



# **Análise numérica do processo de separação de fases líquido-líquido em um microdispositivo por meio de técnicas de CFD utilizando o código livre OpenFOAM**

A. C. S. CAVALCANTE\* e D. A. SANTOS

Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química

\*E-mail para contato: alancaue@discente.ufg.br

**RESUMO** – Neste trabalho foi realizada uma análise numérica do processo de separação de dois líquidos imiscíveis em um microdispositivo com geração de gotas por meio do modelo multifásico de Volume de Fluidos (VOF), implementado no código livre de Fluidodinâmica Computacional (CFD) OpenFOAM®. Foram investigados os efeitos da razão entre as vazões da fase contínua (óleo) e dispersa (água) sobre a queda de pressão no dispositivo, comprimento e taxa de geração das gotas, e pureza de óleo obtida no processo de separação. Os resultados numéricos obtidos foram comparados com os dados experimentais reportados na literatura sob as mesmas condições.

## **1. INTRODUÇÃO**

A microfluídica é definida como a ciência do escoamento de fluidos em dispositivos cuja geometria é da ordem de grandeza de centenas ou milhares de micrômetros (microdispositivos), de forma que requer pequenas quantidades de amostras para a sua operação. A redução de escala se mostra de grande interesse científico, como por exemplo, na área de engenharia química, em que o projeto, a otimização, o estudo e o desenvolvimento de novos processos e produtos requer um maior controle das condições operacionais e dos fenômenos envolvidos, tais como reações químicas, transferência de massa e energia, e um menor custo de operação e de matéria prima (SANTANA *et al.*, 2019; WHITESIDES, 2006)

Os microdispositivos são utilizados em diversos processos de interesse industrial, tais como, a produção de bioetanol por transesterificação, a produção de vacinas e medicamentos, a produção de cosméticos, processos de separação e mistura, dentre outros. Com o intuito de aumentar a taxa produtiva nestes dispositivos, utiliza-se o

conceito de *numbering-up*, que consiste no arranjo de um determinado número de microdispositivos operando continuamente em paralelo.

SANCHEZ *et al.* (2015) abordaram a aplicação desses microdispositivos em reações de transesterificação para a produção de bioetanol, em que óleos vegetais reagem com álcoois de cadeia curta (etanol ou metanol), na presença de catalisadores, em uma temperatura média de 68 °C. Posteriormente, o álcool em excesso deve ser removido a uma temperatura média de 78 °C. Esse aumento de temperatura pode ser realizado individualmente por uma série de microdispositivos. Além disso, o processo de separação dos dois líquidos imiscíveis (óleos vegetais e álcool) também pode ser realizado separadamente em cada microdispositivo, conforme sugerido por LU *et al.* (2021).

BALBINO, AZZONI e LA TORRE (2013) estudaram a aplicação dos microdispositivos em um processo de produção de lipídeos catiônicos para o carregamento de moléculas de pDNA com o objetivo de produzir vacinas contra a Tuberculose. Essa técnica de entrega de genes também foi utilizada pela empresa

Pfizer/BioNTECH para a produção em escala industrial da vacina contra a COVID-19 (CARVALHO *et al.*, 2022).

XIE *et al.* (2022) estudaram a cinética de produção de piperacilina em um micro reator, cujo microdispositivo possibilitou um maior controle sobre o processo de transferência de massa e energia.

Devido ao grande avanço na capacidade de processamento e armazenamento de dados dos computadores, as ferramentas de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) vêm se tornando cada vez mais populares no estudo de fenômenos complexos envolvendo, por exemplo, escoamentos turbulentos e multifásicos, juntamente com transferência de calor e massa. (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

AROCKIAM *et al.* (2021) estudaram, tanto por meio de experimentos, quanto por meio de simulações numéricas computacionais (CFD), o processo de mistura no interior de microdispositivos. Neste caso, os microdispositivos foram confeccionados em forma de serpentina para potencializar o processo de mistura, visto que os microdispositivos são caracterizados por possuir baixos números de Reynolds.

DASH *et al.* (2016) aplicaram as técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) no estudo do processo de separação dieletrorética contínua de nanopartículas de

ouro carregadas em um microdispositivo. Neste estudo, foi possível analisar a eficiência de separação em função das variáveis envolvidas no processo.

