Modelagem Computacional de Difusores para Microbombas

A. G. S. Barreto Neto*1, C. S. Moreira1 e A. M. N. Lima2

Resumo: Este trabalho trata do dimensionamento da estrutura bocal/difusor utilizando a simulação computacional com fronteira móvel. Esse tipo de simulação contempla toda estrutura da bomba, isto é, câmara de bombeamento, difusor e área de dispersão de fluxo, de modo a contabilizar o refluxo em função da estrutura, possibilitando um projeto mais realísticos da estrutura.

Palvras-chave: Microbomba, difusor, Modelagem

1. Introdução

microbombas As são dispositivos microfluídicos de transportar capazes quantidades ínfimas de fluido (líquido ou gás), com taxa de fluxo controlada em regime laminar, ou seja, bombas com baixa potência para deslocamento de pequenos volumes de fluido. Dentre as principais aplicações para as microbombas destacam-se: infusão de drogas, refrigeração de circuitos microeletrônicos e, mais recentemente, em sistemas miniaturizados para análises químicas e bioquímicas (Wong et al.. 2002; Laser and Santiago, 2004; A. Nisar et al., 2008).

O desenvolvimento da tecnologia para miniaturição de sistemas de análises possibilitou o surgimento de um novo conceito, o µTAS (micro total analisys systems) também denominados "lab-on-a-chip" (LOC), através do qual todos os passos do processamento da análise são realizados em um único chip (introdução da amostra, pré-tratamento da amostra, reações químicas, separação analítica e detecção) (Manz et al., 1990).

A miniaturização provoca principalmente redução do volume da amostra e de reagentes ou substâncias bioquímicas associadas, como também redução física do equipamento, portabilidade e baixo custo, além de diminuir o índice de contaminação permitindo uma resposta

rápida e confiável para análise. Como consequência da popularização dos dispositivos microfluídicos de análise, que exigem o transporte de maneira acurada e uniforme de uma pequena quantidade de fluido, há um crescente interesse em microbombas principalmente para aplicações médicas (E. Chappel et al, 2014; D. Dumont et al, 2014; F. Thoma et al, 2015). Em se tratando de dispositivos analíticos, como por exemplo, os biossensores, estes são de fundamental importância, sendo este o único componente responsável pela movimentação da massa fluídica (analito), e consequentemente, indispensável para o funcionamento do dispositivo.

Em se tratando miniaturização de dispositivos faz-se necessário a eliminação de partes móveis, tais como válvulas controle de fluxo tipo cantilever, esfera ou flap; evitando problemas como alta queda de pressão, desgaste e fadiga na válvula aumentando a vida útil e sua confiabilidade do dispositivo (Stemme and Larsson, 1973). Portanto, o uso do princípio bocal/difusor em substituição às válvulas com partes móveis é uma excelente alternativa e tem se constituído como objeto de estudo em muitos centros de pesquisas. O bocal/ difusor, devido à sua concepção especial, tem a sua resistência hidráulica maior em uma direção, e no sentido oposta o efeito é inverso. Assim, embora essa estrutura não impeça o refluxo, como uma válvula normal, ainda sim executa a função de direcionar o fluxo na direção da menor resistência, produzindo um fluxo líquido. Para um bom desempenho de uma microbomba, primeiramente faz-se necessário o projeto adequado das válvulas, ou seja, avalia-se a sua eficiência. Portanto, o uso do princípio bocal/difusor em substituição à válvulas é uma excelente alternativa e tem se constituído como objeto de estudo em muitos centros de pesquisas.

