



# FBT 5776 – Tópicos Especiais em Tecnologia Bioquímico-Farmacêutica II

Tema: Desenvolvimento de Microrreatores

Harrson S. Santana

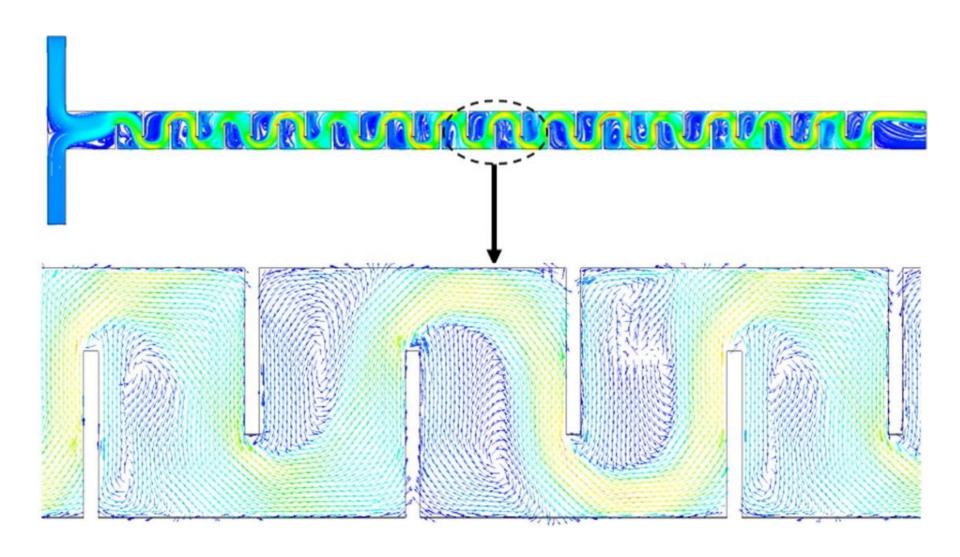
harrson@unicamp.br

https://www.blogs.unicamp.br/microfluidicaeengenhariaquimica/

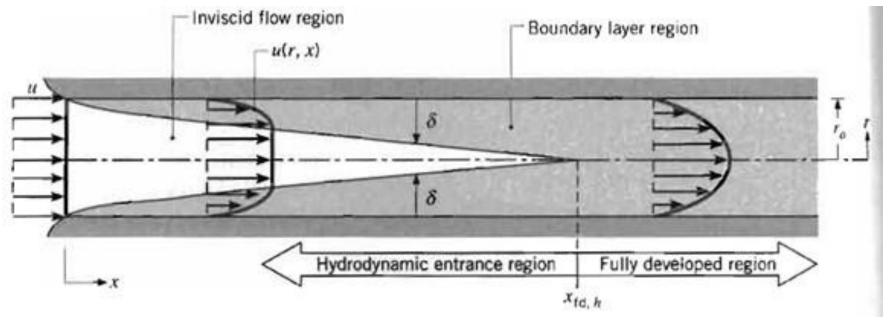


# Fenômenos de Transporte





☐ Desenvolvimento de camada-limite fluidodinâmica laminar em um tubo circular



$$\tau = \mu \frac{du}{dy}$$

$$\tau = f(\dot{\gamma}) \rightarrow \tau = \mu \dot{\gamma}$$

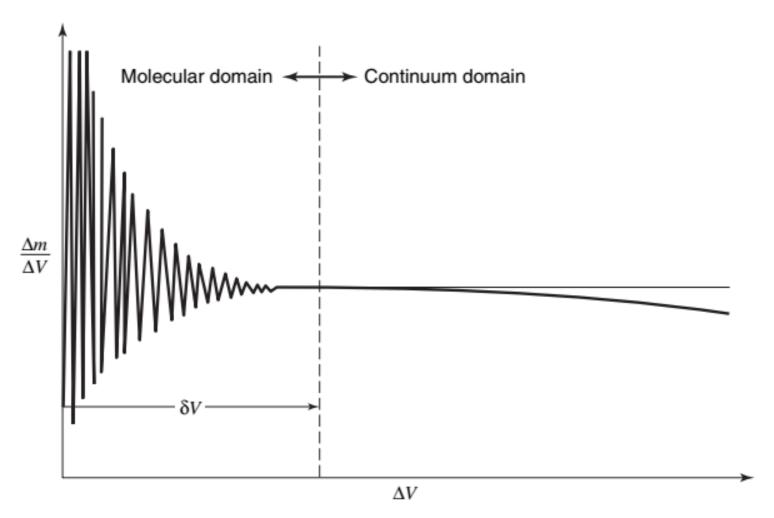
$$\begin{bmatrix} Tens\~ao \\ de \\ cisalhamento \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Viscosidade \\ din\^amica \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} Taxa \\ de \\ deformaç\~ao \end{bmatrix}$$

