{grav}} + \mathbf{f}_{\text{el}} = \rho\mathbf{g} + \rho_{\text{el}}\mathbf{E} \quad (30)$$

Força de gradiente de pressão

A resultante de forças externas, $\mathbf{F}_{\text{press}}$, devido à pressão, p , em uma região Ω com superfície $\partial\Omega$ e vetor normal à superfície, $\mathbf{n}$, é dada pela integral de superfície de $-\mathbf{n}p$:

$$\mathbf{F}_{\text{press}} = \int_{\partial\Omega} (-\mathbf{n}p) da = \int_{\partial\Omega} \mathbf{n}(-p) da = \int_{\Omega} (-\nabla p) d\mathbf{r} \quad (31)$$

No último passo da equação acima, o teorema de Gauss foi aplicado a fim de converter uma integral de superfície em uma integral de volume. Segundo o teorema, para um campo vetorial qualquer $\mathbf{A}$:

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} da = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{A} d\mathbf{r} \quad (32)$$

O campo $\mathbf{A}$, neste caso, corresponde à $p\mathbf{I}$, com $\mathbf{I}$ sendo a matriz identidade. Assim, aplicando o teorema, temos:

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{n}(-p) da = \int_{\Omega} (-\nabla p) d\mathbf{r} \quad (33)$$

O integrando da integral de volume é identificado como a densidade de força devido à pressão:

$$\mathbf{f}_{\text{pres}} = -\nabla p \quad (34)$$

Força viscosa e tensor de tensões viscosas

Dada a região Ω , considera-se, sobre a superfície $\partial\Omega$, a existência forças de atrito devido à natureza viscosa do fluido e do movimento relativo entre o fluido dentro da região com o fluido ao redor.

A força de atrito $d\mathbf{F}$, sobre um elemento de superfície da , em relação ao vetor normal $\mathbf{n}$, é descrita por um tensor de segunda ordem, já que depende da direção da força e da orientação da superfície sobre a qual ela atua. Denomina-se tal tensor como tensor de tensão viscosa (σ'_{ik}), que representa a i -ésima componente da força de atrito viscosa por unidade de área aplicada a um elemento de superfície cuja normal está alinhada ao vetor unitário $\mathbf{e}_k$. Pode-se, assim, escrever:

$$dF_i = \sigma'_{ik} n_{ik} da \quad (35)$$

O atrito (fricção) interna admite valor diferente de zero para os casos em que há movimento relativo entre as partículas do fluido, ou seja, é preciso um gradiente de velocidade, que descreve diferentes velocidades de partículas em diferentes posições do fluido. Dessa forma, o tensor de tensões viscosas passa a depender apenas das derivadas espaciais da velocidade.

Quando o fluido estiver rotacionando, e, assim, o campo de velocidades admitir a

forma de $\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$, a tensão viscosa deve ser igual a zero, já que não há cisalhamento do fluido. Para este caso, é estabelecida a relação anti-simétrica $\partial_k v_i = -\partial_i v_k$, o que faz com que σ' se torne igual a zero. Nessas condições, o tensor de segunda ordem geral é:

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\partial_k v_i + \partial_i v_k - \frac{2}{3} \delta_{ik} \partial_j v_j \right) + \zeta \delta_{ik} \partial_j v_j \quad (36)$$

Os coeficientes η e ζ são, respectivamente, considerados como viscosidade e viscosidade volumétrica (*bulk viscosity*).

Podemos escrever a força viscosa $\mathbf{F}_{\text{viscosa}}$ por meio de uma integral de superfície, convertendo-a em uma integral de volume pelo teorema de Gauss:

$$(\mathbf{F}_{\text{viscosa}})_i = \int_{\partial\Omega} n_k \sigma'_{ik} da = \int_{\Omega} \partial_k \sigma'_{ik} d\mathbf{r} \quad (37)$$

O termo a ser integrado é a componente i -ésima da densidade de força viscosa:

$$(\mathbf{f}_{\text{viscosa}})_i = \partial_k \sigma'_{ik} = \eta \partial_k \partial_k v_i + \left(\frac{1}{3} \eta + \zeta \right) \partial_i (\partial_k v_k) \quad (38)$$

3.1.4 Equação de Navier-Stokes para fluidos compressíveis

Dada a devida estrutura teórica, é possível escrever, em termos dos conceitos apresentados, a equação de Navier-Stokes para fluidos compressíveis, isto é, aqueles em que a densidade ρ varia em relação ao espaço e tempo.

Para representar as tensões internas de um fluido, é comum combinar a força de pressão (associada a um gradiente de pressão ∇p) junto às forças de viscosidade (a qual está associada ao gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{v}$).

O tensor de tensão é escrito como:

$$\sigma_{ik} = -p \delta_{ik} + \sigma'_{ik} \quad (39)$$

Podemos escrever, então:

$$(\mathbf{f}_{\text{pres}} + \mathbf{f}_{\text{viscosa}})_i = \partial_k \sigma_{ik} \quad (40)$$

Ao combinar as equações (30) e (40) na equação (29), obtemos a expressão completa para a equação de Navier-Stokes, escrita em termos dos coeficientes de viscosidade η e ζ :

$$\rho(\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \left(\frac{1}{3} \eta + \zeta \right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \rho \mathbf{g} + \rho_{\text{el}} \mathbf{E} \quad (41)$$

3.1.5 Equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis

Para fluidos, incompressíveis, isto é, aqueles em que a densidade ρ permanece constante ao longo do espaço e tempo, a equação da continuidade assume forma:

$$\partial_k v_k = 0 \quad (42)$$

Assim, a equação (36) pode ser reduzida à seguinte expressão:

$$\sigma'_{ik} = \eta (\partial_k v_i + \partial_i v_k) \quad (43)$$

Tomando η constante, o tensor de tensão é:

$$\partial_k \sigma_{ik} = -\partial_i p + \eta \partial_k \partial_k v_i \quad (44)$$

A equação de Navier-Stokes pode ser escrita como:

$$\rho(\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} + \rho_{\text{el}} \mathbf{E} \quad (45)$$

Para o presente trabalho, consideramos o coeficiente η como sendo a própria viscosidade dinâmica μ dos fluidos com os quais trabalhamos.

3.2 Técnicas Numéricas em dinâmica de fluidos

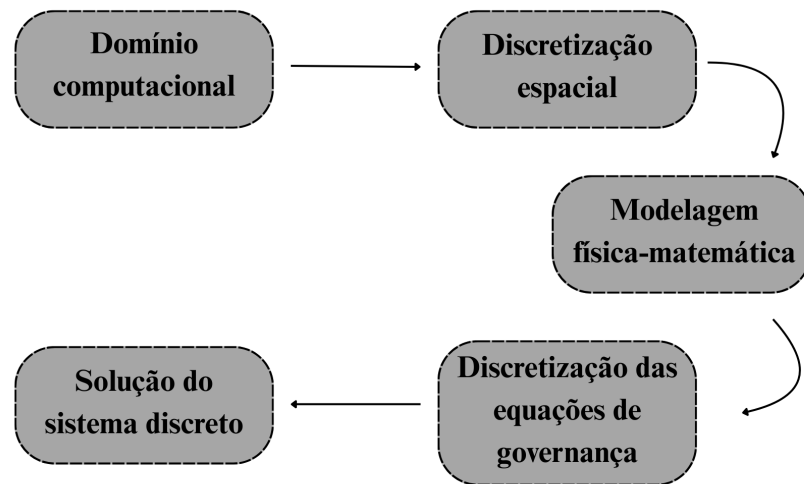
O emprego de ferramentas computacionais no estudo da dinâmica de fluidos implica a resolução numérica das equações de Navier-Stokes e da continuidade. Diferentes métodos de discretização foram desenvolvidos e estabelecidos para tal finalidade. Destacam-se, dentre as técnicas computacionais desenvolvidas para a resolução de equações diferenciais, o método das diferenças finitas (*Finite Difference Method* - FDM), o método de volume finitos (*Finite Volume Method* - FVM) e o método dos elementos finitos (*Finite Element Method* - FEM), sendo o FVM o mais utilizado em Mecânica de Fluidos.

As etapas de uma simulação numérica aplicada aos problemas em dinâmica de fluidos devem ser bem estabelecidas e conhecidas a fim de garantir a boa performance do método/modelo empregado, bem como das soluções obtidas. Nesse sentido, a solução deve seguir um fluxo de passos, tal como representado pela Figura 9. Inicialmente, é necessário que se estabeleça o domínio computacional, sobre o qual a solução será obtida. Com isso, delimita-se espacialmente o problema físico de interesse e define-se condições de contorno para o problema. Posteriormente, para que seja possível a solução numérica das equações diferenciais - sejam elas de diferentes naturezas -, deve-se obter a discretização espacial do domínio computacional, dividindo-o em células ou elementos. Assim, o problema deve ser modelado matematicamente, seguindo às equações de governança que descrevem fisicamente o problema estudado. Em seguida, a discretização dessas equações é realizada, transformando-as de contínuas em discretas, aplicáveis ao domínio espacial já discretizado. Assim, a solução é obtida ao resolver o sistema algébrico discreto resultante das etapas anteriores.

Ainda que os métodos convencionais citados anteriormente forneçam boas resoluções no contexto de dinâmica de fluidos, o interesse em modelar sistemas multifásicos influenciou o surgimento de novas abordagens capazes de lidar com a separação de interfaces entre fluidos, bem como as mudanças de variáveis e propriedades do fluido através da sua interface (LIU; NGUYEN, 2010).

Desse modo, novas técnicas foram propostas e têm sido empregadas para a predição de interface. Os métodos de rastreamento e captura de interface podem ser classificados, de modo geral, em dois principais grupos: métodos de rastreamento explícitos e métodos de captura implícitos (SLAVOV; DIMOVA, 2007).

Figura 9: Etapas procedimentais de uma simulação numérica



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os métodos explícitos envolvem o rastreamento da interface entre duas fases de fluidos a partir de uma malha (grade) móvel, ou, ainda, por meio de marcadores sem massa posicionados ao longo da interface. Nesta classificação, destaca-se o método de *Front Tracking* como o principal exemplo (LIU; NGUYEN, 2010). As técnicas atuam na reconstrução da interface por meio de um conjunto de pontos discretos ao longo da mesma, tendo a resolução como um fator dependente da quantidade dos pontos dispostos.

Alternativamente, os métodos implícitos empregam uma função escalar definida em uma malha fixa para aproximação à interface. Como exemplos proeminentes de métodos implícitos, destacam-se *Volume of Fluid* - (VOF), *Level Set* - (LSM), *Phase Field* e *Lattice Boltzmann* - (LBM). As abordagens fornecem boas aproximações das posições da interface, e a escolha de diferentes tipos de métodos pressupõe condições e objetivos específicos.

Em problemas com n dimensões, os métodos explícitos utilizam uma malha de $n - 1$ dimensões destinada à reconstrução da interface, já os métodos implícitos demandam a resolução das equações de governança em n dimensões.

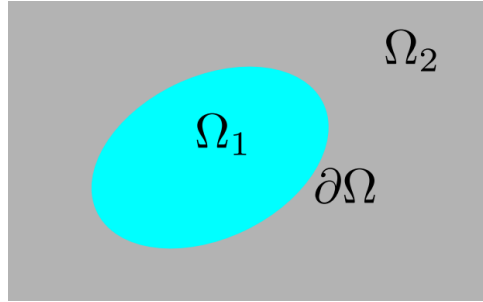
Procura-se, sequencialmente, delinear a construção teórica dos métodos que classificam-se como adequados para os problemas que envolvem a formação de gotas em micro-canais, entendendo-os como, primordialmente, problemas multifásicos, que demandam certas abordagens e o estabelecimento de condições simulacionais específicas.

Assim, diante do uso, no contexto da pesquisa, de um método implícito de captura de interface, procura-se compreender o funcionamento do método de *Volume of Fluid* como a principal ferramenta computacional usada nas presentes condições.

3.2.1 Formulação de um único fluido

Consideremos duas fases de fluidos incompressíveis, que formam uma região imiscível, como mostrado na Figura 10. As equações de governança de fluidos não são resolvidas separadamente para cada uma das fases, mas um único conjunto de equações é aplicado em todo domínio, de tal modo que as propriedades de cada fase mudam descontinuamente ao longo da interface. Nesta formulação de um fluido, adiciona-se um termo atuante apenas na interface que captura a tensão interfacial, a variação de propriedades e qualquer força extra no contorno da interface. Este termo é, matematicamente, representado por uma função delta de Dirac (δ).

Figura 10: Duas fases de fluidos (Ω_1 e Ω_2) separadas por uma interface ($\partial\Omega$).



Fonte: Adaptado de MOHAN & TOMAR (2024)

A partir de tal formulação (de apenas um fluido), a equação de Navier-Stokes, Eq. 47, pode ser modificada em:

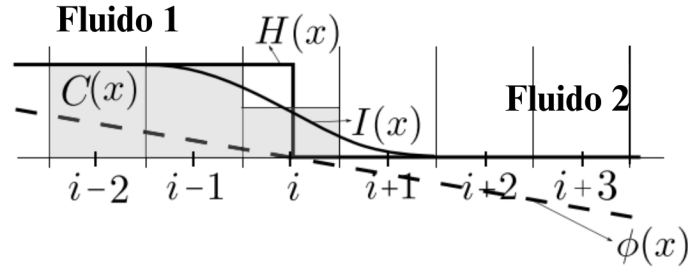
$$\rho(\phi) (\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}) = -\nabla p + \eta(\phi) \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_v^\sigma \quad (46)$$

em que ϕ exprime uma função indicadora representativa da interface. Assim, $\rho(\phi)$ e $\eta(\phi)$ tornam-se, respectivamente, a função de densidade e função de viscosidade, ambas em dependência com ϕ . Por meio da função delta de Dirac (δ), suavizada na superfície, as forças de tensão superficial atuantes na interface são tratadas como forças volumétricas,

denotadas por $\mathbf{f}_\nu^\sigma$, que também inclui demais forças interfaciais, como as de natureza elétrica que possam surgir em fluidos dielétricos. (MOHAN; TOMAR, 2024).

O valor da função indicadora de interface é determinado a partir da posição da própria interface. Pode-se obter uma representação numérica da interface entre dois fluidos em um escoamento unidimensional de distintas formas, como mostra a Figura 11.

Figura 11: Representação de uma interface por meio de uma função indicadora $I(x)$, uma função Heavside $H(x)$, uma fração de vazio $C(x)$ e uma função *level-set* $\phi(x)$.



Fonte: Adaptado de MOHAN & TOMAR (2024)

A função Heavside, também chamada de função degrau, representa a interface exata entre as fases presentes na i -ésima célula da malha. A função de fração de vazio representa a razão entre a quantidade de fluido de uma fase dentro de cada célula. A função assume valor igual a zero nas regiões (células da malha) completamente preenchidas pelo fluido 2 e valor igual a um nas células completamente preenchidas com o fluido 1. Nas células que contenham a interface das fases, o valor da função é de tal forma $0 < C(x) < 1$. Dessa forma, podemos usar uma função indicadora $I(x)$ para representar a interface de modo numérico. Além disso, pode-se representar a interface por meio de uma função *level-set* $\phi(x)$, que assume nível zero na interface e valores positivos para um fluido e negativos para o outro.

3.2.2 Método VOF (Volume of Fluid)

Quando utilizado o campo de fração de vazio para rastrear e capturar a interface, tem-se uma distribuição descontínua nos valores dessa fração ao longo da interface. Sabendo-se que o campo de velocidades é responsável pelo transporte do fluido ao longo da interface, podemos resolver a seguinte equação, que atualiza o campo de fração de vazio (fração de volume) ao longo do tempo, o que permite o rastreamento implícito da interface:

$$\partial_t C + \mathbf{v} \cdot \nabla C = 0 \quad (47)$$

De modo que:

$$C(x) = \begin{cases} 1, & \text{se a região contém o fluido da fase 1} \\ 0, & \text{se a região contém o fluido da fase 2} \\ 0 < C < 1, & \text{na interface entre as fases} \end{cases}$$

A garantia da precisão da equação para manter a resolução da interface (Eq. 51) pressupõe o uso de esquemas e algoritmos específicos.

O método *Volume of Fluid* (VOF), aplicado nos problemas do presente trabalho, opera a partir de uma função fração de vazio (ou fração de volume). O método pode ser classificado em algébrico, com esquemas compressivos, ou, ainda, como geométrico, atuante na reconstrução geométrica da interface.

No método algébrico, o cálculo do transporte da fração de vazio (ou fração de volume), que representa quanto de cada fluido há em uma célula, é realizado através de uma aproximação algébrica da função indicadora. Os métodos de aproximação são classificados em esquemas compressíveis e esquemas THINC (*Tangent of Hyperbola for Interface Capturing*). Os esquemas compressíveis utilizam a orientação da interface em relação à face da célula para o cálculo do fluxo da fração de vazio (MOHAN; TOMAR, 2024). Já o método VOF geométrico opera a partir da reconstrução exata da interface a partir do campo de fração de vazio, que é atualizado por meio do cálculo geométrico dos fluxos (FUSTER et al., 2009).

Método VOF (Volume of Fluid) geométrico

Da perspectiva histórica, a primeira tentativa de avaliar a advecção - transporte de propriedades por um fluido dado seu movimento - da fração de vazios (fração volumétrica), utilizando a reconstrução da interface, adveio com Noh e Woodward (1976) () (NOH; WOODWARD, 2005). No método, denominado como SLIC (*Simple Line Interface Construction*), a advecção da fração volumétrica é feita sequencialmente em cada direção, e as células mistas são divididas usando linhas verticais, com base nos valores das células vizinhas. A interface é reconstruída a partir de três condições: fluido à esquerda, centro

ou direita. Com a interface determinada, a equação (47) pode ser resolvida na direção x por meio da integração do fluxo no tempo. O processo é repetido para a direção y , utilizando linhas verticais para a reconstrução da interface. O método lançou bases para outro método, denominado PLIC (*Piecewise Linear Interface Construction*), e tornou-se fundamental para basear métodos modernos, como é o caso do VOF (MOHAN; TOMAR, 2024).

O método VOF foi, posteriormente, proposto por Hirt e Nichols (1981), que modificaram o método SLIC. No método, a interface reconstruída pode ser horizontal ou vertical, dependendo do gradiente de distribuição da fração de vazios (C) ao redor da vizinhança, pelo qual se obtém a normal à interface. Se a normal estiver mais alinhada em direção ao eixo x , a interface será vertical. Se a normal estiver mais alinhada em direção ao eixo y , a interface será horizontal (HIRT; NICHOLS, 1981). A Figura 12 propõe sintetizar graficamente este desenvolvimento.

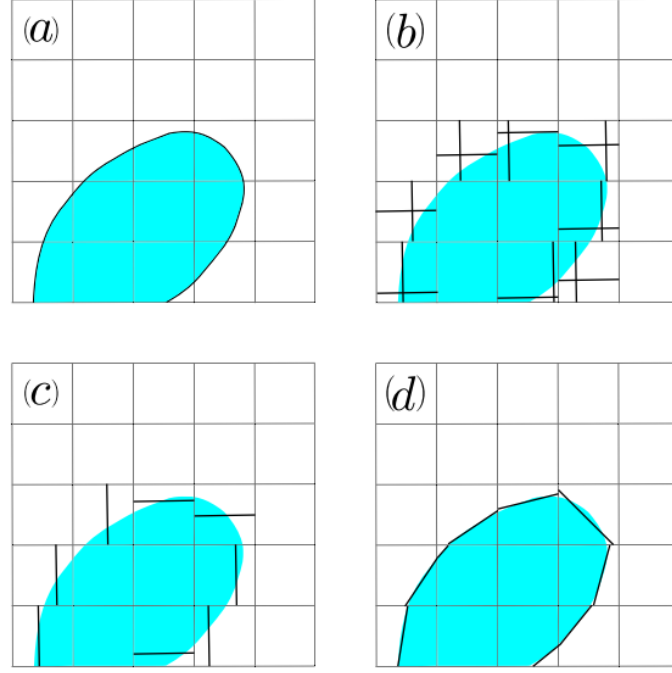
Sequencialmente, Youngs (1982) propôs um método denominado PLIC (*Piecewise Linear Interface Calculation*), representando a interface por um segmento de linha com orientação determinada pela normal à interface, obtida através do gradiente do campo de fração de vazio. Assim, reconstruída a interface, a advecção da fração de vazio (fração de volume) é, geometricamente, feita através das células.

Outros métodos foram desenvolvidos a fim de se obter boa performance na reconstrução da interface, como é o caso do desenvolvimento do método PROST (*Parabolic Reconstruction of Surface Tension*) (RENARDY; RENARDY, 2002), bem como a formação de métodos híbridos e acoplados ao VOF, como o CLSVOF (*Coupled Level-Set Volume of Fluid Method*) (SUSSMAN; PUCKETT, 2000).

No método VOF, a inicialização da fração de volume em cada célula da malha computacional é um passo fundamental. Esse parâmetro é atribuído diretamente às regiões preenchidas com o fluido da fase 1, de modo que $C = 1$, e com o fluido da fase 2, de modo que $C = 0$. Para as células em que está presente a interface, a inicialização da fração de volume deve ser precisa, uma vez que isso garante boa resolução das soluções e o bom progresso da simulação.

Nas células mistas, em que se encontra a interface, pode ser aplicado um método direto de distribuição de pontos dentro das células, calculando a fração de volume a partir da

Figura 12: Reconstrução de interface em distintos métodos em sistema multifásico bidimensional. (a) representa a interface original. (b) representa a reconstrução pelo método SCLIC. (c) representa a reconstrução pelo método VOF proposto por Hirt e Nichols. (d) representa a reconstrução pelo método PLIC.



Fonte: MOHAN & TOMAR (2024)

razão entre os pontos na região do fluido de fase 1 e o total de pontos distribuídos. Além disso, métodos distintos podem ser aplicados para melhorar a precisão da captura e rastreamento da interface, como é o caso do método Monte Carlo (EVANS; SWARTZ, 2000), ou do método que realiza a integração direta da equação implícita da interface, denominado como VOFI (*Volume of Fluid Initializer*)(BNÁ et al., 2016)

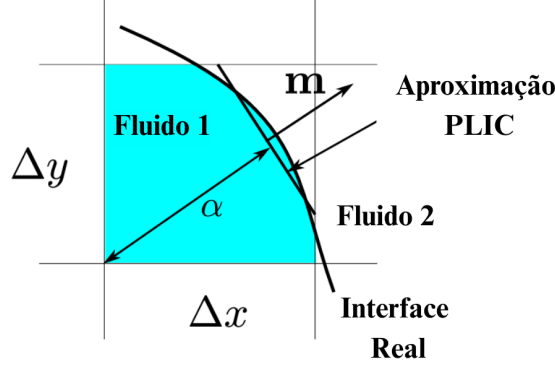
Com a fração de volume atribuída, numericamente, a cada célula da malha computacional, o método, de abordagem geométrica, passa a realizar a reconstrução da interface, por meio da reconstrução do segmento de linha dado pelo método PLIC, como mostra a Figura 13.

A equação para o segmento de linha, considerando o caso bidimensional, é dada por:

$$\mathbf{m}\mathbf{x} = m_x x + m_y y = \alpha \quad (48)$$

em que $m_x x$ e $m_y y$ são as componentes da normal à linha, e α , o segmento de linha

Figura 13: Reconstrução da interface por meio do método PLIC.



Fonte: Adaptado de MOHAR & TOMAR (2024)

constante.

Não é possível determinar a direção da interface pela fração de vazio, assim, é preciso que a normal seja explicitamente calculada. Nesse sentido, métodos diversos foram desenvolvidos para tal fim. O método de Youngs (Figura 14) é um deles, que determina o vetor normal como o gradiente do campo da fração de volume (YOUNGS, 1982):

$$\mathbf{m} = -\nabla_h C \quad (49)$$

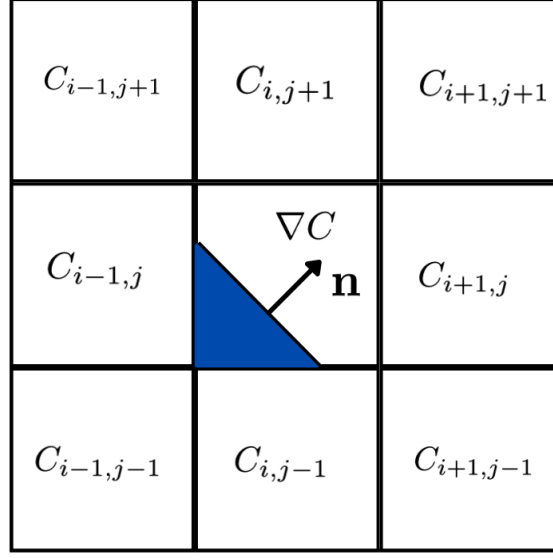
A partir disso, pode-se usar um esquema baseado no Teorema Generalizado de Gauss para determinar as componentes da normal a partir de uma célula central (i, j) . Assim, temos:

$$m_{i,j}^x = -\frac{1}{\Delta x} (C_{i+1,j+1} + 2C_{i+1,j} + C_{i+1,j-1} - C_{i-1,j+1} - 2C_{i-1,j} - C_{i-1,j-1}) \quad (50)$$

$$m_{i,j}^y = -\frac{1}{\Delta y} (C_{i+1,j+1} + 2C_{i,j+1} + C_{i-1,j+1} - C_{i+1,j-1} - 2C_{i,j-1} - C_{i-1,j-1}) \quad (51)$$

O método de Youngs, em certas condições, pode não apresentar boa precisão e, assim, introduzir erros na determinação da interface (MOHAN; TOMAR, 2024). Dessa forma, outros métodos para determinação de interface foram desenvolvidos, como é o caso da abordagem introduzida por Scardovelli e Zaleski (2003), que utiliza de colunas centralizadas para que, em um mesmo bloco de células vizinhas, as frações de volume podem ser

Figura 14: Método de Young para determinação da normal à interface na reconstrução baseada por PLIC.



Fonte: Elaborado pelo autor.

somadas horizontal e verticalmente, o que possibilita determinar uma função de altura e uma função de largura. Por meio de um esquema centralizado, é possível determinar a normal da interface usando a função previamente estabelecida (SCARDOVELLI; ZALESKI, 2003). Aulisa *et al.* (2007) performaram um método que integra elementos da abordagem de Youngs com a abordagem das colunas centralizadas, de Scardovelli e Zaleski. O método ficou conhecido como MYC (*Mixed Youngs Centered*) e, ainda que requeira um custo computacional baixo, apresenta boa performance (AULISA et al., 2007).

