

MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO DE ELETROFIAÇÃO

DOI: 10.22533/at.ed.5282313123

Marcos Akira d'Ávila

Faculdade de Engenharia Mecânica,
Universidade Estadual de Campinas
(UNICAMP), Campinas – SP

Nicolao Cerqueira Lima

Faculdade de Engenharia Mecânica,
Universidade Estadual de Campinas
(UNICAMP), Campinas – SP

3.1 INTRODUÇÃO

O processo de eletrofiação (do inglês, *electrospinning*) é reconhecido como um dos métodos mais versáteis para a obtenção de fibras de alta razão de aspecto com diâmetros na ordem de dezenas de nanômetros a alguns micrômetros. Este processo consiste em forçar um fluido polimérico, geralmente em solução, através de um capilar, no qual um campo elétrico da ordem de alguns kV/cm é aplicado na saída do capilar, gerando uma tensão eletrostática no polímero. As fibras são formadas quando as forças eletrostáticas superam as forças interfaciais em condições específicas, de tal maneira que ocorra um estiramento contínuo e não

a quebra do fluido polimérico na forma de gotículas (maiores detalhes no Capítulo 1). Esta técnica foi desenvolvida inicialmente na década de 1930, mas somente explorada a partir da década de 1990 com a finalidade de produzir fibras poliméricas com diâmetros nas escalas micrométricas e nanométricas.¹

Na eletrofiação, quando um fluido polimérico é submetido a um campo elétrico contínuo, o jato usualmente apresenta duas regiões distintas de escoamento: i) região de jato estável e ii) região de instabilidade.^{2,3} A primeira região ocorre desde a ponta do capilar até uma determinada distância deste, e caracteriza-se pela formação de um jato estável, que estira o polímero devido às tensões exercidas na solução polimérica pelo campo elétrico.^{4,5} A segunda região caracteriza-se pela ocorrência de uma instabilidade de escoamento caracterizada por um movimento caótico do fio, similar a um movimento de “chicote”; esta instabilidade é conhecida como instabilidade do tipo “*whipping*”.⁶⁻⁸

O escoamento desenvolvido no processo de eletrofiação consiste no chamado escoamento eletrohidrodinâmico (EHD), que é essencialmente o mesmo tipo de escoamento encontrado em processos de *spray* eletrostático (*electrospraying*). Um modelo geral para os problemas EHD foi inicialmente formulado por G. I. Taylor,⁹ e uma revisão da teoria EHD pode ser encontrada no artigo de Saville.¹⁰ Por envolver o escoamento em superfície livre de um fluido não-Newtoniano e viscoelástico induzido pela ação de um campo elétrico, fatores como tensão superficial, condutividade elétrica e as propriedades reológicas, fazem com que esse tipo de escoamento desenvolvido durante o processo seja de grande complexidade.²

Os esforços para compreender o processo de eletrofiação, através das equações fundamentais de transporte, iniciaram-se com o trabalho de Spivak e Dzenis.¹¹ Mais tarde, Feng⁵ propôs um modelo unidimensional baseado na teoria de corpo delgado (*slender body*) para descrever o escoamento EHD de fluidos viscosos para a região de jato estável. Hohman *et al.*,^{6,12} através da análise de estabilidade linear, demonstraram que o modelo do corpo delgado é capaz de prever os fenômenos de instabilidade de escoamento observados no processo. Posteriormente, Carroll e Joo,^{13,14} Feng⁴ e Helgeson *et al.*¹⁵ simularam o processo considerando a viscoelasticidade não-linear e efeitos elongacionais. Esses trabalhos demonstraram que o modelo de corpo delgado fornece boa concordância quantitativa para o diâmetro do jato para várias soluções poliméricas em diferentes condições de processo, apesar de ser um modelo essencialmente unidimensional.

Uma outra abordagem unidimensional desenvolvida para simular o processo de eletrofiação foi apresentada por Yarin, Koombhongse e Reneker.⁸ Trata-se de uma abordagem Lagrangeana, na qual o jato eletrofiado é considerado como segmentos viscoelásticos modelados como um sistema mola-amortecedor. Apesar de ser um modelo simplificado, ele apresenta como vantagens o menor custo computacional e capacidade de avaliar, ao menos qualitativamente, os fenômenos de instabilidade do processo. Recentemente, um artigo de revisão foi publicado descrevendo com detalhe esse modelo e suas aplicações.¹⁶

Outras abordagens de simulação podem ser encontradas na literatura, como simulações de dinâmica molecular¹⁷ e simulações utilizando pacotes comerciais como o COMSOL, visando fazer estudos da distribuição de campo elétrico através da avaliação da disposição e da geometria de eletrodos para a otimização do processo.¹⁸ Entretanto, deve-se sempre considerar que o processo de eletrofiação é fundamentalmente um escoamento eletrohidrodinâmico e, por isso, espera-se que as simulações do modelo EHD geral forneçam os resultados mais fidedignos, bem como proporcionem um entendimento mais fundamental dos fenômenos físicos envolvidos no processo. Neste contexto, simulações do modelo EHD utilizando métodos de fluidodinâmica computacional (CFD) são promissoras, pois permitem o melhor entendimento do processo, além da versatilidade em realizar simulações com diferentes geometrias. Nessas simulações é importante considerar a

viscoelasticidade do fluido, o que aumenta a complexidade do modelo; porém, atualmente, alguns pacotes de CFD de código aberto permitem que fenômenos EHD sejam estudados a partir da implementação das equações governantes do processo na forma geral.

Assim, neste capítulo será apresentado o modelo EHD geral, que, a princípio, é capaz de descrever os fenômenos físicos envolvidos na eletrofiação, dadas as devidas condições e particularidades relacionadas ao fluido. Na seção 3.2 é apresentado o histórico do desenvolvimento da teoria eletrohidrodinâmica, descrevendo os sucessivos avanços na teoria até chegar ao modelo geral de Taylor e Melcher,⁹ o qual é apresentado na seção 3.3. Na seção 3.4 é apresentado o modelo do corpo delgado (*slender body*), que, conforme mencionado acima, é um modelo unidimensional obtido a partir do modelo geral e utilizado para simulações de eletrofiação. Na seção 3.5 são apresentados resultados de simulação numérica da formação do jato no processo de eletrofiação a partir de simulações do modelo EHD geral. As simulações foram realizadas utilizando o software OpenFoam®, onde foram implementadas as equações do modelo EHD, considerando um fluido viscoelástico de Giesekus.³⁴ Esses resultados servem para ilustrar a capacidade do modelo EHD em fornecer soluções numéricas que permitem elucidar os fenômenos físicos envolvidos na eletrofiação, o que poderá ser de grande valor para futuros avanços dessa tecnologia e de suas aplicações. Finalmente, considerações finais sobre o que foi apresentado nesse capítulo estão na seção 3.6.

3.2 HISTÓRIA DA ELETROHIDRODINÂMICA

As primeiras patentes do processo de eletrofiação, datadas do início do século XX,¹⁹ vieram pouco antes da pesquisa pioneira desenvolvida por Zeleny,^{20,21} que estudou a instabilidade gerada por forças eletrostáticas em gotas localizadas na ponta de capilares metálicos. Suas observações foram o ponto de partida para elaboração de teorias e motivaram o desenvolvimento de modelos matemáticos para descrever os fenômenos físicos relacionados ao comportamento de fluidos sob o efeito de um campo elétrico. Apesar dos diversos estudos que sucederam os trabalhos de Zeleny ao longo da primeira metade do século XX, foi somente na década de 1960, com os consagrados trabalhos de Taylor,^{10,22–24} que os conceitos fundamentais e os principais modelos generalizados se efetivaram. Nesta mesma época, o termo “eletrohidrodinâmica” passou a ser utilizado para se referir ao ramo da mecânica dos fluidos relacionado ao efeito de forças elétricas. De maneira recíproca, pode ser considerado um ramo da eletrodinâmica relacionado ao movimento de meios contínuos em um campo elétrico.⁹

De um modo geral, quando um fluido está sob a influência de um campo elétrico, os efeitos eletrohidrodinâmicos estarão associados à dois fenômenos principais: a migração de íons carregados e/ou elétrons livres pelo fluido, e a polarização de suas moléculas. Ambos os fenômenos se relacionam a duas propriedades físicas do meio, respectivamente:

- a condutividade elétrica (σ), que representa a capacidade de um fluido de conduzir corrente elétrica, ou seja, a facilidade da movimentação de suas cargas elétricas quando submetidas a um campo elétrico;
- a permissividade dielétrica (ϵ), que associa a capacidade de alinhamento (polarização elétrica) das moléculas de um meio sob a influência de um campo elétrico.