## Fenômenos de transporte em microescala

- ☐ Fenômenos de transporte em microdispositivo podem ser descritos teoricamente em dois níveis básicos: nível molecular e contínuo.
- ☐ O modelo contínuo pode descrever a maioria dos fenômenos de transporte em dispositivos com um comprimento de escala variando de micrômetros a centímetros.
- ☐ **Modelos moleculares** envolvem fenômenos de transporte na faixa de nanômetros.

## Fenômenos de transporte em microescala

☐ Hipótese do *continuum* em fluidos ilustrada para medir a densidade



6

## Fenômenos de transporte em microescala

#### ☐ Hipótese do *continuum*

- ✓ É válido quando o menor volume de fluido de interesse contém um número suficiente de moléculas que torna as médias estatísticas significativas.
- ✓ Todas as quantidades de interesse, como densidade, velocidade e pressão, são definidas em qualquer lugar no espaço e variam continuamente de um ponto a outro dentro do fluido.
- ✓ Em um canal de 10 μm possui aproximadamente 30000 moléculas de água suficiente para o escoamento ser considerado contínuo.

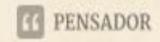
## Hipótese do continuum

- □ No nível contínuo, os fenômenos de transporte são descritos como um conjunto de equações de conservação.
- ☐ As três equações básicas de conservação são:
  - ✓ Conservação de massa: equação de continuidade
  - ✓ Conservação do momento: a segunda lei de Newton ou a equação de Navier-Stokes
  - ✓ Conservação de energia: primeira lei da termodinâmica ou equação de energia.

## Hipótese do continuum

- No nível contínuo, os fenômenos de transporte são descritos como um conjunto de equações de conservação.
- ☐ E para descrever o transporte de espécies:
  - ✓ Conservação das espécies: equação convectiva/difusiva
  - ✓ Leis das reações químicas

## Conservação da Massa

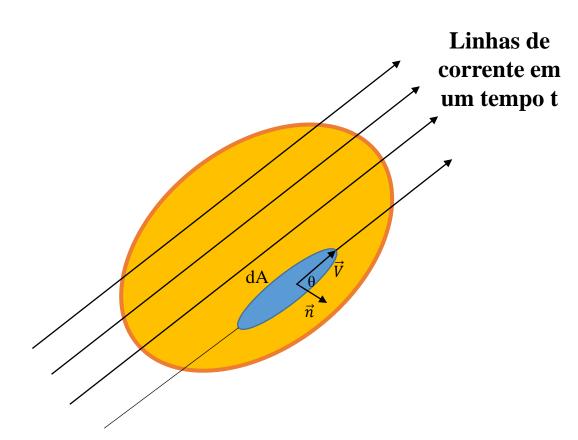


# Na natureza nada se cria, nada se perde, tudo se transforma.

Antoine Lavoisien

#### ☐ Equação da Continuidade ou Conservação da Massa

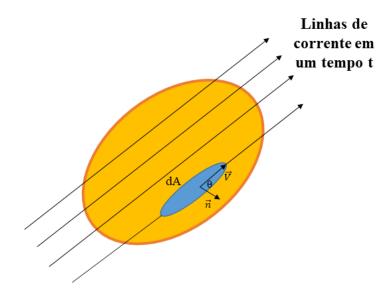
✓ A lei da conservação da massa estabelece que ela não pode ser criada nem destruída



Considerando um volume de controle – região fixa no espaço – localizado em um campo de escoamento de fluido

□ Equação da Continuidade ou Conservação da Massa

$$\left\{ \begin{matrix} Taxa \ de \ massa \\ que \ sai \ do \ volume \\ de \ controle \end{matrix} \right\} - \left\{ \begin{matrix} Taxa \ de \ massa \\ que \ entra \ no \ volume \\ de \ controle \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} Taxa \ de \ acúmulo \ no \\ volume \ de \ controle \end{matrix} \right\} = 0$$



 $Taxa\ de\ massa\ \equiv [\rho vA]$ 

□ Equação da Continuidade ou Conservação da Massa

$$\iint_{SC} \rho(\vec{v} \cdot \vec{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \rho dV = 0$$

#### □ Equação da Continuidade ou Conservação da Massa

✓ Expressão geral para o balanço de massa global – Forma integral

$$\iint_{SC} \rho(\vec{v} \cdot \vec{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \rho dV = 0$$

Fluxo líquido de massa no VC → taxa de massa que sai – taxa de massa que entra Taxa de acúmulo de massa: variação da massa com o tempo no VC.

