

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo irá se tratar alguns conceitos, os quais devem ser abordados quando do estudo de equipamentos utilizados para promover a mistura entre dois fluidos utilizando técnicas numéricas, como a dinâmica dos fluidos computacional.

### 2.1 INTENSIFICAÇÃO DE PROCESSO

O termo “intensificação de processo” foi criado nos anos 70 para descrever algumas idéias as quais surgiam com relação a algumas operações unitárias, em particular a transferência de massa gás-líquido. Esta nova abordagem foi preconizada por Colin Ramshaw da ICI e levantou a possibilidade de plantas químicas muito menores (intensificada) o que significaria plantas mais baratas e mais seguras do que as existentes.

No artigo de Ramshaw (1983) ele estudou um sistema para melhorar o contato entre o líquido e o gás em uma coluna de destilação. Ele começou ignorando os equipamentos existentes e começou a partir de um pedaço de papel, para considerar os pontos chaves em cada etapa. A destilação, por exemplo, está totalmente relacionada à transferência de massa entre o líquido e o gás, e não é difícil de listar os pontos principais para um dado sistema de transferência de massa: boa mistura entre as fases líquida e gás; grande área de superfície interfacial; fino filme líquido e operação contracorrente.

O ponto chave neste caso era a espessura do filme líquido e os fenômenos físicos que a controlavam. Algumas equações suficientemente precisas descrevem esse fenômeno e apesar da maioria dos fatores estarem relacionados às propriedades físicas do fluido, um dos fatores é independente;  $g$ , a gravidade. Quanto maior a gravidade aplicada, mais fino é o filme e menor poderia ser o

recheio da coluna. Isto resulta em uma grande área superficial por volume para a transferência de massa, isto é, uma planta intensificada. De maneira a elevar a gravidade o efeito centrípeto de rotacionar o recheio foi realizado por uma máquina resultando na redução de uma ordem de grandeza no tamanho do equipamento.

O que é importante sobre a transferência de massa com elevada aceleração da gravidade é o pensamento no processo que levou a este desenvolvimento, ao invés do valor do dispositivo em si. A abordagem nesta linha de pensamento envolveu o entendimento das principais variáveis que servem de base para a transferência de massa e então a construção de uma máquina que gerasse as condições para se alcançar um aumento na transferência de massa.

Em termos gerais, foi sobre conhecer o processo (uma reação, uma cristalização, etc.) com aprofundamento suficiente de maneira tal que os pontos que controlam a velocidade das etapas fossem entendidos e com isso ligando o processo ao correto processador.

A intensificação de processos também pode ser entendida como a miniaturização de operações unitárias e processos de maneira que um pequeno pedaço compacto de equipamento tome o lugar de um maior, mantendo a mesma capacidade, vazão mássica ou rendimento.

Como parte dos custos de uma planta química estão ligados aos equipamentos do processo, uma menor quantidade de aço estrutural, dutos, conduites e cabos reunidos em menores unidades operacionais significam menor custo de instalação de uma planta.

## 2.2 MICROFLUÍDICA

A microfluídica trata do comportamento, controle e manipulação de microlitros ou nanolitros de fluidos. É um campo multidisciplinar integrando física, química, microtecnologia e biotecnologia com aplicação prática ao projeto de sistemas nos quais esses pequenos volumes de fluidos serão aplicados. A

microfluídica se refere ao escoamento de fluido em microcanais assim como aos dispositivos microfluídicos (bombas, válvulas, misturadores, etc.) e sistemas.

A microfluídica se preocupa com diversos aspectos: redução no tamanho dos equipamentos, controle de pequenas quantidades de fluidos, redução no consumo de reagentes, desenvolvimento de sistemas integrados, redução no consumo de energia, maior segurança, maior integração e multifuncionalidade, criação de dispositivos portáteis e de uso amigável.

Na microfluídica são estudados: os fenômenos envolvidos, os componentes necessários e os sistemas que podem ser construídos e as suas aplicações. Para o estudo do escoamento dos fluidos são utilizadas as equações da continuidade e de Navier-Stokes e devem-se definir as condições iniciais e de contorno para que se consiga resolver o problema. Na microfluídica, muitas vezes, acaba-se utilizando para estes modelos fluidos Newtonianos isotrópicos, ou seja, os quais as propriedades são idênticas em qualquer direção.

O comportamento dos fluidos na escala micro pode ser diferente do comportamento na escala macro em alguns aspectos tais como tensão superficial, dissipação de energia e a resistência fluídica começa a dominar o sistema. Os estudos da microfluídica mostram como esses comportamentos mudam, e como eles podem ser superados, ou explorados para novos usos.

A metodologia aplicada gera algumas questões com relação ao escalonamento, a hipótese de contínuo e as forças de superfície. Com relação ao escalonamento na faixa de dimensões e vazões em que esses equipamentos são construídos e operados, o escoamento tende a ter um pequeno número de Reynolds o que implica em escoamento no regime laminar. Na modelagem do escoamento do fluido, utiliza-se a simplificação de uma estrutura contínua do fluido, deixando de lado a estrutura molecular, o que permite aplicar as equações de Navier-Stokes, as quais valem para os casos em que há mais de um milhão de moléculas no menor volume em que uma mudança macroscópica ocorra e que o escoamento encontre-se distante do equilíbrio termodinâmico.

## 2.3 DINÂMICA DOS FLUIDOS

O comportamento dos fluidos pode ser descrito por um conjunto de equações diferenciais parciais, as quais são baseadas na conservação de massa, energia e momentum linear (equações de Navier-Stokes) e angular.

O estudo dos fluidos é a mecânica dos fluidos, a qual pode ser subdivida em dinâmica e estática dos fluidos e que depende se o fluido encontra-se em movimento ou não.

A dinâmica dos fluidos é uma sub-disciplina da mecânica dos fluidos a qual lida com fluidos (líquido e gases) em movimento. Ela possui diversas sub-disciplinas, incluindo aerodinâmica (o estudo de gases em movimento) e a hidrodinâmica (o estudo de líquidos em movimento). A dinâmica dos fluidos possui uma grande variedade de aplicações, englobando o cálculo de forças e momentos em uma aeronave, determinando a vazão mássica de petróleo em um duto, prevendo o comportamento do clima, entendendo nebulosas no espaço interestelar e de acordo com o que se reporta modelando a fissão de uma arma de detonação. Alguns de seus princípios são utilizados na engenharia de tráfego, no qual o tráfego é tratado como um fluido contínuo.

A dinâmica dos fluidos oferece uma estrutura sistemática a qual aborda estas disciplinas práticas e que aplica leis empíricas e semi-empíricas, desenvolvidas através das medidas do escoamento, e que são utilizadas para resolver problemas práticos. A solução de um problema da dinâmica dos fluidos tipicamente envolve o cálculo de várias propriedades do fluido, tais como velocidade, pressão, massa específica, e temperatura, em função do espaço e do tempo.

### 2.3.1 Equações da Dinâmica dos Fluidos

As equações fundamentais da dinâmica dos fluidos são as leis de conservação, especificamente, a conservação de massa, conservação de quantidade de movimento (também conhecida como a segunda e terceira lei de Newton), e a conservação de energia. Estas são baseadas na mecânica clássica e são modificadas na mecânica quântica e na relatividade geral. O teorema do transporte de Reynolds é o teorema fundamental utilizado para formular as leis básicas de conservação da dinâmica dos fluidos.

Na mecânica dos fluidos, geralmente é mais conveniente trabalhar-se com volumes de controle, portanto, se faz necessário relacionar as equações do sistema com as equações do volume de controle correspondente.

O teorema de transporte de Reynolds estabelece que a taxa de variação de uma propriedade extensiva  $N$ , para o sistema é igual à taxa de variação de  $N$  no volume de controle somado com a taxa de fluxo da propriedade  $N$  pela superfície de controle.

As formas diferenciais destas equações com hipóteses adicionais são conhecidas como as equações de Navier-Stokes. As hipóteses adicionais são a lei da viscosidade de Newton e a lei de condução de Fourier. A forma geral do teorema de Reynolds é dada pela seguinte equação:

$$\frac{DN_{sistema}}{Dt} = \int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\eta) dV + \int_{V.C.} \rho\eta\vec{v}_b \cdot \hat{n} dA + \int_{V.C.} \rho\eta\vec{v}_r \cdot \hat{n} dA$$

Na qual  $\eta$  é a propriedade intensiva relacionada com a propriedade extensiva  $N$ , ( $N$  dividido pela massa),  $t$  é o tempo,  $V.C.$  refere-se à superfície de controle,  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $V$  é o volume,  $v_b$  é a velocidade da fronteira do volume de controle,  $v_r$  é a velocidade do fluido com relação à superfície de controle,  $n$  é o vetor normal a superfície de controle, o qual aponta para fora, e  $A$  é a área.

A equação da continuidade é encontrada substituindo N pela massa. Isto significa que  $\eta$  é igual a 1.

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V.C.} \rho dV + \int_{V.C.} \rho \vec{v}_b \cdot \hat{n} dA + \int_{V.C.} \rho \vec{v}_r \cdot \hat{n} dA$$

Todas as variáveis estão definidas como na formulação geral. Aplicando o princípio da conservação de massa, o lado esquerdo da equação se reduz a zero uma vez que a massa de um sistema não pode se alterar com o tempo. Em um sistema com escoamento estacionário, o primeiro termo da direita será igual a zero, isto é, a massa do volume de controle não irá se alterar, implicando que a vazão mássica que entra no volume de controle é igual à vazão mássica que deixa o volume de controle.

A equação de quantidade de movimento é encontrada substituindo-se N pela quantidade de movimento. Para tanto,  $\eta$  deve ser igual à velocidade. Da segunda lei de Newton, tem-se que a taxa de variação da quantidade de movimento é igual ao somatório das forças. Então,

$$\sum \vec{F} = \int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) dV + \int_{V.C.} \rho \vec{v} (\vec{v}_b \cdot \hat{n}) dA + \int_{V.C.} \rho \vec{v} (\vec{v}_r \cdot \hat{n}) dA$$

Em que  $\vec{F}$  é igual à força, e  $\vec{v}$  a velocidade do fluido em um sistema de coordenadas ligado à superfície de controle. Deve-se notar que a forma integral da equação de quantidade de movimento é uma equação vetorial.

As duas equações anteriores são a base para a caracterização do escoamento de um fluido.

### 2.3.2 Escoamento Laminar e Turbulento

É um fato empírico que, um fluido escoando em um tubo de diâmetro pequeno ou com baixas velocidades, assim o faz em um escoamento laminar, também chamado escoamento viscoso ou de linhas de corrente. As camadas de fluido deslizam umas sobre as outras sem que ocorra uma mistura macroscópica e a velocidade, em escoamento macroscópico, em regime estacionário, é constante em qualquer ponto. Em velocidades mais elevadas o escoamento se torna turbulento; há mistura, ocasionada por turbilhões, entre as camadas e mesmo em regime estacionário a velocidade em um ponto oscila ao redor de um valor médio. A existência destes dois tipos de escoamento foi demonstrada por Reynolds.

Se utilizados diferentes diâmetros de tubos circulares e diferentes fluidos verifica-se que o escoamento laminar geralmente existe quando a relação adimensional conhecida por número de Reynolds é menor que 2.100. A grandeza do número de Reynolds é independente do sistema de unidades empregado.

