

Ficha de Trabalho

Introdução ao transporte de fluidos e de massa em COMSOL Multiphysics

Fluidos são substâncias capazes de escoar ao longo de um domínio e cujo volume toma a forma do seu recipiente. Todos os fluidos possuem um certo grau de compressibilidade e oferecem pequenas resistências à mudança de forma.

Os fluidos podem ser divididos em líquidos e gases. Enquanto os líquidos são praticamente incompressíveis, ocupam volumes definidos e têm superfícies livres, os gases, por outro lado, são compressíveis, e uma dada massa de gás expande-se até ocupar todas as partes do recipiente.

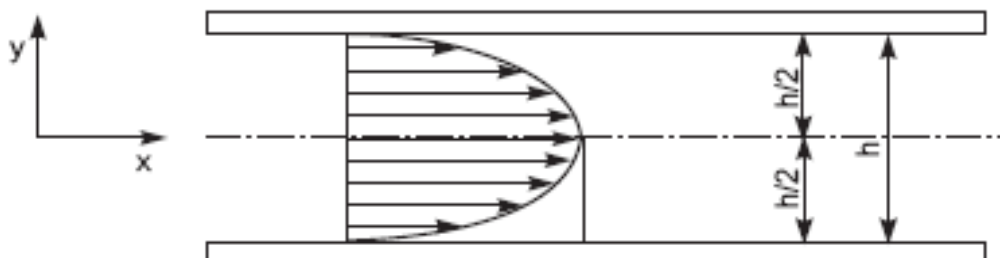
A mecânica dos fluidos lida com o comportamento dos fluidos em repouso ou em movimento. O escoamento dos fluidos é complexo e nem sempre sujeito à análise matemática exata, pelo que a simulação numérica vem ajudar a solucionar muitos dos problemas desta área.

Transporte de Fluidos

Três conceitos são importantes nos fundamentos de escoamento dos fluidos:

1. O princípio da conservação da massa, a partir do qual a equação da continuidade é desenvolvida: a quantidade total de energia num sistema isolado permanece constante.
2. O princípio da conservação da energia: num sistema isolado constituído por corpos que interagem apenas com forças conservativas, a energia mecânica total permanece constante.
3. O princípio da conservação da quantidade de movimento: a quantidade de movimento total do sistema se conserva se não existir nenhuma força externa a atuar.

São dois os tipos principais de escoamento: laminar e turbulento. Em sistemas microfluídicos, os escoamentos são tipicamente laminares. No escoamento laminar as partículas do fluido movem-se em camadas ou lâminas segundo uma trajetória reta e paralela. A velocidade atinge o seu valor máximo no centro do tubo e mínimo nas paredes do tubo, seguindo uma determinada parábola. Define-se escoamento laminar com n° Reynolds < 2100 (aprox.).



O escoamento turbulento é caracterizado pela existência de variações rápidas da velocidade e trajetórias irregulares. Define-se escoamento turbulento com n° Reynolds > 4000 (aprox.).

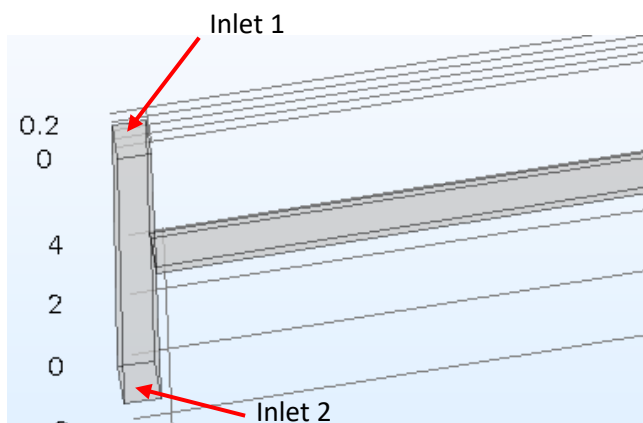
Transporte de massa

O transporte de massa é um processo onde existe a migração de uma ou mais espécies químicas num dado meio (sólido, líquido ou gasoso). O transporte das espécies químicas pode ser feito por dois mecanismos: difusão e/ou convecção. A difusão deve-se à diferença de potenciais químicos das espécies, ou seja, à diferença de concentrações entre dois locais num dado sistema, e depende do coeficiente de difusão da espécie química. A convecção é um mecanismo de transporte forçado e deve-se às condições de escoamento de um sistema, por exemplo, velocidade de um fluido em movimento.

Tarefa 1 – Desenhar a geometria 3D de um microcanal tipo T

Criar um “blank model”. Criar componente 3D. Desenhar um microcanal tipo T simples, a partir de 2 blocos, tendo em conta as seguintes dimensões: largura do canal de 400 μm , comprimento de 15 mm, altura de 400 μm . Nas entradas o microcanal tem a mesma largura (400 μm), e a região de entrada tem um comprimento total de 8 mm.