☐ Equação da Continuidade ou Conservação da Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

☐ Equação da Continuidade ou Conservação da Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$
Equação da Continuidade

□ Equação da Continuidade ou Conservação da Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

$$Escoamento incompressível$$

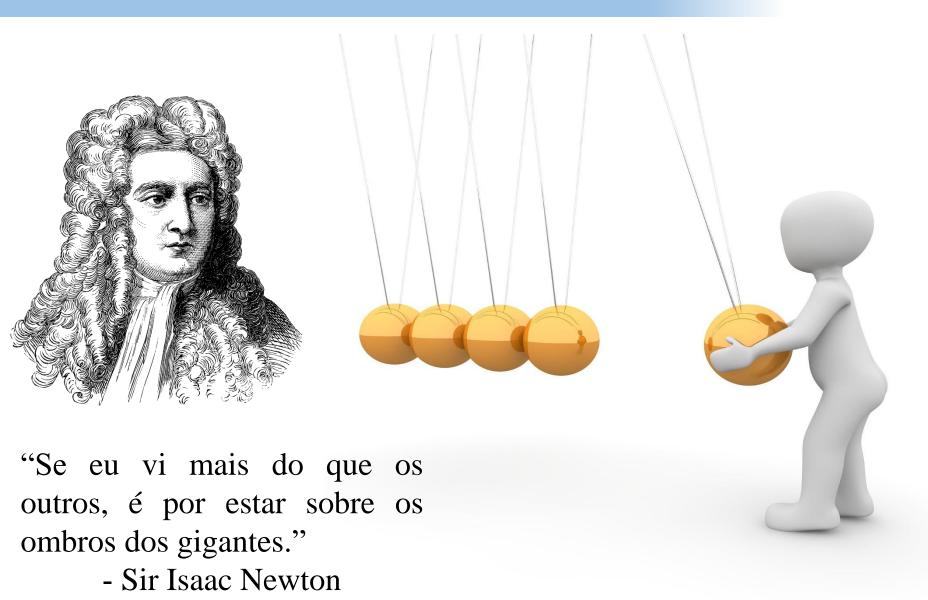
$$\nabla \cdot \vec{v} = 0$$

☐ Equação da Continuidade ou Conservação da Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

$$Escoamento incompressível$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$$



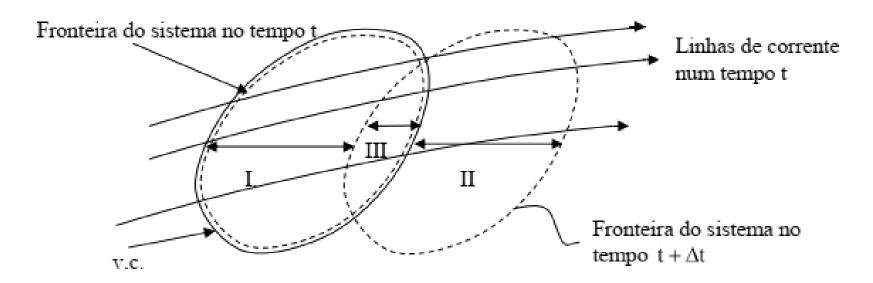
#### ☐ Equação de Navier-Stokes

✓ A taxa de mudança de momentum de um sistema é igual à somatória das forças que atuam no sistema

$$\sum \vec{F} = \frac{dP}{dt} = \frac{d(m\vec{v})}{dt} = m\frac{d\vec{v}}{dt} + \vec{v}\frac{dm}{dt}$$