Com base no exposto, o presente trabalho tem por objetivo a aplicação de técnicas de CFD, utilizando o código livre OpenFOAM, no estudo do processo de separação de fluidos imiscíveis em um microdispositivo com geração de gotas. Os resultados simulados serão comparados com os dados experimentais reportados por LU *et al.* (2021). Ressalta-se que Lu *et al.* (2021) também realizaram algumas simulações CFD, porém utilizando o *software* comercial FLUENT®.

## 2.MATERIAIS E MÉTODOS

### 2.1 Geometria do Microdispositivo

A geometria do microdispositivo utilizada neste trabalho foi baseada no trabalho de LU *et al.* (2021), cujo esquema é mostrado na Figura 1. Como destacado na Figura 1, o dispositivo possui uma junção em T na região de mistura dos fluidos (fase contínua e fase dispersa) e dois canais de saída, sendo estes o canal de saída principal e o secundário. Os pontos utilizados para a medida da queda de pressão também estão destacados na Figura 1.

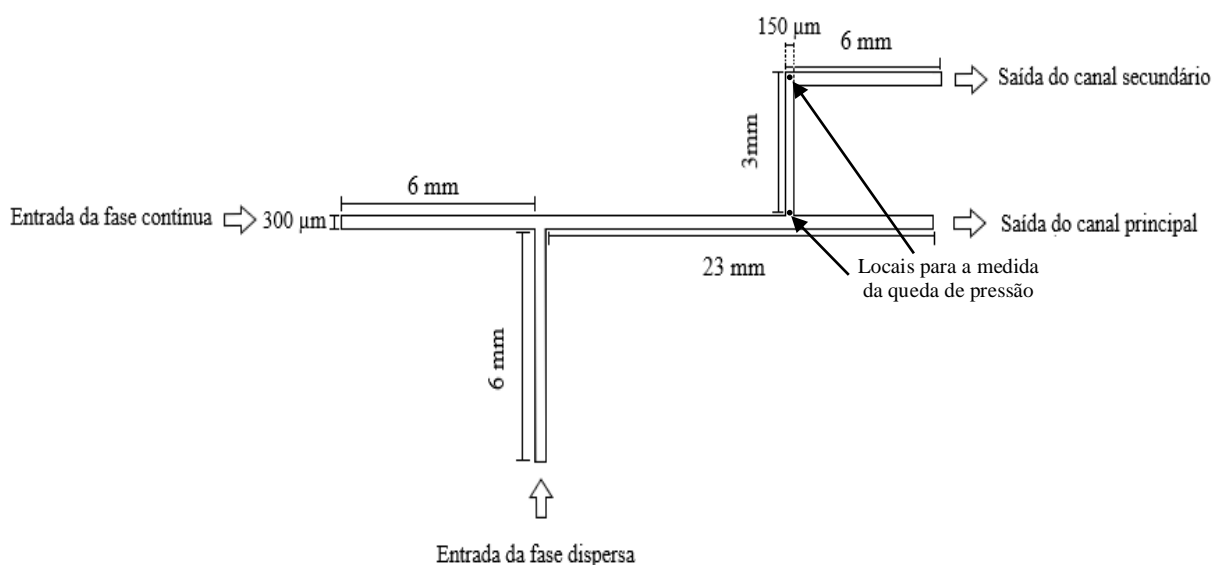


Figura1 – Geometria do microdispositivo utilizada neste trabalho (adaptado de LU *et al.*, 2021).

## 2.2. Modelo Multifásico de Volume de Fluido (VOF)

Para a realização das simulações numéricas, foi utilizado o modelo multifásico Euleriano de Volume de Fluido (VOF), no qual foram empregados os fluidos água e óleo como as fases dispersa e contínua, respectivamente. As Equações 1, 2 e 3 representam, respectivamente, a equação de conservação da quantidade de movimento, compartilhada por ambas as fases, e da conservação da massa para as fases água e óleo.

