УДК 532.5, 519.6

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2021.1.3

ЧИСЛЕННОЕ ИЗУЧЕНИЕ ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ В МИКРОКАНАЛЕ С С-ОБРАЗНЫМИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИМИ ЛОВУШКАМИ

© Н. Б. Фаткуллина, О. А. Солнышкина*

Башкирский государственный университет
Центр Микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем
Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.

Тел.: +7 (347) 229 96 70.

*Email: olgasolnyshkina@gmail.com

Проведено исследование гидродинамических потоков, возникающих при медленном течении вязкой несжимаемой жидкости вокруг гидродинамических ловушек С-образной формы в плоском микроканале с прямоугольным поперечным сечением. Процессы рассматриваются при малых числах Рейнольдса и в изотермических условиях. При помощи разработанных ранее программных модулей на основе метода граничных элементов, ускоренного гетерогенным быстрым методом мультиполей, произведено трехмерное компьютерное моделирование течения жидкости вокруг недеформируемых структур. Проведены расчеты и визуализация поля скоростей вокруг гидродинамических ловушек, расположенных в шахматном порядке поперек потока. Изучены особенности возникающих картин течения в зависимости от расстояния между рядами ловушек.

Ключевые слова: вычислительная гидродинамика, метод граничных элементов, режим Стокса, течения в микроканалах, гидродинамические ловушки.

Введение

Разработка технологий в области микроэлектроники, биоинженерии, фармакологии и производства различных микромеханических устройств легла в основу создания такого научного направления как микрогидродинамика. Ее основной задачей является изучение поведения и динамики жидкости в микромасштабах (1–100 мкм). В настоящее время во многих областях науки и промышленности актуальной проблемой является применение новых эффективных технологий, которые могут быть разработаны на основе фундаментальных исследований в области микрогидродинамики. Трехмерное моделирование стоксовых течений вязкой жидкости в микроканалах с гидродинамическими ловушками имеет значение для микрогидродинамики, например, при создании лабораторий-на-чипе, которые активно применяются в медицине, биофизике и фармакологии. Результаты исследований гидродинамических потоков в подобных сложных областях могут применяться при конструировании микрофлюидных устройств [1].

Микрофлюидные устройства по функциональному назначению делятся на категории: сортировка или разделение частиц, фиксация и удержание частиц, культивирование биологических объектов (клеток, бактерий и т.д.), пробоподготовка или обработка образцов [2]. Существует множество различных технических подходов к захвату частиц и клеток в микрофлюидных устройствах [3]. В основном методика сортировки клеток или частиц связана с использованием гидродинамических эффектов в микроканалах [4]. Акцент сделан на основополагающих гидродинамических механизмах,

вызывающих перекрестную миграцию объектов в сдвиговых и вихревых потоках. Использование различных микроструктур в микрофлюидных системах является весьма перспективным при создании устройств для медицинской диагностики, фармакологии, биотехнологии. Поскольку одной из основных проблем изучения клеток является их извлечение и фиксация, в работе [5] была предложена идея захвата клетки с помощью гидродинамических сил, вызванных потоками жидкости.

В настоящее время известно множество различных видов и конфигураций гидродинамических ловушек. Влияние геометрии структур в микроканалах активно исследуется как с экспериментальной, так и с теоретической точки зрения.

В статье [6] предложена конструкция двухслойной микрожидкостной платформы для захвата одиночных клеток с использованием гидродинамических ловушек U-образной формы. Эта конструкция предложена для решения проблемы снижения гидродинамического сопротивления в каналах микрофлюидного устройства. Подобные конструкции позволяют жидкости перетекать в нижний слой, где рассматриваемые частицы оказываются в ловушке.

Одним из способов фиксации микрочастиц является использование гидродинамических ловушек, в которых иммобилизация достигается за счет действия давления натекающего потока в одном направлении и реакции микроструктуры в другом. При этом важную роль играет обеспечение как захвата частиц в ловушках, так и возможность их отвода для предотвращения засорения устройства. Формы ловушек также бывают следующими: С- или П-образной. Первая представляет собой вертикальный полый полуцилиндр. Вторая – параллелепипед

с вертикальной прямоугольной выемкой. Также в ловушках имеются две щели для уменьшения гидродинамического сопротивления. В работе [7] произведена проверка эффективности предлагаемой топологии микрофлюидного чипа с массивом из 9 ловушек. В качестве параметра эффективности была выбрана вероятность захвата частицы в ловушке.

