

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DEL EFECTO DE LA TEMPERATURA SOBRE MICROCAUDALES DE NITRÓGENO A TRAVÉS DE TUBOS CAPILARES

Brayan Steven Moreno Caballero¹, Jose Luis Valderrama Torres^{*1}, Elizabeth Ayala Blanco², Jhon Freddy Alfonso Serrano²

¹ Universidad Industrial de Santander. Cra 27 Calle 9. Bucaramanga, Santander, Colombia.

² Grupo de investigación en Fluidos y Energía GIFE. Corporación Centro de Desarrollo Tecnológico de Gas. Parque Tecnológico UIS Guatiguará. Km 2 vía El Refugio. Piedecuesta, Santander, Colombia.

Resumen: La temperatura es un factor que pueden influenciar de manera directa los flujos en la preparación de mezclas gaseosas de calibración mediante procesos de mezclado dinámico. En el presente artículo se presenta una simulación en el software comercial COMSOL Multiphysics, con el fin de estudiar el efecto de la temperatura en los flujos de nitrógeno a través de capilares; además se hace una comparación entre el modelo teórico y los resultados de la simulación. Los resultados generados por la simulación muestran comportamientos similares para cada uno de los capilares y permiten apreciar que aumentos en la temperatura provocan la disminución del caudal, por lo que se concluye que es necesario implementar un control de temperatura en el dispositivo generador de trazas.

Palabras clave: *Microfluídica, capilares, microflujo, temperatura, simulación.*

Abstract: Temperature is a factor that can influence directly the flows in the preparation of calibration gaseous mixtures in a dynamic mixture. This article presents a simulation in the commercial software COMSOL Multiphysics, in order to study the temperature's effect in the nitrogen flows through capillaries. Also, the theoretical model and the simulation's results are compared. Results of the simulation show similar behaviors for each capillary and allow appreciate that temperature causes a flow diminution, therefore it is concluded that it is necessary to implement a temperature control in the trace generator device.

Keywords: *microfluidics, capillary, microflow, temperature, simulation.*



INTRODUCCIÓN

La microfluídica es un campo multidisciplinar que comprende diversas áreas como la ingeniería, física, química, microtecnología y biotecnología, que se ha desarrollado desde el principio de los años 80. Estudia el comportamiento de los fluidos en la microescala y mesoescala, permitiendo comprender el diseño de sistemas con cantidades pequeñas de fluidos. Mejoras en la fabricación de equipos para microflujos tales como microbombas, micro válvulas y microintercambiadores de calor, entre otros, han permitido un desarrollo acelerado de la microfluídica en la última década [1]. La Corporación Centro de Desarrollo Tecnológico del Gas (CDT de Gas) ha incursionado en el desarrollo de dispositivos microfluídicos con el diseño e implementación de un Dispositivo Generador de Trazas (DGT), el cual mediante un sistema de microcapilares permite diluir materiales de referencia generando mezclas gaseosas con pequeñas trazas del material. Estas mezclas son usadas para calibrar dispositivos analizadores de gas, sin la necesidad de utilizar grandes cantidades de materiales de referencia, los cuales poseen un valor económico bastante alto.

Durante el desarrollo del dispositivo se implementaron modelos matemáticos para obtener los parámetros básicos de funcionamiento. Sin embargo, es necesario estudiar algunos factores externos que pueden modificar el comportamiento de los microflujos dentro de los capilares. Uno de los principales factores a estudiar es la temperatura, ya que ésta variable es de vital importancia cuando se trabaja con gases, puesto que puede generar cambios en la densidad del gas, y por ende en el flujo del mismo provocando así una modificación en los parámetros establecidos para el generador.

METODOLOGÍA

Para realizar el estudio de la influencia de los cambios de temperatura en los microflujos que atraviesan el sistema de capilares del DGT, se usó la mecánica computacional de fluidos aplicada en el software comercial COMSOL MULTIPHYSICS, el cual permite simular problemas de mecánica de fluidos y analizar los fenómenos físicos que ocurren en los mismos.

La metodología de simulación de COMSOL MULTIPHYSICS se divide en tres etapas las cuales son premodelamiento, modelamiento y resultados [2]. A continuación se muestra en resumen el desarrollo de estas etapas y sus subprocesos:

1. *Premodelamiento*

La etapa de premodelamiento es la etapa inicial de la simulación en donde se define el sistema que se va a trabajar, estableciendo sus parámetros y su estructura en el espacio.

