

格子玻尔兹曼方法模拟弯流道中粒子的惯性迁移行为*

孙东科[†] 项楠 陈科 倪中华[‡]

(东南大学机械工程学院, 江苏省微纳生物医疗器械设计与制造重点实验室, 南京 211189)

(2012年6月7日收到; 2012年7月9日收到修改稿)

本文发展了一个能够模拟微流场环境下粒子惯性迁移行为的三维耦合模型. 该模型采用基于动理论的格子玻尔兹曼方法 (LBM) 描述流体流动, 采用牛顿动力学模型描述粒子的平动和转动, 采用基于 LBM 反弹格式的运动边界法实现流体与粒子模型的耦合. 模拟了重力作用下粒子的沉降过程和 Couette 流条件下粒子的转动过程, 通过将模拟结果与文献中的基准解进行对比定量验证了模型的可靠性. 模拟了不同大小的球形粒子在环形流道中的迁移, 成功复现了经典的流道截面二次流形成过程, 分析了粒径大小对粒子在流道中平衡位置的影响机理. 结果表明, 粒子在弯流道中的平衡位置与粒径大小密切相关, 小半径粒子的平衡位置靠近流道外侧而大半径粒子则靠近流道内侧. 通过实验对模拟结果进行了定性验证. 本模型为深入研究微流场环境下粒子的运动特性以及开发微流控粒子分选器件提供了参考依据.

关键词: 格子玻尔兹曼方法, 流固耦合, 惯性迁移, 弯流道

PACS: 47.27.nd 47.11.-j, 47.27.ek, 04.60.Nc

DOI: 10.7498/aps.62.024703

1 引言

粒子流动现象广泛存在于自然界和工业过程中, 如血细胞在血管中的迁移、颗粒污染物在呼吸道中的沉积、流化床反应器中物料的输运等. 微尺度条件下, 由于流体和粒子的惯性效应不可忽略, 很容易产生与宏观条件下不同的物理现象^[1], 由此而发展起来的惯性微流控技术在生物粒子的高效分选、微纳米材料的定向输运以及医疗检测等方面展现了广阔的应用前景^[2-5]. 这些物理过程均涉及复杂的微尺度流体流动、粒子惯性迁移以及流体与粒子间强烈的非线性相互作用, 宏观惯性流的机理和经验公式并不完全适用. 因此, 研究微流动条件下粒子迁移机制具有重要的理论意义和应用价值.

由于单纯采用实验技术难以获得流体与粒子

相互作用的细节信息, 数值模拟技术在微尺度粒子流体系统研究中的有效性和重要性逐渐显露. Ookawara 等^[6,7] 采用计算流体力学软件 FLUENT 模拟了半圆弧流道中二次流的特性, 并研究了流道截面中粒子浓度的分布特性. Bhagat 等^[8] 采用多物理场耦合软件 CFD-ACE+ 模拟研究了粒子在螺旋微流道中的迁移分布特性. Mao 等^[9] 研究了弯流道中截面二次流对同流样品的界面变形作用. Di Carlo 等^[10] 利用软件 COMSOL 并采用有限元法求解 Navier-Stokes (NS) 方程模拟了直流道中粒子的运动, 分析了受限流情况下流体对粒子的非线性影响机理. 由于以上研究大都基于对 NS 方程求解而实现对流动的模拟, 而且模拟中往往将粒子当成质点处理, 忽略粒子的体积效应对流动的影响, 从而导致模拟结果往往与实际偏差较大^[10].

格子玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method,

* 国家自然科学基金重大研究计划 (批准号: 91023024)、国家博士后科学基金 (批准号: 2012M511647) 和江苏省普通高校研究生科研创新计划 (批准号: CXZZ.0138) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: dongke.sun@gmail.com

[‡] 通讯作者. E-mail: nzh2003@seu.edu.cn

LBM) 是一种新兴的流体系统模拟方法, 兼具宏观流体连续模型和微观分子动力学方法的优点, 而且具有高效的计算效率和良好的并行性, 现已被广泛用于多组分多相流、化学反应流、气固两相流等的研究^[11-13]. 由于 LBM 不受连续介质假设和计算对象几何复杂度的限制, 在微尺度粒子流体体系的研究方面备受瞩目. Ladd 通过修正的反弹格式实现运动边界上的无滑移条件, 最早将 LBM 应用于粒子流体体系的模拟^[12,13]. Chun^[14] 采用该方法模拟了直流道中单粒子和多粒子在雷诺数为 100—1000 条件下的惯性迁移行为. Aidun 等^[15] 通过避免使用粒子内部流体的方法发展了 Ladd 模型, 突破了原模型只适用于研究固体密度大于流体密度的问题这一限制. 随后, Humphry 等^[16] 将 Aidun 模型应用于直流道中粒子周围局部流场特性的研究, 对惯性流中不同大小粒子之间主流动方向距离进行了分析. Kilimnik 等^[17] 通过耦合 LBM 和 LSM (lattice spring model) 对直流道中变形胶囊粒子惯性迁移行为进行了模拟研究. Iglberger 等^[18] 发展了一个基于反弹格式的 LBM-ODE (Open Dynamic Engine, ODE) 流固耦合模型, 模拟研究了流场环境中纳米粒子的迁移、碰撞与凝聚等行为. 这些工作展现了 LBM 在微尺度粒子流体体系模拟研究方面的巨大潜力. 但他们均针对直流道中粒子的行为进行研究, 对弯流道中粒子的惯性迁移尚未进行深入研究.

本文充分考虑粒子与流体间的非线性耦合作用, 采用基于单步松弛时间的 LBM 模型描述流体流动, 并根据牛顿动力学方程 (Newton dynamics equation, NDE) 建立描述粒子运动的模型. 考虑到算法的稳定性和计算效率, 本文采用基于 LBM 反弹格式的运动边界法^[18] 实现流体与粒子的耦合, 最终建立一个完全耦合的 LBM-NDE 三维模型. 采用该模型对微尺度弯流道中粒子惯性迁移行为进行模拟研究, 通过实验验证了耦合模型的可靠性.