Целью настоящего исследования является изучение течения вязкой жидкости и выбор оптимальной конфигурации микрофлюидных устройств, содержащих С-образные гидродинамические ловушки, расположенные в пять рядов в шахматном порядке поперек потока.

Постановка задачи и численная реализация

Рассматриваются гидродинамические потоки вокруг элементов гидродинамических ловушек внутри плоского микроканала с прямоугольным поперечным сечением, возникающие при медленном течении вязкой несжимаемой жидкости под действием заданного постоянного объемного расхода. Все процессы протекают при малых числах Рейнольдса ($Re < 1$) и изотермических условиях. Такие течения описываются стационарными уравнениями Стокса. На поверхности всех неподвижных элементов задается условие прилипания

Для решения поставленной задачи используются современные вычислительные методы и средства. Численный подход основан на методе граничных элементов (МГЭ), который очень эффективен при исследовании трехмерных задач в бесконечных областях и областях со сложной геометрией, поскольку все расчеты связаны только с границей моделируемых объектов. Задачи большой вычислительной сложности возникают, когда для описания процессов требуется большое количество дискретных элементов на границе, поскольку МГЭ сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений с плотной несимметричной матрицей. Поэтому весьма актуальным является применение эффективных подходов к трехмерному моделированию течения вязкой жидкости в областях со сложной геометрией. В рамках данной работы ускорение МГЭ производилось как с помощью усовершенствованного масштабируемого алгоритма (быстрый метод мультиполей), так и с использованием гетерогенной вычислительной архитектуры (многоядерные процессоры и графические процессоры). Это позволяет осуществлять непосредственное крупномасштабное трехмерное моделирование на персональной рабочей станции. Используемая постановка задачи и численный подход более подробно описаны в работе [8].

Результаты моделирования

Проведено трехмерное моделирование течения вязкой несжимаемой жидкости в микроканале с С-образными гидродинамическими ловушками при

постоянным объемном расходе, заданном на входном сечении канала. Для проведения исследования выбрана С-образная конфигурация гидродинамических ловушек. С-образные ловушки часто применяются на практике для захвата и фиксации частиц. Гидродинамическая ловушка представлена в виде пяти цилиндрических элементов одинакового радиуса, расположенных на одинаковом расстоянии друг от друга (рис. 1).

Рис. 1. Триангуляция элементов С-образной гидродинамической ловушки.

Элементы гидродинамических ловушек ориентированы поперек потока и ограничены гладкими стенками плоского микроканала прямоугольного поперечного сечения. Расстояние между цилиндрическими элементами в каждой ловушке достаточно мало и позволяет минимизировать гидродинамическое сопротивление в рассматриваемой области микрофлюидного устройства. Следовательно, увеличивается скорость потока жидкости через микроканал, и повышается эффективность гидродинамических ловушек.

Рассматривается область, состоящая из 22 С-образных гидродинамических ловушек, которые расположены в пять рядов в микроканале в шахматном порядке (рис. 2). Ловушки состоят из пяти цилиндрических элементов радиуса R . Геометрические характеристики ловушки: длина $L_{trap,x} = 6.25 \cdot R$, ширина $L_{trap,z} = 9 \cdot R$. Разработана качественная триангуляция рассматриваемой области, общее количество треугольных элементов составило 427 440.

Рис. 2. Пространственная конфигурация гидродинамических ловушек в микроканале.

Рис. 3. Линии тока вязкой жидкости вокруг ловушек при их шахматном расположении ($d_x = 2 \cdot L_p$, $d_x = 3 \cdot L_p$ слева направо, соответственно).

Рис. 4. Компоненты скорости U_x и U_z при шахматном расположении ловушек ($d_x = 2 \cdot L_p$).

Рис. 5. Компоненты скорости U_x и U_z при шахматном расположении ловушек ($d_x = 3 \cdot L_p$).