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v})V = -\nabla P + \nabla \cdot [\mu(\nabla\vec{v} + \nabla\vec{v}^T)] + \rho\vec{g} + \vec{F} \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\alpha_w\rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_w\rho_w\vec{v}_w) = 0 \quad (2)$$

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

sendo  $\rho$ ,  $\rho_w$ ,  $\rho_o$ ,  $\vec{v}$ ,  $\vec{v}_w$ ,  $\vec{v}_o$ ,  $P$ ,  $\vec{g}$ ,  $\mu$ ,  $\alpha_w$ ,  $\alpha_o$  e  $\vec{F}$  a densidade da mistura dos fluídos, a densidade da água, a densidade do óleo, o vetor velocidade da mistura, o vetor velocidade da água, o vetor velocidade do óleo, a pressão, a aceleração da gravidade, a viscosidade da mistura dos fluidos, a fração volumétrica de água, a fração volumétrica de óleo e a força interfacial, respectivamente.

Além disso, para se determinar a interface entre as fases, foi utilizado o método da força de superfície contínua (LU *et al.*, 2021), apresentada pela Equação 4, sendo  $\kappa$  a curvatura da superfície entre os dois líquidos e  $\sigma$  a tensão superficial.

$$F = \sigma\kappa.\alpha \quad (4)$$

## 2.3. Metodologia numérica e condições de contorno e operacionais

Para a realização de todas as simulações numéricas bidimensionais (2D), foi empregado o código livre (aberto) OpenFOAM<sup>®</sup>, versão 5.x. O tratamento e análise dos resultados foi feito por meio do *software* livre (aberto) de tratamento de dados ParaView<sup>®</sup>, versão 5.8.1. A construção da

geometria do microdispositivo, assim como da malha computacional, foi realizada através do *software* livre (aberto) Gmsh<sup>®</sup>.

Como fase dispersa, adotou-se neste trabalho a água ( $\rho_w = 998,2 \text{ kg.m}^{-3}$ ;  $\mu_w = 0,001 \text{ Pa.s}$ ), enquanto o óleo foi tratado como a fase contínua ( $\rho_o = 910,93 \text{ kg.m}^{-3}$ ;  $\mu_o = 0,068 \text{ Pa.s}$ ). A tensão interfacial foi fixada em um valor de  $0,0020 \text{ N/m}$  e o ângulo de contato entre o óleo (fase contínua) e a parede do microdispositivo foi fixado em  $180^\circ$ . Foi investigado o efeito da vazão volumétrica da fase contínua, variando de  $0,5 \text{ mL/h}$  a  $2,5 \text{ mL/h}$ , enquanto a vazão de entrada da fase dispersa foi mantida constante no valor de  $1,0 \text{ mL/h}$ , sobre o processo de separação água-óleo.

A eficiência do processo de separação do microdispositivo foi avaliada por meio do valor da fração volumétrica média do óleo na saída secundária (pureza do óleo), definida, aqui, como sendo a integral de área da fração volumétrica de óleo ao longo da seção transversal, dividida por esta área. Desta forma, objetivou-se, aqui, a obtenção da maior pureza possível desse componente ao fim do processo. Além disso, foi avaliada a queda de pressão no canal de separação, na qual foram criados pontos (sondas) nas posições mostradas na Figura 1, em que os valores de pressão foram medidos ao longo do tempo. Foram medidos, também, o comprimento e a taxa de geração de gotas para cada condição de velocidade analisada. Para isso, um tempo de simulação total de  $10 \text{ s}$  foi empregado para cada condição operacional, sendo que os últimos  $5 \text{ s}$  foram utilizados para o cálculo da média da fração volumétrica e da queda de pressão. Foi empregado um passo de tempo (*time step*) adaptativo a fim de manter o número adimensional de Courant menor do que  $0,25$  e evitar instabilidades numéricas. Para o acoplamento pressão-velocidade, utilizou-se do algoritmo PIMPLE. Esquemas de discretização de segunda ordem foram aplicados para os termos divergente, Laplaciano e gradiente em todas as equações de transporte, enquanto o esquema de Euler (primeira ordem) foi aplicado para os termos transientes.

Para avaliar o efeito da malha computacional sobre os resultados das simulações, realizou-se um teste de independência de malhas, no qual diferentes refinamentos foram testados sob as mesmas condições operacionais. Dessa forma, cinco diferentes malhas foram criadas com as seguintes quantidades de células

computacionais: 8.748, 12.280, 16.416, 17.706 e 19.383. Todas as malhas possuíam elementos quadriláteros com níveis de não-ortogonalidade, razão de aspecto e simetria (*skewness*) adequados, conforme ilustrado na Figura 2, onde se destaca a região de mistura dos fluidos.

