

# FBT 5776 – Tópicos Especiais em Tecnologia

## Bioquímico-Farmacêutica II

### **Tema: Desenvolvimento de Microrreatores**

Harrison S. Santana

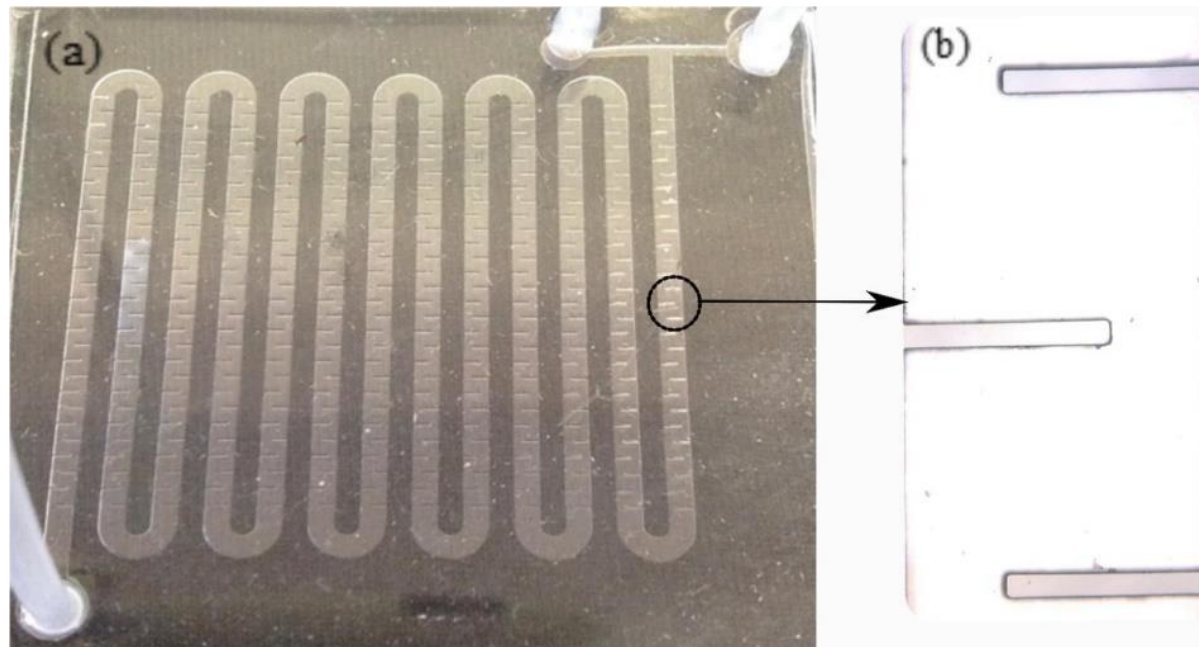
`harrison@unicamp.br`

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

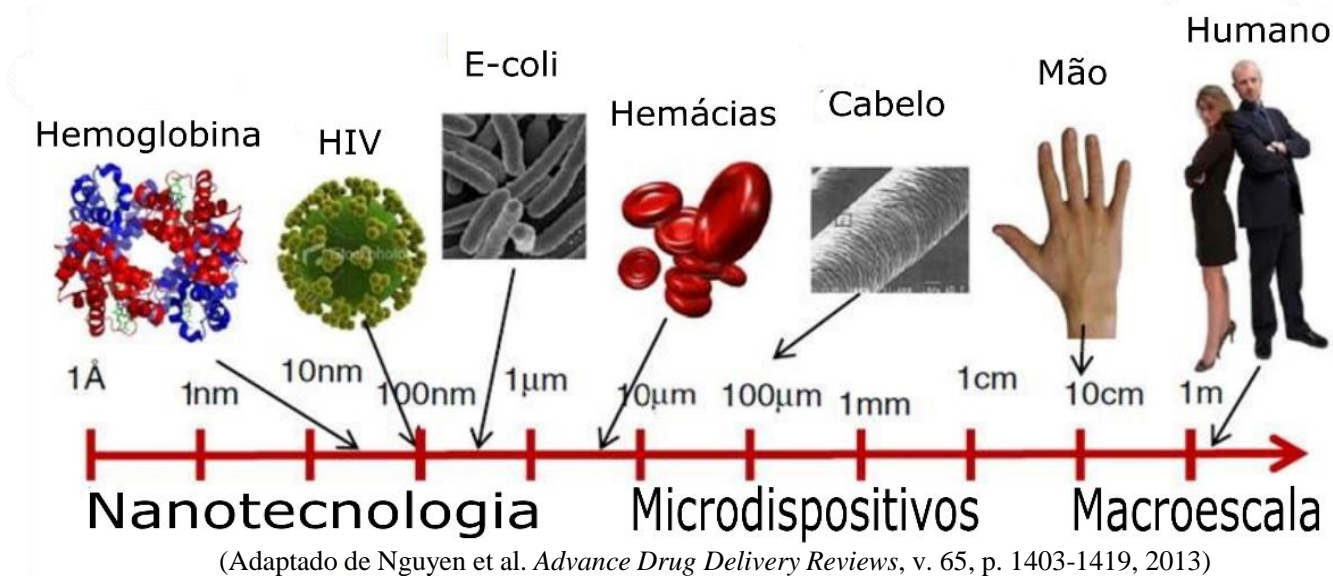
   @meqblog

# Microrreatores

- ❑ **Microrreatores** ou reatores de microcanais são dispositivos que possuem microcanais interconectados, nos quais pequenas quantidades de reagentes são manipuladas e reagem por um determinado período de tempo.



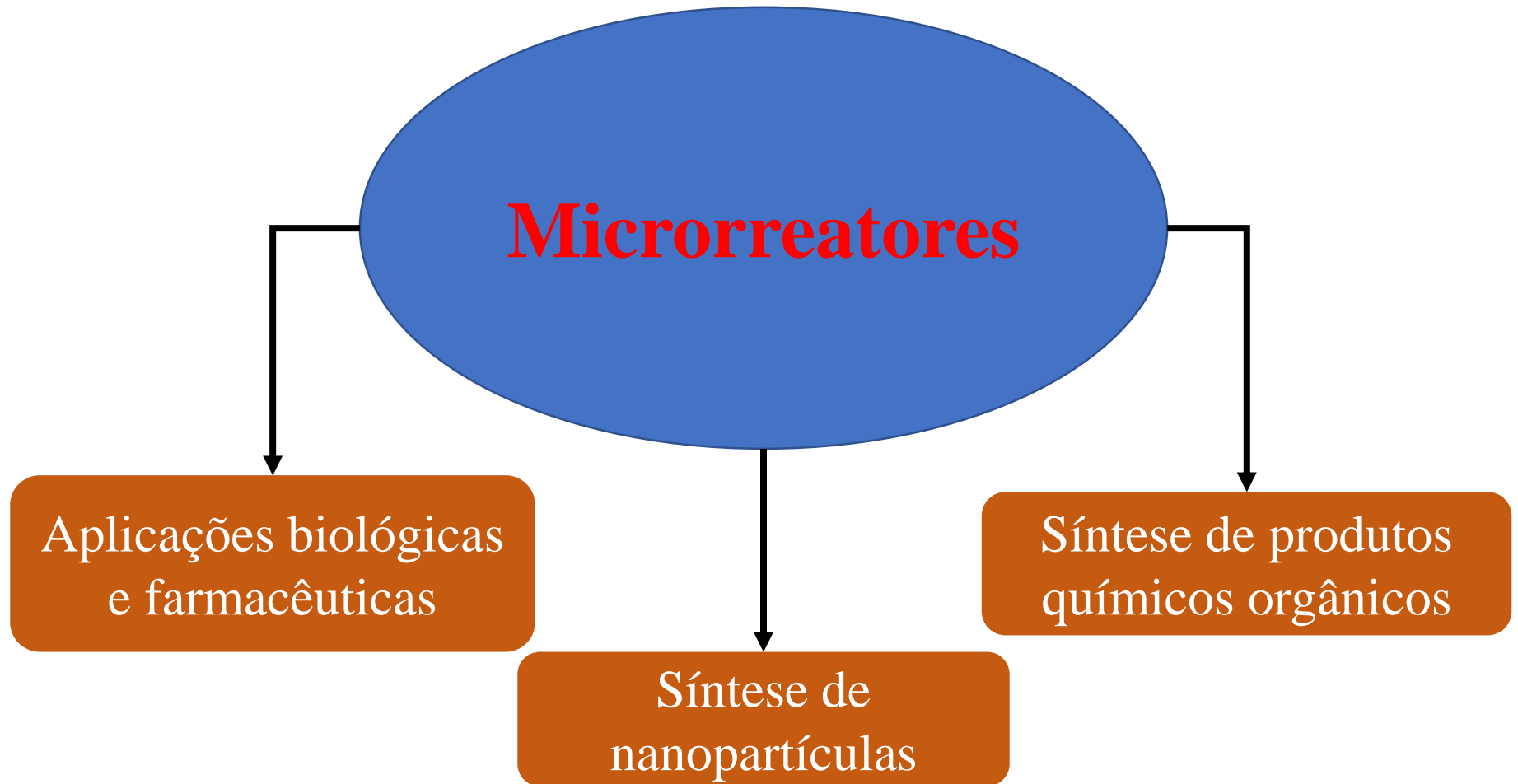
# Microrreatores



## ❑ Características tradicionais dos microrreatores

- Menor quantidades de reagentes e amostras;
- Área superficial elevada em relação ao volume ( $10000 \text{ m}^2 \text{ m}^{-3}$ )
- Redução das resistências à transferência de calor e massa;
- Tempo de reações menores;
- Distribuições mais estreitas de tempo de residência

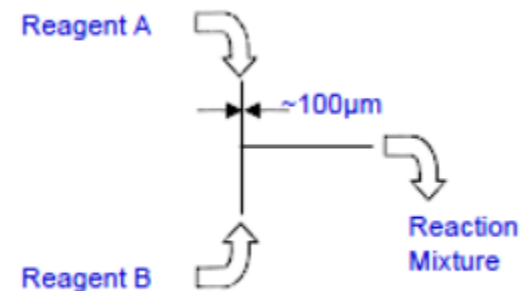
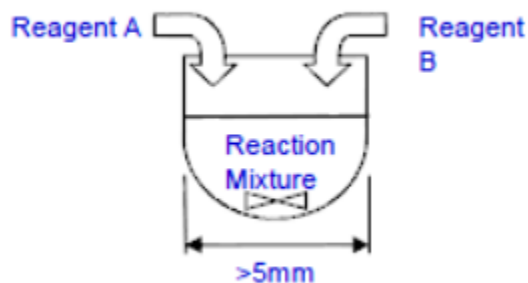
# *Aplicações de microrreatores*



