

文章编号 1004-924X(2005)02-0127-08

电磁式微流体动态混合器的动力学数值模拟

李淑娴^{1,2}, 吴一辉¹, 宣明¹

(1. 中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所 应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130033; 2. 中国科学院 研究生院, 北京 100039)

摘要:从提高电磁式聚合物膜微流体动态混合器的混合性能出发,利用结构动力学理论对聚合物膜进行数值模拟,给出了其模态及谐响应分析结果;然后将其数值模拟结果耦合在流体动力学数值模型上,利用计算流体动力学理论对微腔内液体的流动特性进行了分析,得出低阶振动模式下的 R_e 。对以数值模拟为依据制造的混合器进行了水与红墨水的混合试验。仿真与试验获得了相吻合的研究结果:二阶振动时 R_e 最大;当激励力振动频率在二阶自然频率附近时,混合液体振动最剧烈,混合最理想;振动剧烈程度是由振幅、频率共同决定的。

关键词:微流体动态混合器;数值模拟;模态;谐响应;计算流体动力学

中图分类号:O361 **文献标识码:**A

Dynamic numerical simulation of a electromagnetic microfluidic active mixer

LI Shu-xian^{1,2}, WU Yi-hui¹, XUAN Ming¹

(1. *State Key Lab of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;*
2. *Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China*)

Abstract: The dynamic analysis was applied to a microfluidic polymer membrane active mixer in order to optimize its design and improve its performance. The results of the modal and harmonic response analysis were given, which were coupled into the fluid field, giving the R_e of the first substep vibration and the maximum R_e in the second substep. From mixing experiments, the best mixing took place also in the second substep. The results from simulation and experiments matched well, which proves that the simulation is feasible, and the degree of vibration depends on both amplitude and frequency.

Key words: microfluidic active mixer; numerical simulation; modal; harmonic response; computational fluid dynamics

收稿日期:2005-02-08;修订日期:2005-03-18.

基金项目:国家 863MEMS 重大专项(No. 2003AA-3-A19)、(No. 2004AA404250)及中国科学院二期创新“微型生化分析系统关键技术研究”资助项目

1 引言

微流体混合器主要用作生化分析仪的微传感器以及用于生物芯片和微量化学分析与检测系统中的不同样品、不同试剂之间的混合,作为微型生化分析仪的一个重要组成部分,近年来取得了很大的进展。根据有无外加驱动器,分为静态、动态混合器。前者主要依靠改变混合器中微型管道的几何形状或分流来增加微流体的有效接触面积来增强扩散,提高液体的混合效率。目前已经研制出了分层式、T型、C型等多种静态混合器^[1-3]。但是仅仅依靠分子扩散实现流体混合会导致混合时间过长、混合效率低。而动态混合器能较好的解决这个问题,它主要通过微型反应器 and 外加力场来实现对样品的混合操作。近几年来已经提出了采用超声波、压电、磁力等驱动方式实现动态混合。比较典型的是美国夏威夷大学的 Eun Sok Kim 于 1997 提出的采用压电自聚焦式声波传感器进行动态混合的方法^[4],该方法速度快、结构紧凑,但是驱动电压偏高,与微器件的功率不匹配。此外,有些方法只适合于有极性或磁性的液体^[5-6],甚至需要在液体中添加导磁颗粒;有些需要较大体积的动力装置^[7]等等;因此应用受到了很大的限制。国内对于微流体混合器的报道多见于综述。

文中的混合器是通过电磁激励下的高弹性薄膜谐振驱动对流场产生周期性挠动形成有漩流动,从而形成强对流来实现样品与试剂充分混合。本文从减少混合时间、提高混合效率着眼,利用结构动力学、计算流体动力学理论(computational fluid dynamics,简称 CFD),对微混合器进行动力学数值模拟。分析振动膜的振动特性,并在此基础上进行了谐响应分析得出混合器深度方向上的最大响应位移。将结构动

力学的分析结果耦合到流体动力学数值模型上,得出使微混合器在较短的时间内达到最好的混合的最佳振动模式、频率及振幅。振动膜的动力特性及微混合器的流体动力特性的数值模拟皆基于有限元法,分别运用商业有限元软件 ANSYS 与 CFX 进行数值模拟。