2 模型与算法

2.1 计算流体流动的 LBM 模型

与基于流体连续假设的传统建模思想不同, LBM 将流体抽象为大量微观粒子的集合体. 这些流体粒子在离散的格子上按一定规则进行迁移和碰撞演化. 流体粒子演化规则由玻尔兹曼动力学方程的 BGK 近似形式描述^[19]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = -\frac{1}{\tau_c} [f - f^{eq}], \quad (1)$$

式中, f 为速度为 $\boldsymbol{\xi}$ 的粒子在时空 (\mathbf{x}, t) 上的分布函数, \mathbf{a} 为流体粒子的加速度, τ_c 为流体粒子松弛时间. f^{eq} 为麦克斯韦局部平衡分布函数, 其定义为

$$f^{eq}(\boldsymbol{\xi}, \rho, \mathbf{u}, T) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right), \quad (2)$$

式中, D 为空间维度, R 为气体常数, T 为局部温度. 流体的宏观密度 ρ 和速度 \mathbf{u} 可由分布函数统计获得. 将方程 (1) 在速度空间离散后, 可得分布函数的演化方程^[20]

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + \delta t F_i, \quad (3)$$

即为基于单步松弛时间的格子玻尔兹曼方程. 其中, $f_i(\mathbf{x}, t)$ 为在 i 方向的流体粒子分布函数; τ 为无量纲松弛时间, $\tau = \tau_c / \delta t$; 平衡分布函数 f^{eq} 由 (2) 式的离散形式给出

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho \left[1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2c_s^2} \right]. \quad (4)$$

本文采用基于离散速度的 3 维 19 速 (D3Q19) 模型求解格子玻尔兹曼方程, 即 (3) 式在 D3Q19 模型中, 离散速度 \mathbf{e}_i 可表示为

$$\mathbf{e}_{0-18} = \begin{bmatrix} 0 & c & -c & 0 & 0 & 0 & 0 & c & -c & c & -c & c & -c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & -c & 0 & 0 & c & -c & -c & c & 0 & 0 & 0 & c & -c & c & -c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & -c & 0 & 0 & 0 & 0 & c & -c & -c & c & c & -c & -c & c \end{bmatrix}, \quad (5)$$

其中, c 为格子速度 $c \equiv \delta x / \delta t$. 权重系数 w_i 取值为: $w_0 = 1/3$, $w_{1-6} = 1/18$, $w_{7-18} = 1/36$. 作用力项 F_i 与流体所受外力 \mathbf{F} 满足如下关系:

$$F_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \rho w_i \left[\frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^4} \mathbf{e}_i \right] \cdot \mathbf{F}. \quad (6)$$

以上各式中, w_i 表示权重系数, c_s 为格子声速 $c_s^2 = c^2/3$. 流体密度和速度可通过下式求出:

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (7)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{e}_i f_i + \frac{1}{2} \mathbf{F} \delta t. \quad (8)$$

流体的运动黏度 ν 与无量纲松弛时间相关

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \delta t \quad (9)$$

2.2 计算粒子迁移行为的 NDE 模型

在黏性流体中, 每个运动的粒子均受到流体的黏滞力和其他外部场力(如重力、电场力、磁场力等)的作用. 粒子的行为可用牛顿动力学方程描述

$$m_p \frac{d^2 \mathbf{x}_p}{dt^2} = \mathbf{F}_p^f + \mathbf{F}_p^{\text{ext}}, \quad (10)$$

式中, \mathbf{x}_p 和 m_p 分别表示粒子的位置和质量, \mathbf{F}_p^f 为粒子受到的流体黏滞力, $\mathbf{F}_p^{\text{ext}}$ 表示外部场力, 如重力、电场力、磁场力等. 除了迁移过程中的粒子平动, 粒子转动也会对运输模式产生重要影响. 因此, 必须将粒子的自转效应考虑进来. 粒子转动的控制方程与 (10) 式形式相同, 可表示为

$$I_p \frac{d^2 \boldsymbol{\theta}_p}{dt^2} = \mathbf{T}_p^f + \mathbf{T}_p^{\text{ext}}, \quad (11)$$

式中, \mathbf{T}_p^f 为粒子受到的流体黏滞力矩, $\mathbf{T}_p^{\text{ext}}$ 为外场产生的力矩. 粒子自转速度为粒子转角 $\boldsymbol{\theta}_p$ 随时间变化率, $\boldsymbol{\omega}_p = d\boldsymbol{\theta}_p/dt$. 对 (10), (11) 式进行离散求解即可实现对粒子运动行为的模拟.

2.3 流体与粒子模型的耦合

流体-粒子两相体系输运过程中, 在流固界面须满足一定的边界条件, 同时还需要考虑流体-粒子间的相互作用力. 因此, 构造合理的流固耦合算法是建立流体-粒子系统模型的关键. 本模型不考虑界面速度滑移, 将流固界面视为无滑移边界. 首先考虑粒子平动、转动对流固界面处流速的影响, 流固界面处的流速可表示为

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{u}_p + \boldsymbol{\omega}_p \times \mathbf{r}_p, \quad (12)$$

式中, \mathbf{u}_b 为粒子平动速度, \mathbf{r}_p 为边界与其质心的距离, 可通过下式计算:

$$\mathbf{r}_b = \mathbf{x}_b - \mathbf{x}_c, \quad (13)$$

其中, \mathbf{x}_b 为流固边界位置, \mathbf{x}_c 为粒子质心位置. 在流体与粒子发生碰撞过程中, 两者发生动量交换. 由动量守恒可得碰撞后的流体分布函数

$$f_i(\mathbf{x}_b, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}_b, t) - 2w_i \rho_0 \frac{\mathbf{u}_b \cdot \mathbf{e}_i}{c_s^2}, \quad (14)$$