1.1 *Selección de parámetros:*

Se definen los parámetros que representan las condiciones del sistema. Para este caso, son el radio del capilar, las temperaturas (10, 20, 30 y 40 °C) y las presiones en la entrada y en la salida del sistema de capilares, así como también la rugosidad del tubing y la rugosidad de los capilares según el fabricante (IDEX Health & Science).

1.2 *Elaboración de la geometría:*

Una vez definidos los parámetros a utilizar, se construyó la geometría de trabajo, que es una representación virtual del sistema de capilares del dispositivo dilutor, el cual se puede apreciar en la **Figura 1**.

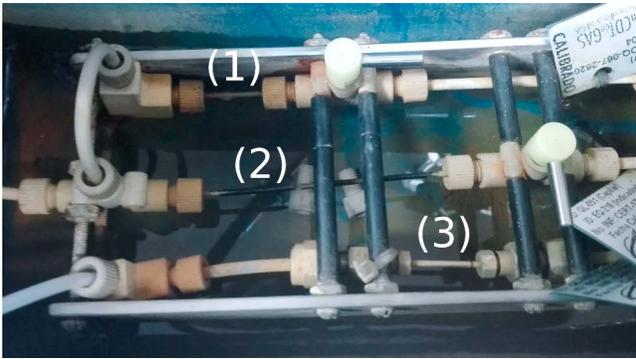


Figura 1. Sistema de capilares del dispositivo dilutor de gases. (1) Capilar de $50\ \mu\text{m}$, (2) Capilar de $75\ \mu\text{m}$, (3) Capilar de N_2 de 250 mm.

Como se puede apreciar, el sistema de capilares del dilutor consta de tres líneas de flujo. Sin embargo, para ésta simulación se construyó una sola línea de tubería debido a que al parametrizar el radio del capilar el *software* permite simular cualquiera de las tres líneas (25 , 50 o $75\ \mu\text{m}$) con una sola geometría. Ésta se construyó con la aplicación de construcción de sólidos con la que cuenta COMSOL (*Model Wizard*), que permite construir geometrías en una, dos o tres dimensiones. Se seleccionó una geometría 1D *axisymmetric*, puesto que simular la geometría completa del sistema presenta gran dificultad especialmente por la capacidad de cómputo necesaria para que el programa realice los cálculos, y además la geometría 3D del sistema consta de formas cilíndricas simétricas.

Para generar la geometría 1D del sistema se dibujó una línea que representa el microflujo de nitrógeno dentro del *tubing* y se seccionó en tres partes la primera representa la tubería de entrada de diámetro constante ($2,159\ \text{mm}$), la segunda representa el capilar y la tercera la tubería de salida del sistema que tiene las mismas características de la tubería de entrada.

2. Metodología:

En esta etapa se asignan los valores de las propiedades físicas y químicas, las condiciones de frontera y el mallado, permitiendo especificar más el sistema de trabajo.

2.1 Materiales:

Se definió el fluido de trabajo; en éste caso de estudio el fluido es nitrógeno, por lo que se seleccionó dicho elemento de la biblioteca de materiales con la que cuenta el *software*, que contiene las propiedades del gas.

En cuanto a los materiales del *tubing* de alimentación y los capilares, son Peek (polieteretercetona) y PeekSil (combinación entre polieteretercetona y una capa interna de gel de sílice). La **Figura 2** muestra el capilar y las fases de los materiales que lo componen.



Figura 2. Capilar de PeekSil [3]. (1) Peek, (2) PeekSil.

2.2 Definición física:

En esta parte del modelamiento se define físicamente el sistema, especificando sus fronteras y componentes estructurales. En este caso los componentes estructurales son el fluido y el *tubing*, y las fronteras del sistema son la entrada y salida del *tubing*, es decir, los extremos de la línea que representa la geometría. Teniendo definidas estructura y fronteras, se procede a ingresar las propiedades de las mismas. En este caso, el fluido es nitrógeno en estado gaseoso, el material de la tubería de alimentación es Peek, el capilar se define como sílice (capa del capilar que está en contacto directo con el fluido) con una rugosidad de $0,001\ \mu\text{m}$, las fronteras son los extremos de la línea, la entrada con una presión parametrizada y la salida con una presión constante de $18\ \text{psia}$.

2.3 Mallado:

El mallado refiere al conjunto de elementos finitos que se usan para representar el cuerpo que se desea simular, que en este caso son los capilares y el *tubing* de alimentación. Este tipo de mallado no presenta ninguna dificultad puesto que la geometría del sistema es bastante sencilla además de ser 1D *axisymmetric* por lo que se genera automáticamente, y sólo se especifica que sea de alta precisión, siendo esta una de las facilidades del software.