Assim, podemos determinar dois limites possíveis de definição para um fluido em relação às suas propriedades elétricas: fluidos perfeitamente condutores e fluidos perfeitamente dielétricos. Fluidos perfeitamente condutores caracterizam-se por sua alta condutividade elétrica de modo que a condução ôhmica seja a única responsável pelo transporte de cargas. Neste caso, sob o efeito de um campo elétrico, considera-se que as cargas migram instantaneamente para a superfície do fluido gerando uma superfície equipotencial (Fig. 3.1a). Por outro lado, fluidos perfeitamente dielétricos, às vezes denominados isolantes elétricos, são fluidos que não possuem íons ou elétrons livres. Ao considerar um meio dielétrico homogêneo, ou seja, quando o fluido possui uma permissividade dielétrica constante, os efeitos de polarização são equilibrados no seu interior e a força elétrica surge apenas na superfície onde os dipolos elétricos não estão balanceados (Fig. 3.1b).¹⁰

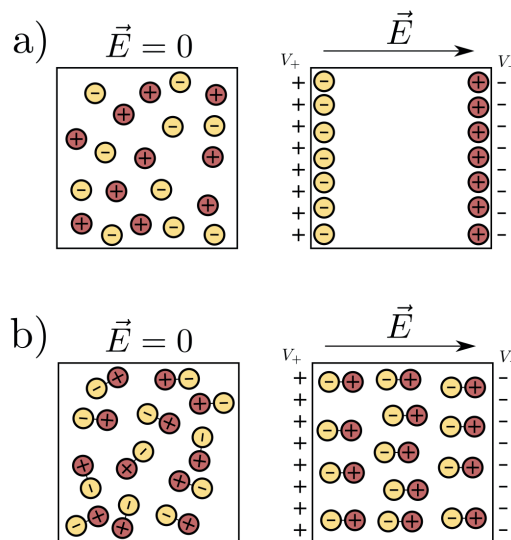


Figura 3.1. Efeito do campo elétrico na (a) distribuição de densidade de carga livre e (b) na polarização das moléculas.

Quando um campo elétrico atravessa uma superfície que separa dois fluidos imiscíveis, ele sofre um desvio devido à diferença entre as propriedades elétricas de ambos os meios. Na ausência de cargas elétricas livres, ou seja, se ambos os fluidos forem

considerados perfeitamente dielétricos, ou se uma fase for considerada perfeitamente condutora enquanto a outra for perfeitamente dielétrica, a descontinuidade no campo elétrico induz uma força na interface que sempre atuará perpendicularmente à superfície: apontando do fluido com maior constante dielétrica em direção ao fluido com menor; ou do fluido condutor em direção ao isolante.^{9,24} Uma vez que essas forças elétricas são sempre normais à interface, elas podem ser balanceadas mecanicamente pelo ajuste da interface e pela tensão superficial, fazendo com que o sistema atinja um regime de estado estacionário.¹⁰ Este tipo de fenômeno também é conhecido como eletrohidroestática (EHS).

Antes dos trabalhos de Taylor, praticamente todas as pesquisas em eletrohidrodinâmica consideravam os fluidos dentro destes dois limites. Porém, fluidos perfeitamente condutores são incomuns e fluidos perfeitamente dielétricos são pouco realistas, pois por menor que seja a condutividade elétrica de um fluido, sempre haverá uma densidade de carga não-nula que irá se acumular na interface até que um estado estável seja atingido.²⁴ Portanto, a melhor forma de aproximação para um fluido é considerar que ele tenha de certa forma uma condutividade finita.

Os primeiros estudos desenvolvidos por O'Konski e Harris,²⁵ seguidos pelos experimentos de Allan e Mason,²⁶ estenderam a teoria de EHS e mostraram que, quando considerados meios condutores (*leaky dielectrics*), a distribuição de densidade de carga gerada pela corrente elétrica dentro e fora da interface também induz uma tensão elétrica tangencial na superfície. Esta observação foi posteriormente confirmada por Taylor,²⁴ que desenvolveu uma teoria capaz de prever a deformação de gotas condutoras inseridas em um campo elétrico. Ele verificou que uma gota pode permanecer esférica dentro de um campo elétrico desde que ambos os fluidos internos e externos à gota estejam em movimento. Este equilíbrio é somente viável se as tensões elétricas tangenciais forem balanceadas por tensões viscosas (tensões hidrodinâmicas). Esta teoria eletrohidrodinâmica desenvolvida por Taylor,²⁴ foi posteriormente concretizada com a notável revisão sobre EHD de Melcher e Taylor,⁹ que definiram o que passou a ser conhecido como *leaky dielectric model*^l. Este modelo, apesar de muito utilizado para representar escoamentos EHD, desconsidera a existência de densidade de carga no interior do fluido. A seguir será apresentado o modelo eletrohidrodinâmico geral, onde, a partir deste, modelos simplificados são obtidos visando uma determinada aplicação que envolva efeitos eletrohidrodinâmicos, que especificamente no nosso caso, corresponde à eletrofiação. Posteriormente, Saville¹⁰ revisou o modelo levando em conta efeitos eletrocinéticos e passou então a considerar o transporte de cargas e forças elétricas de corpo, anteriormente ignoradas por Melcher e Taylor.

¹ Como não existe uma tradução direta para o nome do modelo *leaky dielectric*, deste ponto em diante passaremos a denominá-lo como "modelo de fluidos condutores".

3.3 MODELO ELETROHIDRODINÂMICO GERAL

O modelo EHD geral tem como base a combinação das equações de conservação de massa e momento para fluidos incompressíveis com as equações de Maxwell sob certas condições. É um modelo que contempla escoamentos desde fluidos com altas e baixas condutividades até fluidos perfeitamente dielétricos. Para explicar sua formulação e os fenômenos intrínsecos a estes escoamentos, é importante definirmos inicialmente três tempos característicos: i) tempo elétrico característico $te = \epsilon\epsilon_0/\sigma$, relacionado ao tempo de relaxação das cargas elétricas, onde $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$ F/m é a permissividade do vácuo; ii) tempo característico para os fenômenos magnéticos $t_m = \mu_m\mu_0\sigma L^2$, que caracteriza o tempo de relaxação de correntes elétricas dinâmicas, onde μ_m é a permeabilidade magnética do fluido, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H/m é a permeabilidade magnética do vácuo, e L representa um comprimento característico; e iii) tempo característico hidrodinâmico $th = \rho L^2/\mu$, representando a relaxação viscosa, efeitos difusivos ou a movimentação de uma interface, onde ρ é a densidade do fluido e μ sua viscosidade dinâmica.

Em geral, em problemas EHD o tempo característico elétrico é diversas ordens de grandeza maior do que o tempo característico magnético.²⁶ Com a ausência de campos magnéticos, efeitos de indução magnética podem ser ignorados e a utilização das equações de eletrostática passa a ser uma boa aproximação. Assim, o campo elétrico pode ser considerado irrotacional ($\nabla \times \vec{E} = 0$) e, em termos de potencial elétrico V , o vetor do campo elétrico pode ser escrito como:

$$\vec{E} = -\nabla V \quad (1)$$

A Lei de Gauss para um fluido dielétrico de permissividade pode ser escrita em termos do deslocamento elétrico, $\vec{D} = \epsilon\vec{E}$, como:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \nabla \cdot (\epsilon\vec{E}) = q_v \quad (2)$$

onde q_v representa a densidade de carga volumétrica. Esta, por sua vez, é advectada com o escoamento e conduzida de acordo com a condutividade do fluido usando a seguinte equação de conservação:

$$\nabla \cdot \vec{j} + \frac{Dq_v}{Dt} = \nabla \cdot (\sigma\vec{E}) + \frac{\partial q_v}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla q_v = 0 \quad (3)$$

onde $\vec{j} = \sigma\vec{E}$ é a densidade de corrente devido à condutividade elétrica; $D/Dt = \partial/\partial t + \vec{U} \cdot \nabla$ representa a derivada material de uma propriedade; e \vec{U} é a velocidade do fluido. As forças elétricas \vec{F}_e por unidade de volume são acopladas às equações de conservação do fluido como uma força de campo, e são calculadas tomando-se o divergente do tensor tensão de Maxwell, dado por:

$$\vec{\sigma}_M = \varepsilon \vec{E} \vec{E} - \frac{1}{2} \varepsilon \left[1 - \frac{\rho}{\varepsilon} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right) \right] \vec{E} \cdot \vec{E} \delta_k \quad (4)$$

, onde ρ é a densidade do fluido e δ_k é o delta de Kronecker.

$$\vec{F}_e = \nabla \cdot \vec{\sigma}_M = q_v \vec{E} - \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{E} \nabla \varepsilon + \nabla \left(\frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{E} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \rho \right) \quad (5)$$