其中, \bar{i} 表示 i 的反方向, 有 $\bar{\bar{i}} + i = 0$. 经过此步演化之后, 根据动量定理, 在界面格子作用于固相粒子上的力可表示为

$$\begin{aligned} & \mathbf{f}_b^f \left(\mathbf{x}_b, t + \frac{1}{2} \delta t \right) \\ &= 2 \left[f_i(\mathbf{x}_b, t) - w_i \rho_0 \frac{\mathbf{u}_b \cdot \mathbf{e}_i}{c_s^2} \right] \frac{\delta x^D}{\delta t} \mathbf{e}_i. \end{aligned} \quad (15)$$

通过对流固界面格子的受力和力矩求和, 可得粒子受到的总作用力和力矩^[19]

$$\mathbf{F}_p^f = \sum_{\mathbf{x}_b} [1 - w(\mathbf{x}_b)] \mathbf{f}_b^f, \quad (16)$$

$$\mathbf{T}_p^f = \sum_{\mathbf{x}_b} [1 - w(\mathbf{x}_b)] (\mathbf{r}_b \times \mathbf{f}_b^f), \quad (17)$$

式中, $w(\mathbf{x}_b)$ 为与格子状态相关的二值指示函数, 当 \mathbf{x}_b 处格子为流体时其值为 0, 反之为 1. 上述耦合算法可在执行 LBM 反弹格式中自动实现, 避免了构造复杂算法处理流固界面边界条件, 且流固间的双向耦合作用也在这一过程中得以体现.

3 结果与讨论

3.1 耦合模型的验证

由于流固耦合算法直接决定了耦合模型的精度, 下面通过对两个经典算例的计算验证模型和算法的可靠性. 首先模拟了重力作用下球形粒子的沉降过程, 定量验证本模型对粒子平动模拟的有效性. Mordant 和 Pinton^[21] 给出了粒子沉降速度 u_s 随时间变化的半解析关系

$$\frac{u_s}{U_s} = 1 - \exp\left(-\frac{3t}{t_c}\right), \quad (18)$$

式中, U_s 为沉降速度的最大值, t_c 表示特征时间, 其值取 u_s 自初始时刻增大到 $u_s = 0.95U_s$ 时的时间. 本模拟中, 计算区域为 $2\text{ m} \times 2\text{ m} \times 8\text{ m}$ 的矩形腔, 其中充满密度为 2.0 kg/m^3 、黏度为 $0.25\text{ m}^2/\text{s}$ 的流体. 初始条件下, 直径为 0.625 m 、密度为 3.0 kg/m^3 的球形粒子置于矩形腔顶部横截面中心处. 计算中

取空间步长 δx 为 0.0625 m、无量纲松弛时间 τ 为 0.625, 区域边界为无滑移固壁边界条件. 模拟得到的粒子沉降速度随时间变化曲线如图 1 所示. 由图可知, 在初始阶段由于重力作用粒子沉降速度逐渐增大. 由于流体黏滞阻力随沉降速度的增大而增大, 所以沉降速度增大的趋势逐渐变得缓慢. 最终, 当重力与黏滞阻力平衡时粒子进入稳定运动状态. 本模型模拟结果与实验结果^[21]、基于 NS 方程的模拟结果^[22] 以及 (18) 式的计算结果符合良好.

为定量验证本模型对粒子转动过程模拟的准确性, 下面对圆形腔 Couette 流条件下粒子的运动过程进行模拟. 初始条件下, 半径为 R_p 的粒子置于半径为 R_f 的圆形流场中心, 流场边界为圆形且角速度 ω_b 保持恒定. 在流场剪切力作用下, 粒子开始转动并逐渐加速直至进入稳态, 其角速度 ω_p 达到最大值 ω_p^m . 本模拟中, 粒子半径 $R_p = 0.125$, 圆形流场的半径为 $R_f = 1.25$, 流场边界角速度 $\omega_b = 0.1$, 空间步长取为 $\delta x = 0.025$, 无量纲松弛时间 $\tau = 0.625$, 则时间步长 $\delta t = 1.30208 \times 10^{-4}$. 模拟得到的粒子角速度随时间变化曲线如图 2 所示. 由图可知, 本模拟结果与 Do-Quang 和 Gustav^[23] 采用 DLM(Distributed Lagrange Method) 模拟得到的角速度随时间变化曲线符合良好.

3.2 粒子迁移过程的模拟

3.2.1 初始条件与边界条件

我们应用本模型模拟三维条件下球形粒子在环形流道中的迁移, 如图 3 所示. 模拟中, 流道环形中心线半径 $R_c = 3.0 \times 10^{-5}$ m, 流道截面高 $H = 3.0 \times 10^{-5}$ m, 宽 $W = 3.0 \times 10^{-5}$ m, 如图 3 所示. 流道中流体的密度为 1.0×10^3 kg/m³, 运动黏度为 1.0×10^{-6} m²/s. 球形粒子半径为 5.0×10^{-6} m. 为便于表述, 称平行于主流动方向的平面为主流动平面(主平面)、垂直于主流动方向的平面为流道截面. 初始条件下, 球形粒子置于流道截面中心, 流体和粒子均处于静止状态. 模拟开始时, 流体在外力 F 作用下开始流动, 粒子在黏滞力作用下随流体一起运动. 在流道截面上, 单位网格内流体所受压力 p_s 由外力 F 截面法向 n 决定

$$p_s n = F / \delta x^2, \quad (19)$$

环形流道壁面处流体满足无滑移条件, 在计算过程中采用反弹格式处理.

