

08 a 11 de Outubro de 2018  
Instituto Federal Fluminense  
Búzios - RJ

## ANÁLISE DE UM DISPOSITIVO MICROFLUIDICO USANDO ANSYS FLUENT

**Carlos Eduardo Santos Bonfim**<sup>1</sup> – bonfim.carlos@eb.mil.br

**Felipe Barbosa Ougano**<sup>1</sup> – felipe.ougano@eb.mil.br

**Paulo Alexandre de Moraes Cabral**<sup>1</sup> – paulo.cabral@eb.mil.br

**Tercio Brum**<sup>1</sup> – brum.tercio@eb.mil.br

<sup>1</sup> Instituto de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear (IDQBRN) – Rio de Janeiro, RJ, Brazil

**Abstract.** *O trabalho proposto visa comparar dois modelos de simulação computacional, para avaliar o projeto de um dispositivo microfluídico usado como ferramenta tecnológica na Medicina Especial, para servir como modelo de validação para um microreator tubular a ser utilizados na preparação de antídotos para agentes tóxicos químicos, presentes no Anexo da Convenção de Proibição de Armas Químicas (OPAQ), pelo Laboratório de Síntese Orgânica do Instituto de Defesa Química, Biológica, Radiológica e Nuclear (IDQBRN). Os dados simulados com o Ansys Fluent, apresentaram valores muito próximos e com erros relativamente pequenos, principalmente para a perda de carga, quando comparado com os dados teóricos, experimental e o modelo simulado no COMSOL.*

**Keywords:** *CFD, Microfluídica, Fluent.*

### 1. INTRODUÇÃO

O campo da microfluídica envolve o uso de dispositivos microestruturados, com dimensões geralmente da ordem de dezenas a centenas de micrômetros, que permitem o manuseio de baixos volumes (normalmente nanolitros ou menos) de fluidos dentro deles (Tarn & Pamme, 2013). Para o dispositivo estudado, a microestruturatura é importante visto que a necessidade de portabilidade é uma variável de extrema importância no espaço (Figura 1).

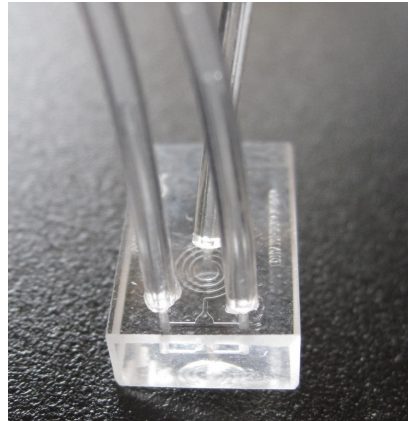


Figura 1: Dispositivo de vidro

O fluxo dentro dos dispositivos micro fluídicos ocorrem praticamente por difusão molecular e na maioria dos casos é laminar. Embora a mistura baseada na difusão possa levar dias em sistemas convencionais baseados em frascos, as pequenas distâncias dentro dos canais microfluídicos permitem a mistura completa em segundos ou minutos. (Gubala et al., 2011).

O trabalho permeia por duas motivações distintas, entretanto, usando a mesma tecnologia de simulação numérica para validar o modelo experimental e auxiliar no melhor desenvolvimento do produto final.

Segundo Mckay (2007), a motivação do projeto partiu da necessidade de retornar com amostras biológicas da Estação Espacial Internacional, de realizar a análise de sangue em órbita, além da dificuldade de portabilidade dos equipamentos disponíveis devido aos grandes volumes e massa.

Para o IDQBRN a necessidade de melhorar a preparação de antídotos, químicos tóxicos e seus precursores, em pequena escala, listados no Anexo da Convenção da OPAQ através do reator microtubular.

## 2. CENÁRIO

O ambiente de simulação foi realizado em uma estrutura espiral, conforme representado na Figura 2 e Figura 3 abaixo.

