

А. А. Курбангалеев, Ф. Х. Тазюков, А. В. Герасимов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ В МИКРОФЛЮИДНОМ КАНАЛЕ ТИПА ЁЛОЧКА

Ключевые слова: моделирование потоков в микрофлюидных устройствах, микрофлюидные каналы и процессоры, ламинарные потоки, ньютоновские жидкости.

Статья содержит результаты математического моделирования в двумерной постановке течения жидкости по каналу. Режим течения потока ламинарный. Модель тестировалась при разных режимах. Одни режимы, рассматривали поток, который проходит через микрофлюидное устройство в канале с геометрией по типу «ёлочка» в прямом направлении, другие режимы при обратном направлении потока. Микрофлюидное устройство с геометрией устройства в канале по типу «ёлочка», представляет из себя микрофлюидный канал шириной 0.2 мм и общей длиной 13мм, в котором через 5 мм от начала длины канала расположено устройство с геометрией по типу «ёлочка», представляющее из себя три диффузор-конфузора с углом раскрытия 45 градусов и катетами по 1мм. В качестве тестируемой ньютоновской жидкости взята жидкость с физическими характеристиками близкими к воде, при нормальных параметрах давления и температуры. Жидкость подается в канал с разными режимными скоростями, поэтому результат моделирования показан при разных входных скоростях и числах Рейнольдса. По результатам моделирования показана разница в падении давления на входе и выходе из канала. Результат моделирования позволяет сделать вывод о том, что с одной стороны течения, если диффузоры раскрыты поток имеет один расход, при обратном течении расход жидкости существенно падает. Полученный эффект можно назвать эффектом «запирания потока», а устройство в канале по типу «ёлочка» - «запорным механизмом или устройством». Моделирование задачи проводилось с помощью программного комплекса ANSYS-Fluent.

A. A. Kurbangaleev, F. H. Tazyukov, A. V. Gerasimov

MODELING OF FLOW IN A HERRINGBONE-TYPE MICROFLUIDIC CHANNEL

Keywords: flow modeling in microfluidic devices, microfluidic channels and processors, laminar flows, Newtonian fluids.

The article contains the results of mathematical modeling in a two-dimensional formulation of fluid flow through a channel. The flow regime is laminar. The model was tested under different regimes. Some regimes considered the flow that passes through a microfluidic device in a channel with herringbone geometry in the forward direction, other regimes with the reverse flow direction. A microfluidic device with herringbone geometry in a channel is a microfluidic channel 0.2 mm wide and 13 mm long in which a device with herringbone geometry is located 5 mm from the beginning of the channel length. It is three diffuser-confusers with an opening angle of 45 degrees and 1 mm legs. A liquid with physical characteristics close to water, under normal pressure and temperature parameters, was taken as the tested Newtonian fluid. The liquid is supplied to the channel with different flow rates, therefore the simulation result is shown for different input rates and Reynolds numbers. The simulation results show the difference in pressure drop at the input and output of the channel. The simulation result allows us to conclude that on one side of the flow, if the diffusers are open, the flow has one flow rate, while with reverse flow, the liquid flow rate drops significantly. The obtained effect can be called the "flow locking" effect, and the "herringbone" type device in the channel is called a "locking mechanism or device". The problem was simulated using the ANSYS-Fluent software package.

Введение

В настоящее время всё больший практический и научный интерес представляют устройства-процессоры, содержащие микроканалы. Процессы течения жидкостей и газов здесь несколько отличаются от течений в макромасштабе. На главенствующую роль вступают физические процессы, которыми в макромасштабе, обычно пренебрегают. Такие технологии востребованы в области медицины, химической, биохимической и других отраслях промышленности. Микроканалы, по которым происходит движение жидкостей и газов имеют очень малые размеры, порядка от микрометра до сотен микрометров [1,2].

Сеть микроканалов, представляет из себя микрофлюидный чип на подложке, вытравленной или отлитый из стекла, металлов, кремния или из различных полимеров. Микрочипы служат для смешивания, перекачки, сортировки, или для контроля исследуемой среды. Преимущества микрофлюидных технологий по отношению к крупнотоннажным производствам обусловлены много меньшими размерами каналов, и

акцент здесь приходится на другие физические свойства [3-5].