O primeiro termo do lado direito da equação (5), representa a força elétrica exercida nas cargas livres. O segundo termo representa a força exercida pelo campo elétrico nos dipolos elétricos. O terceiro e último termo é conhecido como força de eletrostrição, e está associada às mudanças na constante dielétrica devido à variação do volume do material. Ela representa uma contribuição isotrópica do tensor tensão de Maxwell e, em geral, é ignorada em casos incompressíveis ou é acrescida como uma correção ao gradiente de pressão na equação de conservação de momento do fluido, que, para um fluido incompressível, será então dada por:

$$\rho \left(\frac{\partial(\vec{U})}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \vec{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\sigma}_v + \vec{F}_e + \vec{F}_\gamma + \vec{F}_c \quad (6)$$

ou de uma forma expandida:

$$\rho \left(\frac{\partial(\vec{U})}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \vec{U} \right) = -\nabla \left(p - \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{E} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \rho \right) - \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{E} \nabla \varepsilon + q_v \vec{E} + \nabla \cdot \vec{\sigma}_v + \vec{F}_\gamma + \vec{F}_c \quad (7)$$

, onde \vec{F}_γ é a força devido à tensão superficial entre os dois meios e \vec{F}_c é uma força de corpo genérica, podendo representar a contribuição da gravidade, por exemplo. $\vec{\sigma}_v$ é o tensor tensão viscoso, que pode ser dividido em duas partes de acordo com cada caso: uma contribuição Newtoniana, podendo representar um fluido Newtoniano qualquer, ou o solvente, no caso de soluções poliméricas, dada por $\vec{\sigma}_{vs} = \mu \left(\nabla \vec{U} + [\nabla \vec{U}]^T \right)$, onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido; e uma contribuição polimérica $\vec{\sigma}_{vp}$, descrita por meio de equações constitutivas oriundas de modelos reológicos. As equações apresentadas anteriormente, juntamente com a equação da conservação de massa, que para um fluido incompressível é dada por $\nabla \cdot \vec{U} = 0$, formam o conjunto de equações que regem escoamentos eletrohidrodinâmicos. Para o fechamento do sistema, entretanto, é necessário definirmos as condições na interface fluido-fluido.

3.3.1. Condições na interface

O potencial elétrico V é contínuo através de uma interface fluido-fluido e, como consequência, as componentes tangenciais do campo elétrico também são. Assim, definindo o símbolo $\llbracket \cdot \rrbracket$ como a descontinuidade, variação ou salto de uma propriedade na interface, temos que:

$$\vec{t} \cdot \vec{E}_1 = \vec{t} \cdot \vec{E}_2 \rightarrow \llbracket \vec{E}_t \rrbracket = 0 \text{ ou } \vec{n} \times \llbracket \vec{E} \rrbracket = 0 \quad (8)$$

, onde \vec{t} e \vec{n} representam os vetores unitários tangenciais e normais à interface, respectivamente, e os índices e representam cada um dos dois fluidos. Além disso, devido ao acúmulo de carga na superfície proveniente das diferenças entre as propriedades elétricas dos fluidos, o salto da componente normal do campo elétrico $\llbracket \vec{E}_n \rrbracket$ pode ser calculado de acordo com a lei de Gauss:

$$\llbracket \varepsilon \vec{E}_n \rrbracket = q_s \quad (9)$$

, onde q_s denota a carga livre por unidade de área acumulada na interface. De maneira similar à Equação (3), a carga superficial q_s também se conserva com o escoamento de acordo com a seguinte equação de conservação:

$$\frac{\partial q_s}{\partial t} + \vec{U}_s \cdot \nabla_s q_s + \llbracket \sigma \vec{E}_n \rrbracket = 0 \quad (10)$$

, onde ∇_s e \vec{U}_s representam o operador gradiente e a velocidade do fluido na superfície. Finalmente, com base nas condições apresentadas nas Equações (8) e (9), e da Equação do tensor tensão de Maxwell (Equação (4) - assumindo que a componente isotrópica foi adicionada à pressão), podemos obter as expressões para as tensões elétricas tangenciais e normais que agem na interface, respectivamente:

$$\vec{t} \cdot \llbracket \vec{\sigma}_M \rrbracket \cdot \vec{n} = (\varepsilon_1 \vec{E}_{n_1} - \varepsilon_2 \vec{E}_{n_2}) = q_s \vec{E}_t \quad (11)$$

e

$$\vec{n} \cdot \llbracket \vec{\sigma}_M \rrbracket \cdot \vec{n} = \frac{1}{2} [\varepsilon_1 \vec{E}_{n_1}^2 - \varepsilon_2 \vec{E}_{n_2}^2 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \vec{E}_t^2] \quad (12)$$

A componente tangencial do tensor tensão de Maxwell (Equação (11)) será balanceada pela tensão viscosa, enquanto a componente normal (Equação (12)) será balanceada pelo gradiente de pressão e pela tensão superficial. Assim, as tensões na interface satisfazem as seguintes relações de equilíbrio:

$$\vec{t} \cdot \llbracket \vec{\sigma}_M \rrbracket \cdot \vec{n} + \vec{t} \cdot \llbracket \vec{\sigma}_V \rrbracket \cdot \vec{n} = 0 \quad (13)$$

e

$$\vec{n} \cdot \llbracket \vec{\sigma}_M \rrbracket \cdot \vec{n} + \vec{n} \cdot \llbracket \vec{\sigma}_V \rrbracket \cdot \vec{n} + \llbracket p \rrbracket + \gamma \kappa \vec{n} = 0 \quad (14)$$

, onde γ é a tensão superficial e $\kappa = [(\mathbf{I} - \vec{n}\vec{n}) \cdot \nabla] \cdot \vec{n}$ é a curvatura da interface, com \mathbf{I} sendo o tensor identidade.

3.3.2 Simplificações do modelo

Para compreender melhor o comportamento das cargas livres no interior do fluido, podemos utilizar a relação entre o tempo elétrico característico e a variação no tempo da densidade de carga na interface. Esta relação surge naturalmente combinando as Equações (2) e (3):

$$\frac{Dq_v}{Dt} = -\frac{\sigma}{\epsilon} q_v \rightarrow q_v = q_{v0} e^{-\frac{\sigma}{\epsilon} t} \text{ ou } q_v = q_{v0} e^{-\frac{t}{t_e}} \quad (15)$$

, onde o índice 0 representa a propriedade no tempo inicial. Analisando a Equação (15) nota-se que a densidade de carga livre na vizinhança de um elemento de fluido diminui, de uma densidade de carga inicial q_{v0} , com o aumento do tempo de relaxação elétrico. Assim, se o fluido possuir uma alta condutividade elétrica, o tempo de relaxação elétrico será muito menor que o tempo característico hidrodinâmico $t_e \ll t_h$. Ou seja, o deslocamento de carga para interface é instantâneo quando comparado com a escala de movimento do fluido. Por outro lado, fluidos com condutividades quase nulas, $t_e \gg t_h$, se comportam como fluidos perfeitamente dielétricos, podendo-se desconsiderar efeitos de carga livre. A partir da Equação (15), podemos reavaliar as equações gerais de eletrohidrodinâmica para os casos particulares de fluidos com altas condutividades e fluidos perfeitamente dielétricos.

- Fluidos condutores - Modelo de fluidos condutores $t_e \ll t_h$

Esta aproximação, apresentada no trabalho de Saville,¹⁰ é muito utilizada em simulações de eletrohidrodinâmica, pois aplica-se a fluidos com condutividades da ordem de 1 $\mu\text{S/m}$, geralmente considerados em problemas deste tipo. Em fluidos com altas condutividades elétricas, as correntes elétricas dinâmicas são pequenas e, portanto, considera-se que as cargas migram instantaneamente do interior para a interface do fluido, reduzindo a zero as cargas livres no interior do fluido. Nesse caso, a conservação de carga no interior atinge um estado estacionário muito mais rápido que o tempo de movimentação do meio. Assim, a equação de conservação de carga (Equação (3)) pode ser simplificada para um caso quase-estático, reduzindo-se para:

$$\nabla \cdot (\sigma \vec{E}) = 0 \quad (16)$$

Como a condutividade elétrica é constante em cada fluido, o potencial elétrico (e conseqüentemente o campo elétrico por meio da Equação (1)) pode ser calculado no interior do meio diretamente pela solução da equação de Laplace,

$$\nabla^2 V = 0 \quad (17)$$

, com um salto na interface de $[[\sigma \vec{E}_n]] = 0$ devido à diferença nas condutividades elétricas de cada fluido. O cálculo da densidade de carga volumétrica na interface pode ser feito por meio da Equação (2) e a força elétrica, para um fluido incompressível, se reduz para:

$$\vec{F}_e = q_v \vec{E} - \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{E} \nabla \epsilon \quad (18)$$