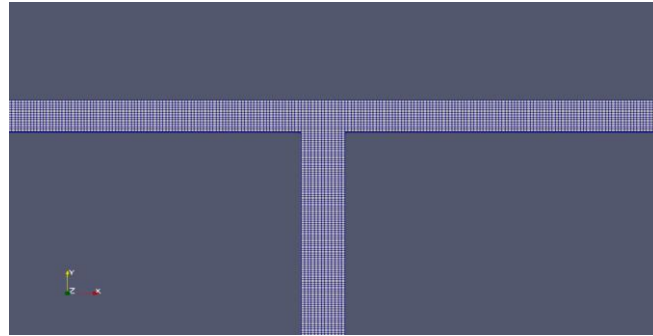


Figura 2 – Ilustração da malha computacional do microdispositivo, destacando a região de mistura dos fluidos.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

#### 3.1 Efeito do refino da malha computacional sobre o comprimento das gotas no microdispositivo

A Tabela 1 apresenta os valores simulados dos comprimentos das gotas de água em óleo em função do número de células computacionais, sob diferentes condições de vazão da fase contínua e vazão da fase dispersa de 1,0 mL/h, juntamente com os valores experimentais (LU *et al.*, 2021).

Após a realização do teste de independência de malhas, foi possível verificar, a partir da Tabela 1, que a malha computacional contendo 17.706 células apresentou o segundo menor erro médio (9,2%), quando comparado com os valores dos comprimentos de gotas experimentais sob as vazões de 0,5 mL/h e 2,5 mL/h. A malha contendo 19.383 células apresentou um erro médio de 8,1%. Portanto, não houve uma variação significativa no resultado médio

Tabela 1 – Comprimento de gotas de água em óleo simulado em função do número de células computacionais sob diferentes condições de vazão da fase contínua e vazão da fase dispersa de 1,0 mL/h, juntamente com os valores experimentais (LU *et al.*, 2021).

Vazão de entrada da fase contínua (mL.h <sup>-1</sup> )	Número de células	Comprimento da gota simulado (µm)	Comprimento da gota experimental (µm) LU <i>et al.</i> (2021)	Erro relativo (%)
0,5	8748	1035,95	1179,96	12,20
	12280	1065,45		9,70
	16416	1141,70		3,24
	17706	1148,05		2,70
	19383	1128,99		4,32
2,5	8748	442,70	369,40	19,84
	12280	413,92		12,05
	16416	429,59		16,29
	17706	427,72		15,79
	19383	413,58		11,96

quando a malha contendo 17.706 células foi refinada. Logo, esta malha foi utilizada no estudo do processo de separação, por possuir a maior vantagem entre o custo computacional e o erro relativo médio.

A Figura 3 mostra os resultados simulados da geração de gotas de água em óleo com a malha computacional escolhida (17.706 células), juntamente com os dados experimentais de LU *et al.* (2021), sob as

mesmas condições. Para a obtenção das Figuras 3 c e 3 d, utilizou-se de um microscópio óptico acoplado a uma câmera fotográfica com o posterior tratamento de imagens (LU *et al.*, 2021). Por meio da Figura 3, pode-se observar uma satisfatória concordância entre os dados experimentais e os resultados numéricos.

