

1 INTRODUÇÃO

O processo de agitação e mistura é fundamental em muitas operações unitárias comuns a indústria química, e consiste na operação básica em outros processos tais como a troca de calor, para a obtenção de uma distribuição uniforme de temperatura, sendo também importante para as reações químicas, uma vez que permite um melhor contato entre os reagentes.

Em diferentes ramos do conhecimento, existem ocasiões em que pequenos volumes de produtos precisam ser manipulados, dentre os quais se podem citar as análises químicas, físicas, biológicas e médicas. Nessas se faz necessário um íntimo contato entre a amostra e o reagente utilizado para que se consiga uma boa homogeneidade da mistura.

É possível ter misturas homogêneas ou misturas multifásicas, por exemplo, dispersões líquido/líquido e gás/líquido, as quais são processamentos importantes também na indústria química, no processamento de alimentos, na indústria farmacêutica e de cosméticos.

Frente a este cenário surge a aplicação de micromisturadores, os quais permitem uma mistura rápida e eficiente em uma variedade de tarefas, que incluem mistura, emulsificação, suspensão, e também reações químicas e sistemas de troca térmica.

Os dispositivos utilizados, atualmente, são operados em condições contínuas e devido às pequenas dimensões dos microcanais o regime de escoamento resultante é predominantemente laminar, no qual o processo de mistura se dá principalmente pela difusão molecular. De maneira a misturar efetivamente em um tempo razoável, os fluidos devem ser manipulados de tal maneira que a área da superfície interfacial entre eles aumente, com isso, reduzindo a distância difusional, melhorando a difusão molecular para auxiliar no processo de mistura (EHRFELD; HESSEL; LÖWE, 2000).

Diversos mecanismos existem para promover o contato e a íntima mistura entre os fluidos, incluindo: a multilaminação, divisão e recombinação, enfoque

hidrodinâmico, junções –T e –Y (EHRFELD; HESSEL; LÖWE, 2000), convecção caótica (BEEBE et al, 2001; LIU et al., 2000; STROOCK et al., 2002), na qual partículas do fluido avançam por um campo de velocidade laminar e apresentam trajetórias caóticas, injeção periódica, injeção em uma corrente principal, transporte de massa forçada e a colisão de alta energia conforme exemplificado na Figura 1.