Há muitos trabalhos na literatura na qual o estudo do bocal/difusor é realizado de forma

¹Instituto Federal de Ciência e Tecnologia - IFPB, João Pessoa, PB, Brasil

²Universidade Federal de Campina Grande - UFCG, Campina Grande, PB, Brasil

^{*} Autor correspondente: arlindo@ifpb.edu.br

individual, isto é, os parâmetros geométricos do bocal/difusor são determinados de forma desacoplada da microbomba (Olson, 1998; Yih-Lin Cheng et al., 2007; Yi-Chun Wang et al., 2009, Li Guo et al., 2011). Contudo, esse tipo de análise pode não ser a melhor alternativa para maximizar o desempenho da microbomba, pois despreza os efeitos do refluxo provocado durante a movimentação da massa fluídica.

Nesse sentido, o presente trabalho irá realizar o estudo geométrico do bocal/difusor na própria estrutura da microbomba, resolvendo-se a equação de Navier-Stokes em regime transiente para uma geometria 3D.

2. Materiais e Métodos

2.1 Aspectos Teóricos: Modo de operação da microbomba

O ciclo de funcionamento de uma microbomba está ilustrado na Figura 1, sendo composto, apenas, por dois estágios: (i) o estágio de sucção, onde o fluido entra na bomba devido a uma diferença de pressão $(P_1 < P_0)$ com a entrada (inlet) funcionando como difusor e a saída (outlet) funcionando como bocal. Durante o estágio de bombeamento (ii), durante a compressão, o fluido é transportado devido à diferença de pressão $(P_1>P_0)$ no qual a saída agora irá funcionar como difusor e a entrada como bocal (Figura 1b). A queda de pressão na direção do difusor é menor que na direção do bocal. Assim, o volume de fluido transportado pelo difusor será maior que o transportado pelo bocal $(\Phi_I > \Phi_0)$ no modo de sucção. Para o modo de bombeamento ocorre o inverso, a saída funcionará como difusor e o volume de fluido transportado será maior que o da entrada (Φ_1 < Φ_0). Assim, para um ciclo completo de funcionamento, o fluxo de líquido transporta do pela microbomba corresponderá à diferença entre os dois modos de operação.

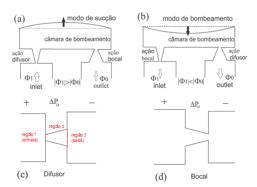


Figura 1. Ilustração do modo de operação da microbomba com o bocal/difusor: (a) Modo de sucção; (b) Modo de bombeamento; (c) Diferença de pressão sobre o difusor; (d) Diferença de pressão sobre o bocal.

2.2 Aspectos Teóricos: Bocal/difusor

O projeto da estrutura bocal/difusor determina o desempenho da microbomba sem válvulas (valveless); o difusor é um dispositivo concebido para transformar a energia cinética em energia potencial, ou seja, reduz a velocidade com o aumento da pressão. Difusores podem ser classificados como cônicos e piramidal (secção quadrada ou secção retangular), Figura 1:(a)-(c) respectivamente (NABAVI, 2009). Entretanto, os difusores da Figura1: (b)-(c) têm a mesma natureza, ou seja, são difusores de paredes planas apenas apresentando uma relação b/W1 diferentes. A seleção da forma do difusor é predominantemente dependente do processo de fabricação, sendo o difusor de paredes planas mais adequadas para o processo de litografia ou técnicas de fabricação de microusinagem, outro fato favorável ao difusor plano é que este é cerca de 10-80% menor que o melhor difusor cônico, para a mesma condição de entrada de pressão ou velocidade (Olsson, 1998).

Os parâmetros geométricos do difusor plano são: ângulo de divergência 2θ , comprimento, L, profundidade, b, largura de entrada e saída W_1 e W_2 , respectivamente. Em função destes parâmetros é projetado o difusor com melhor eficiência. Para análise da eficiência o difusor pode ser dividido em três regiões (Figura 2-c) sendo a perda total de pressão o somatório das perdas individuais (Olsson, 1998).

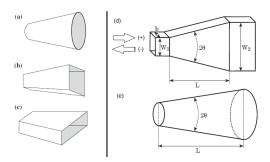


Figura 2. Tipos de difusores: (a) cônico e (b)-(c) piramidal e aspectos geométricos do: (d) plano, (e) cônico.