# *Reator em batelada vs. microrreator*



# *Reator em batelada vs. microrreator*



# *Reator em batelada vs. microrreator*

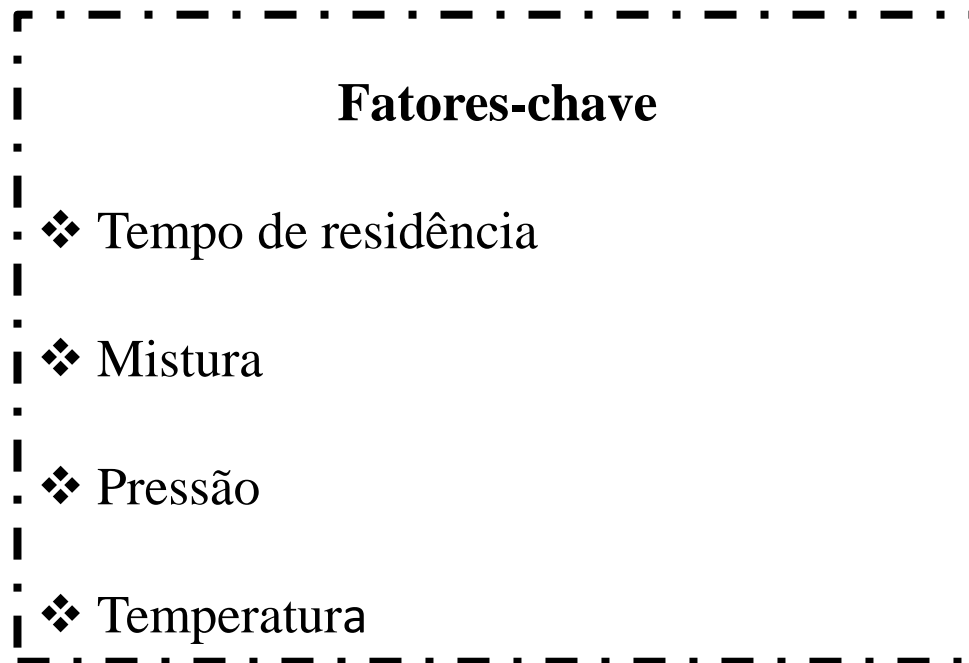
## ❑ Princípios dos microrreatores

- ✓ Os reagentes são continuamente bombeados para o reator
- ✓ Os reagentes se misturam e reagem dentro do reator de fluxo
- ✓ O produto deixa o reator de forma contínua

# *Reator em batelada vs. microrreator*

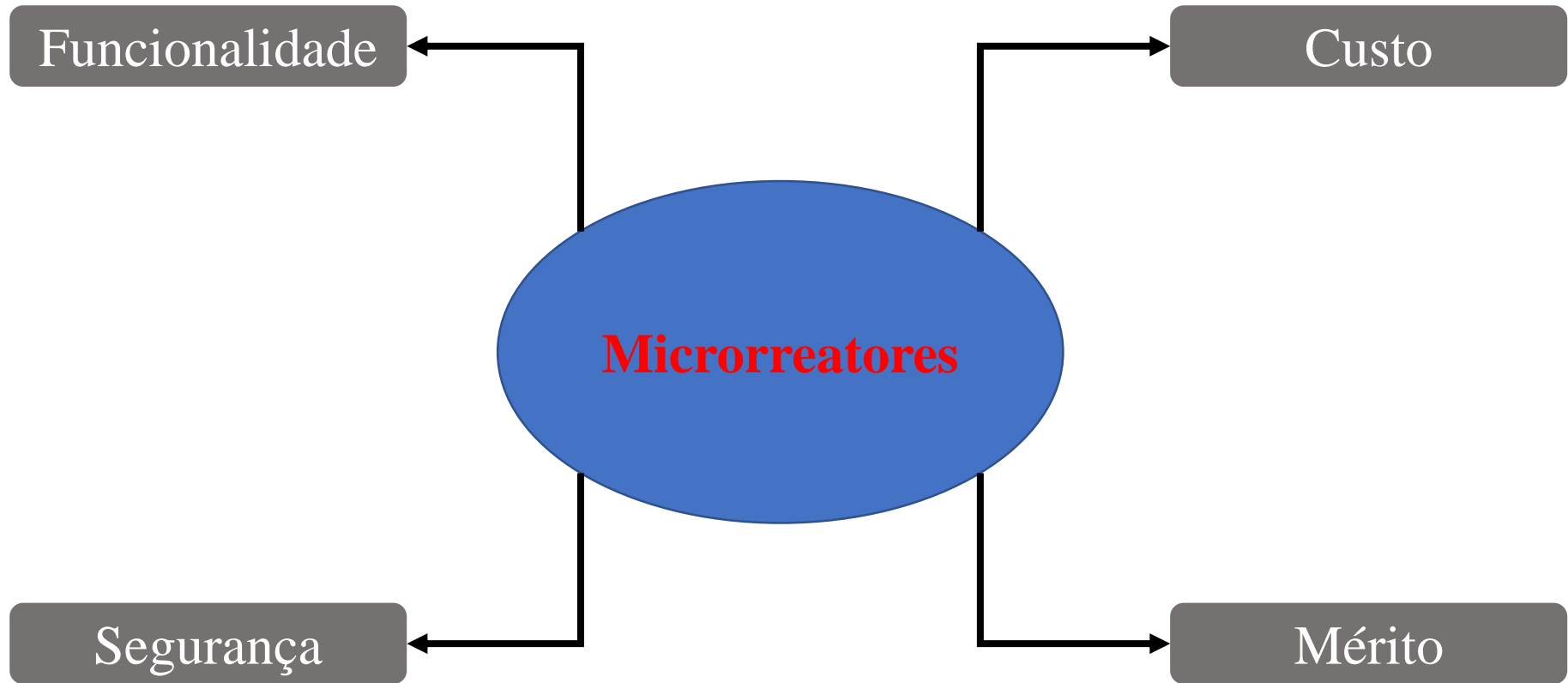
## ❑ Princípios dos microrreatores

- ✓ Os reagentes são continuamente bombeados para o reator
- ✓ Os reagentes se misturam e reagem dentro do reator de fluxo
- ✓ O produto deixa o reator de forma contínua

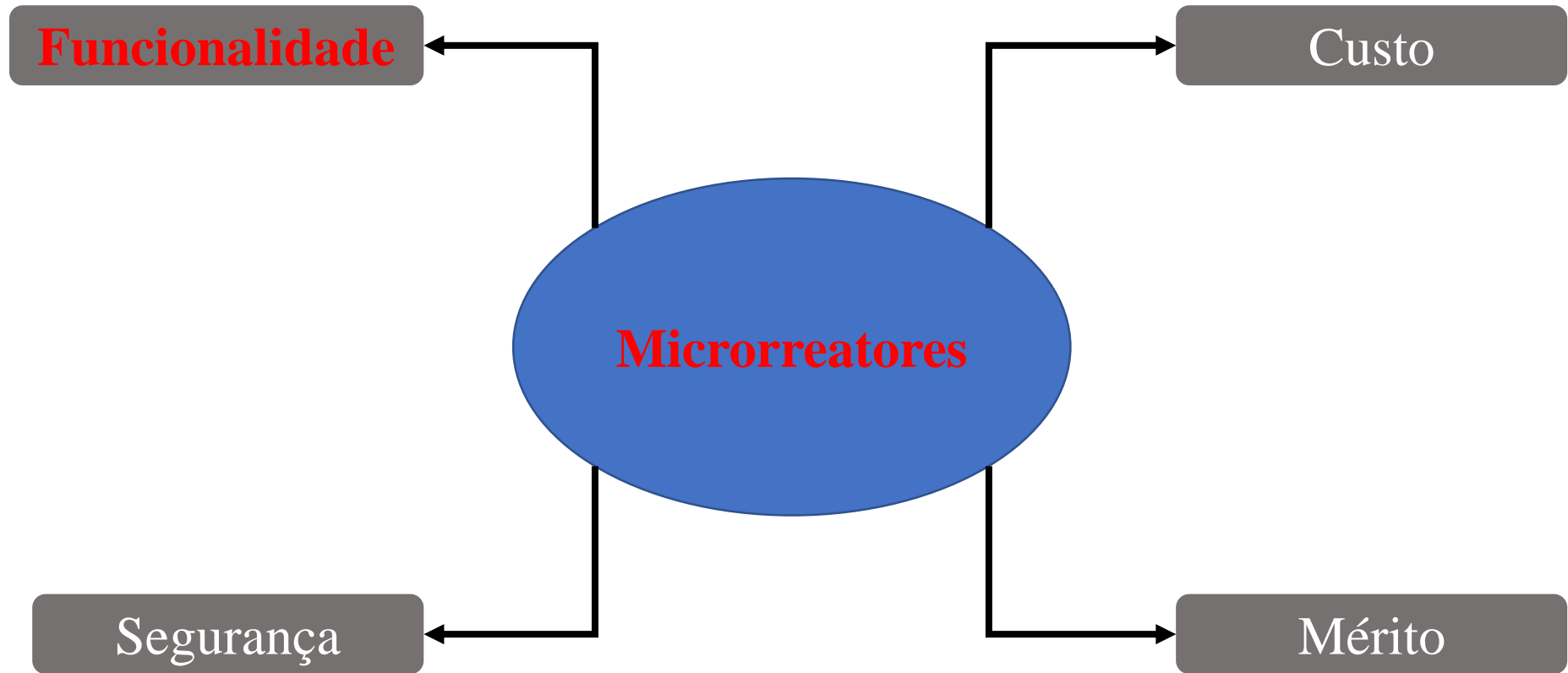




# *Vantagens dos microrreatores*



# *Vantagens dos microrreatores*

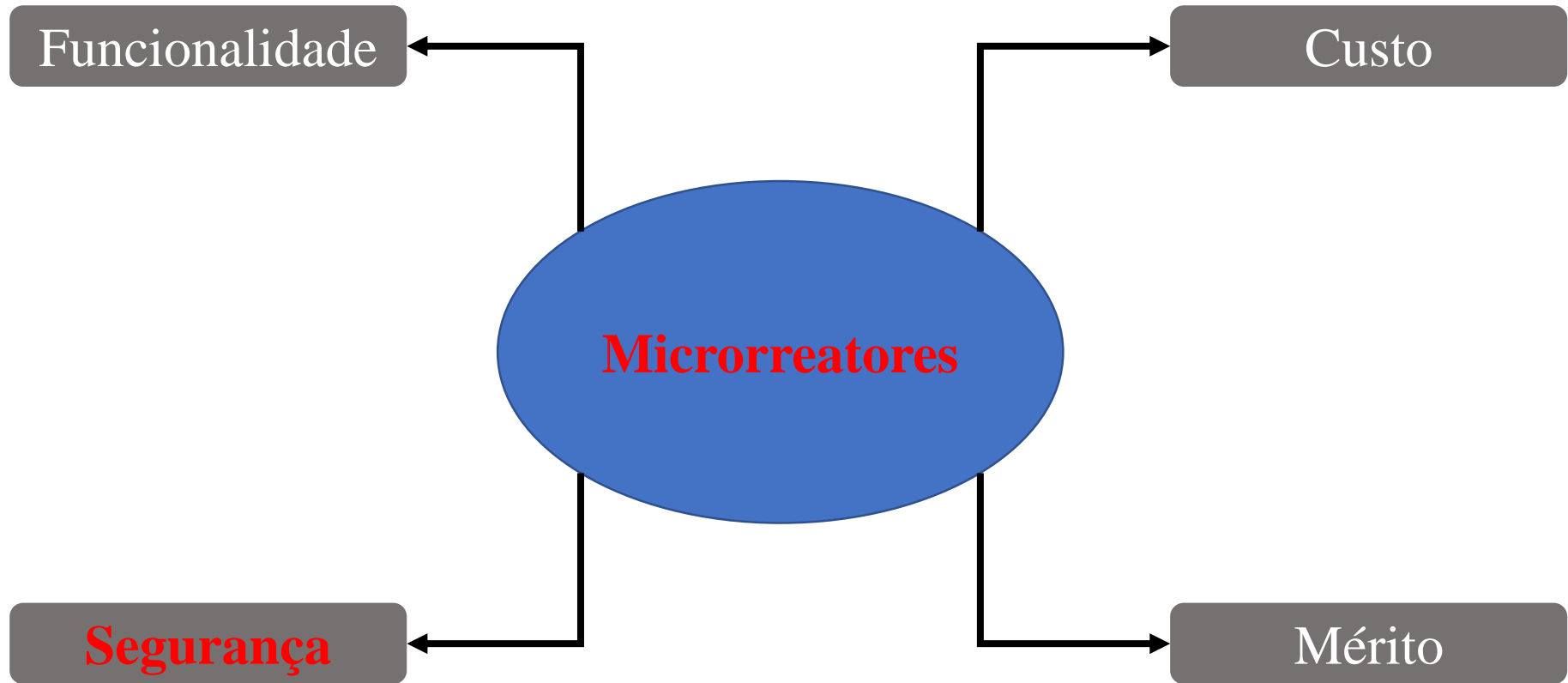


# *Funcionalidade*

❑ Os ganhos de funcionalidade dos microrreatores são:

- ✓ Pequenas inércias térmicas;
- ✓ Elevados gradientes de propriedades físicas & Temperaturas uniformes;
- ✓ Reduzidos tempos de residência;
- ✓ Alta razão superfície-volume.

# *Vantagens dos microrreatores*



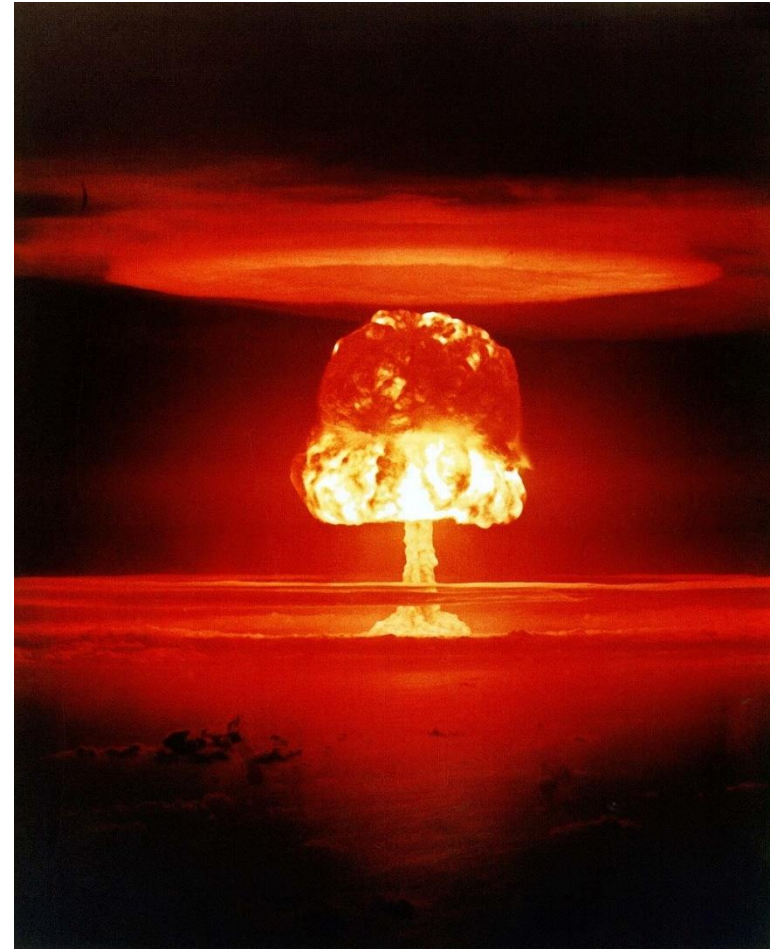
# *Segurança*

- ✓ Alta razão superfície-volume;
- ✓ Menor quantidades de reagentes;
- ✓ Integração de sensores

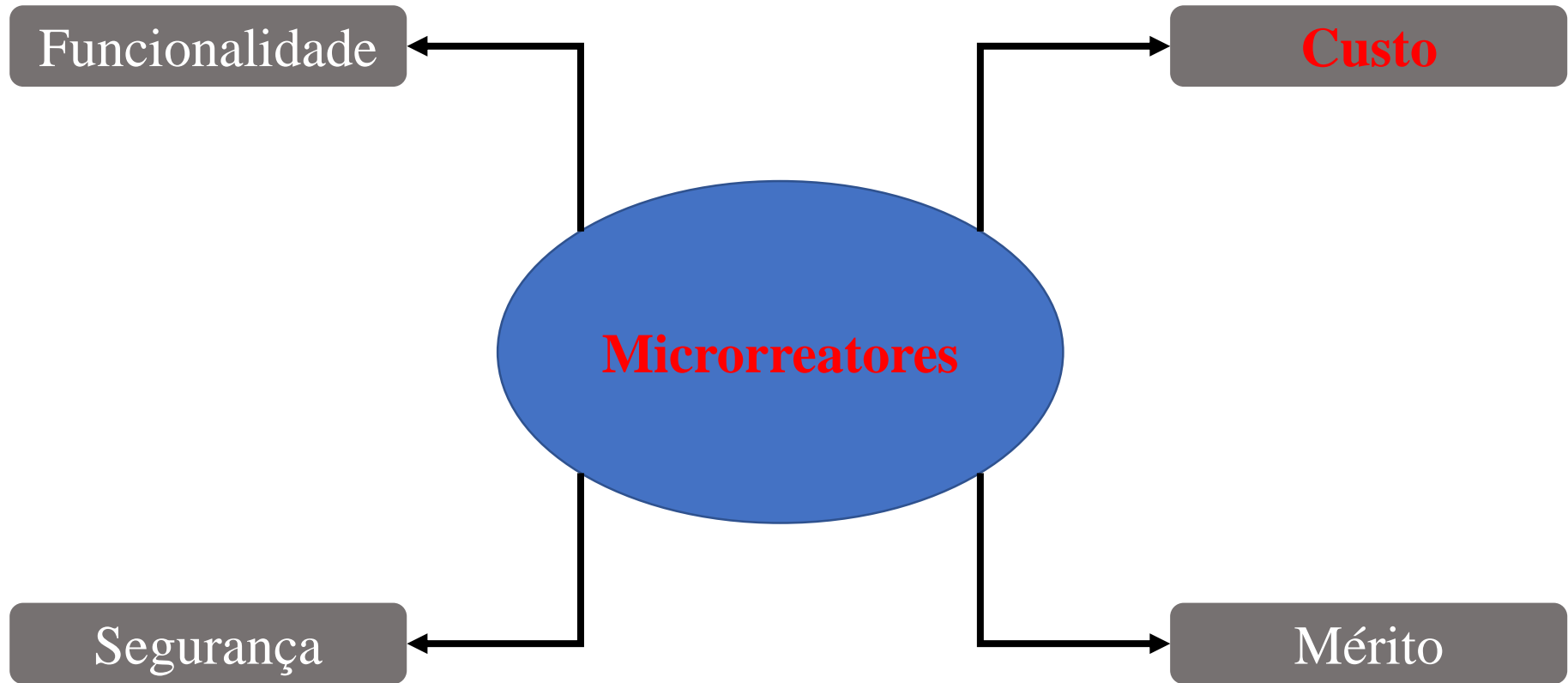


# *Segurança*

- ✓ Alta razão superfície-volume;
- ✓ Menor quantidades de reagentes;
- ✓ Integração de sensores



# *Vantagens dos microrreatores*



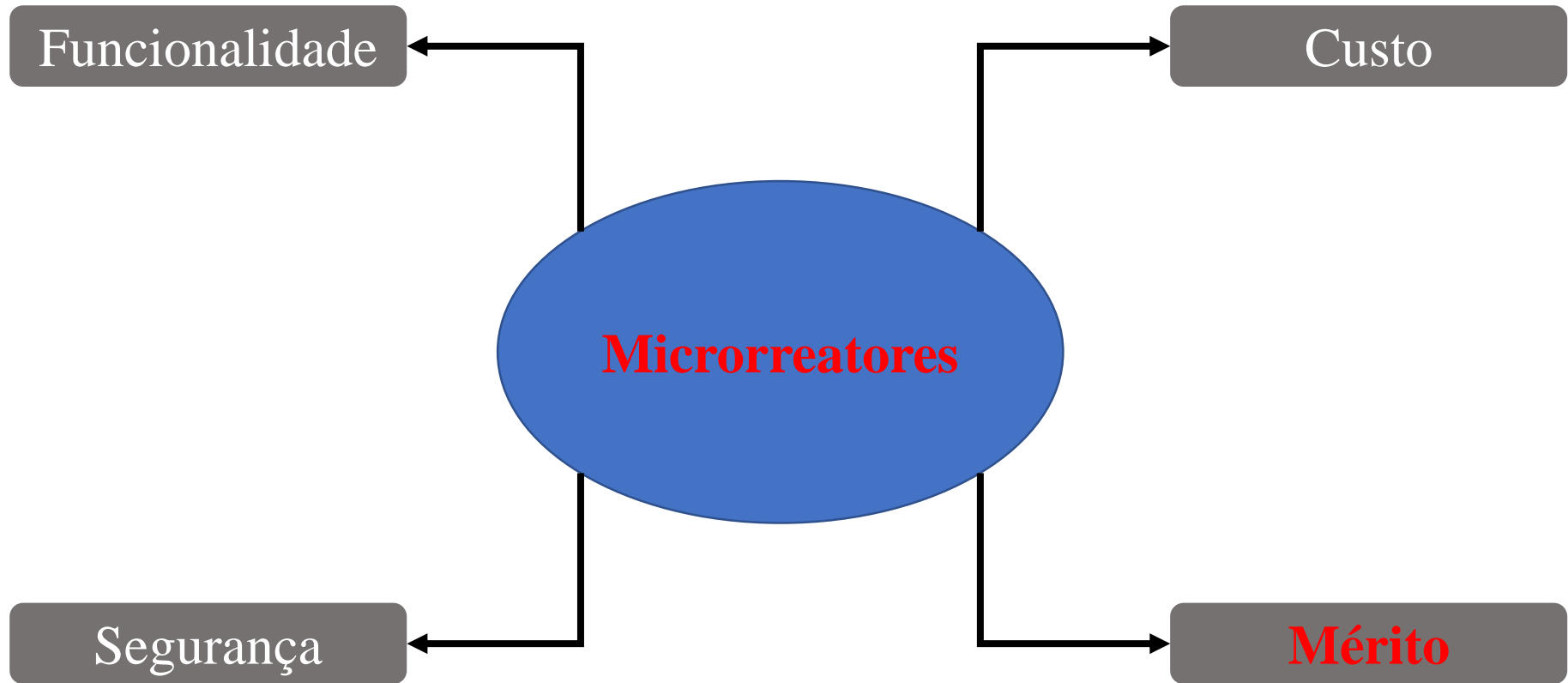
# *Custo*

- ✓ Altos rendimentos;
- ✓ Menor quantidades de reagentes;
- ✓ Baixos custos de fabricação