Получены линии тока вязкой несжимаемой жидкости вокруг гидродинамических ловушек (рис. 3). Рассчитаны продольная и поперечная компоненты скорости вокруг недеформируемых элементов гидродинамических ловушек (рис. 4–5).

Изучено влияние расстояния между рядами ловушек на картину течения и распределения продольной и поперечной компонент скорости потока. В ходе исследования варьировалось расстояние между рядами ловушек по оси Ox . Исходя из анализа полученных картин течения, можно сказать,

что с увеличением расстояния d_x сопротивление в рассматриваемой области микроканала уменьшается, значения скорости между ловушками увеличиваются. Также получены картины течения в поперечном сечении микроканала между рядами ловушек (рис. 6). При обтекании вязкой жидкостью недеформируемых структур происходит перераспределение скоростей. С увеличением расстояния d_x гидродинамическое сопротивление в рассматриваемой области микроканала уменьшается, значения скорости между ловушками увеличиваются.

Рис. 6. Линии тока и модуль вектора скорости между рядами ловушек в плоскости yOz .

Расчеты проведены для различных расстояний между рядами гидродинамических ловушек по оси Ox (от $d_x = 1 \cdot L_p$ до $d_x = 3 \cdot L_p$), но постоянном расстоянии по оси Oz $d_z = 9 \cdot R$. Во всех случаях задается постоянное давление на входе канала, результирующее Re варьируется в пределах 0.4 – 0.7. Число Рейнольдса вычисляется по формуле $Re = \frac{2\rho Q}{\mu(w+h)}$, где ρ – плотность жидкости, μ – динамическая вязкость жидкости, Q – объемный расход, w и h – ширина и высота микроканала.

Компоненты скорости U_x и U_z значительным образом меняются при увеличении расстояния между ловушками, что естественным образом будет влиять на динамику частиц в рассматриваемом участке. Из полученных картин течений можно предположить, что эффективность захвата частиц с большим расстоянием между ловушками будет выше. В дальнейшем планируется проведение расчетов по динамике частиц различного размера в выбранной конфигурации.

Заключение

На основе ускоренного метода граничных элементов проведено трехмерное прямое моделирование течения вязкой несжимаемой жидкости в микроканале с препятствиями. Получены картины течения и поля скоростей жидкости при обтекании гидродинамических ловушек С-образной формы. Подобная форма ловушек, а также их шахматное расположение в микроканалах микрофлюидного устройства часто применяется на практике для захвата и фиксации частиц (клеток, капель, бактерий и т.д.). Результаты исследования могут быть применены при конструировании лабораторий-на-чипе.

Планируется дальнейшее расширение исследования – включение в рассмотрение динамики недеформируемых капель в потоке вязкой жидкости.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК – 549.2019.1. Библиотека FMM предоставлена Fantalgo, LLC (Maryland, USA).

ЛИТЕРАТУРА

1. Chung K., Rivet C., Lu Y., Kemp M. Imaging single-cell signaling dynamics with a deterministic high-density single-cell trap array // *Anal. Chem.* 2011. 83 (18). Pp. 7044–7052.
2. Кухтевич И. В., Евстапов А. А., Букатин А. С. Микрофлюидные устройства для исследований клеток (обзор) // *Научное приборостроение.* 2013. Т. 23. №4. С. 66–75.
3. Nilsson J., Evander M., Hammarström B., Laurell T. Review of cell and particle trapping in microfluidic systems // *Analytica chimica acta.* 2009. 649. Pp. 141–157.
4. Karimi A., Yazdi S., Ardekani A. M. Hydrodynamic mechanisms of cell and particle trapping in microfluidics // *Biomicrofluidics.* 2013. 7(2). 24 p.
5. Evstrapov A. A., Mukhin I. S., Bukatin A. S., Kukhtevich I. V. Ion and electron beam assisted fabrication of nanostructures integrated in microfluidic chips // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms.* 2012. Vol. 282. Pp. 145–148.
6. Chen H., Sun J., Wolvetang E., Cooper-White J. High-throughput, deterministic single cell trapping and long-term clonal cell culture in microfluidic devices // *Lab on a Chip.* 2015. 15. Pp. 1072–1083.
7. Белоусов К. И., Кухтевич И. В. Моделирование процессов массопереноса и фиксации микрочастиц в микрофлюидных чипах с гидродинамическими ловушками // *Сб. тезисов докладов конгресса молодых ученых. Вып. 2. СПб: ИТМО.* 2013. С. 212–214.
8. Abramova (Solnyshkina) O. A., Pityuk Y. A., Gumerov N. A., Akhatov I. S. Three-dimensional simulation of stokes flow around a rigid structure using FMM/GPU accelerated BEM // *Communications in Computer and Information Science.* 2019. Vol. 965. Pp. 427–438.