Por definição, o fluxo no sentido positivo representa a ação do difusor, enquanto no sentido negativo ação do bocal.

$$p_d = \left(K_{1,d} + K_{2,d} + K_{3,d} \left(\frac{W_1}{W_2}\right)\right) \frac{1}{2} \rho \bar{u}^2 \tag{1}$$

$$\Delta p_n = \left(K_{1,n} + K_{2,n} + K_{3,n} \left(\frac{W_1}{W_2} \right) \right) \frac{1}{2} \rho \bar{u}^2 \tag{2}$$

Usando a variável ξ para representar as perdas, então se tem que as perdas totais no sentido do difusor são

$$\xi_{d} = K_{1,d} + K_{2,d} + K_{3,d} \left(\frac{W_1}{W_2}\right)$$
 (3)

e no sentido do bocal,
$$\xi_{n=}K_{1,n} + K_{2,n} + K_{3,n}(\frac{W_1}{W_2})$$
 (4)

Usando as equações (3) e (4), o rendimento pode ser então definido como:

$$\eta = \xi_n / \xi_d \tag{5}$$

Segundo Stemme et al., 1993, o rendimento do difusor dever ficar na faixa de 1<n<5. Isso implica que a perda de pressão para um dado fluxo é menor no sentido positivo (difusor) que na direção do bocal, de modo a garantir um fluxo líquido. Entretanto, o cálculo destes parâmetros de perdas para o microdifusor são bastante difícil de serem mensurados, entretanto, há na literatura tabelas que estimam os valores de perdas em função da geometria do difusor (White, 2010), conforme ilustrado na Figura 3. Os valores tabelados são disponíveis para dispositivos em macro escala que apresentam velocidade elevada do fluido e regime de fluxo diferente do laminar.

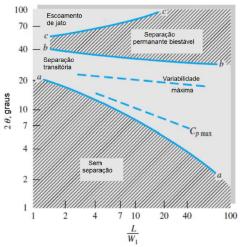


Figura 3: Mapa de estabilidade para o difusor plano (White, 2010, p.410).

De acordo com o Mapa de difusor o melhor projeto será aquele posto ao longo da linha de C_{pmax} , isto é, o difusor apresentará seu maior rendimento.

Na macro escala, o regime de fluxo laminar ou turbulento é dado em função do número de Reynolds (Re). Assim um dado bem conhecido da literatura é que o escoamento de um fluido qualquer em escala macroscópica é laminar se, Re < 2000 e turbulento se, Re > 3000. Por outro lado, em micro dispositivos essa faixa de número de Reynolds não é a mesma da macro escala, sendo que há trabalhos que afirmam a existência de um regime turbulento de fluxo para Re=400 (Nabavi, 2009). Desta forma usar uma tabela de perdas (dispositivos de macroescala) para projeto de microdifusores não é a melhor solução, podendo sim ser um ponto de partida. A solução ideal é usar uma ferramenta de fluidodinâmica computacional (do inglês: Computational Fluid Dynamics-CDF) baseada em elementos finitos para calcular de forma mais precisa o rendimento do difusor, levando-se em conta aspectos geométrico e de regime de fluxo, ou seja, $\eta = f(Re, L, W1, W2)$.

3. Uso do COMSOL Multiphysics

O modelo computacional da microbomba foi realizado através da solução da equações de Navier-Stokes e da continuidade utilizando-se o software COMSOL Multiphysics.

A equação de Navier-Stokes (ENS) (2) e da continuidade (3) são usadas para resolver a parte relativa ao movimento da massa.