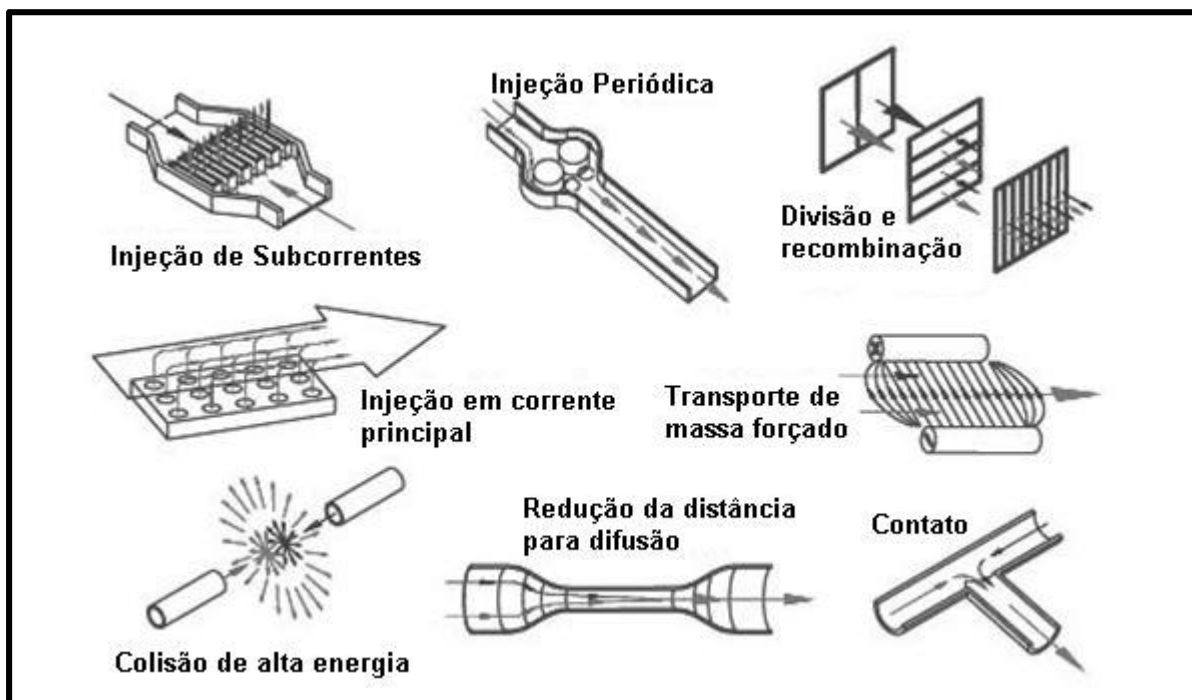


Figura 1 - Mecanismos para melhorar o contato e a mistura entre duas ou mais correntes de fluidos.

Na Figura 2, é possível visualizar o esquema da geometria proposta por Liu et al. (2000) para gerar a advecção caótica em seu interior.

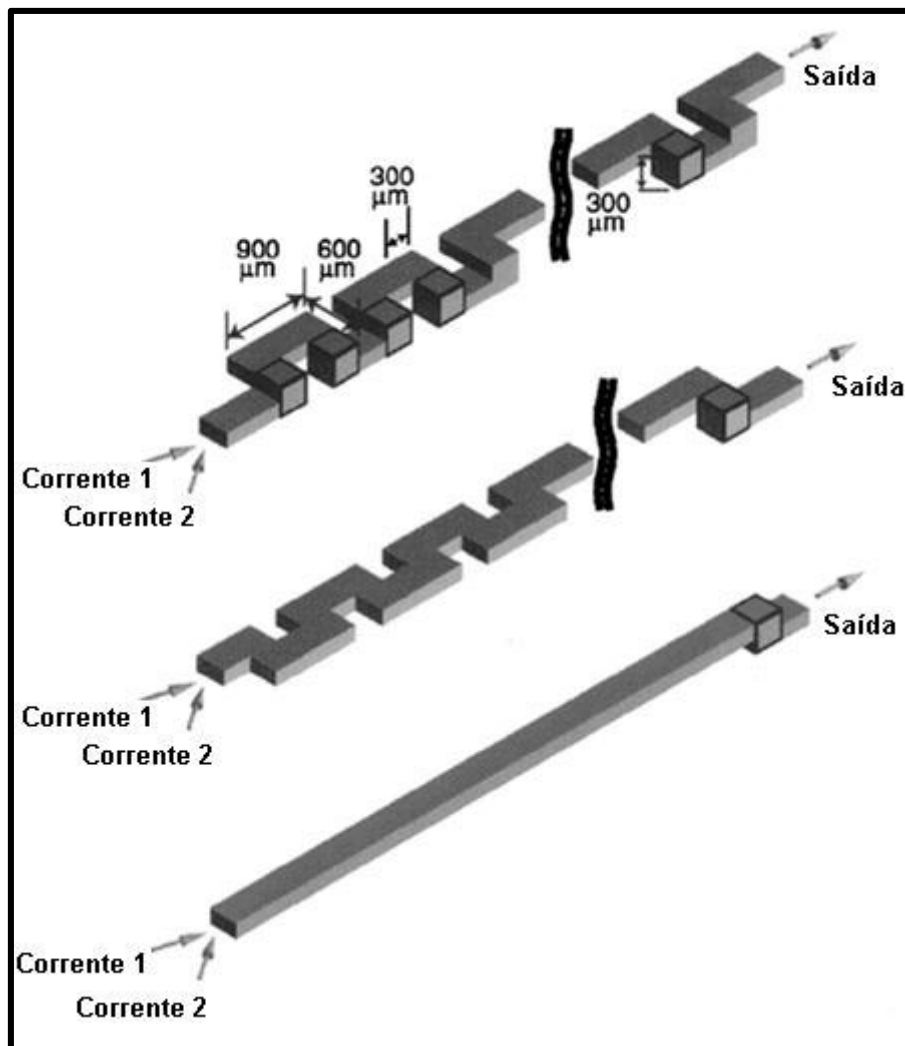


Figura 2 - Esquema do micromisturador serpentina 3-D (LIU et al., 2000).