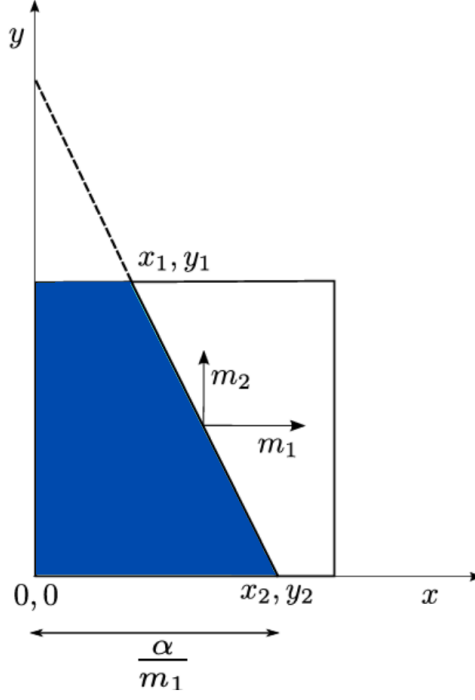
Após a determinação da normal, a etapa posterior da reconstrução da interface por meio do método PLIC, consiste em determinar o segmento de linha constante, representado por α na Figura 13. Isso é feito, inicialmente, tomando-se como constante o volume de uma região delimitada pela malha discretizada. Considerando uma célula bidimensional de grade quadrada, que contenha o vetor normal $\mathbf{n} = 1$, quando m_x e m_y são nulos ou valores positivos, o volume/área da região envolta pela interface é:

$$V = \frac{\alpha^2}{2m_x m_y} \quad (52)$$

Essa relação só é válida nas condições em que as intercepções da linha de interface PLIC com o eixo x e y estejam dentro da célula de grade. Se isso não ocorrer, é preciso

subtrair áreas triangulares (partes da interface que estão fora da célula) para ajustar o volume/área corretamente, como mostra a Figura 15.

Figura 15: Caso padrão para reconstrução de interface pelo método PLIC. O fluido 1 está preenchendo a região destacada e $m_1, m_2 \geq 0$.



Fonte: Adaptado de MOHAR & Tomar (2024)

Ao resolvermos a equação do volume, podemos encontrar uma relação entre a fração de volume (fração de vazio), a linha constante α e a normal da interface, dado que o volume está relacionado com o quanto a célula da malha está preenchida com o fluido.

Pode-se definir um parâmetro Γ relacionado com a fração de volume, de forma que a linha constante α seja calculada baseando-se em tal parâmetro e nos coeficientes m_1 e m_2 .

Dessa forma, conforme Zaleski *et al.* (2000), podemos escrever as seguintes relações analíticas (SCARDOVELLI; ZALESKI, 2000):

Se $0 \leq \Gamma < \Gamma_1$, então:

$$\alpha = \sqrt{2m_1m_2\Gamma} \quad (53)$$

Se $\Gamma \leq \Gamma \leq \frac{1}{2}$, então:

$$\alpha = m_2\Gamma + \frac{m_1}{2} \quad (54)$$

Com a interface já reconstruída, que consiste na principal tarefa do método VOF geométrico, a advecção da fração de vazio (fração de volume) deve ser feita. Para isso, usa-se a equação de advecção, dada por:

$$\partial_t C + \mathbf{v} \cdot \nabla C = 0 \quad (55)$$

que pode reescrita como:

$$\partial_t C + \nabla \cdot (\mathbf{v}C) = C(\nabla \cdot \mathbf{v}) \quad (56)$$

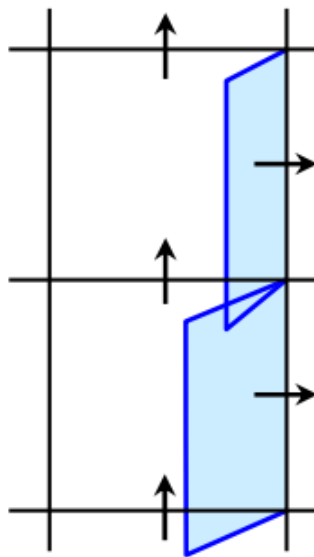
A integração no tempo da equação (56) permite encontrar o fluxo da fração de vazio através das faces das células (MOHAN; TOMAR, 2024). Os métodos de advecção geométrica, com base no cálculo do fluxo, pode ser classificado em métodos fracionados (*split methods*) e métodos não fracionados (*unsplit methods*) (PUCKETT et al., 1997; RIDER; KOTHE, 1998). De modo geral, os métodos fracionados determinam a advecção da fração de volume em cada direção espacial sequencialmente, enquanto que os métodos não fracionados determinam a advecção em um único passo.

Nos métodos não fracionados, o termo do lado direito da equação (56) torna-se nulo em escoamentos compressíveis. Nessa formulação, a advecção ocorre em um único passo. Nesses casos, o cálculo do fluxo da fração de volume envolve o cálculo do volume/área de figuras geométricas complexas que são cortadas pela interface. Isso torna o método computacionalmente custoso, mas com a vantagem de que a advecção possa ser determinada por meio de um único passo.

Os primeiros algoritmos do método não fracionado foram estruturados por Rider e Kothe (1998), usando valores de velocidades centradas nas faces das células para construção de trapézios, como mostra a Figura 16 (RIDER; KOTHE, 1998). Neste esquema, a região doadora, ou seja, a parcela de fluido que é transportada, é modelada como um trapézio. Os ângulos do trapézio são determinados a partir da razão entre as velocidades

centradas na face da célula, de modo que a forma da região doadora passa a depender diretamente de como as velocidades são distribuídas no interior da célula (COMMINAL; SPANGENBERG; HATTEL, 2015). Isso pode levar a uma sobreposição de regiões de fluido, pois, quando células vizinhas também calculam suas regiões doadoras, as arestas dessas regiões não são colineares, o que leva à contagem em dobro de partes do fluido. Ainda, se partes do fluido não são transportadas, criam-se espaços vazios no esquema geométrico.

Figura 16: Método não fracionado de Rider e Kother para determinar a advecção da fração de vazio.



Fonte: COMMINAL, R. *et al.* (2015)

Algumas melhorias foram implementadas do método não fracionado, como, por exemplo, o esquema proposto por Lopez *et al.* (2004), em que as velocidades são calculadas nos vértices das células, evitando a sobreposição de volumes transportados (LÓPEZ *et al.*, 2004). Posteriormente, Owkes e Desjardins (2014) implementaram o método para esquemas tridimensionais, melhorando aspectos de conservação de volume e das condições de contorno dos esquemas (OWKES; DESJARDINS, 2014).

Os métodos fracionados, por sua vez, consistem em uma abordagem para calcular a advecção da fração de vazio em todas as direções espaciais separadamente. Isso torna o lado direito da equação (56) necessário, uma vez que corresponde ao termo de dilatação. Nos métodos fracionados, a advecção pode ser tratada do ponto de vista Lagrangiano, em que a interface reconstruída desloca-se seguindo o fluxo em cada direção. A advecção também pode ser abordada por uma perspectiva Euleriana ao ser calculada pelo fluxo

através de cada face da célula sequencialmente (TRYGGVASON; SCARDOVELLI; ZALESKI, 2011).

Método VOF (Volume of Fluid) algébrico

As abordagens algébricas do método VOF constituem-se como os mais antigos métodos de captura de interface e, também, a mais antiga abordagem do próprio método VOF (MIRJALILI; JAIN; DODD, 2017). Nesta classe de métodos, a fração de volume, C , é obtida através da seguinte equação:

$$V \partial_t C_i(t) + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) C(x, t) dS = \int_{\Omega} C \nabla \cdot \mathbf{v} dV \quad (57)$$

em que C_i representa a fração de volume na i -ésima célula, assim como V representa o volume na célula, e $C(x, t)$ é a própria função indicadora da fração de volume.

Uma aproximação numérica, seja ela polinomial, uma média de volume ou uma representação hiperbólica-tangencial, é feita sobre a função indicadora de fase, C . Diferentemente dos métodos geométricos, os métodos algébricos calculam o fluxo (a advecção) da fração de volume sem a necessidade da reconstrução geométrica da interface.

Os métodos algébricos classificados em compressivos se baseiam na orientação do vetor normal à interface para o cálculo do fluxo, ao qual atribuímos a representação F_f (MIRJALILI; JAIN; DODD, 2017). Dessa forma, escrevemos:

$$F_f = \gamma(\theta) F_{HRS} + [1 - \gamma(\theta)] F_{HDS} \quad (58)$$

O fluxo representado por F_{HRS} é computado utilizando o esquema de alta resolução HRS (*High-Resolution Scheme*), que, de modo geral, fornece ótima precisão diante de descontinuidades. O termo F_{HDS} refere-se ao fluxo calculado usando um esquema de ordem superior, HDS (*High-Order Downwinding Scheme*). Uma função de mistura, que combina dois esquemas numéricos, é adicionada como $\gamma(\theta)$, em que θ é o ângulo entre a normal à face da célula e a normal à interface.

Ao calcular o fluxo em cada face das células da grade, caso a normal da interface esteja alinhada em relação à normal da face da célula, um esquema do tipo HDS é utilizado para a aproximação algébrica. No entanto, caso a normal à interface esteja em direção

perpendicular à normal da face da célula, um esquema HRS é empregado (MIRJALILI; JAIN; DODD, 2017).

Diferentes métodos de esquemas compressivos para discretização espacial foram desenvolvidos ao longo dos anos. Entre os principais, destacam-se o esquema HRIC (*High Resolution Interface Capture*), proposto por Muzaferija *et al.* (1998) (MUZAFERIJA, 1999); e o esquema CICSAM (*Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes*), proposto por Ubbink e Issa (1999) (UBBINK; ISSA, 1999), que consolidou-se como um dos mais populares esquemas para o método VOF algébrico.

3.2.3 Implementação computacional

Os esquemas até então tratados são empregados para os casos em que a formulação do método VOF é explícita, em que uma solução dependente do tempo deve ser computada e, como a fração volumétrica no passo de tempo atual é determinada a partir dos passos anteriores, uma solução iterativa da equação de advecção em cada passo de tempo pode ser dispensada. Nas simulações empregadas neste trabalho, optamos por abordar o método VOF de maneira implícita, o que implica na resolução da equação de advecção para a fração volumétrica em cada passo de tempo, já que esta quantidade depende de outras quantidades no mesmo passo temporal. A escolha da abordagem foi influenciada pelas condições em que se procurava evitar o custo computacional exageradamente alto, mas que fornecesse boas resoluções das simulações e que, principalmente, pudesse oferecer soluções robustas para a captura da interface, tarefa da qual grande parte do trabalho depende.

Dessa forma, os métodos, algoritmos e esquemas empregados foram utilizados a partir de um software de CFD, Ansys Fluent (2024 R2), que, a depender das definições do usuário usa dos métodos descritos anteriormente, através do qual a seguinte equação de fração de volume é resolvida para a q -ésima fase (FLUENT *et al.*, 2011):

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\partial_t (C_q \rho_q) + \nabla \cdot (C_q \rho_q \mathbf{v}_q) = S_{C_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \right] \quad (59)$$

em que $\dot{m}_{qp}$ é a massa transferida da fase q para fase p , e $\dot{m}_{pq}$ é a massa transferida da fase p para a fase q . O termo fonte do lado direito da equação, S_{C_q} , é zero por padrão. A

fase primária não tem sua fração de volume resolvida pela equação acima, mas é calculada a partir da seguinte restrição:

$$\sum_{q=1}^n C_q = 1 \quad (60)$$

Na formulação implícita - da qual faz-se uso no trabalho - a fração de volume é discretizada da seguinte forma:

$$\frac{C_q^{n+1} \rho_q^{n+1} - C_q^n \rho_q^n}{\Delta t} V + \sum_f (\rho_q^{n+1} F_f^{n+1} C_{q,f}^{n+1}) = \left[S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \right] V \quad (61)$$

em que $n + 1$ é o índice do passo de tempo atual, n é o índice para o passo de tempo anterior, C_q^{n+1} é o valor da fração de volume na célula no passo de tempo atual, C_q^n é a fração de volume na célula no passo de tempo anterior, $C_{q,f}^{n+1}$ é o valor da fração volumétrica na face de uma célula no tempo $n + 1$, F_f^{n+1} é o fluxo de volume através da face de uma célula no tempo $n + 1$, e V é o volume da célula.

Esquema de captura e interpolação da interface

Para uma formulação baseada no controle de volume, há a exigência de que os fluxos de convecção e difusão através das faces do volume de controle sejam calculados e equilibrados com os termos-fonte dentro do próprio volume. Assim, o software aplica um tratamento de interpolação para as células que estão próximas à interface entre as fases.

Nas simulações, empregou-se um esquema compressivo para a interpolação, denominado, pelo software, como *Compressive Scheme*. O esquema é uma reconstrução de segunda ordem que se baseia em limitadores de inclinação para evitar oscilações e variações bruscas indesejadas nas regiões entre as fases. O papel dos limitadores é fundamental nas simulações para garantir boas resoluções. Um exemplo do seu funcionamento é descrito a seguir.

Supondo um perfil de fração volumétrica C , em que a interface está na transição de 0 para 1 da seguinte forma:

$$C = [0, 0.2, 0.8, 1.2, 0.9, 1]$$

Identifica-se que o valor correspondente a $C = 1.2$ não faz sentido fisicamente, pois o

limite deve ser $C = 1$. Assim, com o uso dos limitadores, tem-se a redução da inclinação por meio de uma interpolação dos valores, como por exemplo:

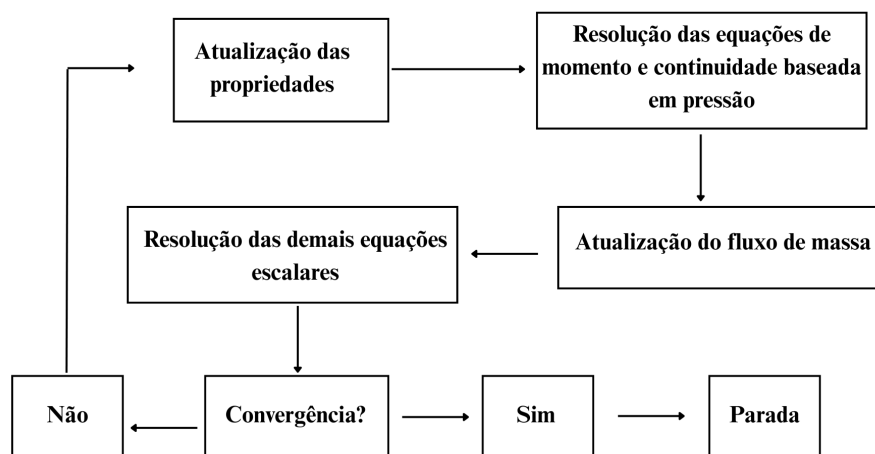
$$C = [0, 0.2, 0.8, 1, 1, 1]$$

Método baseado em pressão

No software em questão, existem dois modos de solução numérica: um método baseado em pressão (*pressure-based solver*) e um método baseado em densidade (*density-based solver*). Nas simulações realizadas, utilizamos a primeira opção, que emprega um algoritmo pertencente a uma classe de métodos chamada de método de projeção. Nesta classe, a conservação de massa (expressa em termos da equação da continuidade) do campo de velocidades é garantida através da resolução de uma equação para a pressão, obtida pelas equações de continuidade e momento. Assim, o campo de velocidades é ajustado pela pressão, atendendo à condição de continuidade. A solução, nesta classe de método, depende de um processo iterativo para que se chegue à convergência.

Esquemáticamente, o método baseado nos valores e correção de pressão opera na forma como está representada na Figura 17.

Figura 17: Algoritmo do método de solução baseado em pressão.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Discretização para equações de transporte de um escalar

O software Ansys Fluent implementa uma técnica de volume de controle (empregada no Método de Volumes Finitos) para discretizar uma equação de transporte escalar

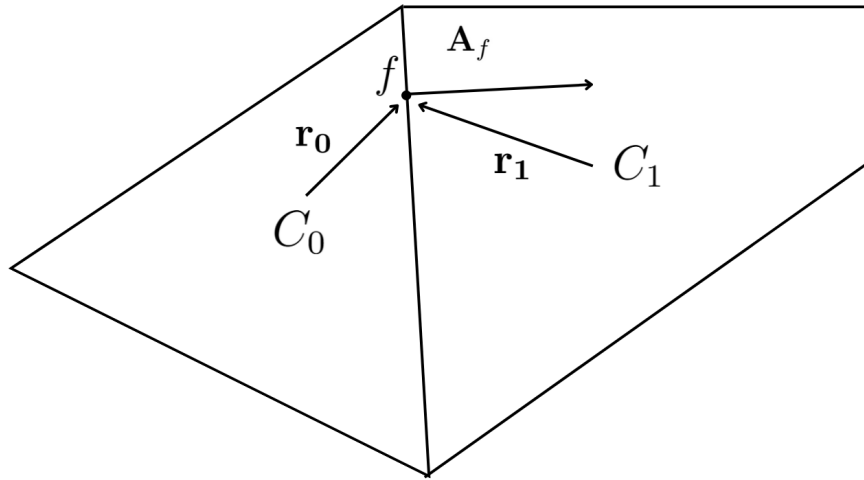
genérica e, então, torná-la apta para ser resolvida numericamente. A técnica envolve a integração das equações de transporte para cada volume de controle, obtendo uma equação discreta que expressa o princípio físico (como a lei da conservação) em um volume de controle base (EYMARD; GALLOUËT; HERBIN, 2000).

Para uma quantidade escalar ϕ , podemos escrever a equação de conservação de seu transporte, para um volume de controle V , como:

$$\int_V \partial_t(\rho\phi)dV + \oint \rho\phi\mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} = \oint \Gamma_\phi \nabla\phi \cdot d\mathbf{A} + \int_V S_\phi dV \quad (62)$$

em que ρ é a densidade, $\mathbf{v}$, o vetor velocidade, $\mathbf{A}$, o vetor de área superficial, Γ_ϕ , o coeficiente de difusão para o escalar ϕ , $\nabla\phi$, o gradiente de ϕ , e S_ϕ , o termo fonte de ϕ por unidade de volume.

Figura 18: Volume de controle para a discretização de uma equação de transporte escalar.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Uma forma linearizada da equação (62) é descrita como:

$$a\phi_p = \sum_{vz} a_{vz}\phi_{vz} + b \quad (63)$$

O subíndice vz refere-se às células vizinhas, a_p e a_{vz} são os coeficientes linearizados para ϕ e ϕ_{vz} .

Discretização espacial

Para a discretização espacial, utilizou-se o esquema denominado como *Upwind* de Segunda Ordem (*Second-Order Upwind Scheme*). Nessa abordagem, os valores (correspondentes às quantidades de propriedades transportadas pelo escoamento) são calculados nas faces das células usando uma reconstrução linear multidimensional. Para isso, busca-se maior precisão por meio de uma expansão em série de Taylor da solução na célula central para as demais células na vizinhança.

Na abordagem, os valores das variáveis são calculados baseando-se no sentido do velocidade. O esquema *upwind* de primeira ordem usa o valor da variável na célula anterior na direção do fluxo, denominada como célula *upstream*, enquanto o esquema *upwind* de segunda ordem aumenta a precisão incluindo informações acerca do gradiente da variável computada.

O valor da variável ϕ_f na face da célula é, então, calculada por:

$$\phi_f = \phi + \nabla\phi \cdot \mathbf{r} \quad (64)$$

em que ϕ e $\nabla\phi$ são, respectivamente, o valor centrado da variável na célula e seu gradiente na célula *upstream*. O vetor $\mathbf{r}$ é o deslocamento do centro da célula *upstream* até o centro da face.

Essa abordagem requer uma formulação em relação ao gradiente da variável em cada célula. A determinação deste gradiente pode ser obtida por meio do método de *Green-Gauss Cell-Based Gradient*, explicitado na seção 3.2.2, em que, por padrão, o valor de ϕ_f na face da célula é tomado como uma média aritmética dos valores nos centros das células vizinhas:

$$\bar{\phi}_f = \frac{\phi_{c0} + \phi_{c1}}{2} \quad (65)$$

Discretização temporal

Para as simulações não estacionárias, isto é, transientes, as equações de governança devem ser discretizadas no tempo. Nesse sentido, o software (Ansys Fluent) oferece diferentes esquemas de discretização temporal (como fornece, também, para a discretização

espacial).

A discretização temporal envolve a integração de cada termo nas equações diferenciais ao longo de um intervalo de tempo Δt . A evolução temporal de uma variável genérica, ϕ , é dada pela seguinte expressão:

$$\partial_t \phi = F(\phi) \quad (66)$$

A formulação transiente foi realizada utilizando um esquema de integração temporal implícita limitada de segunda ordem (*bounded second-order implicit time integration*), em que a discretização da variável pode ser expressa como:

$$\partial_t \phi = \frac{\phi_{\frac{n+1}{2}} - \phi_{\frac{n-1}{2}}}{dt} \quad (67)$$

$$\phi_{\frac{n+1}{2}} = \phi_n + \frac{1}{2}\beta_{\frac{n+1}{2}}(\phi_n - \phi_{n-1}) \quad (68)$$

$$\phi_{\frac{n-1}{2}} = \phi_{n-1} + \frac{1}{2}\beta_{\frac{n-1}{2}}(\phi_{n-1} - \phi_{n-2}) \quad (69)$$

Os valores de $n, n-1, n-2, n+1/2, n-1/2$ são diferentes passos temporais. OS fatores β são limitadores para cada variável no respectivo passo temporal.

Discretização da equação de momento

Previamente, escrevemos a equação de Navier-Stokes em sua forma diferencial (a qual nos referimos como a equação do balanço de momento linear). Ademais, podemos escrevê-la em sua forma integral, sobre a qual aplicamos a discretização. As equações (de continuidade e de momento) podem ser escritas, então, como:

$$\oint \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} = 0 \quad (70)$$

$$\oint \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} = - \oint p \mathbf{I} \cdot d\mathbf{A} + \int \boldsymbol{\tau} \cdot d\mathbf{A} + \int_V \mathbf{F} dV \quad (71)$$

em que I é a matriz identidade, τ é o tensor de tensão, e $\mathbf{F}$ representam as forças externas.

A equação de momento pode ser discretizada conforme o esquema de discretização descrito previamente (baseado em volumes de controle). Dessa forma, podemos descrever a equação discretizada como:

$$a_p v = \sum a_{vz} v_{vz} + \sum p_f A \cdot \hat{i} + S \quad (72)$$

Como os valores para o campo de pressão e para o fluxo de massa não são conhecidos, o software os obtém como parte da solução da equação. Isso é feito por meio de esquemas de interpolação capazes de computar valores de pressão em cada célula (PATANKAR, 2018). Em nossas simulações, fizemos uso do esquema denominado PRESTO! (*Pressure Staggering Option*). O esquema computa a pressão nas faces por meio do conceito de *volume de controle defasado*, o qual aplica um pequeno volume sobre a face para o cálculo da pressão por meio da equação da continuidade (MAHDAVI; SHARIFPUR; MEYER, 2015).

Discretização da equação da continuidade

A equação da continuidade pode ser escrita de forma discreta como:

$$\sum_f^{N_{faces}} J_f A_f = 0 \quad (73)$$

em que J_f é o fluxo de massa através da face f .

Os valores das variáveis como pressão e velocidade estão definidos no centro das células da malha, entretanto, é necessário computar o valor das variáveis na face da célula, tal como ocorre com os valores de massa para determinação de seu fluxo. Uma simples interpolação linear dos valores entre dois centros de células vizinhas para obter a variável na face da célula desejada (o volume de controle) pode resultar em um problema denominado como *checkerboarding* (quadriculado de pressão), que não demonstra o comportamento físico real do fluxo (HOPMAN et al., 2023). O problema ocorre devido ao desacoplamento da pressão e da velocidade. Nesse sentido, o software Fluent realiza uma interpolação de alta ordem, por meio de métodos sofisticados que consideram informações do entorno das

células, não somente dos centros. Essa interpolação pode ser empregada por dois diferentes métodos: interpolação linear baseada na distância ou a média baseada no momento (MAJUMDAR, 1988).

O fluxo de massa, J_f , pode ser escrito, então, como:

$$J_f = \hat{J}_f + d_f(P_{c_0} - P_{c_1}) \quad (74)$$

Sendo que $\hat{J}_f$ é definido dependendo do método, em que:

Baseado em distância:

$$\hat{J}_f = \frac{\rho_f}{2} (\mathbf{v}_{C_0} + \mathbf{v}_{C_1}) \cdot \hat{n} + J_{ao,d} \quad (75)$$

Baseado em momento:

$$\hat{J}_f = \rho_f \left(\frac{a_{p_{C_0}} \mathbf{v}_{C_0} + a_{p_{C_1}} \mathbf{v}_{C_1}}{a_{p_{C_0}} + a_{p_{C_1}}} \right) \cdot \hat{n} + J_{ao,a_p} \quad (76)$$

O termo d_f depende de $\bar{a}_p$, que representa a média dos coeficientes a_p associados à equação do momento (conforme indicado na equação (72)), calculada para as duas células vizinhas à face f . As pressões p_{C_0} e p_{C_1} , bem como as velocidades $\mathbf{v}_{C_0}$ e $\mathbf{v}_{C_1}$, correspondem aos valores encontrados nas células localizadas em cada lado da face.

A correção $J_{ao,d}$ é uma modificação de alta ordem utilizada em malhas que não são uniformes ou ortogonais, baseada nas distâncias entre os centros das células e o centro da face. De modo semelhante, a correção J_{ao,a_p} é também uma modificação de alta ordem, mas fundamentada nos coeficientes de momento das células adjacentes à face.

4 Resultados e discussão

Esta seção do presente trabalho dedica-se à apresentação dos resultados obtidos por meio das simulações empregadas de sistemas microfluídicos, visando, especialmente, o entendimento acerca das influências de parâmetros físicos e geométricos na formação de gotas em microcanais. Os modelos computacionais empregados seguem os esquemas e métodos numéricos descritos, anteriormente, na explanação metodológica.

4.1 Formação de gotas em um microcanal com uma junção em T (*T-junction*)

Pretendemos, inicialmente, avaliar os efeitos das velocidades de fluidos e do número de capilaridade (Ca) na formação de microgotas em uma geometria com formato de uma junção em T através de um método implícito de captura de interface - Volume de Fluido (*Volume of Fluid*). Além disso, objetivamos a comparação do método empregado com outro método numérico implícito amplamente utilizado, denominado como *Level Set* (LSM).