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla \mathbf{p} = \mathbf{F} \quad (2)$$
$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (3)$$

onde ρ (kg/m³) é a densidade do fluido, **u** é o vetor velocidade, p é vetor pressão, e F representa as forças de corpo externas e internas agindo sobre a massa fluídica. No COMSOL esse conjunto de equações é implementada pela interface física Laminar Flow (spf). A parte ativa da bomba, isto é, o local que irá iniciar o movimento da massa fluídica será a parte superior da câmara de bombeamento (ver Figura 4), configurando um movimento prescrito dessa região. Assim, esse movimento provocará o desequilíbrio das forças viscosas e, por conseguinte, o movimento do fluido. Entretanto, o direcionamento do movimento do fluido será função exclusiva dos difusores. No COMSOL essa função do movimento da fronteira é implementado pelo Moving Mesh (ale).

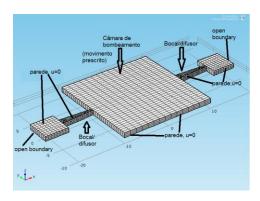


Figura 4: Estrutura da microbomba e condições de fronteira.

As especificações para as condições de fronteira são:

Para o Moving Mesh, é especificado no inlet/outlet como open boundary, e nas demais superficies são postas a condição de não deslizamento na fronteira (no-slip boundary, **u**=0). A parede superior da câmara de bombeamento recebe a condição do tipo Moving wall.

 Para a interface física Moving Mesh as bordas laterais da microbomba são fixadas, isto é não podem se movimentar. Entretanto, a parte superior da bomba apresenta a condição de movimento na direção do eixo z, definida por uma equação para o movimento da membrana:

Amplitude*
$$\sin(2*pi*f*t)*(\cos(X*pi/l0))*(c \cos(pi*Y/l0))$$
 (4)

Assim, o deslocamento da membrana apresenta componentes em x, y, z e t. Portanto, f representa a frequência em Hz, X e Y são variáveis globais do sistema e I0 representa a largura da câmara de bombeamento, conforme ilustrado na Figura 5. na mesma figura também está ilustrado a entrada e saída do difusor (W1/W2) e o ângulo de abertura 2θ.

3.1 Geometria da microbomba e condições de movimento

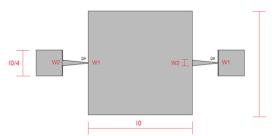


Figura 5: Vista superior da geometria da microbomba.

A câmara de bombeamento apresenta o formato quadráticos, sendo posicionada no centro de coordenadas (x,y,z)=(0,0,0). Assim, na parte central da membrana sempre irá ocorrer o maior valor de deslocamento, conforme ilustrado na Figura 6.

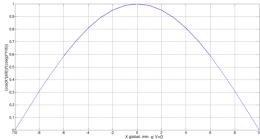


Figura 6: Comportamento da amplitude da membrana em função da posição (X,Y).

3.2 Simulações

A malha utilizada na simulação é do tipo mapeada com elementos do tipo hexaédricos, prismáticos e triangulares, totalizando 15430 elementos, conforme já ilustrada na Figura 4. O cálculo da vazão de saída é realizada através da intregarção da velocidade sobre a área de saída: $Q = \int_A^t \mathbf{u} \ dt$. O fluido utilizado nas simulações foi a água na temperatura de 25°C. Na Figura 7 estão ilustrados os parâmetros da simulação. A simulação será realizada de forma parametrizada, em regime transiente, em função do ângulo do difusor, na qual o Comsol irá variar o angulo segundo o vetor $2\theta = \{5^{\circ}, 10^{\circ}, 15^{\circ}\}$. De modo a calcular o melhor ângulo para o difusor. Assim, ao variar o ângulo de abertura também irá variar o valor de W2= $2*L*tan(0.5*\theta *pi/180)+w1$.

" Name	Expression	Value	Description
10	20[mm]	0.020000 m	Largura
L	1.5[mm]	0.0015000 m	Comprimento Difusor
teta	11.45	11.450	variando
w1	0.1[mm]	1.0000E-4 m	entrada/difusor
w2	2*L*tan(0.5*teta*pi/18	4.0076E-4 m	saída/difusor
ls	10/4	0.0050000 m	Entrada/saida bomba

Figura 7: Parâmetros da simulação.

