

SIMULAÇÃO E AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE MISTURA DE DOIS MODELOS DE MICROMISTURADORES

André Razente (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Lúcio Cardozo Filho (Orientador), e-mail: lcfilho@uem.br, Marcos de Souza (Co-orientador), Renata Côrrea Vicentino

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Tecnologia/Maringá, PR.

Engenharia Química - Operações de Separação e Mistura (3.06.02.03-3)

Palavras-chave: micromisturadores, microfluidos, CFD.

Resumo:

Neste trabalho, foram realizadas simulações computacionais utilizando o software COMSOL Multiphysics® para obter o perfil de distribuição de concentração em duas geometrias diferentes de micromisturadores a fim de avaliar a eficiência de mistura das mesmas. Assim sendo, verificou-se que a geometria raquete se mostrou mais eficiente do que a geometria ômega, apresentando um grau de mistura máxima para a geometria raquete de 97,28% e para a geometria ômega de 55,13%.

Introdução

Atualmente, micromisturadores vem sendo empregados em várias atividades no âmbito da química e da engenharia química (Hessel et al., 2005). Algumas das aplicações mais recentes para esses dispositivos são testes farmacêuticos para doenças e distúrbios fisiológicos.

Em micromisturadores, a escala se torna pequena ao ponto de área superficial do dispositivo se tornar muito mais significativa do que as medidas de vazão e velocidade (Pryor, 2011). Tal fator influencia no tipo de escoamento, que geralmente se apresenta como um escoamento laminar (Stokes) com um número de Reynolds menor que a unidade (Hessel et al., 2005). Em inglês, esse tipo de escoamento é denominado *Creeping Flow*.

Neste trabalho foram estudados dois modelos de micromisturadores com geometrias adaptadas de Arias et al (2012). As geometrias podem ser vistas na Figura 1 (geometria ômega a esquerda e raquete a direita)

Para verificar a eficiência desses dispositivos, analisou-se a eficiência de mistura primeiramente por simulação computacional. Para isso utilizou-se de software CFD (computational fluid-dynamics) COMSOL Multiphysics®, que utiliza o método numérico de elementos finitos para efetuar os cálculos da simulação computacional.

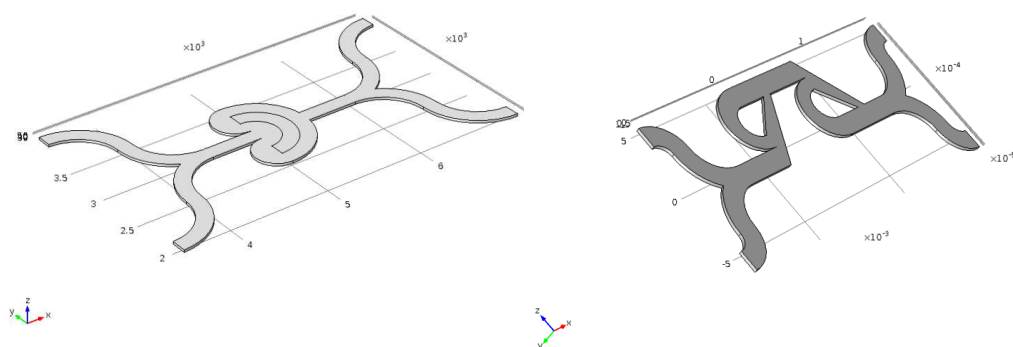


Figura 1 – Geometria Ômega (à esquerda) e Geometria Raquete (à direita)

Materiais e métodos

Para executar as simulações computacionais, foi necessário confeccionar as geometrias de micromisturadores. Para isso, utilizou-se o software AutoCad, desenhando a geometria plana e posteriormente extrusando metade da largura do micromisturador ($25 \mu\text{m}$) configurando, assim, as geometrias mostradas na Figura 1. Foram confeccionadas modelos com uma a quatro etapas para a geometria ômega, e modelos com duas, quatro e seis etapas para a geometria raquete.

Com as geometrias prontas, utilizou-se o programa COMSOL Multiphysics® para realizar a simulação. Para isso, foram selecionadas os fenômenos físicos “Transport of Diluited Species” e “Creeping Flow” sendo o estudo realizado em regime permanente. Em seguida, as geometrias outrora confeccionadas foram importadas para o programa.

A simulação foi configurada seguindo o tutorial para micromisturadores fornecido pela própria empresa desenvolvedora do Software, sendo o coeficiente de difusividade do soluto no meio de $5,9 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$, vazão constante de 1 mL/h e concentração inicial de soluto de uma das entradas de $1,51 \cdot 10^{-5} \text{ mol/L}$ e a outra contendo solução tampão com concentração zero. A malha utilizada nas simulações para todas as geometrias foi a tetraédrica livre. Por fim, foi utilizado a ferramenta “auxiliar sweep” para variar a vazão no sistema de $1,0 \text{ mL/h}$ até $2,0 \text{ mL/h}$ em intervalo de $0,5 \text{ mL/h}$.

Resultados e Discussão

Após realizar as simulações, foram obtidos os perfis de concentração de cada configuração para os dois tipos de geometria. Desses perfis destacam-se a configuração de quatro etapas para a geometria ômega (Figura 2) e seis etapas para a geometria raquete (Figura 3), ambos para a vazão de $1,5 \text{ mL/h}$.