No desenho, ter em conta as coordenadas dos blocos para os posicionar em forma de T, como na figura abaixo (atenção ao posicionamento):



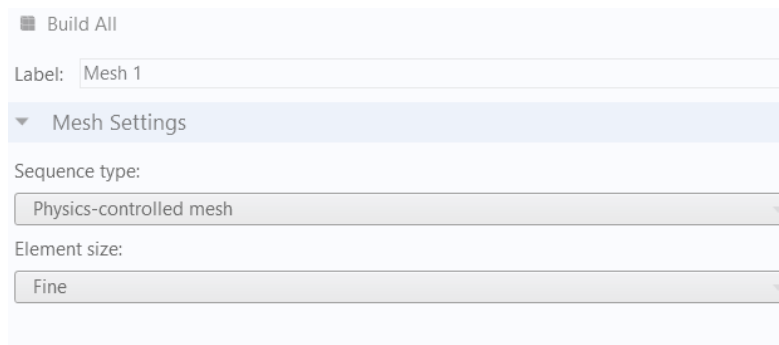
Tarefa 2 – Associar ao domínio o material água.

Adiciona o módulo de escoamento laminar (*laminar flow*). Associa todas as regiões de água (domínios 1 e 2, que formam o T do canal) ao domínio fluídico.

As condições de fronteira do problema deverão incluir paredes (walls) em todo o canal, à exceção da saída e das duas entradas do canal. Nas duas entradas, em vez de paredes, definir duas condições de fronteira de entrada (inlet), uma para cada entrada, com um caudal *inlet* >> *fully developed flow* >> *flow rate* de 5 $\mu\text{l}/\text{min}$ em cada uma delas e na saída *outlet* com pressão nula.

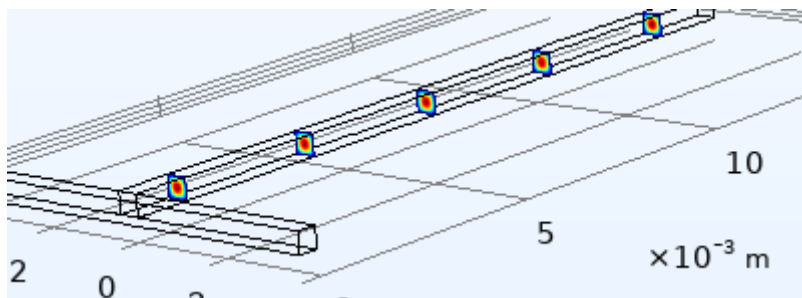
Nota: ao colocar o caudal pode colocar-se como 5 [$\mu\text{l}/\text{min}$]. O software reconhece a unidade e converte para a que está por defeito no software: m^3/s .

Tarefa 3 – Cria uma malha de tamanho fine.



Simula o escoamento em estado estacionário (adiciona um estudo). Analisa os perfis de velocidade e pressão obtidos. Para analisar os resultados podes criar streamlines (linhas de corrente), aumentar o nº de slices, mudar o plano das slices, etc.

Por defeito os campos de velocidade aparecem assim. Mudar o plano de corte no slice para plano xy, e apenas 1 slice a meia altura do canal. O que se conclui sobre os campos de velocidade no microcanal?



Tarefa 4 – Incluir transporte de massa:

Adiciona agora ao modelo o **módulo de transporte de massa** (*Transport of Diluted Species*). Considera que **numa das entradas do canal a água tem um soluto que entra no canal com concentração 1 mol/m³ e na outra há só água sem soluto** (concentração 0 mol/m³). Isto pode ser feito optando pela definição de **condição fronteira inflow**. Definir a **saída do canal como outflow**. Todas as outras fronteiras terão 0 fluxo (por defeito no COMSOL).

A velocidade do escoamento laminar vai influenciar o transporte de massa. Assim, clica em *Transport properties* e no **campo de velocidade define “velocity field”**, para que o

software vá buscar automaticamente os valores de velocidade calculados no módulo de laminar flow. No mesmo campo (*Convection and Diffusion*) indica o **coeficiente de difusão (D) do soluto**, que iremos considerar $1\text{e-}10$ [m^2/s].

A condição inicial do problema será concentração 0.

Simular em **estado estacionário**.

Observa se o canal tem uma distância suficiente para que a mistura ocorra na totalidade (ou seja, que a concentração da amostra chegue a 0.5 mol/m^3).

Tarefa 5 – No módulo de **laminar flow**, numa das entradas do canal **multiplica agora o caudal por 10 (ou seja, coloca um caudal de 50 ul/min numa entrada mantendo 5 ul/min na outra)**. Refaz a simulação e comenta as diferenças no perfil de velocidades e na mistura obtidas.