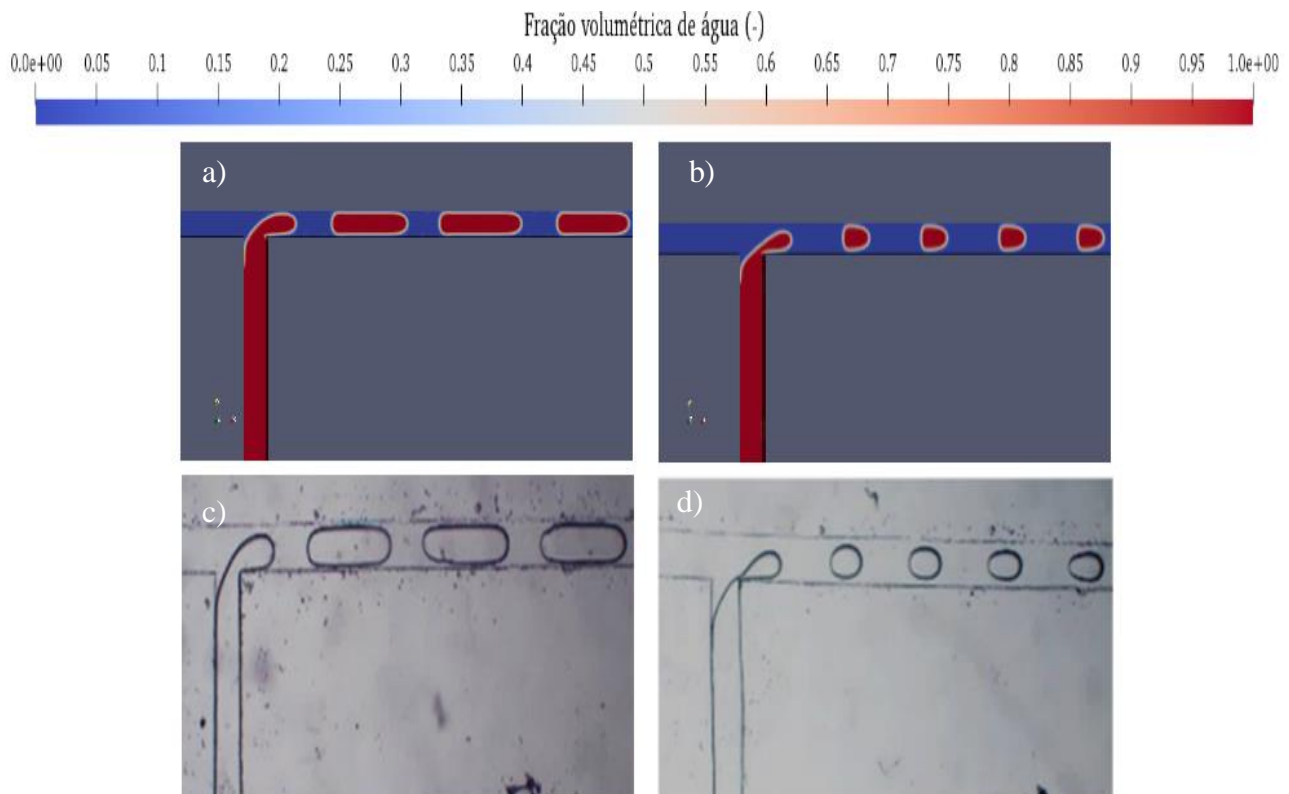


Figura 3 – Comparação entre os resultados simulados de geração de gotas de água em óleo para diferentes valores da vazão volumétrica da fase contínua (fase dispersa a 1,0 mL/h): a) simulado com fase contínua a 0,5 mL/h; b) experimental com fase contínua a 0,5 mL/h (LU *et al.*, 2021); c) simulado com fase contínua a 2,5 mL/h; d) experimental com fase contínua a 2,5 mL/h (LU *et al.*, 2021).

### 3.2. Efeito da vazão de entrada da fase contínua sobre a queda de pressão e pureza de óleo no microdispositivo

A fim de avaliar o efeito da vazão de entrada da fase contínua sobre a queda de pressão no canal de separação e na pureza de óleo na saída do canal secundário (Figura 1), foram aferidos os valores dessas propriedades em cinco diferentes condições de vazão de entrada: 0,75 mL/h, 1,19 mL/h, 1,63 mL/h, 2,06 mL/h e 2,50 mL/h. Tais resultados são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2 – Queda de pressão e pureza de óleo em função da vazão de entrada da fase contínua; vazão da fase dispersa de 1,0 mL/h.

Vazão volumétrica da fase contínua (mL.h <sup>-1</sup> )	Queda de pressão (Pa)	Pureza de óleo no canal secundário (%)
0,75	448,03	99,62
1,19	641,54	99,68
1,63	795,37	99,50
2,06	952,16	99,55
2,50	1113,10	99,62

Observa-se na Tabela 2 que, como esperado, a queda de pressão foi significativamente influenciada pela velocidade de entrada da fase contínua. Um aumento total de 233% no valor da velocidade causou um aumento de 148% no valor da queda de pressão.