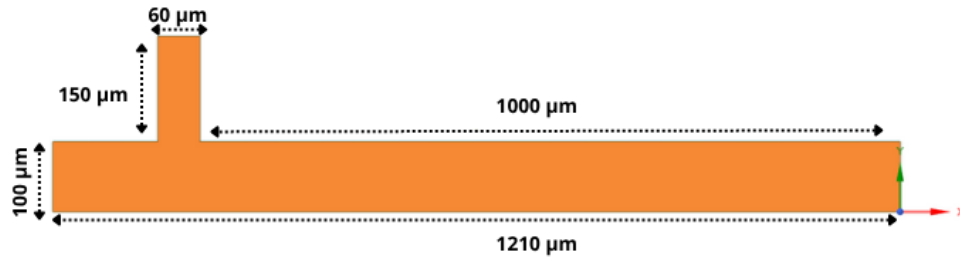
Os diferentes métodos apresentam potencialidades e características distintas. Embora diversos trabalhos destaquem o método *Level Set* como uma excelente ferramenta para a análise da geração de gotas em microcanais - devido à sua alta ordem de precisão e boa conservação de massa -, nosso objetivo se concentrou na investigação do quão bem o método *Volume of Fluid* (VOF) se adapta a problemas microfluídicos. Ao focar em seu potencial de conservação de massa, buscamos compreender melhor os fenômenos e distúrbios envolvidos no processo de geração de gotas, especialmente sob condições de instabilidade do escoamento e variações no número de capilaridade Ca .

4.1.1 Procedimento computacional

Para tanto, usamos o software, destinado às simulações em fluidodinâmica, Ansys Fluent. Para a modelagem geométrica, recorreremos à aplicação do software Ansys SpaceClaim, e as dimensões geométricas dos canais são mostradas na Figura 19. A geração da malha computacional foi realizada posteriormente usando uma malha quadrilateral (Figura 20), a qual proporcional cálculos mais efetivos dos efeitos de tensão superficial em comparação com malhas triangulares ou tetraédricas (GARIMELLA; SHASHKOV; KNUPP, 2004).

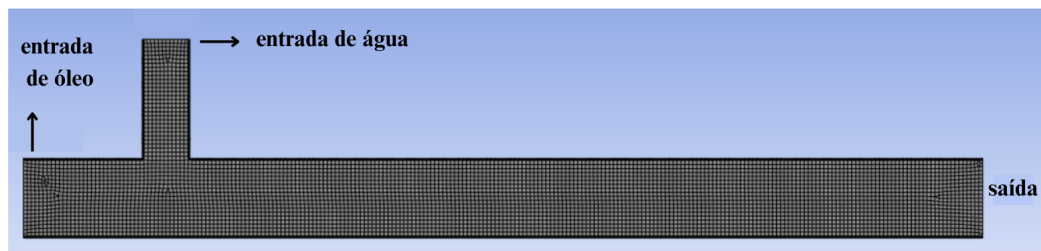
Para garantir boa performance computacional, guiou-se um estudo de independência de malha, assegurando que a quantidade de elementos da malha, bem como de seus tamanhos, estivesse de acordo com a eficácia requerida do modelo simulacional, fornecendo, também, suficiente custo computacional sem prejudicar a assertividade das simulações. Desta forma, performamos uma série de simulações com diferentes tamanhos de elementos

Figura 19: Dimensões dos canais na geometria de junção em T utilizada nas simulações. O canal de entrada para a fase dispersa possui largura de $60\ \mu\text{m}$, enquanto o canal de entrada para a fase contínua possui largura de $100\ \mu\text{m}$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 20: Malha aplicada à geometria modelada.



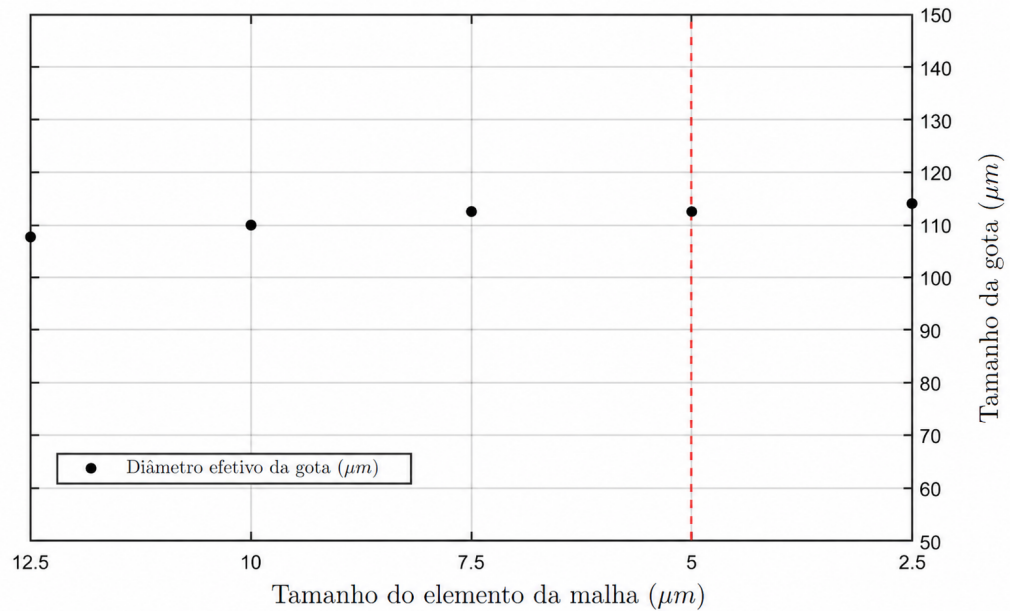
Fonte: Elaborado pelo autor.

de malha, a fim de analisar o grau de influência da malha nos parâmetros de tamanho das gotas geradas.

Ao fixarmos os demais parâmetros simulacionais, conduzimos diferentes simulações com diferentes tamanhos de malha, os quais foram: $2,5\ \mu\text{m}$, $5,0\ \mu\text{m}$, $7,5\ \mu\text{m}$ e $10\ \mu\text{m}$. Os dados simulacionais foram registrados no gráfico abaixo (Figura 21), em que se relaciona o tamanho da gota gerada com o tamanho dos elementos de malha.

A análise dos dados apresentados graficamente permite concluir a influência exercida pelo tamanho do elemento de malha sobre o tamanho das gotas formadas no microcanal. Podemos perceber que, para valores do tamanho dos elementos relativamente grandes, como maiores que $7,5\ \mu\text{m}$, o parâmetro físico avaliado sofre uma variação significativa às

Figura 21: Estudo de independência de malha. Uma malha de $5\mu m$ foi selecionada por oferecer um bom equilíbrio entre precisão e custo computacional, sem diferenças significativas no parâmetro analisado em comparação com malhas mais refinadas.



Fonte: Elaborado pelo autor.

custas do menor esforço computacional requerido, desfavorecendo a resolução e eficiência das simulações. Assim, para que se mantivesse o balanço entre o custo computacional e a acurácia simulacional, optamos por trabalhar com tamanhos de elementos de $5,0\mu m$.

Como mostra a Tabela 1, utilizou-se da malha mais refinada ($2,5\mu m$) como base de comparação para o cálculo do erro relativo aproximado. Este método permite avaliar o comportamento da solução em relação à região de convergência assintótica, em que o refinamento adicional da malha produz variações insignificantes na variável de interesse.

Tabela 1: Resultados do estudo de convergência de malha para o diâmetro da gota.

Tamanho do Elemento (μm)	Diâmetro da Gota (μm)	Erro Relativo (e_a) [%]
2,5 (Referência)	114,0	—
5,0	113,0	0,88
7,5	113,0	0,88
10,0	110,0	3,51
12,5	108,0	5,26

As configurações das simulações empregadas seguiram os esquemas e métodos anteriormente descritos. Inicialmente, definimos as interações entre as fases com base em uma modelagem interfacial por antidifusão, assumindo o coeficiente de tensão superficial constante e igual a $0,005 \text{ N/m}$. A condição de não deslizamento foi aplicada às paredes da geometria, e o ângulo de contato entre as fases foi configurado em 135° . Como método de solução, empregou-se o esquema baseado em pressão-velocidade. Para a discretização espacial, utilizamos o esquema de *Upwind* de segunda ordem e a formulação do gradiente de *Green-Gauss Cell Based*. Para a discretização das equações de momento, utilizamos o esquema PRESTO! (*pressure staggering option*).

Os fluidos, em todas as simulações empregadas, seguiram as seguintes características físicas (Tabela 2).

Tabela 2: Propriedades físicas dos fluidos usados nas simulações de canal *T-junction*.

Fluido	Densidade (ρ , kg/m^3)	Viscosidade (η , $\text{mPa} \cdot \text{s}$)
Água	1000	1,0
Óleo	750	1,34

As simulações foram conduzidas mantendo fixo o valor da velocidade do fluido da fase dispersa (óleo) em $U_d = 0,012 \text{ m/s}$ e variando os valores da velocidade do fluido da fase contínua (água) (U_c), de modo a obter razões de U_c/U_d no intervalo de 1 a 12. Assim, com esse intervalo de variação, medimos, também, o efeito do número de capilaridade (Ca) na formação das gotas.

Os valores de velocidade, bem como o intervalo de variação da razão U_c/U_d foram implementados a fim de se obter comparação e validação com o trabalho de Bashir *et al.* (2011), que empregou a validação experimental para seus resultados numéricos da análise da dinâmica de formação de gotas nem uma junção em T, utilizando o método numérico LSM (*Level-Set method*) (BASHIR; REES; ZIMMERMAN, 2011).

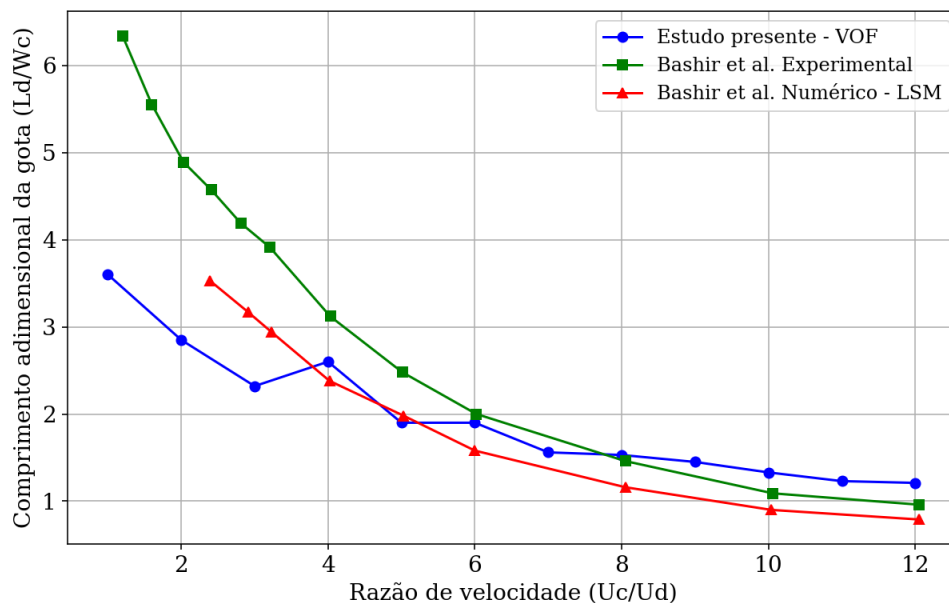
4.1.2 Validação do modelo

O estudo de Bashir *et al.* (2011) implementou o modelo LSM (*Level-Set method*), diferente do modelo empregado no presente estudo, o *Volume of Fluid* - (VOF), para o estudo da formação de gotas nas mesmas condições geométricas (em dimensões) e físicas ao qual

submeteu-se o modelo do trabalho. Nesse sentido, procurou-se identificar as discrepâncias resultantes das diferentes abordagens, objetivando o entendimento da adequabilidade do método VOF para o modelo.

Bashir *et al.* (2011) identificaram divergências entre os tamanhos das gotas geradas experimentalmente e aquelas analisadas pelas simulações quando os valores da razão de velocidade (U_c/U_d) eram baixos. Entretanto, para altos valores da razão de fluxo, essas diferenças diminuía (BASHIR; REES; ZIMMERMAN, 2011). Pode-se atribuir tal divergência às variações de propriedades físicas que, experimentalmente, apresentam comportamento diferente quando analisadas simulacionalmente. Além disso, em certas ocasiões, simulações bidimensionais não capturam, tão acuradamente, forças de tensão que atuam sobre a gota. A Figura 22 mostra a comparação gráfica da relação entre o tamanho adimensional da gota (dado pela razão do seu diâmetro (L_d) e o comprimento do canal principal (W_c)) e a razão das velocidades (U_c/U_d).

Figura 22: Comparação do tamanho adimensional da gota formada no microcanal para diferentes razões de velocidade entre o presente estudo e o modelo de validação numérica avaliado.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Neste estudo, conduzimos as simulações computacionais considerando a razão de viscosidade (η_d/η_c) próxima de 0,8 para que os resultados obtidos pudessem ser comparados com o modelo numérico-experimental da literatura. Pode-se observar, para baixos valores da razão de velocidade, certa divergência entre os resultados, um fenômeno também

identificado por Bashir *et al.* (2011). À medida que os valores da razão de velocidade aumentam, os dados numéricos obtidos por meio das simulações deste estudo convergem, até certo ponto, com os dados experimentais do modelo no qual este estudo se baseia. Pode-se atribuir as diferenças no comportamento do tamanho das gotas aos métodos numéricos utilizados. Enquanto o método *Level Set*, empregado por Bashir *et al.*, utiliza uma função de distância para a definição da interface, o método *Volume of Fluid* (VOF) utiliza uma função de fração volumétrica para representar a interface entre as fases. Em certas situações, como a descrita, o VOF é considerado um método mais robusto em termos de conservação de massa, enquanto o *Level Set* pode oferecer maior precisão na forma da interface, mas introduzindo erros relacionados à conservação de massa (TRYGGVASON *et al.*, 2001).

4.1.3 Resultados

As análises e discussões subsequentes objetivam enfatizar aspectos físicos da geração de gotas no microcanal estudado através da comparação entre a implementação do método de *Volume of Fluid* (VOF) e os resultados numéricos/experimentais atribuídos a Bashir *et al.* (2011), obtidos pela implementação do modelo de *Level Set*. Como será demonstrado, o método aplicado no presente estudo foi capaz de proporcionar uma análise mais específica das regiões de instabilidade no processo de formação das gotas, o que, de certo modo, permitiu o desenvolvimento de um diagrama de fases completo, incluindo e considerando regiões de transições.

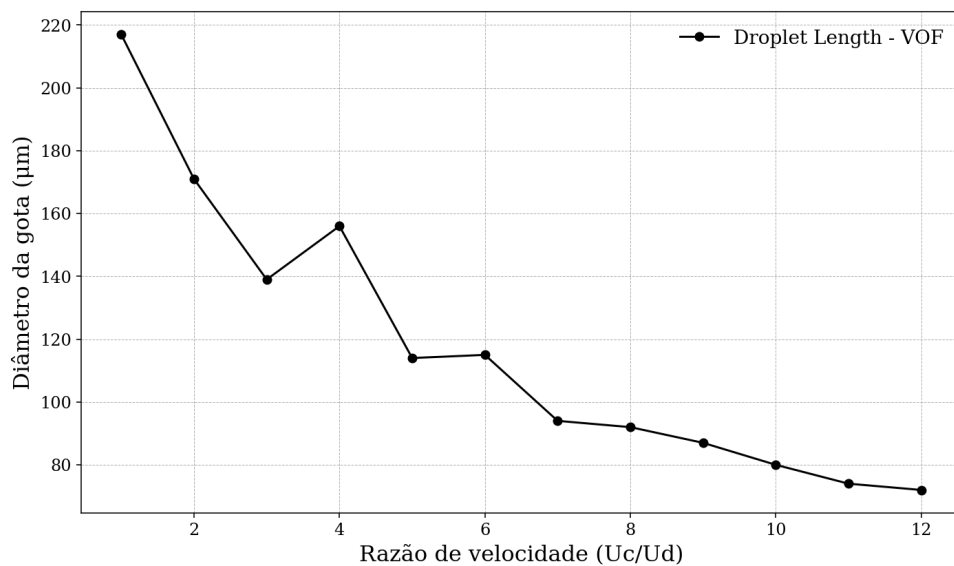
Para uma geometria de um microcanal do tipo de junção em T (*T-junction*), o gradiente de pressão produzido pelas forças de tensão de cisalhamento da fase contínua é responsável pela dinâmica da fase dispersa, que tende a se romper na junção e, em condições propícias, produzir gotas.

Parâmetros como velocidade dos fluidos, bem como a razão de viscosidade dos mesmos podem interferir na maneira pela qual as gotas são produzidas. Os resultados que se seguem objetivam mostrar os efeitos da razão de velocidade dos fluidos sobre a produção de gotas no que diz respeito aos seus tamanhos e aos regimes de formação.

Efeitos da razão de velocidade sobre a geração de gotas

Foram realizadas doze simulações para validar a análise da formação de microgotículas quanto ao tamanho, utilizando o modelo experimental apresentado. Variou-se, assim, a razão de velocidades dos fluidos de 1 a 12, mantendo a velocidade da fase dispersa (água) constante em $U_d = 0,012$ m/s e alterando a velocidade da fase contínua (óleo). A correlação entre o tamanho das gotas formadas e a razão de velocidade é mostrada no gráfico abaixo (Figura 23).

Figura 23: Diâmetro das gotas geradas para diferentes valores da razão das velocidades (U_c/U_d). Observa-se uma tendência geral de diminuição no tamanho das gotas à medida que a razão U_c/U_d aumenta, exceto próximo de $U_c/U_d \approx 4$, onde um comportamento irregular surge com um aumento inesperado no comprimento das gotas.

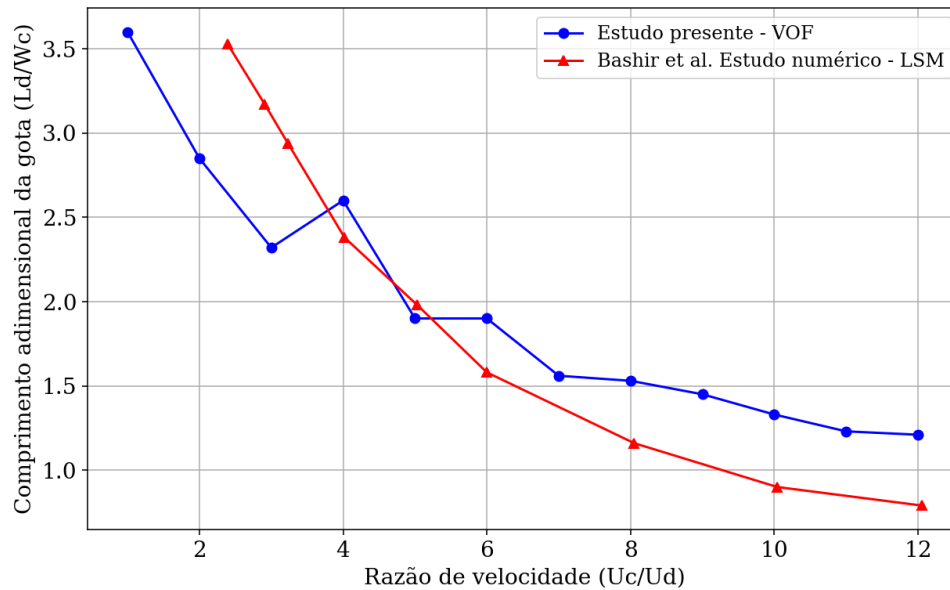


Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 24 mostra a comparação entre os efeitos da razão de velocidade sobre os tamanhos das gotas do modelo numérico das simulações realizadas com o modelo numérico de validação.

Como pode-se observar, o comportamento geral do gráfico representa o decréscimo do tamanho da gota à medida em que a razão de velocidade é incrementada. Similarmente aos resultados de Bashir *et al.* (2011), a faixa de diferença entre os tamanhos analisados diminui para altas razões de velocidade, enquanto que, para seus baixos valores, as diferenças são significativas. Nota-se, também, as ocorrências de discrepâncias entre o modelo do presente estudo e o comparado em momentos de transição de regimes de fluidos, como será abordado na análise sobre o efeito do número de capilaridade (Ca). Tais diferenças

Figura 24: Comparação do comprimento adimensional das gotas para diferentes razões de velocidade do presente estudo e do modelo de comparação.



Fonte: Elaborado pelo autor.

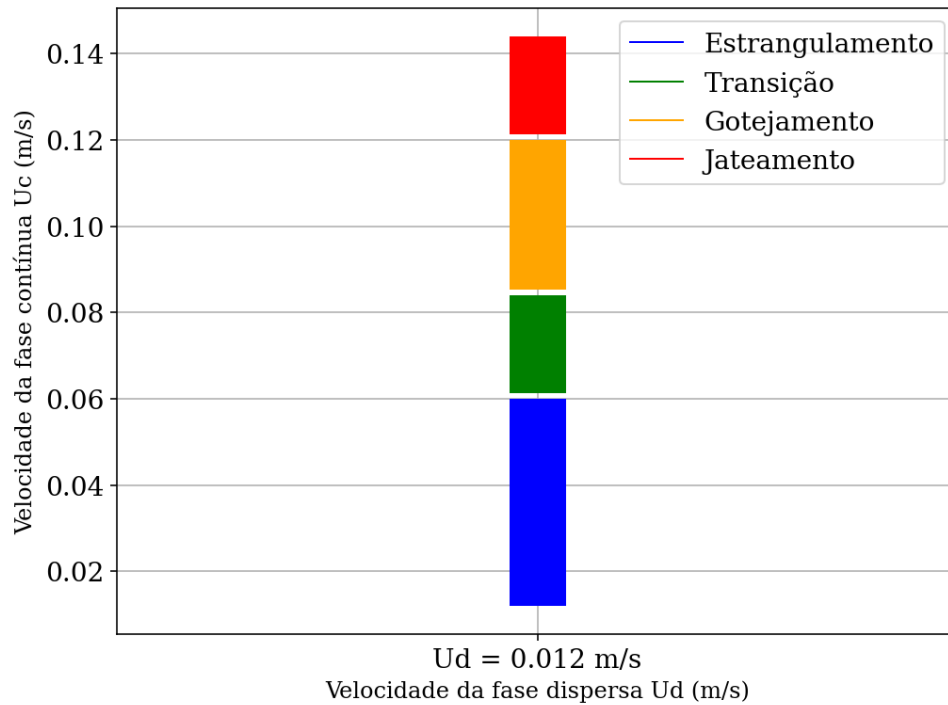
podem ser atribuídas aos diferentes métodos de solução empregados, destacando a melhor performance do método utilizado em nossas análises no que diz respeito aos critérios de conservação de massa no sistema simulado (TRYGGVASON et al., 2001).

As discrepâncias identificadas em condições de baixos valores de U_c/U_d estão relacionadas às transições de regime de escoamento e, por consequência, indicam irregularidade no tamanho da gota formada. Durante essas transições, uma variação significativa no tamanho da gota pode ocorrer devido à alta instabilidade de controle da separação de gotas, o que contribui para a uma distribuição de tamanhos não uniforme. Pode-se atribuir a irregularidade à combinação de forças que atuam de modo instável, configurando as transições de regimes (STEIJN; KLEIJN; KREUTZER, 2009).

A Figura 25 mostra a dependência dos regimes de escoamento de fluido em relação às velocidades dos fluidos do sistema. Identifica-se a presença de três regimes distintos.

O primeiro regime identificado é o de estrangulamento (*squeezing*), ocorrente em condições de baixas velocidades do fluido da fase contínua e tem, como principal atuante na formação de gotas, a força de pressão sobre a junção. As gotas geradas são largas e, geralmente, irregulares em forma e tamanho devido ao longo tempo de estrangulamento

Figura 25: Diagrama dos regimes de geração de gotas em dependência às velocidades dos fluidos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

e altos valores de tensão interfacial (MEHRAJI; SAADATMAND, 2021).

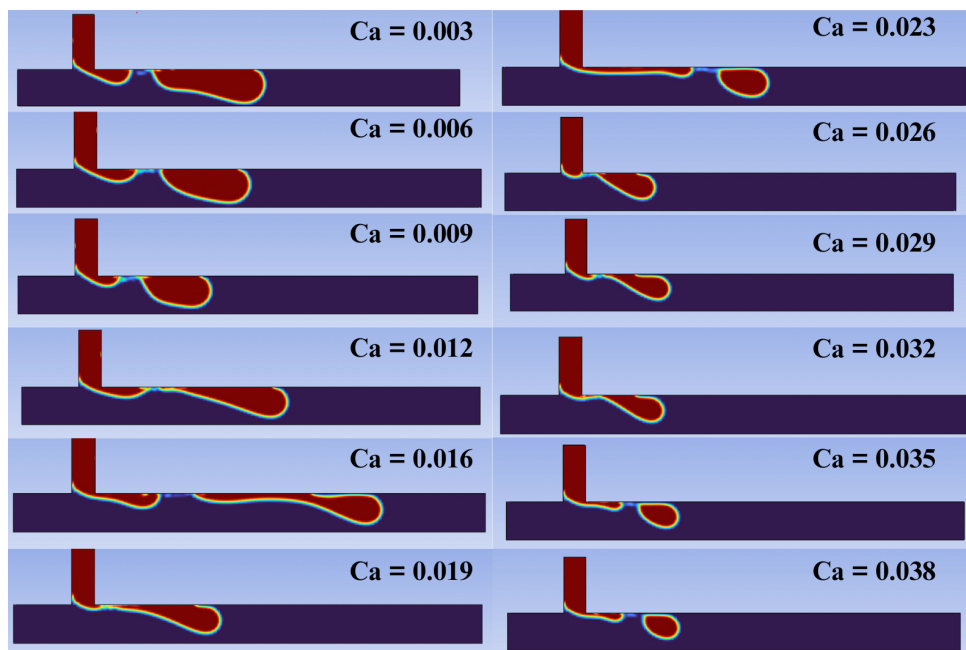
O segundo regime identificado é o de gotejamento (*dripping*), no qual as gotas são formadas próximo à junção dos canais da geometria. Nessas condições, a velocidade da fase dispersa se torna suficientemente alta para que a tensão viscosa aplicada pelo fluido da fase contínua se sobreponha à tensão interfacial. Dessa forma, segundo o princípio de conservação de massa, o fluido da fase dispersa passa a ser afunilado em pontos de altas velocidades. Nessa situação, produz-se alta pressão capilar no final do fluido afunilado, quebrando a fase dispersa e, conseqüentemente, gerando a gota.

O terceiro regime observado é o regime de jateamento (*jetting*), que ocorre com o aumento da velocidade do fluido da fase contínua. A gota tende a ser formada ao final do prolongamento da fase dispersa devido à alta inércia de escoamento da fase. A quebra em gota é resultado da instabilidade do jato. Uma região de transição entre o regime de estrangulamento (*squeezing*) e o regime de gotejamento (*dripping*) é identificada. Nessa transição, não há uniformidade na formação das gotas quanto ao tamanho e à maneira de rompimento (CHEKIFI, 2018).

