

## AUTOMATE

Advanced Production of Microfluidic Devices through Simulation Methods

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Produktion der Zukunft, Produktion der Zukunft, 36. AS PdZ - Nationale Projekte 2020	<b>Status</b>	abgeschlossen
<b>Projektstart</b>	01.10.2021	<b>Projektende</b>	31.03.2025
<b>Zeitraum</b>	2021 - 2025	<b>Projektlaufzeit</b>	42 Monate
<b>Keywords</b>	microfluidics, simulation, design automation, optimization		

### Projektbeschreibung

Das Gebiet der Mikrofluidik befasst sich mit der Manipulation von kleinsten Mengen von Flüssigkeiten (im Bereich einiger Mikro- bis Picoliter) und findet breite Anwendung in der Chemie, der Pharmazie, Biologie, dem Gesundheitswesen oder der Lebensmittelindustrie. Insbesondere bekannt als Lab-on-a-Chip (LoC) ermöglichen entsprechende Systeme typische Laboraufgaben wie Mischen, Erhitzen, Inkubieren, etc. auf einem einzelnen Chip. Allerdings ist der Entwurf und die Produktion dieser Systeme derzeit noch weit von dem entfernt, was man z.B. im Bereich der "traditionellen" Chipindustrie erwartet. Dies führt zu einem aufwändigen Entwurfs- und Produktionsprozess, der oft nur zu mittelmäßigen Lösungen führt – sowohl was die Performanz als auch die Entwicklungskosten insgesamt betrifft.

Ein wesentlicher Grund hierfür ist, dass beim Entwurf solcher Systeme eine große Anzahl an physikalischen Spezifikationen betrachtet werden muss, die alle voneinander abhängen und sich gegenseitig beeinflussen (z.B. die Dimensionierung von Kanälen, die verwendeten Phasen, die Flussraten, die verwendeten Flüssigkeiten, etc.). Dies führt zu sehr komplexen Entwurfsaufgaben, bei denen zudem bisher wenige Methoden für die Optimierung und Validierung zur Verfügung stehen. Tatsächlich werden in der Praxis Systeme bisher überwiegend nach dem Prinzip "Trial and Error" entwickelt, d.h. ein Entwurf wird produziert und anschließend physikalisch getestet. Führt der Prototyp nicht die gewünschte Funktionalität aus, wird der gesamte Entwurfs- und Produktionsprozess wiederholt. Diese kosten- und zeitintensiven Iterationen sind besonders ausschlaggebend in Bereichen, in denen ein schneller Markteinstieg entscheidend ist, wie z.B. auch die Covid-19 Pandemie in den letzten Monaten gezeigt hat.

Im AUTOMATE Projekt werden wir den Produktionsprozess von mikrofluidischen Systemen durch ausgefeilte Simulationsmethoden revolutionieren, welche bereits vor der Produktion die Validierung und Optimierung entsprechender Entwürfe erlauben. Dazu werden wir entsprechende physikalische Modelle definieren und, darauf aufbauend, Simulationswerkzeuge entwickeln. Um die Komplexität zu beherrschen werden verschiedene Abstraktionsebenen und Methoden des High Performance Computing nutzbar gemacht. Schließlich werden die Modelle auch für die Optimierung verwendet. Weiters werden intuitive Benutzeroberflächen implementiert, die es auch weniger fachkundigen Personen erlaubt einen einfachen Zugang zu den entwickelten Methoden und Entwurfswerkzeugen zu erhalten und damit den Einsatz mikrofluidischer Systeme vorantreiben. Die Korrektheit der entwickelten Methoden wird durch Fallstudien validiert in denen erzeugte Resultate als "digitaler Zwilling" mit tatsächlich produzierten Chips verglichen werden.

Das Konsortium ist dabei ideal für die hierfür nötigen Aufgaben aufgestellt und besteht aus zwei industriellen Partnern mit Fokus auf der Produktion von mikrofluidischen Systemen und der industriellen Simulation sowie akademischen Partnern mit international sichtbaren Forschungsleistungen im Bereich des Entwurfs mikrofluidischer Systeme bzw. der Entwicklung von Optimierungsmethoden. Die beigelegten LoIs bestätigen ebenfalls die Wichtigkeit dieses Themas und das Interesse der Industrie an dem Projekt.