Por outro lado, não houve variação significativa no valor da pureza de óleo na saída do canal secundário com o aumento da vazão volumétrica da fase contínua. Em todos os casos, o uso do canal secundário para a separação foi suficiente para se atingir um valor de pureza de óleo acima de 99%. Valores similares de pureza de separação também foram reportados por Lu *et al.* (2021). Porém, a queda de pressão no canal

secundário se mostrou elevada pra todos os casos, evidenciando uma perda de carga significativa. Na Figura 4 é mostrada a região do canal de separação para todas as condições de vazão volumétrica utilizadas. Observa-se, através da Figura 4, uma satisfatória separação do óleo no canal secundário, enquanto a maior parte da água é coletada no canal principal. Apesar do alto valor de queda de pressão, as forças de pressão e capilaridade agindo no canal secundário não foram suficientes para superarem as forças de tensão superficial agindo sobre as superfícies das gotas ao ponto de as romperem, como pode ser melhor observado nas Figuras 4c e 4e, no ponto de divisão dos canais.

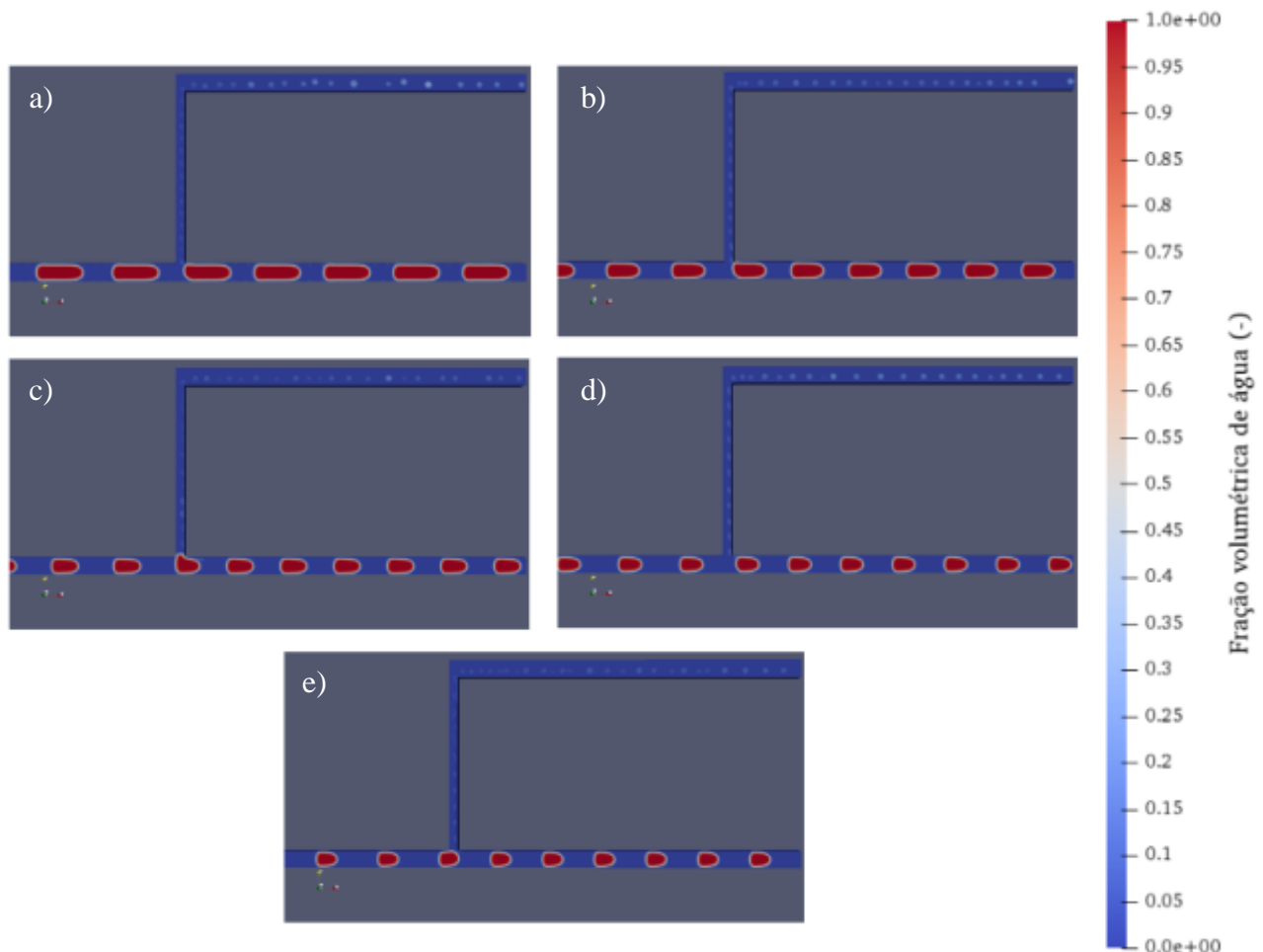


Figura 4 – Distribuição das frações volumétricas da água simulada para diferentes valores de vazão volumétrica da fase contínua (vazão da fase dispersa de 1,0 mL/h): a) 0,75 mL/h; b) 1,19 mL/h; c) 1,63 mL/h; d) 2,06 mL/h; e) 2,50 mL/h.

### 3.3. Efeito da vazão de entrada da fase contínua sobre o comprimento e a taxa de geração das gotas

A taxa de geração de gotas de água em óleo, definida como o número de gotas geradas por unidade de tempo, foi calculada para diferentes vazões volumétricas da fase contínua, cujos resultados estão dispostos na Tabela 3 e na Figura 5 a seguir.

Tabela 3 – Taxa de geração de gotas de água em óleo simulada para diferentes vazões volumétricas da fase contínua

Vazão volumétrica da fase contínua (mL/h)	Taxa de geração de gotas ( $s^{-1}$ )	Comprimento das gotas ( $\mu m$ )
2,50	41,00	427,72
2,06	35,33	494,13
1,63	29,67	530,64
1,19	23,00	644,79
0,75	15,67	867,00

A partir da Tabela 3 e da Figura 5, é possível verificar que a taxa de geração de gotas é diretamente proporcional à vazão da fase contínua, enquanto que o comprimento da gota é inversamente proporcional à mesma. Isto se deve ao aumento da força de cisalhamento da fase contínua sobre a fase dispersa na região de mistura do microdispositivo, o que faz com que a gota seja “quebrada” com maior frequência, aumentando, assim, a sua taxa de geração e diminuindo o seu comprimento.