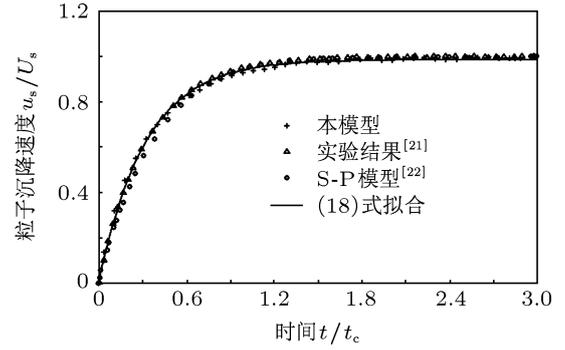


图 1 粒子沉降速度随时间变化曲线

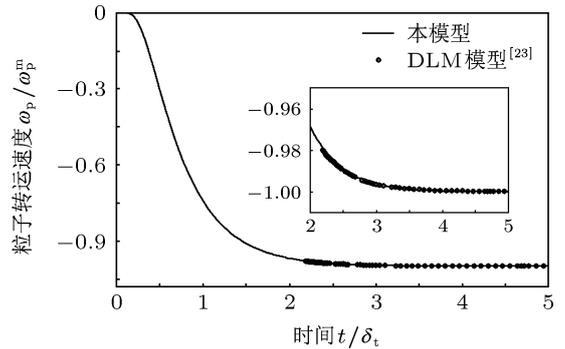


图 2 粒子转动速度随时间变化曲线

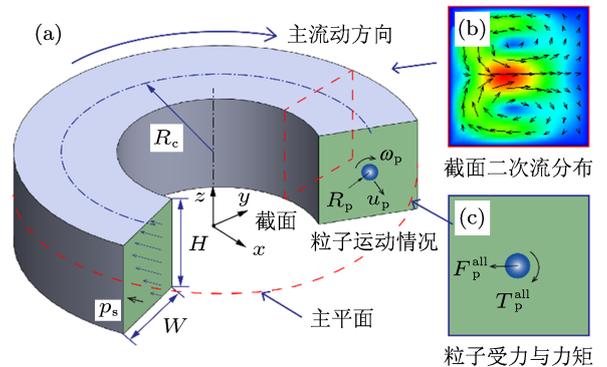


图 3 球形粒子在环形流道中的迁移模型示意图

3.2.2 流体粒子间的相互作用

首先我们模拟半径 $R_p = 5.0 \mu\text{m}$ 的粒子在环形流道中的迁移过程. 在本模拟中, 取 $p_s = 10$ N/m², 空间步长 $\delta x = 1.0 \mu\text{m}$, 无量纲弛豫时间 $\tau = 1.5$, 则时间步长 $\delta t = 5.556 \times 10^{-8}$ s. 模拟得到的主平面流速分布如图 4 所示. 由图 4 可知, 在流动初期 ($t \leq 25\delta t$) 主平面流速均较小, 随着时间推移流速分布呈现逐渐增大的趋势. 由于受到流道壁面边界层效应的影响, 流速分布增大的趋势逐步放缓. 当 $t \geq 150\delta t$ 时, 流动基本趋于稳定, 进入稳定流动状态.