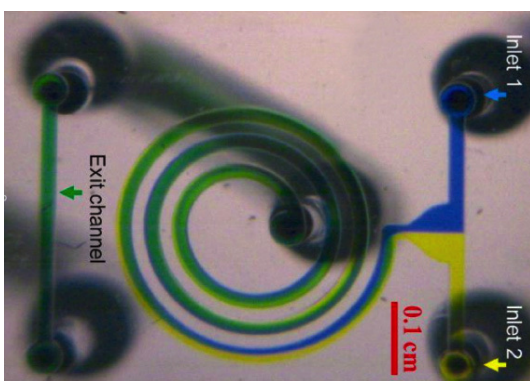


Figura 2: Mistura de água e corante.

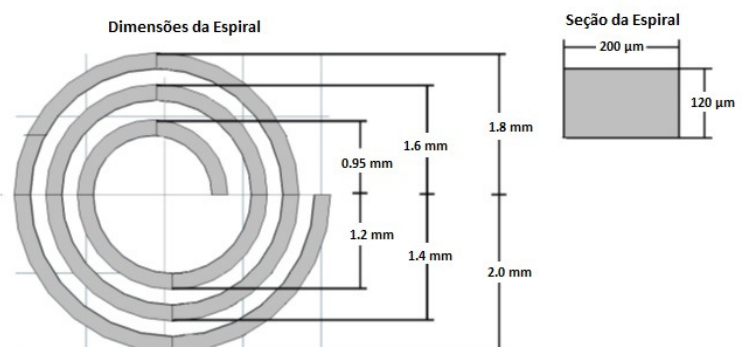


Figura 3: Dimensões da Espiral

Para as condições de contorno foi adotado que o fluxo é laminar, como é de costume para fluxos microfluídicos, temperatura ambiente e fluido newtoniano, bem como as condições de discriminadas na Tabela 1, abaixo:

Tabela 1 – Condições de Contorno para simulação

Propriedade do Fluido (água)	$\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ (densidade) $\nu = 1 \times 10^{-3} \text{ Pa.s}$ (viscosidade cinemática) $D = 5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ (Difusividade, Nguyen 2008)
Concentrações de Entrada	For $y < 0$ , $c = 0$ For $y > 0$ , $c = 1$
Velocidades de entrada analisadas	0.05 m/s, 0.08 m/s
Condições de contorno de saída	$P = 0 \text{ Pa}$ No slip walls
Variação do número de Reynolds	8 – 12
Variação do número de Dean (Gosset, 2009)	0-3

## 2.1 Geometria

A geometria do dispositivo foi modelada através do Space Claim (Ansys, 2016) licenciada para o IDQBRN e de acordo com as dimensões estabelecidas na Figura 4 e Figura 5.

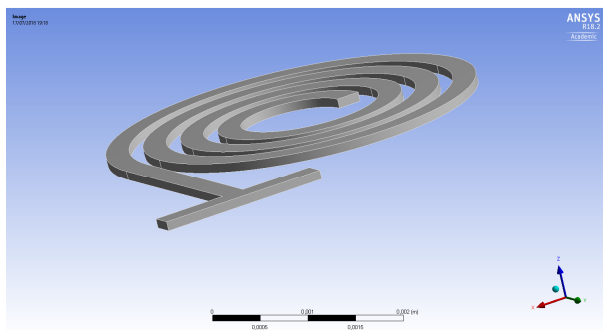


Figura 4: Geometria do dispositivo

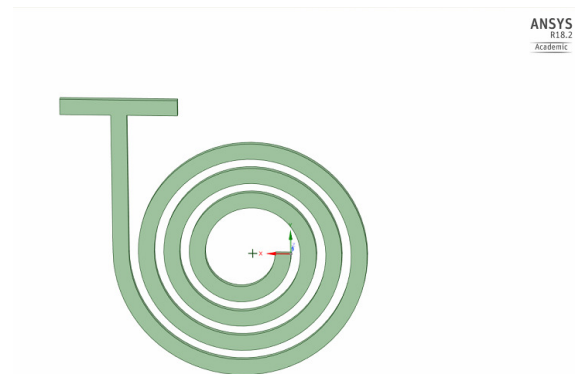


Figura 5: Vista frontal da geometria

## 2.2 Malha

Após ser realizado um estudo de convergência de malha, para o campo de velocidade chegou-se a malha contendo 112035 elementos, hexaédricos, conforme a Figura 6 e Figura 7:

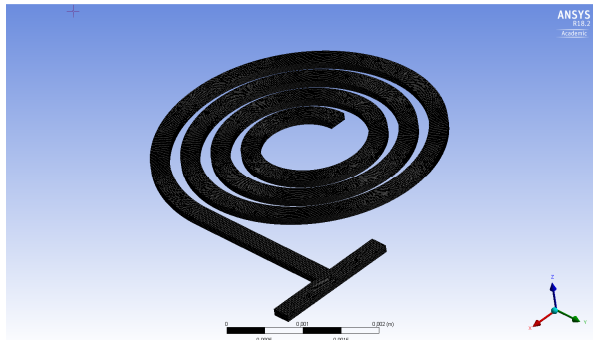


Figura 6: Malha Hexaédrica

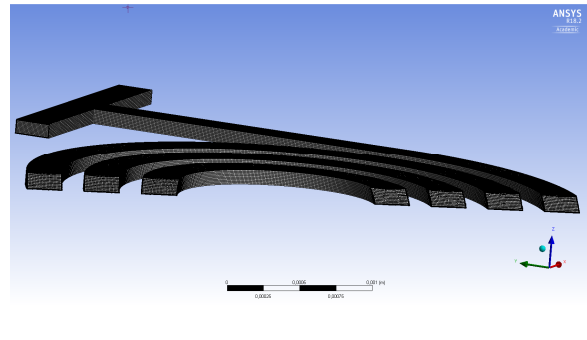


Figura 7: Malha em corte

### 3. RESULTADOS

Os dados simulados com o Ansys Fluent, apresentaram valores muito próximos e com erros relativamente pequenos (variação de 0.01 a 0.05%), principalmente para a perda de carga, quando comparado com os dados teóricos, experimental e o modelo simulado no COMSOL.

Os valores teóricos foram calculados a partir da Eq. (1) abaixo:

$$\Delta P = 32\mu UL/D_H^2 \rho \quad (1)$$

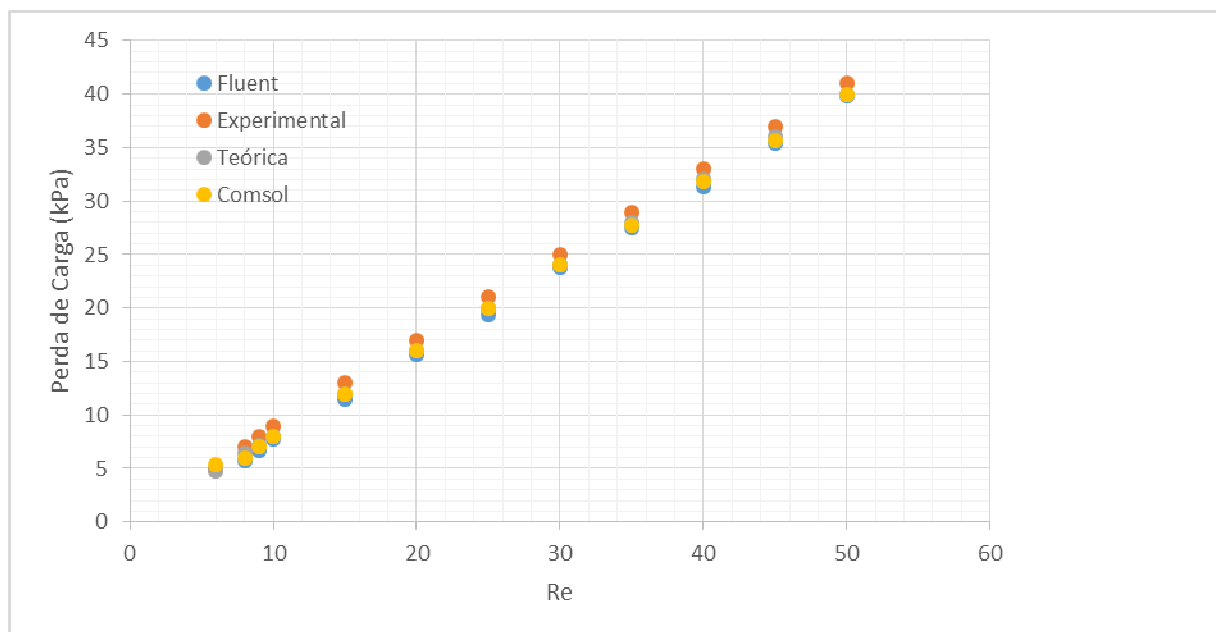


Figura 8: Perda de carga ao longo da espiral

Na Figura 8 acima, podemos observar a proximidade dos pontos teóricos, experimentais e simulados computacionalmente, validando assim o modelo computacional para a perda de carga.

Os dados experimentais da mistura foram examinados usando o mesmo cálculo, o método experimental, mas os cálculos dependiam do valor da concentração em vez do valor de intensidade de pixel. Este é o método também foi empregado em um estudo comparando vários micromixers (Finlayson, Aditya et al., 2008). A variação de concentração,  $\sigma_c$ , foi calculada baseada na concentração usando a Eq. (2):

$$\sigma_c = \sqrt{\langle (c - \langle c \rangle)^2 \rangle} \quad (2)$$

Onde  $c$  é a concentração entre 0 e 1 e  $\langle c \rangle$  é a concentração média na região amostrada.

