

直微流道和弯微流道中的惯性聚集建模

马萨诸塞综合医院和 Veryst 的研究人员正在利用多物理场耦合分析来研究惯性聚集的微流控过程。

作者: JOSEPH MARTEL 和 MEHMET TONER (马萨诸塞综合医院 BIOMEMS 资源中心), 以及 NAGI ELABBASI、DAVID QUINN 和 JORGEN BERGSTROM (VERYST ENGINEERING)

在许多医疗程序和测试中, 需要通过分离感兴趣的细胞来进一步分析。微流控彻底改变了进行这些测试的方式。在最有前途的分离和浓缩感兴趣细胞的微流控技术中, 有一种称为惯性聚集的技术。惯性聚集现象最初发现于 20 世纪 60 年代, 在微流控特别是在在生物医学器件设计中找到了新的功用, 最近在能够通过血样检测癌症的器件中发挥着关键的作用。这种现象可以描述为流体中的悬浮颗粒自发地跨过流线迁移到位于流道界面内的平衡位置。并在平衡位置处以有序形式继续流动。通过改变流道的几何形状, 可以控制不同大小粒子的平衡位置。

当粒子雷诺数 Re_p 约等于 1 时, 由于两种力的平衡, 会发生这种现象: 朝向流道壁剪切梯度升力, 以及朝向每个流道壁反方向的壁相互作用力。这两种力的平衡将决定平衡位置 (见图 1)。在具有矩形截面的直流道中, 这会产生处于流道长面中心的一对平衡位置, 如图 2A 所示。增加流道的曲率会改变对粒子的作用力, 从而改变平衡位置。由于流道中心流体的移动速度更快, 其动量会使流道上发生二次横向流动, 引发对粒子的曳力, 从而调整它们的平衡位置, 如图 2B 所示。这种二次流动的强度取决于流道曲率, 并可通过无维

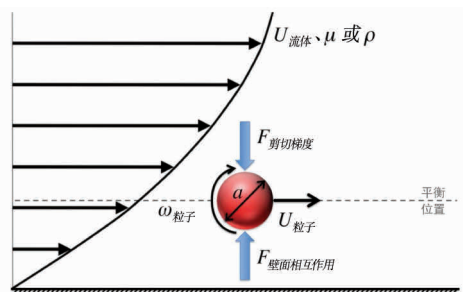


图 1: 作用于微流道中粒子的基本力。

迪安数 De 描述。因此, 粒子在弯流道流动中的平衡位置是流道尺寸、粒子大小、粒子和流道雷诺数和迪安数的函数。

CFD 模型

我们在 COMSOL Multiphysics 中构建了一些 CFD 模型, 用于预测粒子的平衡位置, 以及它们随流动和几何参数所发生的变化。为了简化模型和缩短求解时间, 将分析分为两个步骤。

在第一个步骤中, 我们求解不包含粒子的 CFD 问题。这可以得到直流道的标准 Hagen-Poiseuille 流动解, 以及弯流道的迪安流动解。然后, 我们将该解映射到第二个 CFD 模型的入口边界, 粒子在 CFD 域中以红色小圆表示, 并且利用合适的移动壁条件表示粒子的平动和转动。两个 CFD 模型均进行参数化建模, 以方便研究流动和几何参数的影响。

根据 CFD 的结果计算粒子受到的反作用力和力矩, 并且用于更新粒子的平动和转动的速度分量。为实现这一点, 我们设置了一些全局常微分方程 (ODE), 以线速度和角速度的方式指定粒子的平衡。COMSOL Multiphysics 将这些全局方程与流体动力学方程同时进行求解, 从而可以显著加快求解过程。此外, 通过

