

Tutorial Mistura passiva de fluidos em microcanais para aplicações em bioengenharia

Tutorial para simulação em COMSOL Multiphysics, versão 5.2a

Susana O. Catarino

Unidade de Investigação em Microsistemas Eletromecânicos (CMEMS-UMinho), Universidade do Minho, Guimarães, Portugal

pretendida (com ou sem obstáculos), o número de entradas e saídas do canal, as fronteiras do canal com o exterior, as propriedades físicas das amostras (em particular a densidade, viscosidade e coeficiente de difusão), o caudal associado aos fluidos em circulação e o tipo de simulação necessária (estacionária ou transiente).

O SOFTWARE

O COMSOL Multiphysics consiste numa ferramenta integrada, baseada em métodos de elementos finitos (métodos de discretização espacial e temporal já integrados no software), com uma interface gráfica simples, de modo a permitir a modelação e simulação de fenómenos de multifísica, em problemas estacionários ou transientes, em 1D, 2D e 3D. Esta ferramenta inclui vários módulos com modelos físicos pré-definidos, bem como uma ferramenta genérica para implementação de equações diferenciais parciais que não estejam previamente definidas, assegurando elevada flexibilidade dos modelos.

O PROBLEMA

São muitas as aplicações em bioengenharia que requerem a utilização de dispositivos microfluidicos, sendo disso exemplos biossensores, dispositivos lab-on-chip para diagnóstico ou para engenharia de tecidos e biorreatores. Uma vez que a circulação de fluidos à microescala é limitada pela difusão molecular das amostras, originando processos lentos de mistura, torna-se da maior relevância a simulação da mistura de amostras em domínios microfluidicos, de modo a otimizar geometrias capazes de promover esta mistura em tempo útil e de forma adequada à aplicação pretendida.

OS REQUISITOS

Este tutorial terá em conta um exemplo simples de simulação de mistura passiva de dois fluidos em microcanais, de modo a apresentar COMSOL Multiphysics como ferramenta de simulação adequada à simulação deste tipo de problemas. De modo a simular convenientemente a mistura de dois fluidos à microescala, é necessário ter em conta a geometria

EXEMPLO DE APLICAÇÃO

Apresenta-se a resolução em COMSOL Multiphysics 5.2a do problema proposto para um microcanal com duas entradas e uma saída. A geometria do canal terá de ser otimizada de modo a garantir a mistura completa dos dois fluidos antes de estes atingirem a extremidade do microcanal. O tutorial terá em conta dois fluidos com a densidade e viscosidade da água, e um coeficiente de difusão de $1\text{E}-9\text{ m}^2/\text{s}$, a circular em no microcanal com caudais de $2\text{ }\mu\text{L}/\text{min}$.

A modelação e simulação do problema inicia-se pela criação de um modelo em branco no COMSOL.

Uma vez criado o modelo base, é possível adicionar todos os elementos a partir da árvore do problema (Model Builder) (Fig.1).

Definição do domínio e geometria do problema:

Antes de desenhar a geometria, é criada a componente do problema, que no presente exemplo é bidimensional. Dentro da componente é então definido o desenho da geometria que, no presente exemplo, consiste em duas geometrias de microcanais: um canal linear e um canal em serpentina, ambos com entrada tipo-Y, com largura de $200\text{ }\mu\text{m}$ (Fig.2). As geometrias podem ser diretamente desenhadas no software ou, alternativamente, para

modelos mais complexos, podem ser importadas geometrias completas para o COMSOL Multiphysics.