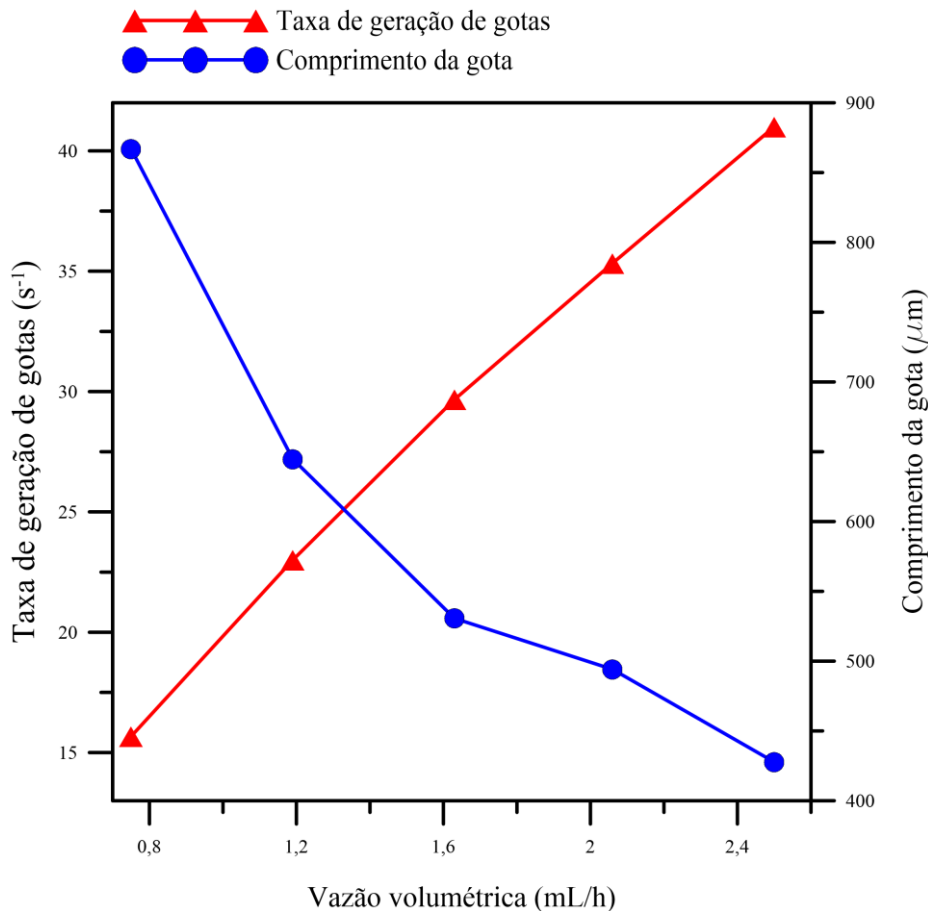


Figura 5 – Comprimento e taxa de geração das gotas de água em óleo em função da vazão volumétrica da fase contínua (vazão da fase dispersa de 1,0 mL/h).

#### 4. CONCLUSÃO

Foi possível estudar o processo de separação de fluidos imiscíveis em um microdispositivo com geração de gotas por meio de simulações CFD utilizando o código livre OpenFOAM. Os resultados simulados foram validados por meio de dados experimentais reportados na literatura. Investigou-se o efeito da vazão volumétrica da fase contínua sobre a taxa de geração e comprimento das gotas de água em óleo, da queda de pressão no canal de separação e da pureza de separação do óleo.

Por um lado, a queda de pressão no canal de separação foi significativamente influenciada pela velocidade de entrada da fase contínua. Por outro lado, não houve variação significativa no valor da pureza de óleo obtida com o aumento da vazão volumétrica da fase contínua. Em todos os casos, o uso do canal secundário para a separação foi suficiente para se atingir um valor de pureza de óleo acima de 99%. Porém, a queda de pressão no canal secundário se mostrou elevada pra todos os casos, evidenciando uma perda de carga significativa. Por fim, a taxa de geração de gotas se mostrou diretamente proporcional à vazão da fase contínua, enquanto que o comprimento da gota se mostrou inversamente proporcional à mesma.

#### 5.REFERÊNCIAS

- AROCKIAM, S.; CHENG, Y. H.; ARMENANTE, P.M., BASURAY, S. (2021); Experimental determination and computational prediction of the mixing efficiency of a simple, continuous, serpentine-channel microdevice, *Chemical Engineering Research and Design*, Volume 167, Pages 303-317.
- BALBINO, T. A.; AZZONI, A. R.; LA TORRE, L. G. (2013); Microfluidic devices for continuous production of DNA/cationic liposome complexes for gene delivery and vaccine therapy, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, Volume 111, Pages 203-210.
- DASH, W.; MOHANTY, S.; PRADHAN, S.; MISHRA, B.K. (2016); CFD design of a microfluidic device for continuous dielectrophoretic separation of charged gold nanoparticles, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Volume 58, Pages 39-48.
- LU, I.L.; ONG, Y.S.; KUSHAARI, K. Z.; WONG, V.L.; RAMASAMY, M. G. (2022). Numerical CFD investigation of liquid-liquid two-phase flow separation in a microseparator, *Separation Science and Technology*, 57:9.
- SANCHEZ, G.B.; SANTANA, H. S.; TORTOLA, D.S.; TARANTO, O. P. (2015); "Desenvolvimento de um sistema de aquecimento baseado em placa de Peltier para microdispositivos ", p. 2457-2462. In: *Anais do XI Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica [Blucher Chemical Engineering Proceedings, v. 1, n.3]. ISSN Impresso: 2446-8711. São Paulo: Blucher.*
- SANTANA H. S.; SILVA, J. L.; TARANTO O. P (2019). editors. *Process Analysis, Design, and Intensification in Microfluidics and Chemical Engineering*. IGI Global.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, E (2000). an introduction to computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Journal*, v. 77, p. 143-151.
- WHITESIDES, G. M (2006). The origins and the future of microfluidics. *Nature*, v. 442, p. 368-373.
- XIE Y.; FENG, M.; ZHANG, M.; HU, W.; HUANG, J.; WANG, Y.; LUO, G. (2022); Kinetics model of piperacillin synthesis in a microreactor, *Chemical Engineering Science*, Volume 259.