Escoamento laminar pode existir quando o número de Reynolds é maior do que 2.100 quando o fluido escoar no interior de tubulações bastante lisas. Neste caso o escoamento é instável e pequenas perturbações podem causar a transição para o escoamento turbulento. No caso de dois fluidos escoando em tubulações idênticas e com a mesma velocidade, o que tiver a viscosidade cinemática mais baixa será o mais susceptível ao desenvolvimento de turbulência. Desvios do escoamento em “linha reta” são impedidos pelo caráter viscoso do fluido e a inércia do fluido que se desvia é proporcional a sua massa específica. Desta maneira, fluidos de baixa viscosidade e alta massa específica tendem a fornecer à turbulência.

O número de Reynolds expresso em termos de viscosidade cinemática é dado por:  $Re = \frac{\rho \bar{V} D}{\mu}$ . Ele é, desta maneira, uma medida, da relação entre as forças de inércia e as forças viscosas e, também, da possibilidade de desenvolvimento de turbulência.

Para líquidos e para gases em geral, com exceção daqueles gases em baixa pressão para os quais o livre caminho médio de uma molécula é da ordem de

grandeza do diâmetro do tubo, pode-se assumir a não existência de escorregamento na parede do tubo. Desta maneira, a velocidade aumenta de um valor zero na parede até um valor máximo no centro da canalização. A curva de  $u$  em função de  $y$  (distância a partir da parede) é denominada distribuição ou perfil de velocidades. A uma distância suficientemente grande da entrada da canalização o perfil de velocidades assume uma forma constante; o escoamento é dito desenvolvido. A distribuição de velocidades depende do tipo de escoamento, se laminar ou turbulento. Para um duto circular em regime laminar, tem-se um perfil de velocidade parabólico, para o qual a velocidade no centro do duto é o dobro da velocidade média, já para um regime turbulento tem-se um perfil de velocidade achatado, em que a velocidade é praticamente constante ao longo da seção transversal.

### 2.3.3 Escoamento em Condutos de Seção Não-Circular

O cálculo do número de Reynolds também pode ser realizado para condutos de seção não circular, desde que se substitua o diâmetro  $D$  pelo diâmetro equivalente  $D_{eq}$  definido pela relação:

$$D_{eq} = 4r_H$$

Nesta equação, o raio hidráulico é:  $r_H = \frac{A}{l_p}$ .

Onde  $\begin{cases} l_p = \text{perímetro molhado} \\ A = \text{área da seção transversal} \end{cases}$

Verifica-se que para um conduto de seção circular esta definição conduz a um resultado consistente  $D_{eq} = D$ .

## 2.4 TÉCNICAS NUMÉRICAS

O uso de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos de engenharia e da física é hoje uma realidade, graças ao vertiginoso desenvolvimento de computadores de alta velocidade e de grande capacidade de armazenamento. Em função dessa disponibilidade computacional, a qual cresce exponencialmente, o desenvolvimento de algoritmos para a solução dos mais diversos problemas tem recebido enorme atenção dos analistas numéricos e engenheiros, fazendo aumentar, também em taxas acentuadas, o número de pesquisadores e usuários da simulação numérica.

### 2.4.1 Ferramentas disponíveis:

O engenheiro ou projetista tem à sua disposição, fundamentalmente, três ferramentas para desenvolver o seu projeto ou analisar o seu problema:

- Métodos analíticos;
- Métodos numéricos (experimentação numérica);
- Experimentação em laboratório.

Se um método analítico for suficiente para resolver o problema de interesse, dentro de níveis de precisão e exigência necessários, ele deve ser preferido, pois uma regra básica que deve ser sempre observado em engenharia é o uso de ferramenta adequada ao tamanho do problema que se quer resolver.

Com relação à experimentação em laboratório, sua grande vantagem é o fato de tratar com a configuração real. Ela é, entretanto, em alguns casos de altíssimo custo, e muitas vezes não pode ser realizada por questões de segurança como é o caso de transferência de calor no núcleo de reatores nucleares ou pela

dificuldade de reprodução das condições reais, como, por exemplo, no escoamento supersônico a grandes altitudes ou na simulação de reservatórios de petróleo.

A experimentação numérica (simulação numérica), por sua vez, praticamente não apresenta restrições, podendo em princípio resolver problemas complexos com condições de contorno gerais, definidos em geometrias também complexas e apresentando resultados com uma rapidez muito grande. O tempo e o custo de projeto de um novo equipamento podem ser sensivelmente reduzidos com o uso da simulação numérica.

Quando o modelo matemático representativo do fenômeno já é conhecido e validado, não é mais lógico usar a experimentação de laboratório, uma vez que os computadores e os métodos numéricos podem resolver tal modelo matemático em tempo e custos, geralmente mais baixos.

A tendência que se observa, portanto, é a realização de experiências em laboratório cada vez mais sofisticadas, com o intuito de usar os resultados na corroboração de modelos matemáticos e numéricos, na investigação e entendimento de novos fenômenos que ainda necessitam ser matematicamente modelados, e na avaliação final de um determinado projeto.

Existem erros resultantes do uso de equações diferenciais que não representam o fenômeno. A validação física, portanto, preocupa-se com a fidelidade do modelo matemático para com o problema físico. A comparação dos resultados numéricos com os resultados experimentais ajuda na validação física, porém não é suficiente para isso.

No método dos volumes finitos (MVF) as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação no volume elementar.

O método dos elementos finitos (MEF) e o das diferenças finitas não trabalham com volumes de controle e sim apenas com os pontos da malha e, como consequência, não são conservativos (pode ocorrer do balanço de massa não ser respeitado).

Atualmente, um grande esforço de pesquisa está sendo dedicado ao desenvolvimento de métodos em volumes finitos usando malhas não-estruturadas, semelhantes àsquelas usadas em elementos finitos. No panorama atual, observa-se que ambos os métodos, MVF e MEF, estão resolvendo problemas fortemente

convectivos, inclusive com ondas de choque, em geometrias arbitrárias, mostrando que existe entre eles uma forte semelhança em termos de generalidade.

## 2.5 DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

A dinâmica dos fluidos computacional (do inglês, Computational Fluid Dynamics - CFD) é o termo dado ao grupo de técnicas matemáticas, numéricas e computacionais usadas para obter, visualizar e interpretar soluções computacionais para as equações de conservação de grandezas físicas de interesse em um dado escoamento.

A origem destas equações de conservação é a teoria de fenômenos de transporte. Assim, pode-se resumir CFD como o conjunto das técnicas de simulação computacional usadas para prever os fenômenos físicos ou físico-químicos que ocorrem em escoamentos.

CFD faz parte da área de mecânica computacional que, por sua vez, está incluída na grande área de simulação. A simulação é usada por físicos, químicos e engenheiros para prever o comportamento de um produto, processo ou material em determinadas condições assumidas ou aferidas.

### 2.5.1 A Matemática do CFD

O conjunto de equações as quais descrevem os processos de transferência de quantidade de movimento são conhecidas como as equações de Navier-Stokes. Estas equações diferenciais parciais foram desenvolvidas no início do século dezenove e não possuem nenhuma solução analítica geral conhecida, porém podem ser discretizadas e estimadas numericamente.

Equações descrevendo outros processos, tais como da combustão, também podem ser resolvidas em conjunto com as equações de Navier-Stokes. Geralmente, um modelo aproximado é utilizado para derivar estas equações adicionais, sendo os modelos de turbulência um importante exemplo em particular.

Só existem soluções analíticas para as equações de Navier-Stokes para algumas condições simplificadas e sob condições ideais. Para obter as soluções para escoamentos reais, uma aproximação numérica deve ser adotada, e para este caso, são adotadas aproximações algébricas as quais podem ser resolvidas utilizando-se métodos numéricos.

As aproximações algébricas são obtidas através da discretização das equações, essa abordagem envolve a divisão do domínio espacial em uma série de volumes de controle finitos, através do uso de uma malha. As equações da continuidade, da quantidade de movimento são, então, integradas sobre cada um dos volumes de controle, de tal maneira que a massa, energia, quantidade de movimento, entre outras, seja conservada em cada volume de controle.

Considerando as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e de um escalar passivo, em notação indicial expressa em coordenadas Cartesianas, como a seguir:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu_{eff} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) + S_{U_i}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varphi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \varphi) = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_{eff} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) \right) + S_{\varphi}$$

As equações diferenciais anteriores são integradas sobre o volume de controle, e o Teorema da Divergência ou de Gauss, como também é conhecido, é

aplicado para converter às integrais volumétricas em integrais de superfície. Se o volume de controle não se altera com o tempo, então as derivadas com o tempo podem ser movidas para fora das integrais de volume e as equações resultam em:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_S \rho U_j dn_j = 0$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho U_i dV + \int_S \rho U_j U_i dn_j = - \int_S P dn_j + \int_S \mu_{eff} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_V S_{U_i} dV$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \varphi dV + \int_S \rho U_j \varphi dn_j = \int_S \Gamma_{eff} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_V S_\varphi dV$$

Em que  $V$  e  $s$  denotam respectivamente, regiões de integração em volume e na superfície, e  $dn_j$  são as componentes cartesianas do vetor normal a superfície apontando para fora. As integrais em volume representam termos fonte ou de acúmulo, e as integrais na superfície representam a soma dos fluxos convectivos e difusivos.

O primeiro passo na solução numérica para as equações diferenciais é criar um sistema acoplado de equações algébricas linearizadas. Isto é feito convertendo cada um dos termos das equações integradas em uma forma discreta (discretização).

Os termos volumétricos (isto é, fonte e acúmulo) são convertidos no seu formato discreto pela aproximação de valores específicos em cada setor e então integrando estes valores sobre todos os setores os quais contribuem para o volume de controle. Os termos de escoamento na superfície são convertidos na sua forma discreta, primeiramente aproximando os fluxos aos pontos de integração, os quais estão localizados no centro de cada superfície do volume de controle tridimensional. O escoamento é então avaliado integrando todos os fluxos sobre os segmentos da superfície que contribuem para o determinado volume de controle.

As formas discretas das equações integrais se tornam:

$$V \left( \frac{\rho - \rho^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} (\rho U_j \Delta n_j)_{ip} = 0$$

$$V \left( \frac{\rho U_i - \rho^0 U_i^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} \dot{m}_{ip} (\rho U_i)_{ip} = \sum_{ip} (P \Delta n_i)_{ip} + \sum_{ip} \left( \mu_{eff} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{ip} + \overline{S_{U_i}} V$$

$$V \left( \frac{\rho \varphi - \rho^0 \varphi^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} \dot{m}_{ip} \varphi_{ip} = \sum_{ip} \left( \Gamma_{eff} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{ip} + \overline{S_\varphi} V$$

Em que  $V$  é o volume de controle,  $\Delta t$  é o passo de tempo,  $\Delta n_j$  é o vetor normal que aponta para fora da superfície, e o subscrito  $ip$  denota a avaliação no ponto de integração, e as somas são realizadas sobre todos os pontos de integração do volume de controle. Deve-se ressaltar que uma aproximação de Euler de primeira ordem com diferenças para trás foi assumido nestas equações. O sobrescrito '0' denota um nível de tempo anterior. A forma discreta da vazão mássica pela superfície do volume de controle, designada por  $\dot{m}_{ip}$  é dada por:

$$\dot{m}_{ip} = (\rho U_j \Delta n_j)_{ip}$$

Para o acoplamento pressão-velocidade o ANSYS CFX utiliza um arranjo da rede co-localizado tal que todos os volumes de controle sejam idênticos para as equações de transporte. Aplicando-se uma equação de quantidade de movimento modificada para cada ponto de integração, a seguinte equação para a velocidade advectiva para cada ponto de integração é obtida:

$$U_{i,ip} = \bar{U}_{i,ip} + f_{ip} \left( \left. \frac{\partial P}{\partial x_i} \right|_{ip} - \left. \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} \right|_{ip} \right) - c_{ip} f_{ip} (U_{i,ip}^0 - \bar{U}_{i,ip}^0)$$

Na qual,

$$f_{ip} = \frac{d_{ip}}{1 - c_{ip} d_{ip}} \text{ e } d_{ip} = -\frac{V}{A}$$

$A$  = aproximação para o coeficiente central da equação de quantidade de movimento, excetuando o termo transiente

$$c_{ip} = \frac{\rho}{\Delta t}$$

A barra sobrescrita indica o cálculo da média dos valores dos vértices adjacentes ao ponto de integração, enquanto que '0' sobrescrito indica valores em um passo de tempo anterior.