Definição do modelo físico do problema:

Uma vez conhecida a geometria do problema, é necessário incluir as equações governativas a resolver, assim como o conjunto de condições iniciais e de fronteira do problema, que descrevem a totalidade do comportamento do sistema físico a simular. No modelo de mistura de dois fluidos num microescoamento, devem ser incluídos os módulos de física de escoamento laminar (laminar flow module) e transporte de espécies (transport of diluted species module), que descrevem os princípios da con-

servação de momento e de massa, de modo a representar convenientemente a migração de espécies químicas no meio fluido. O transporte das espécies químicas ocorre por dois mecanismos: difusão e convecção. A difusão deve-se à diferença de concentração entre as espécies, e depende do valor definido para o coeficiente de difusão da espécie química. A convecção é um mecanismo de transporte forçado e deve-se às condições de escoamento de um sistema (no caso, ocorre como resultado da velocidade do fluido em escoamento no microcanal). As condições de fronteira de um problema de mistura deverão ter em conta como se dá a entrada e a saída (inlet \rightarrow laminar inflow \rightarrow flow rate)

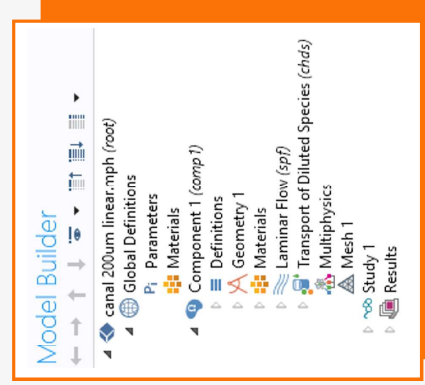


Figura 1 — Árvore de um modelo no COMSOL Multiphysics)

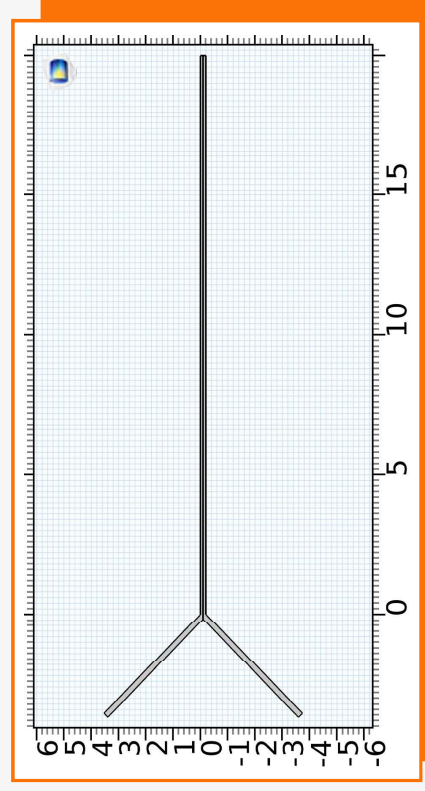


Figura 2A— Geometrias desenhadas no COMSOL Multiphysics — Canal linear.

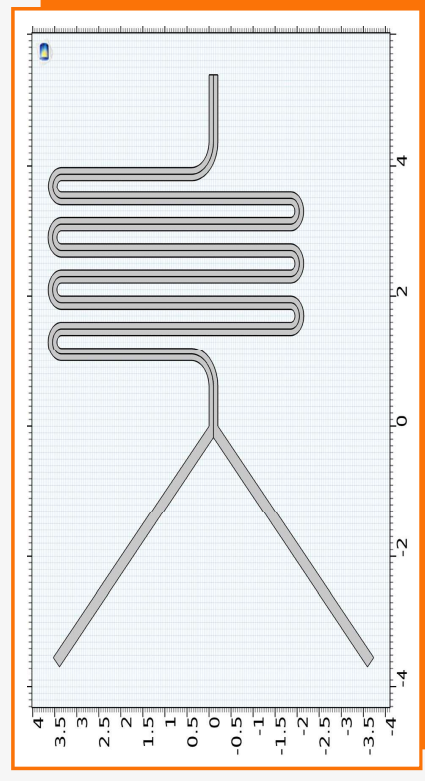


Figura 2B — Geometrias desenhadas no COMSOL Multiphysics — Canal em serpentina. Ambos os canais representados têm $200\text{ }\mu\text{m}$ de largura e uma entrada tipo-Y.