- Fluidos perfeitamente dielétricos $t_e \gg t_h$

Quando ambos os fluidos são considerados perfeitamente dielétricos, suas condutividades são pequenas o suficiente para satisfazer a condição $t_e \gg t_h$. Nesse caso, o campo elétrico polariza as moléculas do fluido, que por sua vez modificam o campo elétrico novamente. Uma vez que não há densidade de cargas livres ($q_v = 0$) no interior do fluido, o cálculo desta interação pode ser feito reduzindo-se a Equação (2) para:

$$\nabla \cdot (\epsilon \vec{E}) = 0 \quad (19)$$

Novamente, o potencial elétrico pode ser calculado pela solução da equação de Laplace (Equação (17)) no interior do fluido, mas deve satisfazer a condição $[\epsilon \vec{E}_n] = 0$ na interface por causa das diferenças entre as constantes dielétricas dos fluidos. Além disso, devido à falta de cargas livres, a força elétrica para um fluido incompressível se reduz para:

$$\vec{F}_e = -\frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{E} \nabla \epsilon \quad (20)$$

Vemos pela Equação (20) que, no caso de fluidos perfeitamente dielétricos, a força elétrica depende do gradiente de ϵ , e por isso será sempre normal a interface, apontando do fluido com maior permissividade elétrica para o fluido com menor.

3.4 TEORIA DO CORPO DELGADO (*SLENDER BODY THEORY*)

O modelo apresentado na Seção 3.3.2 é um modelo geral e pode ser aplicado a qualquer problema que envolva efeitos de campos elétricos em fluidos. Apesar da sua generalidade, a solução das equações é complexa e envolve conhecimentos em métodos numéricos além de possuir um alto custo computacional dependendo do problema. Por estes motivos, diversos modelos simplificados para a solução específica do afinamento de um jato na saída de um capilar foram introduzidos ao longo das últimas décadas.^{4-7,11,12,27,28} Nesta seção, apresentamos o modelo desenvolvido por Feng,⁵ conhecido como *slender body theory*, que até hoje é tido como referência para a solução do jato e para o desenvolvimento de novos modelos. Sua teoria é uma extensão da teoria desenvolvida por Hohman,⁶ porém incluindo efeitos não-Newtonianos e uma correção na inicialização da densidade de carga. Posteriormente, Feng⁵ acrescentou em sua teoria a solução do jato para um fluido viscoelástico descrito pelo modelo de Giesekus.

O modelo da teoria do corpo delgado é baseado no modelo de fluidos condutores e, portanto, considera que há apenas densidade de carga na superfície do jato. Além disso, este modelo prevê apenas a primeira etapa do processo de eletrofiação, que consiste no afinamento do jato na saída do tubo capilar. Assim, o modelo é simplificado de modo que

todos os parâmetros dependam apenas da direção axial do jato (direção z). Para isso, o modelo parte de duas principais hipóteses: que o raio do jato R reduz gradativamente ao longo da direção axial z , ou seja $|dR(z)/dz| \ll 1$; e que a velocidade axial v é constante na seção transversal do jato.

As equações de conservação que governam o movimento do jato durante o processo de eletrofiação são a conservação da massa, a conservação da carga, a conservação de momento linear e a lei de Coulomb juntamente com a lei de Gauss. Sendo Q a vazão volumétrica, a conservação de massa é dada por:

$$\pi R^2 v = Q \quad (21)$$

A corrente elétrica total I induzida pelo campo elétrico no jato pode ser dividida em uma componente devido à condução de cargas I_{cond} e uma componente devido à convecção de cargas I_{conv} . Assim, a equação de conservação de carga será dada por:⁵

$$I = I_{cond} + I_{conv} = \pi R^2 \sigma E_z + 2\pi R v q_s \quad (22)$$

, onde E_z corresponde à componente z do campo elétrico. O balanço de momento pode ser deduzido com base nas forças atuando em uma pequena parcela do jato. A forma geral da equação de momento é dada por:

$$\frac{d}{dz} (\pi R^2 \rho v^2) = \pi R^2 \rho g + \frac{d}{dz} [\pi R^2 (-p + \sigma_{v_{zz}})] + \frac{\gamma}{R} 2\pi R R' + 2\pi R (\sigma_{M_t} - \sigma_{M_n} R') \quad (23)$$

onde $\sigma_{v_{zz}}$ corresponde à tensão viscosa axial e o apóstrofo denota a derivada com relação à z . Assim, R' corresponde à taxa de decrescimento do jato. σ_{M_t} e σ_{M_n} são as tensões elétricas tangenciais e normais atuando na superfície do jato, respectivamente, dadas por:

$$\sigma_{M_t} = q_s \vec{E}_t \approx q_s E_z \quad (24)$$

$$\sigma_{M_n} = \left[\frac{\varepsilon}{2} (\vec{E}_n^2 - \vec{E}_t^2) \right] \approx \frac{q_s^2}{2\bar{\varepsilon}} - \frac{\bar{\varepsilon} - \varepsilon}{2} E_z^2 \quad (25)$$

, onde ε e $\bar{\varepsilon}$ são as permissividades do fluido e do ar, respectivamente. A pressão nesse caso pode ser determinada fazendo o balanço das forças normais na superfície do jato:

$$-p + \sigma_{v_{rr}} = \sigma_{M_n} - \frac{\gamma}{R} \quad (26)$$

, onde $\sigma_{v_{rr}}$ corresponde à tensão viscosa radial. Combinando as Equações (24), (25) e (26) na Equação (23), obtemos a forma final da equação de momento na direção axial:⁴

$$\rho v v' = \rho g + \frac{T'}{R^2} + \frac{\gamma R'}{R^2} + \frac{q_s q_s'}{\bar{\varepsilon}} + (\varepsilon - \bar{\varepsilon}) E_z E_z' + \frac{2q_s E_z}{R} \quad (27)$$

, onde $T = R^2(\sigma_{v_{zz}} - \sigma_{v_{rr}})$ corresponde à força de tensão, e está relacionada à taxa de deformação por meio de uma determinada relação constitutiva. O potencial elétrico axial pode ser estimado por meio de uma aproximação assintótica após a combinação da lei de Gauss com a lei de Coulomb. O resultado do potencial elétrico na direção z é dado por⁶:

$$V(z) \approx V_{\infty}(z) + \ln\chi \left(\frac{1}{\bar{\epsilon}} q_s R - \frac{\beta}{2} \frac{d(E_z R^2)}{dz} \right) \quad (28)$$

, onde $V_{\infty}(z)$ corresponde ao potencial elétrico externo (sem o efeito do jato), $X = L/R_0$ é a razão entre o comprimento do jato L e o raio inicial R_0 , e $\beta = \epsilon/\bar{\epsilon} - 1$. Assim, o campo elétrico na direção axial é dado finalmente por:

$$E(z) \approx E_{\infty}(z) + \ln\chi \left(\frac{1}{\bar{\epsilon}} \frac{d(q_s R)}{dz} - \frac{\beta}{2} \frac{d^2(E_z R^2)}{dz^2} \right) \quad (29)$$

, onde $E_{\infty}(z)$ é o campo elétrico externo, considerado espacialmente uniforme^{4,5}. As Equações (21), (22), (27), (29) e mais a equação constitutiva do fluido viscoelástico formam o sistema de equações que determinam as variáveis $R(z)$, $v(z)$, $E(z)$, $q_s(z)$, $\sigma_{v_{zz}}(z)$ e $\sigma_{v_{rr}}(z)$ na direção axial do jato. É importante notar que, para solucionar o sistema, os valores de Q e I devem ser dados como valores de entrada nas equações. Para uma explicação detalhada sobre o desenvolvimento e derivação destas equações, além da visualização completa dos resultados obtidos por elas, sugere-se a leitura das referências^{4-6,11,12,29}.

3.5 RESULTADOS NUMÉRICOS DO MODELO GERAL DE ELETROHIDRODINÂMICA

Nesta seção serão apresentados os resultados das simulações numéricas do estiramento de um jato Newtoniano e viscoelástico utilizando o modelo EHD geral apresentado na Seção 3.3.2. As simulações foram realizadas em um software de CFD (*computational fluid dynamics*) gratuito e de código aberto chamado OpenFOAM.³⁰ Os cálculos são baseados no método dos volumes finitos e, portanto, os resultados são calculados dentro de uma malha definida pela discretização de uma determinada geometria. Para maiores detalhes do software, dos métodos numéricos e do código sugere-se a leitura das referências.^{30,31}

Os resultados apresentados aqui serão restritos apenas à etapa inicial do processo de eletrofiação, que consiste na aceleração e no estiramento de um jato polimérico por meio de forças elétricas na saída de um capilar. Esta etapa, apesar de não ser a maior responsável pelo afinamento do jato, tem contribuição direta no diâmetro final da fibra. Além disso, é neste ponto que as condições para o segundo estágio do processo são estabelecidas.