Seguindo o padrão de aproximação dos elementos finitos, funções de interpolação são usadas para avaliar as derivadas espaciais para todos os termos difusivos. Por exemplo, para uma derivada na direção  $x$  no ponto de integração  $ip$ , têm-se:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{ip} = \sum_n \left. \frac{\partial N_n}{\partial x} \right|_{ip} \varphi_n$$

O somatório é sobre todas as funções de interpolação para cada elemento.

A integração na superfície do gradiente de pressão nas equações de quantidade de movimento pode ser calculada pela seguinte expressão:

$$(P\Delta n_{ip})_{ip}$$

O valor de  $P_{ip}$  é dado pela seguinte função:

$$P_{ip} = \sum_n N_n(s_{ip}, t_{ip}, u_{ip}) P_n$$

E para completar a discretização do termo advectivo, a variável  $\varphi_{up}$  deve ser aproximada em termos dos valores de  $\varphi$  nos nós. O esquema advectivo implementado no ANSYS CFX pode ser apresentado na forma:

$$\varphi_{ip} = \varphi_{up} + \beta \nabla \varphi \Delta \mathbf{l}$$

Na qual  $\varphi_{up}$  é o valor no nó à frente, e  $\mathbf{l}$  é o vetor entre o nó à frente e o  $ip$ . Quando é utilizada uma combinação especificada,  $\nabla \varphi$  é a média dos gradientes dos nós adjacentes e quando é utilizado um esquema “high resolution”  $\nabla \varphi$  é o gradiente do nó à frente. Escolhas particulares de  $\beta$  e  $\nabla \varphi$  levam a diferentes esquemas.

O conjunto das equações linearizadas o qual surge da aplicação do método dos volumes finitos para todos os elementos do domínio são equações conservativas discretas. Este sistema de equações pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\sum_{nb_i} a_i^{nb} \varphi_i^{nb} = b_i$$

Em que  $\varphi$  é a solução,  $b$  é o lado direito das equações,  $a$  os coeficientes da equação,  $i$  é a o número de identificação do volume de controle ou do nó em questão, e  $nb$  é do inglês “neighbor”, “vizinho”, mas também inclui o coeficiente central que multiplica a solução na  $i$ -ésima posição. Para as equações acopladas 3-

D do conjunto de equações de quantidade de movimento, o sistema resulta em uma matriz (4x4) e ou um vetor (4x1), que pode ser expresso por:

$$a_i^{nb} = \begin{bmatrix} a_{uu} & a_{uv} & a_{uw} & a_{up} \\ a_{vu} & a_{vv} & a_{vw} & a_{vp} \\ a_{wu} & a_{wv} & a_{ww} & a_{wp} \\ a_{pu} & a_{pv} & a_{pw} & a_{pp} \end{bmatrix}_i^{nb}, \quad \varphi_i^{nb} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \\ p \end{bmatrix}_i^{nb} \quad \text{e} \quad b_i = \begin{bmatrix} b_u \\ b_v \\ b_w \\ b_p \end{bmatrix}_i$$

As vantagens de tal tratamento acoplado sobre as abordagens não-acopladas ou segregadas são várias: robustez, eficiência, generalidade e simplicidade. Estas vantagens todas combinadas fazem com que a solução numérica acoplada seja uma ferramenta poderosa para qualquer código CFD. A principal desvantagem é o grande armazenamento de coeficientes que se faz necessário.

## 2.6 MICROMISTURADORES

Os micromisturadores foram pesquisados extensivamente nos últimos anos, a seguir são apresentados alguns estudos realizados.

Kockmann et al.(2006) apresentam uma investigação teórica e experimental da mistura convectiva em várias estruturas de micromisturadores e também a combinação dos mesmos com o objetivo de obter alta intensidade de mistura e alta vazão. Diferentes elementos de mistura foram integrados em um chip de silicone para criar um dispositivo para vazões tão altas quanto 20 kg/h.

As estruturas de teste foram fabricadas e caracterizadas de acordo com o seu comportamento de escoamento e desempenho de mistura. As medidas do escoamento foram feitas pelo acompanhamento do pH em uma neutralização com indicação por azul de bromotimol e as mesmas confirmaram as simulações numéricas das características do escoamento e do campo de concentrações. A

qualidade integral da mistura no micromisturador foi medida através da reação iodeto-iodato (Villermaux-Dushman) e mostrou excelentes valores para altos números de Re (acima de 800). Oferecendo potencial para o uso dos micromisturadores para novas aplicações na produção de produtos químicos.

Aubin; Fletcher e Bertrand (2005) investigaram o efeito de vários parâmetros geométricos de um micromisturador com ranhuras em forma de zigzag no desempenho de mistura utilizando a dinâmica dos fluidos computacional.

A qualidade da mistura foi quantificada pela estatística de dados espaciais, pela máxima espessura de estiramento e pela análise do tempo de residência. Os resultados mostraram que o número de ranhuras por ciclo de mistura não afeta a qualidade da mistura de uma maneira significativa. Por outro lado, uma grande profundidade e largura da ranhura permitem que a máxima espessura de estiramento possa ser rapidamente reduzida, sem aumentar a perda de carga ao longo do misturador. Ranhuras largas, contudo, criam significativas zonas mortas no microcanal, enquanto ranhuras mais profundas melhoram a qualidade da mistura espacial.

No trabalho de Löb et al. (2006), a dispersão de dois fluidos imiscíveis em micromisturadores foi investigada utilizando as misturas água/óleo e n-heptano/água como sistemas de teste.

Os experimentos revelaram a dependência do tamanho médio das gotas e da distribuição de tamanhos em função dos parâmetros geométricos do micromisturador e das condições operacionais. Descobriu-se que o tamanho médio das gotículas está relacionado com o volume total do misturador, vazão de escoamento e correspondente perda de carga dos dois líquidos para uma determinada geometria de micromisturador, o que poderia ser explicada em face da quantidade de energia inserida no micromisturador.

Como foco principal, o efeito da geometria da câmara de mistura e da geometria do sistema de alimentação foi investigado com relação à distribuição de tamanho de gotículas pela variação das dimensões principais do misturador e pela mudança da estrutura de alimentação. Foi demonstrado que a redução da altura da fenda e do número de canais de alimentação possui um efeito significativo sobre a distribuição do tamanho das gotículas, levando a um menor diâmetro médio das

gotículas. Além disso, a eficiência de dispersão foi investigada para um processo de extração.

Um estudo computacional foi apresentado por Hassell e Zimmerman (2006), do escoamento através de um micromisturador com ranhuras em formato zigzague. Estas são arranjadas assimetricamente em ciclos, nos quais um conjunto de ranhuras topologicamente similares representa meio ciclo. A análise foi realizada utilizando um software de elementos finitos para avaliar o escoamento do fluido no interior do canal e para caracterizar o efeito das ranhuras na movimentação do fluido através do canal criando um movimento não-axial no escoamento do mesmo.

Três sistemas físicos diferentes foram modelados: um canal contendo uma única ranhura, meio ciclo de infinitas ranhuras e um sistema infinito com uma ranhura por meio ciclo. Uma faixa de alturas da ranhura foi investigada para o sistema como uma única ranhura e para números de Reynolds variando de 0-15 de maneira a identificar os mecanismos pelo qual o fluido é transportado através do canal ao passar pelas ranhuras, o efeito que as forças inerciais e viscosas exercem sobre o processo e para identificar a faixa de altura da ranhura para otimizar a transferência do fluido pelo canal.

Yue; Chen e Yuan. (2004) apresentam resultados experimentais preliminares com relação à perda de carga de escoamentos mono- e bifásicos através de um misturador com microcanal retangular no formato-T com diâmetros hidráulicos de 528 e 333  $\mu\text{m}$ , respectivamente.

Foi demonstrado que ambos os escoamentos monofásicos de  $\text{N}_2$  e de água em um regime laminar no interior do microcanal, levando em conta as incertezas experimentais, são consistentes com a teoria clássica de perda de carga, a qual é aplicada para sistemas macroscópicos.

A perda de carga obtida para o sistema bifásico  $\text{N}_2$ -água nos micromisturadores foi analisada e comparada com os modelos existentes também apresentando boa concordância.

Wong; Ward e Wharton (2004) apresentaram um micromisturador em formato -T que foi fabricado e testado para investigar a viabilidade como um micromisturador de mistura rápida. O micromisturador -T foi fabricado com um

substrato de sílica e colado a uma placa de vidro Pyrex para permitir a observação e caracterização do desempenho de mistura.

A mistura foi caracterizada utilizando um corante azul e um líquido incolor, os resultados foram verificados pela reação de hidrólise de dicloroacético-fenol vermelho. Diferentes pressões foram aplicadas na entrada do micromisturador –T e seus correspondentes desempenhos de mistura foram observados com um microscópio ótico.

As correntes de líquido são quebradas em estrias conforme o número de Reynolds aumenta e existe um número de Reynolds, entre 400 e 500, quando estas estrias desaparecem em concentrações uniformes ao longo do canal de mistura. As observações foram confirmadas por simulações computacionais, as quais permitem explicar a mistura rápida pelas condições assimétricas do escoamento na entrada, além disso, pela geração de vórtices e escoamentos secundários na junção.

Foi demonstrado para um micromisturador –T com um canal de mistura tendo um diâmetro hidráulico de 67 micrometros, que uma pressão de 5,5 bar aplicada na entrada é suficiente para causar a completa mistura em menos de um milissegundo depois das duas correntes de líquido entrarem em contato.

Uma investigação da mistura em um micromisturador em formato de cruz foi realizada por Wong et al. (2003) através da utilização de um pacote de dinâmica dos fluidos computacional.

Descobriu-se que com a inserção de elementos de um misturador estático na saída do canal do micromisturador em formato de cruz, pode-se obter rápida mistura das duas correntes de líquidos, conforme demonstrado pelos resultados das simulações computacionais.

Acredita-se que o aumento no desempenho de mistura é causado pela geração de vórtices e componentes de velocidade lateral quando os fluidos a serem misturados passam por estes elementos no micromisturador. Foi demonstrado que um tempo de mistura menor do que um milissegundo pode ser alcançado com apenas 2 bar de pressão aplicado em cada líquido.

Estes dispositivos encontram aplicações em estudo de cinéticas de reações e ao mesmo tempo abrem um grande leque de novas possibilidades.

