

Análise da influência de parâmetros geométricos de um sensor fotoacústico de gases por simulação via método de elementos finitos

Isaac Jefferson Gardim Couto^{1*}, Guilherme Rodrigues Lima², Leonardo Mota¹

¹Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro; ²Universidade Federal do Espírito Santo

*20201110017@pq.uenf.br

Resumo

Neste trabalho foi investigada a influência do comprimento (L) e do raio (r) do *buffer* no fator geométrico (FG) de um sensor fotoacústico de gases por simulação via método de elementos finitos. Os resultados indicaram um comportamento linear da variação máxima de pressão em função de r para todos os valores de L simulados. O FG experimentou um aumento gradativo para L entre 10 e 30 mm, tendo seu máximo atingido em L = 50 mm ($S = 0,0988 \text{ Pa/mm}$). No entanto, em termos de qualidade do ajuste, foi este valor que apresentou a pior performance ($R^2_{\text{ajustado}} = 0,9477$). Para L = 100, 200 e 300 mm foi observada uma queda no FG com valor em torno de $0,093 \text{ Pa/mm}$. As simulações mostraram que existe um compromisso entre FG e qualidade do ajuste quando se busca a otimização de parâmetros geométricos de um sensor fotoacústico de gases.

Palavras-chave: Célula fotoacústica, Elementos Finitos, Comsol Multiphysics

1. Introdução

A quantificação dinâmica de gases de efeito estufa, sinalizadores biológicos e fitormônios está presente em diversos estudos na agronomia, medicina e ambiente (mudanças climáticas)^[1-3]. Conseqüentemente, esforços têm sido realizados no desenvolvimento de novos sensores capazes de monitorar em tempo real essas emissões. Dentre os dispositivos empregados para detecção e monitoramento de gases, destaca-se a célula fotoacústica (CF)^[4]. Isso porque um sistema de detecção de gases deve preencher algumas características fundamentais, e.g., elevadas seletividade e sensibilidade, boa resolução temporal, larga faixa dinâmica de operação e tamanho compacto. Em particular, a espectroscopia fotoacústica (EFA) preenche, dependendo das configurações, todos esses requisitos. No entanto, antes de produzir uma CF, é importante buscar uma compreensão dos efeitos de parâmetros geométricos no desempenho do sensor. Portanto, este trabalho teve por objetivo simular via Método de Elementos Finitos (MEF) um modelo de CF no formato de halter, visando a melhor combinação geométrica entre o comprimento e o raio do *buffer*^[5].

2. Materiais e Métodos

2.1. Material

As simulações computacionais foram realizadas executando o software COMSOL Multiphysics (versão 6.1) em um computador Intel Core i9 de 12^a geração (12900K).

2.2. Metodologia

A modelagem e as simulações foram conduzidas com o auxílio de um módulo adicional de acústica ao COMSOL Multiphysics. O MEF foi aplicado para a obtenção da solução do Sistema de Equações Linearizadas de Navier-Stokes (SELNS)^[6] no domínio da amostra gasosa (DAG). Com o objetivo de encontrar cenários ótimos, isto é, $\Delta P_{\text{máxima}}$ na região central do ressonador, onde a máxima amplitude da onda acústica estacionária acontece^[7] (região de interesse). Foram definidos valores de raio dos *buffers* (r) em 10,0 mm, 12,5 mm, 15,0 mm, 17,5 mm e 20,0 mm. Para cada valor arbitrado de r foram considerados os comprimentos (L) de 10 mm, 15 mm, 20 mm, 25 mm, 30 mm, 40 mm, 50 mm, 100 mm, 200 mm e 300 mm.

3. Resultados e Discussão

Na Fig. 1 estão apresentadas as $\Delta P_{\text{máxima}}$ em função de r para os diferentes L . Observou-se um comportamento linear (representado pelas linhas sólidas) bastante evidente em todos os cenários simulados (símbolos abertos). Pela Fig. 1, as simulações sugerem dois grupos bem definidos com base no aparente paralelismo das inclinações das retas ajustadas. O primeiro de $10 \leq L \leq 30$ mm com coeficientes angulares menores, e o segundo de $40 \leq L \leq 300$ mm com coeficientes angulares maiores.