Na Figura 3 é apresentada uma fotografia do equipamento fabricado, ao contrário do que acontece com a geometria preconizada, o micromisturador construído não apresenta seção transversal completamente retangular.

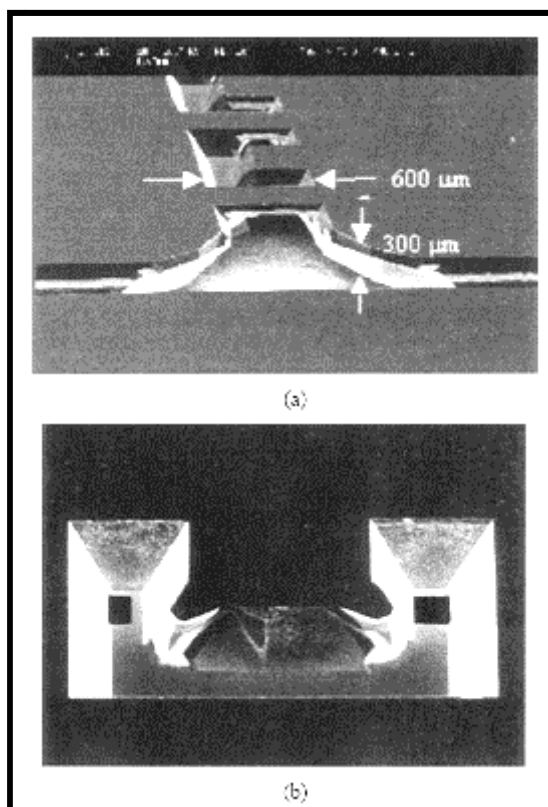


Figura 3 - Canal do micromisturador serpentina 3-D (LIU et al., 2000).

Devido à relativa pouca idade do estudo de micromisturadores, regras usuais para o projeto de micromisturadores ainda não foram desenvolvidas. Entretanto, à parte de seu tamanho diminuto, os micromisturadores são meramente reatores contínuos de escoamento laminar, o que sugere que a abordagem para o projeto com o objetivo de mistura em microcanais deva ser tratada de maneira similar àqueles de mistura laminar em escala macro com escoamento em dutos.

Em um escoamento laminar não perturbado, as linhas de corrente correm paralelas umas as outras e não há mistura convectiva nas direções radial e tangencial, o que resulta em um baixo grau de homogeneidade espacial.

Além disso, o perfil parabólico de velocidade do escoamento laminar em dutos circulares gera uma falta de homogeneidade, a qual se traduz em larga distribuição de tempo de residência. Portanto, de maneira a perturbar o escoamento e facilitar a mistura em um escoamento laminar em uma tubulação, dispositivos em linha ou misturadores estáticos podem ser inseridos no canal.

Os melhores projetos dos misturadores estáticos alteram o perfil de velocidade do escoamento, e dessa maneira reduzem a falta de homogeneidade radial, atingindo homogeneização espacial.

Para um micromisturador, a geração de componentes transversais para o escoamento é uma boa maneira de produzir a convecção caótica. As componentes transversais podem estirar e dobrar volumes do fluido sobre a seção transversal do canal. Usualmente, estruturas tridimensionais são utilizadas para criar efeitos transversais. Stroock et al. (2000) utilizavam estruturas em baixo relevo no piso do canal para fazer o escoamento rotacionar em uma trajetória helicoidal. Park et al. (2004) utilizaram o método de dispersão para aprimorar o desempenho de um micromisturador.

Estiramento e dobra, difusão e a dispersão ou dissolução são três processos básicos que ocorrem durante a agitação de fluidos. Embora o estiramento e dobra da interface dos dois fluidos devido à rotação permita a mistura na micro-escala tanto para baixos quanto para altos números de Reynolds, a rotação não é tão eficiente para baixos números de Reynolds como é para os altos. Portanto, para melhorar a eficiência de mistura de um micromisturador baseado em rotação passiva, Park et. al (2004) apresentam o método da dispersão.