A geometria utilizada nas simulações está representada na Figura 3.2. Para reduzir o custo computacional, foi utilizada uma geometria axissimétrica. Apesar da sua aparência plana, diferentemente da geometria bidimensional, simulações axissimétricas consideram o cálculo das variáveis na direção normal à face frontal e anterior. Em geral, a geometria é construída em formato de cunha com um pequeno ângulo interno (*e.g.* ≤ 5). Este tipo de abordagem é muito comum em simulações em que há um eixo central de simetria, por exemplo com cilindros e cones.^{31,32}

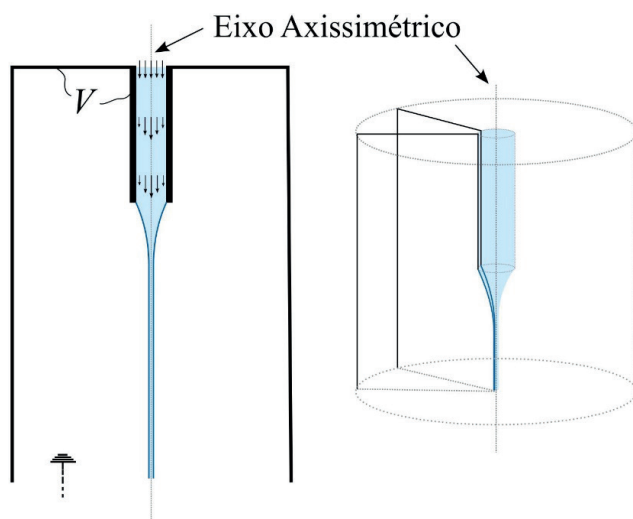


Figura 3.2. Esboço da geometria axissimétrica utilizada nas simulações.

No processo experimental de eletrofição, em geral a fonte de alta voltagem é conectada apenas no capilar e no coletor. Porém, para simular o processo de atomização, alguns autores também incluem a voltagem na parede superior.^{32,33} Assim, neste trabalho, a voltagem foi incluída nas paredes superiores e no capilar, de modo a gerar um campo elétrico externo uniforme que vai do topo ao chão ao longo da direção do jato. A fronteira inferior é considerada aterrada, *i.e.*, $V = 0$. Além disso, foi definida uma vazão constante para o jato na entrada do capilar e o problema foi construído de tal forma que permitisse que o fluido escoasse livremente pela fronteira inferior, como se estivesse aberta. A geometria foi discretizada em uma malha contendo um total de 24.200 volumes de controle. Os detalhes das condições de contorno das simulações e da malha podem ser encontrados na referência³⁴.

Nos restringimos a apresentar aqui apenas os principais resultados que ilustram a capacidade do modelo em descrever os fenômenos relacionados à etapa inicial do processo de atomização/eletrofição.

3.5.1 Nota

Os resultados apresentados nesta seção são frutos da pesquisa desenvolvida por Lima,³⁴ que consistiu na implementação das equações gerais de EHD (apresentadas anteriormente) em um software de CFD gratuito e de código aberto. Foi utilizado como base um código de escoamento bifásico baseado no método VOF (*volume of fluid*),³⁵ que calcula as equações de conservação dentro de cada fluido com base em um parâmetro de localização e balanço chamado fração volumétrica. A implementação e o modelo foram validados utilizando o clássico problema da deformação de uma gota Newtoniana condutora imersa em um fluido condutor sob o efeito de um campo elétrico. Os resultados mostraram-se satisfatórios. O mesmo código foi posteriormente reutilizado em diversos outros problemas de escoamentos eletrohidrodinâmicos, entre eles a deformação de uma gota viscoelástica em um campo elétrico,^{36,37} ajuste de lentes líquidas por meio de forças elétricas,^{36,38,39} e análises de fenômenos de *electrowetting*.⁴⁰ Estes estudos mostram não só a gama de aplicações dos efeitos eletrohidrodinâmicos, mas também a versatilidade do modelo geral.

3.5.2 Simulações de um jato Newtoniano

Simulações com fluidos viscoelásticos acrescentam uma maior complexidade ao sistema de equações, uma vez que as equações constitutivas são não-lineares e muitas vezes dependem de diversos parâmetros difíceis de serem quantificados experimentalmente.⁴¹ Por isso, para verificar a validade do modelo implementado, inicialmente foram feitos diversos testes com um jato Newtoniano. A literatura nesta linha é vasta tanto na área experimental^{42–44} quanto teórica.^{32,45–48} Iniciamos por comparar os resultados com o trabalho de Hohman *et al.*,¹² que desenvolveu uma teoria para eletrofiação capaz de prever as soluções estáveis para o estiramento do jato, transporte de carga e para o campo elétrico. Neste trabalho, os autores compararam as previsões de sua teoria com medições experimentais apenas para o glicerol, considerando as seguintes propriedades: $\epsilon = 4.12 \times 10^{-10}$ F/m, $\sigma = 4.8 \times 10^{-6}$ S/m, $\nu = 1.49 \times 10^{-3}$ m²/s, $\Upsilon = 0.0634$ N/m e $\rho = 1260$ kg/m³. O estiramento do jato foi avaliado aplicando-se um potencial elétrico de 30 kV e uma vazão de em um tubo capilar de raio $R_0 = 0.08$ cm com uma distância de 6 cm entre as placas. A Figura 3.3 mostra a comparação dos resultados do modelo eletrohidrodinâmico geral com os resultados teóricos e experimentais obtidos por Hohman e colaboradores.¹² As três curvas praticamente colapsam, mostrando que o modelo geral é capaz de prever corretamente a curvatura inicial do jato.

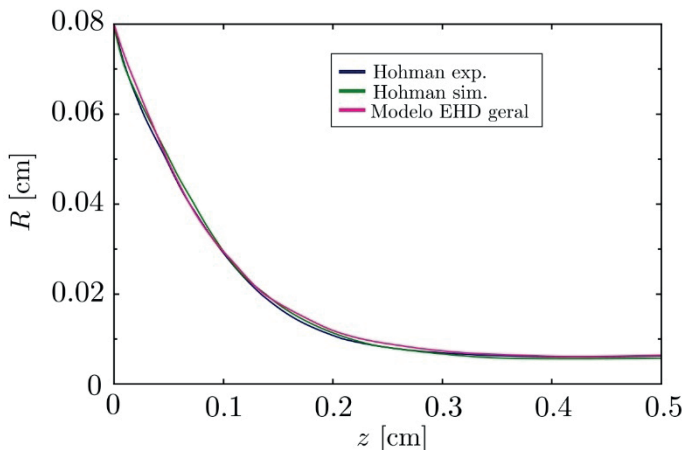


Figura 3.3. Comparação do resultado do afinamento de um jato Newtoniano previsto pelo modelo eletrohidrodinâmico geral com os resultados teóricos e experimentais obtidos por Hohman *et al.*¹²

Diferentemente das soluções unidimensionais apresentadas por Hohman *et al.*¹² e Feng,^{4,5} a simulação numérica tridimensional também nos permite a visualização do campo de escoamento no interior do jato. Tendo como base o trabalho de Lastow e Balachandran,³² verificamos o efeito de recirculação no interior de um jato de heptano ao se aplicar um potencial elétrico de 20 kV e uma vazão de $\approx 1\text{ mL/min}$ em um tubo capilar de raio $R_0 = 0.35\text{ mm}$. Utilizamos as seguintes propriedades para o heptano: $\varepsilon = 1.6815 \times 10^{-11}\text{ F/m}$, $\sigma = 7.7 \times 10^{-7}\text{ S/m}$, $\nu = 5.858 \times 10^{-7}\text{ m}^2/\text{s}$, $\gamma = 0.021\text{ N/m}$ e $\rho = 684\text{ kg/m}^3$. Assim como observado por Lastow e Balachandran,³² a Figura 3.4 apresenta a circulação do fluido no interior do cone. Este fenômeno foi primeiro observado por Hayati *et al.*⁴⁹ e discutido em outros trabalhos,^{48,50,51} e é similar às recirculações observadas em gotas condutoras, ocorrendo principalmente por influência das tensões elétricas cisalhantes na superfície do cone. Nas imagens, as cores vermelho e azul caracterizam a distribuição de fração volumétrica no domínio e diferem as duas fases, sendo a transição de cores a região de interface.