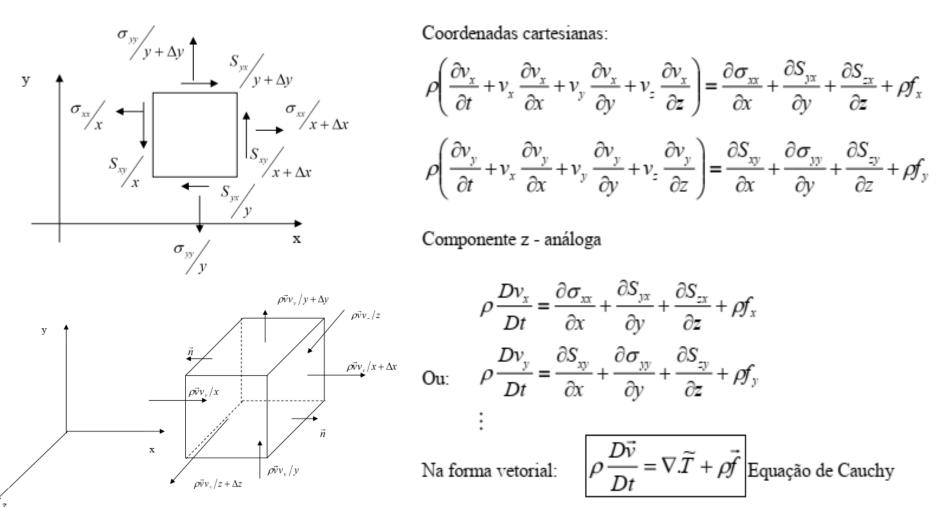
#### ☐ Equação de Navier-Stokes

Seja o volume de controle (v.c) e o sistema que corresponde ao material contido no v.c. no tempo t



$$\begin{bmatrix} Soma\ das\ forças\ que\\ atuam\ no\ sistema\\ (material\ contido\ no\ v.c.) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Taxa\ de\\ acúmulo\ de\\ m.l.no\ v.c. \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Taxa\ líquida\\ de\ m.l.no\ v.c. \end{bmatrix}$$

#### ☐ Equação de Navier-Stokes



Coordenadas cartesianas:

$$\rho \left( \frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial S_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial S_{zx}}{\partial z} + \rho f_z$$

$$\rho \left( \frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = \frac{\partial S_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial S_{zy}}{\partial z} + \rho f_y$$

Componente z - análoga

$$\rho \frac{Dv_x}{Dt} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial S_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial S_{zx}}{\partial z} + \rho f_x$$

Ou: 
$$\rho \frac{Dv_y}{Dt} = \frac{\partial S_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial S_{zy}}{\partial z} + \rho f_y$$

Na forma vetorial: 
$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \nabla . \tilde{T} + \rho \vec{f}$$
 Equação de Cauchy

22

#### ☐ Equação de Navier-Stokes

✓ Se o fluido for Newtoniano, incompressível e escoamento laminar a Equação de Cauchy torna-se:

$$\begin{cases} \rho \frac{Dv_x}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \nabla^2 v_x + \rho f_x \\ \rho \frac{Dv_y}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \nabla^2 v_y + \rho f_y \end{cases} \qquad \begin{array}{c} \textbf{Equações de} \\ \textbf{Navier-Stokes} \\ \rho \frac{Dv_z}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \nabla^2 v_z + \rho f_z \end{cases}$$

☐ Equação de Navier-Stokes

✓ Na forma vetorial:

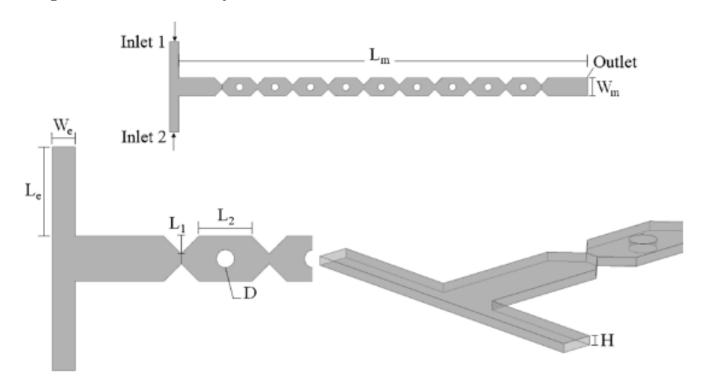
$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{f} + \mu \nabla^2 \vec{v} - \vec{\nabla} P$$

Equação de Navier-Stokes

Equação de Cauchy para fluido Newtoniano, incompressível e escoamento laminar

#### ☐ Equação de Navier-Stokes

✓ Em microdispositivos, muitas vezes encontramos um fluxo movido pela pressão (*pressure-driven flow*) em um microcanal reto.



☐ Equação de Navier-Stokes

✓ Considerando um fluxo na direção do eixo *x* plenamente desenvolvido, como ficaria a Equação de Navier-Stokes?

