



Desenvolvimento de um algoritmo para a otimização de distribuidores de vazão utilizados em microplantas químicas produtoras de biodiesel e vinho

Fernando Liedmann*, Osvaldir P. Taranto e Harrson S. Santana

Resumo

Atualmente, com o avanço da impressão 3D e consequente desenvolvimento da microfluídica, há diversos estudos sobre a produção de vários produtos, como biodiesel, em microrreatores. O presente trabalho busca aplicar um algoritmo de otimização da uniformidade de fluxo nas saídas dos distribuidores de vazão através da mudança do diâmetro de cada saída do distribuidor, o qual faz a distribuição dos reagentes para os microrreatores.

Palavras-chave: Algoritmo, Microfluídica, Microplanta.

Introdução

A microfluídica é a ciência que estuda escoamento de fluidos em estruturas com dimensões de micrômetros e suas principais vantagens são a utilização de menor quantidade de reagente e amostra, menor tempo de reação, baixo custo de fabricação, maior área superficial e elevada transferência de calor (*Whitesides, 2006*). O aumento da produção de um determinado produto pelo aumento da quantidade de microdispositivos é conhecido como escalonamento. O escalonamento pode ser realizado pela utilização de vários micro/milrreatores dispostos paralelamente e pela multiplicação desses microdispositivos. O aumento de produção utilizando microdispositivos é conhecido como microplanta química.

A configuração da microplanta que utiliza micro/milrreatores dispostos paralelamente permite trabalhar com diferentes temperaturas e pressões, sendo que a microplanta também é flexível na substituição de suas unidades. Para o seu funcionamento, é necessário um dispositivo que faça a distribuição uniforme de fluxo, conhecido por distribuidor de vazão, e uma estrutura de suporte que permita agrupar paralelamente os micro/milrreatores e que seja flexível de acordo com a demanda de produção. As etapas de desenvolvimento de microdispositivos foram demonstradas pelo grupo de pesquisa em outros trabalhos (*Santana et al., 2017; Santana et al. 2015*). Dentre as etapas do design da planta, estão o design do distribuidor da vazão dos reagentes para os dispositivos e o design da coluna (suporte dos dispositivos). A Figura 1 mostra um exemplo de microplanta química.

Uma boa distribuição de vazão é fundamental para o bom funcionamento da microplanta química. *Luo et al., 2015* propõe um algoritmo de otimização dos diâmetros de saída do distribuidor de acordo com a vazão obtida experimentalmente ou através de simulações. Nesse segundo caso, é necessário definir toda a geometria do distribuidor, como número de saídas (inclusive o diâmetro inicial das mesmas) e entradas, e as condições de escoamento para a simulação.



Figura 1. Exemplificação do processo de produção do biodiesel, onde a) são as bombas, b) e c) são os distribuidores de vazão, d) são os tubos que conectam os distribuidores a microplanta, e) é a estrutura de suporte da microplanta, f) são os quatro microrreatores, g) é a mistura de etanol e catalisador, h) é um óleo vegetal e i) são as chapas aquecedoras e agitadoras.



Metodologia

O algoritmo é composto dos seguintes passos:

- 1) Registrar os valores dos diâmetros de cada saída do distribuidor (D_i) e os valores da vazão em cada orifício (Q_i);
- 2) Calcular a vazão mássica média (Q);
- 3) Calcular as variações dos diâmetros das saídas (ΔD_i). Para isso, deve-se determinar um fator de relaxação γ (0,6, por exemplo) para controlar a amplitude da variação;
- 4) Calcular os novos diâmetros dos orifícios (D_i), conforme a Equação 1. Para ajustar o fator de relaxação, é necessário analisar se há muita variação nos novos diâmetros obtidos;
- 5) Aplicar os novos diâmetros em uma simulação ou um experimento e repetir o algoritmo até as vazões mássicas serem constantes.

Equação 1. Cálculo do novo diâmetro (iteração $t+1$) da saída i do distribuidor de vazão.

$$D_{i,t+1} = \gamma \left(1 - \frac{Q_{i,t}}{Q} \right) + D_{i,t}$$

Considerando regime permanente, escoamento incompressível e invíscido, sistema adiabático, isotérmico e sem trabalho de eixo, pode-se utilizar a Equação de Bernoulli modificada. Acrescentando a correlação de Hazen-Williams e o coeficiente de Darcy, é possível chegar a Equação 2 após algumas manipulações e considerações (variação de altura nula e variação de velocidade desprezível nos pontos escolhidos dentro de um tubo de saída do distribuidor).