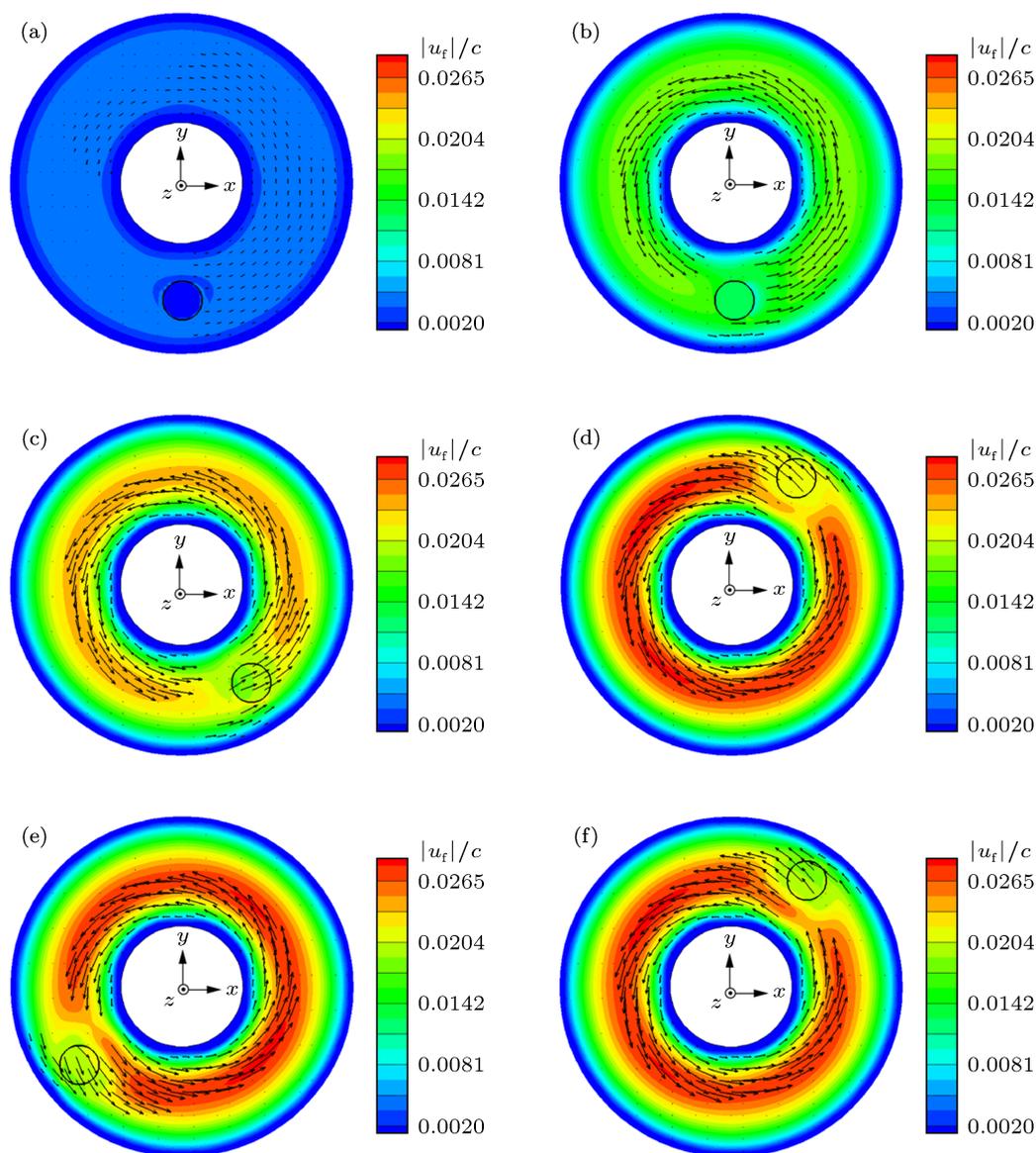


图4 模拟得到的主平面流速分布随时间演化 (a) $t = 5\delta t$; (b) $t = 25\delta t$; (c) $t = 50\delta t$; (d) $t = 150\delta t$; (e) $t = 300\delta t$; (f) $t = 500\delta t$ ($R_0 = 5.0 \mu\text{m}$, $p_s = 10 \text{N/m}^2$, $\delta x = 1.0 \mu\text{m}$, $\tau = 1.5$. 箭头表示流速, 圆圈表示粒子)

由图4还可看出, 无论流动初期还是稳态条件下, 主平面流速分布均呈中间高两侧低的状态, 而且主平面流速极大值并未出现在流道中心线上, 而是在靠近流道中心并略偏向流道内侧. 一方面是因为环形流道外侧壁面面积大于内侧, 在壁面边界层效应的作用下, 外侧流体所受壁面阻力损耗高于内侧, 从而外侧流速会明显低于内侧, 流速极值出现位置更靠近流道内侧. 另一方面, 流体在弯流道中的惯性效应不可忽略, 流道内侧的流体会在离心作用下向外侧流动. 从流道截面上看, 中心区域流速高于壁面附近流速, 所以中心区域流体的流动占主导地位. 流体自流道截面中心向外侧流动, 再由外

侧经上下壁面处流回内侧. 为满足流量连续, 靠近内侧的流体又自内壁面流回流道截面中心. 最终在垂直于主流方向的截面上就形成了如图5所示的二次流速度分布.

为考察粒子运动情况, 我们将不同时刻粒子质心位置分别投射到主流动平面和流道截面, 得到运动粒子质心轨迹如图6所示. 为方便表述, 将粒子质心位置、流道中心线与流速峰值位置与流道中轴的距离分别记为 d_p , d_c 和 d_f . 由图6(a)可知, 在稳态流动条件下, 粒子质心位置与流道中轴、流速峰值位置并不重合: 粒子质心靠近流道中心而略偏于外侧, 流速峰值则出现在流道中心内侧. 这是由

于粒子在迁移过程中,同时受到来自流体的升力与曳力的共同作用.从主流流动平面上看,靠近流道中心区域的流速大而流道壁面附近区域流速小.由于粒子在微流动条件下其体积大小不可忽略,所以在流体剪切效应诱导下产生一个促使粒子自壁面向流道中心运动的升力,其方向如图 6(a) 所示.升力大小可表示为 [25]

$$F_L = \rho C_L \frac{U_m^2 R_p^4}{D_h^2}, \quad (20)$$

式中, C_L 为无量纲升力系数, U_m 为流动强度.升力系数由流道雷诺数和粒子在流道截面中的位置决定 [25].从流道截面上看,粒子势必在二次流带动

下随流体一起自流道中心向流道外壁面迁移,如图 6(b) 所示.根据 Stokes 定律,流体对粒子的曳力可表示为

$$F_D = 3\pi\mu U_s R_p, \quad (21)$$

式中, μ 为流体动力黏度 ($\mu = \rho\nu$), U_s 表示二次流强度.曳力与升力对粒子产生的作用完全相反,两者大小均与主流速分布、二次流分布以及粒子的空间位置相关.模拟中发现,在某些特殊位置曳力与升力能够达到平衡,粒子围绕流道中心做等半径圆周运动,其在流道截面中的位置不再发生改变,如图 6(b) 所示.称此时粒子所处位置为粒子平衡位置.

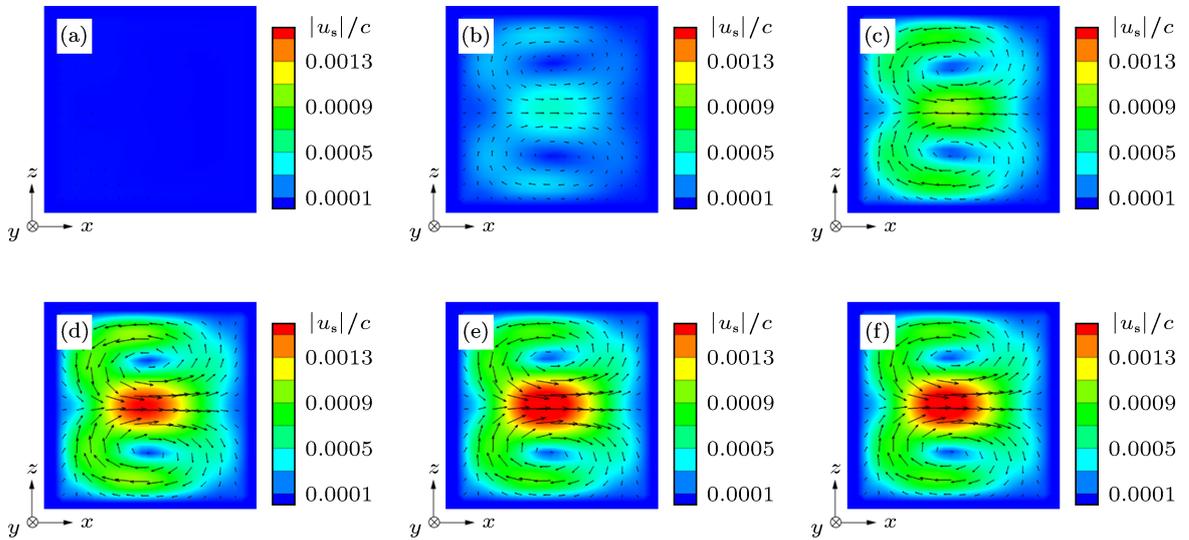


图 5 模拟得到的截面二次流分布随时间演化 (a) $t = 5\delta t$; (b) $t = 25\delta t$; (c) $t = 50\delta t$; (d) $t = 150\delta t$; (e) $t = 300\delta t$; (f) $t = 500\delta t$ ($R_p = 5.0 \mu\text{m}$, $p_s = 10 \text{ N/m}^2$, $\delta x = 1.0 \mu\text{m}$, $\tau = 1.5$. 箭头表示流速)