Jensen (2001) indicou que há um aumento no uso das técnicas de microfabricação nos diferentes campos da química para construir estruturas com capacidade de exceder os sistemas macroscópicos convencionais. Além das aplicações em análises químicas e biológicas, espera-se que os sistemas químicos microfabricados possuam um grande número de vantagens para a síntese química, estudos da cinética química e desenvolvimento de processos.

As vantagens dos processos químicos através do aumento da transferência de calor e massa em pequenas dimensões foram demonstradas em sistemas de reações multifásicos, em modelos de líquidos e gases.

Hessel; Löwe e Schönfeld (2005) fizeram uma extensa revisão com relação aos princípios de mistura relativos a líquidos miscíveis (e gases) em dispositivos de mistura microestruturados. Isto foi complementado pela descrição do projeto dos elementos típicos de mistura, métodos para a caracterização da mistura, e os campos de aplicação.

Os princípios de mistura aplicados por Hessel; Löwe e Schönfeld (2005) podem ser divididos em duas classes os de mistura passiva e os de mistura ativa.

Com relação à mistura passiva, eles discutiram dispositivos com formato tipo -Y e tipo -T, misturadores de multi-laminação, divisão e recombinação, escoamento caótico, de colisão de jatos, e de recirculação entre outros.

Já a mistura ativa pôde ser alcançada pela utilização de escoamento pulsante com o tempo, gerado por uma mudança da energia de bombeamento ou pela mudança de campos elétricos, mistura acústica do fluido, ultrassom, microagitadores entre outros.

Em relação à escala de tempo da cinética química, o transporte difusivo em microdispositivos é mais rápido do que em misturadores convencionais. Para explorar o potencial resultante para a engenharia de processos químicos, os efeitos de escala de tamanho em processos de transporte precisam ser entendidos. Por este motivo, o comportamento referente ao transporte de massa, quantidade de movimento e calor em um escalonamento foram considerados por Bothe; Stemich e Warnecke (2006).

Baseado em simulações numéricas, as características de mistura de microreatores em formato –T com seção transversal retangular foram estudados para três diferentes regimes de escoamento.

Para a descrição da qualidade de mistura, a intensidade de mistura de Danckwerts foi complementada pela medida da escala de segregação a qual emprega o conceito de área de contato específica. Para acessar a eficiência de mistura em dutos, a contribuição da taxa de dissipação de energia na direção transversal foi utilizada. Estes conceitos foram aplicados para um micromisturador em formato –T, empregando simulações CFD. Além disso, comparações com dados experimentais foram realizadas e mostraram apreciável concordância.

Na última década, muitos esforços foram dedicados ao desenvolvimento de microdispositivos para reações, mistura e separação. Muitos pesquisadores relataram as vantagens na utilização de microdispositivos para produção. Entretanto, poucas plantas químicas em escala micro são utilizadas para produções reais. Na pesquisa de Hasebe (2004), os problemas de projeto e operação de micro plantas químicas foram discutidos do ponto de vista da engenharia de processos.

Primeiro, os problemas de projeto de micro plantas químicas foram classificados em dois subproblemas: o projeto das micro operações unitárias e o projeto inteiro da micro planta. Para cada um dos subproblemas os aspectos dos microsistemas foram explicados e os problemas dominantes os quais precisam ser solucionados pelos engenheiros de processo foram apontados. Então, as características dos problemas de instrumentação e controle das micro plantas químicas puderam ser resumidos.

Finalmente, foi apontado que a pesquisa nos problemas de projeto e controle das micro-plantas químicas tem a possibilidade de agir como uma ponte entre a ciência engenharia química e a engenharia de sistemas de processos.

O desempenho de diferentes micromisturadores foi examinado experimentalmente e pelo uso da dinâmica dos fluidos computacionais (CFD) por Ehlers et al. (2000). O desenvolvimento e ocorrência de turbulência é muito importante para uma boa qualidade de mistura nos micromisturadores os quais foram examinados.

Devido ao pequeno diâmetro dos microcanais o comprimento de mistura é alcançado muito rapidamente e existe menor falta de homogeneidade na concentração de tal maneira que as reações secundárias são efetivamente reduzidas. Além disso, foi demonstrado que o desempenho de mistura de micromisturadores pode ser simulado com boa concordância com os resultados experimentais utilizando modelos de turbulência existentes.

Utilizando a dinâmica dos fluidos computacionais foi possível investigar a influência de parâmetros geométricos dos micromisturadores. Os resultados mostraram que o comportamento de mistura é fortemente influenciado pela altura e direção do canal.

A pobre mistura em reatores de microcanais, mais especificamente em reações em fase líquida, primariamente devido à inerente característica do escoamento laminar ser dominado pela difusão tem atraído a atenção de muitos pesquisadores. O objetivo de Adeosun e Lawal (2005) foi investigar o aumento da transferência de massa em reatores com microcanais, através de um estudo teórico da mistura dos padrões utilizados correntemente, configuração em junção –T assim como quatro propostas de configuração de microreatores multicanais.

O aumento da transferência de massa nas configurações propostas foi alcançado via “reorientação e estiramento da interface dos fluidos” pela imposição de algumas restrições geométricas nestas configurações dos microreatores. Estas configurações foram estudadas em relação ao seu desempenho de mistura através da realização de simulações com dinâmica dos fluidos computacional de injeção de traçador e pela visualização experimental do escoamento, respectivamente.

Baseado no critério de baixa perda de carga assim como alto desempenho de mistura, a melhor configuração para aumento de mistura foi identificada e posteriormente otimizada.

Este estudo teórico dos problemas de mistura em regime laminar em micromisturadore/reatores mostra que as simulações com o uso de CFD são uma poderosa ferramenta para o projeto e otimização de configurações para micromistura/reação.

Liu et al. (2004) conduziram um estudo numérico da mistura de dois fluidos (água pura e solução de glicerol em água) em um microcanal. Pela variação da

concentração de glicerol na solução glicerol/água, a variação no comportamento da mistura pelas mudanças nas propriedades dos dois fluidos (por exemplo, viscosidade, massa específica e difusividade) foi investigada.

O fenômeno de mistura foi testado em três micromisturadores: um misturador de onda quadrada, um misturador de serpentina tridimensional e um misturador com ranhuras em formato de ziguezague. As equações que governam o processo, de continuidade, quantidade de movimento e fração mássica do soluto foram resolvidas numericamente.

Para avaliar o desempenho da mistura, um critério de índice de uniformidade de mistura foi proposto. Nos sistemas considerados, o número de Reynolds baseado nas propriedades médias era  $Re=1$  e  $Re=10$ . Encontrou-se que para baixos números de Reynolds ( $Re=1$ ), o desempenho de mistura varia inversamente com a fração mássica de glicerol devido à difusão molecular. O desempenho da mistura se deteriorava devido à significativa redução do tempo de residência dos fluidos no interior do misturador.

A importância dos micromisturadores para a tecnologia de microreações demanda um conhecimento bem fundamentado sobre o comportamento de mistura destes dispositivos. Engler et al. (2004) demonstrou por simulações numéricas assim como experimentalmente que o aumento da vorticidade no interior do micromisturador estático em formato  $-T$  com seção transversal retangular ocorre mesmo para baixos números de Reynolds e que estes efeitos podem ser utilizados para aprimorar a qualidade da mistura.

Os resultados auxiliam no entendimento dos processos de mistura no interior dos microcanais. O objetivo global de Engler et al. (2004) era desenvolver regras básicas para o projeto e implementação com sucesso em micromisturadores.

Motivados por recentes experimentos avançados em misturadores microfluídicos, Bennet e Wiggins (2003) estudaram a mistura passiva e as propriedades do escoamento em um microcanal com um determinado padrão geométrico por meio do uso da dinâmica dos fluidos computacional (CFD).

As geometrias estudadas sobrepõem o baixo número de Reynolds, e o elevado número de Péclet ( $Pe = UL/D$ ,  $U$  – velocidade,  $L$  – comprimento e  $D$  – difusividade) para misturar eficientemente através da geração de um escoamento

tridimensional o qual gera trajetórias caóticas para a convecção de escalares passivos. Os autores esperam que tais estudos em CFD avancem em ambos os campos na capacidade e no entendimento de tais misturas em escoamento em micropadrões.

Os dispositivos microfluídicos têm recentemente atraído interesse devido ao seu potencial de tornar novas aplicações em realidade incluindo muitas áreas da indústria médica. Entretanto, os desafios no projeto de dispositivos microfluídicos continuam, uma vez que todos os aspectos do escoamento do fluido no interior do microcanal ainda não são completamente compreendidos. Bayraktar e Pidugu (2006) apresentaram as principais descobertas na literatura dos fundamentos físicos do escoamento em microcanais. A revisão teve como intenção prover uma extensa visão da base de conhecimento disponível assim como as áreas que precisam de intensa investigação. Ainda incluiu estudos de ambos: escoamentos movidos pela pressão e movidos pela eletro-osmose em microcanais.

Misturadores caóticos com microcanais torcidos foram projetados e simulados numericamente no estudo de Jen et al. (2003). A teoria de sistemas dinâmicos indica que um movimento caótico de uma partícula pode ocorrer quando o campo de velocidade é ou bidimensional e dependente do tempo, ou tridimensional. No estudo de Jen et al. (2003), micromisturadores com estruturas tridimensionais de microcanais torcidos foram projetados de maneira a induzir uma mistura caótica.

O termo convecção caótica foi introduzido na mecânica dos fluidos por Hassan Aref (AREF, 2002). A noção de que escoamentos laminares e regulares podem produzir trajetórias caóticas em partículas é atualmente entendida como uma pedra fundamental da cinemática do escoamento de fluidos e o termo convecção/advecção caótica é utilizado como uma palavra-chave por muitas revistas do ramo e em muitas conferências.

A aplicação da advecção/convecção caótica vai desde a mistura em escoamentos atmosféricos e oceanográficos até a mistura em dispositivos microfluídicos.

Além do micromisturador em formato  $-T$ , três tipos de micromisturadores com microcanais inclinados, oblíquos e em formato de onda foram investigados em Jen et al. (2003). No projeto de cada microcanal torcido, o ângulo do fundo dos

canais foi alternado em cada subseção. Quando os fluidos entram nos microcanais torcidos, o escoamento oscila em volta das estruturas do microcanal e o regime caótico que leva a mistura caótica pôde surgir. Os resultados numéricos indicaram que a mistura ocorre no canal principal e comprimentos maiores de mistura são progressivamente necessários para um maior número de Péclet. A oscilação do escoamento nos microcanais torcidos causou a convecção caótica. Entre os quatro projetos de micromisturador, o micromisturador com os canais inclinados mostraram o melhor desempenho de mistura.

Stroock et al. (2002) tendo em mente a dificuldade em misturar soluções em microcanais sob as condições típicas de operação, uma vez que a flutuação espontânea da velocidade a qual tenderia a homogeneizar os fluidos em um escoamento turbulento não está presente, já que o regime de escoamento obtido é laminar, e a difusão molecular ao longo dos canais é lenta; apresentou um método de mistura passiva para fluidos de uma mistura de correntes movidas pela pressão em estado estacionário em um microcanal com baixo número de Reynolds.

Utilizando este método, o comprimento do canal necessário para a mistura cresce logaritmicamente com o número de Péclet, e a dispersão hidrodinâmica ao longo do canal é reduzida em relação àquela em um simples canal liso.