Efeitos do número de capilaridade sobre o tamanho das gotas

A variação da velocidade do fluido de fase contínua resulta a variação, também, do número de capilaridade para cada simulação. Dessa forma, podemos analisar o comportamento dos fluidos em relação à formação de gotas. Para tanto, identificamos o momento de rompimento do fluido da fase dispersa, pelo qual a gota foi gerada no microcanal principal (como mostrado na Figura 26). Visualmente, por meio dos modos pelos quais a gota é formada, pode-se identificar e classificar os regimes de formação associados ao número de capilaridade.

Figura 26: Rompimento de gotas para diferentes números de capilaridade. Os instantes de rompimento da fase dispersa na junção foram registrados sob diferentes condições de número de capilaridade (Ca). Essas observações fornecem informações valiosas sobre os regimes de formação de gotas em função do número de capilaridade.

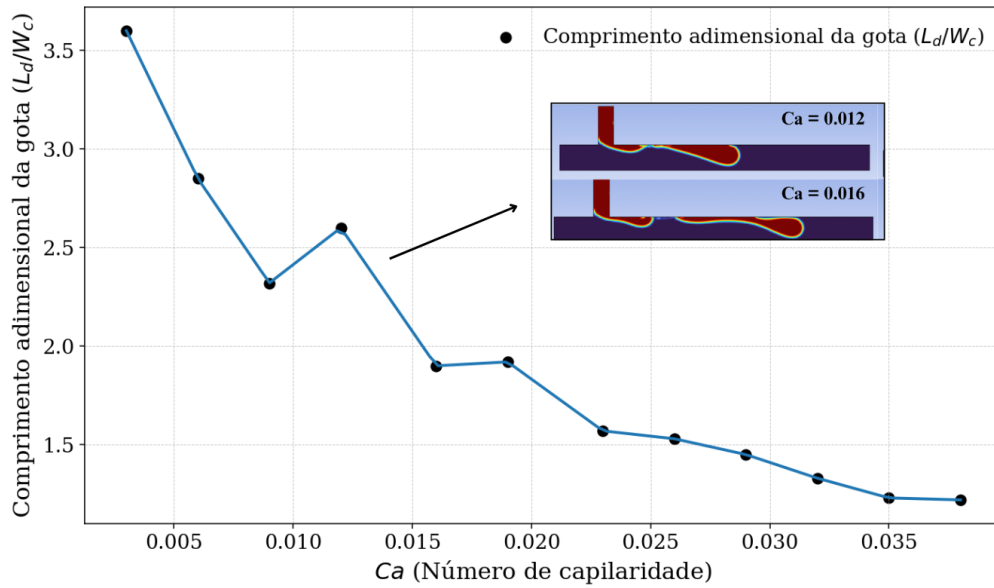


Fonte: Elaborado pelo autor.

Como identificado na Figura 27, o tamanho da gota decresce à medida em que os valores do número de capilaridade são incrementados. Isso ocorre de modo similar à relação da razão de velocidades dos fluidos com as dimensões das gotas, uma vez que, sobre nossas condições simulacionais, o único fator que altera o valor do número de capilaridade é a variação da velocidade do fluido da fase contínua.

Para valores do número de capilaridade relativamente baixos ($Ca \leq 0,012$), identifica-

Figura 27: Comprimento adimensional da gota para diferentes números de capilaridade.



Fonte: Elaborado pelo autor.

se a presença do regime de estrangulamento (*squeezing*), que, como explicitado anteriormente, resulta na formação de gotas maiores e mais largas, sem um contorno de interface bem definido. O tempo de desprendimento e formação da gota é, também, maior e observa-se a presença de irregularidade na interface entre os fluidos. Nessas condições, a produção das gotas torna-se não tão efetiva e não uniforme (MONTANERO; GAÑÁN-CALVO, 2020).

Para valores no intervalo de $0,012 < Ca \leq 0,023$, uma transição entre regimes é identificada. As gotas são formadas de maneira irregular quanto ao tamanho e à forma, e os momentos de rompimento da fase dispersa exibem diferentes características. Nessas condições de transição, a pressão da gota alcança um valor crítico, ocasionado a transição do regime de estrangulamento (*squeezing*) para o regime de gotejamento (*dripping*). Observa-se que, nessa região, os valores do tamanho da gota não apresentam uma taxa de decréscimo; ao contrário, ocorre um leve aumento em seus diâmetros antes de retomarem a tendência de redução.

Para valores entre $0,023 < Ca \leq 0,032$, observamos a formação de gotas no regime de gotejamento, sendo geradas junto à junção dos canais da geometria. Neste regime, o papel das forças de tensão é significativo para o rompimento do fluido. As gotas são, de

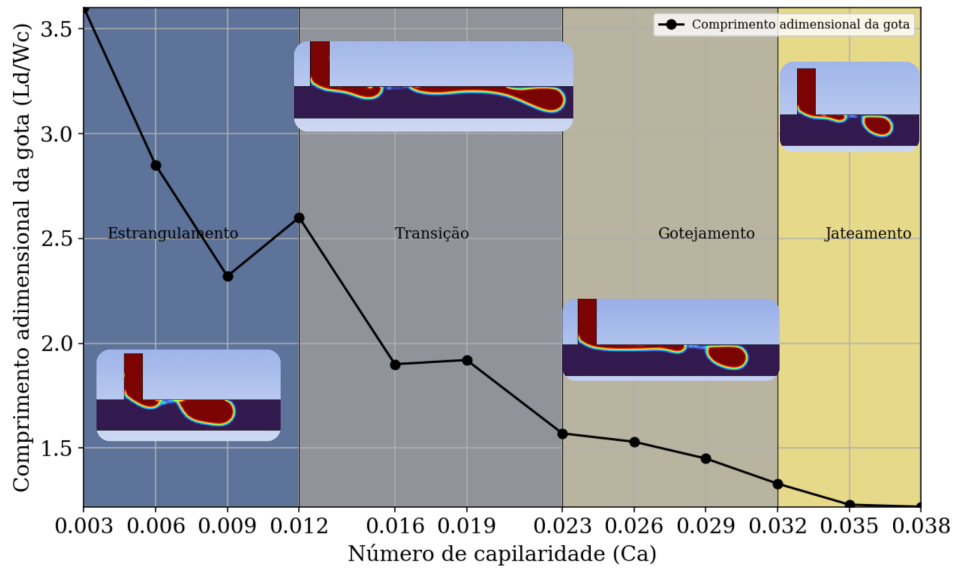
maneira típica, monodispersas e homogêneas, quando comparadas à formação no regime de estrangulamento e na fase de transição (NUNES et al., 2013).

Finalmente, para valores relativamente altos do número de capilaridade ($Ca > 0,032$), identificamos o regime de jateamento (*jetting*) na formação das gotas. Sob tais condições, as gotas podem ser produzidas devido à instabilidade de Rayleigh-Plateau, isto é, uma instabilidade de capilaridade, e são produzidas no fim da extensão do fluido da fase dispersa (SEEMANN et al., 2011; MOON et al., 2016).

Os mecanismos de rompimento e formação da gota no regime de gotejamento e de jateamento são diferentes, influenciando a forma e o tamanho das gotas geradas. No regime de gotejamento, as forças que atuam sobre a fase dispersa são caracterizadas pela pressão, tensão interfacial, forças viscosas e forças inerciais. No local da junção da geometria, a força interfacial resiste ao desprendimento da gota enquanto que as forças viscosas e de pressão empurram a fase dispersa para a direção de escoamento do fluido. Há três níveis de atuação dessas forças: a fase dispersa adentra à junção, resultando em uma queda de pressão e um gradiente de velocidade na fase contínua; a gota passa a se alongar no canal principal, mas a força de tensão interfacial dificulta sua expansão e crescimento. Com a fase dispersa bloqueando a área da junção, a queda de pressão atinge um valor crítico, fazendo com que o alongamento comece a ser afinado. O rompimento, então, ocorre após o descolamento da fase dispersa em relação à junção. Dessa forma, gotas são formadas próximas à junção e atingem sua forma estável (LAI et al., 2011). O regime de jateamento produz gotas ainda menores devido ao alongamento mais estreito da fase dispersa e aos menores valores de tensão interfacial e de cisalhamento (GUPTA; KUMAR, 2010).

A Figura 28 oferece a visualização dos diferentes regimes em que os fluidos atuam durante o processo de geração de gotas, relacionando-os à variação do número de capilaridade. Podemos, visualmente, detectar e classificar, de acordo com o número de capilaridade, os regimes em que cada modo de rompimento e formação da gota predomina. Identifica-se que, no regime de estrangulamento (*squeezing*), o tamanho da gota decresce à medida em que o número de capilaridade aumenta. Depois de atingido certo valor de Ca , há uma região de transição entre os regimes e, nesse estágio, o tamanho da gota não segue a tendência uniforme de crescimento ou decrescimento. Após a predo-

Figura 28: Diagrama de regime de fluido para a formação de gotas em diferentes valores do número de capilaridade (Ca).



Fonte: Elaborado pelo autor.

minância do regime de gotejamento (*dripping*), o tamanho da gota decresce à medida em que o número de capilaridade aumenta. Esse decréscimo é, também, atribuído ao regime de jateamento (*jetting*), mas com uma taxa de variação ainda maior.

Conclusões

Nesta análise do presente trabalho, objetivamos entender como parâmetros físicos, tais como a razão de velocidade dos fluidos e o número de capilaridade, afetam a formação e a geração de microgotículas em microcanais. Para este fim, nós empregamos um método baseado em simulação e numérico que, uma vez validado com dados da literatura, forneceu informações cruciais para entender as condições de formação das gotas. Inicialmente, nós analisamos como a razão de velocidade entre as fases dispersa e contínua (U_c/U_d) influenciou o tamanho das gotas. Nós observamos uma relação inversa, na qual o diâmetro das gotas diminuiu à medida que a razão de velocidade aumentou. Adicionalmente, nós examinamos a influência do número capilar sobre as características de diferentes regimes de formação. O método de simulação empregado, Volume de Fluido (VOF), provou ser eficaz na identificação de uma região de transição entre os regimes de formação, caracterizada por uma instabilidade nos tamanhos das gotas. A abordagem possibilitou uma descrição mais detalhada do mapeamento dos regimes de escoamento.

Apesar de não oferecer o mesmo nível de precisão na resolução da interface fluida como o método *Level Set*, o método VOF demonstrou eficiência e provou ser adequado para analisar problemas microfluídicos. Ele surgiu como uma alternativa viável para simulações numéricas neste campo, equilibrando custo computacional e precisão. Além disso, o método foi eficiente em apresentar parâmetros físicos chave, tais como o tamanho das gotas e as características do regime de formação, que são cruciais para entender o processo de geração das gotas. As informações obtidas deste estudo contribuem para uma melhor compreensão da implementação do método VOF na análise numérica e baseada em simulação da formação de gotas em microcanais, com potenciais aplicações futuras no desenvolvimento de microdispositivos.

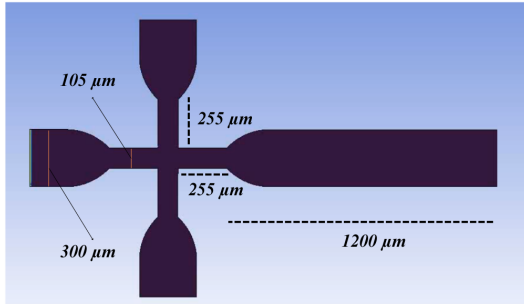
4.2 Influência de parâmetros geométricos na formação de gotas em microcanais

A presente seção deste trabalho constitui um estudo realizado em apoio ao Grupo de Física Aplicada à Medicina e Nanotecnologia (GFAMN), da Unesp, câmpus de Bauru. Pretendemos viabilizar, no contexto simulacional, uma melhor compreensão sobre as características geométricas de microcanais que seriam, em certo momento, aplicados para experimentações futuras. Com isso, objetivou-se fornecer ao grupo importantes considerações dos aspectos físicos de geração de gotas nas geometrias estudadas a fim de contribuir para a otimização experimental.

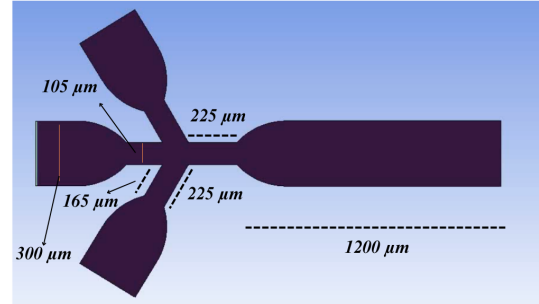
Com o propósito de entender como parâmetros da modelagem geométrica influenciam as características das gotas formadas, diversas simulações foram desenvolvidas, as quais envolveram diferentes geometrias com canais característicos para a produção de gotículas através de um sistema de focalização de fluxo (*flow-focusing*).

Inicialmente, fizemos uso de quatro variações de geometria, nas quais o ângulo de junção entre o canal da fase contínua e o canal da fase dispersa foi alterado. As geometrias usadas estão mostradas na Figura 29.

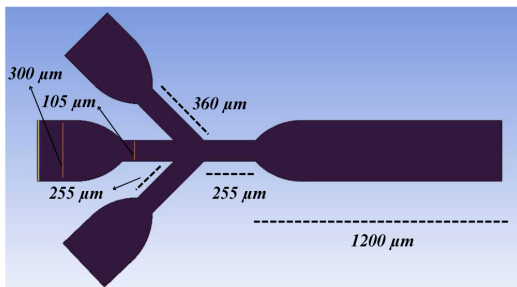
Figura 29: Geometrias para a formação de gotas em um dispositivo de focalização de fluxo, implementadas nas simulações numéricas. O canal horizontal principal é a entrada para o fluido da fase dispersa (álcool), enquanto os dois canais que se encontram na junção são as entradas para o fluido da fase contínua (água). A Geometria A possui um ângulo de junção de 90° , enquanto as demais — B, C e D — possuem ângulos de junção de 60° , 45° e 30° , respectivamente.



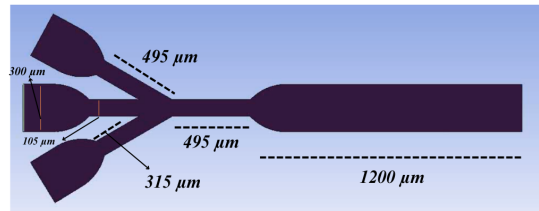
(a) Geometria A



(b) Geometria B



(c) Geometria C



(d) Geometria D

Fonte: Elaborado pelo autor.

4.2.1 Procedimento computacional

Para a implementação computacional, utilizamos o software Ansys Fluent, pelo qual são empregados métodos baseados em volume de controle para a transformação das equações de governança em suas formas algébricas para a solução numérica. As especificidades do método numérico empregado (VOF), bem como a implementação pelo software de solução, foram abordadas em discussões anteriores deste trabalho.

A modelagem e configurações geométricas foram trabalhadas através do software SpaceClaim, seguidas da geração e do refinamento da malha computacional. Para tanto, uma malha quadrilateral foi utilizada, oferecendo melhor precisão dos efeitos de tensão superficial quando comparada às malhas triangulares ou, até mesmo, tetraédricas.

Em relação à interação entre as fases, as condições iniciais foram configuradas a partir

do modelo de anti-difusão interfacial, assumindo o valor para a tensão interfacial constante de $0,005 \text{ N/m}$. As condições de entrada foram derivadas das velocidades iniciais dos fluidos. Uma condição de não deslizamento foi aplicada às paredes da geometria, e o ângulo de contato entre as fases, representando a adesão à parede, foi definido como 135° . Para a discretização espacial, empregamos a formulação do gradiente *Green Gauss Cell Based* e, como esquema, *Upwind* de segunda ordem. Para a discretização das equações de momento, utilizamos o esquema PRESTO!. As simulações foram consideradas estáveis e aceitáveis a partir do momento em que os resultados entre passos de tempo sucessivos variassem em menos de 10^{-5} , indicando que o critério de convergência fora atingido.

Em todas as simulações conduzidas, os fluidos foram caracterizados baseados nas propriedades físicas mostradas na tabela 2. A fase de álcool é considerada como fase dispersa, enquanto que a fase de água, contínua.

Fluido	Densidade (ρ , kg/m^3)	Viscosidade (η , $\text{mPa} \cdot \text{s}$)
Água	1000	1,0
Álcool	850	1,074

Tabela 3: Propriedades físicas dos fluidos usados nas simulações para geometria *flow-focusing*.

As velocidades dos fluidos foram determinadas considerando que a razão entre as velocidades da fase dispersa e da fase contínua (U_d/U_c) variasse no intervalo de 0 a 1. A velocidade da fase dispersa foi, então, matida em 0.01 m/s , e a velocidade da fase contínua foi variada dentro do intervalo de U_d/U_c .

4.2.2 Efeitos da razão de velocidade na formação de gotas

Os padrões de escoamento na formação de gotas em sistemas bifásico líquido-líquido para um microcanal com características geométricas de focalização de fluxo (*flow-focusing*) podem ser categorizados em estrangulamento, gotejamento e jateamento. Esses padrões, como descrito anteriormente, são influenciados pelas propriedades físicas das fases, pelos parâmetros de fluxo, estruturas e dimensões do dispositivo microfluídico.

Nessas condições, o processo de formação de uma gota é caracterizado por três etapas fundamentais. No estágio inicial, denominado de estágio de preenchimento, os fluidos das diferentes fases preenchem os canais de entradas separadamente até convergirem na

junção da geometria. No estágio subsequente, caracterizado pelo estrangulamento, o fluido da fase contínua aplica determinada tensão de cisalhamento e pressão sobre o fluido da fase dispersa capazes de fazê-lo ser comprimido no canal de escoamento. Finalmente, no estágio final, denominado de estágio de destacamento (ou desprendimento), a instabilidade capilar, associada à interação entre as forças de cisalhamento e tensões superficiais, leva à ruptura do fluido da fase dispersa (ROUMPEA et al., 2019).

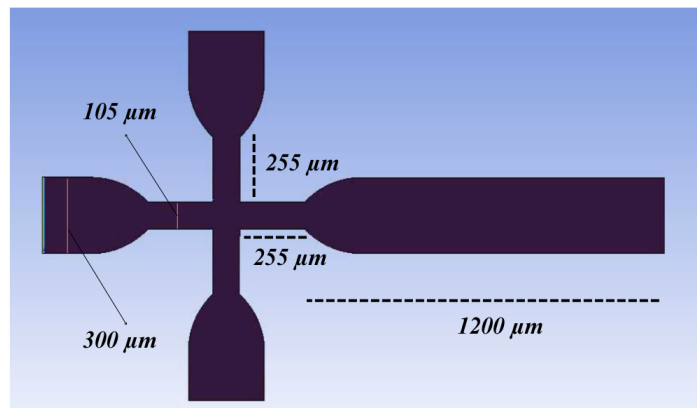
Nesse mecanismo de interação, a razão de velocidade dos fluidos é um fator determinante para a formação de gotas monodispersas à medida em que, também, influencia o número de capilaridade e a relação entre a força de cisalhamento aplicada pela fase contínua (água) sobre a fase dispersa (álcool) e as tensões superficiais.

Em seguida, mostramos como a alteração da velocidade da fase contínua (U_c), que, por sua vez, faz com que a razão de velocidade seja alterada, influencia o padrão de produção de gotas nas diferentes geometrias, assim, também identificando como o caráter geométrico atua neste mecanismo.

Geometria A

A geometria A possui as seguintes dimensões, mostradas na Figura 30.

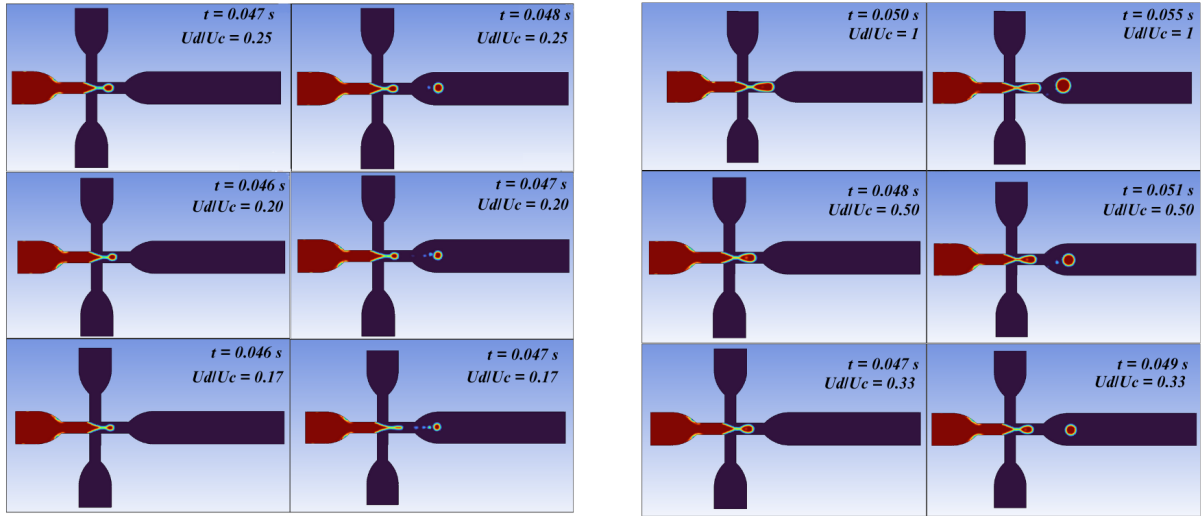
Figura 30: Dimensões da geometria A: os canais de entrada e saída possuem largura de $300\ \mu\text{m}$ e um canal de afunilamento de $105\ \mu\text{m}$. A distância do funilamento até a junção é de $255\ \mu\text{m}$, e o comprimento do canal principal é $1200\ \mu\text{m}$. Os canais fazem um ângulo de 90° .



Fonte: Elaborado pelo autor.

Para diferentes valores da razão U_d/U_c , os resultados das simulações foram analisados. Registramos, também, o instante que determina a quebra da fase dispersa e o processo final da formação de uma gota.

Figura 31: Rompimento da fase dispersa e gotas monodispersas formadas no canal da geometria A para diferentes valores de razão de velocidade U_d/U_c .



Fonte: Elaborado pelo autor.

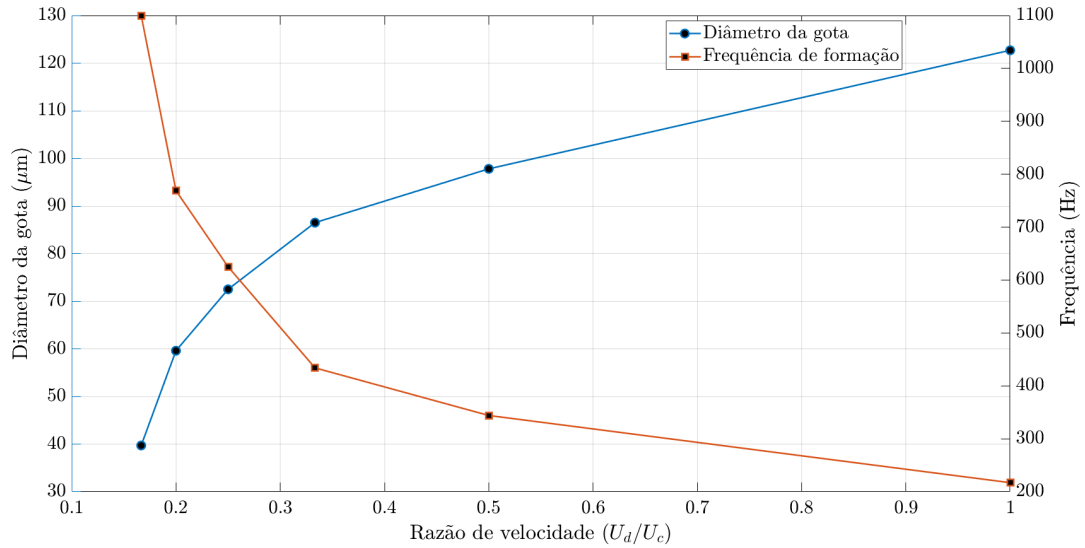
Visivelmente, notamos que, à medida que a velocidade da fase contínua aumenta (e, conseqüentemente, a razão U_d/U_c diminui), as gotas geradas tendem a diminuir de tamanho em relação ao seu diâmetro. O gráfico na Figura 32 mostra como o diâmetro das gotas varia em função da razão de velocidades. Além disso, a frequência de formação das gotas foi calculada com base no tempo de rompimento entre uma gota e a próxima formada. Observa-se que, à medida que a velocidade da fase contínua aumenta, a frequência de formação se comporta de maneira inversamente proporcional ao diâmetro das gotas.

Em geral, a geometria apresenta bom desempenho no que diz respeito à geração de gotas uniformes e com certo grau de monodispersidade, com tamanhos controláveis por parâmetros relativamente simples. Observa-se que, para os valores considerados nas simulações, as instabilidades nas forças atuantes no sistema apenas contribuíram para a geração de gotas e, em certa medida, não influenciaram nas instabilidades do volume do fluido da fase dispersa, nem na presença de regimes de formação instáveis ou não uniformes.

Geometria B

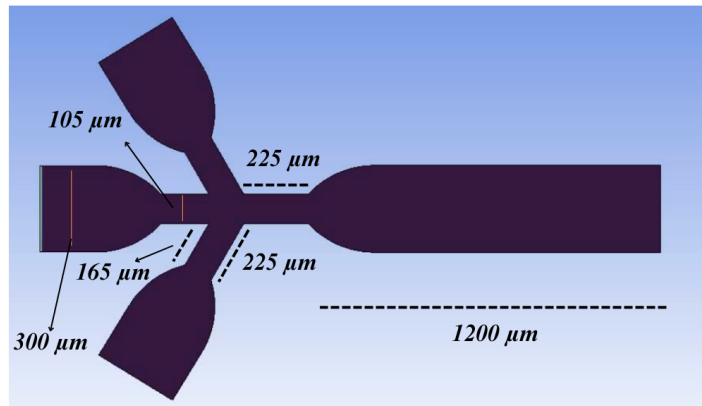
A geometria B possui as seguintes dimensões, mostradas na Figura 33.

Figura 32: Valores do diâmetro da gota gerada e da frequência de formação em função da razão de velocidade U_d/U_c para a geometria A.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 33: Dimensões da geometria B: os canais de entrada e saída possuem largura de $300 \mu\text{m}$ e um canal de afunilamento de $105 \mu\text{m}$. A distância do funilamento até a junção é de $225 \mu\text{m}$ para o maior lado e $165 \mu\text{m}$ para o menor lado. O comprimento do canal principal é $1200 \mu\text{m}$. Na junção, os canais fazem um ângulo de 60° em relação à horizontal.