2.4 Resultados de la simulación:

Esta es la parte final de la simulación en donde se muestra la solución del modelamiento ya sea en forma gráfica o tabulada, para este caso se usó la forma tabulada indicando que los parámetros a mostrar fueran temperatura del sistema, presiones (entrada y salida) y flujo másico a la salida de la línea para así poder exportar los datos a una hoja de cálculo y realizar el respectivo análisis.

Se realizaron dos simulaciones, en la primera el sistema analizado fue solo el capilar con el objetivo de estudiar si el simulador arrojaba resultados que correspondieran a los calculados teóricamente con la norma ISO 6145-5. La segunda simulación

tomó como sistema de estudio todo el recorrido del gas a través del sistema de capilares, el cual consiste en un trayecto inicial de *tubing* de 150 mm de longitud, una válvula que regula el flujo y enlaza el *tubing* al capilar ya sea de 25, 50 o 75 μm de diámetro, seguido de un punto que ensambla al capilar con el *tubing* de salida el cual mide 50 mm de longitud. El *tubing* de entrada y salida tiene un mismo diámetro (2,159 mm).

RESULTADOS

Para verificar la confiabilidad de la simulación en COMSOL primero se realizó una comparación entre los datos obtenidos en la primera simulación (solo el capilar) y los calculados mediante la ecuación de la norma ISO 6145-5 (Ecuación 1); dicha comparación se muestra en la **Tabla 1**. Los datos obtenidos en la segunda simulación muestran el caudal en relación a la temperatura para una línea completa de flujo, es decir las líneas de *tubing* y el capilar con diámetro de 25, 50 y 75 μm y 50 mm de longitud.

$$Q_{mt} = \frac{\pi * D^4 * (P_{in} - P_{out}) * \bar{\rho}}{128 * L * \mu} \quad (1)$$

Temperatura [°C]	Presión entrada P_{in} [psia]	Presión salida P_{out} [psia]	Q_{mt} ISO 6145-5	Q_{mt} COMSOL	ERROR [%]
20	88	18	0,3159211175	0,3159205110	-0,0002
20	78	18	0,2707895293	0,2707886004	-0,0003
20	68	18	0,2256579411	0,2256566898	-0,0006
20	58	18	0,1805263529	0,1805247792	-0,0009
20	48	18	0,1353947647	0,1353928686	-0,0014
20	38	18	0,0902631764	0,0902609580	-0,0025
20	28	18	0,0451315882	0,0451290474	-0,0056

Tabla 1. Comparación de datos COMSOL vs ISO 6145-5. Fuente: Autores.

Para cada capilar se realizó una gráfica que muestra la variación del flujo másico consecuente al cambio en la temperatura, esto se puede observar en las **Figuras 3, 4 y 5**.

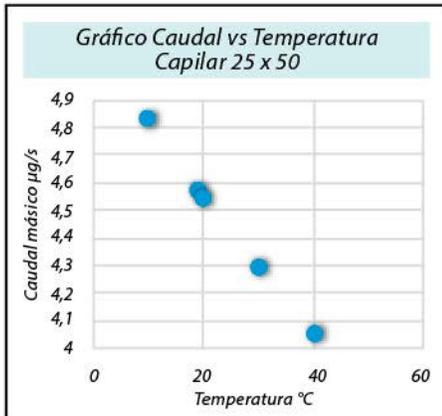


Figura 3. Caudal másico vs. Temperatura, Capilar 25 µm x 50 mm. Fuente: Autores.

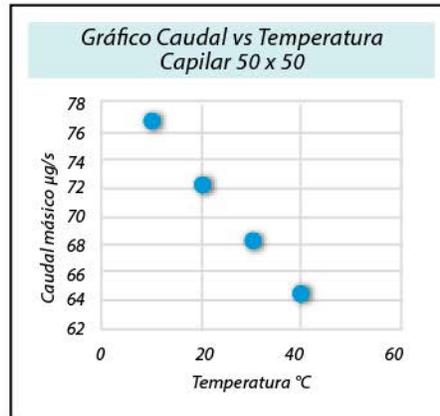


Figura 4. Caudal másico vs. Temperatura, Capilar 50 µm x 50 mm. Fuente: Autores.