O padrão de escoamento laminar e o desempenho de mistura de dois micromisturadores diferentes foi investigado e quantificado utilizando CFD por Aubin et al. (2003). As geometrias dos micromisturadores consistiam de canais ou com ranhuras em ziguezague diagonais ou assimétricas no fundo do canal. Os resultados numéricos mostram que um único escoamento helicoidal é produzido para o misturador diagonal, enquanto que para o misturador com ranhuras cria um duplo escoamento helicoidal, composto alternadamente por um vórtice grande e pequeno.

A trajetória de partículas mostra que muito pouca mistura convectiva ocorre no misturador diagonal. Entretanto, no misturador com ranhuras, uma mistura muito boa acontece. Métodos quantitativos de análise que tradicionalmente são utilizados para caracterizar misturadores estáticos em escala macro foram empregados. O cálculo da variação da dispersão das partículas e o estiramento mostraram-se ser bem adaptados para quantificar a mistura em um micromisturador.

Contudo, métodos baseados na taxa de deformação parecem ser menos adequados. Os resultados possuem excelente concordância com os resultados experimentais anteriormente obtidos pelo autor.

O estudo desenvolvido por Lin, Tsai e Fu (2005) descreve o desenvolvimento de um micromisturador passivo que utilizava a rotação gerada pela injeção de fluidos por diferentes canais de entrada para gerar um vórtice tridimensional no interior de uma câmara circular em um escoamento com baixo número de Reynolds, por volta de 3,2 e com isso melhorando a eficiência de mistura. Os dois fluidos são injetados intercaladamente por oito canais tangenciais. A Figura 5 apresenta o dispositivo estudado.

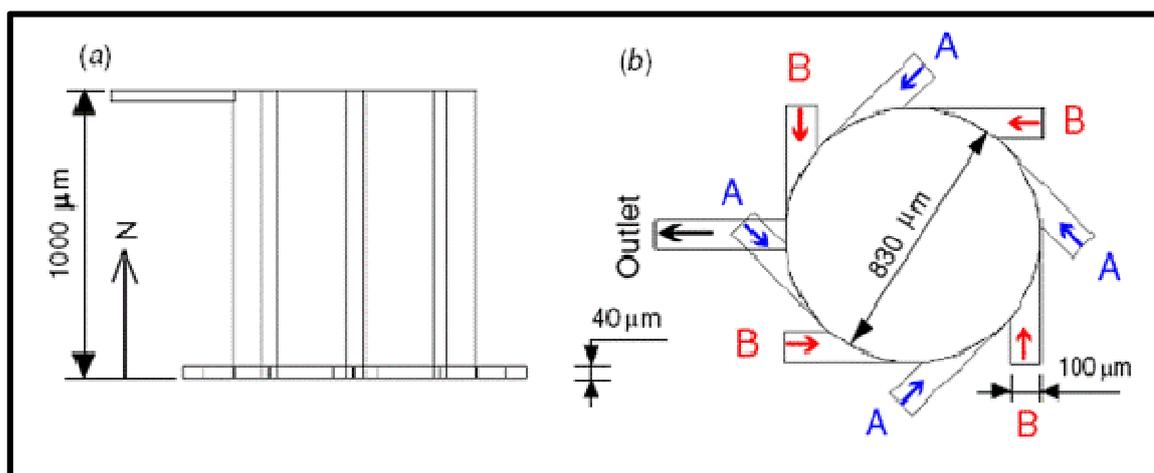


Figura 5 - Dispositivo usado por Lin, Tsai e Fu (2005).

A dinâmica dos fluidos computacional pode ser utilizada para conduzir simulações as quais permitam compreender o problema antes de se partir para a construção dos modelos físicos e realizar testes, uma vez que com essas simulações é possível realizar alterações dos diversos parâmetros em uma larga faixa de valores e permitindo reunir dados simultâneos e instantâneos de vários aspectos do modelo.

De maneira a permitir uma boa resolução, o domínio computacional foi descrito com uma malha hexaédrica, com a maioria das células com 5 µm de comprimento. Portanto, o domínio computacional resultante apresentava aproximadamente 800000 células.

No estudo de Lin, Tsai e Fu (2005) para  $Re = 0,5$  o vórtice tridimensional não era formado, uma vez que as forças viscosas eram maiores que as forças inerciais. Apesar de apresentar a eficiência de mistura para  $Re = 4$  de 90% e confirmar com dados experimentais Lin, Tsai e Fu (2005) não apresentaram como foi realizada a avaliação da eficiência de mistura para os dados levantados experimentalmente. Nas Figuras 6, 7 e 8 são apresentados alguns resultados qualitativos encontrados por Lin, Tsai e Fu (2005).

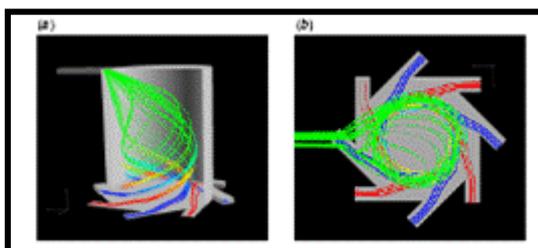


Figura 6 - Linhas de corrente de Lin, Tsai e Fu (2005).

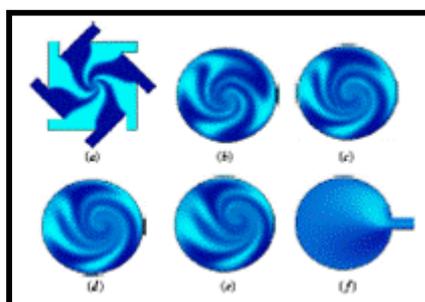


Figura 7 - Fração mássica de Lin, Tsai e Fu (2005).

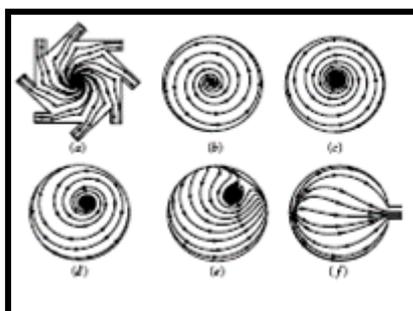


Figura 8 - Projeção das linhas de correntes em diferentes posições de Lin, Tsai e Fu (2005).

Uma maneira usual de validar a simulação CFD em microcanais é comparar o resultado numérico da perda de carga com os valores medidos experimentalmente (FOUCARDE et al., 2001). A boa concordância com os valores medidos é um

indicativo de que a formulação matemática descreve corretamente o perfil de velocidade.

Aubin et al. (2003) investigaram os padrões de escoamento e o desempenho de mistura de duas diferentes geometrias de micromisturadores, mostradas na Figura 9, baseadas no trabalho de Stroock et al. (2002), os quais são formados basicamente por um canal retangular e com ranhuras na parte de baixo do misturador com o formato diagonal e no formato ziguezague.

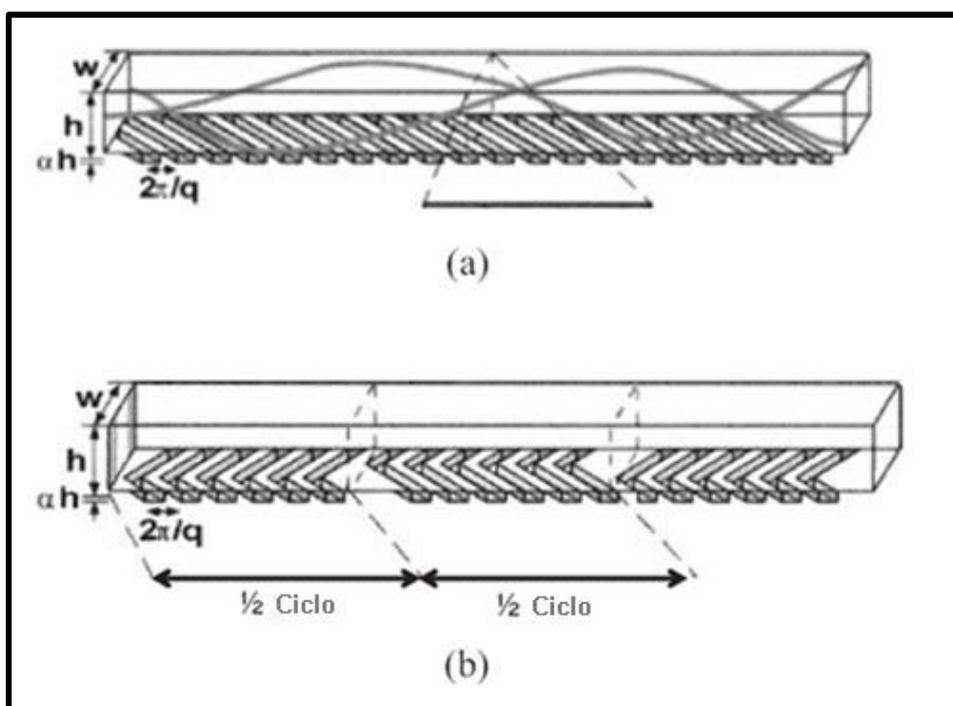


Figura 9 - Misturadores utilizados em Stroock et al (2002). (a) Misturador diagonal. (b) Misturador ziguezague.

No trabalho de Stroock et al. (2002) chegou-se a conclusão que a geometria com ranhuras em ziguezague gera um escoamento transversal que induz uma mistura caótica para  $0 < Re < 100$ . O grau de mistura foi quantificado utilizando o desvio padrão do corante em diferentes posições ao longo do misturador. Foi observado que uma completa mistura foi alcançada com menos de 3 cm para números de Péclet ( $Pe$ )  $< 106$ , enquanto que um canal reto necessitava de um comprimento superior.

No trabalho de Aubin et al. (2003) fez-se um levantamento da intensidade do tensor de taxa de deformação no intuito de identificar as zonas no escoamento com o maior potencial de mistura.

Uma maneira de caracterizar a mistura é um método baseado em uma análise Lagrangeana, acompanhando a mistura de duas correntes de fluidos, representada por dois corantes com massa nula. Inicialmente, um grande número de partículas de corantes entrando em um dos lados do misturador representa um Fluido A, enquanto que as outras partículas entrando pelo outro lado do misturador representam o Fluido B.

Plotando a posição dos corantes em diferentes posições ao longo do misturador revela a evolução dos padrões de mistura de fluidos similares, conforme demonstrado na Figura 10.