Equação 2. Obtenção da vazão Q em um tubo. $(P_1 - P_2)$ é a diferença de pressão nos pontos 1 e 2, C é o coeficiente de Hazen-Williams (seu valor varia de acordo com o tipo de tubo), D é o diâmetro do tubo, L é o comprimento do tubo, ρ é a densidade do fluido e g é a aceleração da gravidade.

$$Q = \sqrt[1,85]{\frac{(P_1 - P_2)C^{1,85}D^{4,87}}{10,59L\rho g}}$$

Resultados e Discussão

Considerando os dados experimentais com água obtidos por *Lopes, 2018* e mostrados na Tabela 1, aplica-se o algoritmo proposto. Os dados para $100 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ serão utilizados para exemplificação do método.

Tabela 1. Valores experimentais obtidos por *Lopes, 2018* utilizando um distribuidor de vazão cônico.

Vazão Total ($\text{mL}\cdot\text{min}^{-1}$)	Saída			
	1	2	3	4
100	22,20	21,28	26,32	24,83
200	50,12	43,49	52,31	44,72
400	92,46	81,45	94,07	92,17

O coeficiente de Hazen-Williams foi escolhido como 140 ao considerar tubo liso. O diâmetro inicial de cada tubo da saída é baseado em *Lopes, 2018*. O comprimento do tubo é arbitrário, já que ele não influencia no resultado da iteração. Além disso, 1 cm é uma boa estimativa do comprimento de cada tubo de saída. Considera-se a massa específica média da água igual a 1000 kg/m^3 e a aceleração da gravidade igual a $9,81 \text{ m/s}^2$. O fator de relaxação foi determinado pela tentativa e erro.

Com as vazões dadas em cada saída e as constantes determinadas, pode-se calcular a perda de pressão em cada tubo pela manipulação da Equação 2, ao isolar o termo entre parênteses. A Tabela 2 mostra os resultados obtidos.

Tabela 2. Perda de pressão nos tubos (saídas do distribuidor) para $100 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$.

Tubo	Perda de Pressão (Pa)
1	0,232
2	0,215
3	0,318
4	0,286

Essas perdas de pressão foram consideradas como constantes para todas as iterações, já que suas variações são pequenas. Para dar maior validade a essa aproximação, o fator de relaxação igual a 0,001 faz leves alterações nos diâmetros dos tubos, o que altera pouco a perda de pressão. Aplicando a Equação 1 para os quatro tubos de saída na primeira iteração do algoritmo, tem-se os resultados na Tabela 3.

**Tabela 3.** Diâmetros obtidos para cada tubo após a primeira iteração.

Tubo	Diâmetro (m)
1	0,00316
2	0,00320
3	0,00299
4	0,00305

A variação parece pequena, mas considerando que o trabalho é realizado no campo da microfluídica, toda variação em milímetros ou em décimo de milímetros é relevante. Com isso, é possível simular quais seriam as novas vazões em cada tubo ao utilizar a Equação 2 e repetir o algoritmo para a segunda iteração. As vazões em cada saída se igualam após cerca de 6 iterações. A vazão média tem uma leve alteração durante as iterações por causa da aproximação da perda de pressão, a qual é considerada constante. A Tabela 4 mostra o resultado obtido para 100 mL.min⁻¹.

Tabela 4. Vazões e diâmetros (em mL.min⁻¹ e m, respectivamente) obtidos após 6 iterações para o distribuidor cônico com 4 saídas com vazão total de 100 mL.min⁻¹.