de 2 $\mu\text{l}/\text{min}$ para a entrada de ambos os fluidos nos microcanais e pressão nula na saída (Fig. 3). Em relação às paredes dos microcanais, as suas condições de fronteira assumem-se como impermeáveis a soluto (ou seja, com fluxo nulo), com velocidade zero e gradiente de pressão também zero. As condições iniciais da simulação podem ser consideradas velocidade, pressão e concentração de soluto nulas em todo o domínio dos microcanais. Nesta fase, devem ainda ser atribuídos aos domínios geométricos os materiais e as suas propriedades. Neste exemplo, e como já referido, devem definir-se as propriedades físicas da água.

Definição da malha:

A interface gráfica do COMSOL Multiphysics permite a definição das malhas de acordo com os requisitos do problema. O número de elementos na malha, o tipo e a sua dimensão devem resultar de um balanço entre a precisão obtida e o custo em tempo computacional e memória exigidos, pelo que se recomenda um estudo prévio de malha para seleção da mais adequada ao problema.

No presente exemplo, as malhas de cada um dos microcanais foram criadas com elementos triangulares e quadriláteros (Fig. 4).

Definição do algoritmo de resolução: Uma vez definido o problema físico e todas as suas propriedades, procede-se à sua simulação. Nesta fase, obtém-se uma solução numérica apropriada para o modelo matemático. O algoritmo de resolução (solver) é o programa numérico que consiste na aplicação de uma sequência de tarefas de modo a obter a solução das equações, e difere nas aproximações efetuadas às variáveis. O COM-

Pós-processamento:

SOL Multiphysics permite a seleção de vários algoritmos de resolução estacionários ou transientes no tempo, tanto de resolução direta como iterativa. A escolha do algoritmo deverá depender da estabilidade necessária, assim como da memória e

disponível para simulação. No exemplo apresentado, o modelo foi resolvido usando um solver direto estacionário PARDISO.

Após a simulação, deve proceder-se à extração dos dados de interesse e à sua interpretação e validação (por comparação com testes experimentais, análises de sensibilidade ou comparação com outros modelos existentes). No exemplo em análise, a simulação estacionária da mistura de dois fluidos em microcanais per-

mitiu analisar a distribuição da concentração de soluto no domínio, para cada um dos casos simulados (Fig. 5 e 6)

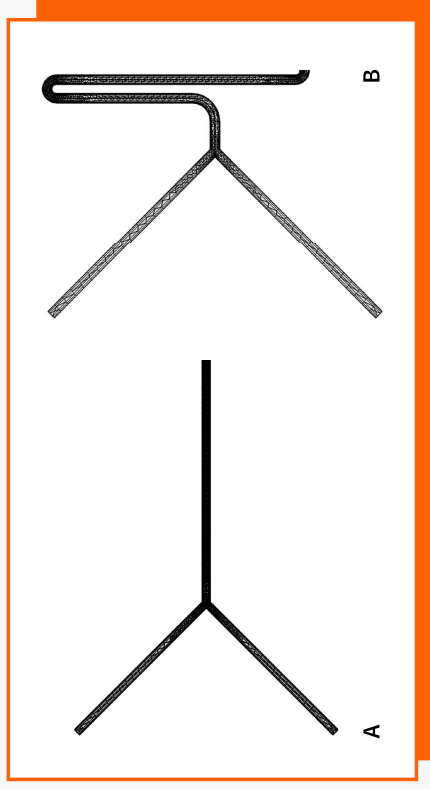


Figura 4 — Detalhe das malhas criadas no COMSOL Multiphysics para a interseção das entradas dos microcanais. A) Canal linear com 1156 elementos na malha. B) Canal em serpentina com 6025 elementos na malha.