3.2.1 Resultados

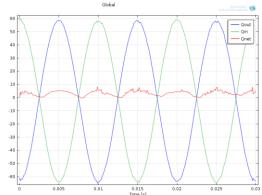


Figura 8: Comportamento da vazão e do fluxo líquido da microbomba para uma frequência de 100 Hz.

A Figura 8 ilustra o comportamento do fluxo na região de entrada e saída da bomba. O fato de não haver válvulas de retenção de fluxo provoca um refluxo, que poderá influenciar no rendimento da bomba. Assim, retirando-se as contribuições do refluxo sobra-se o fluxo líquido. Sendo este que deverá ser computado como resultado do processo de bombeamento.

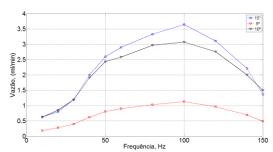


Figura 9: Comportamento da vazão em função da frequência e do angulo de abertura (2θ) .

A Figura 9 ilustra o comportamento não monotônico da vazão em função da frequência e do ângulo de abertura. Nota-se que o máximo valor da vazão ocorrem em 100 Hz para o difusor de 15°, diferentemente do que mostra vários trabalhos na literatura, na qual o valor de 10° é amplamente utilizado.

4. Conclusões

Conforme foi mostrado na secção anterior é possível fazer o projeto dos difusores já contabilizando toda a estrutura física da microbomba e, não somente, o próprio difusor. Dessa forma, é possível dimensionar toda estrutura dentro das condições exigidas no projeto, tais como: volume da câmara, dimensional, taxa de fluxo, configurando uma otimização mais eficiente.

8. Referências

A. Nisar; Afzulpurkar, N.; Banchong; Tuantranont, A. Mems-based micropumps in drug delivery and biomedical applications. *Sensors and Actuators B*, Volume 130, p. 917–942, (2008).

Dimitry Dumont-Fillon, Hassen Tahriou, Christophe Conan and Eric Chappel. **Insulin Micropump with Embedded Pressure Sensors for Failure Detection and Delivery of Accurate Monitoring**. *Micromachines*, vol. 5, p.1161-1172, (2014).

E. Chappel; S. Mefti; G.-L. Lettieri; S. Proennecke; C. Conan. **High precision innovative micropump for artificial pancreas**. *Proc. SPIE vol. 8976, Microfluidics, BioMEMS, and Medical Microsystems XII*, (2014).

F. Thoma, F. Goldschmidtböing and P. Woias. A New Concept of a Drug Delivery System with Improved Precision and Patient Safety Features. *Micromachines*, 6, 80-95. (2015).

Li Guo, Weiping Yan1,, Yinghua Xu and Yiru Chen1. Valveless Piezoelectric Micropump of Parallel Double Chambers. International Journal of Precision Engineering and Manufacturing, vol. 13, 5, pp. 771-776, (2011).

Nabavi, M. **Steady and unsteady flow analysis in microdiffusers and micropumps: a critical review**. *Microfluidics and Nanofluidics*, Springer Berlin / Heidelberg, v. 7, p. 599–619, (2009).

Olsson, Valve-less diffuser pumps for liquids. Dissertação (Msc. thesis)-Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, jan. (1998).

Yi-Chun Wang, Jui-Cheng Hsu, Ping-Chi Kuo, Yung-Chun Lee. Loss characteristics and flow rectification property of diffuser valves for micropump applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52, 328–336, (2009).

Yih-Lin Cheng, Jiang-Hong Lin. Manufacture of three-dimensional valveless micropump. *Journal of Materials Processing Technology*, 229–236, (2007).

Yih-Lin, Cheng, Jiang-Hong Lin. Manufacture of three-dimensional valveless micropump. *Journal of Materials Processing Technology*, 229–236, (2007).