Insgesamt wird das AUTOMATE Projekt erstmalig ermöglichen, einen Entwurfs- und Produktionsprozess für mikrofluidische Systeme einzuführen, der nicht auf einem "Trial and Error"-Verfahren aufbaut, sondern frühzeitige Validierung und Optimierung ermöglicht – noch bevor ein erster Prototyp produziert wird. Berücksichtigt man, dass Entwurfskosten exponentiell steigen je später Fehler entdeckt werden, sind damit signifikante Kostenreduktionen möglich. Tatsächlich ist es das Ziel, die Zeit und Kosten des Entwurfs von mikrofluidischen Systemen um mindestens 90% zu reduzieren.

## **Abstract**

Microfluidics deals with the manipulation of small amounts of fluids (in the order of few micro- to pico-liters) and finds a broad application in chemistry, pharmacology, biology, healthcare and food industries. Most prominently known as Lab-on-a-Chip (LoC), corresponding systems minimize, integrate, automate, and parallelize typical lab operations such as mixing, heating, incubation, etc. on a single chip. However, the design and production process of corresponding devices is still far away from the standards, which e.g. is taken for granted in the "traditional" chip/semiconductor industry – leading to a costly design and production process and frequently results in solutions which are far from being optimal.

This is mainly caused by the fact that, when designing a microfluidic system implementing the required operations, a huge number of physical specifications need to be considered (e.g. the dimensions of the channels, the used phases, flow rates, the applied liquids, etc.), which all depend and affect each other. This results in a complex task, where, thus far, the designer often has very few methods to optimize a derived design or even to simply validate whether it works as intended. In fact, "validation" is currently mainly conducted by means of a "trial-and-error" scheme, i.e. a prototype is produced and, then, physical experiments are conducted to test the functionality. In case the prototype does not show the intended functionality, the entire design and production process has to be re-iterated again. This results in a costly and time-consuming iteration process, which is especially crucial in domains where a fast time-to-market is required, as, e.g. the rapidly growing Covid-19 pandemic showed during the last months.

Through AUTOMATE, we will revolutionize the production process of microfluidic systems by developing sophisticated methods for simulation which allow to validate and optimize a determined design prior to production. To this end, we will model the physics of microfluidic systems and, based on them, develop corresponding simulation engines. To tackle the complexity of the simulations, different levels of abstractions as well as methods for high performance computing are utilized. Moreover, the availability of models and simulation is also utilized for optimization, i.e. cannot only be used for validating a system but also for optimizing the system's performance. Finally, intuitive user interfaces are developed in order to also allow non-experts in the highly interdisciplinary microfluidic domain to easily access these tools and, by this, further increase the usage of microfluidic system. The validity of the developed models and methods is confirmed by dedicated case studies in which the obtained results are compared to actually produced microfluidic systems and act as "digital twin".

The consortium is perfectly suited for the proposed tasks including two industrial partners with a focus on the production of microfluidic systems and the distribution of (industrial-strengthened) simulation software, respectively, as well as two academic partners with an impressive research record on the design of microfluidic systems as well as on the development of optimization methods. Additionally, the attached LoIs confirm the importance of this topic and the interest of the industry in this project.

Overall, the AUTOMATE project will, for the first time, introduce a design and production process for microfluidic systems which does not rely on a “trial-and-error” scheme anymore but guarantees early validation and optimization before even a first prototype needs to be produced. Considering that the costs of fixing an error in a design exponentially grows the later an error is detected, this will allow significant cost reductions. Indeed, the goal is to reduce the design and production time as well as costs of microfluidic systems by at least 90%.

### **Projektkoordinator**

- Universität Linz

### **Projektpartner**

- Software Competence Center Hagenberg GmbH
- Ernst Wittner Gesellschaft m.b.H.
- ESS Engineering Software Steyr GmbH