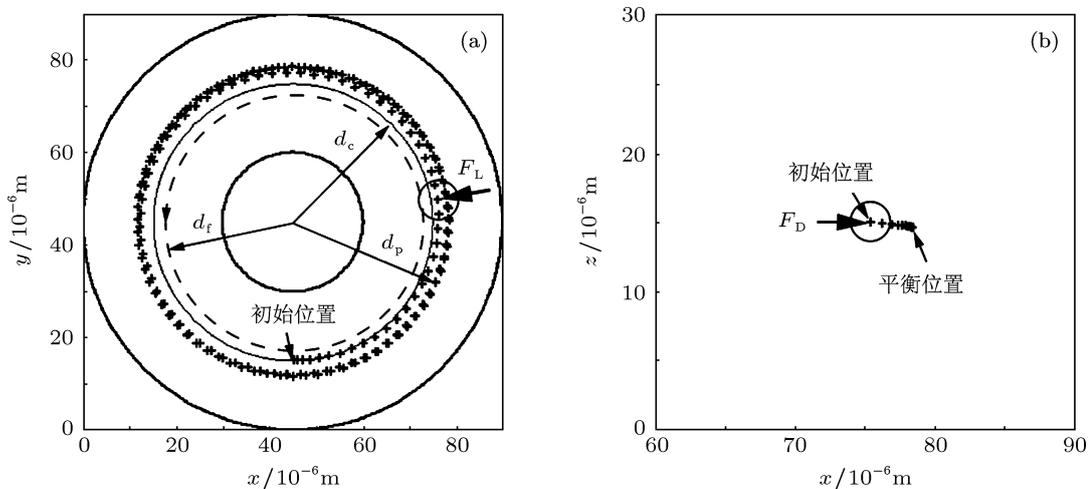


图 6 模拟得到的粒子质心轨迹 (a) 主流流动平面; (b) 流道截面 ($R_p = 5.0 \mu\text{m}$, $p_s = 10 \text{ N/m}^2$, $\delta x = 1.0 \mu\text{m}$, $\tau = 1.5$. d_p , d_c 和 d_f 分别表示粒子质心位置、主流道中心线、流速峰值位置与流道中轴的距离)

3.2.3 粒径对平衡位置的影响

为考察影响粒子平衡位置的关键因素,并考虑到粒径大小对流场演化与粒子迁移具有重要影响,我们对半径 $R_p = 3.0 \mu\text{m}, 4.0 \mu\text{m}, 6.0 \mu\text{m}, 7.0 \mu\text{m}$ 粒子的迁移过程进行模拟研究.本模拟中其他计算条件均与图 4 的计算条件相同.模拟得到的粒子质心与流道中轴距(心轴距) d_p 随时间变化曲线如图 7 所示,流体流动和粒子迁移特征量与半径对应关系如表 1 所示.由 7 图可知,不同半径的粒子均以一定速度运动,迁移到平衡位置到达稳定运动状态.通过对比这组曲线还可发现,较大半径的粒子到达平衡位置的所需时间较短.这是由于半径变化对粒子迁移速度影响不大,而对粒子平衡位置影响较大:具有较小半径的粒子其初始位置距其平衡位置较

远,需要较长的时间才能到达稳定运动状态,如表 1 所示.

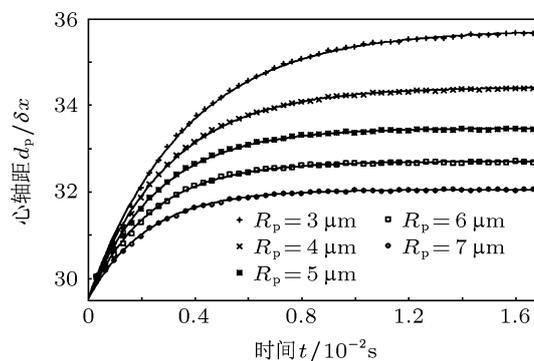


图 7 模拟得到的半径为 $R_p = 3.0 \mu\text{m}, 4.0 \mu\text{m}, 5.0 \mu\text{m}, 6.0 \mu\text{m}, 7.0 \mu\text{m}$ 的粒子质心位置与流道中轴距(心轴距)随时间变化曲线 ($\rho_s = 10 \text{ N/m}^2, \delta x = 1.0 \mu\text{m}, \tau = 1.5$)

表 1 模拟得到的流体流动与粒子迁移特征量与半径对应关系

粒子半径 $R_p/\delta x$	流动特征量		粒子迁移特征量		
	主平面流速	截面二次流	平动速度	转动速度	平衡位置
	\bar{u}_m/c	\bar{u}_s/c	\bar{u}_p/c	ω_p/c	$d_p^e/\delta x$
3.0	1.889×10^{-2}	1.918×10^{-3}	1.72×10^{-2}	6.37×10^{-4}	35.69
4.0	1.865×10^{-2}	1.913×10^{-3}	1.83×10^{-2}	4.61×10^{-4}	34.41
5.0	1.832×10^{-2}	1.898×10^{-3}	1.84×10^{-2}	3.13×10^{-4}	33.48
6.0	1.785×10^{-2}	1.872×10^{-3}	1.82×10^{-2}	1.97×10^{-4}	32.70
7.0	1.735×10^{-2}	1.830×10^{-3}	1.73×10^{-2}	8.60×10^{-5}	32.06