Например, в микрофлюидных системах возрастает эффект влияния свойств поверхности канала, такие как его шероховатость и однородность, в следствии того, что в подобных системах в большинстве случаев реализуются ламинарные потоки. В случаях необходимости скорейшего перемешивания, поверхность, напротив, должна быть шероховатая. Также надо отметить, что в микрофлюидных технологиях огромную роль начинают играть диффузионные процессы и силы поверхностного натяжения, а силы тяжести наоборот сильно ослабевают в силу малого объёма. В связи с этим микрофлюидные процессы имеют ряд существенных преимуществ:

- малый объём образца, и низкий расход реагентов позволяет создавать постоянный градиент концентраций для реагирующих компонентов, тем самым повышается возможность постановки более высокоточных экспериментов;

- высокая точность управления процессом смешения и нагрева или охлаждения жидкостей и газов позволяет лучше контролировать состояние клеточной микросреды при имитировании физиологии;

- быстрая передача тепла благодаря высокому значению отношения площади поверхности к объему позволяет проводить быстрые химические реакции;

- высокая точность и повторяемость результатов способствует быстрой интеграции различных компонентов, в том числе оптических и электронных в одном устройстве;

- реакции проходят в закрытых системах, где исключена контаминация, а объемы реагентов минимальны, что позволяет более безопасно работать с реагентами и биологическими образцами;

- проводить исследования и анализы, которые ранее не осуществлялись. Например, создание капель нужного размера очень малых объемов, в которых можно обеспечить условия для изоляции отдельных клеток или молекул.

Таким образом, микрофлюидные технологии обеспечивают массу возможностей для снижения материальных ресурсов и затрат энергии в таких сферах как: медицина, фармацевтика, биология, химическая и сельское хозяйство, а также в других областях промышленности, являясь выделенной новой современной отдельной востребованной ветвью науки [6-9].

В данной работе представлен микрофлюидный канал по типу ёлочка. Показаны результаты моделирования прохождения ламинарного потока через канал в прямом и обратном направлении. Показаны графики распределения давления.

Область моделируемого течения представлена на рис. 1.

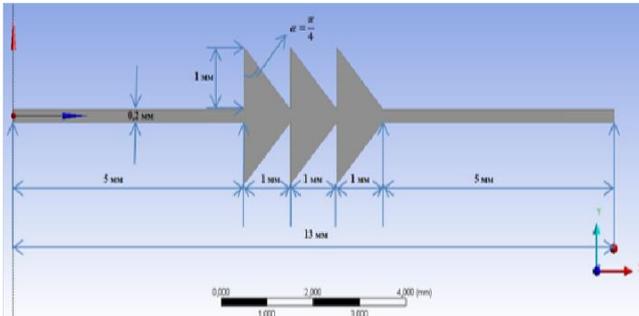


Рис. 1 – Схема канала по типу ёлочка
Fig. 1 – Channel diagram by herringbone type

Тестируемая жидкость с физическими и режимными характеристиками, представлена в таблице 1.

Математическая постановка задачи

В математической модели предполагается: - режим течения в канале - ламинарный, модель двумерная и без учета действия массовых сил. На основе этих предположений строится система уравнений Навье-Стокса в декартовой системе координат (x, y) (1) [10], с вектором скорости для двух компонент $V = (u, v)$.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0; \\ \rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right] = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right]; \\ \rho \left[\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right] = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right]; \end{cases} \quad (1)$$

где ρ – плотность, μ – динамическая вязкость, p – давление.

Таблица 1 - Физические и режимные характеристики жидкости

Table 1 - Physical and operating characteristics of the liquid

Физические и режимные характеристики жидкости	(H ₂ O)	Число Рейнольдса - Re
Плотность ρ [кг/м ³]	1000	
Динамическая вязкость μ [10 ⁻⁶ Па · с]	1000	
Скорости потока u [м/с]:	0.0005	0,1
	-0.0005	0,1
	0.005	1
	-0.005	1
	0.05	10
	-0.05	10

Краевые условия

В качестве граничных условий: во входном сечении канала задаются: профили скорости и начальные параметры вида: $\varphi(x, y) = (u, v, \mu, \rho)$. В выходных сечениях задаются «мягкие» граничные условия [11] – распределение первых производных искомых зависимых функций вида (2):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \sigma(x), \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \sigma(y), \quad (2)$$

при установившемся течении $\sigma(x) = \sigma(y) = 0$.

Реализация

Для модели построена адаптированная сетка с подслоем вблизи стенок. Основной слой потока имеет более разреженную сетку, а при приближении к стенкам происходит сгущение, с семью подслоями. В областях, примыкающих к угловым точкам, используется метод разложения в ряды [8].

На рис. 2 показана сетка для части канала.