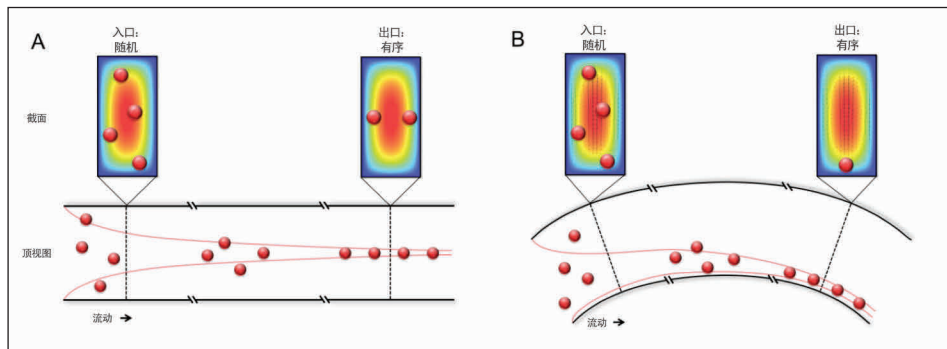


图 2: 惯性聚集在直流道 (A) 和弯流道 (B) 中的影响。粒子随机引入, 但会由于惯性聚集而变得有序, 如截面图中所示。

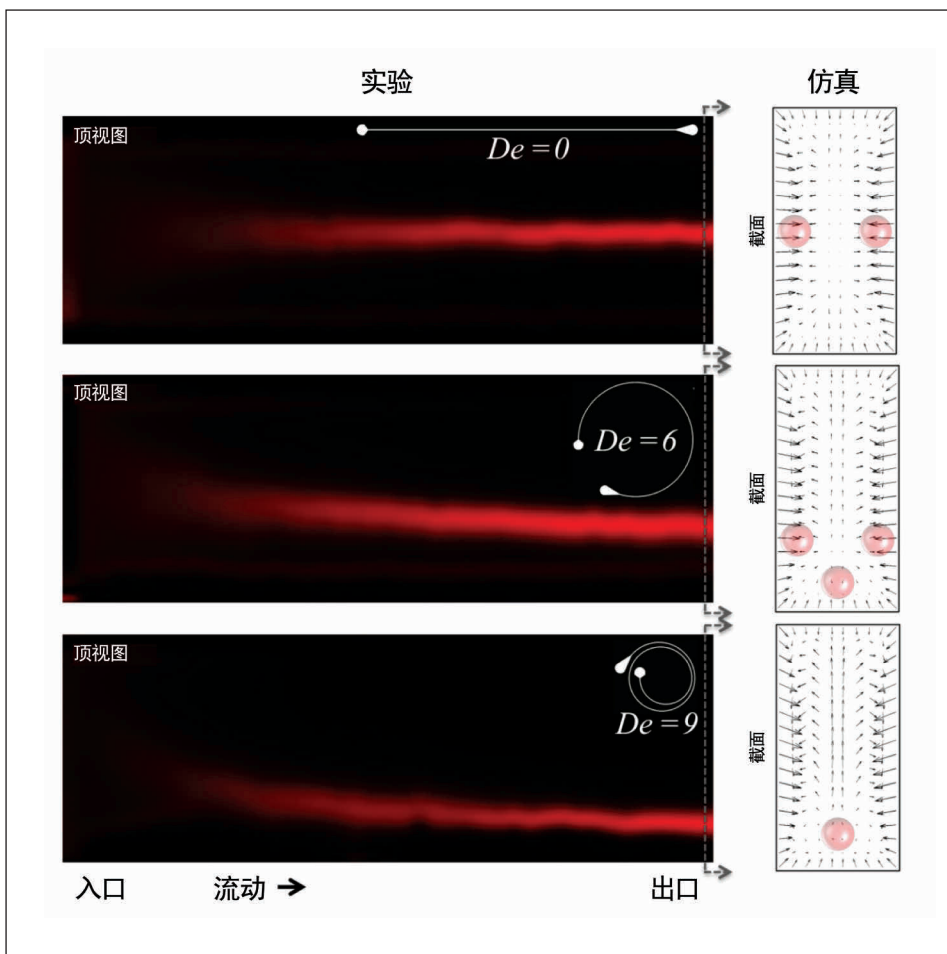


图 3：微流体纵向截面的实验荧光显微镜图像（左）显示了粒子沿流道的分布。截面图（右）显示了模拟得到的作用在粒子上的力。仿真得到的平衡位置通过粒子标记，它们与实验结果严格匹配。图中显示了对于相同的雷诺数，对应于三个具有不同曲率的微流控器件的数据。器件的曲率在荧光图像右上角的嵌图中指示。

COMSOL Multiphysics 的独特功能来自动计算雅可比矩阵中流体变量和全局变量之间的耦合项，也可以缩短求解时间。

在确定与周围流体处于平衡的粒子的转动和平动速度之后，计算横向惯性升力。然后，我们可以添加迪安流动的影响，假设斯托克斯曳力作用在粒子之上，并且迪安流速可以通过第一个模型获得。

我们需要认识到的是，为了预测惯性聚集，本文阐述的方法是必需的，因为标准的粒子追踪方法并不适用。例如，在直流道中，标准粒子追踪方法预测在流道截面中特定位置插入的

中性悬浮粒子会保持在该位置。并不存在描述控制惯性聚集的力和力矩与无粒子时获得的流体流动条件相关联的通用解析方程。但是，我们基于上述 CFD 解，建立了作用于粒子的力和力矩的表达式。然后，我们可以使用 COMSOL Multiphysics 粒子追踪功能，通过应用之前所建立的表达式作为用户定义的力和力矩方程来预测粒子运动，包括转动和惯性聚集。

验证和结果

首先根据 $50\ \mu\text{m}$ 方形截面流道中的直流道流动的确解，对模型进行验证。在此例中，已

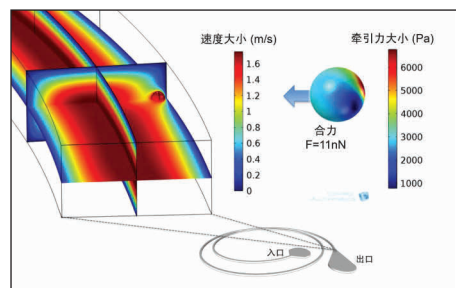


图 4：处于特定非平衡位置的粒子的速度分布（左）和表面牵引力（右）。

知粒子平衡位置处于方形每个面的中心，距离流道壁 $10\ \mu\text{m}$ ，粒子直径为 $10\ \mu\text{m}$ ，流道雷诺数为 20。

然后，我们将 CFD 模型预测结果与高 $50\ \mu\text{m}$ 、宽 $100\ \mu\text{m}$ 、长 $4\ \text{cm}$ 的直流道和弯流道的实验测量结果进行比较。图 3 显示了流道雷诺数为 100 和三个不同迪安数：0、6、9 时的实验和仿真结果。（迪安数为 0 时，流道为直流道）。对于每种情形，我们显示了使用荧光条纹显微镜收集的、沿流道长度方向的粒子分布，以及为该截面计算的力场（净力 = 0），并突出显示了平衡位置。这些仿真结果与对应三种情形下的实验测量结果吻合较好。说明了平衡位置与流道曲率的相关性。图 4 显示了流道中的流速以及一个流道 / 粒子组合中的粒子表面牵引力，该力主要受到壁 - 粒子相互作用的影响。

可以在 COMSOL Multiphysics 中迅速迭代完成设计更改，并建立此类器件操作的完整理论，这种能力不但可以节省实验时间，而且可以指导我们对救生诊断器件的设计和优化。