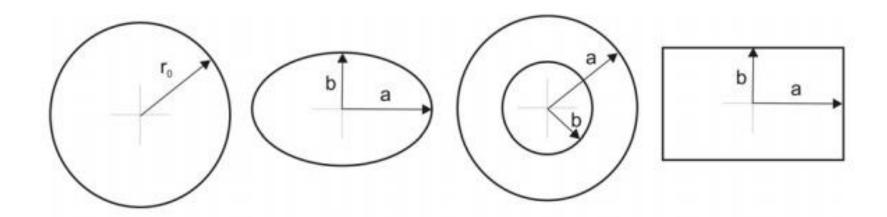
#### ☐ Equação de Navier-Stokes

✓ Considerando um fluxo na direção do eixo *x* plenamente desenvolvido, como ficaria a Equação de Navier-Stokes?

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dx}$$

#### ☐ Equação de Navier-Stokes

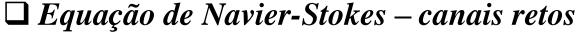
✓ Aplicando a condição de contorno de não-escorregamento na parede do canal, uma solução analítica pode ser obtida para canais com geometria de seção simples (círculo, elipse, anel concêntrico, retângulo e triângulo equilátero)

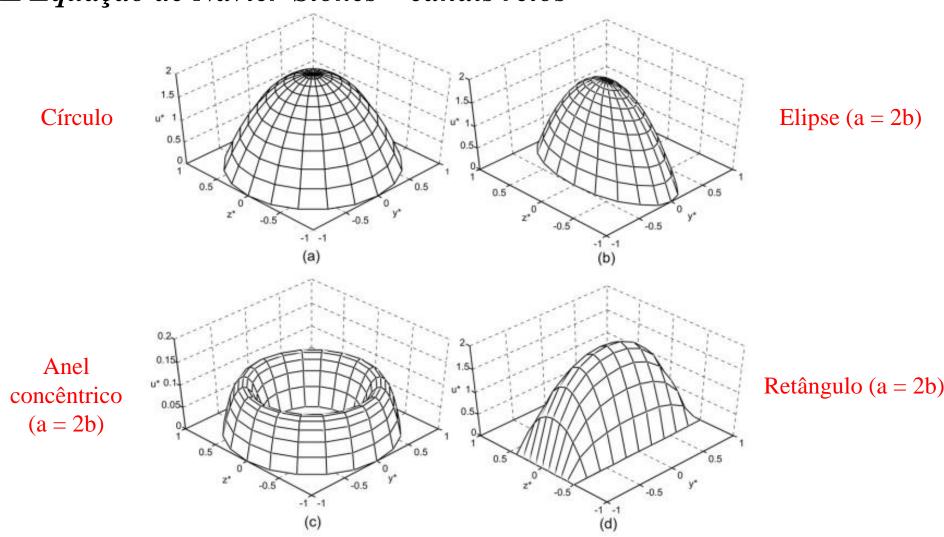


28

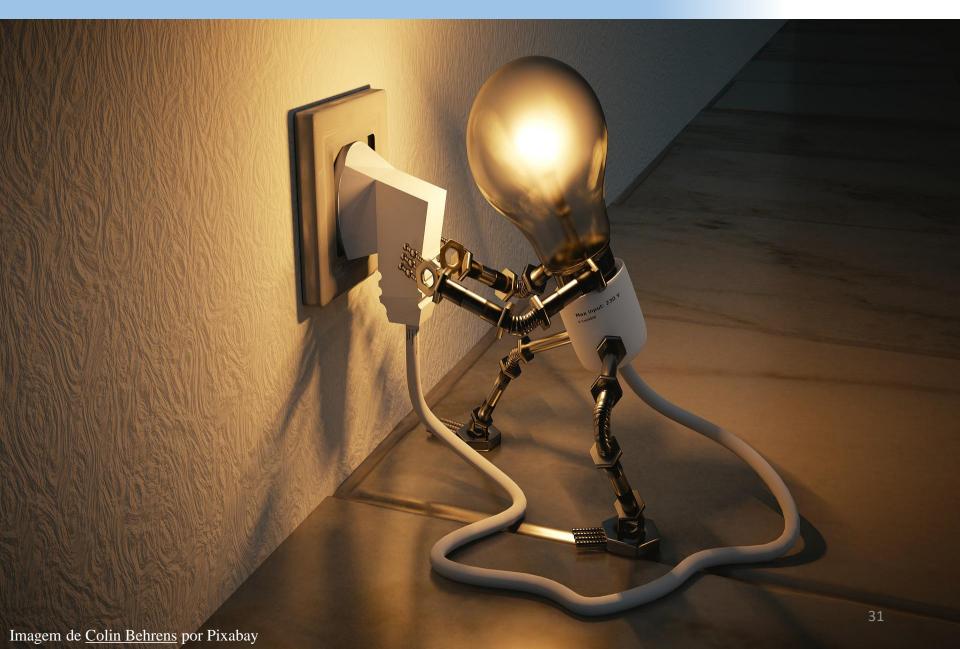
#### ☐ Equação de Navier-Stokes — canais retos