# *Vantagens dos microrreatores*



# *Mérito científico*

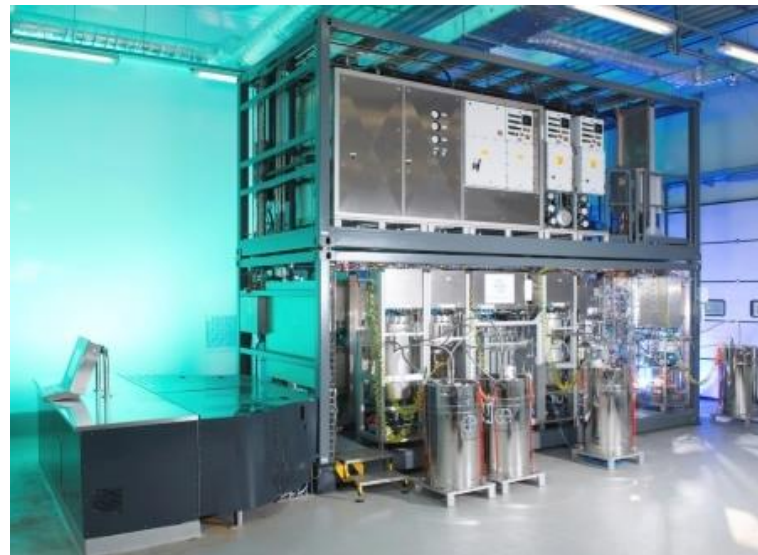
❖ Uma refinaria química pode ser miniaturizada?



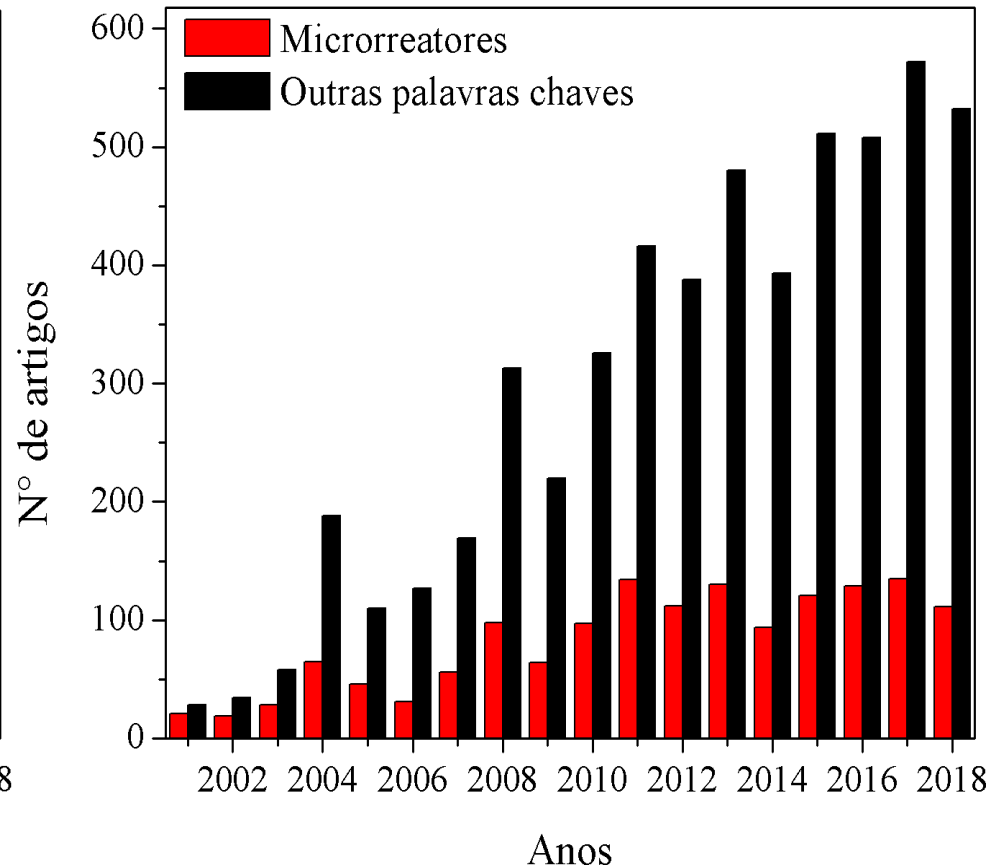
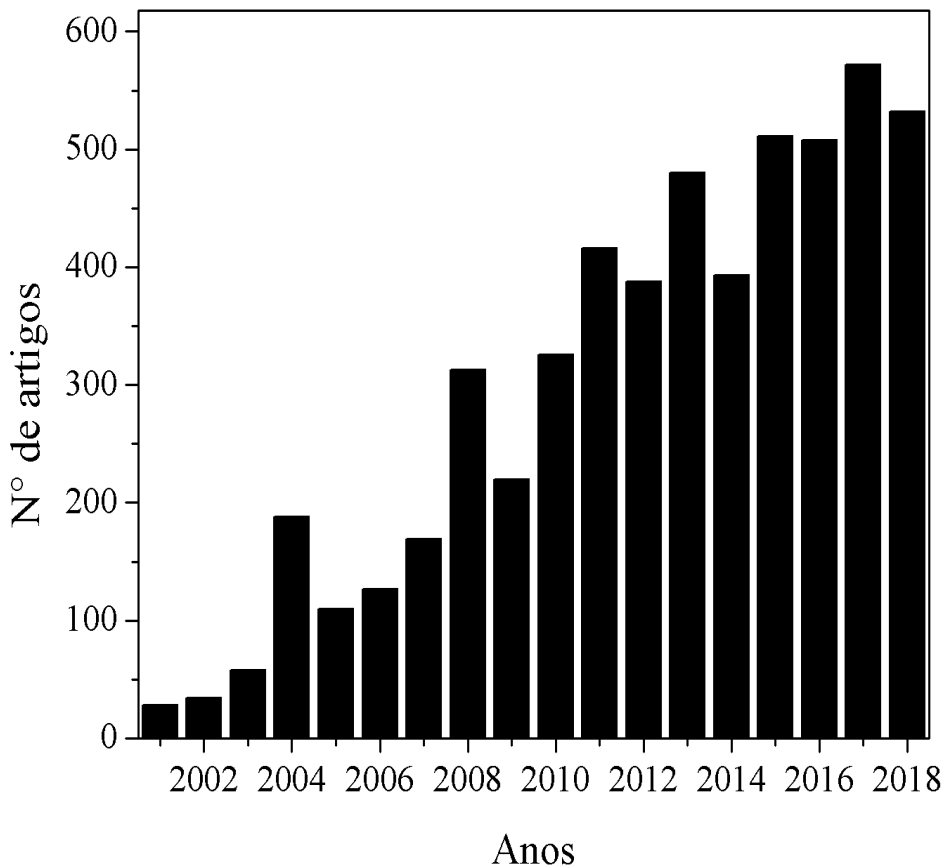
# *Mérito científico*



G. Agricola, *De Re Metallica*, 1556



# Microfluídica na Engenharia Química



Pesquisa realizada na *ScienceDirect* (30/07/2018) com as palavras-chave: **microfluidics**; **microreactors**; **microchannels**; **microdevices**; **microfluidic devices**.

Revistas: *Chemical Engineering Journal*; *Chemical Engineering Science*; *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*; *Chemical Engineering Research and Design*; *Chinese Journal of Chemical Engineering*; *Advances in Chemical Engineering*; *Computers & Chemical Engineering*; *Computer Aided Chemical Engineering*; *Current Opinion in Chemical Engineering*; *Journal of Environmental Chemical Engineering*.

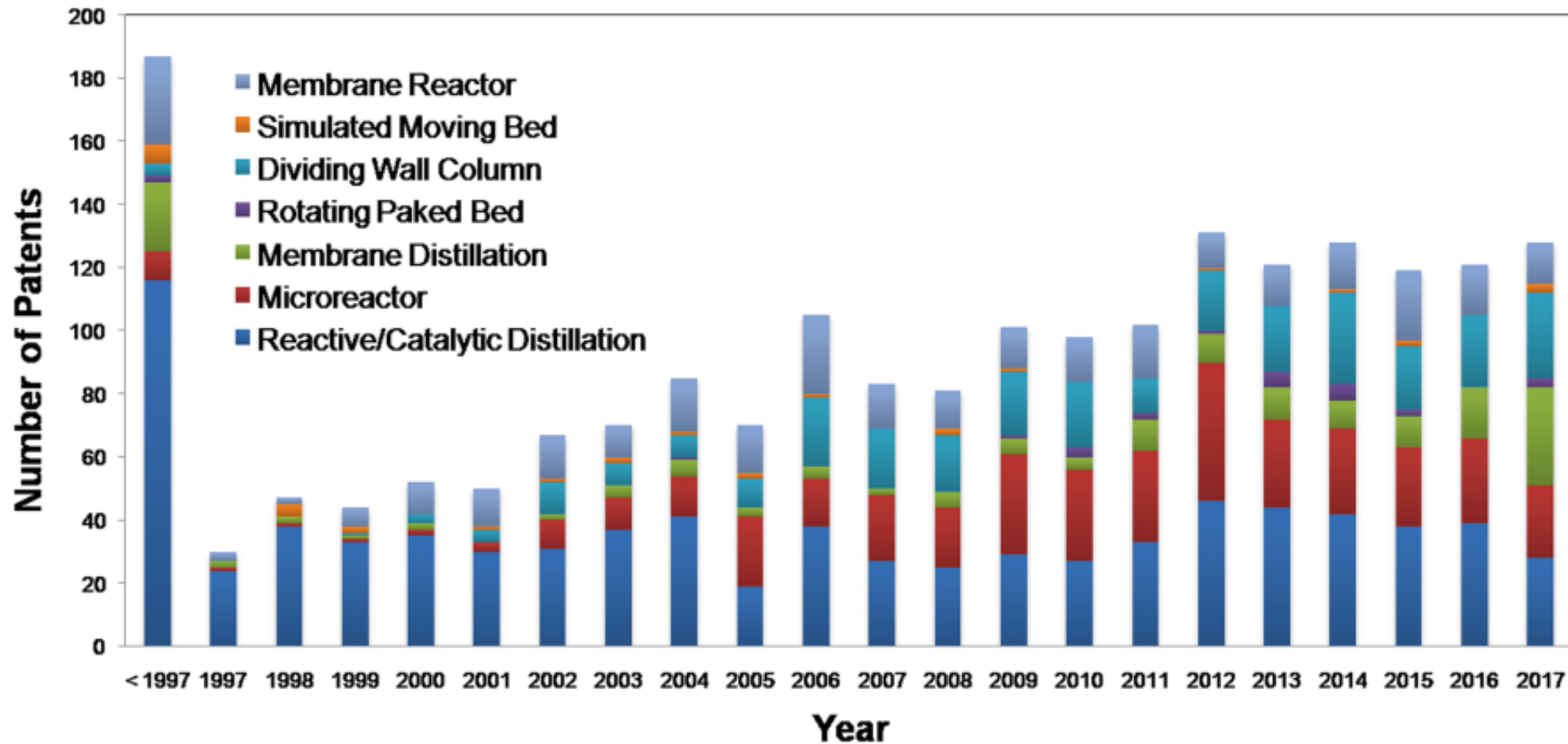


Fig. 2. Number of patents on seven process intensification technologies.