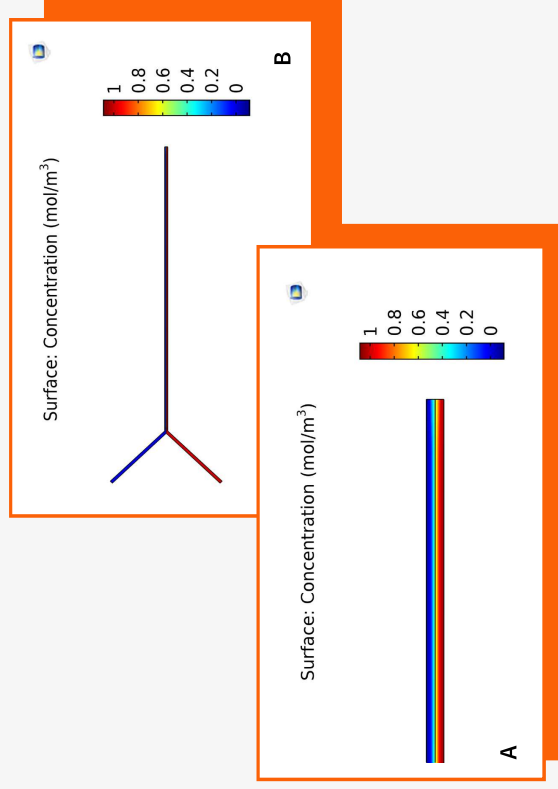


Figura 5 — A) Concentração de soluto em estado estacionário no microcanal linear tipo-Y. B) Detalhe da concentração de soluto na extremidade do microcanal.

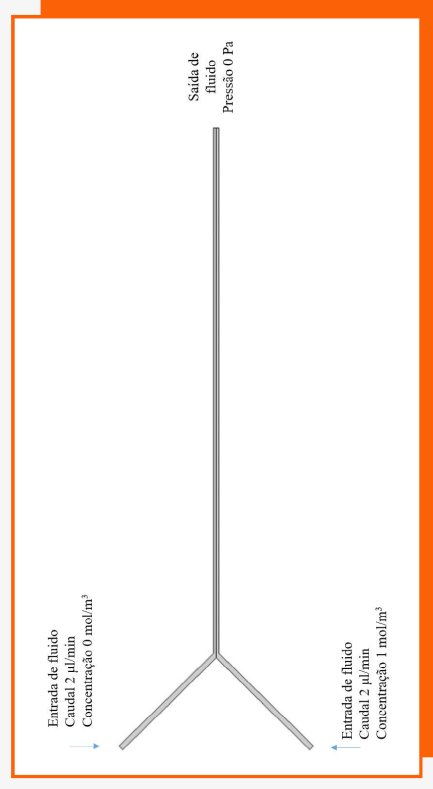


Figura 3 — Condições de fronteira do modelo de mistura de dois fluidos no microcanal linear tipo-Y.

7 — Tutorial

Tendo em conta as condições de fronteira do problema em análise, em que foram consideradas duas entradas com concentrações distintas (0 e 1 mol/m³), pode assumir-se como critério de mistura completa no microcanal a obtenção de uma concentração de 0,5 mol/m³ ao longo de toda a largura do mesmo. A análise dos resultados permite concluir que o canal linear não permite a mistura passiva dos dois fluidos (à exceção da linha central do canal onde estes se encontram), enquanto o canal em serpentina, devido ao seu comprimento total superior, assegura tempo de trânsito suficiente para que os fluidos se misturem na sua totalidade (provado pela concentração de 0,5 mol/m³ obtida ao longo de toda a largura do canal).

Os resultados do exemplo apresentado sugerem assim que um microcanal com geometria em serpentina apresenta maior potencial para integração num microdispositivo onde a capacidade para mistura passiva de fluidos seja um requisito e onde a dimensão/área seja um fator decisivo.

O exemplo apresentado é facilmente ajustado para outros parâmetros: geometrias, materiais, condições iniciais e de fronteira, adaptando-se às necessidades do utilizador. De

forma complementar, é possível acoplar ao mesmo modelo outros módulos de física, permitindo simular qualquer outro fenómeno relacionado com o de mistura, desde sensores, atuadores, reações químicas ou aquecimento.