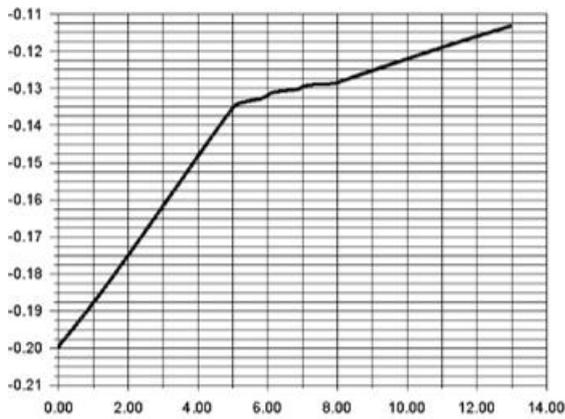
Рис. 2 - Сетка для части канала
Fig. 2 - Grid for a part of the channel

Для проверки на сходимость задача решалась на сетках с разным количеством узлов. С начала число узлов составляло 153 654, затем 356 087, затем 581 235 и 6983661. Разница в результатах по значению абсолютной скорости и давлению между задачами с сетками 581 235 и 6983661 не превысила 2%, и при увеличении числа узлов результат практически не изменялся, что позволило судить о сходимости задачи.

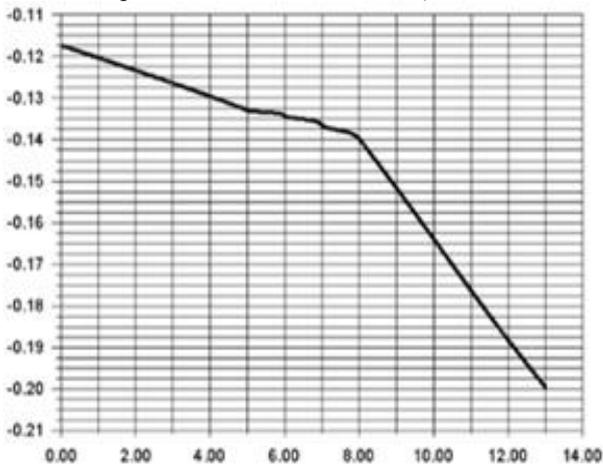
Проверка задачи на устойчивость обеспечивается условием Куранта, который по умолчанию заложен в программный комплекс ANSYS-Fluent.

Результаты моделирования

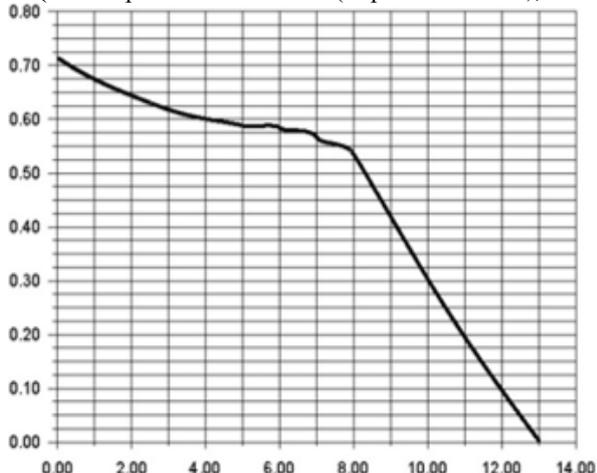
На рис. 3 представлены графики распределения давления вдоль осевой линии канала.



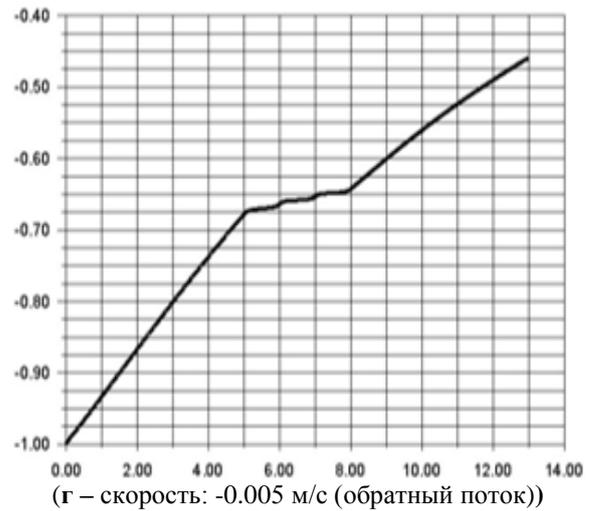
(а - скорость на входе 0.0005 м/с (Re = 0,1))