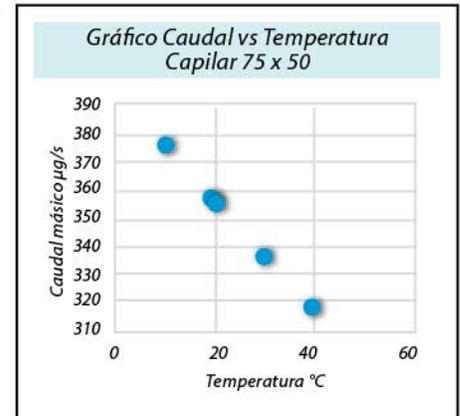


Figura 5. Caudal másico vs. Temperatura, Capilar 75 µm x 50 mm. Fuente: Autores.

DISCUSIÓN

A partir de los datos obtenidos, se pudo apreciar que efectivamente los cambios de temperatura tienen efecto sobre los microflujos másicos de gas a través de los capilares. Debido al incremento en la temperatura del sistema los microflujos mostraron una tendencia a disminuir, dicho cambio se debe a variaciones en la temperatura que causan cambios en la viscosidad del gas convirtiéndola en una fuente de incertidumbre [4].

El cambio en la viscosidad producto del cambio de temperatura se debe a que en los gases las moléculas poseen un amplio campo de movilidad y comúnmente se encuentran alejadas por lo que la cohesión entre ellas es baja, pero ante un incremento de temperatura la interacción entre moléculas aumenta, así como también los choques de éstas contra las paredes del recipiente que contiene al gas incrementando así su resistencia a fluir.

Para este caso, las variaciones del flujo con respecto a la temperatura presentan un comportamiento aproximadamente lineal, decreciendo progresivamente y a una razón de cambio casi constante. La razón de decrecimiento del caudal aumentó a medida que incrementa el diámetro del capilar es decir que se observó una mayor disminución del caudal en el capilar más grande (75 µm) y una menor en el más pequeño (25 µm), debido a que el aumento del diámetro de un capilar, disminuye la cantidad de material, facilitando así la transferencia de energía en forma de calor, lo cual incrementa la temperatura del fluido (nitrógeno) [5].

CONCLUSIONES

La temperatura es una magnitud que afecta el flujo a través de los capilares en la preparación de mezclas de gases de calibración por dilución dinámica, y por lo tanto es necesario controlarla.

El método de control de caudal a través de un sistema de microcapilares permite obtener diluciones con proporciones volumétricas de hasta 1:10000, con bajos niveles de incertidumbre [6]. Además es una opción económicamente viable y bastante flexible a la hora de su ejecución, puesto que si se desea hacer regulaciones de flujo diferentes, sólo se necesita realizar un cambio de capilar y controlar adecuadamente las presiones en el sistema.

La simulación por medio de COMSOL permite solucionar el sistema de ecuaciones, que describe el sistema de manera rápida haciendo un análisis en 2D y con bajos porcentajes de error, debido a que COMSOL realiza los cálculos usando las ecuaciones de Navier-Stokes las cuales se aplican a cada en el campo de flujo y por lo tanto permiten resolver los detalles del flujo en todas partes en el dominio del flujo [7]. Además de obtener aproximaciones a los valores teóricos, COMSOL permitió analizar los efectos del cambio de temperatura que hasta ahora no se habían podido estudiar por la falta de un control de temperatura en el equipo.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Javadi, A. *Drops and jets of complex fluids*. UvA-DARE (Digital Academic Repository), Universidad de Ámsterdam, Ámsterdam; 2013.
- [2] Montes R. *Aplicación del programa COMSOL multiphysics en la Ingeniería Mecánica*. Tesis de Pregrado, Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira; 2015.
- [3] IDEX Health & Science. 6505 - PEEKsil™ Tubing 1/16 [Figura] recuperado de <https://www.idex-hs.com/peeksil-tubing-1-16-od-x-50-m-id-x-5cm-5-pack.html>
- [4] International Organization for Standardization. 2009. *Gas analysis-Preparation of calibration gas mixtures using dynamic volumetric methods-Part 5: Capillary calibration devices*, ISO 6145-5.
- [5] Zhizhao C, Teck NW, Nam-Trung N. *Heat transfer in plug flow in cylindrical microcapillaries with constant surface heat flux*. *International Journal of Thermal Sciences* 2013; 64: 204–212.
- [6] International Organization for Standardization. 2003. *Gas analysis-Preparation of calibration gas mixtures using dynamic volumetric methods-Part 1: Methods of calibration*, ISO 6145-1.
- [7] Çengel Y, Cimbala J. *Mecánica de fluidos fundamentos y aplicaciones (1ra ed.)*, McGraw-Hill; 2007.