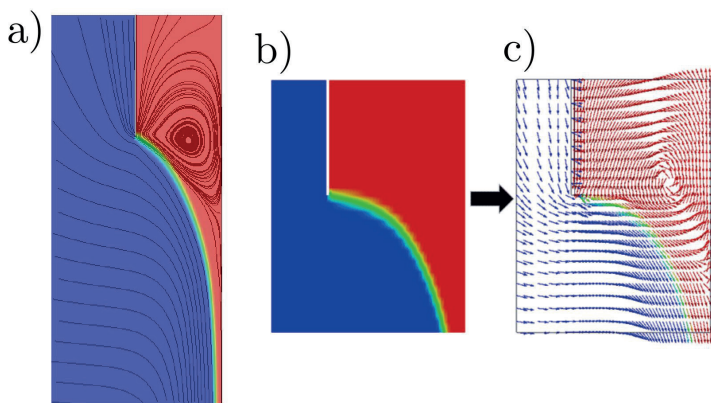


Figura 3.4. Recirculação produzida em um jato de heptano. Mesmo fenômeno observado por Lastow *et al.*³² (a) linhas de corrente sobrepostas à distribuição de fração volumétrica; (b) Fração volumétrica na saída do capilar (azul – ar; vermelho – fluido); (c) Vetores de velocidade com cores representando a distribuição de fração volumétrica.

Mantendo as configurações de simulação da Figura 3.4, exploramos o efeito do campo elétrico no afinamento do jato Newtoniano. A Figura 3.5 mostra os formatos estáveis do cone na saída do tubo capilar para diferentes voltagens. Como esperado, um aumento na intensidade do campo elétrico aumenta a intensidade das forças elétricas atuando na superfície do cone, intensificando o estiramento do jato. Dois efeitos são importantes de serem observados: o primeiro é a formação antecipada do jato devido ao recuo do ápice do cone em direção à saída do tubo; e o segundo é a redução do diâmetro do jato com o aumento do potencial elétrico. Ambos os resultados estão de acordo com resultados observados na literatura.^{5,33}

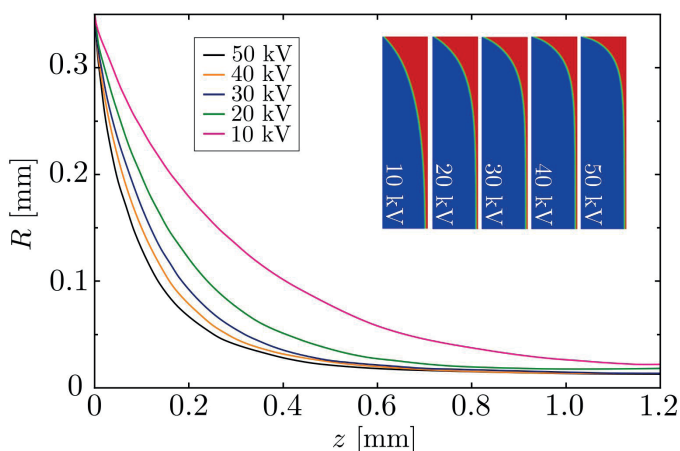


Figura 3.5. Efeito da intensidade do campo elétrico no estiramento de um jato de heptano. No detalhe da figura está apresentada a distribuição de fração volumétrica (azul-ar, e vermelho – fluido), representado a curvatura do jato em cada caso.

3.5.3 Simulações de um jato viscoelástico

Uma vez verificada a consistência dos resultados obtidos pelo modelo eletrohidrodinâmico geral para casos com fluidos Newtonianos, passamos para casos mais complexos utilizando fluidos viscoelásticos. O acréscimo de equações constitutivas em softwares de CFD não é uma tarefa simples. Porém, a implementação e validação de diversos modelos constitutivos não-newtonianos no OpenFOAM já haviam sido feitas previamente nos trabalhos de Favero⁵²⁻⁵⁴. Portanto, as equações de EHD foram incorporadas neste mesmo código, possibilitando a simulação de escoamentos eletrohidrodinâmicos com fluidos viscoelásticos. Assim como com fluidos Newtonianos, o afinamento de um jato viscoelástico por meio de forças elétricas também foi alvo de estudos por diversos autores.^{4,16,55} Dando continuidade no trabalho de Hohman *et al.*,^{6,12} Feng⁴ estendeu o modelo de fluidos Newtonianos para incluir o efeito de um fluido de Giesekus no estiramento do jato. Ele comparou seus resultados de simulação com os obtidos em laboratório por Doshi e Reneker⁵⁵ para uma solução de poli(óxido de etileno) (PEO). Com base nestes resultados, nesta etapa, apresentamos a comparação do modelo eletrohidrodinâmico geral utilizando fluidos viscoelásticos com os resultados numéricos obtidos por Feng⁴ e com os dados experimentais de Doshi e Reneker.⁵⁵ Assim como Feng,⁴ utilizamos o modelo de Giesekus⁵⁶ para descrever o comportamento não-Newtoniano do fluido. A escolha deste modelo é justificada por ele fornecer melhores resultados para escoamentos elongacionais.^{4,57} O modelo constitutivo de Giesekus entra como uma contribuição polimérica $\vec{\sigma}_{vp}$ no tensor tensão na equação de momento (Equação(7)), e é dado por:

$$\vec{\sigma}_{vp} + \lambda \overline{\vec{\sigma}_{vp}} + \alpha \frac{\lambda}{\eta_0} (\vec{\sigma}_{vp} \cdot \vec{\sigma}_{vp}) = 2\eta_0 (\nabla \vec{U} + [\nabla \vec{U}]^T) \quad (30)$$

, onde $\overline{\vec{\sigma}_{vp}}$ representa a derivada convectiva superior no tempo do tensor das tensões dado por:

$$\overline{\vec{\sigma}_{vp}} = \frac{D\vec{\sigma}_{vp}}{Dt} - [\nabla \vec{U}^T \cdot \vec{\sigma}_{vp}] - [\vec{\sigma}_{vp} \cdot \nabla \vec{U}] \quad (31)$$

, sendo $D\vec{\sigma}_{vp}/Dt$ a derivada material. O modelo contém três parâmetros principais, sendo eles: o tempo de relaxação λ , a viscosidade polimérica η_0 à taxa de deformação nula, e um fator adimensional de mobilidade α , que está associado ao movimento Browniano anisotrópico e/ou arrasto hidrodinâmico das moléculas do polímero.⁵⁸

A Figura 3.6 apresenta a forma final de um jato de uma solução de 4% de PEO obtida pela simulação realizada com o modelo eletrohidrodinâmico geral, pelo modelo numérico de Feng⁴ e pelo trabalho experimental de Doshi e Reneker.⁵⁵ Os parâmetros utilizados foram: $\rho = 1200 \text{ kg/m}^3$, uma vazão de $20 \text{ } \mu\text{l/min}$, uma permissividade de $\epsilon = 4,12 \times 10^{-10} \text{ F/m}$, uma condutividade de $\sigma = 4.9 \times 10^{-3} \text{ S/m}$ e $\Upsilon = 0.0766 \text{ N/m}$ para a tensão superficial. Neste caso, foi considerada a existência de um solvente. Portanto, incluímos uma contribuição

Newtoniana na Equação (7) com base em uma viscosidade dinâmica de $\mu = 0.001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ para o solvente. A viscosidade do polímero à taxa de deformação nula foi dada por $\eta_0 = 1.25 \text{ Pa} \cdot \text{s}$, e foram utilizados um fator de mobilidade $\alpha = 0.01$ e um tempo de relaxação $\lambda = 1 \text{ s}$. O valor do campo elétrico externo considerado no problema foi de $E_\infty = 40 \text{ kV/m}$. Uma vez que a distância entre as placas que geram a diferença de potencial não foi dada, consideramos, no presente trabalho, uma distância de , que implica um valor de diferença de potencial elétrico igual a $\Delta V = 24 \text{ kV}$.

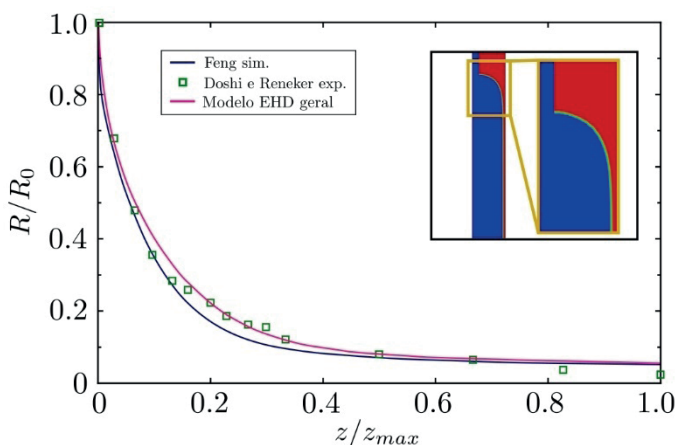


Figura 3.6. Afinamento do jato de uma solução de 4% de PEO; comparação do resultado do modelo eletrohidrodinâmico geral com o resultado numérico de Feng⁴ e com os dados experimentais obtidos por Doshi e Reneker.⁵⁵ No detalhe da figura é mostrada a distribuição de fração volumétrica (azul - ar, e vermelho - fluido) na saída do capilar, representando sua curvatura.