Tian et al. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 133, (2018) 160-210



- ❖ Reação de síntese de biodiesel em microrreatores (tempo de residência = 60 s) e em reator de batelada (180 min)

Chemical Engineering Journal 302 (2016) 752–762



Contents lists available at ScienceDirect

Chemical Engineering Journal

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/cej](http://www.elsevier.com/locate/cej)

Chemical  
Engineering  
Journal

## Transesterification reaction of sunflower oil and ethanol for biodiesel synthesis in microchannel reactor: Experimental and simulation studies



Harrison S. Santana <sup>a,\*</sup>, Deborah S. Tortola <sup>a</sup>, Érika M. Reis <sup>a</sup>, João L. Silva Jr. <sup>b</sup>, Osvaldir P. Taranto <sup>a</sup>

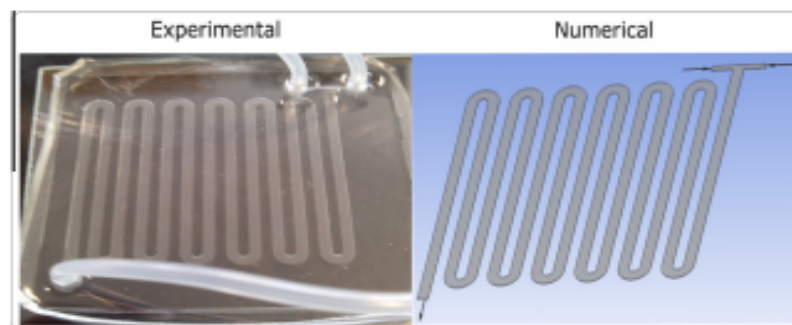
<sup>a</sup> University of Campinas, School of Chemical Engineering, 13083-852 Campinas, SP, Brazil

<sup>b</sup> Federal Institute of Education, Science and Technology of South of Minas Gerais – IFSULDEMINAS, 37550-000 Pouso Alegre, MG, Brazil

### HIGHLIGHTS

- Experimental and numerical study of biodiesel synthesis in microdevices.
- The influence of temperature, ethanol/oil ratio and catalyst concentration.
- Microreactors are a viable option to produce biodiesel.
- Yield parameters and selectivity better capture the experimental process.

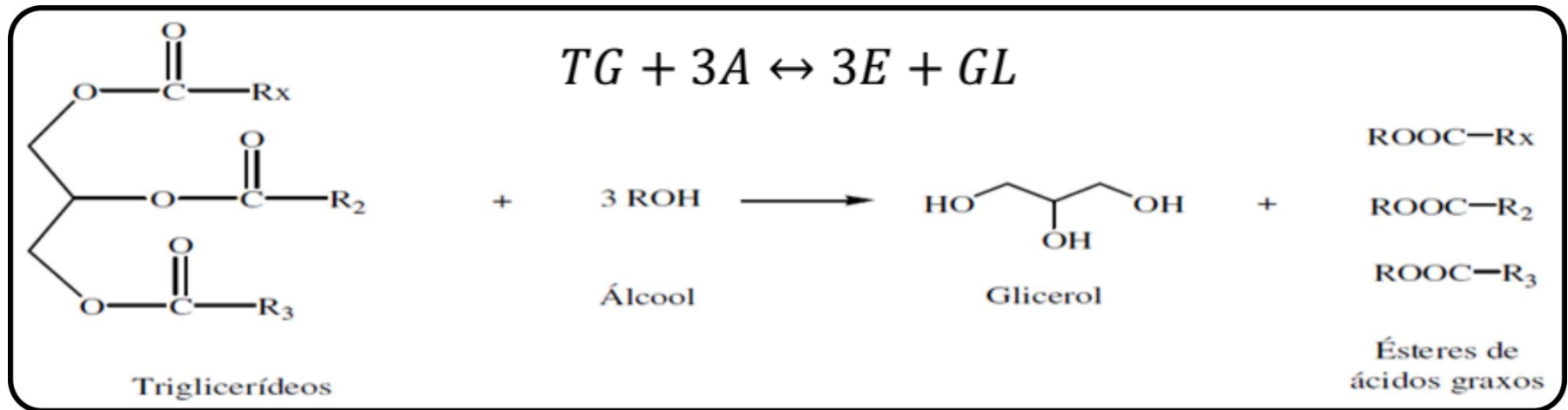
### GRAPHICAL ABSTRACT



# Exemplos de aplicações de microrreatores

## ➤ Biodiesel

Combustível que consiste de ésteres de mono-álquil de ácidos graxos de cadeia longa, derivado de óleos vegetais e/ou gorduras animais (ASTM D6751-15, 2015).



Matérias-primas:

- Óleos vegetais;
- Gorduras animais;
- Óleos microbianos, algas e residuais.

Alcoóis:

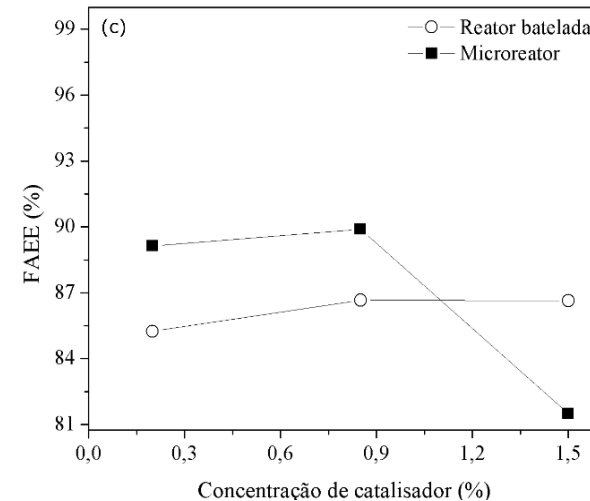
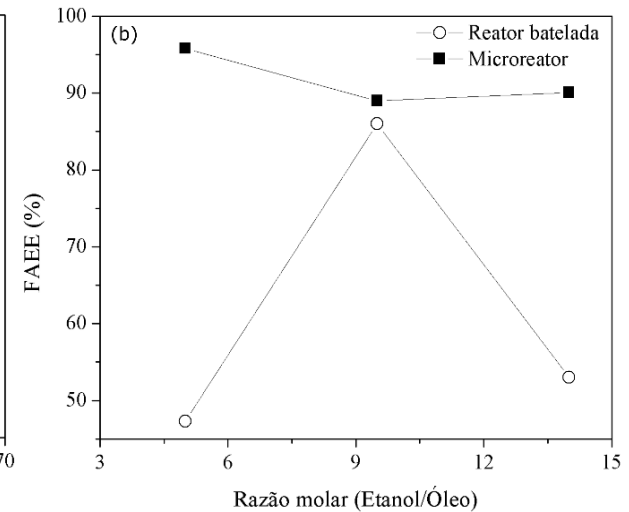
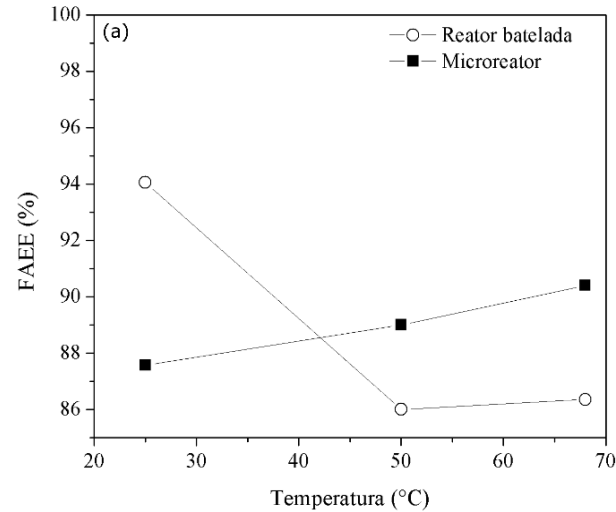
- Metanol;
- Etanol.

Catalisadores:

- Homogêneos: bases ou ácidos;
- Heterogêneos: químicos ou bioquímicos.

# Exemplos de aplicações de microrreatores

- ❖ Reação de síntese de biodiesel em microrreatores (tempo de residência = 60 s) e em reator de batelada (180 min)





# Fenômenos de Transporte e reações químicas

❑ A modelagem de microrreatores pode se basear nas seguintes equações:

✓ *Conservação de massa:*  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$

✓ *Conservação do momento:*  $\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \nabla \tilde{T} + \rho \vec{f}$

✓ *Conservação de energia:*  $\nabla \cdot k \nabla T + \dot{q} + \Phi = \rho c_v \frac{DT}{Dt}$

✓ *Conservação das espécies:*  $\vec{v} \cdot \nabla c_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB} \nabla^2 c_A + R_A$

✓ *Leis das reações químicas:*  $r_A = k C_A^a C_B^b \cdots C_D^d$

# ❖ Reação de síntese de biodiesel em microrreatores com elementos estáticos!

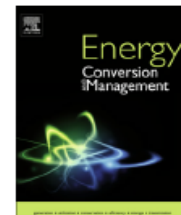
Energy Conversion and Management 141 (2017) 28–39



Contents lists available at ScienceDirect

Energy Conversion and Management

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/enconman](http://www.elsevier.com/locate/enconman)



## Biodiesel synthesis in micromixer with static elements



Harrison S. Santana<sup>a,\*</sup>, Deborah S. Tortola<sup>a</sup>, João L. Silva Jr.<sup>b</sup>, Osvaldir P. Taranto<sup>a</sup>

<sup>a</sup> University of Campinas, School of Chemical Engineering, 13083-852 Campinas, SP, Brazil

<sup>b</sup> Federal Institute of Education, Science and Technology of South of Minas Gerais – IFSULDEMINAS, 37550-000 Pouso Alegre, MG, Brazil

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Available online 3 April 2016

#### Keywords:

Biodiesel  
Sunflower oil–ethanol  
Transesterification reaction  
Micromixer  
Static elements