由表 1 可知,随着粒子半径的增大,主平面流动强度(由无量纲主流速均值 \bar{u}_m/c 表示)和二次流强度(由无量纲二次流速均值 \bar{u}_s/c 表示)呈下降的趋势.粒子迁移过程中,其平衡位置随粒径的增大而逐渐向流道内侧靠近.这是由于在微流动条件下,增大粒子半径则有助于增强粒子所受升力和曳力的作用,即, $F_L \propto U_m^2 R_p^4, F_D \propto U_s R_p$. 尽管随着半径的增大,主流动和二次强度均有一定程度的减弱,从而降低粒子所受升力和曳力的大小.但粒子半径自 $3.0 \mu\text{m}$ 至 $7.0 \mu\text{m}$ 增大了 3.5 倍,而流场强度基本没有明显降低,如 $R_p = 3.0 \mu\text{m}$ 时主平面平均流速为 $R_p = 7.0 \mu\text{m}$ 时的 1.089 倍,流道截面二次流平均流速则为 1.048 倍.粒子半径变化对其受力的影响大于流动强度的影响,所以粒子所受升力和曳力的作用随着粒径的增大而趋于增大.另一方面,由于升力与半径四次方成正比而曳力与半径线性相关,所以半径对升力的影响大于对曳力的影响.较

大半径粒子向二次流强度较强的流道中心偏移才能使升力与曳力保持平衡.因此,在微尺度弯流道中迁移粒子的平衡位置随粒径的增大逐渐向流道内侧靠近.

3.3 模拟结果的实验验证

为验证模拟结果的正确性,我们通过实验表征粒子在弯流道内的迁移特性.设计和制作如图 8(d)插图 (i) 所示的 5 圈螺旋结构微流道,以满足模型中粒子多圈循环运动的特质.将平均粒径为 $5 \mu\text{m}$ 和 $10 \mu\text{m}$ 的荧光粒子 (Thermo Fisher Scientific, Inc.) 悬浮液稀释 500 倍,使承载液的密度和黏度均与前述模拟条件相符.测试样品液通过精密注射泵 (KDS201, KD Scientific, Inc.) 和微管注入微流道,实现样品流速的精确控制.微流道中荧光粒子的迁移通过倒置荧光显微镜 (IX71, Olympus) 的 20 倍物镜和附载的 14 位 CCD (Exi Blue, Qimaging) 进行观

测和记录. 为降低偶然因素对实验的影响, 我们采用 IMAGEJ 软件 (version 1.45s, NIH, USA) 叠加同一区段 50 张以上粒子运动图像, 并对产生的粒子运动轨迹复合图像进行灰度值分布测量.

实验中分别将两种粒子以 $660 \mu\text{L}/\text{min}$ 的流量 (平均流速为 1.3 m/s) 注入微流道. 图 8(a), (b), (c) 分别为两种粒子在靠近螺旋流道出口处的荧光运动图谱及复合图谱, (d) 为流道宽度方向的粒子荧光强度分布曲线. 由图 8(a), (b) 可知, 在实验流速下两

种粒子运动轨迹均呈单束状, 表明粒子在流动作用下已聚焦至平衡位置. 这与模拟结果中粒子最终运动至平衡位置的结论相一致. 由图 8(c), (d) 不难发现, 两种粒子在流道中最终稳定后的平衡位置不重合: 大半径粒子靠近流道内测, 而小半径粒子则靠近流道外侧. 这一结果也与本文模拟结论符合. 此外, 本文模拟和实验结果均与 Kuntaegowdanahalli 等 [4] 和 Yoon 等 [25] 在微流道粒子分选研究中观察到的实验现象定性一致.

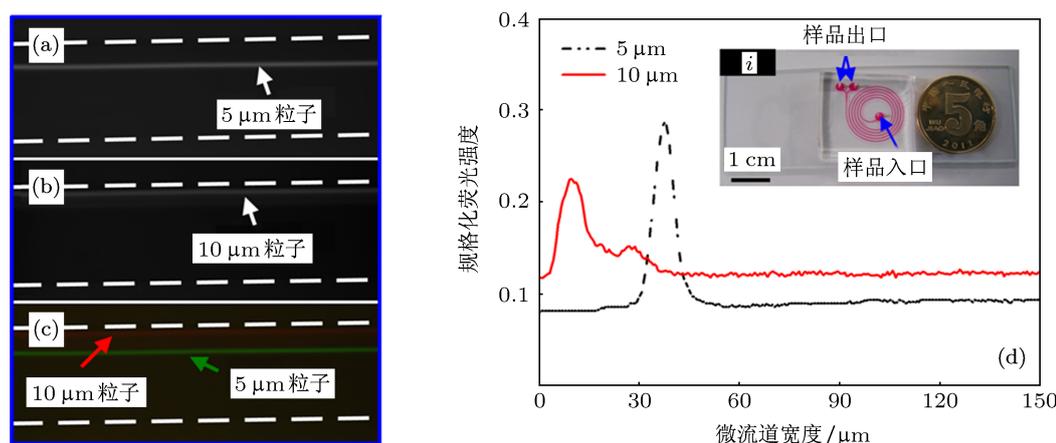


图 8 流道出口处半径为 (a) $5 \mu\text{m}$; (b) $10 \mu\text{m}$ 粒子的迁移运动荧光图谱; (c) 两种粒子荧光图谱叠加图; (d) 流道宽度方向荧光强度分布曲线 (图 (a)—(c) 中白色虚线代表流道壁的位置, (d) 中插图 (i) 为芯片结构实物图)