A difusão ocorre naturalmente quando na mistura de dois ou mais fluidos existe um grande gradiente de concentrações. O processo de estiramento e dobra é gerado pela convecção (por exemplo, rotação). A ação combinada de estiramento e dobra produz finas estrias enquanto que o processo de dispersão produz pequenas gotas, conforme verificado na Figura 4.

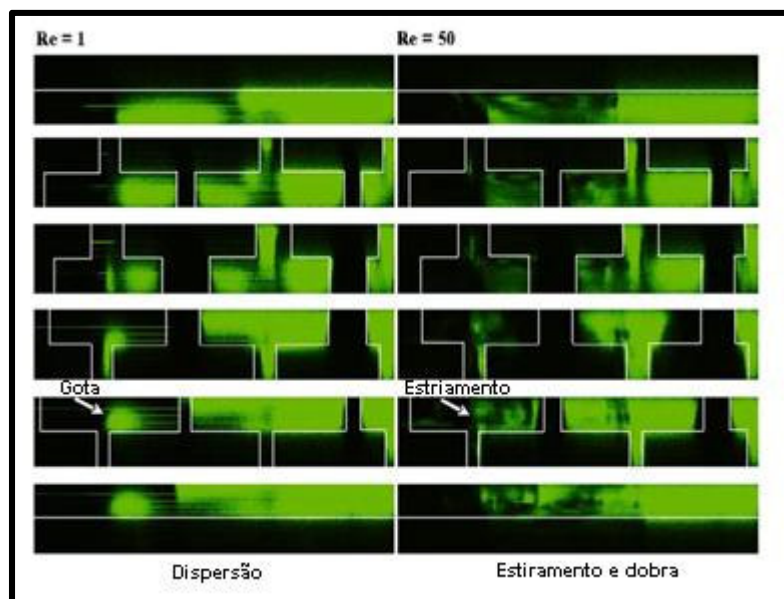


Figura 4 - Perfil de mistura: esquerda, processo de dispersão; direita, processo de estiramento e dobra. Enquanto que um pequeno fragmento de gota foi gerado para um baixo número de Reynolds, o estiramento foi dominante para um número de Reynolds mais alto. (PARK et al., 2004)

Com o objetivo de caracterizar o desempenho da mistura de dispositivos estáticos de grande escala, inúmeros métodos são comumente utilizados, entre eles: o coeficiente de variação e a intensidade de segregação (HOBBS; MUZZIO, 1997, 1998; MICKAILY-HUBER et al., 1996; RAULINE et al., 2000; ZALC et al., 2002), seções de Poincaré (HOBBS; MUZZIO, 1998), espessura de estiramento (FOURCADE et al., 2001) e distribuições de tempo de residência (HOBBS; MUZZIO, 1997; NAUMAN, KOTHARI; NIGAM et al., 2002; VISSER et al., 1999). Estes podem ser levantados experimentalmente e/ou numericamente – a abordagem numérica pode ser encontrada, por exemplo, em Aubin et al. (2003).

Recentemente, alguns pesquisadores estudaram uma variedade de novos esquemas para agitar o escoamento para mistura em sistemas microfluídicos. Estes estudos incluem muitos micromisturadores ativos e micromisturadores passivos. Em comparação com os misturadores ativos, os micromisturadores passivos não necessitam de partes móveis, e a mistura é obtida pelo movimento natural do fluido conforme ele atravessa os elementos de mistura do micromisturador. Entretanto, os micromisturadores ativos precisam ser providos de acessórios para fornecer forças externas, e não são facilmente integrados a outros sistemas microfluídicos.

Assim como os misturadores estáticos, os micromisturadores utilizam parte da energia do próprio escoamento para promover a mistura, isto é traduzido na forma de uma perda de pressão, comumente conhecido como perda de carga.

Com isso, para melhor caracterizar um micromisturador pode-se utilizar de dois parâmetros principais, sua eficiência de mistura e a perda de carga que o mesmo irá inserir no sistema, permitindo dessa maneira que o projetista de uma nova unidade, além de fazer a melhor escolha para o seu sistema, possa dimensionar o sistema de transferência dos reagentes, o qual irá necessitar de uma bomba.