2 振动膜的动力学数值模拟

混合器实际工作时承受电磁力动载荷,为使混合更剧烈,希望电磁力的频率与振动体系的自然频率一致能发生共振,迫使被混合液体发生较为剧烈的紊流,因此有必要对振动膜做动力学分析,来确定惯性(质量效应)和阻尼起重要作用时混合器的动力学特性。其通用运动学方程^[8]为:

$$[M]\{\ddot{u}\} + [C]\{\dot{u}\} + [K]\{u\} = \{F\}, \quad (1)$$

式中, $[M]$ 、 $[C]$ 、 $[K]$ 分别为混合器的质量、阻尼、刚度矩阵, $\{\ddot{u}\}$ 、 $\{\dot{u}\}$ 、 $\{u\}$ 分别为节点加速度向量、节点速度向量、节点位移向量, $\{F\}$ 为外力向量。对 n 个自由度系统 $[M]$ 、 $[C]$ 、 $[K]$ 都是 $n \times n$ 矩阵,它们构成混合器的空间模型。

2.1 模态分析

模态分析是忽略阻尼的自由振动分析,即 $\{F\} = 0$, 其运动方程(1)变为:

$$[M]\{\ddot{u}\} + [K]\{u\} = \{0\}, \quad (2)$$

应用模态分析来确定设计中的混合器的振动特性(固有频率和模态),它是其他更为深入动力学分析的起点。从而求出各阶固有圆角频率 ω_i 的平方和各阶固有振型为列组成的模态振型矩阵。在 ANSYS 中,结果文件是输出各阶自然频率 f_i , 其中 $f_i = \frac{2\pi}{\omega_i}$ 。

2.1.1 数值模型及边界条件建立

微混合器振动膜的模态分析数值模型包括振动膜与永磁薄片,振动膜与永磁薄

片固联在一起,两者之间没有相对运动。振动膜的材料为 DOW CORNING 公司的 Sylgard[®]184,模型为半径 3 mm 的圆形薄片。永磁薄片材料为 NdFeB,模型为半径 1.5 mm 厚度 1 mm 的薄圆片。由于工艺的原因,振动膜的厚度一般在 50~250 μm 之间,模拟计算中振动膜的厚度变化只考虑此范围内的。

数值模拟中考虑到振动膜的工作状况,固定其周边边缘。模拟中的有关材料参数如表 1 所示:

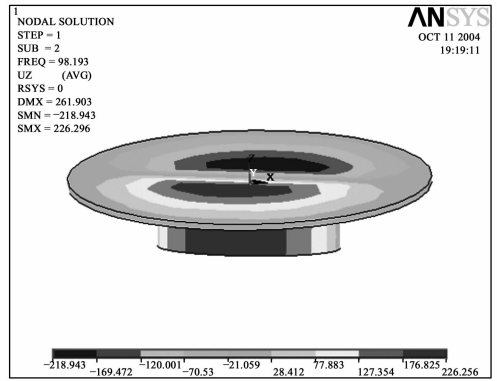
表 1 数值模型中的有关材料参数

Tab.1 Material properties in the numerical model

| | PDMS ^[9] 振动膜 | NdFeB ^[10] |
|------------------------|-------------------------|-----------------------|
| 弹性模量(Pa) | 750e3 | 156e12 |
| 泊松比 | 0.4 | 0.114 |
| 密度(Kg/m ³) | 1 050 | 7 070 |

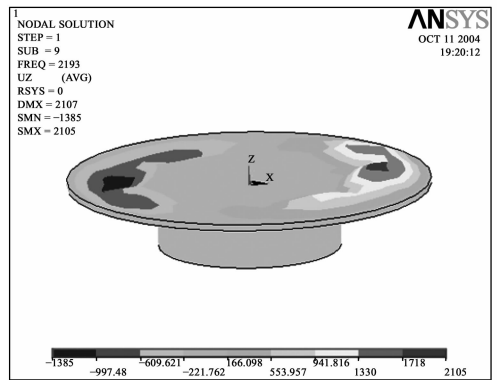
2.1.2 结果分析

模拟分别对不同厚度的振动系统进行振动分析,扩展了 15 阶模态。计算结果发现,不同厚度的振动膜在同一阶的固有振型基本一致。以厚度为 100 μm 的振动膜为例,比较典型的几种固有振型如图(1)所示:



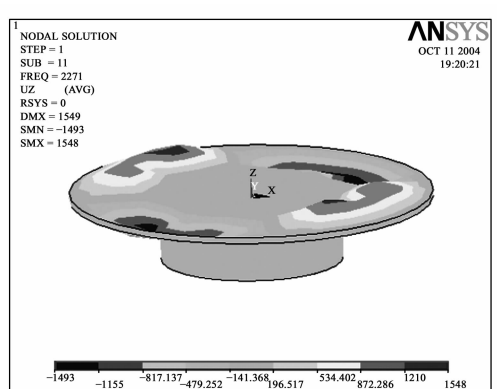
(b)2 阶振型

(b)The second mode shape



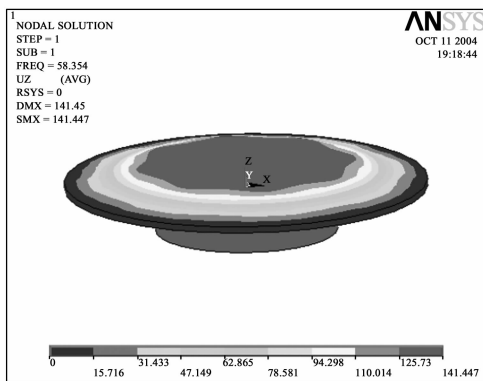
(c)9 阶振型

(c)The ninth mode shape



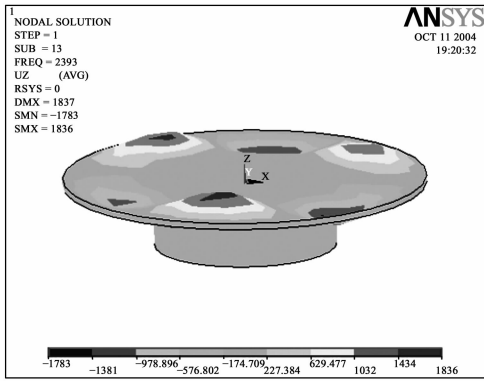
(d)11 阶振型

(d)The eleventh mode shape



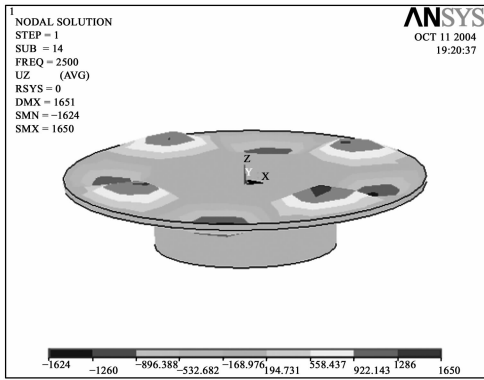
(a)1 阶振型

(a)The first mode shape



(e) 13 阶振型

(e) The thirteenth mode shape



(f) 14 阶振型

(f) The fourteenth mode shape

图 1 典型的几种固有振型云图

Fig. 1 Contour plots of typical mode shapes

从图中可以看出,越是低阶的振动模式,其振型越简单。在低阶振动中永磁薄片与振动膜都参与振动,属于整体振动;随着阶数的提高,永磁薄片的振动程度越来越轻微,就只是振动膜的局部振动了。一般来说,低阶振型对结构的动态特性起决定作用,越是低阶影响越大。在混合器混合过程中也是如此,希望整个的振动系统都参与振动,以提高混合效率,所以实际应用中尽量采用低阶振动模式。