Table 2.2 Analytical solution for velocity field inside a straight channel	
Channel Type	Solution
Circle	$u^*(r) = 2\left(1 - \frac{r^2}{r_0^2}\right)$
	$\overline{u} = \frac{1}{8\mu} \left( -\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} \right) r^2$
Ellipse	$u^*(y,z) = 2\left(1 - \frac{y^2}{a^2} - \frac{z^2}{b^2}\right)$
	$\overline{u} = \frac{1}{4\mu} \left( -\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} \right) \frac{a^2 b^2}{a^2 + b^2}$
Concentric annulus	$u^{\star}(r) = 2\left[a^2 - r^2 + \left(a^2 - b^2\right)\frac{\ln(a/r)}{\ln(b/a)}\right] / \left[a^2 + b^2 - \frac{a^2 - b^2}{\ln(a/b)}\right]$
	$\overline{u} = \frac{1}{8\mu} \left( -\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} \right) \left[ a^2 + b^2 - \frac{a^2 - b^2}{\ln(a/b)} \right]$
Rectangle	$u^{\star}(y,z) = \frac{48}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \left[ \left\{ 1 - \frac{\cosh[(2n-1)\pi z/2a]}{\cosh[(2n-1)\pi b/2a)]} \right\} \times \frac{\cosh[(2n-1)\pi y/2a]}{(2n-1)^3} \right] / \left\{ 1 - \frac{192a}{\pi^5 b} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tanh[(2n-1)\pi b/2a]}{(2n-1)^5} \right\}$
	$\overline{u} = \frac{a^2}{3\mu} \left( -\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} \right) \left\{ 1 - \frac{192a}{\pi^5 b} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tanh[(2n-1)\pi b/2a]}{(2n-1)^5} \right\}$





30



#### □ Primeira lei da Termodinâmica

✓ A primeira lei da termodinâmica diz que a variação na energia interna de um sistema  $\Delta U$ é igual à transferência de calor resultante para dentro do sistema Q, mais o trabalho resultante realizado no sistema W.

$$\Delta U = Q + W$$

$$\delta Q - \delta W = dE$$

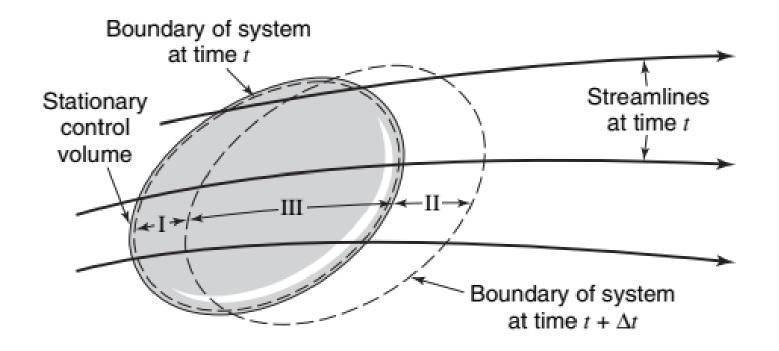
 $\delta Q$  é positivo quando o calor é adicionado ao sistema

 $\delta W$  é positivo quando o trabalho é feito pelo sistema

1° Lei da Termodinâmica

#### ☐ Equação da Energia

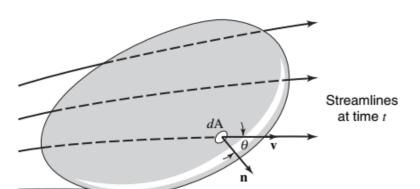
✓ Relação entre um sistema e um volume de controle em um campo de fluxo de fluido.