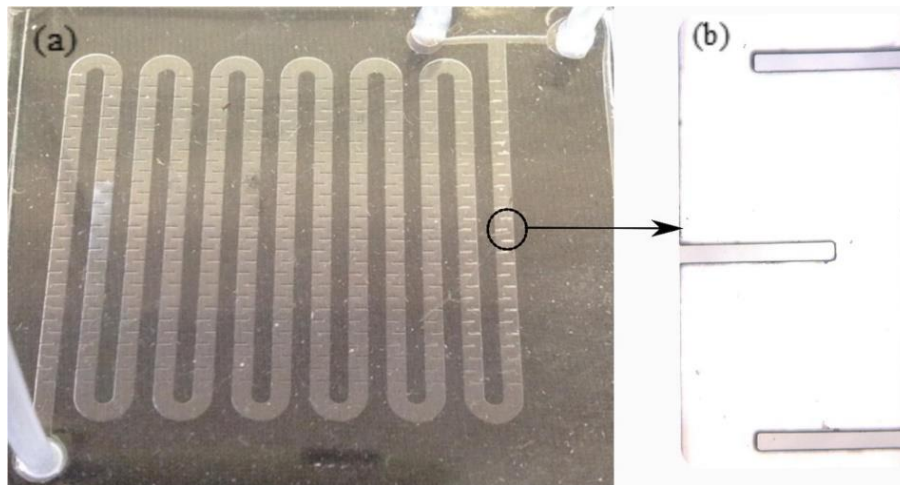
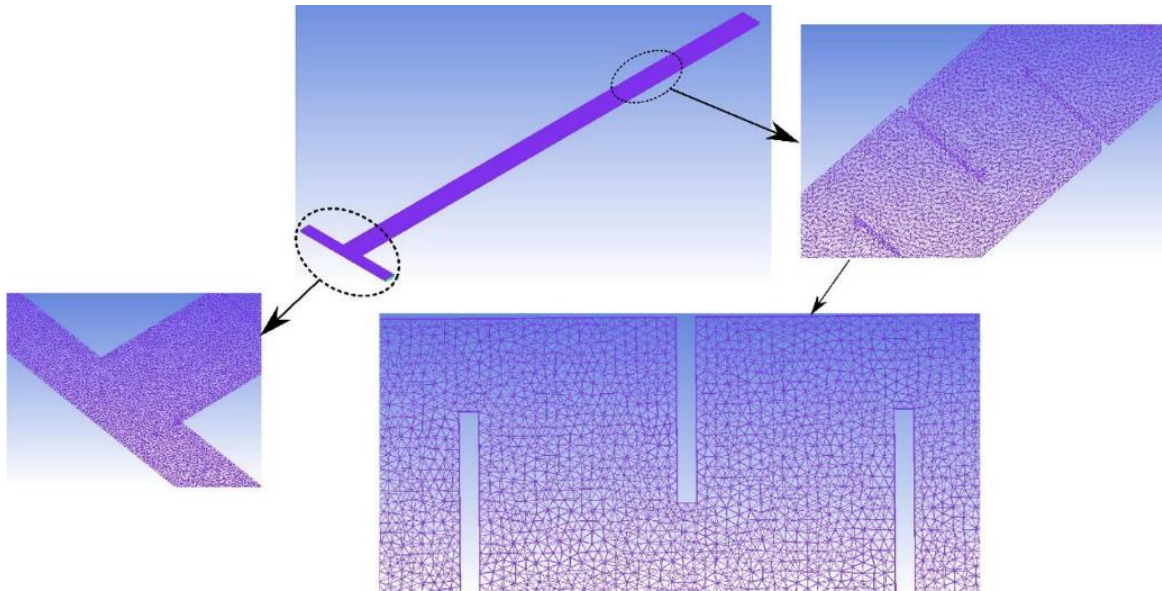
### ABSTRACT

The biodiesel synthesis intensification can be performed using microdevices. The present research investigated numerical and experimentally the transesterification of sunflower oil with ethanol and sodium hydroxide catalyst in microchannel reactors with static elements. In the numerical study, two micromixer designs (Length = 35 mm; Width = 1500  $\mu\text{m}$ ; Height = 200  $\mu\text{m}$ ) were evaluated: T-micromixer (micromixer without static elements) and MSE (micromixer with static elements). The mixing of fluids was analyzed for a range of Reynolds number of 0.1–100. The oil conversion was investigated for a range of operating conditions: temperature (25–75  $^{\circ}\text{C}$ ), ethanol/oil molar ratio (6–12) and catalyst concentration (0.75–1.25%). Similar conditions were experimentally tested in microchannels with static elements (Length = 411 mm) made of polydimethylsiloxane (PDMS). The MSE showed superior performance of mixing index and oil conversion. The highest mixing was noticed for a Reynolds number of 100. The optimum oil conversion (91.53%) was observed numerically at conditions of 75  $^{\circ}\text{C}$ , ethanol/oil molar ratio of 9 and catalyst concentration of 1%. The MSE showed experimentally the highest ethyl esters percentage (99.53%) at 50  $^{\circ}\text{C}$ , ethanol/oil molar ratio of 9 and catalyst concentration of 1%, for a residence time of approximately 12 s. The use of static elements in micromixer enhanced the biodiesel synthesis.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

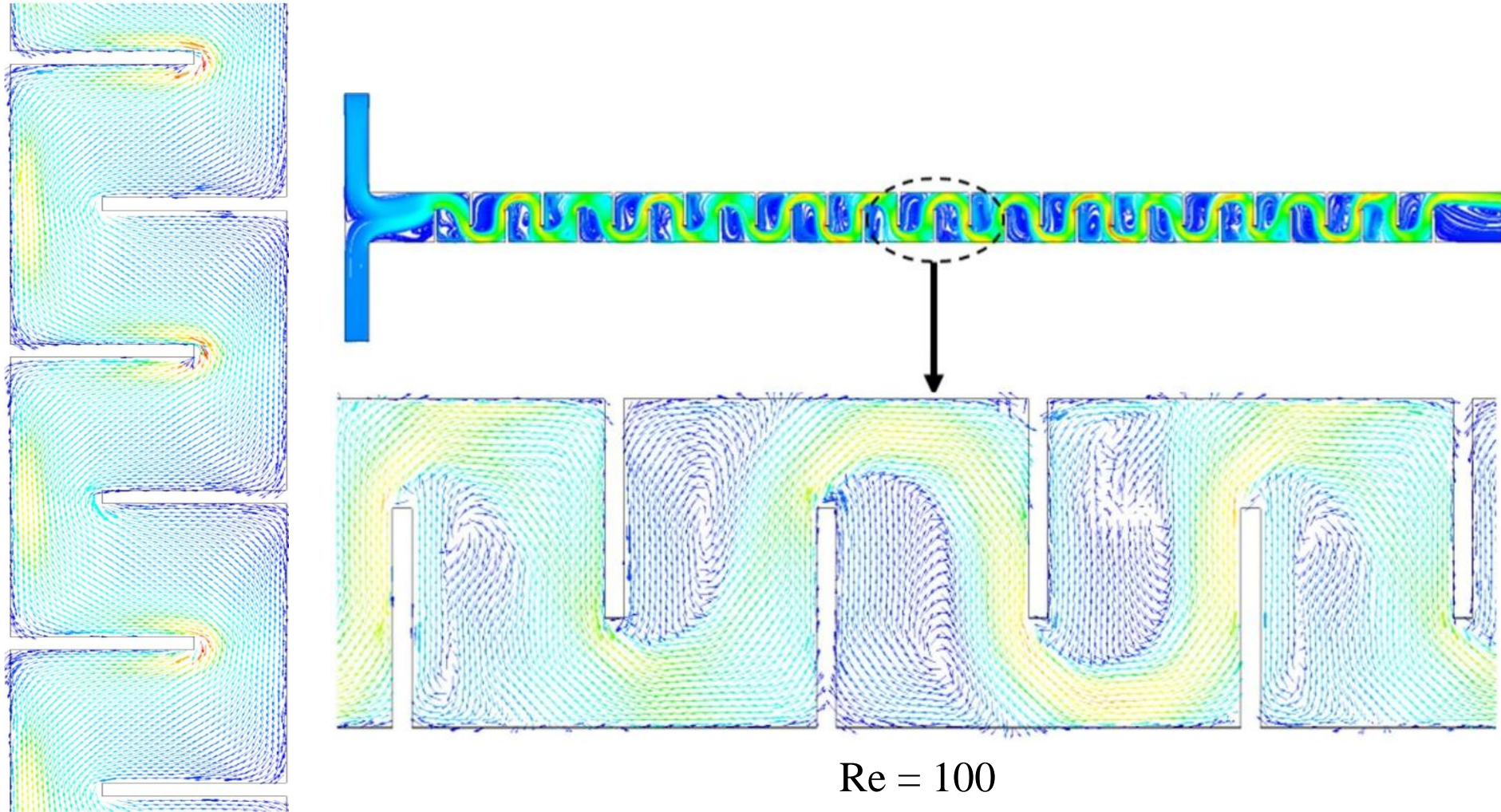


❖ Reação de síntese de biodiesel em microrreatores com elementos estáticos!





❖ Reação de síntese de biodiesel em microrreatores com elementos estáticos!



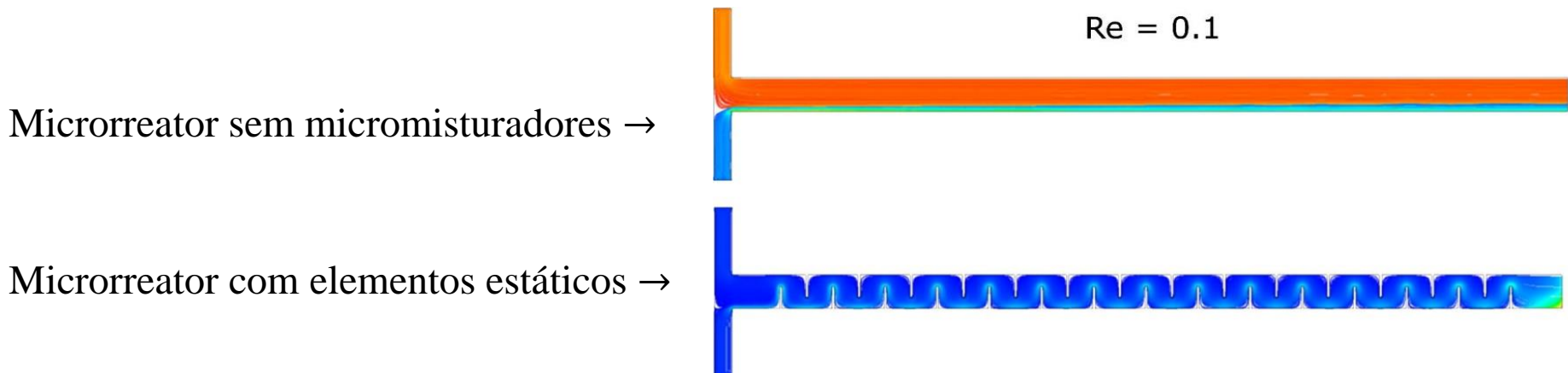
$Re = 0,1$

$Re = 100$

Santana *et al.*, Energy Conversion and Management, v. 141, p.28-39, 2017.

## ❑ Otimização de microdispositivos através de simulações numéricas!

Reator	FAEE (%) - Rendimento	Tempo reacional
Batelada	94,06	3 h
Microrreator sem micromisturadores	95,80	~ 60 s
Microrreator com elementos estáticos	99,53	~ 12 s



Santana *et al.*, Energy Conversion and Management, v. 141, p.28-39, 2017.