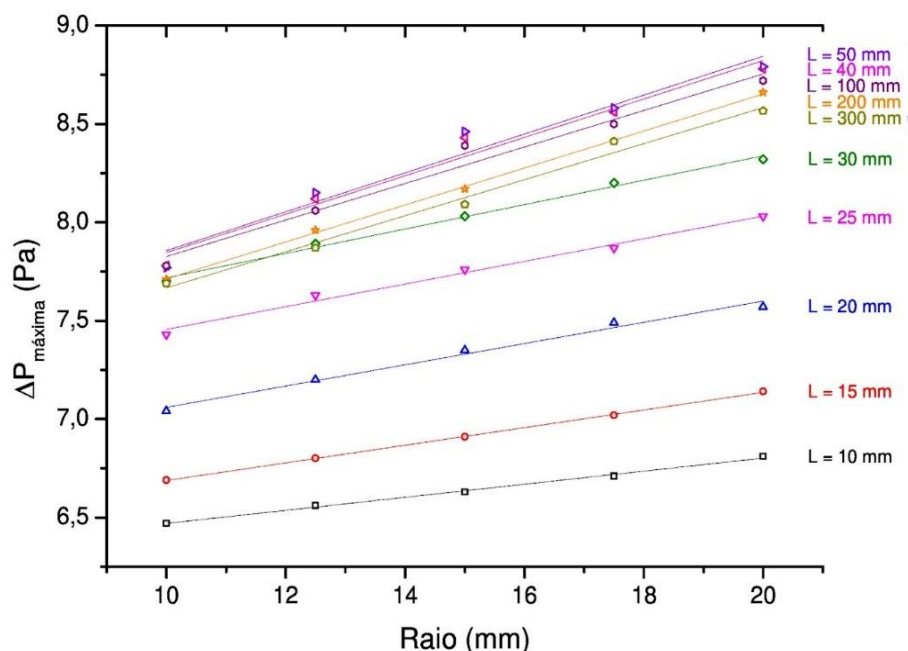


Figura 1. Comportamento da diferença de pressão em função do raio para os diferentes comprimentos simulados.

Ademais, os resultados apontaram um limite superior de $\Delta P_{\text{máxima}}$ para $40 \leq L \leq 50$ mm. A partir de então, as amplitudes de pressão mostraram uma queda à medida que L aumentou de 100 a 300 mm (seta cinza na Fig. 1). Outro aspecto a ser observado é que independente de L , os valores de $\Delta P_{\text{máxima}}$ foram sempre alcançados para o maior valor simulado de raio, i.e., $r = 20,0$ mm. Esse resultado é consistente com os reportados na literatura que também obtiveram maiores amplitudes de pressão para o maior r ao simular *buffers* de $10 \leq L \leq 30$ mm e $4 \leq r \leq 8$ mm^[8].

As Figs. 2(a) e (b) apresentam os resultados do fator geométrico (FG) – definido aqui como o coeficiente angular do perfil linear ajustado (Pa/mm) – e da qualidade dos ajustes lineares refletidos pelos valores do coeficiente de determinação R^2_{ajustado} em função de L . Entre 10 e 30 mm, FG aumentou progressivamente com L . Contudo, um ganho pronunciado em FG foi observado em $40 \leq L \leq 50$ mm e o máximo alcançado para $L = 50$ mm, indicado por uma seta laranja na Fig. 2(a), corroborando os resultados de $\Delta P_{\text{máxima}}$.