#### □ Equação da Energia

$$\left\{ egin{array}{l} taxa\ de\ adição\ de\ calor\ para\ o\ volume\ de\ controle\ de\ seus\ arredores \end{array} 
ight\} - \left\{ egin{array}{l} taxa\ de\ energia\ realizado\ pelo\ volume\ de\ controle\ devido\ ao\ escoamento\ devido\ ao\ escoamento\ de\ volume\ de\ controle\ de\ controle\$$

$$- \left\{ \begin{matrix} taxa \ de \ energia \\ que \ entra \ no \ volume \ de \ controle \\ devido \ ao \ escoamento \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} taxa \ de \ acúmulo \\ de \ energia \ dentro \ do \\ volume \ de \ controle \end{matrix} \right\}$$



Fluxo de fluido através de um volume de controle

□ Equação da Energia

$$\left\{
 \begin{array}{c}
 taxa de adição \\
 de calor para o \\
 volume de controle \\
 de seus arredores
 \end{array}
 \right\} \rightarrow \frac{\delta Q}{dt}$$

$$\begin{cases} taxa \ de \ trabalho \\ realizado \ pelo \\ volume \ de \ controle \\ nos \ arredores \end{cases} \rightarrow \frac{\delta W}{dt}$$

#### □ Equação da Energia

$$\left\{ \begin{matrix} taxa \ de \ energia \\ que \ sa\'i \ do \ volume \ de \ controle \\ devido \ ao \ escoamento \end{matrix} \right\} - \left\{ \begin{matrix} taxa \ de \ energia \\ que \ entra \ no \ volume \ de \ controle \\ devido \ ao \ escoamento \end{matrix} \right\}$$

$$= \iint_{SC} e\rho(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}) dA$$

$$\begin{cases} taxa \ de \ acúmulo \\ de \ energia \ dentro \ do \\ volume \ de \ controle \end{cases} = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} e\rho dV$$

### □ Equação da Energia

✓ Substituindo todos esses termos, temos:

$$\frac{\delta Q}{dt} - \frac{\delta W}{dt} = \iint_{SC} e\rho(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} e\rho dV$$

### □ Equação da Energia

✓ Substituindo todos esses termos, temos:

$$\frac{\delta Q}{dt} - \frac{\delta W}{dt} = \iint_{SC} e\rho(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} e\rho dV$$

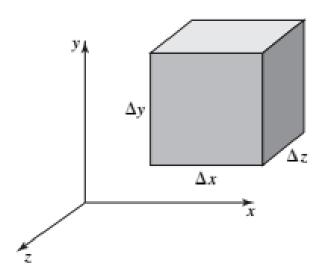
W → trabalho de eixo, trabalho de fluxo e trabalho de cisalhamento

$$\frac{\delta Q}{dt} - \frac{\delta W_s}{dt} = \iint_{SC} \left( e + \frac{P}{\rho} \right) \rho(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} e\rho dV + \frac{\delta W_{\mu}}{dt}$$

### □ Equação da Energia

✓ Pode-se avaliar os termos da Equação Geral da 1° Lei para um volume de controle diferencial.

$$\frac{\delta Q}{dt} - \frac{\delta W_s}{dt} - \frac{\delta W_{\mu}}{dt} = \iint_{SC} \left( e + \frac{P}{\rho} \right) \rho(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} e\rho dV$$



□ Equação da Energia

$$\begin{cases} taxa\ de\ adição\\ de\ calor\ para\ o\\ volume\ de\ controle\\ de\ seus\ arredores \end{cases} \rightarrow \frac{\delta Q}{dt} = \left[k\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x+\Delta x} - k\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x}\right] \Delta y\ \Delta z + \left[k\frac{\partial T}{\partial y}\Big|_{y+\Delta y} - k\frac{\partial T}{\partial y}\Big|_{y}\right] \Delta x\ \Delta z \\ + \left[k\frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z+\Delta z} - k\frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z}\right] \Delta x\ \Delta y + \dot{q}\ \Delta x\ \Delta y\ \Delta z \end{cases}$$

$$\begin{cases} taxa\ de\ trabalho\\ realizado\ pelo\\ volume\ de\ controle\\ nos\ arredores \end{cases} \rightarrow \qquad \frac{\delta W_s}{dt} = 0 \qquad \frac{\delta W_\mu}{dt} = \Lambda\ \Delta x\ \Delta y\ \Delta z$$