Apesar do desvio na curvatura do cone apresentado entre este trabalho e o trabalho do Feng,⁴ os resultados obtidos pelo modelo eletrohidrodinâmico geral estão mais próximos dos dados experimentais de Doshi e Reneker.⁵⁵ Esta pequena discrepância pode estar associada a desvios numéricos ou a diferenças entre parâmetros de modelo.

Finalmente, apresentamos os resultados numéricos do campo elétrico no domínio, força elétrica e distribuição de densidade de carga na interface. Na Figura 3.7, utilizamos um potencial elétrico de e as seguintes propriedades de solução polimérica: $\eta_0 = 1.2 \text{ Pa} \cdot \text{s}$; $\mu = 0.002 \text{ Pa} \cdot \text{s}$; $\lambda = 0.03 \text{ s}$ e $\alpha = 0.05$. As outras propriedades físicas foram mantidas iguais as da simulação anterior.

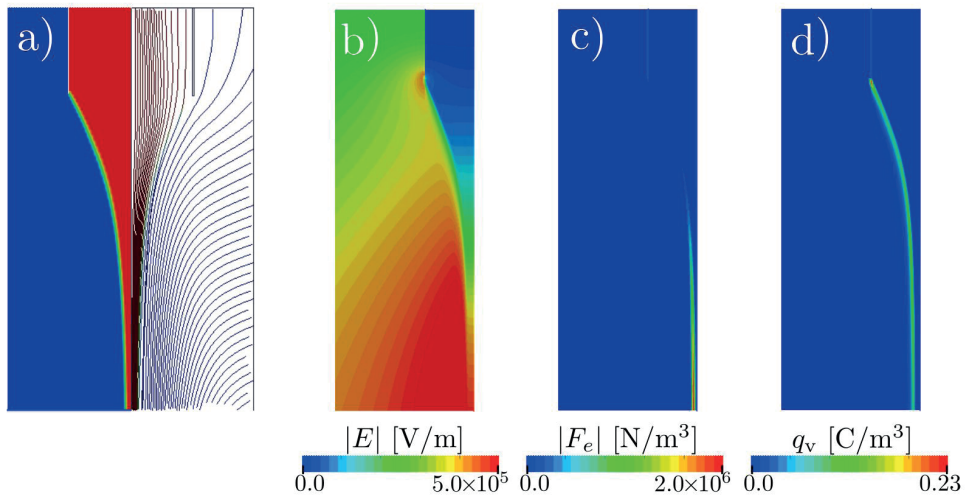


Figura 3.7. Formato final do jato polimérico considerando 10kV: (a) Distribuição de fração volumétrica (azul - ar, e vermelho - fluido) na saída do capilar e linhas de corrente; (b) Distribuição do campo elétrico; (c) Distribuição da força elétrica no jato; (d) Distribuição de densidade de carga no jato.

Diferentemente do resultado Newtoniano apresentado anteriormente, neste caso não houve a formação de uma recirculação no interior do cone. A explicação deste fato está na diferença entre as condutividades elétricas de ambos os fluidos. Nos casos Newtonianos foram utilizadas condutividades da ordem de $\sim 10^{-6}$ S/m, enquanto que aqui a condutividade é da ordem de $\sim 10^{-3}$ S/m. Assim como apontado por Shtern *et al.*⁵⁰, a superfície de fluidos com alta condutividade é praticamente equipotencial, e, portanto, a componente tangencial do campo elétrico, e consequentemente a tensão elétrica tangencial, é praticamente nula. Observamos também na Figura 3.7 uma distribuição de densidade de carga localizada ao longo de toda interface do jato, mas com uma intensidade maior na superfície do cone. De fato, à medida que o jato se torna mais fino a jusante, o aumento da velocidade do jato reduz a densidade de carga superficial e, portanto, a intensidade do campo elétrico. Como consequência, a força elétrica exercida no jato também reduz. Na Figura 3.8 apresentamos uma imagem mais afastada do cone que mostra a variação do campo elétrico e da densidade de carga a jusante do jato. De acordo com Feng,⁴ a alta condutividade e as fortes correntes elétricas geram altos níveis de carga superficial na base do cone, intensificando o estiramento do jato. Como observado por ele, na saída do capilar, o campo elétrico dispara até um pico e depois tende a relaxar à jusante devido à redução da densidade de carga superficial.

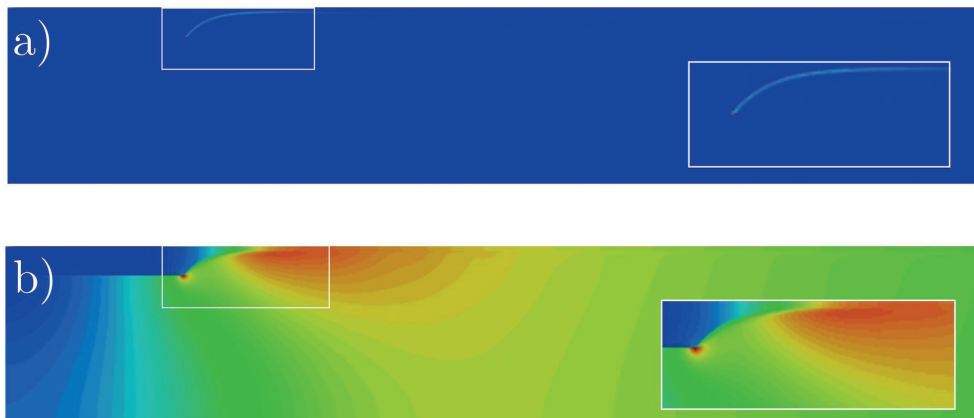


Figura 3.8. Distribuição de (a) densidade de carga e (b) campo elétrico em locais afastados do cone para o mesmo caso da Figura 3.7. Os detalhes mostram as imagens próximas à saída do capilar.

3.6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste capítulo, a modelagem matemática do processo de eletrofiação foi apresentada a partir do modelo EHD geral. Por se tratar de um modelo geral, deduzido a partir das equações de Maxwell e acoplado às equações de conservação da massa e do momento, este pode ser considerado como ponto de partida para qualquer estudo sobre fenômenos eletrohidrodinâmicos, dentre os quais se insere a eletrofiação.

No passado, simulações baseadas em simplificações foram propostas para estudar alguns dos fenômenos observados na eletrofiação, como o modelo unidimensional do corpo delgado. Entretanto, soluções baseadas no modelo geral, apesar do maior custo computacional, proporcionam maior versatilidade e robustez para o estudo dos efeitos eletrohidrodinâmicos na eletrofiação. Os resultados de simulações apresentados aqui mostraram que a implementação do modelo EHD geral conjuntamente com o modelo viscoelástico não-linear de Giesekus permite estudar os fenômenos eletrohidrodinâmicos característicos à eletrofiação. Como essa abordagem foi implementada dentro de um pacote computacional de CFD, há a possibilidade de realizar novos estudos com esse tipo de modelagem considerando, por exemplo, outras configurações de saída do fluido e de eletrodos, bem como instabilidades e quebra do jato em gotículas. Além disso, resultados obtidos por simulações a partir dos modelos fundamentais são extremamente úteis não só para prever o comportamento do material durante a eletrofiação, mas também para estudar com maior profundidade os fenômenos e efeitos que são observados experimentalmente.

REFERÊNCIAS

1. Ramakrishna, S.; Fujihara, K.; Teo, W. E.; Lim, T. C.; Ma, Z. *An introduction to electrospinning and nanofibers*; 2005.