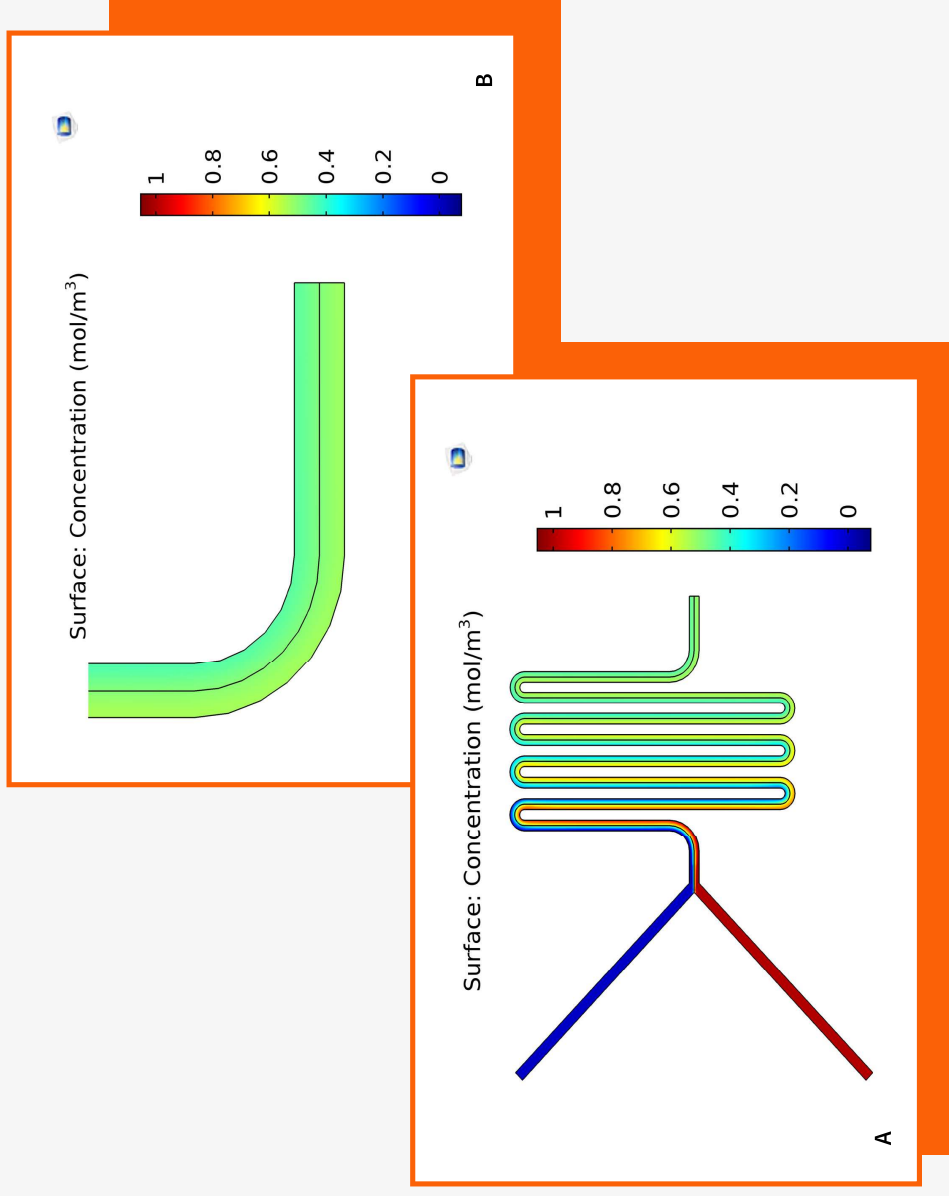


Figura 5 — A) Concentração de soluto em estado estacionário no microcanal em serpentina tipo-Y; B) Detalhe da concentração de soluto extremidade do microcanal.