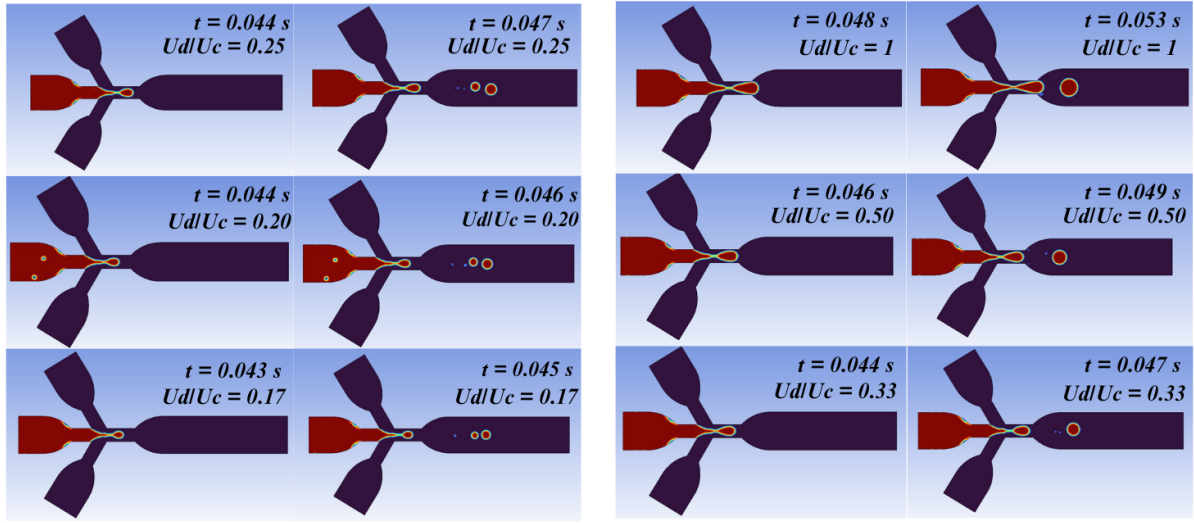


Fonte: Elaborado pelo autor.

Para diferentes valores de razão U_d/U_c , identificamos o instante de ruptura da fase dispersa e a formação subsequente de gotas.

Como também observado na geometria A, a formação de gotas monodispersas é caracterizada pelo aumento no diâmetro das gotas à medida que a razão de velocidades U_d/U_c aumenta. No entanto, para razões menores que $U_d/U_c = 0,33$, observamos a formação de

Figura 34: Rompimento da fase dispersa e gotas monodispersas formadas no canal da geometria B para diferentes valores de razão de velocidade U_d/U_c .



Fonte: Elaborado pelo autor.

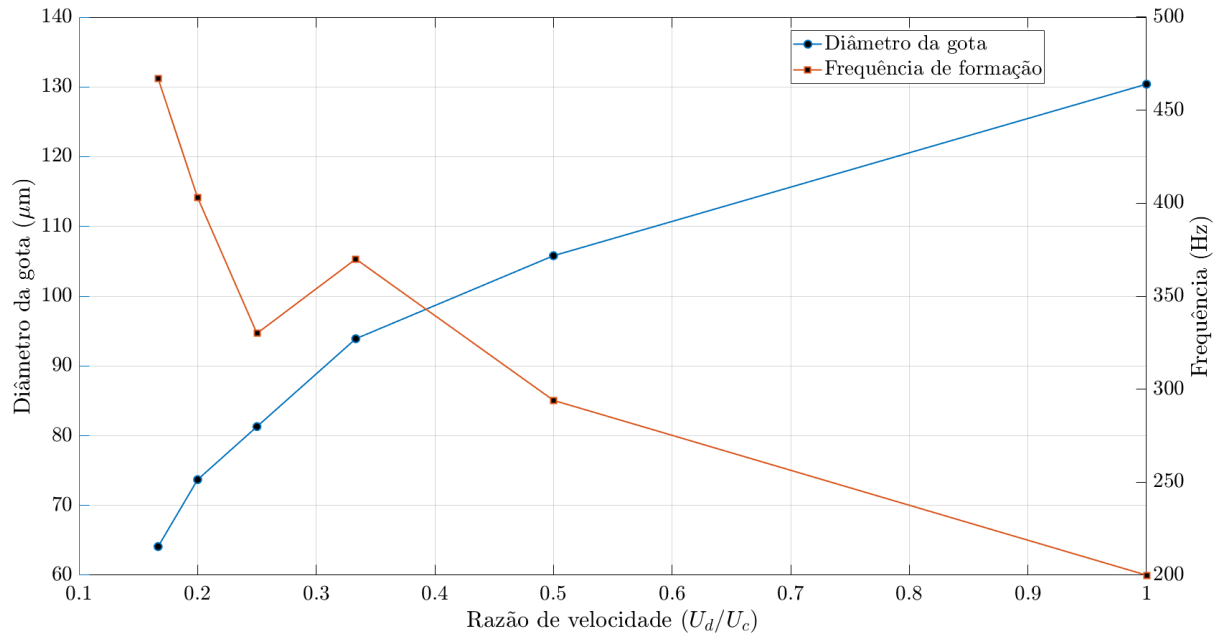
gotas subsequentes e menores. Esse fenômeno deve-se, em partes, à instabilidade resultante da relação entre a tensão superficial da fase dispersa e a força de cisalhamento da fase contínua, que adentra à junção com ângulo diferente em comparação à geometria anterior. Essa dinâmica faz com que o fluido da fase dispersa não retorne completamente ao canal de entrada antes que o fluido da fase contínua exerça uma força de cisalhamento suficientemente alta, impedindo o movimento completo de estrangulamento da fase dispersa e, assim, formando uma gota subsequente (KOVALCHUK et al., 2019).

Para esta situação, calculamos o tamanho da gota e a frequência de formação com base na primeira gota do par de gotas que se formam a partir de um determinado valor de U_d/U_c . O gráfico abaixo (Figura 35) mostra a relação entre esses parâmetros.

Devido à formação prematura de uma gota subsequente, a frequência de produção de gotas apresenta um comportamento distinto nas regiões em que a razão $U_d/U_c = 0,33$. Como o cálculo da frequência considera apenas a primeira gota dos pares formados, a formação da gota subsequente introduz um atraso na formação esperada da próxima gota.

Esta geometria, especificamente, proporciona condições particulares para a formação de gotas com certo grau de monodispersidade. Isso torna a análise de sua eficiência mais complexa, pois exige a consideração da ocorrência de formações prematuras indesejadas

Figura 35: Valores do diâmetro da gota gerada e da frequência de formação em função da razão de velocidade U_d/U_c para a geometria B.



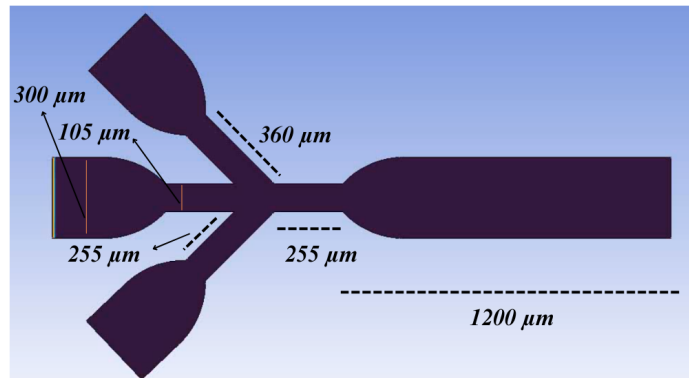
Fonte: Elaborado pelo autor.

de gotas em determinadas regiões dos valores de velocidade dos fluidos.

Geometria C

A geometria C possui as seguintes dimensões, mostradas na Figura 36.

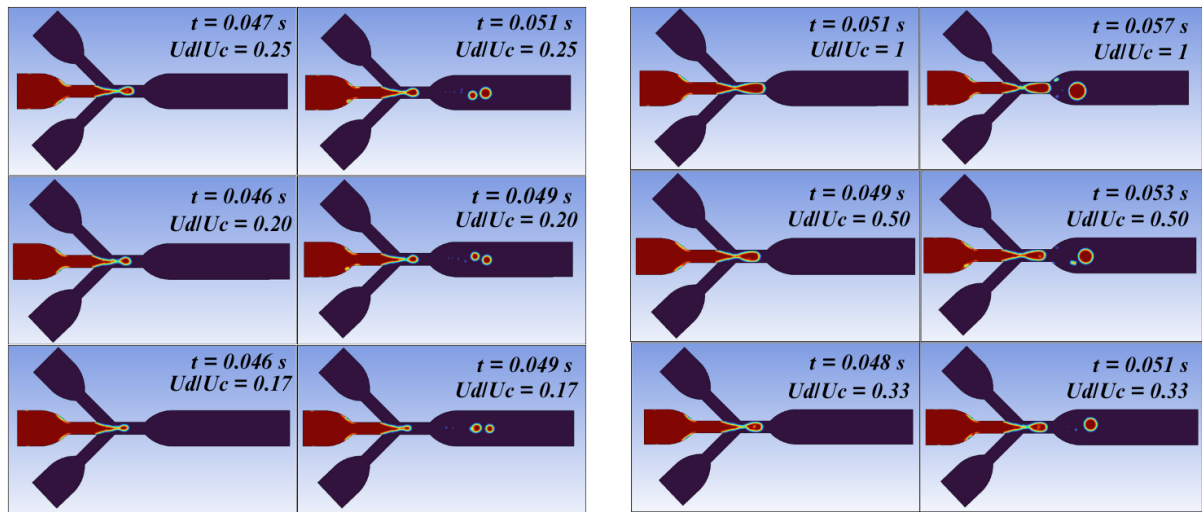
Figura 36: Dimensões da geometria C: os canais de entrada e saída possuem largura de $300\ \mu\text{m}$ e um canal de afunilamento de $105\ \mu\text{m}$. A distância do funilamento até a junção é de $255\ \mu\text{m}$. O comprimento do canal principal é $1200\ \mu\text{m}$. Na junção, os canais fazem um ângulo de 45° em relação à horizontal.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Para diferentes valores da razão de velocidade (U_d/U_c), os resultados da simulação foram registrados, capturando os instantes do rompimento da fase dispersa (Figura 37).

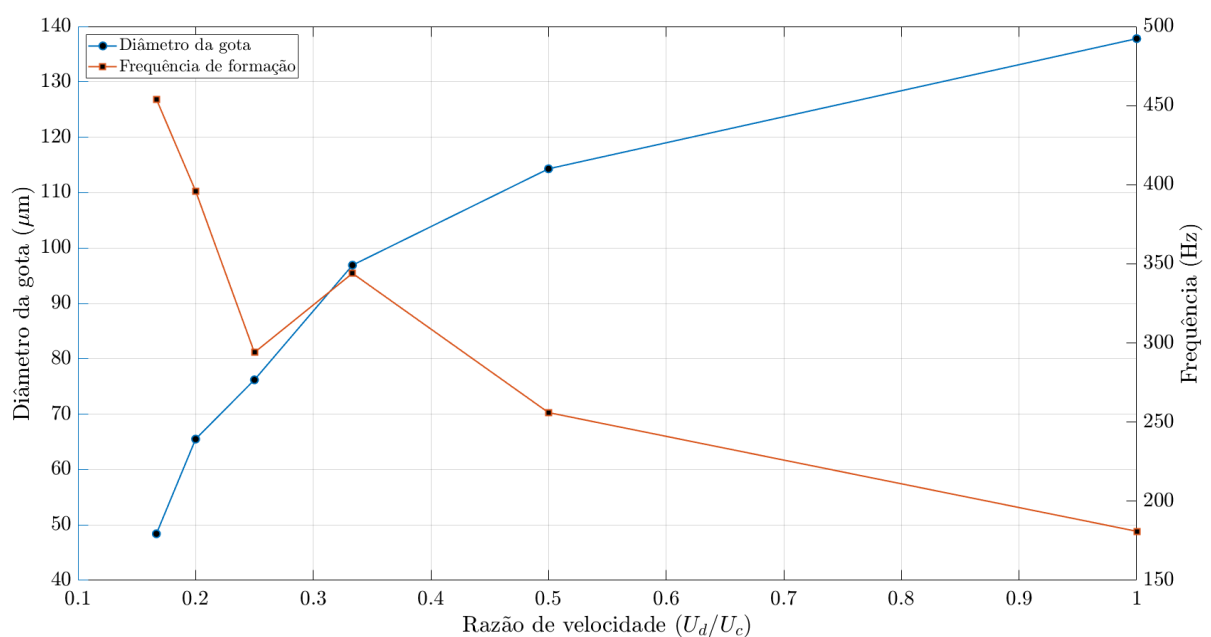
Figura 37: Rompimento da fase dispersa e gotas monodispersas formadas no canal da geometria C para diferentes valores de razão de velocidade U_d/U_c .



Fonte: Elaborado pelo autor.

O padrão de formação de gotas na geometria C segue uma tendência semelhante à da geometria B. A partir do valor de $U_d/U_c = 0,25$, observamos a formação precoce de gotas subsequentes. As razões para este padrão foram registradas na análise da geometria anterior e permanecem as mesmas para esta presente análise.

Figura 38: Valores do diâmetro da gota gerada e da frequência de formação em função da razão de velocidade U_d/U_c para a geometria C.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Mais uma vez, os valores do diâmetro efetivo da gota e da frequência de formação foram registrados, utilizando-se a primeira gota dos pares formados como referência, e o intervalo de tempo entre a formação da primeira gota de um par e a primeira gota do par subsequente.

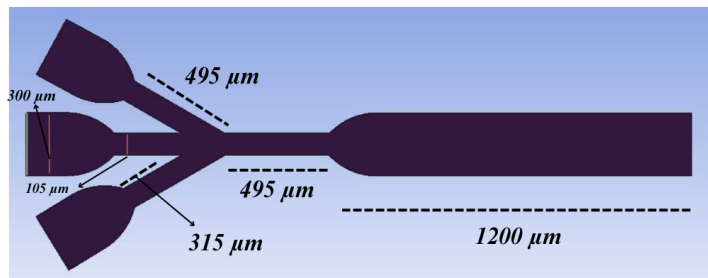
A análise gráfica permite identificar uma região de formação precoce de gotas subsequentes, o que retarda o tempo de formação esperado da gota. De modo geral, é perceptível a relação já evidente, em que o diâmetro das microgotas formadas diminui à medida que a velocidade da fase constante aumenta, fazendo com que as forças de cisalhamento superem as forças de tensão superficial, levando à formação de gotas em um tempo menor, reduzindo assim seu diâmetro efetivo.

A formação de gotas nesta geometria apresenta certo grau de regularidade e uniformidade. No entanto, para determinados valores da razão de velocidades, é fundamental considerar instabilidades que levam a efeitos indesejados na formação de gotas com o grau desejado de monodispersidade. Essas instabilidades podem, em certa medida, afetar a eficiência da geometria, especialmente com sua projeção para uma aplicação que exige produção contínua e regular.

Geometria D

Por fim, a última geometria analisada neste estudo apresenta as seguintes dimensões, mostradas na Figura 39.

Figura 39: Dimensões da geometria D: os canais de entrada e saída possuem largura de $300\ \mu\text{m}$ e um canal de afunilamento de $105\ \mu\text{m}$. A distância do funilamento até a junção é de $495\ \mu\text{m}$ para o maior lado e $315\ \mu\text{m}$ para o menor lado. O comprimento do canal principal é de $1200\ \mu\text{m}$. Na junção, os canais fazem um ângulo de 30° em relação à horizontal.

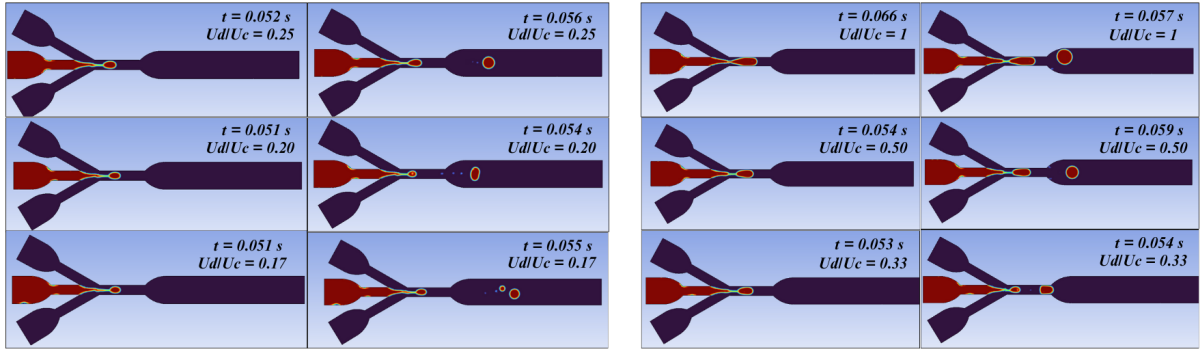


Fonte: Elaborado pelo autor.

Para diferentes valores da razão de velocidade (U_d/U_c), os resultados da simulação

foram registrados, capturando os instantes do rompimento da fase dispersa (Figura 40).

Figura 40: Rompimento da fase dispersa e gotas monodispersas formadas no canal da geometria D para diferentes valores de razão de velocidade U_d/U_c .



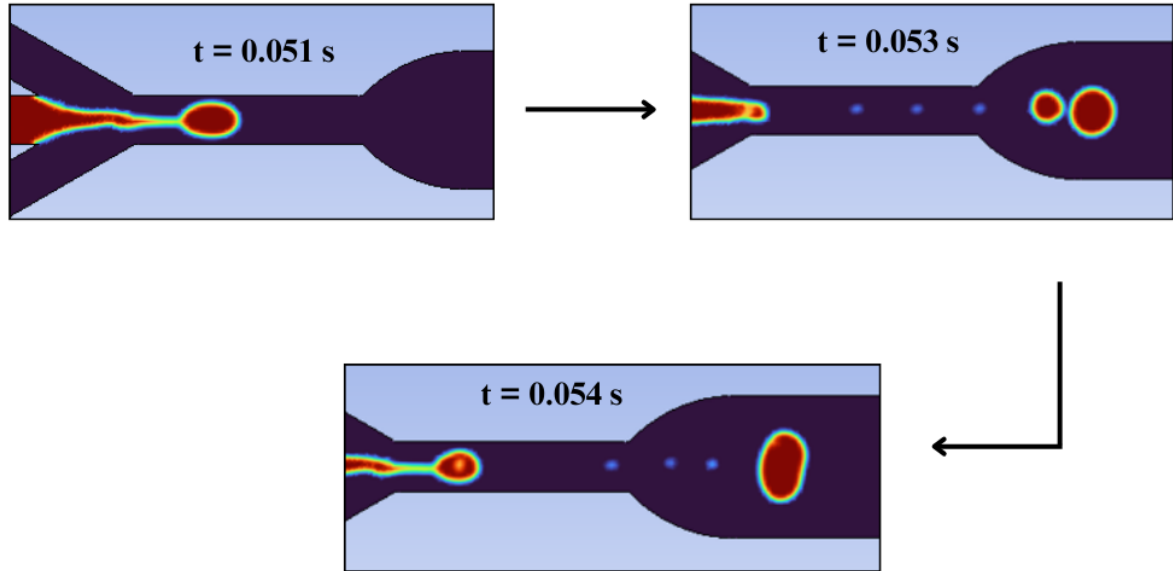
Fonte: Elaborado pelo autor.

Observamos, nesta geometria, um padrão de comportamento dos fluidos semelhante às dinâmicas das duas geometrias analisadas anteriormente. Acima de um certo valor de U_d/U_c , gotas subsequentes de tamanhos menores começam a se formar devido à interação entre as forças de cisalhamento do fluido da fase contínua (água) e a força de tensão superficial do fluido da fase dispersa (álcool). A captura geral dos momentos de separação das gotas, como mostrado na Figura 40, não permite a visualização antecipada das gotas subsequentes sendo formadas. Isso se deve ao fato de que, no momento em que o fluido disperso se rompe em uma gota esperada, a gota formada de forma prematura já se fundiu com a gota gerada anteriormente. Uma visualização mais clara dessa dinâmica é possível através da Figura 41.

Como observado, dentro de um curto intervalo de tempo entre uma gota esperada e a seguinte, uma gota precoce e menor se forma. Essa gota se funde com a gota formada anteriormente, resultando em uma única gota maior. A coalescência das gotas é, em grande parte, resultado de um equilíbrio dinâmico entre a tensão superficial, as forças de cisalhamento e os efeitos hidrodinâmicos. A tensão superficial tende a minimizar a área interfacial entre os fluidos a tal ponto que pode causar a ruptura da interface para reduzir a energia do sistema (EGGERS; LISTER; STONE, 1999).

O fenômeno da formação precoce de gotas e posterior coalescência ocorre, para esta geometria, mesmo para as primeiras razões de velocidade analisadas, em valores inferiores a $U_d/U_c = 0,50$. Também pode-se observar que, para valores mais baixos de U_d , a formação

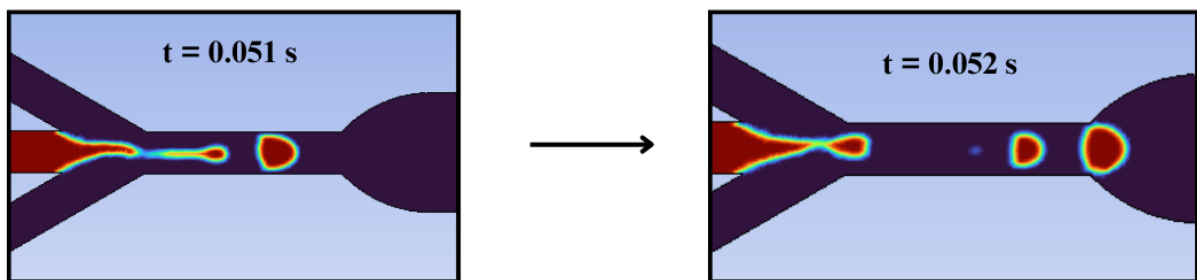
Figura 41: Formação precoce de gota para $U_d/U_c = 0,25$. Inicialmente, a separação da gota ocorre como esperado. No entanto, pouco depois, uma gota subsequente se forma em um curto intervalo de tempo. A gota precoce, então, se funde com a gota formada anteriormente em uma única gota.



Fonte: Elaborado pelo autor.

de duas gotas ocorre de forma prematura (Figura 42).

Figura 42: Formação de duas gotas precoces na razão de velocidades de $U_d/U_c = 0,17$.

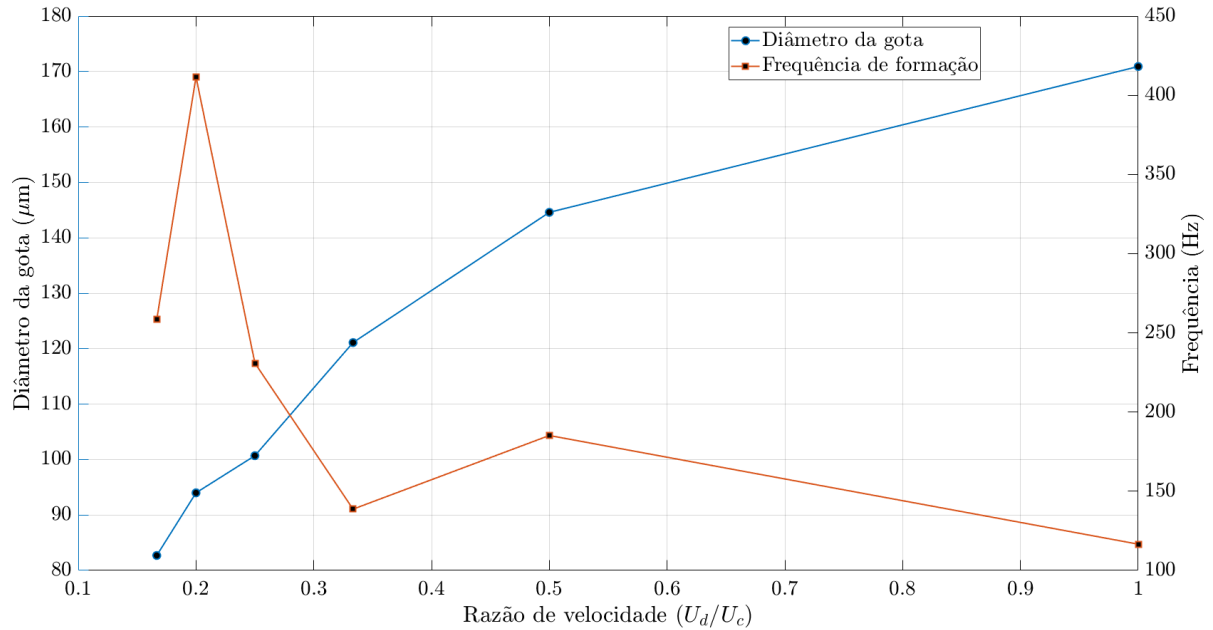


Fonte: Elaborado pelo autor.

O gráfico abaixo da Figura 43 fornece uma análise relacionando o tamanho da gota e a frequência de formação em função da razão de velocidades. Um atraso perceptível na frequência das gotas ocorre em uma região de valores de U_d/U_c , o que corresponde à formação de gotas precoces. Diante disso, a presente análise está considerando a formação da primeira gota gerada em um par de gotas subsequentes.

Os resultados mostram a existência de duas reduções na frequência de formação de gotas. A primeira ocorre próxima de $U_d/U_c = 0,33$, quando uma gota precoce é formada.

Figura 43: Valores do diâmetro da gota gerada e da frequência de formação em função da razão de velocidade U_d/U_c para a geometria D.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A segunda redução ocorre na região em torno de $U_d/U_c = 0,17$, onde duas gotas precoces são formadas, diminuindo a frequência da formação original de gotas.