2.2 谐响应分析

以模态分析为基础,应用谐响应分析来分析连续的周期性电磁力在混合器中产生的持续的周期响应(谐响应),及确定混

合器承受随时间按正弦(简谐)规律变化的载荷时稳态响应。这种计算只计算稳态受迫振动,发生在激励开始时的瞬态振动不在谐响应分析中考虑。其运动通用方程里面的 $\{F\}$ 由下式得出

$$\{f\} = \{f_{\max}(\cos \varphi + i \sin \varphi)\} e^{i\omega t}, \quad (3)$$

f_{\max} 为最大力, ω 为圆角频率, φ 为相位角。

2.2.1 数值模型及边界条件建立

数值模型、边界条件与前面的模态分析时一样。在谐响应分析中需要施加周期性激振力,在这里只需在永磁薄片的下表面加上 f_{\max} 即电磁激振力就可以了。

2.2.2 结果分析

模拟结果发现:

(1) 振动膜的最大响应位移的分布区域在振动膜的中间或四周;振动膜的最大响应位移在中心时,振动频率在一阶自然频率附近;振动膜的最大响应位移在四周时,振动频率在二、三阶自然频率附近且最大响应位移有两个,方向相反,在同一条直径上(由于振动膜振动数值模型为回转体,二、三阶振型实质上是相同的);

(2) 不同厚度的振动膜的谐响应位移随厚度的增加而降低;在 $50 \sim 250 \mu\text{m}$ 之间时, $50 \mu\text{m}$ 厚的振动膜能取得最大的谐响应位移;

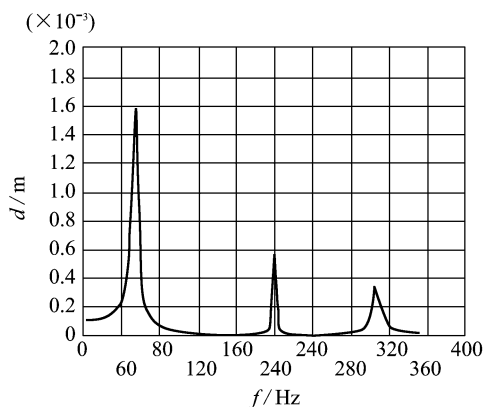
(3) 振动膜的最大谐响应位移在一阶振动中时谐响应位移最大为 1.58 mm ,如图 2(a)所示;

(4) 振动膜的最大谐响应位移在二、三阶振动中时谐响应位移最大为 1.21 mm ,如图 2(b)所示。

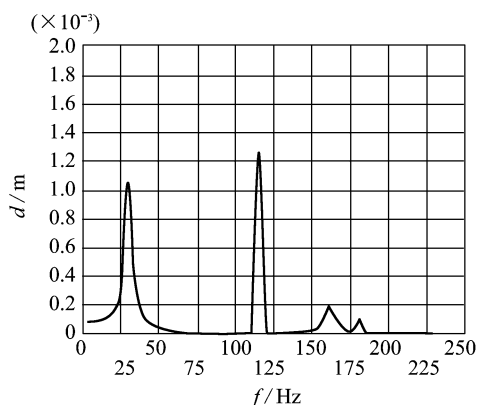
其余几阶的响应位移皆小于 0.5 mm ,在此不作详细介绍。

3 微混合器的流体动力学模拟

微流体动态混合器主要通过微流体通道、微型反应器和外加力场而实现对样品



(a) 最大响应位移在振动膜的的中心时

(a) D_{\max} in the center of membrane

(b) 最大响应位移在振动膜的的四周时

(b) D_{\max} around the membrane

图 2 谐响应位移

Fig. 2 Displacement of harmonic response

的混合操作,使其产生紊流。物质在紊流流体中的扩散叫对流扩散。对流扩散包括分子扩散和涡流扩散,即在紊流流体中既有因分子热运动而产生的分子扩散,也有因素流体质点的激烈混合而产生的涡流扩散。对流扩散通量的计算公式^[11]如下:

$$J = -(D + D_e) \frac{dc}{dz}, \quad (4)$$

式中, J 为对流扩散通量, $\text{mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$; D 为分子扩散系数, m^2/s ; D_e 为涡流扩散系数, m^2/s ; C 为扩散物质的浓度 (mol/m^3); $\frac{dc}{dz}$ 为浓度梯度, 扩散物质在扩散方向上浓