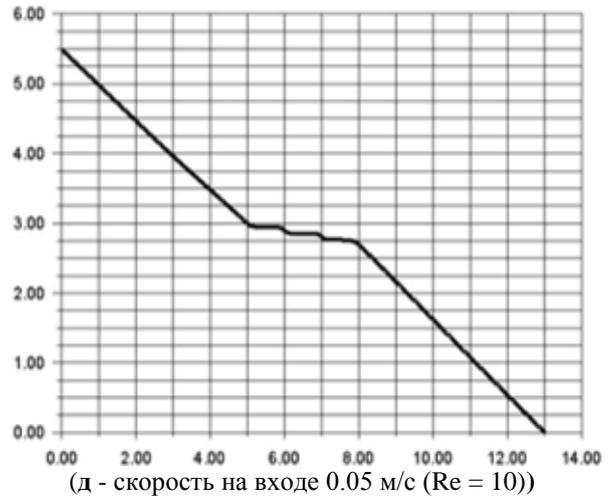
(б - скорость: -0.0005 м/с (обратный поток))



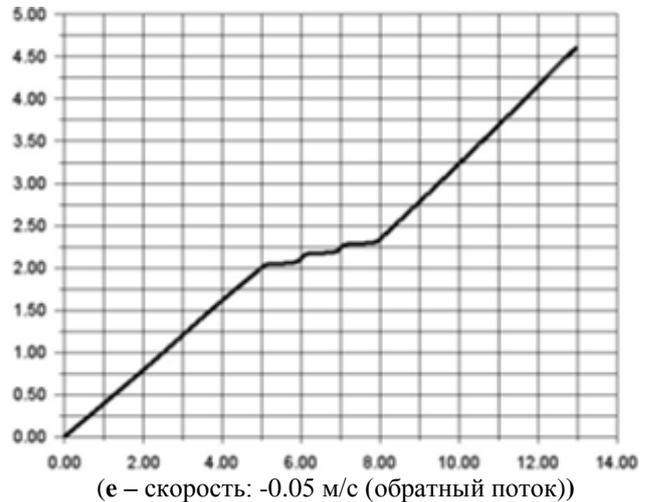
(в - скорость на входе 0.005 м/с (Re = 1))



(г - скорость: -0.005 м/с (обратный поток))



(д - скорость на входе 0.05 м/с (Re = 10))



(е - скорость: -0.05 м/с (обратный поток))

Рис. 3 – Графики распределения давления вдоль осевой линии канала. Движение потока в прямом и обратном направлении

Fig. 3 – Graphs of pressure distribution along the centerline of the channel

Из анализа представленных графиков можно видеть:

1) по графикам (а) и (б) при скорости на входе 0.0005 м/с ($Re = 0,1$) и - 0.0005 м/с (движение потока в обратном направлении) перепад давления между входным и выходным сечением одинаков $\Delta p = 0,007$

Па, что свидетельствует о том, что реализуется условия выполнения гипотезы Стокса;

2) по графикам (в) и (г) при скорости на входе 0.005 м/с ($Re = 1$) и - 0.005 м/с (движение потока в обратном направлении) перепад давления между входным и выходным сечением уже не одинаков $\Delta p = 0,05$ Па и $\Delta p = 0,03$ Па;

3) по графикам (д) и (е) при скорости на входе 0.05 м/с ($Re = 10$) и - 0.05 м/с (движение потока в обратном направлении) перепад давления между входным и выходным сечением ещё более отличается $\Delta p = 0,15$ Па и $\Delta p = 0,3$ Па.

Заключение

По результатам моделирования определено, что микроканал по типу ёлочка может служить «запирающим» устройством по типу жидкостного диода, способным контролировать проток. Как было указано выше, из анализа графиков для распределения давлений вдоль осевой линии канала можно сделать вывод о том, что по гипотезе Стокса данный эффект усиливается с ростом значения числа Рейнольдса, за счёт увеличения скорости потока. Влияние конвективных слагаемых с увеличением значения числа Рейнольдса возрастает и влияние нелинейности в уравнениях Навье-Стокса, только усиливается.

В итоге, данный процесс приводит к увеличению разности перепадов давления в прямом и обратном направлении потока, что способно приводить к изменению расхода вещества (жидкости) в прямом и обратном направлении. Также, в дальнейшем следует предположить, что данный эффект будет усиливаться и при увеличении количества диффузор - конфузоров в канале, но для проверки этой гипотезы следует проводить дополнительные исследования.