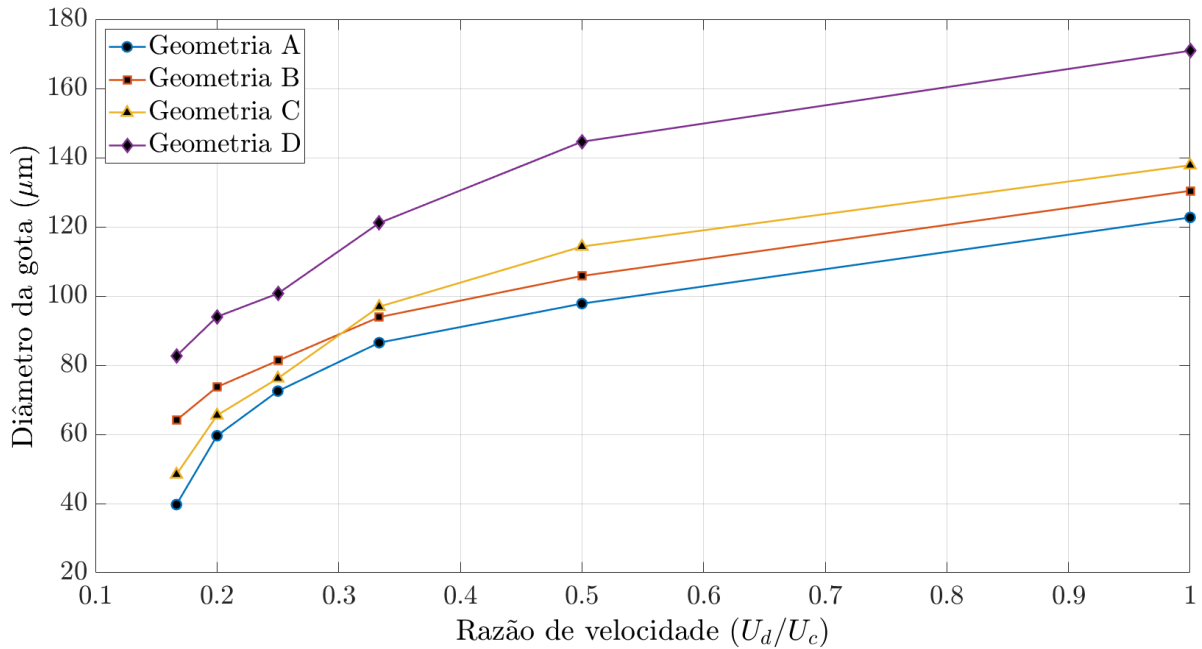
O desempenho desta geometria deve considerar a formação precoce de gotas em baixos valores de U_d , o que, até certo ponto, pode comprometer a produção homogênea de gotas. Nesse sentido, ainda que para altos valores de U_d as condições forneçam fácil manipulação e controle sobre a formação, frequência e tamanho das gotas, para baixos valores, as instabilidades podem inibir a precisão.

4.2.3 Análise comparativa dos resultados das diferentes geometrias

O gráfico da Figura 44 mostra o comportamento das quatro geometrias em relação ao tamanho das gotas formadas em função da razão de velocidades apresentada.

Identificamos que, para as quatro geometrias, de modo geral, uma relação de proporção direta entre o tamanho da gota e o valor de U_d é esperada. À medida que a velocidade do fluido da fase dispersa diminui, o tamanho da gota diminui, condição decorrente da sobreposição das forças de cisalhamento sobre a tensão superficial do fluido da fase dispersa.

Figura 44: Diâmetro da gota em função da razão de velocidade U_d/U_c para cada geometria.



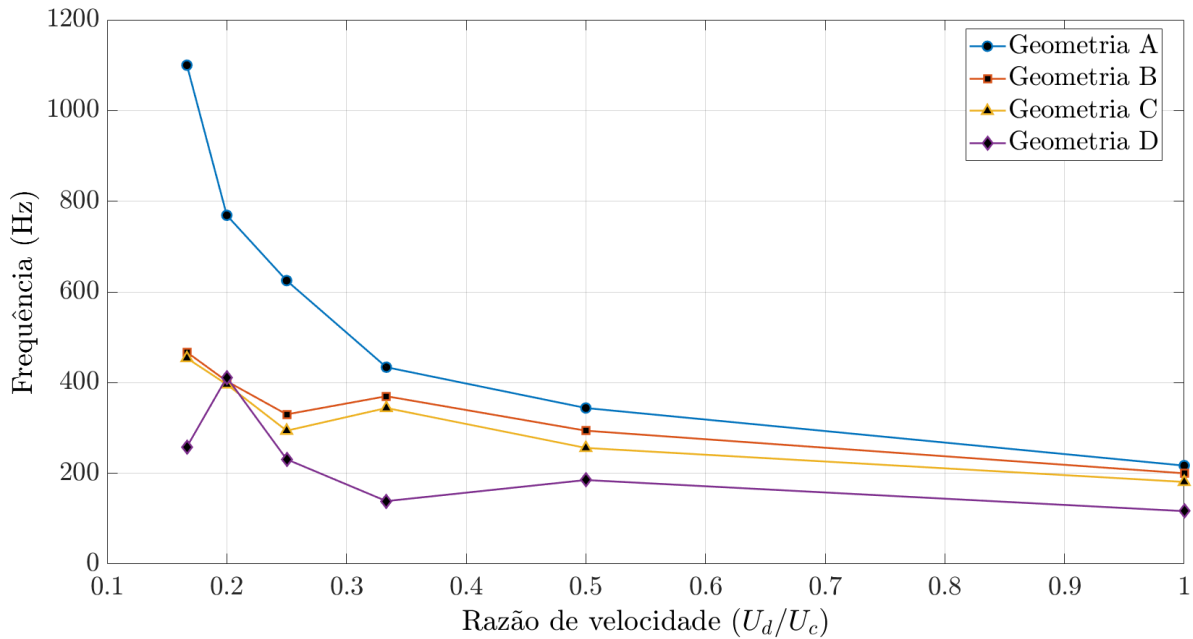
Fonte: Elaborado pelo autor.

Entretanto, a análise comparativa nos permite identificar especificidades. A geometria A possui limites inferiores de tamanho de gota dentro da faixa de valores de U_d/U_c . As geometrias B e C mostram uma semelhança relativa, com um desvio inicial entre seus valores devido ao aumento abrupto do diâmetro da gota para a geometria C em baixos valores de U_d/U_c . A geometria D, por sua vez, apresenta valores do tamanho da gota maiores em todo intervalo de U_d/U_c .

Identifica-se, ainda, uma tendência de uniformidade da formação das gotas para valores altos de U_d/U_c .

Com relação à frequência de formação de gotas, podem ser observadas algumas peculiaridades importantes, diretamente relacionadas à eficiência de cada geometria. A geometria A apresenta um aumento contínuo na frequência à medida que os valores de U_d/U_c diminuem, o que significa que a frequência aumenta conforme a velocidade do fluido da fase contínua se eleva. No entanto, para as geometrias B e C, observa-se uma queda nos valores de frequência. Isso se deve à formação prematura de gotas subsequentes após a gota esperada, conforme analisado anteriormente. Como o cálculo da frequência apresentado considera o intervalo de tempo entre gotas esperadas e não entre gotas formadas prematuramente, a geração indesejada de pequenas gotas atrasa a formação das gotas

Figura 45: Frequência de formação de gotas para cada geometria em função dos valores de U_d/U_c .



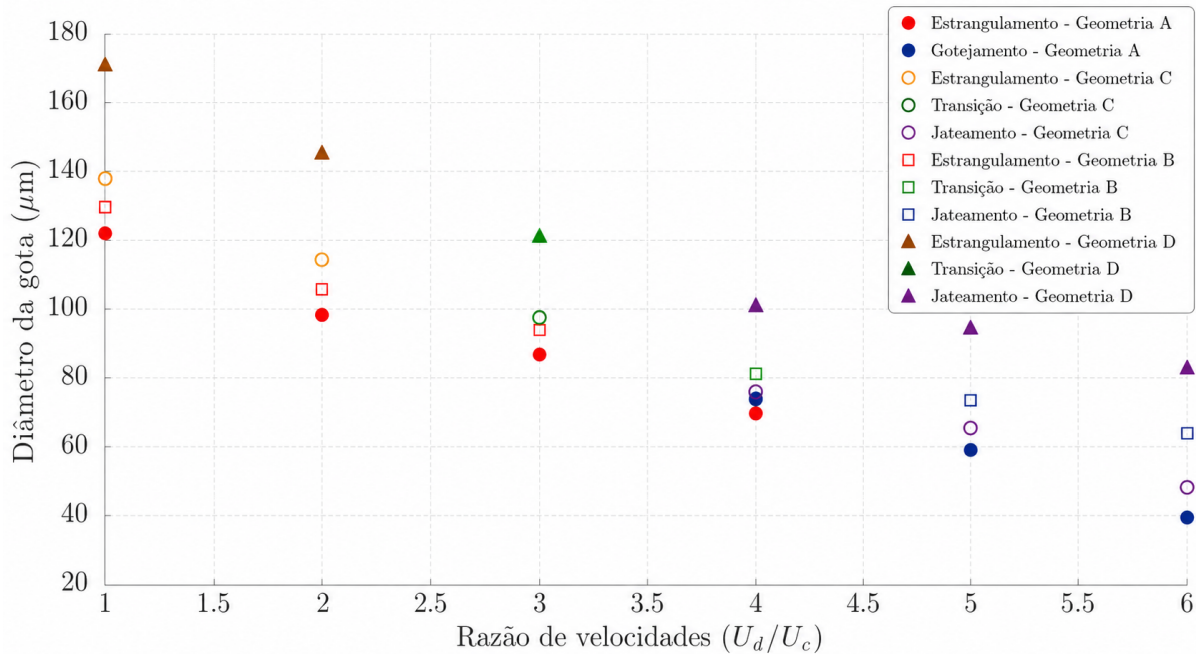
Fonte: Elaborado pelo autor.

ideais, reduzindo, assim, os valores de frequência. O mesmo comportamento é observado para a geometria D. No entanto, como já mencionado, essa geometria tende a formar mais de uma gota subsequente prematura em baixos valores de U_d , levando a quedas ainda maiores nos valores de frequência.

Regimes de formação

O processo de formação de gotas é influenciado pela razão entre as velocidades dos fluidos, U_c/U_d , onde U_c é a velocidade da fase contínua e U_d é a velocidade da fase dispersa. Os comportamentos observados das gotas podem ser classificados em diferentes regimes de formação: estrangulamento, gotejamento e jateamento. Esses regimes são determinados pelo equilíbrio entre as forças que atuam sobre as gotas durante sua formação. Para a geometria A, a formação de gotas começa no regime de estrangulamento, pelo qual as gotas crescem em tamanho à medida que a razão U_c/U_d aumenta de 1 até 4. Uma vez que a razão atinge 4, o regime transita para o regime de gotejamento, caracterizado por uma formação de gotas mais definida e periódica. Na geometria C, o comportamento é semelhante, mas com uma faixa de transição menor. As gotas inicialmente se formam no regime de estrangulamento até uma razão de 2. Após esse ponto, emerge um regime transitório entre gotejamento e jateamento. Nesse regime, gotas prematuras são formadas

Figura 46: Classificação do processo de geração de gotas em relação ao regime de formação para as geometrias estudadas. Três tipos de regimes são observados: estrangulamento, gotejamento e jateamento, assim como faixas de transição entre eles. Os regimes são fortemente dependentes da razão de velocidades dos fluidos e podem ser classificados por meio da caracterização do processo de formação das gotas.



Fonte: Elaborado pelo autor.

com características que lembram o regime de jateamento, mas com a periodicidade típica do regime de gotejamento. Esse regime continua até que a razão atinja 3, após o qual a formação das gotas se estabiliza no regime de jateamento. Para a geometria B, observa-se um padrão semelhante, mas a transição do regime de estrangulamento para um regime híbrido de gotejamento e jateamento ocorre em uma razão mais elevada, de 3. Assim, o comportamento da geometria B segue uma tendência semelhante à da geometria C, mas com um início mais tardio da transição entre regimes. Por fim, a geometria D apresenta essa mesma transição começando na razão de 2, marcando uma mudança do regime de estrangulamento para o regime híbrido gotejamento/jateamento. Essa transição é crucial para a compreensão da dinâmica de formação de gotas em sistemas microfluídicos.

Em resumo, a classificação dos regimes de formação de gotas depende fortemente da razão de velocidades, com transições distintas ocorrendo em diferentes pontos para cada geometria. Essas transições são caracterizadas por uma mudança no tipo de formação de gotas, do regime inicial de estrangulamento, passando por um estado transitório, até alcançar o regime final de gotejamento ou jateamento.

4.3 Dinâmica de *droplet splitting* em microcanal assimétrico

A técnica de divisão de gotas em microfluídica refere-se à partição de gotas em tamanhos controlados, ajustados para aplicações específicas. Esse processo desempenha um papel fundamental em sistemas microfluídicos, uma vez que as gotas filhas resultantes podem ser utilizadas para realizar análises em volumes reduzidos, facilitando a realização de réplicas paralelas e aumentando substancialmente a produtividade experimental. Dessa forma, cada gota atua como um microreator autocontido, possibilitando o manuseio preciso de reagentes e uma melhor reprodutibilidade dos ensaios (RAAD et al., 2021).

Duas classificações podem ser feitas em relação aos mecanismos pelos quais as gotas são divididas em microcanais. Em abordagens ativas, as gotas podem ser divididas por meio da aplicação de forças geradas por fontes externas, como eletrodos (LINK et al., 2006) e campos magnéticos (ABOUTALEBI et al., 2018). Como esses métodos dependem de fontes externas, os componentes adicionais necessários frequentemente aumentam tanto a complexidade quanto os custos associados à técnica.

Por outro lado, métodos passivos permitem a divisão das gotas por meio do projeto estrutural geométrico do microcanal. Esses métodos baseiam-se na obstrução parcial do escoamento da gota, de modo que a divisão ocorre devido às forças hidrodinâmicas geradas pela obstrução. As geometrias projetadas para promover a divisão são concebidas de tal forma que a interação entre a dinâmica intrínseca do escoamento e as características geométricas seja suficiente para induzir a divisão das gotas, sem a necessidade de um mecanismo externo, que poderia adicionar ainda mais complexidade ao sistema.

Aparelhagens experimentais, técnicas computacionais e simulações numéricas têm sido empregadas para investigar a dinâmica da divisão de gotas (AGNIHOTRI et al., 2025). Estudos foram conduzidos com o objetivo de investigar o mecanismo de divisão de gotas em microcanais simétricos, utilizando diferentes tipos de geometria. Link et al. (LINK et al., 2004) demonstraram duas formas de divisão de gotas: primeiro, por meio da introdução de uma bifurcação no microcanal principal e, posteriormente, pela inserção de um obstáculo de grande dimensão próximo à seção de teste do microcanal.

Tormos et al. (CLAUSELL-TORMOS; GRIFFITHS; MERTEN, 2010) empregaram bombas de seringa para extrair o fluido de maneira uniforme a partir de múltiplas saídas,

minimizando assim as diferenças de pressão entre os canais e reduzindo a divisão desigual. Leshansky et al. (LESHANSKY et al., 2012) realizaram uma análise teórica bidimensional para investigar a dinâmica das gotas durante a ruptura na presença de obstruções, identificando a fronteira entre regiões obstruídas e não obstruídas com base no princípio da conservação de massa. Adamson et al. (ADAMSON et al., 2006) observaram que, para obter gotas-filhas menores ou alcançar maior vazão, junções em T podem ser conectadas em série para dividir cada gota múltiplas vezes. No entanto, junções simétricas nem sempre produzem gotas-filhas de tamanhos iguais devido às forças resistivas decorrentes da tensão interfacial e ao escoamento quase periódico das gotas que entram nas junções em T.

No que se refere à divisão assimétrica de gotas, diversos estudos têm sido conduzidos. Wang et al. (WANG; LIU; PANG, 2018) investigaram experimental e teoricamente a ruptura de gotas em uma bifurcação assimétrica com dois ramos inclinados, analisando como parâmetros como a velocidade da gota e o comprimento inicial da gota influenciam as características da divisão. Seus resultados demonstraram que esses parâmetros afetam fortemente a razão de divisão, evidenciando o caráter interdependente do processo de ruptura entre a geometria da junção e as próprias gotas.

Hsieh et al. (HSIEH et al., 2009) investigaram a divisão de gotas em uma bifurcação em formato de Y, demonstrando que o grau de divisão assimétrica é influenciado pelo ângulo da bifurcação. Nie e Kennedy (NIE; KENNEDY, 2010) examinaram a divisão assimétrica de gotas-mãe de diferentes tamanhos por meio da variação das razões de vazão óleo/água, destacando o efeito das condições de escoamento sobre a distribuição resultante das gotas. Samie et al. (SAMIE; SALARI; SHAFII, 2013) propuseram junções em T assimétricas com ramos de comprimentos idênticos, porém com diferentes seções transversais, a fim de gerar microgotas de tamanhos desiguais. Além disso, desenvolveram equações preditivas para determinar tanto o ponto de ruptura da gota quanto as condições críticas para a ruptura em junções em T assimétricas.

Shen et al. (SHEN et al., 2017) projetaram duas microestruturas distintas para promover, respectivamente, a coalescência e a divisão de gotas. Utilizando experimentos de micro-velocimetria por imagem de partículas (*micro-PIV*), compararam quantitativamente a dinâmica do escoamento em diferentes microestruturas e observaram novos

fenômenos de escoamento de gotas não reportados em estudos anteriores. Seus resultados indicaram que bifurcações do tipo junção em Y promovem a divisão de gotas de forma mais eficiente do que obstáculos cilíndricos, e que os campos vetoriais de velocidade influenciam significativamente tanto a coalescência quanto a divisão das gotas.

À medida que as pesquisas avançaram, a divisão assimétrica de gotas passou a atrair atenção crescente, impulsionada pela demanda cada vez maior, em aplicações práticas, pela geração precisa e simultânea de gotas com diferentes tamanhos (BEDRAM; MOO-SAVI, 2011). Apesar dos esforços significativos para compreender a dinâmica da divisão de gotas em microcanais, apenas um número limitado de estudos tem se concentrado no processo de divisão em canais com diferentes gradientes de pressão, os quais dão origem a uma partição assimétrica do volume da gota (RAAD et al., 2021). O ajuste do gradiente de pressão por meio da utilização de canais de saída com diferentes comprimentos constitui uma das abordagens mais comuns para induzir assimetria na divisão de gotas.

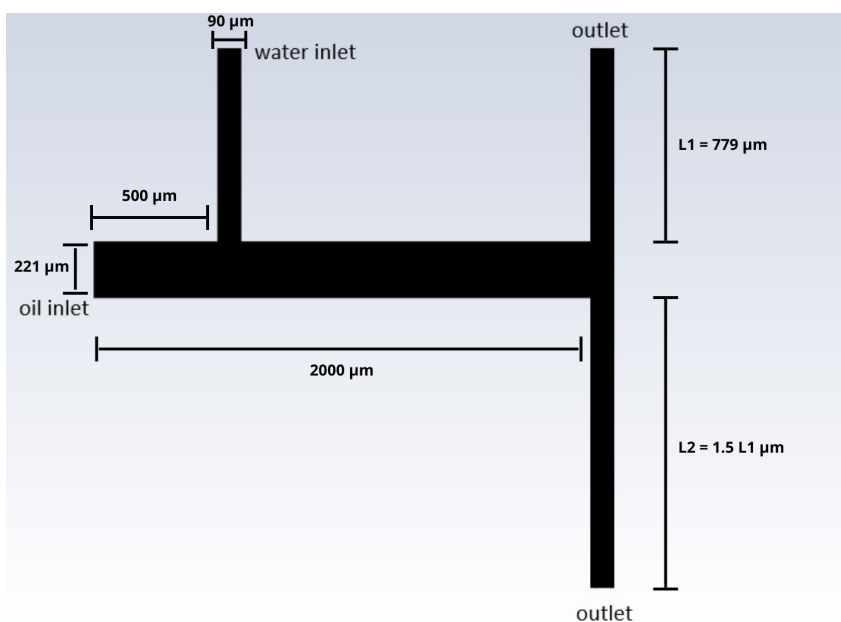
Nesta seção, busca-se analisar e compreender aspectos fundamentais da dinâmica de divisão de gotas em uma geometria de junção em T assimétrica, com ramos de diferentes dimensões, capaz de gerar um gradiente de pressão que influencia significativamente o processo de divisão. Especificamente, pretende-se caracterizar o processo por meio da análise de variáveis como velocidade e pressão no comportamento dinâmico do sistema.

4.3.1 Modelagem Geométrica

Buscamos, aqui, compreender os mecanismos de divisão de gotas em uma geometria assimétrica. Para esse propósito, empregou-se uma geometria assimétrica, caracterizada pela diferença nos comprimentos dos canais de saída, conforme ilustrado na Figura 47, de acordo com o modelo proposto por Raad et al. (RAAD et al., 2021).

De acordo com a literatura, tal assimetria induz um gradiente de pressão ao longo do canal de saída, levando a gota incidente a se dividir em gotas-filhas assimétricas (RAAD et al., 2021). Esse fenômeno ocorre porque, à medida que o comprimento de um dos canais aumenta, observa-se um aumento na magnitude do perfil de velocidade no canal oposto. Consequentemente, forma-se um vórtice na região da junção, o qual promove uma distribuição assimétrica do volume da gota durante a ruptura. Quando a gota se divide, a porção maior é direcionada para o canal mais estreito (onde a velocidade é maior),

Figura 47: Dimensões da geometria utilizada.



enquanto a porção menor é direcionada para o canal mais comprido (onde a velocidade é menor).

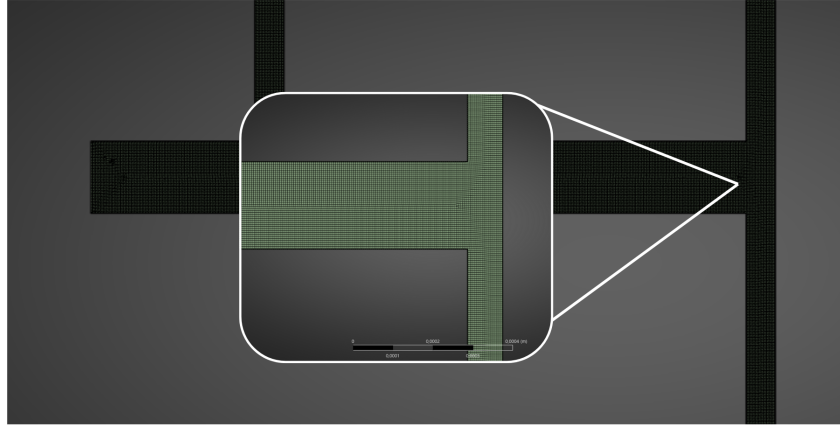
As explicações para o fenômeno observado serão confirmadas por meio dos resultados e das análises das simulações desenvolvidas neste estudo, com o objetivo de corroborar o entendimento fundamentado na literatura existente e, simultaneamente, proporcionar uma compreensão mais aprofundada das variáveis envolvidas no processo de divisão, particularmente sob condições de assimetria.

4.3.2 Malha Computacional

A geometria foi modelada utilizando o software *Ansys SpaceClaim*, seguida pela geração da malha com elementos quadrilaterais, conforme ilustrado na Figura 48.

A modelagem da geometria previamente apresentada teve como objetivo investigar a dinâmica do processo de divisão de gotas. A escolha dessa geometria justifica-se por sua capacidade de fornecer análises mais detalhadas de variáveis que desempenham papel fundamental no mecanismo de divisão, uma vez que o canal principal relativamente largo possibilita a investigação de efeitos como o acúmulo de pressão.

Figura 48: Malha quadrilateral aplicada à geometria.



4.3.3 Configuração da Simulação

As simulações foram inicializadas por meio da definição das interações entre as fases utilizando uma abordagem de modelagem de interface com anti-difusão. O coeficiente de tensão superficial foi considerado constante, assumindo o valor de $0,005 \text{ N/m}$. As condições de entrada foram prescritas de acordo com as velocidades iniciais dos fluidos, enquanto uma condição de contorno de não deslizamento (*no-slip*) foi imposta ao longo das paredes do canal. O ângulo de contato, representando a adesão entre as fases na parede, foi fixado em 135° . As velocidades das fases foram consideradas para as fases contínua e dispersa, respectivamente, como $U_c = 0,03 \text{ m/s}$ e $U_d = 0,005 \text{ m/s}$.

O método de solução empregou o esquema acoplado com frações volumétricas para o acoplamento pressão-velocidade. Para a discretização espacial, utilizou-se o método do gradiente Green-Gauss baseado na célula, e o esquema PRESTO! foi adotado para a interpolação da pressão. A equação da quantidade de movimento foi discretizada utilizando um esquema *second-order upwind*. Considerou-se que a convergência foi alcançada quando a precisão do passo de tempo atingiu 10^{-5} , garantindo exatidão suficiente para a construção do banco de dados.

Para todas as simulações, os fluidos foram caracterizados com base nas propriedades físicas resumidas na Tabela 4.

Tabela 4: Propriedades físicas dos fluidos utilizados nas simulações.

Fluido	Densidade (ρ , kg/m ³)	Viscosidade (η , mPa·s)
Água	1000	1,00
Óleo	750	1,34

4.3.4 Dinâmica da divisão assimétrica de gotas

O mecanismo primário que governa a divisão de gotas em microcanais está associado ao acúmulo de pressão a montante da gota, o qual fornece a força motriz para sua deformação e posterior ruptura. Em contrapartida, a tensão superficial do fluido atua como o principal fator resistente, opondo-se à ruptura e mantendo a integridade da gota até que a pressão motriz supere esse efeito estabilizador. colocar referência

À medida que a gota gerada no canal se aproxima da junção, onde encontra a bifurcação em dois ramos subsequentes, ocorre a obstrução do escoamento da fase contínua. Essa obstrução induz o acúmulo de pressão a montante da gota, elevando significativamente os níveis de pressão nessa região.

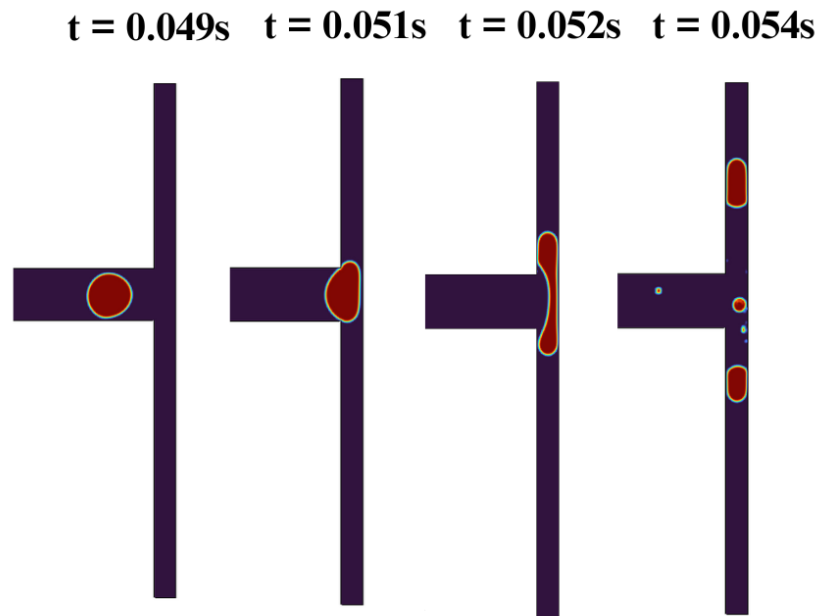
Esse processo pode ser observado na Figura 49.

Após sua formação, a gota é transportada pelo escoamento da fase contínua em direção à região de bifurcação. Ao se aproximar da junção, torna-se evidente um desequilíbrio em seu volume, com tendência de direcionamento para o ramo de menor comprimento. Com o aumento da pressão a montante, a gota sofre alongamento assimétrico até sua ruptura, produzindo duas gotas-filhas de tamanhos distintos. Consequentemente, a gota de maior volume escoar para o canal mais estreito, enquanto a menor é direcionada para o canal mais largo.