度随距离的变化率。 D_e 除了受流体的性质影响外, 主要与流体的紊流程度有关。当流体处于层流时, $D_e = 0$, 上式就成为分子扩散速率的计算公式; 当流体处于高度紊流状态时, $D \ll D_e$ 。可见, 要想减少混合时间, 提高混合效率, 就要提高 J , 就要提高 D_e , 就要找出紊流程度最高的最佳振动模式。在宏观条件下, 一般认为当 $Re < 2\ 100$ 时, 流动为层流; 当 $Re > 4\ 000$ 时, 流动为紊流; Re 处在两者之间时, 为过渡状态。 Re 越大, 紊流越激烈。将结构动力学模拟的低阶振动模式以边界条件的形式耦合到流场分析中, 算出对应模式的 Re , 也就得出了最佳紊流状态对应的振动模式, 也就找到了利于混合的最佳条件。

3.1 流体动力学数学模型及边界条件建立

混合器的数学模型简化为半径 3 mm, 深 5 mm 的圆柱腔体。混合器工作时为开放体系, 存在自由表面, 应用先进的 VOF (volume fraction) 方法, 很好地解决了这一问题。其基本思想是: 设某一控制系统中第 i 相的 VOF 为 α_i ($0 \leq \alpha_i \leq 1$), 则

$\alpha_i = 0$ 时, 控制系统中无第 i 相流体;

$\alpha_i = 1$ 时, 控制系统中全部为第 i 相流体;

每个控制系统内各相 VOF 之和等于 1, 即 $\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1$ 。模拟中的流体有理想空气、25℃ 的水、墨水 (假定与 25℃ 的水的物理参数一致)。

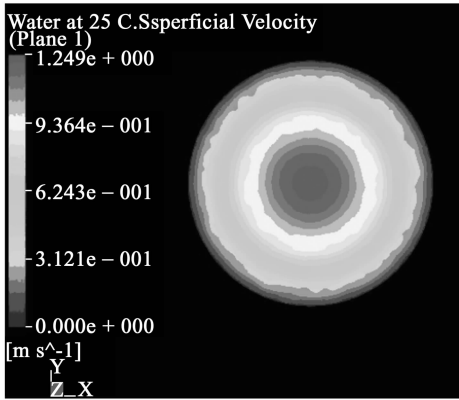
$0 < \alpha_i < 1$ 时, 控制系统包含相界面;

每个控制系统内各相 VOF 之和等于 1, 即 $\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1$ 。模拟中的流体有理想空气、25℃ 的水、墨水 (假定与 25℃ 的水的物理参数一致)。

振动膜定义为活动墙 (move wall), 具体运动方式为前面所做的结构动力学数值模拟里面的低阶振动模式, 如图 3 所示。混合器顶部开放, 定义为开口边界 (opening)。四壁为固壁边界 (no slip wall)。

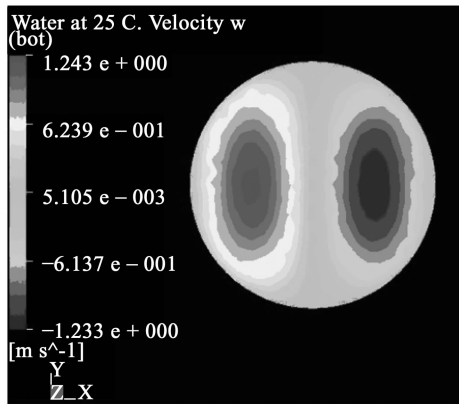
计算主要基于前面所做的结构动力学模拟的低阶振动模式, 如下所述的三种物理边界:

计算主要基于前面所做的结构动力学模拟的低阶振动模式, 如下所述的三种物理边界:



(a)一阶

(a)First mode shape



(b)二阶

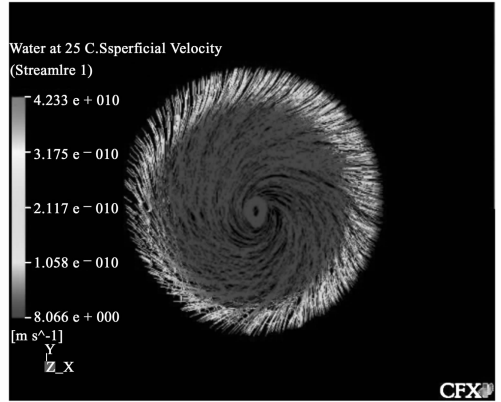
(b)The second mode shape

图 3 振动膜的速度云图

Fig. 3 Velocity contour of membrane

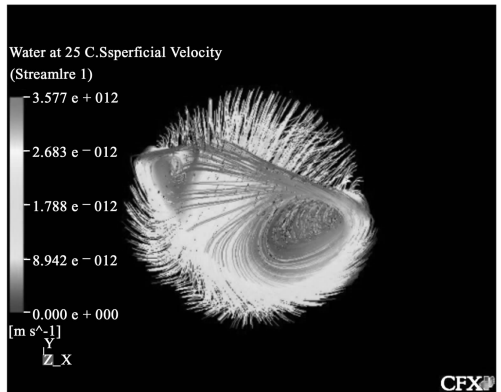
$$R_e = \frac{\rho v D_h}{\mu} \quad (5)$$

式中, ρ 为流体的密度, v 为流体的速度,



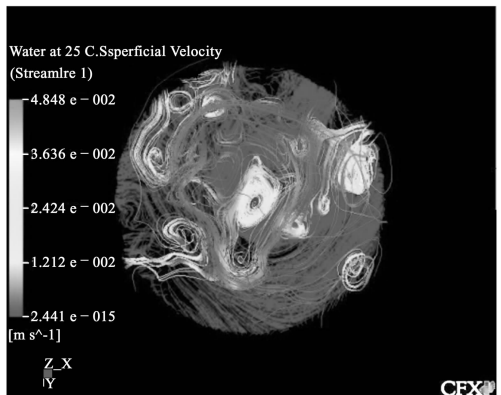
(a)物理边界(1)

(a)Boundary condition (1)



(b)物理边界(2)

(b)Boundary condition (2)



(c)物理边界(3)

(c)Boundary condition (3)

图 4 CFD 计算的 VOF 流线结果

Fig. 4 Streamline results of VOF

(1) 振动模式为一阶时, 取振动振幅为 1.58 mm, 频率为一阶频率;

(2) 振动模式为二阶时, 取振动振幅为 1.21 mm, 频率为二阶频率;

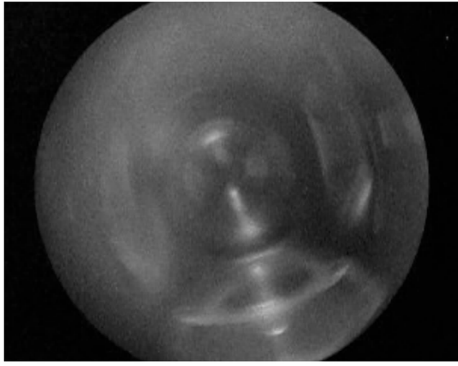
(3) 振动模式为一阶时, 取振动振幅为 1.58 mm, 频率为 5 倍的一阶频率;

第三种物理边界主要针对提高振动频率能否提高混合效率。

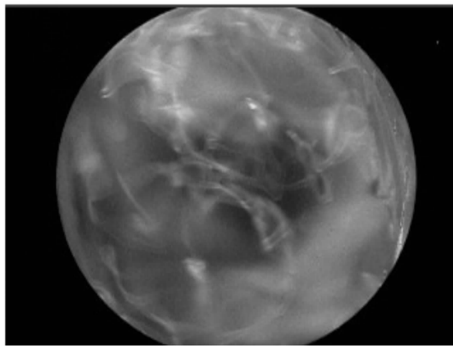
3.2 结果分析

图 4 所示分别对应上面的三种物理边界时所取得的数值模拟结果, 显示为液体组分的 V_{super} (superficial velocity, 在 CFX 中 $V_{super} = VOF_i \times V_i$)。由式(5)可以算出 R_e [12],