# Projeto de reatores

❑ Principais objetivos associados aos projetos de reatores:

- ✓ Propiciar um grau adequado de mistura entre os reagentes;
- ✓ Maximizar a transferência de massa & calor;
- ✓ Propiciar facilidade na separação do produto formado dos reagentes não convertidos;
- ✓ Facilidade de operação, manutenção e instrumentação;
- ✓ Material utilizado;
- ✓ Segurança

# Projeto de reatores

- ❑ Principais objetivos associados aos projetos de reatores (sub-sistemas):
  - ✓ Mistura entre os reagentes
  - ✓ Contato entre reagentes e catalisador no caso de sistemas heterogêneos
  - ✓ Contato entre os fluídos reagentes/produtos formados e a parede interna do tubo/vaso
  - ✓ Transferência de calor entre o interior e o exterior da parede do reator
  - ✓ Transferência de calor entre a parede do reator e o fluído/sistema térmico

# Projeto de reatores

❑ O desempenho de um reator depende da interação complexa entre quatro efeitos:

❖ **Cinética de Reação e Termodinâmica;**

❖ **Parâmetros do Reator;**

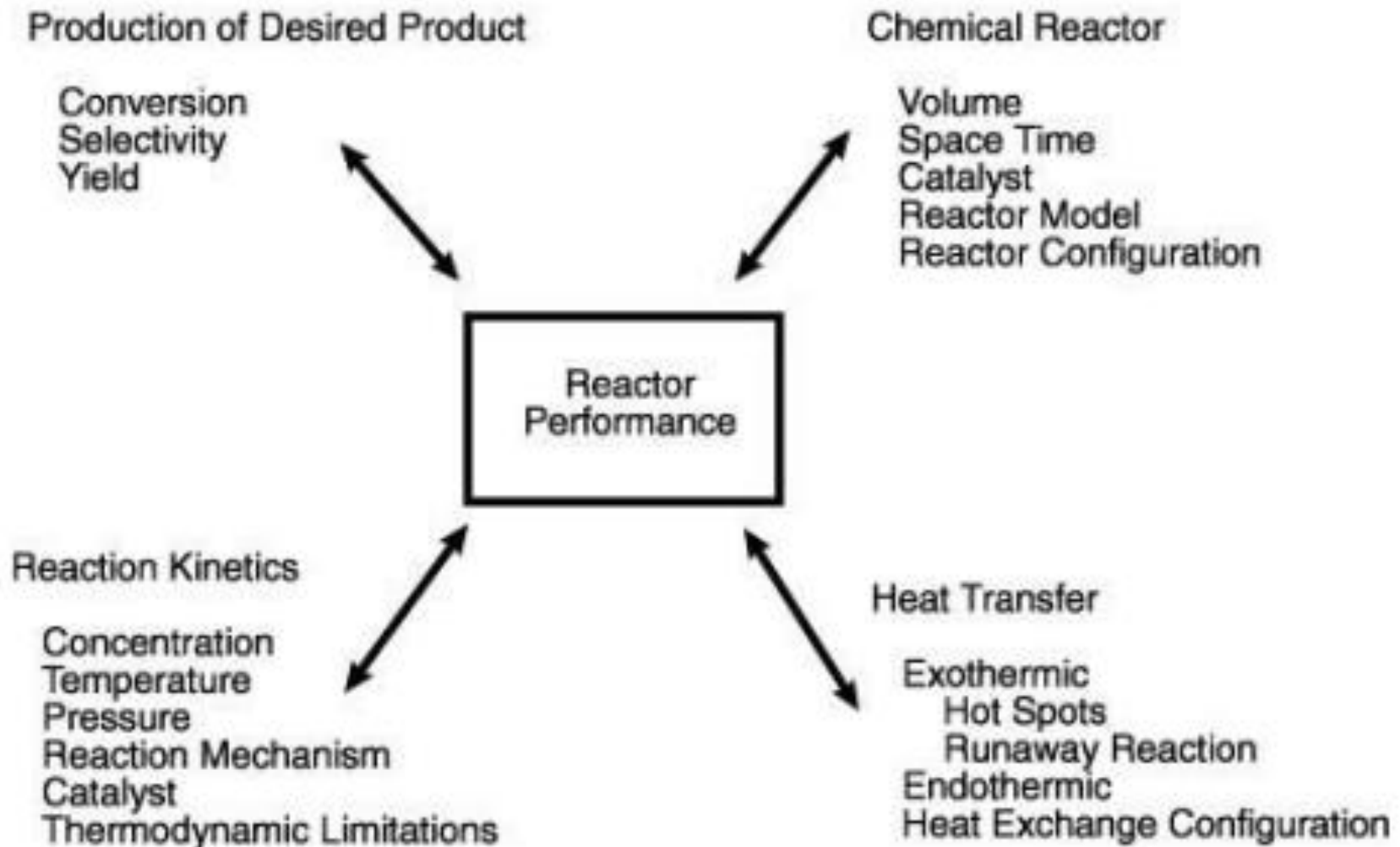
❖ **Produção de Produto Desejado;**

❖ **Transferência de Calor no Reator**



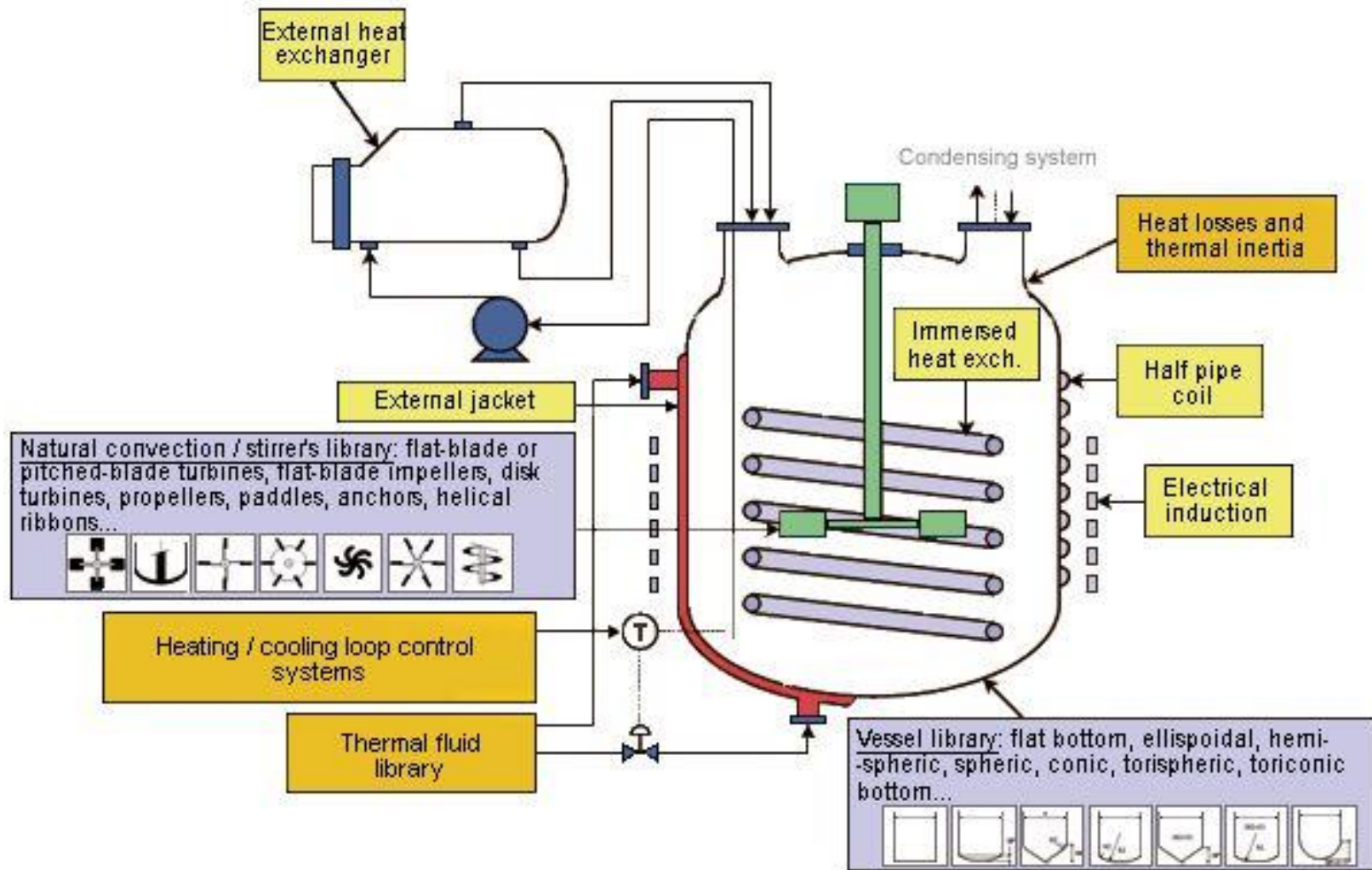
# Projeto de reatores

- ❑ O desempenho de um reator depende da interação entre quatro efeitos