### □ Equação da Energia

$$\begin{cases} \text{taxa de energia} \\ \text{que saí do volume de controle} \\ \text{devido ao escoamento} \end{cases} - \begin{cases} \text{taxa de energia} \\ \text{que entra no volume de controle} \\ \text{devido ao escoamento} \end{cases}$$

$$\int \int_{\mathbf{c.s.}} \left( e + \frac{P}{\rho} \right) \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA$$

$$= \left[ \rho v_x \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \Big|_{x + \Delta x} - \rho v_x \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \Big|_x \right] \Delta y \ \Delta z$$

$$+ \left[ \rho v_y \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \Big|_{y + \Delta y} - \rho v_y \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \Big|_y \right] \Delta x \ \Delta z$$

$$+ \left[ \rho v_z \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \Big|_{z + \Delta z} - \rho v_z \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \Big|_z \right] \Delta x \ \Delta y$$

### □ Equação da Energia

$$\begin{cases} taxa \ de \ ac\'umulo \\ de \ energia \ dentro \ do \\ volume \ de \ controle \end{cases} = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} e\rho dV$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\text{c.v.}} e\rho \, dV = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{v^2}{2} + gy + u \right] \rho \, \Delta x \, \Delta y \, \Delta z$$

### □ Equação da Energia

✓ Combinando as equações anteriores na expressão geral da primeira lei, dividindo pelo volume do elemento e avaliando no limite como  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$  aproximam-se de zero, a equação se torna:

$$\begin{split} &\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} + \Lambda \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \rho v_x \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \rho v_y \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \rho v_z \left( \frac{v^2}{2} + gy + u + \frac{P}{\rho} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \frac{v^2}{2} + gy + u \right) \right] \end{split}$$

### □ Equação da Energia

✓ Introduzindo derivadas substantivas, considerando escoamento incompressível e expressando a função Λ em termos de viscosidade (e.g. tensão de cisalhamento), temos a Equação da Energia:

$$\nabla \cdot k\nabla T + \dot{q} + \Phi = \rho c_v \frac{DT}{Dt}$$

### □ Equação da Energia – Formas especiais

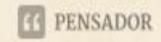
✓ Assumindo um fluxo incompressível, uma condutividade térmica constante e ignorando a mudança de energia cinética, a equação da energia pode ser simplificada para a equação de convecção de calor:

$$\rho c_v \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T$$

### □ Equação da Energia – Formas especiais

✓ Na situação em que não há movimento fluido, toda a transferência de calor é por condução. Nesta situação (e.g., sólidos) a equação de energia se torna :

$$\rho c_{v} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot k \nabla T + \dot{q}$$



# Na natureza nada se cria, nada se perde, tudo se transforma.

Antoine Lavoisien

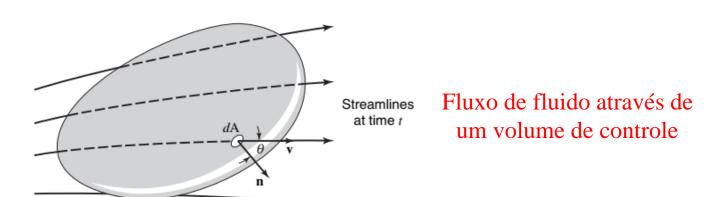
# Conservação da Massa - Componentes



### ☐ Lei de Conservação da Massa

Massa não pode ser criada nem destruída!

$$\iint_{\mathbf{c.s.}} \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\mathbf{c.v.}} \rho \ dV = 0 \quad (4-1)$$



☐ Lei de Conservação da Massa

\* Equação da continuidade para o componente A

$$\nabla \cdot \mathbf{n}_A + \frac{\partial \rho_A}{\partial t} - r_A = 0$$

### ☐ Lei de Conservação da Massa

✓ Expressando  $\mathbf{n}_{A}$  como:

$$\mathbf{n}_A = -\rho D_{AB} \nabla w_A + \rho_A \mathbf{v}$$

✓ Dividindo pela massa molecular do componente A e rearranjando:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla c_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB} \nabla^2 c_A + R_A$$

### ☐ Lei de Conservação da Massa

✓ Balanço de massa para n espécies químicas – Exemplo!

$$\rho(U \cdot \nabla Y_{TG}) = \rho D_{TG} \nabla^2 Y_{TG} + M_{WTG}(r_{TG})$$

$$\rho(U \cdot \nabla Y_A) = \rho D_A \nabla^2 Y_A + M_{WA} (3r_{TG})$$

$$\rho(U \cdot \nabla Y_{GL}) = \rho D_{GL} \nabla^2 Y_{GL} + M_{WGL}(-r_{TG})$$

$$\rho(U \cdot \nabla Y_E) = \rho D_E \nabla^2 Y_E + M_{WE}(-3r_{TG})$$