2. Reneker, D. H.; Yarin, A. L. ;*Polymer* **2008**, *49*.
3. Rutledge, G. C.; Fridrikh, S. v. ;*Advanced Drug Delivery Reviews* **2007**, *59*.
4. Feng, J. J. ;*Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **2003**, *116*.
5. Feng, J. J. ;*Physics of Fluids* **2002**, *14*.
6. Hohman, M. M.; Shin, M.; Rutledge, G.; Brenner, M. P. ;*Physics of Fluids* **2001**, *13*.
7. Reneker, D. H.; Yarin, A. L.; Fong, H.; Koombhongse, S. ;*Journal of Applied Physics* **2000**, *87*.
8. Yarin, A. L.; Koombhongse, S.; Reneker, D. H. ;*Journal of Applied Physics* **2001**, *89*.
9. Melcher, J. R.; Taylor, G. I. ;*Annual Review of Fluid Mechanics* **1969**, *1*.
10. Saville, D. A. ;*Annual Review of Fluid Mechanics* **1997**, *29*.
11. Spivak, A. F.; Dzenis, Y. A. ;*Applied Physics Letters* **1998**, *73*.
12. Hohman, M. M.; Shin, M.; Rutledge, G.; Brenner, M. P. ;*Physics of Fluids* **2001**, *13*.
13. Carroll, C. P.; Joo, Y. L. ;*Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **2008**, *153*.
14. Carroll, C. P.; Joo, Y. L. ;*Physics of Fluids* **2006**, *18*.
15. Helgeson, M. E.; Grammatikos, K. N.; Deitzel, J. M.; Wagner, N. J. ;*Polymer* **2008**, *49*.
16. Lauricella, M.; Succi, S.; Zussman, E.; Pisignano, D.; Yarin, A. L. ;*Reviews of Modern Physics* **2020**, *92*.
17. Jirsák, J.; Moučka, F.; Nezbeda, I. ;*Industrial and Engineering Chemistry Research* **2014**, *53*, 8257.
18. Gupta, A.; Ayithapu, P.; Singhal, R. ;*Chemical Engineering Science* **2021**, *235*.
19. Tucker, N.; Hofman, K.; Stanger, J.; Staiger, M.; Hamid, N. A.; Torres, P. L. ;*International Symposium on New Frontiers in Fiber Materials Science, Conference Proceedings* **2011**.
20. Zeleny, J. ;*Physical Review* **1917**, *10*, 1.
21. Zeleny, J. ;*Physical Review* **1914**, *III*, 69.
22. Taylor, G. I.; *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **1962**, *267*.
23. Taylor, G. I.; *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **1964**, *280*.

24. Taylor, G. I.; *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **1966**, 291.
25. O'Konski, C. T.; Harris, F. E. ;*The Journal of Physical Chemistry* **1957**, 61.
26. Allan, R. S.; Mason, S. G. ;*Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **1962**, 267.
27. RAMOS, J. I. ;*International Journal for Numerical Methods in Fluids* **1996**, 23.
28. Dasri, T. *Mathematical Models of Bead-Spring Jets during Electrospinning for Fabrication of Nanofibers*; 2012; Vol. 9.
29. Ganan-Calvo, A. M. ;*Journal of Fluid Mechanics* **1997**, 335.
30. Weller, H. G.; Tabor, G.; Jasak, H.; Fureby, C. ;*Computers in Physics* **1998**, 12, 620.
31. OpenFOAM OpenCFD Ltd <https://www.openfoam.com/>.
32. Lastow, O.; Balachandran, W. ;*Journal of Electrostatics* **2006**, 64, 850.
33. Yan, F.; Farouk, B.; Ko, F. ;*Journal of Aerosol Science* **2003**, 34, 99.
34. Lima, N. Simulação de escoamentos eletrohidrodinâmicos de fluidos newtonianos e viscoelásticos, 2013.
35. Hirt, C. W.; Nichols, B. D. ;*Journal of Computational Physics* **1981**, 39, 201.
36. Lima, N. C. Numerical Studies in Electrohydrodynamics, 2017.
37. Lima, N. C.; D'Ávila, M. A. ;*Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **2014**, 213, 1.
38. Lima, N. C.; Cavalli, A.; Mishra, K.; Mugele, F. ;*Optics Express* **2016**, 24, 4210.
39. Lima, N. C.; Mishra, K.; Mugele, F. ;*Optics Express* **2017**, 25, 6700.
40. Roghair, I.; Musterd, M.; van den Ende, D.; Kleijn, C.; Kreutzer, M.; Mugele, F. ;*Microfluidics and Nanofluidics* **2015**, 19, 465.
41. Thompson, C. J.; Chase, G. G.; Yarin, A. L.; Reneker, D. H. ;*Polymer* **2007**, 48, 6913.
42. Cloupeau, M.; Prunet-Foch, B. ;*Journal of Aerosol Science* **1994**, 25, 1021.
43. Hartman, R. P. A.; Brunner, D. J.; Camelot, D. M. A.; Marijnissen, J. C. M.; Scarlett, B. ;*Journal of Aerosol Science* **2000**, 31.
44. Jaworek, A.; Krupa, A. ;*Journal of Aerosol Science* **1999**, 30.

45. Najjaran, A.; Ebrahimi, R.; Rahmanpoor, M.; Najjaran, A. In *Applied Mechanics and Materials*; 2013; Vol. 327, pp. 180–185.
46. Collins, R. T.; Jones, J. J.; Harris, M. T.; Basaran, O. A. ;*Nature Physics* **2008**, *4*, 149.
47. Collins, R. T.; Harris, M. T.; Basaran, O. A. ;*Journal of Fluid Mechanics* **2007**, *588*, 75.
48. Lim, L. K.; Hua, J.; Wang, C. H.; Smith, K. A. ;*AIChE Journal* **2011**, *57*, 57.
49. Hayati, I.; Bailey, A. I.; Tadros, T. F. ;*Nature* **1986**, *319*, 41.
50. Shtern, V.; Barrero, A. ;*Journal of Aerosol Science* **1994**, *25*, 1049.
51. De La Mora, F. J. ;*Journal of Fluid Mechanics* **1992**, *243*, 561.
52. Favero, J. L.; Secchi, A. R.; Cardozo, N. S. M.; Jasak, H. ;*Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **2010**, *165*, 1625.
53. Favero, J. L.; Secchi, A. R.; Cardozo, N. S. M.; Jasak, H. ;*Computers and Chemical Engineering* **2010**, *34*, 1984.
54. Favero, J. L. Simulação de escoamentos viscoelásticos: desenvolvimento de uma metodologia de análise utilizando o software OpenFOAM e equações constitutivas diferenciais, 2009.
55. Doshi, J.; Reneker, D. H. ;*Journal of Electrostatics* **1995**, *35*.
56. Giesekus, H. ;*Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **1982**, *11*.
57. Bird, R. B.; Armstrong, R. C.; Hassager, O. *Dynamics of Polymeric Liquids, v. 1 - Fluid Mechanics*; 2nd ed.; 1987.
58. Bird, R. B.; Armstrong, R. C.; Hassager, O. **1987**.

SOBRE OS AUTORES



NICOLAO CERQUEIRA LIMA: Formou-se em Matemática pela Universidade Estadual de Campinas - Unicamp em 2008. Em 2010 ingressou como mestrando em Engenharia Mecânica na área de mecânica dos fluidos computacional onde desenvolveu pesquisas pioneiras no Brasil em simulações de escoamentos eletrohidrodinâmicos. Seguiu a mesma linha de pesquisa no doutorado em 2012, onde, durante este período, teve a oportunidade de trabalhar durante um ano na universidade de Twente – NL com um dos grupos mais renomados na área de electrowetting do mundo. Após a conclusão do doutorado, trabalhou como pesquisador por um ano no laboratório nacional de nanotecnologia (LNNano) com escoamentos turbulentos em microcanais. Em seguida, ingressou no pós-doutorado pela Faculdade de Engenharia Química - Unicamp para o desenvolvimento de pesquisas na área de escoamentos multifásicos para a Petrobras. Atualmente, é pós-doutor pela Faculdade de Engenharia Mecânica - Unicamp, contemplado com uma bolsa Fapesp, na área de simulação de escoamentos em meios granulares CFD-DEM.

<http://lattes.cnpq.br/9044632718064547>



MARCOS AKIRA D'ÁVILA: Possui graduação em Engenharia de Materiais pela Universidade Federal de São Carlos (1994), mestrado em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal de Santa Catarina (1997) e é Ph.D. em Engenharia Química pela University Of California at Davis (2003). Atuou como pesquisador na Faculdade de Engenharia Química da Unicamp entre 2003 e 2009 e ingressou como docente na Faculdade de Engenharia Mecânica da Unicamp em 2009, onde atualmente é Professor Associado. Suas linhas de pesquisa concentram-se nas áreas de reologia, processamento de polímeros e modelagem e simulação de processos. Nos últimos anos vem desenvolvendo pesquisas na área de biomateriais, com ênfase em processos como eletrofiliação e manufatura aditiva de hidrogéis. É bolsista produtividade em pesquisa nível 1B, tendo coordenado diversos projetos de pesquisa financiados nesta área, além de estabelecer parcerias com grupos de pesquisa no Brasil e no exterior. Possui mais de 60 artigos publicados em periódicos internacionais, com índice de citação H17 na base Scopus.

<http://lattes.cnpq.br/9149815042717233>