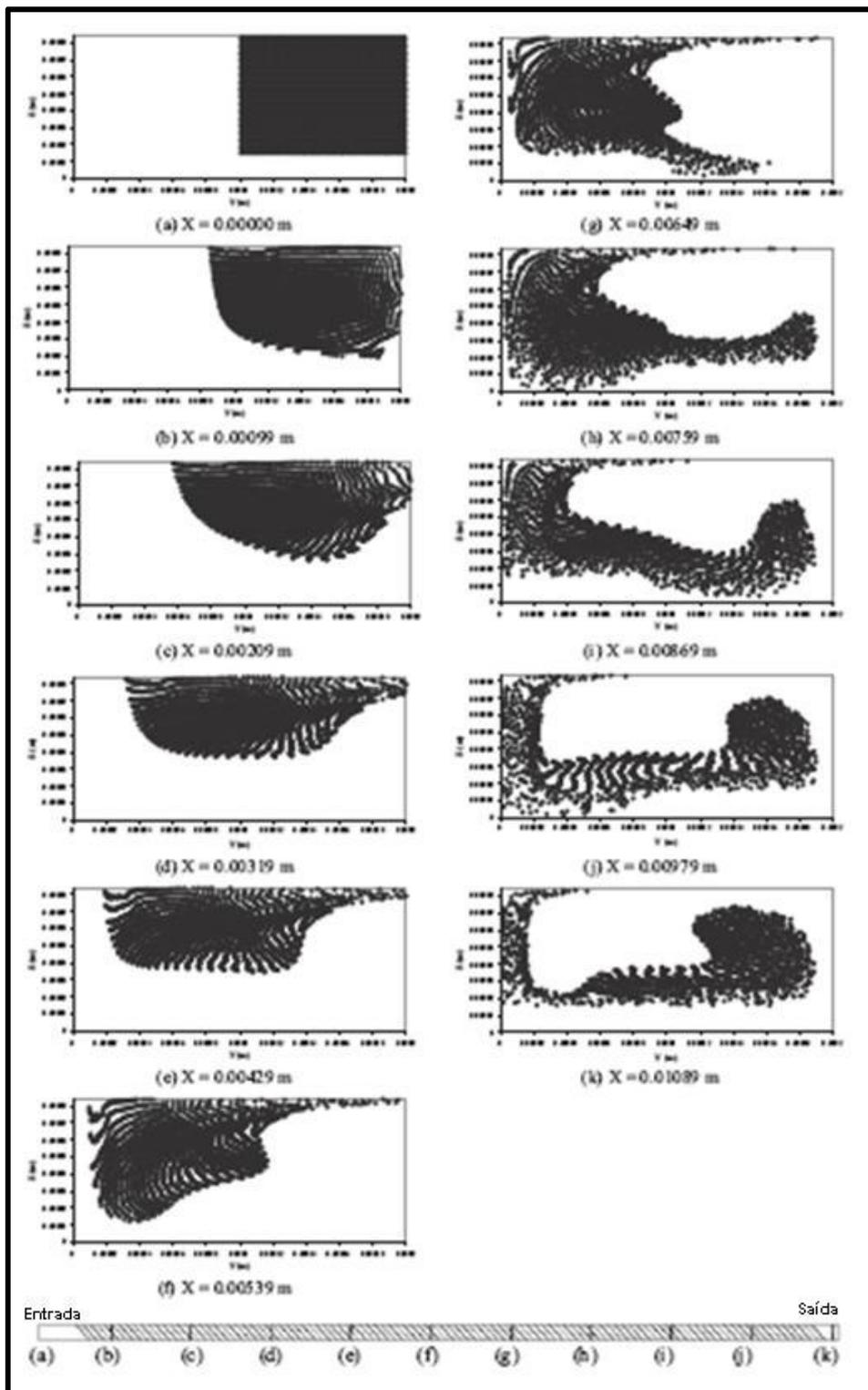


Figura 10 - Evolução do traçador de partícula ao longo do misturador diagonal (AUBIN, FLETCHER, XUEREB, 2005).

O escoamento caótico é caracterizado pelo estiramento e dobra de elementos de fluido, os quais produzem um crescimento exponencial da interface dos fluidos, e, portanto, um divergente das condições iniciais (AUBIN et al., 2003). A

disposição dos pontos em um mapa de Poincaré revela a natureza caótica do escoamento: regiões de escoamento caótico aparecem como nuvens randômicas de pontos, enquanto regiões de escoamento não-caótico aparecem como zonas sem pontos ou com curvas fechadas. Na Figura 11 tem-se um exemplo de um mapa de Poincaré.

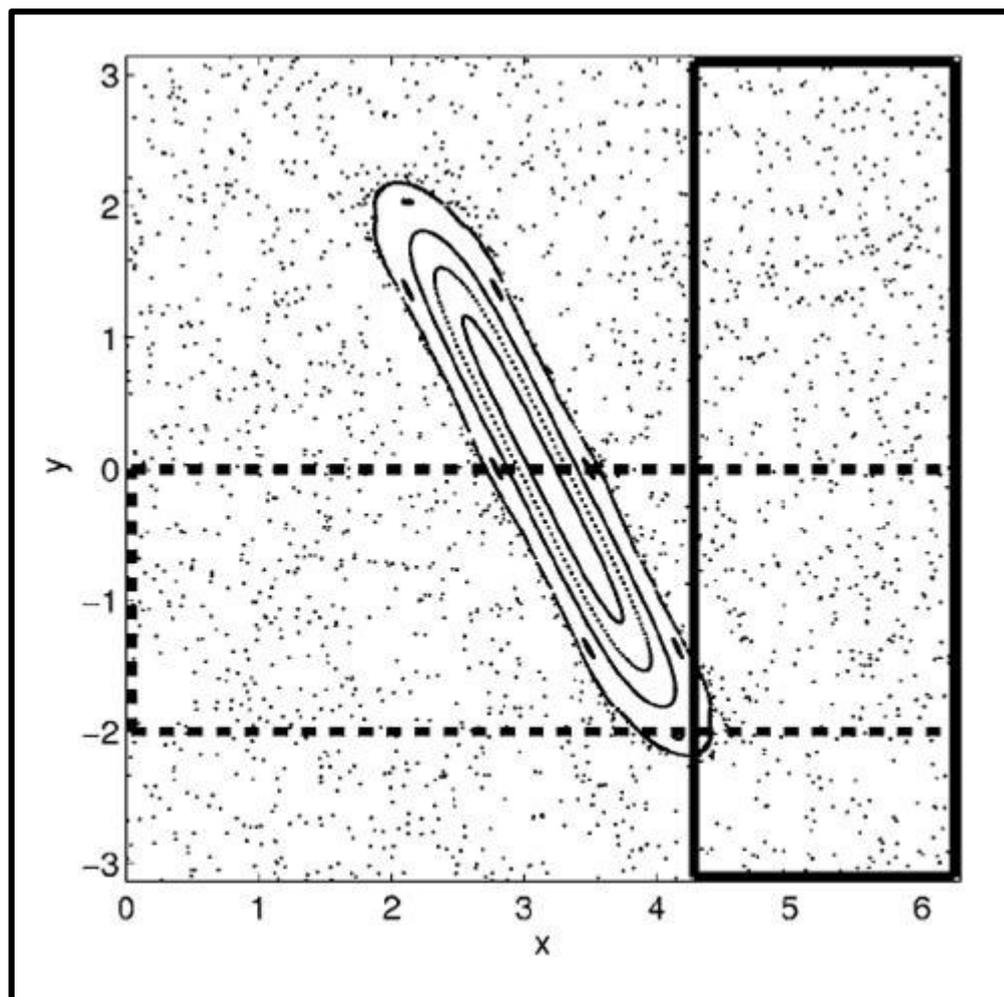


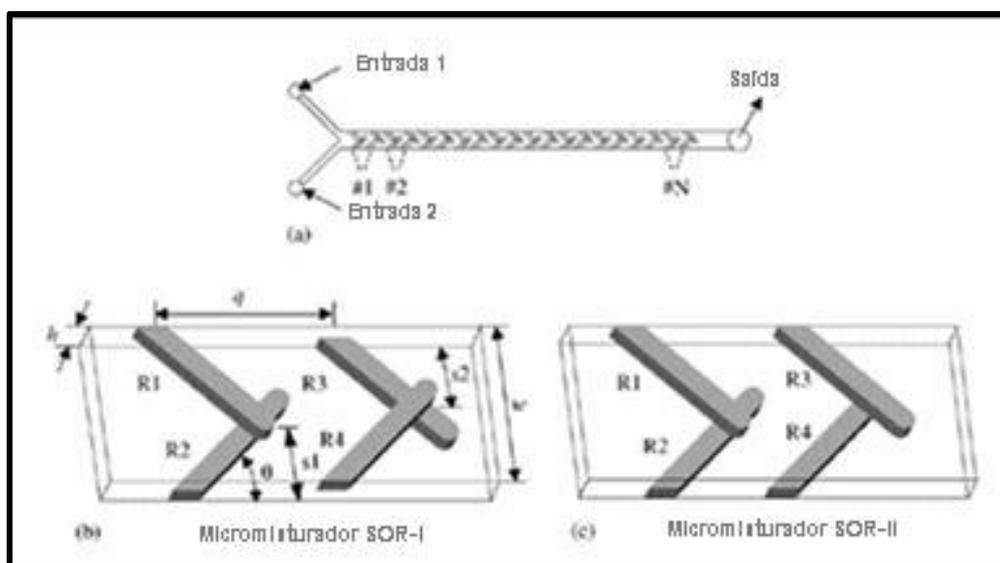
Figura 11 - Mapa padrão de uma seção de Poincaré (GLEESON, 2005).

Fu et al. (2006), apresentaram dois micromisturadores estáticos (SOR-I e SOR-II) os quais foram projetados e fabricados em substrato de vidro. Os dois micromisturadores com sulcos em relevo geraram componentes transversais no escoamento no microcanal, gerando caos, tendo como consequência a redução do comprimento de mistura.

Fu et al. (2006), utilizaram a dinâmica dos fluidos computacional para estudar as duas estruturas de micromisturadores, como mostrado na Figura 12, ambas são baseadas no conceito inserido por Stroock et al. (2002), o qual utiliza degraus na parte inferior do misturador para gerar uma perturbação no escoamento, em regime laminar, e dessa maneira aprimorar o efeito da mistura.

Experimentos para a mistura de um corante vermelho (água e solução de rodamina vermelha em água, para qual o coeficiente de difusão é  $2,8 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ), foram conduzidos para visualizar o desenvolvimento do processo de mistura e para avaliar o desempenho dos misturadores SOR-I e SOR-II sob vazões com  $Re < 116$ .

Como resultados obtiveram que o efeito de rotação gerado no escoamento em um dos segmentos do misturador identificado como SOR-I é desfeito no segmento seguinte, diferente do que ocorre no misturador SOR-II, com isso a melhor mistura foi obtida com o misturador SOR-II.



**Figura 12 - Micromisturadores SOR-I e SOR-II (FU et al., 2006).**

Kohl et al. (2005) apresentaram em seu estudo dados referentes ao fator de atrito levantado experimentalmente por diversos pesquisadores com relação ao valor teórico, conforme Figuras 13 e 14. Em seu artigo fez-se uma investigação na faixa de  $4,9 < Re < 2068$  de escoamentos monofásicos incompressíveis na tentativa de justificar as principais discordâncias encontradas por outros autores. Kohl et al. (2005) chegaram à conclusão que as principais fontes de erros são erros inseridos

pela instrumentação aplicada, ou por subestimar ou superestimar os efeitos de entrada e saída dos microcanais, uma vez que o sensor de pressão, geralmente, está instalado fora do microcanal.