Литература

1. R Seemann. et al. *Reports on progress in physics*, **75**, 1, 16601-16606 (2012).
2. M.T. Guo et al. *Lab on a Chip*, **12**, 3, 2146-2155 (2012).
3. A. Günther, K.F. Jensen *Lab on a Chip*, **6**, 12, 1487-1503 (2006).

4. P.M. Günther et al. *Chemical engineering & technology* **28**, 4, 520-527 (2005).
5. C.E. Stanley, R.C.R. Wootton, A.J. de Mello *CHIMIA International Journal for Chemistry*, **66**, 3, 88-98 (2012);
6. I. Shestopalov, J.D. Tice, R.F. Ismagilov *Lab on a Chip*, **4**, 4 316-321 (2004).
7. C.C. Lee et al. *Nucleic Acids Research*. **38**, 8. 2514-2521 (2010).
8. P. Tabeling *Current Opinion in Biotechnology*. **25**, 129-134 (2014).
9. A. Rakszewska, J. Tel, V. Chokkalingam, W.T.S. *NPG Asia Materials*. **6**, 13. (2014).
10. А.Л. Буляница *Научное Приборостроение*, **15**, 2. 51-66 (2005).
- 11 А.А.Курбангалеев, Ф.Х. Тазюков, А.Ф. Батталов, С.Р. Еникеева., С.А. Лившиц *Научно-технический сборник вестни газовой науки*, **48**, 3. 261-268. (2021).
12. Н.А.Филатов Дисс. канд. техн. Наук, Санкт-Петербургский национальный исследовательский академический университет имени Ж.И. Алфёрова Российской академии наук, Санкт-Петербург, 2022. 147 с.

References

1. R. Seemann et al. *Reports on progress in physics*, **75**, 1, 16601-16606 (2012).
2. M.T. Guo et al. *Lab on a Chip*, **12**, 3, 2146-2155 (2012).
3. A. Günther, K.F. Jensen *Lab on a Chip* **6**, 12, 1487-1503 (2006).
4. P.M. Günther et al. *Chemical engineering & technology* **28**, 4, 520-527 (2005).
5. C.E. Stanley, R.C.R. Wootton, A.J. de Mello *CHIMIA International Journal for Chemistry* **66**, 3, 88-98 (2012);
6. I. Shestopalov, J.D. Tice, R.F. Ismagilov *Lab on a Chip* **4**, 4 316-321 (2004).
7. C.C. Lee et al. *Nucleic Acids Research*. 2010. **38**, 8. 2514-2521 (2010).
8. P. Tabeling *Current Opinion in Biotechnology*. **25**, 129-134 (2014).
9. A. Rakszewska, J. Tel, V. Chokkalingam, W.T.S. *NPG Asia Materials*. **6**, 133. (2014).
10. Bulyanitsa A. L. *Scientific Instrumentation*. **15**, 2. 51-66 (2005).
11. A. A. Kurbangaleev *Scientific and technical collection of the journal of gas science*. **48**, 3. 261-268 (2021).
12. N. A. Filatov *Dissertation for the degree of Candidate of Technical Sciences* St. Petersburg National Research Academic University named after Zh.I. Alferov of the Russian Academy of Science St. Petersburg, 2022. 147 p.

© **А. А. Курбангалеев** – кандидат технических наук, доцент кафедры Интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами (ИСУИР), Казанский национальный исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань, Россия, arturkurbangaleev@rambler.ru; **Ф. Х. Тазюков** – доктор технических наук, старший научный сотрудник, профессор кафедры Основ конструирования и прикладной механики, КНИТУ, tazyukov@mail.ru; **А. В. Герасимов** – доктор технических наук, доцент кафедры ИСУИР, КНИТУ, aleks_gerasimov@mail.ru; gerasimov@kstu.ru.

© **А. А. Kurbangaleev** – PhD (Technical Sci.), Associate Professor, the Department of Intelligent Systems and Information Resource Management (ISIRM), Kazan National Research Technological University (KNRTU), Kazan, Russia, arturkurbangaleev@rambler.ru; **F. Kh. Tazyukov** – Doctor of Sciences (Technical Sci.), Senior Researcher, Professor, the Department of Fundamentals of Design and Applied Mechanics, KNRTU, tazyukov@mail.ru; **A. V. Gerasimov** – Doctor of Sciences (Technical Sci.), Associate Professor, the ISIRM department. KNRTU, aleks_gerasimov@mail.ru; gerasimov@kstu.ru.