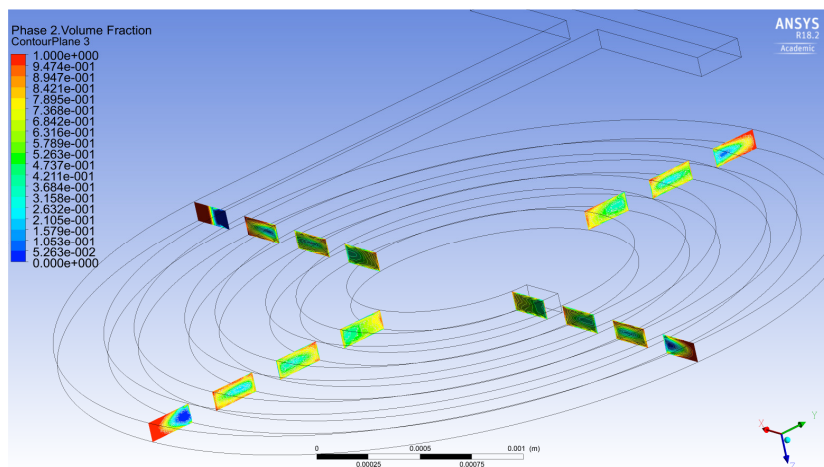


Figura 9: Variação da fração volumétrica ao longo da espiral

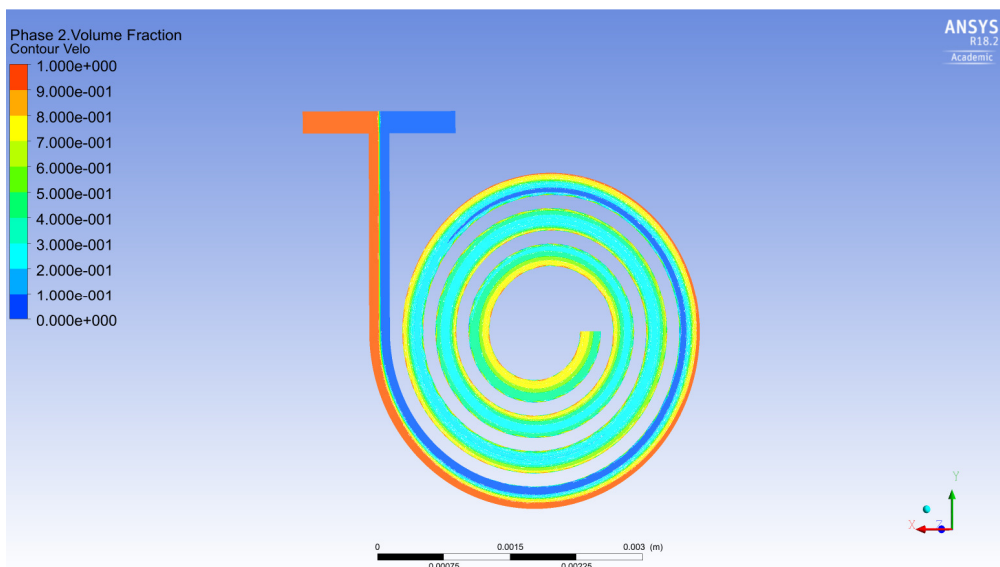


Figura 10: Perfil da fração volumétrica

#### 4. CONCLUSÃO

Preliminarmente os dados simulados para Reynolds e Dean variando de 8-12 e 0-3, respectivamente, forneceram resultados próximos, aos dados experimentais e simulados por McKay (2007). O que nos dá uma primeira validação do modelo, entretanto, a investigação continuará até Reynolds 90 e Dean 23.

Após isso, será comparada a simulação Euleriana com a Lagrangeana, de forma a obter a melhor aproximação para as reações internas do Laboratório de Síntese Orgânica do IDQBRN.

## REFERENCES

- Anslys Space Claim Tutorials, 2016.
- Convenção sobre Armas Químicas, Anexo. Disponível em: <<https://www.opcw.org/chemical-weapons-convention/annexes/>>. Acessado em 20 de setembro de 2018.
- Finlayson, B. A., A. Aditya, et al. (2008). Mixing of Liquids in Microfluidic Devices. COMSOL Conference, Boston.
- Gossett, D. R. & Carlo, D. D. Particle Focusing Mechanisms in Curving Confined Flows. *Anal. Chem.* **81**, 8459–8465 (2009).
- Nguyen, N.-T. (2008). Micromixers: fundamentals, design and fabrication. Norwich, NY, William Andrew.
- Organização das Nações Unidas (ONU). Convenção sobre a Proibição do Desenvolvimento, Produção, Armazenagem e Utilização de Armas Químicas e sobre sua Destruição. Disponível em: <[https://treaties.un.org/Pages/ViewDetails.aspx?src=TREATY&mtdsg\\_no=XXVI-3&chapter=26&lang=en](https://treaties.un.org/Pages/ViewDetails.aspx?src=TREATY&mtdsg_no=XXVI-3&chapter=26&lang=en)>. Acessado em 20 de setembro de 2018.
- T. L. Mckay, "A CFD Model Of Mixing In A Microfluidic Device For Soace Medicine Technology", pp. 1–103, 2011.
- Tarn, Mark & Pamme, Nicole. (2013). Microfluidics. Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering. 1-7. 10.1016/b978-0-12-409547-2.05351-8.

## ANALYSIS OF A MICROFLUID DEVICE USING ANSYS FLUENT

**Abstract.** *The proposed work aims to compare two models of computational simulation to evaluate the design of a microfluidic device used as a technological tool in Special Medicine to serve as validation model for a tubular microreactor to be used in the preparation of antidotes for chemical toxic agents present in the Annex to the Convention on the Prohibition of Chemical Weapons (OPCW), by the Laboratory of Organic Synthesis of the Chemical, Biological, Radiological and Nuclear Defense Institute (IDQBRN). The simulated data with the Ansys Fluent presented values very close and with relatively small errors, mainly for the loss of load, when compared with the theoretical data, experimental and the model simulated in the COMSOL.*

**Keywords:** *CFD, Microfluidics, Fluent.*