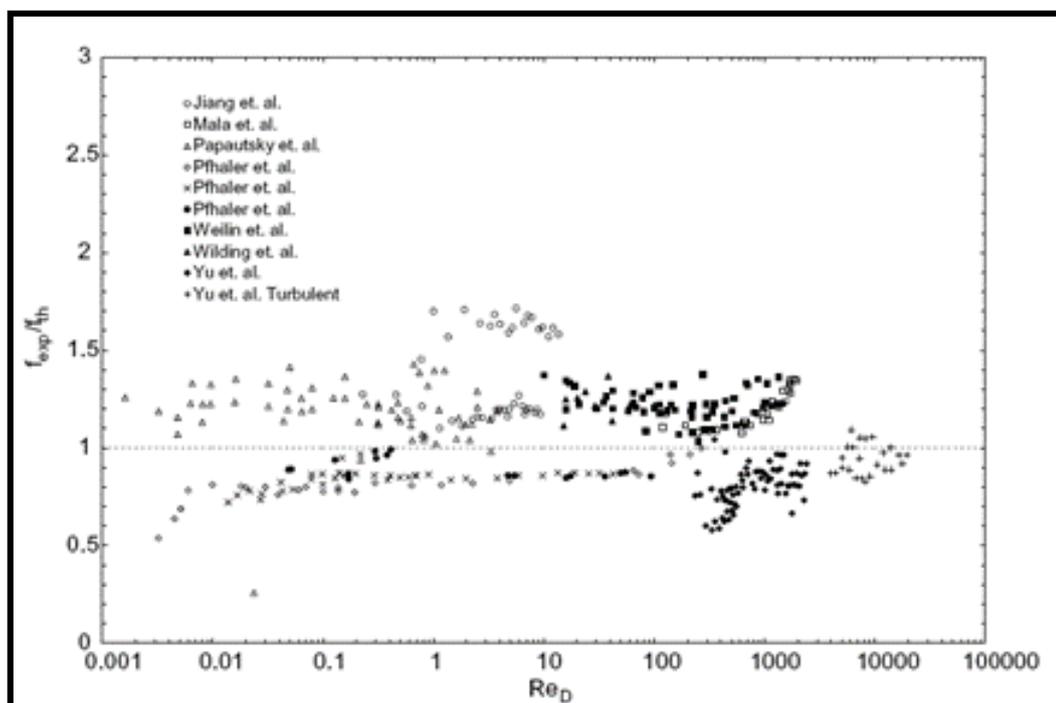


Figura 13 - Fator de atrito experimental para líquidos de Kohl et al. (2005).

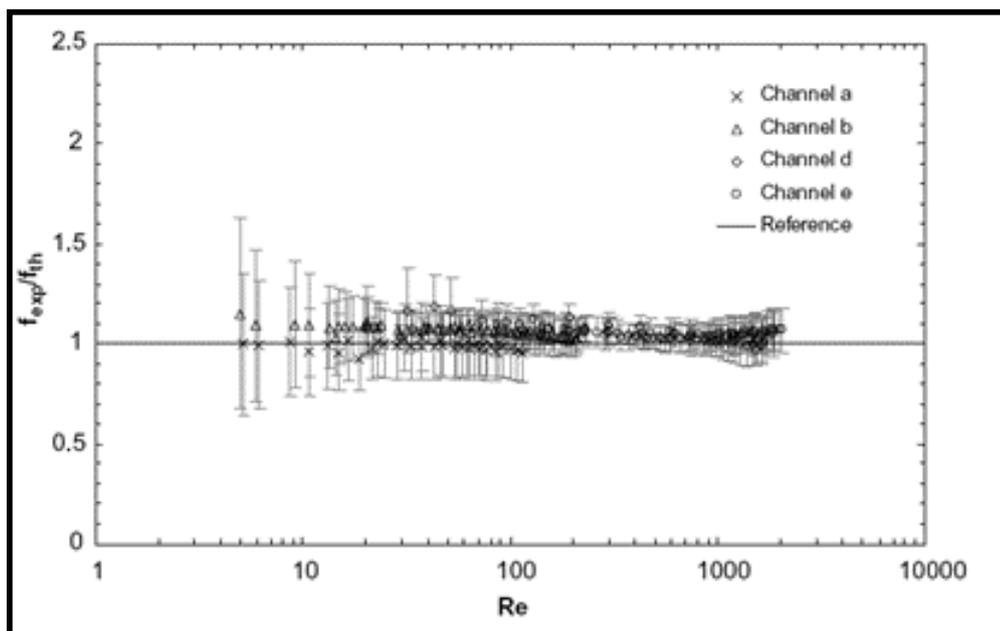


Figura 14 - Comparação de dados da água para escoamento laminar incompressível em relação ao número de Reynolds (KOHL et al., 2005).

Na Figura 15 são apresentados os resultados do trabalho de Kohl et al. (2005) e os resultados aplicando a seguinte equação, na qual  $\alpha$  é a relação entre a largura e a altura do canal retangular:

$$fRe = 96(1 - 3,5553\alpha + 1,9467\alpha^2 - 1,7012\alpha^3 + 0,9564\alpha^4 - 0,2537\alpha^5)$$

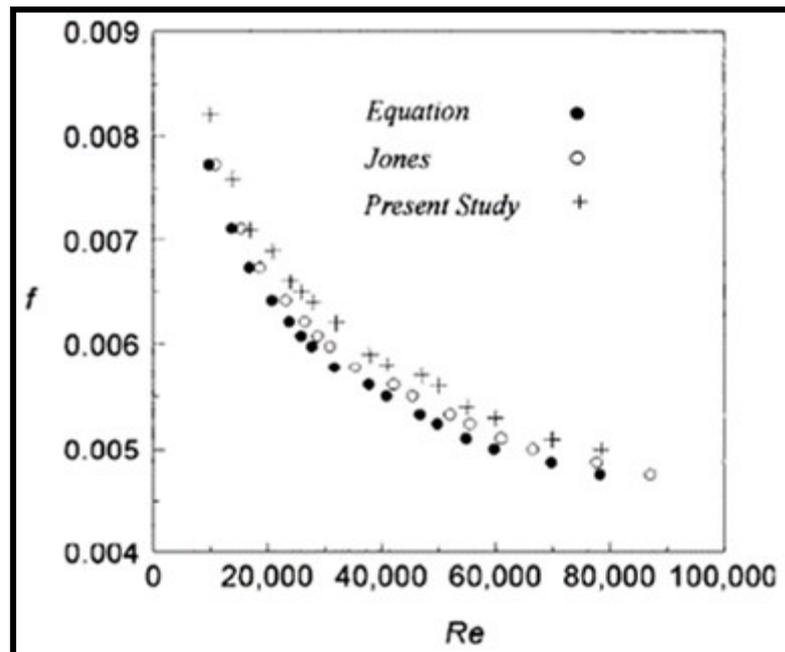


Figura 15 - Fator de Fanning VS número de Reynolds para fluido Newtoniano em duto retangular (KOHL et al., 2005).

Nos anexos A e B são apresentadas diversas referências a respeito de trabalhos investigativos realizados de maneira a caracterizar e avaliar a perda de carga em microdispositivos de diferentes geometrias e sobre uma grande faixa de número de Reynolds tanto para líquidos quanto para gases.

### 2.6.1 Micromisturadores Ativos e Passivos

Em geral, os micromisturadores podem ser divididos em duas categorias: a dos micromisturadores passivos e a dos micromisturadores ativos. Os

micromisturadores passivos não necessitam de uma fonte de energia externa, o processo de mistura conta inteiramente com a difusão e a convecção caótica.

Misturadores passivos podem ainda ser divididos pela maneira em que se dá a mistura das fases: laminação paralela, laminação serial, injeção, convecção caótica e gotículas. Micromisturadores ativos utilizam o distúrbio gerado por um campo externo para o processo de mistura. Então, os misturadores ativos podem ser divididos pelo tipo de efeitos externos tais como pressão, temperatura, eletrohidrodinâmica, dieletroforese, eletrocinética, magnetohidrodinâmica e acústica.

Com os campos externos e os correspondentes componentes de integração, as estruturas dos micromisturadores ativos são geralmente complicadas e necessitam complexos processos de fabricação. Além disso, fontes de energia externas são necessárias para a operação dos micromisturadores ativos. Então, a integração dos misturadores ativos em um sistema microfluídico é tanto desafiante quanto onerosa.

Em contrapartida, os micromisturadores passivos não precisam de atuação externa exceto pela alimentação dos fluidos. As simples estruturas passivas comumente utilizadas são robustas, de operação estável e facilmente integrada em um sistema mais complexo.

Atenção deve ser dada para certos parâmetros operacionais tais como número de Reynolds, número de Péclet e número de Strohal St. O número de Reynolds representa a relação entre a força de inércia e a força viscosa. O número de Péclet representa a relação entre a transferência de massa devido à convecção e difusão. A convecção é dominante para altos números de Péclet. O número de Strohal representa a razão entre o tempo de residência de uma espécie e o período de tempo do distúrbio externo em um micromisturador ativo.

## 2.7 QUALIDADE DA MISTURA

No trabalho de Aubin; Fletcher e Bertrand (2005), a mistura espacial foi caracterizada por dois métodos. O primeiro é uma análise da variação do vizinho mais próximo, a qual é utilizada em dados de estatística espacial e mede a distância entre uma coordenada em particular e uma partícula do traçador. O segundo método mede a redução da espessura de estriamento em diferentes posições ao longo do microcanal. Já a mistura temporal é avaliada pelo levantamento da distribuição de tempo de residência (RTD).

No trabalho de Liu et al.(2006) o cálculo do alongamento médio linear fornece outro meio de quantificar o desempenho da mistura. Experimentalmente para validação é feita a visualização da mistura com corante.

No trabalho de Wong; Ward e Wharton (2004), a eficiência da mistura foi medida através da visualização da fração mássica dos componentes calculada pela aplicação da dinâmica dos fluidos computacional e pelo cálculo da intensidade de segregação, conforme definido em Wong et al. (2003) e pelo cálculo da coeficiente de variação.

No trabalho de Wong et al. (2003) de maneira a caracterizar a eficiência de mistura dos micromisturadores, definiram-se dois parâmetros adimensionais. São eles a intensidade de segregação e coeficiente de variação. A intensidade de segregação e o coeficiente de variação são medidas da quantidade de mistura ocorrida e a uniformidade de concentração entre a entrada e a saída do micromisturador, respectivamente. Eles são funções do desvio padrão da concentração das espécies em distâncias específicas do ponto de injeção dos componentes. A intensidade de segregação e o coeficiente de variação são calculados utilizando as equações a seguir.

$$I_s = \frac{\sigma_0^2}{\sigma_i^2}$$

Em que  $\sigma_0$  e  $\sigma_i$  são os desvios padrão dos componentes na saída e na entrada do micromisturador respectivamente. O desvio padrão na entrada é dado pela equação:

$$\sigma_i = [\overline{x_{va}}(1 - \overline{x_{va}})]^{1/2}$$

Em que  $\overline{x_{va}}$  é a fração volumétrica média de uma espécie  $a$  na entrada, a qual pode ser calculada pela razão entre a vazão volumétrica da espécie  $a$  em relação à vazão volumétrica dos dois componentes na entrada. O coeficiente de variação é calculado por:

$$\frac{\sigma_0}{\overline{x_{va}}} = \left\{ I_s \left( \frac{1}{\overline{x_{va}}} \right) - 1 \right\}^{1/2}$$

O coeficiente de variação e a intensidade de segregação são iguais a zero para um mistura perfeitamente homogênea. Dependendo da aplicação, a intensidade de segregação na faixa 0,01-0,0001 e o coeficiente de variação de 0,01-0,05 podem ser utilizados como critério para definir que houve uma mistura completa.

No trabalho de Bothe; Stemich e Warnecke (2006) a avaliação da qualidade de mistura foi baseada na intensidade de segregação de Danckwerts (1953). Esta medida não é sensível a escala de tamanho na qual a segregação ocorre. Para uma caracterização significativa da qualidade de mistura, a intensidade de segregação precisa ser complementada com uma escala de segregação.