O desconhecimento da perda de carga de uma das partes de um sistema incorre em dois grandes riscos, o primeiro de não se atingir a vazão de projeto e o segundo de ocorrer à vaporização de um dos reagentes.

1.1 OBJETIVOS

A proposta deste trabalho é identificar a qualidade da mistura, a qual resulta da passagem de dois fluidos de propriedades físicas similares ao passarem no interior de micromisturadores aplicando a ferramenta conhecida como dinâmica dos fluidos computacional.

Para alcançar o objetivo principal do trabalho algumas etapas deverão ser efetuadas entre elas pode-se citar:

- Revisão bibliográfica das principais aplicações de micromisturadores e as principais técnicas numéricas utilizadas para a caracterização de seu desempenho para o fim de misturar fluidos;
- Testes com o software ANSYS CFX para verificar a viabilidade do estudo aplicando a técnica dos volumes finitos;
- Geração das geometrias e malhas dos micromisturadores utilizados no projeto de Costa (2003) e Cunha (2007);
- Simulação com quatro vazões de operação em regime laminar.

Serão estudados os micromisturadores utilizados no projeto de Costa (2003) através do levantamento da qualidade da mistura obtida pela passagem por estes dispositivos de dois fluidos de propriedades físicas semelhantes a da água e com a difusividade com ordem de grandeza conforme apresentado em Bennett e Myers (1978).

Existem algumas técnicas numéricas que podem ser aplicadas para o levantamento da qualidade da mistura: injeção de partículas e acompanhamento da trajetória, levantamento do tempo de residência por injeção de estímulo e resposta, levantamento da tensão de cisalhamento; entre outras. Neste trabalho dá-se ênfase no cálculo da qualidade da mistura como definida por Kockmann, Föll e Woias (2003).

Além disso, buscar-se-á avaliar dentre as geometrias simuladas qual teria o melhor desempenho para efetuar a mistura.

1.2 JUSTIFICATIVA

Um dos focos dado ao estudo de novos processos é com relação a sua intensificação, ou seja, na redução de escala. Este enfoque tem como objetivo a criação de processos menores e ao mesmo tempo mais seguros, sem que com isso haja redução do rendimento, e, portanto, podendo ser entendidos como mais eficientes.

Um dos processos que está sendo estudado, atualmente, e que será discutido neste trabalho são os micromisturadores, os quais possuem diversas aplicações entre elas a mistura de fluidos para a produção de emulsões com estreita distribuição do tamanho das gotículas.

O material com o qual estes dispositivos são fabricados, e principalmente as técnicas utilizadas para sua fabricação costumam ser caras, e por isso realizar o desenvolvimento dos mesmos por meio de testes em laboratório das diferentes

configurações pode ser uma tarefa onerosa, além dos gastos com os fluidos utilizados nos testes.

Além dos fatores econômicos levantados anteriormente, há a questão do tempo despendido com estes ensaios. Tendo em vista estas duas restrições propõe-se a utilização da ferramenta conhecida como dinâmica dos fluidos computacional, a qual permite uma série de simulações numéricas ao invés de testes em laboratório as quais reduzem o tempo e o investimento para o desenvolvimento de um novo equipamento.

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação está estruturada em seis capítulos, no primeiro fez-se uma introdução a respeito do interesse no estudo dos micromisturadores. No segundo capítulo, procurou-se demonstrar através da revisão bibliográfica os diferentes aspectos estudados com relação aos micromisturadores e como a dinâmica dos fluidos computacional pode auxiliar nessa tarefa. No capítulo 3 é abordada a metodologia aplicada no presente trabalho para o estudo dos micromisturadores, desde a criação da geometria até o pós-processamento dos resultados. No capítulo 4 são apresentados os resultados de um estudo preliminar das possíveis técnicas que seriam utilizadas para avaliar as geometrias de interesse. No quinto capítulo são mostrados os resultados da simulação dos micromisturadores M1, M2 e M3. E por fim, o capítulo 6 apresenta algumas conclusões com respeito à eficiência e ao funcionamento dos micromisturadores.