4 结论

本文实现了一种可用于模拟微尺度弯流道中粒子迁移行为的三维耦合模型, 本模型采用基于单步松弛时间的 LBM 模型描述流体的流动, 用牛顿时力学方程模型描述粒子的运动行为, 并通过基于反弹边界条件的运动边界法实现两者的耦合. 通过模拟重力作用下粒子的沉降过程和 Couette 流条件下粒子的转动过程, 定量验证了模型和算法的可靠性. 模拟得到的粒子沉降速度、转动速度随时间变化曲线均与文献中的基准结果符合良好. 通过模拟环形弯流道中的流动, 成功复现了流道截面上的二

次流演化过程, 分析了二次流成因及流体与粒子间的相互作用机理. 模拟研究了半径为 $3 \mu\text{m}$, $4 \mu\text{m}$, $5 \mu\text{m}$, $6 \mu\text{m}$, $7 \mu\text{m}$ 的粒子在环形流道中的迁移及粒径大小对平衡位置的影响规律. 结果表明: 粒子在弯流道中随流体迁移时, 其在流道截面中的平衡位置与粒子尺寸密切相关, 随着粒子半径的增大粒子平衡位置逐渐自流道外侧向流道内侧靠近. 最后, 采用实验方法对模拟结果进行了定性验证.

衷心感谢东南大学材料学院朱鸣芳教授在建模方面的指导, 感谢美国加州大学欧文分校机械与航空工程系王勇博士的有益讨论.

- [1] Di Carlo D 2009 *Lab. Chip* **9** 3038
 [2] Hur S C, Choi S E, Kwon S, Di Carlo D 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 044101
 [3] Choi Y S, Seo K W, Lee S J 2011 *Lab. Chip* **11** 460
 [4] Kuntaegowdanahalli S S, Bhagat A A S, Kuma G, Papautsky I 2009 *Lab. Chip* **9** 2973
 [5] Di Carlo D, Irimia D, Tompkins R G, Toner M 2007 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104** 18892
 [6] Ookawara S, Higashi R, Street D, Ogawa K 2004 *Chem. Eng. J.* **101** 171
 [7] Ookawara S, Street D, Ogawa K 2006 *Chem. Eng. Sci.* **61** 3714
 [8] Bhagat A A S, Kuntaegowdanahalli S S, Papautsky I 2008 *Lab. Chip* **8**

- 1906
- [9] Mao X, Waldeisen J R, Huang T J 2007 *Lab. Chip* **7** 1260
- [10] Di Carlo D, Edd J F, Humphry K J, Stone H A, Toner H 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 094503
- [11] Zeng J B, Li L J, Liao Q, Jiang F M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066401 (in Chinese) [曾建邦, 李隆键, 廖全, 蒋方明 2011 物理学报 **60** 066401]
- [12] Ladd A J C 1994 *J. Fluid Mech.* **271** 285
- [13] Ladd A J C 1994 *J. Fluid Mech.* **271** 311
- [14] Chun B, Ladd A J C, 2006 *Phys. Fluids* **18** 031704
- [15] Aidun C K, Lu Y, Ding E J 1998 *J. Fluid Mech.* **373** 287
- [16] Humphry K J, Kulkarni P M, Weitz D A, Morris J F, Stone H A 2010 *Phys. Fluids* **22** 081703
- [17] Kilimnik A, Mao W, Alexeev A 2011 *Phys. Fluids* **23** 123302
- [18] Iglberger K 2005 *Master Thesis* (Germany: University of Erlangen-Nuremberg)
- [19] Guo Z L, Zhao T S, Shi Y 2006 *Phys. Fluids* **18** 067107
- [20] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C 2002 *Phys. Rev. E* **65** 046308
- [21] Mordant N, Pinton J F 2000 *Eur. Phys. J. B* **18** 343
- [22] Sharma N, Patankar N A 2005 *J. Comput. Phys.* **205** 439
- [23] Do-Quang M, Amberg G 2008 *J. Comput. Phys.* **227** 1772
- [24] Bhagat A A S, Kuntaegowdanahalli S S, Papautsky I 2008 *Lab. Chip* **8** 1906
- [25] Yoon D H, Ha J B, Bahk Y K, Arakawa T, Shoji S, Go J S 2009 *Lab. Chip* **9** 87

Lattice Boltzmann modeling of particle inertial migration in a curved channel*

Sun Dong-Ke[†] Xiang Nan Chen Ke Ni Zhong-Hua[‡]

1) (School of Mechanical Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China)

2) (Jiangsu Key Laboratory for Design and Manufacture of Micro-Nano Biomedical Instruments, Nanjing 211189, China)

(Received 7 June 2011; revised manuscript received 9 July 2012)

Abstract

A three-dimensional coupled model for particle inertial migration in the presence of micro flows is proposed and implemented. In the present model, the kinetic theory based lattice Boltzmann method is used to describe the fluid flows, and the Newton dynamics equation based model is used to describe the translation and rotation of the particle. The fluid and particle model are coupled by the LBM bounceback scheme based moving boundary method. The processes of particle settlement under gravity and particle rotation in the condition of Couette flow take place. The reliability of the present model and algorithm is validated through comparisons between the present simulation and the benchmark tests in the literature. The simulations of particle migration with various radii in an annular curved channel are performed, and the classic velocity distribution of the secondary flow in the channel cross-section is reproduced successfully. The mechanism of the particle radius influencing the particle equilibrium position in the curved channel is discussed. The results show that the particle equilibrium position in the curved channel will approach to the channel inner wall with the increase of radius. The present model is of important value for detailed study of the particle dynamics in micro flows as well as for the design and development of new micro fluidic particle selective chips and devices.

Keywords: lattice Boltzmann method, fluid solid interaction, inertial migration, curved channel

PACS: 47.27.nd, 47.11.-j, 47.27.ek, 04.60.Nc

DOI: 10.7498/aps.62.024703

* Project supported by the Major Research plan of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 91023024), the National Science Foundation for Post-doctoral Scientists of China (Grant No. 2012M511647), and the Jiangsu Graduate Innovative Research Program (Grant No. CXZZ_0138).

† Corresponding author. E-mail: dongke.sun@gmail.com