Поступила в редакцию 02.10.2020 г.

NUMERICAL STUDY OF THE VISCOUS FLUID FLOW IN A MICROCHANNEL WITH C-SHAPED HYDRODYNAMIC TRAPS

© N. B. Fatkullina, O. A. Solnyshkina*

*Center for Micro- and Nanoscale Dynamics of Dispersed Systems, Bashkir State University
32 Zaki Validi Street, 450076 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

Phone: +7 (347) 229 96 70.

**Email: olgasolnyshkina@gmail.com*

Recent developments in microelectronics, genetic engineering, production of micro-mechanical devices have led to the creation of microfluidics. This new scientific direction is aimed at studying the behavior of liquid systems on a microscopic scale (from 1 μm to 100 μm). Nowadays, the application of new effective technologies based on fundamental research in the field of microfluidics is an urgent problem in many fields of science and industry. Three-dimensional modeling of Stokes flows of a viscous fluid in microchannels with hydrodynamic traps is important for microfluidics. For example, in the manufacturing of Lab-on-a-Chip devices, which are widely used in biochemistry and pharmacology to study multi-stage biochemical processes. Therefore, it is relevant to study microchannels with hydrodynamic traps of different configurations. Hydrodynamic flows of viscous incompressible fluid around C-shaped hydrodynamic traps in rectangular microchannel were studied in this paper. Processes were considered at low Reynolds' numbers and under isothermal conditions. Three-dimensional computer simulation was performed using developed software modules based on the Boundary Element Method, accelerated using an advanced scalable algorithm (FMM) and a heterogeneous computing architecture (multicore CPUs and graphics processors). To solve large scale problems, flexible GMRES solver was utilized. High-quality triangulation of elements of hydrodynamic traps was developed. The calculation and visualization of the velocity field around C-shaped chessboard traps were carried out. The features of arising flow patterns depending on the distance between rows of traps were studied.

Keywords: computational fluid dynamics, Boundary Element Method, Stokes flow, microchannel flow, hydrodynamic traps.

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at bulletin_bsu@mail.ru if you need translation of the article.

REFERENCES

1. Chung K., Rivet C., Lu Y., Kemp M. *Anal. Chem.* 2011. 83 (18). Pp. 7044–7052.
2. Kukhtevich I. V., Evstrapov A. A., Bukatin A. S. *Nauchnoe priborostroyeniye*. 2013. Vol. 23. No. 4. Pp. 66–75.
3. Nilsson J., Evander M., Hammarström B., Laurell T. *Analytica chimica acta*. 2009. 649. Pp. 141–157.
4. Karimi A., Yazdi S., Ardekani A. M. *Biomicrofluidics*. 2013. 7(2).
5. Evstrapov A. A., Mukhin I. S., Bukatin A. S., Kukhtevich I. V. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2012. Vol. 282. Pp. 145–148.
6. Chen H., Sun J., Wolvetang E., Cooper-White J. *Lab on a Chip*. 2015. 15. Pp. 1072–1083.
7. Belousov K. I., Kukhtevich I. V. *Sb. tezisov dokladov kongressa molodykh uchenykh*. No. 2. Saint Petersburg: ITMO. 2013. Pp. 212–214.
8. Abramova (Solnyshkina) O. A., Pityuk Y. A., Gumerov N. A., Akhatov I. S. *Communications in Computer and Information Science*. 2019. Vol. 965. Pp. 427–438.

Received 02.10.2020.