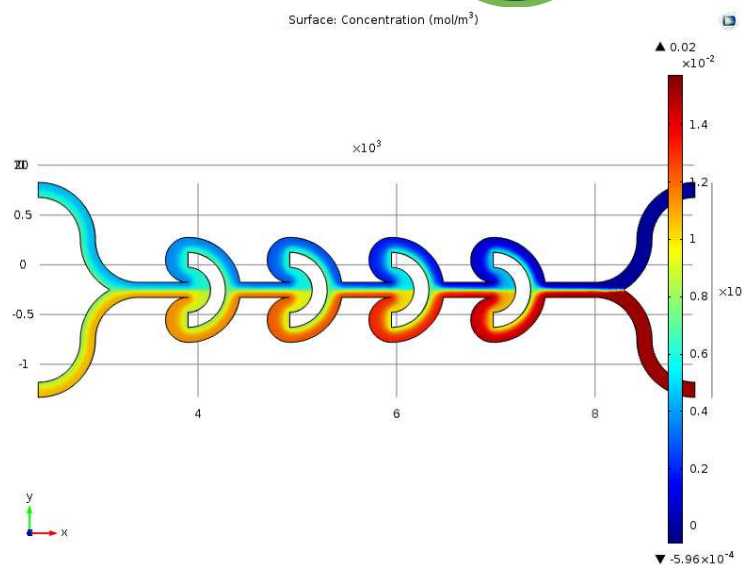


Figura 2 – Perfil de concentração para a geometria ômega de quatro etapas

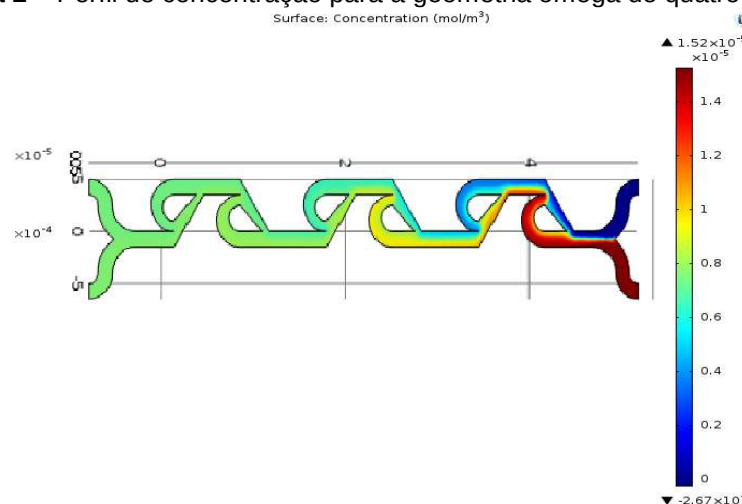


Figura 3 – Perfil de Concentração para a geometria raquete de seis etapas.

Também foram obtidos os valores de concentração em cada saída do soluto e a partir deles foram calculados o grau de mistura (razão entre a menor concentração de saída pela maior). Dentre esses valores calculados, destacam-se os valores para a vazão de 1,5 mL/h contidos na Tabela 1. Avaliando tanto os perfis de concentração bem como os valores de grau de mistura, pode-se perceber que a geometria raquete possui uma eficiência de mistura muito maior do que a geometria ômega, uma vez que a geometria raquete com menor número de etapas consegue alcançar 90,88% de mistura contra 55,13% na maior configuração da geometria ômega.

Tabela 1 – Valores de concentração e grau de mistura para a vazão de 1,5 ml/h

Geometria	Csaída 1 (mMol/L)	Csaída 2 (mMol/L)	Grau de Mistura
Ômega 1	0,002923	0,012188	23,98%
Ômega 2	0,003939	0,011162	35,29%
Ômega 3	0,005089	0,010013	50,82%
Ômega 4	0,005362	0,009727	55,13%
Raquete 2	0,007289	0,008020	90,88%
Raquete 4	0,007349	0,007680	95,69%
Raquete 6	0,007436	0,007605	97,78%

Conclusões

Após simulações computacionais utilizando o software COMSOL Multiphysics® com auxílio do software AutoCad para a confecção das geometrias estudadas, foi possível determinar o grau de mistura e perfis de concentração para as geometrias raquete e ômega para configurações de até seis e quatro etapas respectivamente.

Portanto pode-se concluir que a geometria raquete é muito eficiente para misturar as correntes de fluido, sendo observado um grau de mistura de 97,78% na configuração de seis etapas contra 55,13% da geometria ômega na configuração de quatro etapas.

Agradecimentos

À Fundação Araucária pelo apoio financeiro concedido. Aos professores orientadores Lúcio e Marcos pela disponibilidade e orientação durante todo o projeto, e à doutoranda Renata Vicentino pelo auxílio técnico no desenvolvimento do trabalho.

Referências

ARIAS, E.L.M.; MARTINS, P.F.; MUNHOZ, A.L.J.; GUTIERRE-RIVERA, L.; FILHO, R.M. Continuous Synthesis and in Situ Monitoring of Biodiesel Plant Production in Different Microfluidic Devices. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 51, n. 33, p. 10755-10767, 2012.

HESSEL, V.; LÖWE, H.; SCHÖNFELD, F. Micromixers – a review on passive and active mixing principles. **Chemical Engineering Science**, v. 60, n. 8–9, p. 2479-2501, 2005.

PRYOR, R.W. **Multiphysics modeling using comsol: a first principles approach**. 1. ed., Sudbury: Jones and Bartlett Publishers, 2011.