It.	Saídas								Q _{médio}
	1		2		3		4		
	Q ₁	D ₁	Q ₂	D ₂	Q ₃	D ₃	Q ₄	D ₄	
1	22,20	0,00316	21,28	0,00320	26,32	0,00299	24,83	0,00305	23,66
2	23,43	0,00317	23,19	0,00322	23,93	0,00297	23,85	0,00304	23,60
3	23,57	0,00317	23,52	0,00322	23,63	0,00297	23,63	0,00304	23,59
4	23,58	0,00317	23,58	0,00322	23,59	0,00297	23,59	0,00304	23,59
5	23,59	0,00317	23,58	0,00322	23,59	0,00297	23,59	0,00304	23,59
6	23,59	0,00317	23,59	0,00322	23,59	0,00297	23,59	0,00304	23,59

Um dos objetivos do grupo de pesquisa é utilizar de 8 a 16 microrreatores na microplanta química para uma produção em escala comercial, ou seja, é necessário a presença de distribuidores de vazão com 8 e 16 saídas. Para testar a eficiência do algoritmo para esses casos, valores iniciais arbitrários mas possíveis de vazão foram determinados para distribuidores de 8 e 16 saídas. O resultado foi excelente da mesma forma, alcançando valores finais com 6 iterações. Os dados obtidos para o distribuidor de 8 saídas são mostrados pela Tabela 5.

Tabela 5. Vazões arbitrárias iniciais utilizadas e diâmetros finais obtidos para o distribuidor de vazão com 8 saídas recebendo uma vazão total de 800 mL.min⁻¹.

Saída	Vazão Inicial (mL.min ⁻¹)	Diâmetro Final (m)
1	100,00	0,00309
2	105,00	0,00305
3	110,00	0,00298
4	115,00	0,00293
5	80,00	0,00336
6	98,00	0,00312
7	94,00	0,00316
8	98,00	0,00312



Apesar dos diâmetros finais dos distribuidores com mais saídas apresentarem maior variação (Tabela 6), isso não significa, necessariamente, que os distribuidores com maior número de saídas sempre apresentarão maior variação nos diâmetros finais, já que essa variável depende principalmente da uniformidade da vazão e não do número de saídas. Apesar da maior variação na vazão inicial no distribuidor com 8 saídas, ele apresentou menor variação no diâmetro final que o distribuidor de 16 saídas, pois o distribuidor de 8 saídas possui somente o tubo 5 com uma maior variação na vazão, conforme mostrado pela Tabela 5.

Tabela 6. Resumo da maior amplitude de variação na vazão inicial (em relação à vazão média) e no diâmetro final (em relação ao maior diâmetro).

Número de saídas	Variação na Vazão Inicial (%)	Variação no Diâmetro Final (%)
4 (100 mL.min ⁻¹)	21,30	7,76
4 (200 mL.min ⁻¹)	18,51	6,77
4 (400 mL.min ⁻¹)	6,32	2,39
8	35,00	12,80
16	25,00	14,93

Conclusão

A utilização do algoritmo foi validada para qualquer tipo de distribuidor cônico, seja com 4 ou n saídas. Um passo interessante de avanço nesse âmbito é intercalar testes experimentais ou simulações em algum software com as iterações para alcançar uma alta precisão nos valores dos diâmetros das saídas.

Referências Bibliográficas

- LOPES, M. G. M.; SANTANA, H. S.; ANDOLPHATO, V. F.; RUSSO, F. N.; SILVA JR. J. L.; TARANTO, O. P. 3D printed micro-chemical plant for biodiesel synthesis in millireactors. *Energy Conversion and Management*, v. 184, p. 475-487, 2019.
- LOPES, M. G. M.; SANTANA, H. S.; ANDOLPHATO, V. F.; SILVA JR. J. L.; TARANTO, O. P. CFD analysis of flow distributor designs for numbering-up of biodiesel synthesis. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 138, p. 458-471, 2018.
- LUO, L.; WEI, M.; FAN, Y.; FLAMANT, G. Heuristic shape optimization of baffled fluid distributor for uniform flow distribution. *Chemical Engineering Science*, p. 542-556, 2015.
- SANTANA, H. S.; SILVA JR, J. L.; TARANTO, O. P. Optimization of micromixer with triangular baffles for chemical process in millidevices. *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 281, p. 191-203, 2019.
- SANTANA, H. S.; TORTOLA, D. S.; SILVA Jr, J. L.; TARANTO, O. P. Biodiesel synthesis in micromixer with static elements. *Energy Conversion and Management*, v. 141, p. 28-39, 2017.
- WHITESIDES, G. M. The origins and the future of microfluidics. *Nature*, v. 442, p. 368-373, 2006