# Projeto de reatores

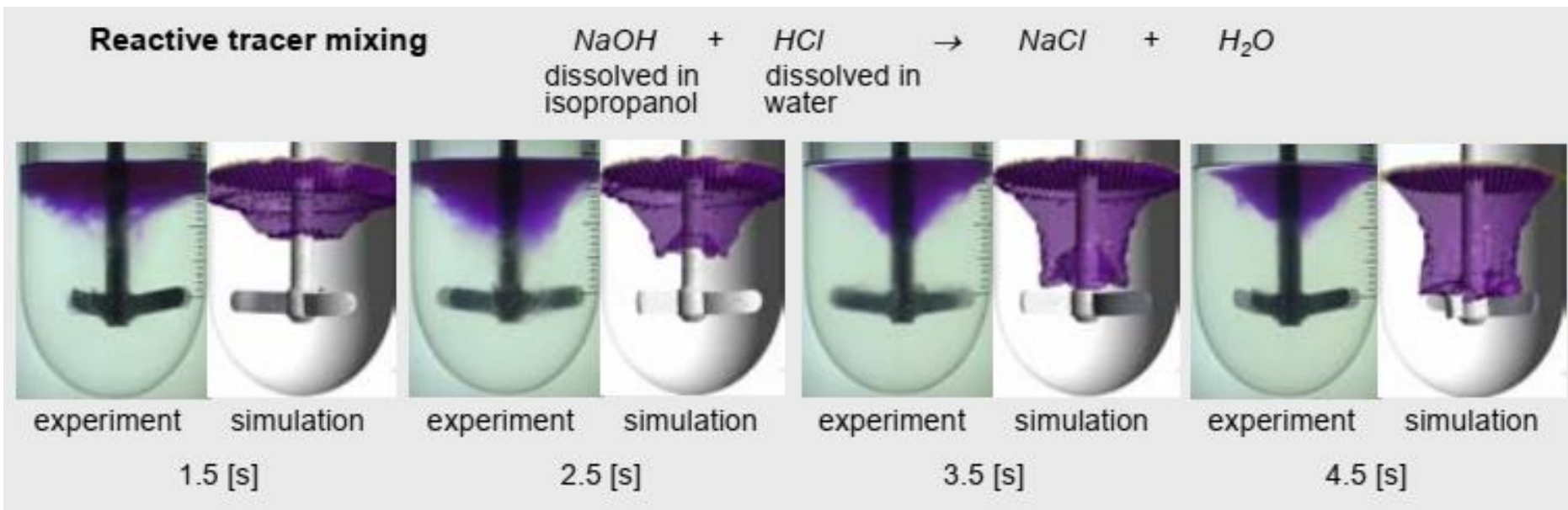
## □ Análise e simulação de processos



# Projeto de reatores

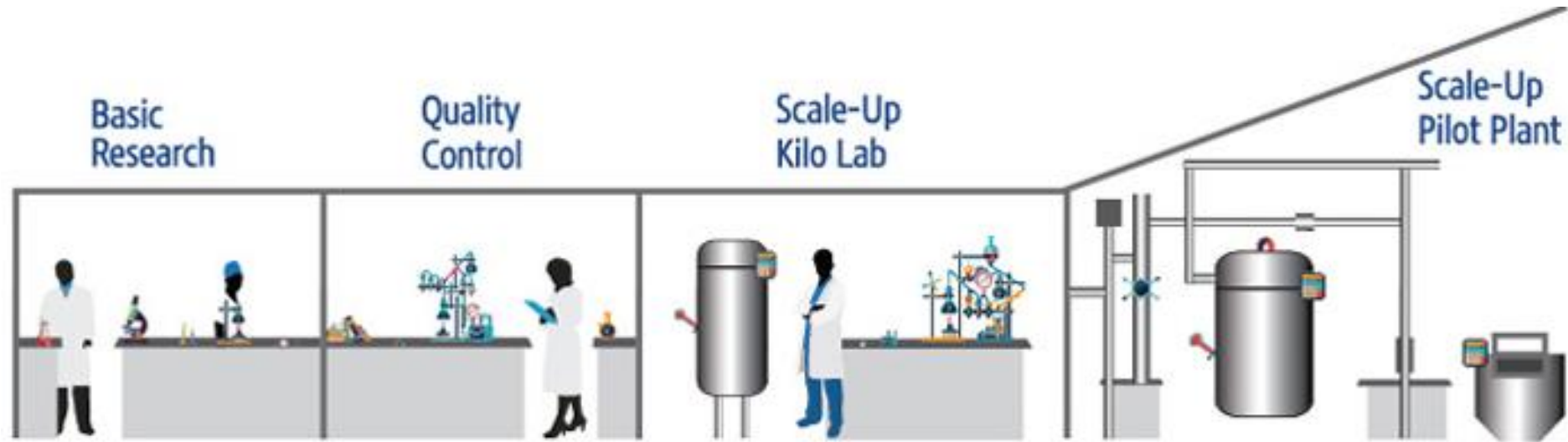
## ☐ Análise e simulação de processos

- ❖ Desenvolvimento de códigos CFD acoplados a modelos matemáticos
  - ✓ Aumento de escala
  - ✓ Otimização
  - ✓ Análises de perigo



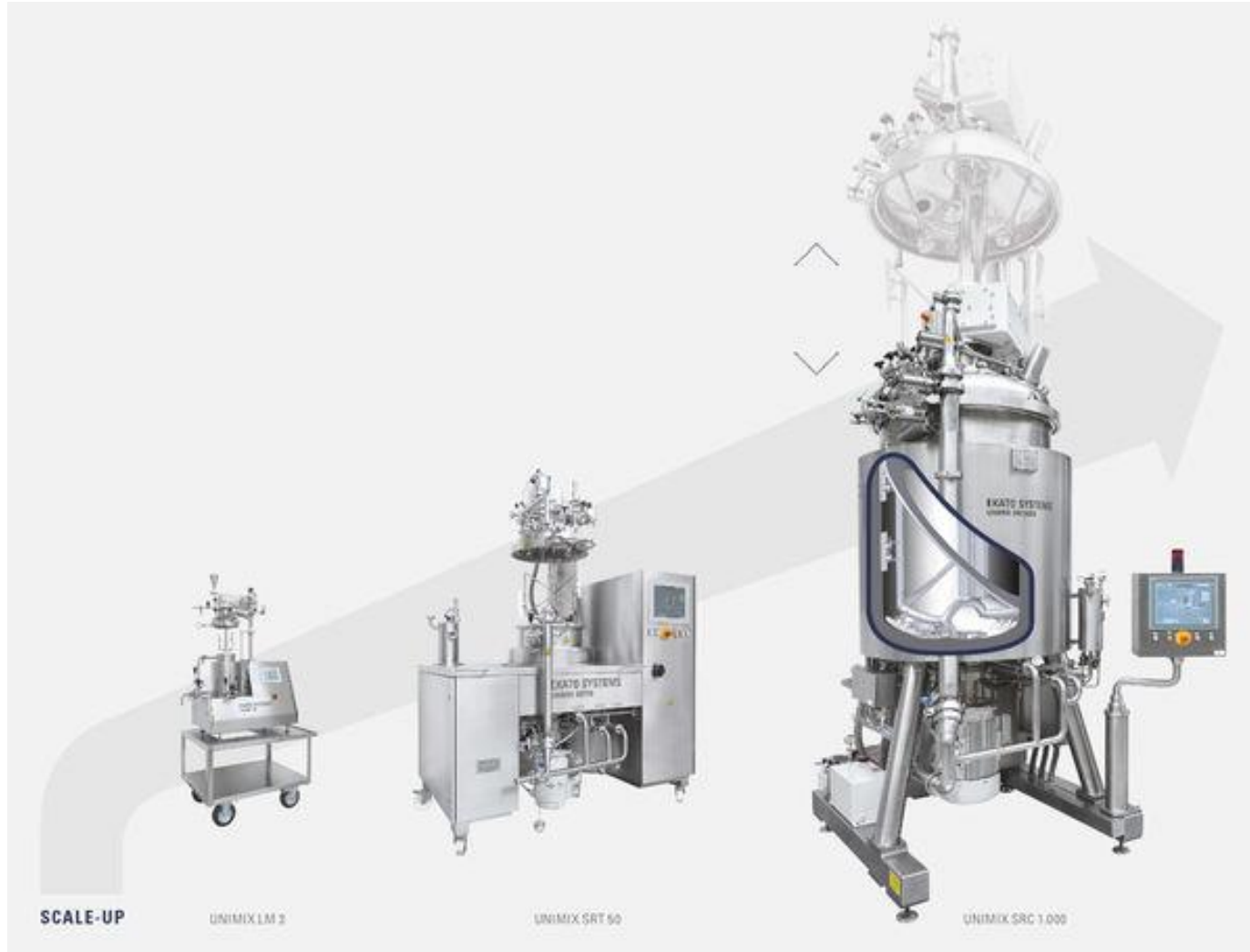
# Projeto de reatores

## □ *Scale up*



# Projeto de reatores

□ *Scale up* – É fácil assim?





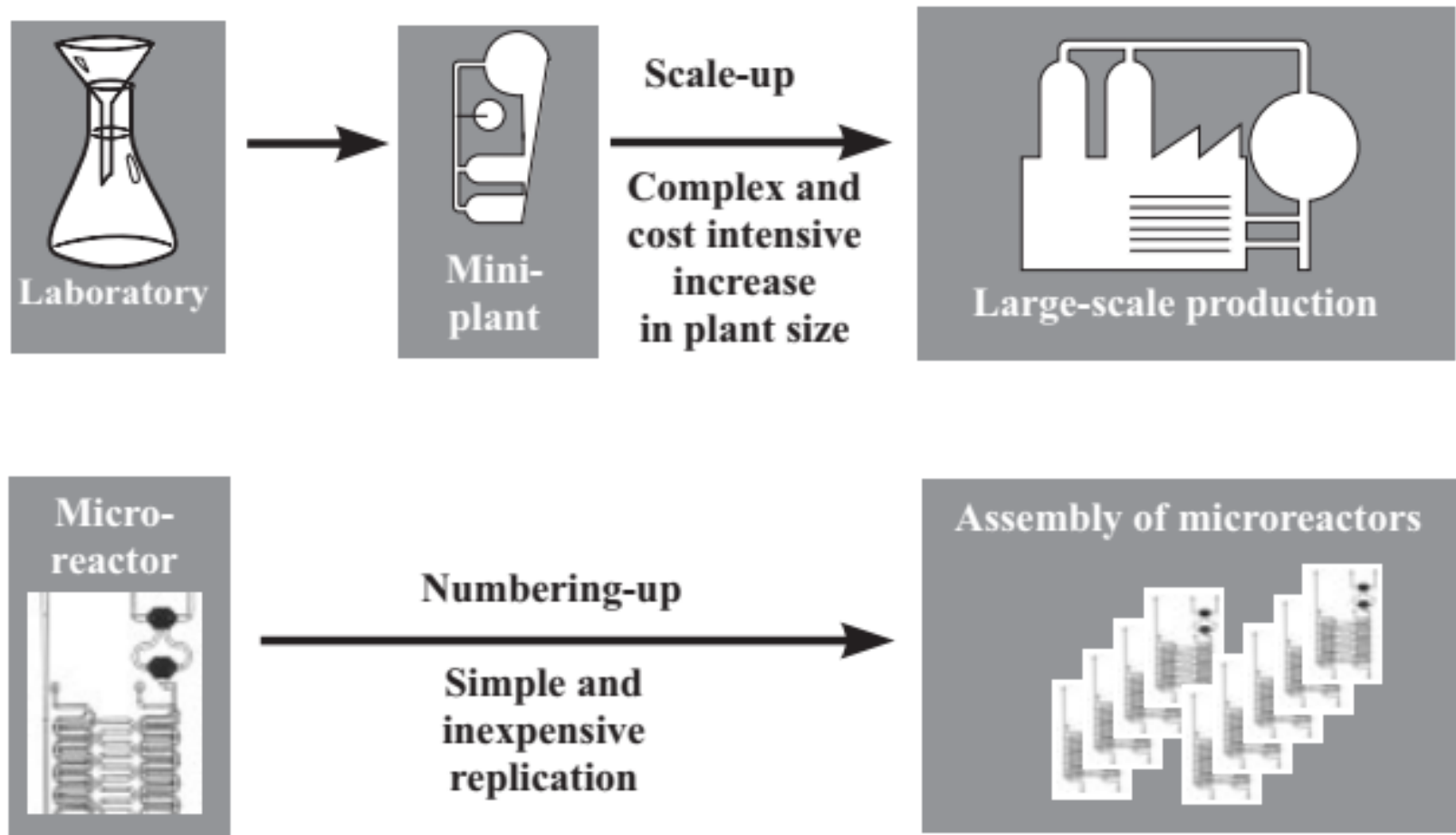
# Projeto de reatores

□ *Scale up* – É difícil assim?



# Projeto de reatores

□ *Scale up* – Principal diferença das escalas macro e micro



# *Microrreatores*

## ❑ Elementos funcionais de um Microrreator

- ✓ Microcanais
- ✓ Elementos funcionais para gerenciamento térmico
- ✓ Estruturas de catalisador
- ✓ Sensores
- ✓ Elementos de mistura



# *Microrreatores*

## ❑ Desenvolvimento/Design de um Microrreator

- ✓ Dinâmica dos fluidos, fenômenos de transporte e cinética de reação
- ✓ Tamanho da seção transversal do microcanal
- ✓ Tempo de residência requerido
- ✓ Comprimento Longitudinal
- ✓  $DaI$ ,  $DaII$  (O que é mais importante – Mistura ou reação?)
- ✓ Condições operacionais

# Projeto de microreatores