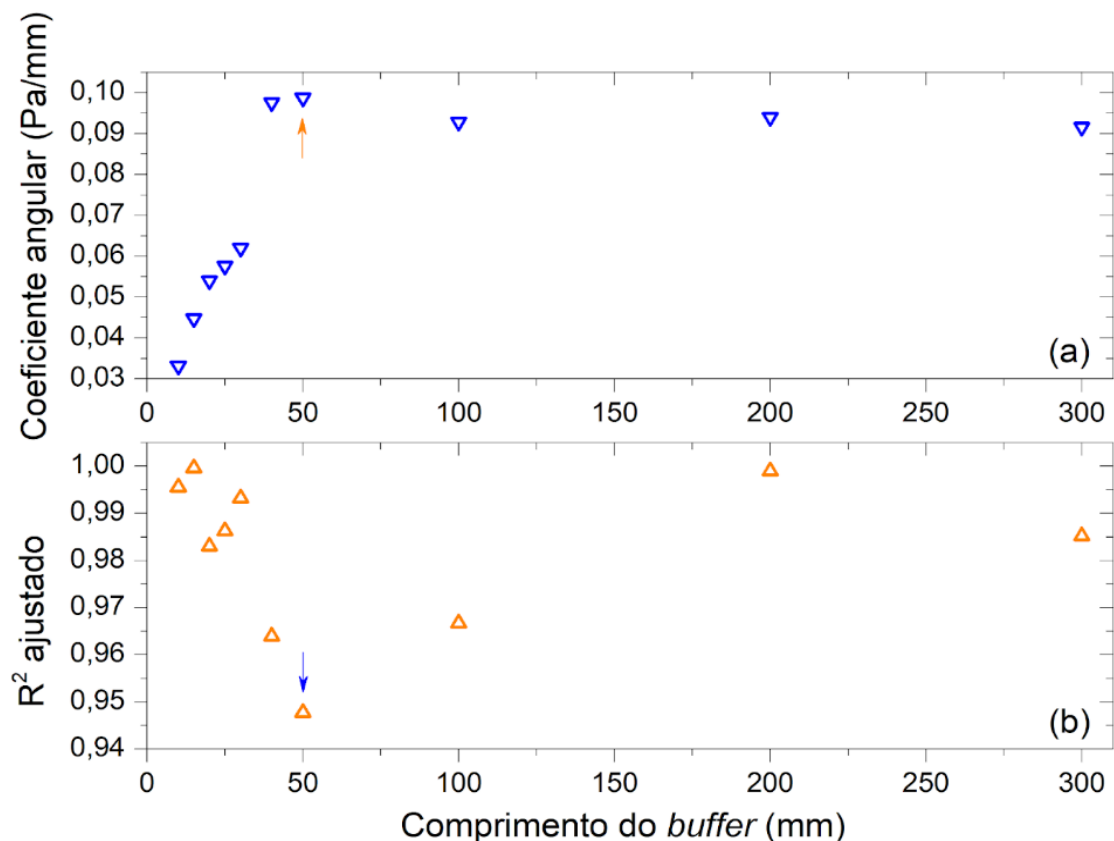


Figura 2. (a) Fator geométrico e (b) qualidade do ajuste em função do comprimento do *buffer*.

Ao extrapolar-se L para valores de 100 a 300 mm, S experimentou uma queda e mostrou-se estável em torno de 0,093 Pa/mm. Em relação à qualidade, nota-se que para $10 \leq L \leq 30$ mm, a variação de r explicou sempre acima de 98% o comportamento de $\Delta P_{\text{máxima}}$. Por outro lado, justamente na região em que as simulações apresentaram maior S , $40 \leq L \leq 50$ mm, R^2_{ajustado} exibiu os valores mais baixos dentre os cenários simulados. A seta azul na Fig. 3(b) destaca que em $L = 50$ mm o menor nível de explicação foi determinado. Ao aumentar-se L , R^2_{ajustado} voltou a aumentar ao passo que $\Delta P_{\text{máxima}}$ diminuiu.

4. Conclusões

Neste trabalho foi analisada a influência do raio (r) e comprimento (L) dos *buffers* no fator geométrico (FG) de um sensor fotoacústico destinado ao monitoramento de gases a partir de simulações pelo Método de Elementos Finitos. Os resultados mostraram uma dependência linear nas curvas $\Delta P_{\text{máxima}}$ versus r para todo intervalo de L simulado. Valores otimizados foram alcançados para $r = 20,0$ mm e $L = 50$ mm. Essa combinação resultou em um $FG = 0,0988$ Pa/mm. As análises das simulações mostraram que esse mesmo par, entretanto, culminou no menor valor de $R^2_{\text{ajustado}} = 0,9477$ entre todos os cenários investigados.

Agradecimentos

I.J.G. Couto agradece ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica da UENF. G.R. Lima e L. Mota agradecem às Fundações de Amparo à Pesquisa dos Estados do Espírito Santo e Rio de Janeiro pelos suportes financeiros através dos Processos FAPES/PPP/2017 e FAPERJ-APQ1 (E-26/211.777/2021).

Referências

- [1] CAPRIOLI, F.; QUERCIA, L. Ethylene detection methods in post-harvest technology: a review. *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 203, p. 187-196, Nov. 2014.
- [2] PAARDEKOOOPER, L. M.; VAN DEN BOGAART, G.; KOX, M.; DINGJAN, I.; NEERINCX, A.H.; BENDIX, M. B.; TER BEEST, M.; HARREN, F.J.M.; RISBY, T.; PICKKERS, P.; MARCZIN, N.; CRISTESCU, S.M. Ethylene, an early marker of systemic inflammation in humans. *Scientific Reports*, v.7, n. 6889, p. 1-10, Jul. 2017.
- [3] POPA, C.; PETRUS, M.; BRATU, A.M. Ammonia and ethylene biomarkers in the respiration of the people with schizophrenia using photoacoustic spectroscopy. *Journal of Biomedical Optics*, v. 20, n. 5, p. 57006, Mai. 2015.
- [4] PALZER, S. Photoacoustic-based gas sensing: a review. *Sensors*, v. 20, n. 9, p. 2745, Mai. 2020.
- [5] YANG, T.; ZHOU, K.; JIN, L.; LIU, R.; CHEN, W. Optimization of photoacoustic cell for trace acetylene detection in transformer oil. *Atmosphere*, v. 14, n. 5, p. 801, Abr. 2023.
- [6] COTTERELL, M.I.; WARD, G.P.; HIBBINS, A.P.; HAYWOOD, J.M.; WILSON, A.; LANGRIDGE, J.M. Optimizing the performance of aerosol photoacoustic cells using a finite element model. Part 1: method validation and application to single-resonator multipass cells. *Aerosol Science and Technology*, v. 53, n. 10, p. 1107-1127, Ago. 2019.
- [7] WOLFF, M.; KOST, B.; BAUMANN, B. Shape-optimized photoacoustic cell: numerical consolidation and experimental confirmation. *International Journal of Thermophysics*, v. 33, n. 10, p. 1953-1959, Nov. 2012.
- [8] CAI, Y.; ARSAD, N.; LI, M.; WANG, Y. Buffer structure optimization of the photoacoustic cell for trace gas detection. *Optoelectronics Letters*, v. 9, n. 3, p. 233-237, Mai. 2013.