4.3.5 Efeito da pressão

Conforme descrito, a pressão desempenha papel fundamental no processo de ruptura. Assim, busca-se analisar seu comportamento e determinar suas magnitudes ao longo do processo de divisão. Para isso, foi utilizada uma linha horizontal central ao longo da bifurcação na região da junção da geometria, servindo como referência para a análise da

Figura 49: Processo de divisão de uma gota em um microcanal assimétrico. Inicialmente, a gota se aproxima da bifurcação e, ao atingir a junção, observa-se uma distribuição desigual de seu volume, culminando em sua ruptura assimétrica.



intensidade de pressão.

A Figura 50 apresenta o comportamento da pressão ao longo da linha central previamente definida no microcanal. Observa-se que a pressão antes e após a gota apresenta valores inferiores quando comparados à pressão no interior da mesma. Ademais, não se verifica acúmulo significativo de pressão antes que a gota preencha completamente a bifurcação.

A Figura 51 apresenta o perfil de pressão no momento em que a gota começa a adentrar a bifurcação. Observa-se aumento da pressão no interior da gota, embora ainda não se constate elevação significativa a montante.

Por fim, a Figura 52 ilustra o comportamento da pressão no instante em que a gota tende a se romper de forma assimétrica. Observa-se acentuado acúmulo de pressão a montante, o que resulta no cisalhamento da gota. Nesse cenário, a ruptura ocorre de maneira desigual devido à distribuição assimétrica de volume causada pelo gradiente de pressão entre canais de diferentes comprimentos.

Figura 50: Perfil de pressão ao longo da linha central durante a aproximação da gota à junção.

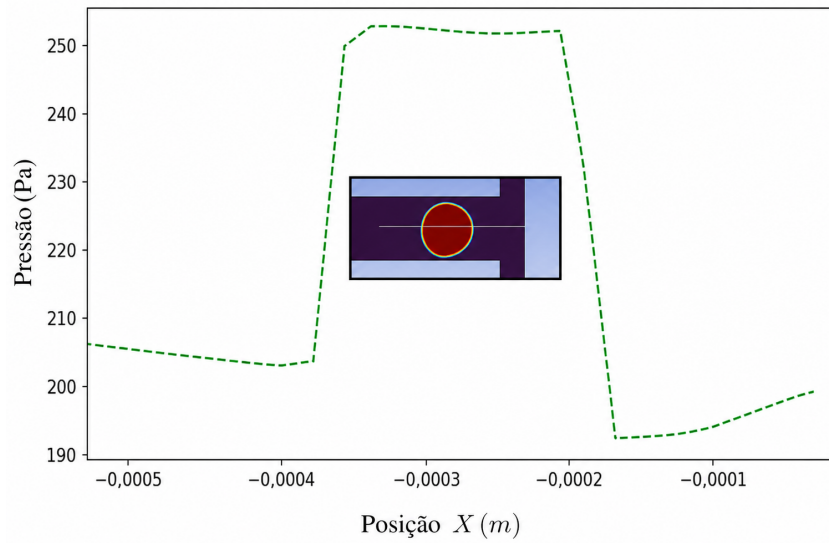
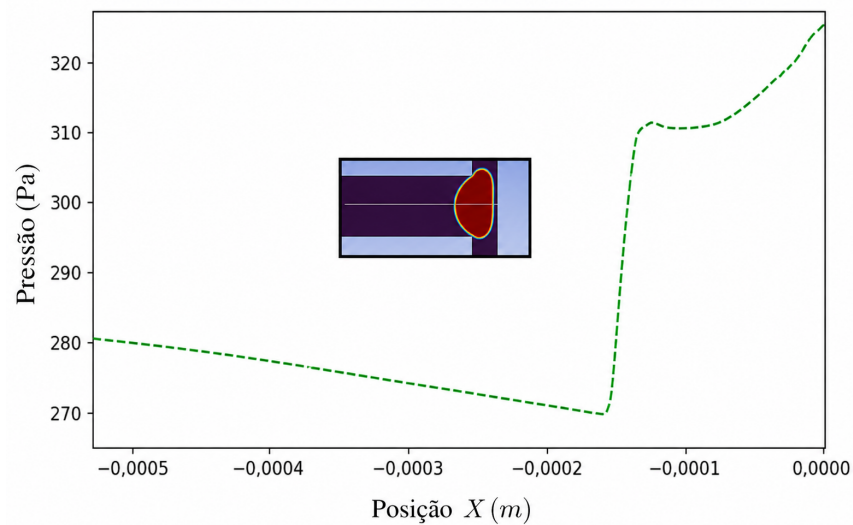
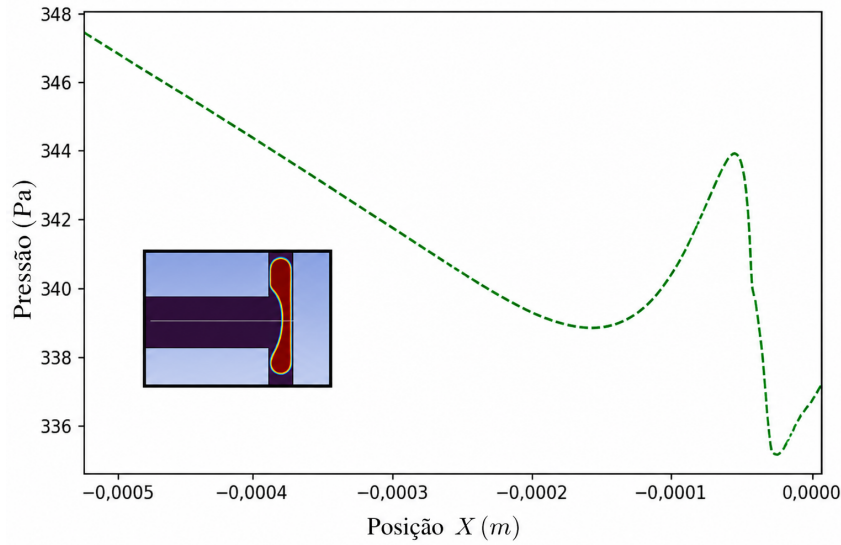


Figura 51: Perfil de pressão ao longo da linha central na região da junção.



Os tamanhos nos quais as gotas se rompem dependem do gradiente de pressão estabelecido nos canais de saída. A diferença nas dimensões dos canais promove a formação de um gradiente de pressão que atua como principal força de cisalhamento, promovendo a ruptura assimétrica da gota em volumes distintos, conforme registrado em $t = 0,054$ s na Figura 49.

Figura 52: Perfil de pressão ao longo da linha central no momento da ruptura assimétrica da gota.



4.3.6 Distribuição da velocidade

Uma compreensão mais aprofundada do processo de divisão pode ser obtida por meio da análise do perfil e da distribuição de velocidades no canal modelado. Para esse propósito, os contornos de velocidade foram registrados em diferentes instantes de tempo (Figura 53), correspondentes às etapas do processo de ruptura previamente apresentadas (Figura 49). Conforme esperado, observam-se maiores valores de velocidade no canal superior, o qual possui menor comprimento e, conseqüentemente, apresenta maior vazão.

A diferença nas intensidades de velocidade entre os dois canais de saída pode ser melhor evidenciada por meio da análise do campo vetorial de velocidades, conforme mostrado na Figura 54. O campo de velocidades foi registrado antes da entrada da gota na junção dos canais, no instante inicial de sua formação.

Observa-se que, até a junção principal, o campo de velocidades apresenta comportamento aproximadamente uniforme, tanto em magnitude quanto em direção. A partir da bifurcação, entretanto, verifica-se diferença significativa no perfil de velocidades entre os dois ramos. O ramo superior apresenta valores consideravelmente mais elevados, enquanto o ramo inferior exibe velocidades menores.

Como os comprimentos dos ramos são idênticas, diferindo apenas em seus comprimentos, essa diferença pode ser estendida às vazões, sendo a vazão no ramo superior maior que no ramo inferior.

Figura 53: Contornos de velocidade em três diferentes estágios do processo de divisão da gota.

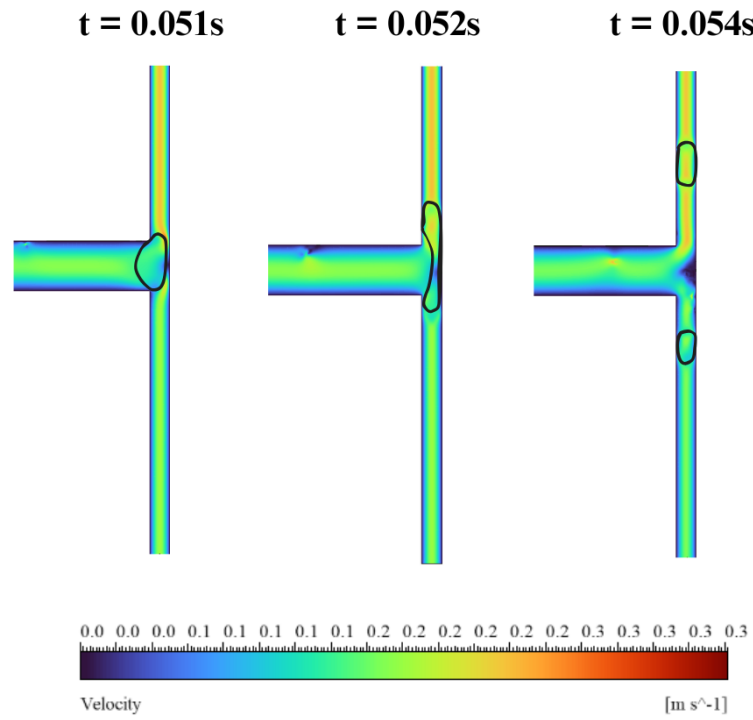
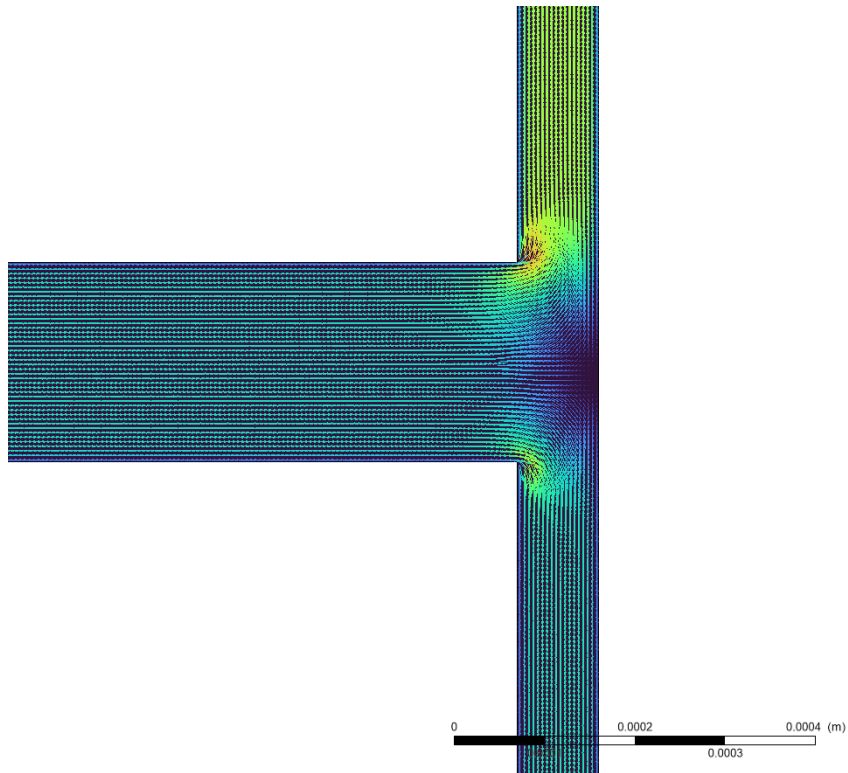


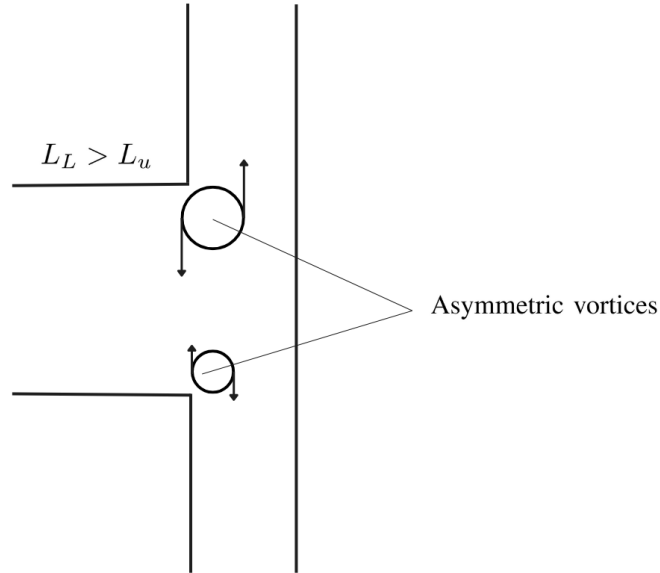
Figura 54: Campo vetorial de velocidades na região da junção dos ramos.



A análise do campo vetorial também permite identificar a formação de vórtices de

tamanhos distintos nos cantos da junção da geometria. Visualmente, esses vórtices podem ser representados conforme ilustrado na Figura 55.

Figura 55: Vórtices de tamanhos distintos gerados pela diferença nos comprimentos dos canais de saída. L_L representa o ramo inferior e L_u o ramo superior.



Com base na análise do gradiente de pressão discutida anteriormente, a diferença nos valores de velocidade pode ser justificada por meio da relação de Darcy–Weisbach, que estabelece a relação entre a perda de carga e o comprimento do canal de escoamento (CHANSON, 2004):

$$\begin{cases} \Delta P_u = P - P_u = \frac{128}{\pi} \cdot \frac{\mu L_u Q_u}{D_H^4} \\ \Delta P_L = P - P_L = \frac{128}{\pi} \cdot \frac{\mu L_L Q_L}{D_H^4} \end{cases} \quad (77)$$

onde ΔP_u e ΔP_L representam as diferenças de pressão nos ramos superior e inferior, respectivamente; Q_u e Q_L são as vazões volumétricas em cada ramo; μ é a viscosidade dinâmica do fluido; e D_H corresponde ao diâmetro hidráulico do canal.

Considerando que as pressões nas saídas de ambos os ramos são iguais, obtém-se a seguinte relação:

$$\frac{Q_u}{Q_L} = \frac{L_L}{L_u} \quad (78)$$

Evidencia-se, portanto, que, à medida que a razão entre os comprimentos dos canais de saída aumenta, a vazão no ramo superior torna-se proporcionalmente maior do que no ramo inferior.

Quando a razão de comprimentos é superior à unidade, a maior parte da gota original tende a ser direcionada ao ramo superior, uma vez que este apresenta maior velocidade média de escoamento. À medida que essa razão aumenta, essa predominância torna-se ainda mais acentuada. Como consequência, a gota sofre ruptura assimétrica: a gota-filha de maior volume escoar pelo ramo superior, enquanto a menor é conduzida pelo ramo inferior.

Para uma visualização mais clara das características do escoamento nessas condições, os valores de velocidade foram registrados ao longo do eixo y , tanto na seção superior quanto na seção inferior do canal de saída. Essa análise foi realizada em três estágios distintos do processo de divisão da gota.

As três figuras a seguir apresentam o comportamento da velocidade ao longo do eixo y na região superior do canal de saída. Inicialmente, conforme pode ser observado no gráfico (Figura 56), a velocidade apresenta aumento de intensidade à medida que a linha de medição atravessa as regiões ocupadas pela fase dispersa. Após pequena variação local, a velocidade continua a aumentar até atingir um valor máximo, correspondente à maior intensidade de escoamento no interior do canal.

No segundo estágio (Figura 57), quando a gota começa a se expandir de forma assimétrica, observa-se uma variação mais pronunciada da velocidade na região correspondente à fase dispersa. Esse comportamento pode ser associado à redução da velocidade da gota em comparação ao instante inicial na junção, quando ainda estava em processo de redistribuição volumétrica.

Ao atravessar completamente a região ocupada pela fase dispersa, verifica-se que a velocidade volta a crescer até atingir seu valor máximo característico no canal de saída, correspondente à maior intensidade do escoamento da fase contínua.

Por fim, no terceiro estágio (Figura 58), observa-se que a gota readquire parte de sua velocidade à medida que se desloca ao longo do ramo superior. Ainda assim, permanece uma variação na intensidade da velocidade quando comparada à fase contínua no mesmo

Figura 56: Perfil de velocidade no primeiro estágio do processo de divisão para a região superior do canal de saída.

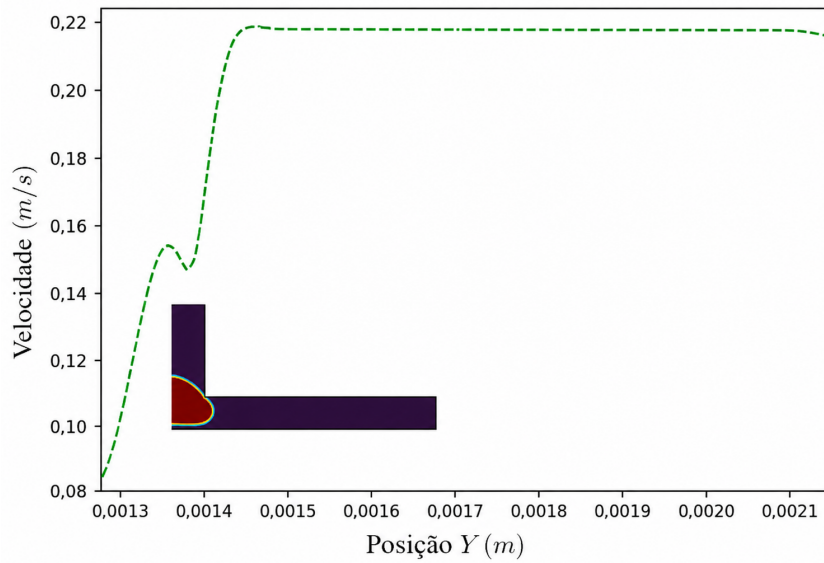
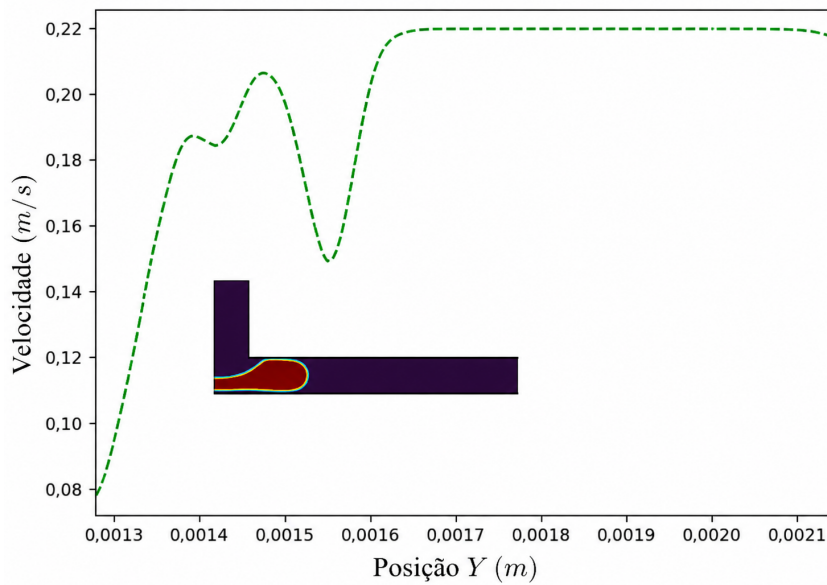


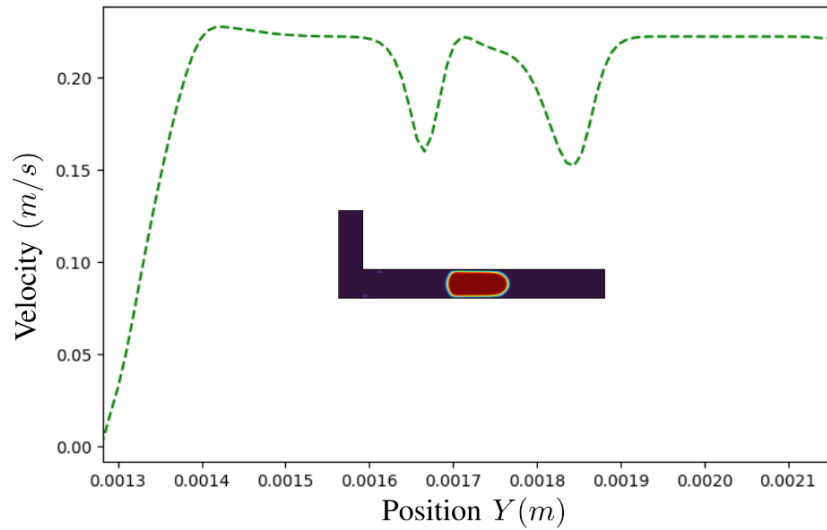
Figura 57: Perfil de velocidade no segundo estágio do processo de divisão para a região superior do canal de saída.



canal, refletindo a diferença de propriedades físicas entre as fases e os efeitos interfaciais presentes no escoamento bifásico.

É evidente a tendência de aumento da velocidade ao longo de todo o processo de escoamento. Essa tendência de crescimento pode ser registrada e confirmada por meio da análise dos contornos de velocidade e dos dados numéricos, particularmente pelo aumento progressivo dos valores máximos registrados ($V_{\max}$).

Figura 58: Perfil de velocidade no terceiro estágio do processo de divisão para a região superior do canal de saída.



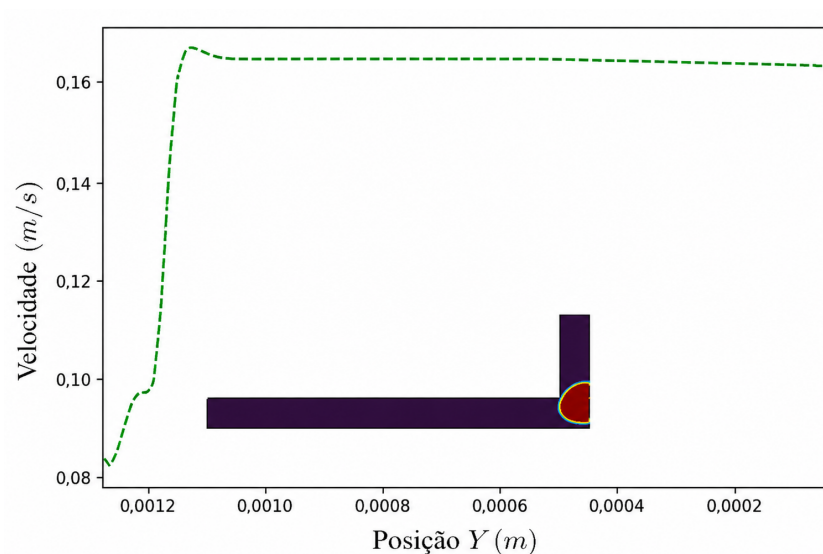
As variações características de velocidade são observadas de forma consistente sempre que a linha de medição atravessa a transição entre a fase dispersa (gota) e a fase contínua (fluido carreador). Essas variações localizadas, tipicamente manifestadas como picos acentuados e regiões de platô, devem-se fundamentalmente ao efeito de constrição hidrodinâmica, no qual o fluido contínuo é forçado a escoar por uma fina camada de lubrificação entre a gota e a parede do canal, resultando em aceleração localizada máxima (BRETHERTON, 1961).

Além disso, à medida que a gota sofre a divisão e sua porção maior adentra o canal superior, registra-se um aumento significativo da velocidade global da fase dispersa. Embora as variações características de velocidade persistam durante o processo de divisão, elas passam a ocorrer em níveis mais elevados de velocidade de base.

As três figuras seguintes apresentam o comportamento da velocidade ao longo do eixo y na região inferior do canal de saída. Inicialmente, pode-se observar (Figura 59) o mesmo padrão verificado no primeiro estágio previamente analisado para o canal superior. Entretanto, nesse primeiro estágio do canal inferior, a velocidade máxima registrada é significativamente menor. Isso se deve à diferença nos comprimentos dos canais, que altera a vazão do escoamento.

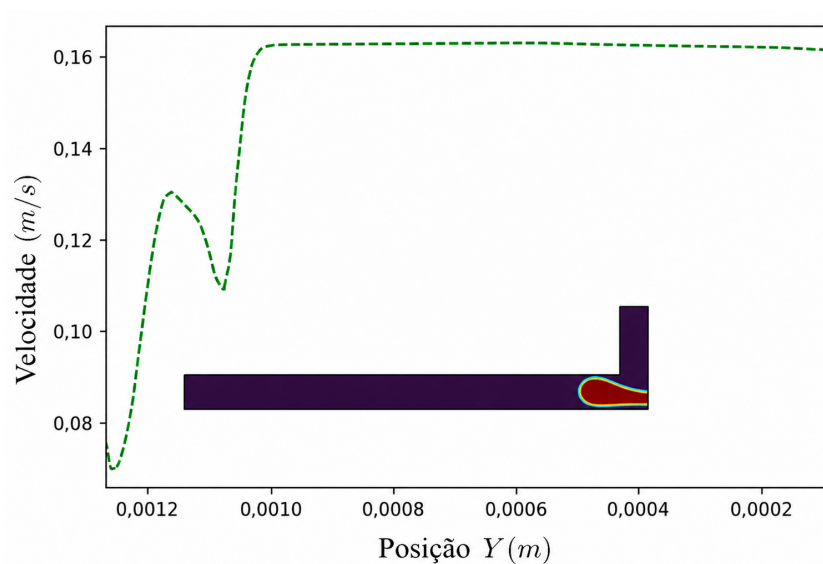
No estágio seguinte (Figura 60), de forma semelhante ao segundo estágio observado para o canal superior, a distribuição de velocidade sofre variações ao atravessar a gota,

Figura 59: Perfil de velocidade no primeiro estágio do processo de divisão para a região inferior do canal de saída.



porém com intensidades menores.

Figura 60: Perfil de velocidade no segundo estágio do processo de divisão para a região inferior do canal de saída.