No trabalho numérico de Adeosun e Lawal (2005) duas medidas indiretas foram utilizadas para avaliar a qualidade da mistura – uma caracterização qualitativa da mistura, chamada de distribuição de fração mássica das espécies e uma medida quantitativa, a distribuição de tempos de residência, como descrito por Danckwerts (1953) e Fogler (1999). A distribuição de tempo de residência é caracterizada por alguns parâmetros estatísticos, são eles: o tempo de residência médio ( $t_m$ ), o qual representa o tempo médio gasto até a saída dos elementos do fluido, variância ( $\sigma^2$ ) ou o desvio padrão ao quadrado, o qual é uma medida da dispersão da distribuição

de tempos, e o coeficiente de variação ( $CV$ ), o qual é uma medida utilizada para estimar a variabilidade do desvio padrão com relação ao tempo de residência médio. Quanto menor a variância ou o coeficiente de variação mais estreita é a distribuição de tempos de residência, e mais próxima é a distribuição do tempo de residência médio, e, portanto, espera-se que melhor seja a qualidade da mistura.

$$t_m = \frac{\int_0^{\infty} tE(t)dt}{\int_0^{\infty} E(t)dt} = \int_0^{\infty} tE(t)dt \text{ (uma vez que } \int_0^{\infty} E(t)dt = 1)$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t)dt$$

$$CV = \frac{\sigma}{t_m}$$

No trabalho de Engler et al. (2004) a qualidade da mistura pôde ser avaliada em uma seção transversal arbitraria do misturador. A qualidade da mistura  $\alpha$  é calculada por:

$$\alpha = 1 - \sqrt{\frac{\sigma_M^2}{\sigma_{max}^2}}$$

Na qual  $\sigma_{max}^2$  é a máxima variância da mistura (que é 0,5 para condições de contorno simétricas) e  $\sigma_M^2$  é definido por:

$$\sigma_M^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (c_i - \bar{c}_M)^2$$

Na qual  $n$  é o número de pontos da malha que se encontram na seção transversal escolhida,  $c_i$  é a concentração no ponto da malha  $i$  e  $\overline{c_M}$  é a concentração ótima da mistura a qual é igual a 0,5 para condições de contorno simétricas. Por esta definição temos uma mistura perfeita para  $\alpha = 100\%$

No trabalho de Aubin et al. (2003) foram apresentados métodos de caracterização e quantificação da qualidade da mistura. Um dos métodos é baseado em uma análise Lagrangeana, acompanhando a mistura de duas correntes de fluidos, as quais são representadas por partículas de fluido sem massa.

Inicialmente, uma numerosa quantidade de partículas é igualmente distribuída na entrada do misturador. Todas as partículas entrando em um lado do misturador representam o fluido A, enquanto que as partículas entrando do outro lado representam o fluido B.

A representação gráfica da posição das partículas em várias posições no interior do misturador revela o padrão de mistura de dois componentes similares. Outra ferramenta Lagrangeana visual utilizada para avaliar a mistura em misturadores estáticos é a seção de Poincaré, a qual relaciona informação com a natureza caótica do escoamento. As seções de Poincaré são geradas pelo acompanhamento da trajetória das partículas em todas as seções transversais em diferentes posições.

As posições na seção transversal são então sobrepostas para formar uma imagem 2-D. A disposição dos pontos em um mapa de Poincaré revela a natureza caótica do escoamento: o regime de escoamento caótico aparece como uma nuvem de pontos randômicos, enquanto que um escoamento não-caótico aparece como zonas sem pontos ou com curvas fechadas.

De maneira a quantificar a homogeneidade da mistura, uma análise estatística da concentração em amostras da mistura, a qual é baseada no conceito de intensidade de segregação de Danckwerts, pode ser utilizada. A abordagem de intensidade de segregação é baseada na variância da concentração em diferentes regiões do espaço com respeito à concentração média. No caso de partículas sem massa, uma variância baseada numérica pode ser calculada pelo posicionamento de uma rede  $n \times m$  de células igualmente espaçadas sobre uma seção transversal do

misturador. Um método estatístico similar envolve o cálculo do coeficiente de variação  $COV$ , que é o desvio padrão normalizado pela média.

No trabalho numérico realizado por Hung; Wang e Chyou (2005), a qualidade de mistura foi avaliada de maneira similar ao apresentado no trabalho de Engler et al. (2004):

$$\varepsilon_{mixing} = 1 - \frac{1}{L} \int_0^L \left| \frac{C_{A,x}^* - 0,5}{C_{A,max}^* - 0,5} \right| dx$$

Utilizando o cálculo do módulo da diferença entre a concentração e a concentração média ao invés de elevar os resultados ao quadrado e extrair a raiz quadrada.

No trabalho de Kochmann et al. (2005), a qualidade da mistura foi calculada da maneira proposta por Engler (2004, 2005).

No trabalho de Nguyen e Wu (2005) foi apresentada uma rica revisão de misturadores com os dois princípios de operação, passivos e ativos, para cada caso foram apresentados a referência, o autor, o ano do estudo, o tipo do misturador, a largura do canal, a altura do canal, a velocidade típica, o número de Reynolds, o número de Péclet e o material de fabricação do micromisturador. Para os misturadores ativos ainda foram listados o tipo de distúrbio externo utilizado, a frequência do distúrbio e o número de Strouhal.

## 2.8 PERDA DE CARGA

Ainda é uma área ativa de pesquisa a validade da teoria do fator de atrito com base em tamanhos convencionais ser aplicada em escoamentos em microcanais. Muitos pesquisadores relataram desvios significativos dos valores previstos, enquanto outros relataram boa concordância.

Prova do interesse nessa área são os vários pesquisadores que trabalham nessa área. Kohl et al. (2005), apresentaram uma investigação experimental do escoamento em microcanais e realizou medições internas de pressão para tentar desvendar os resultados conflitantes apresentados por outros autores. Taylor, Carrano e Kandlikar (2006) investigaram o efeito da rugosidade relativa (altura da rugosidade em relação ao diâmetro) e atualizaram o diagrama de Moody para refletir novos dados experimentais. Xu et al. (2000) conduziram experimentos com canais de diâmetro hidráulico na faixa de 30  $\mu\text{m}$  a 344  $\mu\text{m}$  e com o número de Reynolds variando de 20 a 4000.

Pelos dados experimentais levantados eles concluem que o escoamento se aproxima da tendência de um escoamento de Poiseuille com exceção para Reynolds alto, por volta de 1500, o que seria um indicativo de transição para o escoamento turbulento. Zimmerer e Kottke (1996), Eternad e Sadeghi (2001), Ribatski, Wojtan e Thome (2006), Revellin e Thome (2007), Váldez, Miana e Pelegay (2007) também estudaram a perda de carga em dispositivos na escala micrométrica.

As discrepâncias na literatura devem ser levantadas para se gerar um conjunto de equações as quais possam ser utilizadas para prever a perda de carga que ocorre em microcanais. Com base nessa premissa Steinke; Kandlikar (2006) reuniram um conjunto de dados experimentais relatados na literatura (aproximadamente 5000 pontos), os quais foram criteriosamente avaliados.

Os autores concluíram que as teorias convencionais de escoamento de Stokes e Poiseuille se aplicam aos escoamentos monofásicos no interior de microcanais. Segundo os autores, há algo em comum entre os que relatam discrepâncias entre os valores calculados experimentalmente e os valores teóricos, estes pesquisadores não levaram em conta as perdas na entrada e na saída e o comprimento para o desenvolvimento do escoamento laminar. Já os que levaram estas perdas localizadas em consideração relataram a boa concordância com os valores previstos teoricamente.

O ponto de partida para o cálculo da perda de carga é a definição do fator de atrito,  $f$ . Uma complicação para determinar o fator de atrito são as duas definições existentes: a de Darcy e a de Fanning. O fator de atrito de Fanning é definido pela razão entre a tensão de cisalhamento na parede e a energia cinética do escoamento por unidade de volume:

$$f_f = \frac{\tau_w}{1/2\rho\bar{V}^2}$$

Na qual  $f_f$  é o fator de atrito de Fanning,  $\tau_w$  é a tensão de cisalhamento na parede,  $\rho$  é a massa específica do fluido, e  $\bar{V}$  é a velocidade média. O fator de atrito em função da perda de carga e da velocidade média é dado por:

$$f_f = \frac{\Delta P D_h}{2L\rho\bar{V}^2}$$

Em que  $\Delta P$  é a perda de carga,  $D_h$  é o diâmetro hidráulico,  $L$  é o comprimento do canal. Para escoamento laminar, o número de Poiseuille,  $Po = f_f Re$ , é uma constante. O valor de  $f_f Re$  é igual a 16 para uma passagem circular. Para canais retangulares ele é função da razão largura/altura ( $\alpha_c$ ). O número de Poiseuille pode ser determinado utilizando a equação de Shah; London (1978).

$$f_f Re = 24(1 - 1.3553\alpha_c + 1.9467\alpha_c^2 - 1.7012\alpha_c^3 + 0.9564\alpha_c^4 - 0.2537\alpha_c^5)$$

Para canais quadrados em que  $\alpha_c = 1$ , resulta em  $f_f Re = 14,23$ .

O fator de atrito de Moody (ou Darcy), um parâmetro adimensional é definido pela expressão:

$$f_D = \frac{-(dP/dx)D_h}{\rho\bar{V}^2/2}$$

Para um conduto de seção circular, o perfil de velocidade na região de escoamento completamente desenvolvido é parabólico:

$$V(r) = -\frac{1}{4\mu}\left(\frac{dP}{dx}\right)r_0^2\left[1 - \left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right]$$

E uma vez que  $\tau_w = -\mu(dV/dr)_{r=r_0}$ , tem-se, que a relação entre o fator de atrito de Fanning e Darcy é dado por:

$$f_f = \frac{f_D}{4}$$

Portanto, se calculado para canais quadrados, chega-se a  $f_D Re = 56,9$ , coerente com o valor encontrado em Incropera; DeWitt (1998) de  $f_D Re = 57$ .

## 2.9 COMENTÁRIOS GERAIS

Neste capítulo foram revisados alguns aspectos referentes à modelagem e simulação dos micromisturadores, através da aplicação da dinâmica dos fluidos computacional.

Através da utilização desta ferramenta numérica é possível otimizar a geometria dos mesmos, uma vez que é possível avaliar a qualidade da mistura obtida, independente das características físico-químicas dos componentes envolvidos, podendo ser simulado fluidos no estado líquido ou gasoso, e caso seja necessário é possível avaliar escoamentos bifásicos, os quais de maneira geral, são mais complexos.

Além disso, é possível variar as condições operacionais, de maneira a se encontrar àquelas que melhor atendam as restrições impostas, incluindo um aspecto importante para a fase de projeto de sistemas microfluídicos, que é a perda de carga.

Com relação à perda de carga há basicamente grande discussão quanto a validade da teoria clássica, a qual é aplicada em escala macro, se a mesma é válida para a escala micrométrica.

Para a qualidade da mistura, não há um consenso geral entre os vários artigos pesquisados, e diferentes maneiras para a caracterização da mesma são propostas, porém, é aceito no meio acadêmico que muitos desses resultados são de caráter qualitativo, uma vez que a própria medição experimental deste parâmetro, o qual serviria para validar os resultados numéricos, ainda precisa de aprimoramento.