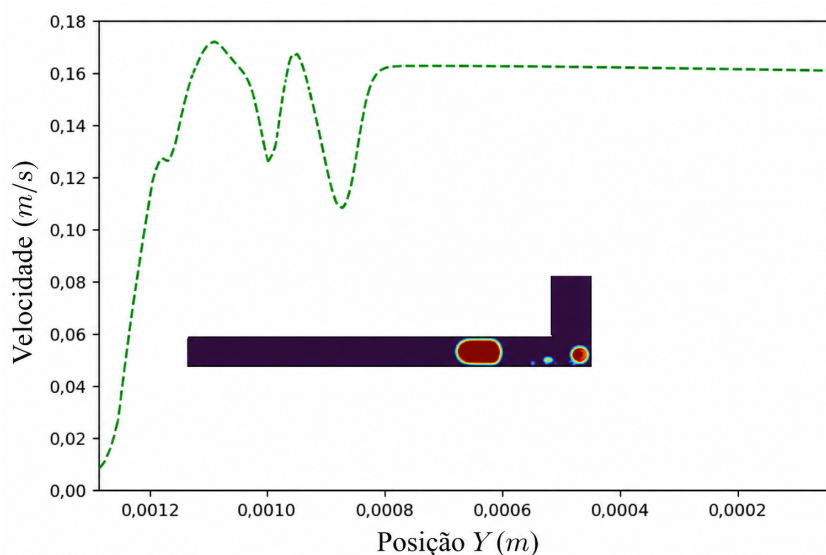


Por fim, no último estágio registrado para o canal inferior, observam-se variações de velocidade à medida que a gota atravessa a seção de medição, particularmente em razão da menor porção de fluido que se desprende, conforme mostrado na Figura 61.

Quando comparado ao último estágio registrado no canal superior, verificam-se variações menos significativas e menos espaçadas, até o ponto em que a velocidade atinge

seu valor máximo, o qual novamente é inferior ao valor alcançado no canal superior.

Figura 61: Perfil de velocidade no terceiro estágio do processo de divisão para a região inferior do canal de saída.



O mesmo padrão também é observado no canal inferior, no qual ocorre aumento da velocidade, e suas variações manifestam-se predominantemente na região ocupada pela gota. Uma diferença notável pode ser identificada entre os estágios dos canais superior e inferior, uma vez que a velocidade máxima registrada no canal inferior é menor do que a registrada no canal superior. Essa observação corrobora a análise anteriormente apresentada e, em certa medida, explica a desproporcionalidade e a assimetria observadas na divisão da gota.

Considerações

Em síntese, os resultados demonstraram a influência exercida pela assimetria geométrica no processo de divisão de gotas em um microcanal, especialmente por meio da interação entre os campos de pressão e velocidade. O aumento localizado da pressão na região da bifurcação, associado à diferença de resistência hidráulica entre os ramos de saída, é capaz de promover uma distribuição desigual do escoamento, favorecendo o direcionamento do fluido para o canal de menor comprimento. Como consequência, observa-se a formação de gotas-filhas com volumes desuniformes, o que caracteriza um rompimento assimétrico. Além disso, a análise dos campos de velocidades e das estruturas de vórtices evidenciou a influência das diferenças hidrodinâmicas nas direções do processo de separação. Dessa forma, o estudo pôde reforçar a importância do controle geométrico em dispositivos mi-

crofluídicos.

5 Conclusões

Os resultados e discussões apresentados ao longo deste trabalho evidenciam a importância da Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) como ferramenta fundamental para a análise e compreensão de sistemas microfluídicos. As perspectivas abordadas acerca dos sistemas estudados contribuem significativamente para o avanço de técnicas e para o aprofundamento do entendimento da aplicação de CFD em microfluídica, especialmente em sistemas de formação de gotas, os quais desempenham papel essencial no desenvolvimento de microdispositivos com aplicações biotecnológicas.

Nesse contexto, o trabalho explorou diferentes vertentes da microfluídica, promovendo discussões e perspectivas que reforçam o potencial das técnicas computacionais como importantes aliadas no processo de desenvolvimento, análise e otimização de novas tecnologias.

Inicialmente, objetivamos entender como parâmetros físicos, tais como a razão de velocidade dos fluidos e o número de capilaridade, afetam a formação e geração de gotas em microcanais. Para tal análise, propomos a validação de um método de CFD para o estudo de produção de gotas em microcanais. A adequabilidade do método *Volume of Fluid* foi validada à medida em que sua aplicação pôde fornecer informações relevantes e consistentes de sistemas microfluídicos, respaldando-se no que já fora consolidado pela literatura. A partir disso, identificamos uma relação inversa entre a razão de velocidades (U_c/U_d) e o diâmetro das gotas. Adicionalmente, o método empregado provou ser eficaz na identificação de uma região de transição entre os regimes de formação, caracterizada pela instabilidade nos diâmetros das gotas.

Em um segundo momento, objetivamos compreender como diferentes aspectos de modelagem geométrica de microcanais alteram e influenciam o processo e os mecanismos de formação de gotas em microcanais. Para isso, modelamos quatro tipos distintos de geometrias de tipo *flow-focusing* e, então, analisamos seu comportamento sob as condições propostas. As simulações puderam corroborar a influência de parâmetros geométricos sobre a forma e frequência de produção de gotas, tornando claro que, à medida em que o ângulo entre o canal principal e as junções é diminuído, o processo de formação de gotas torna-se propício à maiores condições de instabilidade, exibindo comportamentos

de regimes de escoamento diferentes.

Por fim, como terceira frente deste trabalho, objetivamos investigar a influência da assimetria geométrica de microcanal sobre o processo de divisão de gotas em regimes microfluídicos. A investigação demonstrou que o desequilíbrio na resistência hidráulica e a formação de vórtices locais direcionam o fluxo preferencialmente para o canal menor, gerando gotas-filhas heterogêneas, reiterando que a geometria do canal é um parâmetro crítico para o manejo preciso de fluidos.

Espera-se que as contribuições trazidas pelos estudos apresentados, bem como pelas perspectivas de processos microfluídicos sob diferentes condições físicas e geométricas, sejam peças adicionais na construção e desenvolvimento de áreas cobertas pela microfluídica, especialmente, como apresentado como uma das principais motivações deste trabalho, no desenvolvimento de microdispositivos capazes de alavancar o processo de construção de tecnologias favoráveis ao progresso e desenvolvimento humano-científico.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABOUTALEBI, M. et al. Numerical investigation on splitting of ferrofluid microdroplets in t-junctions using an asymmetric magnetic field with proposed correlation. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 447, p. 139–149, 2018.

ADAMSON, D. N. et al. Production of arrays of chemically distinct nanolitre plugs via repeated splitting in microfluidic devices. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 6, n. 9, p. 1178–1186, 2006.

AGNIHOTRI, S. N. et al. Droplet splitting in microfluidics: A review. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 37, n. 5, 2025.

AHMED, F. et al. Design and validation of microfluidic parameters of a microfluidic chip using fluid dynamics. *AIP Advances*, AIP Publishing, v. 11, n. 7, 2021.

AULISA, E. et al. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional cartesian geometry. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 225, n. 2, p. 2301–2319, 2007.

BAROUD, C. N.; GALLAIRE, F.; DANGLA, R. Dynamics of microfluidic droplets. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 10, n. 16, p. 2032–2045, 2010.

BASHIR, S.; REES, J. M.; ZIMMERMAN, W. B. Simulations of microfluidic droplet formation using the two-phase level set method. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 66, n. 20, p. 4733–4741, 2011.

BATTAT, S.; WEITZ, D. A.; WHITESIDES, G. M. An outlook on microfluidics: the promise and the challenge. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 22, n. 3, p. 530–536, 2022.

BEDRAM, A.; MOOSAVI, A. Droplet breakup in an asymmetric microfluidic t junction. *The European Physical Journal E*, Springer, v. 34, n. 8, p. 78, 2011.

BEEBE, D. J.; MENSING, G. A.; WALKER, G. M. Physics and applications of microfluidics in biology. *Annual review of biomedical engineering*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 4, n. 1, p. 261–286, 2002.

BHATIA, S. N.; INGBER, D. E. Microfluidic organs-on-chips. *Nature biotechnology*, Nature Publishing Group US New York, v. 32, n. 8, p. 760–772, 2014.

BJÖRNMALM, M.; YAN, Y.; CARUSO, F. Engineering and evaluating drug delivery particles in microfluidic devices. *Journal of Controlled Release*, Elsevier, v. 190, p. 139–149, 2014.

BNÁ, S. et al. Vofi—a library to initialize the volume fraction scalar field. *Computer Physics Communications*, Elsevier, v. 200, p. 291–299, 2016.

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.

BROUZES, E. et al. Droplet microfluidic technology for single-cell high-throughput screening. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Academy of Sciences, v. 106, n. 34, p. 14195–14200, 2009.

CASTILLO-LEÓN, J. Microfluidics and lab-on-a-chip devices: history and challenges. In: *Lab-on-a-Chip Devices and Micro-Total Analysis Systems: A Practical Guide*. [S.l.]: Springer, 2014. p. 1–15.

CHANSON, H. *Hydraulics of open channel flow*. [S.l.]: Elsevier, 2004.

CHEKIFI, T. Computational study of droplet breakup in a trygvaapped channel configuration using volume of fluid method. *Flow Measurement and Instrgyvaumentation*, Elsevier, v. 59, p. 118–125, 2018.

CHEN, C.-Y. et al. Ion channel electrophysiology via integrated planar patch-clamp chip with on-demand drug exchange. *Biotechnology and bioengineering*, Wiley Online Library, v. 108, n. 6, p. 1395–1403, 2011.

CHONG, Z. Z. et al. Active droplet generation in microfluidics. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 16, n. 1, p. 35–58, 2016.

CHRISTOPHER, G. F.; ANNA, S. L. Microfluidic methods for generating continuous droplet streams. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 40, n. 19, p. R319, 2007.

- CLAUSELL-TORMOS, J.; GRIFFITHS, A. D.; MERTEN, C. A. An automated two-phase microfluidic system for kinetic analyses and the screening of compound libraries. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 10, n. 10, p. 1302–1307, 2010.
- CLAUSELL-TORMOS, J. et al. Droplet-based microfluidic platforms for the encapsulation and screening of mammalian cells and multicellular organisms. *Chemistry & biology*, Elsevier, v. 15, n. 5, p. 427–437, 2008.
- COMMINAL, R.; SPANGENBERG, J.; HATTEL, J. H. Cellwise conservative unsplit advection for the volume of fluid method. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 283, p. 582–608, 2015.
- CRAMER, C.; FISCHER, P.; WINDHAB, E. J. Drop formation in a co-flowing ambient fluid. *Chemical engineering science*, Elsevier, v. 59, n. 15, p. 3045–3058, 2004.
- DHANALIWALA, A. H. et al. Liquid flooded flow-focusing microfluidic device for in situ generation of monodisperse microbubbles. *Microfluidics and nanofluidics*, Springer, v. 14, p. 457–467, 2013.
- DITTRICH, P. S.; MANZ, A. Lab-on-a-chip: microfluidics in drug discovery. *Nature reviews Drug discovery*, Nature Publishing Group UK London, v. 5, n. 3, p. 210–218, 2006.
- DOLLET, B. et al. Role of the channel geometry on the bubble pinch-off in flow-focusing devices. *Physical review letters*, APS, v. 100, n. 3, p. 034504, 2008.
- EGGERS, J.; LISTER, J. R.; STONE, H. A. Coalescence of liquid drops. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 401, p. 293–310, 1999.
- ERICKSON, D. Towards numerical prototyping of labs-on-chip: modeling for integrated microfluidic devices. *Microfluidics and Nanofluidics*, Springer, v. 1, n. 4, p. 301–318, 2005.
- EVANS, M.; SWARTZ, T. *Approximating integrals via Monte Carlo and deterministic methods*. [S.l.]: OUP Oxford, 2000.
- EYMARD, R.; GALLOUËT, T.; HERBIN, R. Finite volume methods. *Handbook of numerical analysis*, Elsevier, v. 7, p. 713–1018, 2000.

- FLUENT, A. et al. Ansys fluent theory guide. *Ansys Inc., USA*, v. 15317, p. 724–746, 2011.
- FRANCESKO, A.; CARDOSO, V. F.; LANCEROS-MÉNDEZ, S. Lab-on-a-chip technology and microfluidics. In: *Microfluidics for Pharmaceutical Applications*. [S.l.]: Elsevier, 2019. p. 3–36.
- FUSTER, D. et al. Numerical simulation of droplets, bubbles and waves: state of the art. *Fluid dynamics research*, IOP Publishing, v. 41, n. 6, p. 065001, 2009.
- GAÑÁN-CALVO, A. et al. Building functional materials for health care and pharmacy from microfluidic principles and flow focusing. *Advanced drug delivery reviews*, Elsevier, v. 65, n. 11-12, p. 1447–1469, 2013.
- GANÁN-CALVO, A. M. Electro-flow focusing: the high-conductivity low-viscosity limit. *Physical review letters*, APS, v. 98, n. 13, p. 134503, 2007.
- GARIMELLA, R. V.; SHASHKOV, M. J.; KNUPP, P. M. Triangular and quadrilateral surface mesh quality optimization using local parametrization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 193, n. 9-11, p. 913–928, 2004.
- GARSTECKI, P. et al. Formation of droplets and bubbles in a microfluidic t-junction—scaling and mechanism of break-up. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 6, n. 3, p. 437–446, 2006.
- GUO, F. et al. Droplet electric separator microfluidic device for cell sorting. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 96, n. 19, 2010.
- GUPTA, A.; KUMAR, R. Flow regime transition at high capillary numbers in a microfluidic t-junction: Viscosity contrast and geometry effect. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 22, n. 12, 2010.
- HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 39, n. 1, p. 201–225, 1981.
- HOPMAN, J. A. et al. On a conservative solution to checkerboarding: examining the causes of non-physical pressure modes. In: EUROPEAN RESEARCH COMMUNITY ON FLOW, TURBULENCE, AND COMBUSTION (ERCOFTAC). *14th International*

ERCOTAC Symposium on Engineering, Turbulence, Modelling and Measurements: 6th-8th September 2023, Barcelona, Spain: proceedings. [S.l.], 2023.

HSIEH, A. T.-H. et al. Nonviral gene vector formation in monodispersed picolitre incubator for consistent gene delivery. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 9, n. 18, p. 2638–2643, 2009.

IWANAGA, S. et al. Facile fabrication of uniform size-controlled microparticles and potentiality for tandem drug delivery system of micro/nanoparticles. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, Elsevier, v. 109, p. 301–306, 2013.

KALER, K. V.; PRAKASH, R. Droplet microfluidics for chip-based diagnostics. *Sensors*, MDPI, v. 14, n. 12, p. 23283–23306, 2014.

KAMEI, K.-i. et al. 3d printing of soft lithography mold for rapid production of polydimethylsiloxane-based microfluidic devices for cell stimulation with concentration gradients. *Biomedical microdevices*, Springer, v. 17, p. 1–8, 2015.

KANG, L. et al. Microfluidics for drug discovery and development: from target selection to product lifecycle management. *Drug discovery today*, Elsevier, v. 13, n. 1-2, p. 1–13, 2008.

KHAN, I. et al. Two-phase bubbly flow simulation using cfd method: A review of models for interfacial forces. *Progress in Nuclear Energy*, Elsevier, v. 125, p. 103360, 2020.

KIM, P. et al. Soft lithography for microfluidics: a review. *Biochip Journal*, = The Korean BioChip Society, 2008.

KOVALCHUK, N. M. et al. Drop formation in microfluidic cross-junction: jetting to dripping to jetting transition. *Microfluidics and nanofluidics*, Springer, v. 23, p. 1–14, 2019.

LAI, D. et al. Rounded multi-level microchannels with orifices made in one exposure enable aqueous two-phase system droplet microfluidics. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 11, n. 20, p. 3551–3554, 2011.

LAI, K. Y.-T.; YANG, Y.-T.; LEE, C.-Y. An intelligent digital microfluidic processor for biomedical detection. *Journal of Signal Processing Systems*, Springer, v. 78, p. 85–93, 2015.

- LEE, J. B.; SUNG, J. H. Organ-on-a-chip technology and microfluidic whole-body models for pharmacokinetic drug toxicity screening. *Biotechnology journal*, Wiley Online Library, v. 8, n. 11, p. 1258–1266, 2013.
- LESHANSKY, A. et al. Obstructed breakup of slender drops in a microfluidic T junction. *Physical review letters*, APS, v. 108, n. 26, p. 264502, 2012.
- LIM, Y. C.; KOUZANI, A. Z.; DUAN, W. Lab-on-a-chip: a component view. *Microsystem Technologies*, Springer, v. 16, p. 1995–2015, 2010.
- LINK, D. et al. Geometrically mediated breakup of drops in microfluidic devices. *Physical review letters*, APS, v. 92, n. 5, p. 054503, 2004.
- LINK, D. R. et al. Electric control of droplets in microfluidic devices. *ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION IN ENGLISH*-, John Wiley & Sons, Ltd, v. 45, n. 16, p. 2556, 2006.
- LIU, J.; NGUYEN, N. T. Numerical simulation of droplet-based microfluidics-a review. *Micro and Nanosystems*, Bentham Science Publishers direct, v. 2, n. 3, p. 193–201, 2010.
- LÓPEZ, J. et al. A volume of fluid method based on multidimensional advection and spline interface reconstruction. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 195, n. 2, p. 718–742, 2004.
- MAHALIK, N. P. *Micromanufacturing and nanotechnology*. [S.l.]: Springer, 2006.
- MAHDAVI, M.; SHARIFPUR, M.; MEYER, J. Cfd modelling of heat transfer and pressure drops for nanofluids through vertical tubes in laminar flow by lagrangian and eulerian approaches. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 88, p. 803–813, 2015.
- MAJUMDAR, S. Role of underrelaxation in momentum interpolation for calculation of flow with nonstaggered grids. *Numerical heat transfer*, Taylor & Francis, v. 13, n. 1, p. 125–132, 1988.
- MAO, D.-k. Towards front-tracking based on conservation in two space dimensions ii, tracking discontinuities in capturing fashion. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 226, n. 2, p. 1550–1588, 2007.

- MARK, D. et al. Microfluidic lab-on-a-chip platforms: requirements, characteristics and applications. *Microfluidics based microsystems: fundamentals and applications*, Springer, p. 305–376, 2010.
- MEHRAJI, S.; SAADATMAND, M. Flow regime mapping for a two-phase system of aqueous alginate and water droplets in t-junction geometry. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 33, n. 7, 2021.
- MENECH, M. D. et al. Transition from squeezing to dripping in a microfluidic t-shaped junction. *journal of fluid mechanics*, Cambridge University Press, v. 595, p. 141–161, 2008.
- MIRJALILI, S.; JAIN, S. S.; DODD, M. Interface-capturing methods for two-phase flows: An overview and recent developments. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, Center for Turbulence Research,, v. 2017, n. 117-135, p. 13, 2017.
- MOHAN, A.; TOMAR, G. Volume of fluid method: a brief review. *Journal of the Indian Institute of Science*, Springer, v. 104, n. 1, p. 229–248, 2024.
- MONTANERO, J. M.; GAÑÁN-CALVO, A. M. Dripping, jetting and tip streaming. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 83, n. 9, p. 097001, 2020.
- MOON, B.-U. et al. Water-in-water droplets by passive microfluidic flow focusing. *Analytical chemistry*, ACS Publications, v. 88, n. 7, p. 3982–3989, 2016.
- MUZAFERIJA, S. A two-fluid navier-stokes solver to simulate water entry. In: NATIONAL ACADEMY PRESS. *Proceedings of 22nd symposium on naval architecture, 1999*. [S.l.], 1999. p. 638–651.
- NEETHIRAJAN, S. et al. Microfluidics for food, agriculture and biosystems industries. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 11, n. 9, p. 1574–1586, 2011.
- NEUŽIL, P. et al. Revisiting lab-on-a-chip technology for drug discovery. *Nature reviews Drug discovery*, Nature Publishing Group UK London, v. 11, n. 8, p. 620–632, 2012.
- NIE, J.; KENNEDY, R. T. Sampling from nanoliter plugs via asymmetrical splitting of segmented flow. *Analytical chemistry*, ACS Publications, v. 82, n. 18, p. 7852–7856, 2010.

NOH, W. F.; WOODWARD, P. Slic (simple line interface calculation). In: SPRINGER. *Proceedings of the fifth international conference on numerical methods in fluid dynamics June 28–July 2, 1976 Twente University, Enschede*. [S.l.], 2005. p. 330–340.

NUNES, J. et al. Dripping and jetting in microfluidic multiphase flows applied to particle and fibre synthesis. *Journal of physics D: Applied physics*, IOP Publishing, v. 46, n. 11, p. 114002, 2013.

OWKES, M.; DESJARDINS, O. A computational framework for conservative, three-dimensional, unsplit, geometric transport with application to the volume-of-fluid (vof) method. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 270, p. 587–612, 2014.

PATANKAR, S. *Numerical heat transfer and fluid flow*. [S.l.]: CRC press, 2018.

PUCKETT, E. G. et al. A high-order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 130, n. 2, p. 269–282, 1997.

RAAD, M. et al. A numerical study of droplet splitting in branched t-shaped microchannel using the two-phase level-set method. *Advances in Mechanical Engineering*, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 13, n. 11, p. 16878140211045487, 2021.

RADEMEYER, P. et al. Microfluidic system for high throughput characterisation of echogenic particles. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 15, n. 2, p. 417–428, 2015.

RENARDY, Y.; RENARDY, M. Prost: a parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 183, n. 2, p. 400–421, 2002.

RIDER, W. J.; KOTHE, D. B. Reconstructing volume tracking. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 141, n. 2, p. 112–152, 1998.

ROUMPEA, E. et al. Experimental studies on droplet formation in a flow-focusing microchannel in the presence of surfactants. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 195, p. 507–518, 2019.

SAMIE, M.; SALARI, A.; SHAFII, M. B. Breakup of microdroplets in asymmetric T-junctions. *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, APS, v. 87, n. 5, p. 053003, 2013.

SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 164, n. 1, p. 228–237, 2000.

SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Interface reconstruction with least-square fit and split eulerian–lagrangian advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 41, n. 3, p. 251–274, 2003.

SCHORK, N. J. Personalized medicine: time for one-person trials. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 520, n. 7549, p. 609–611, 2015.

SEEMANN, R. et al. Droplet based microfluidics. *Reports on progress in physics*, IOP Publishing, v. 75, n. 1, p. 016601, 2011.

SHEERAN, P. S. et al. Contrast-enhanced ultrasound imaging and in vivo circulatory kinetics with low-boiling-point nanoscale phase-change perfluorocarbon agents. *Ultrasound in medicine & biology*, Elsevier, v. 41, n. 3, p. 814–831, 2015.

SHEN, F. et al. Study of flow behaviors of droplet merging and splitting in microchannels using micro-piv measurement. *Microfluidics and nanofluidics*, Springer, v. 21, n. 4, p. 66, 2017.

SLAVOV, V.; DIMOVA, S. Phase-field versus level set method for 2d dendritic growth. In: SPRINGER. *Numerical Methods and Applications: 6th International Conference, NMA 2006, Borovets, Bulgaria, August 20-24, 2006. Revised Papers 6*. [S.l.], 2007. p. 717–725.

SONTTI, S. G.; ATTA, A. Cfd analysis of microfluidic droplet formation in non-newtonian liquid. *Chemical Engineering Journal*, Elsevier, v. 330, p. 245–261, 2017.

STEIJN, V. van; KLEIJN, C. R.; KREUTZER, M. T. Flows around confined bubbles and their importance in triggering pinch-off. *Physical review letters*, APS, v. 103, n. 21, p. 214501, 2009.

- SUSSMAN, M.; PUCKETT, E. G. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 162, n. 2, p. 301–337, 2000.
- TALY, V.; KELLY, B. T.; GRIFFITHS, A. D. Droplets as microreactors for high-throughput biology. *ChemBioChem*, Wiley Online Library, v. 8, n. 3, p. 263–272, 2007.
- TAN, S. H.; SEMIN, B.; BARET, J.-C. Microfluidic flow-focusing in ac electric fields. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 14, n. 6, p. 1099–1106, 2014.
- TEREKHOV, S. S. et al. Microfluidic droplet platform for ultrahigh-throughput single-cell screening of biodiversity. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Academy of Sciences, v. 114, n. 10, p. 2550–2555, 2017.
- THORSEN, T. et al. Dynamic pattern formation in a vesicle-generating microfluidic device. *Physical review letters*, APS, v. 86, n. 18, p. 4163, 2001.
- TRYGGVASON, G. et al. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 169, n. 2, p. 708–759, 2001.
- TRYGGVASON, G.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. *Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows*. [S.l.]: Cambridge university press, 2011.
- UBBINK, O.; ISSA, R. A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 153, n. 1, p. 26–50, 1999.
- UMBANHOWAR, P.; PRASAD, V.; WEITZ, D. A. Monodisperse emulsion generation via drop break off in a coflowing stream. *Langmuir*, ACS Publications, v. 16, n. 2, p. 347–351, 2000.
- UTADA, A. S. et al. Monodisperse double emulsions generated from a microcapillary device. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 308, n. 5721, p. 537–541, 2005.
- VLADISAVLJEVIĆ, G. T. et al. Industrial lab-on-a-chip: Design, applications and scale-up for drug discovery and delivery. *Advanced drug delivery reviews*, Elsevier, v. 65, n. 11-12, p. 1626–1663, 2013.

- WANG, W.; ZHANG, M.-J.; CHU, L.-Y. Functional polymeric microparticles engineered from controllable microfluidic emulsions. *Accounts of chemical research*, ACS Publications, v. 47, n. 2, p. 373–384, 2014.
- WANG, X.; LIU, Z.; PANG, Y. Droplet breakup in an asymmetric bifurcation with two angled branches. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 188, p. 11–17, 2018.
- WHITE, F. M. *Viscous Fluid Flow*. [S.l.]: McGraw Hill, Boston, MA, 1991.
- WHITESIDES, G. M. The origins and the future of microfluidics. *nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 442, n. 7101, p. 368–373, 2006.
- WÖRNER, M. Numerical modeling of multiphase flows in microfluidics and micro process engineering: a review of methods and applications. *Microfluidics and nanofluidics*, Springer, v. 12, n. 6, p. 841–886, 2012.
- XI, H.-D. et al. Active droplet sorting in microfluidics: a review. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 17, n. 5, p. 751–771, 2017.
- YIN, S. et al. Dynamics of droplet in flow-focusing microchannel under ac electric fields. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 125, p. 103212, 2020.
- YOUNGS, D. L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics*, Academic Press, 1982.
- ZHAO, Y. et al. Lab-on-a-chip technologies for single-molecule studies. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 13, n. 12, p. 2183–2198, 2013.
- ZHENG, F. et al. Organ-on-a-chip systems: microengineering to biomimic living systems. *Small*, Wiley Online Library, v. 12, n. 17, p. 2253–2282, 2016.
- ZHU, P.; WANG, L. Passive and active droplet generation with microfluidics: a review. *Lab on a Chip*, Royal Society of Chemistry, v. 17, n. 1, p. 34–75, 2017.