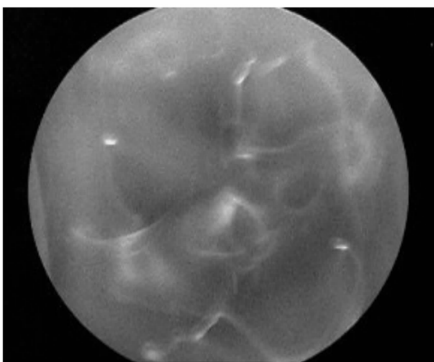
D_h 为水力直径, μ 为流体的动力粘性系数。物理边界为(1)时, $R_e = 7\ 370$; 物理边界为(2)时, $R_e = 24\ 644$; 物理边界为(3)时, $R_e = 1\ 280$ 。所以物理边界为(2)时, R_e 最大, 紊流最激烈, 混合效果更为理想。在试验时, 尽量采用振动模式 2。



(a) 一阶自然频率
(a) f_1



(b) 二阶自然频率
(b) f_2



(c) 5 倍的一阶自然频率
(c) $5f_1$

图 5 数码相机拍摄的混合状态

Fig. 5 Mixing conditions from digital camera

为验证数值模拟的正确性, 对微混合器进行了水与红墨水的混合试验, 取振动频率分别接近为一阶自然频率、二阶自然频率、5 倍的一阶自然频率, 混合过程通过数码相机拍摄下来。混合效果分别如图 5 (a)、(b)、(c) 所示, 当振动频率在二阶自然频率附近时, 振动最剧烈。虽然一阶振动时响应位移最大, 但是其振动的剧烈程度是由振幅、自然频率共同决定的。

数值模拟时, 为简化计算节省计算机资源, 对模型个别细节不影响性能的地方进行了简化处理, 对其力学边界进行了理想状态的近似处理。比如, 数值计算中混合器是圆柱体, 而实际的混合器在光路通过的地方有两个平面; 数值计算中假定混合器的四周为理想的固壁, 而实际上 PDMS 有弹性, 在混合的过程中不是固定不动的。所以, 初步认为试验结果与数值模拟结果之间的偏差是由于数值模拟时模型简化、力学边界的近似引起的。

4 结 论

通过对微流体动态混合器进行模态分析、谐响应分析, 得出振动膜的振动特性及其最大响应位移, 然后将其结果应用 CFX 耦合到流体动力学模拟中, 求出低阶振动时的 R_e 。得出: 振幅、振动频率共同决定了混合的效率; 第二阶振动模式的 R_e 最大。

在数值模拟结果的基础上对混合器进行设计、优化。简单的混合试验发现: 当振动频率在二阶自然频率附近时, 紊流最剧烈, 其涡旋结构导致流体内部的激烈运动, 使混合程度加剧, 时间缩短, 效率提高。

动力学数值模拟与试验的结果相吻合。也证明了 CFD 在微流体混合研究中是一种切实可行的方法。

参考文献:

- [1] SCHWESINGER N, FRANK T, WURMUS H. A modular microfluid system with an integrated micromixer[J]. *Micromech. Microeng.*, 1996, (6):99-102.
- [2] WONG S H, WARD M C L, WHARTON C W. Micro t-mixer as a rapid mixing micromixer[J]. *Sensors and Actuators B*, 2004, 100:359-379.
- [3] LIU R H, STREMLER M A, SHARP K V, *et al.* Passive mixing in a three-dimensional serpentine microchannel[J]. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2000, 9(2):190-197.
- [4] ZHU X, KIM E S. *Micromachined self-focusing acoustic wave transducers*[D]. The University of Hawaii, 1997.
- [5] YANG Z, MATSUMOTO S, GOTO H, *et al.* Ultrasonic micromixer for microfluidic systems [J]. *Sensors and Actuators A*, 2001, 93:266-272.
- [6] SUZUKI H, HO CH M. A magnetic force driven chaotic micromixer[C]. *Proc. 15th Int. conf. on MEMS*, 2002:40-43.
- [7] YANG ZH, GOTO H, MATSUMOTO M, *et al.* Active micromixer for microfluidic systems using lead-zirconate-titanate(PZT)[J]. *Electrophoresis*, 2000, 21:116-119.
- [8] 马钊英, 王家林. 机械工程结构强度计算有限元基础[M]. 长春:吉林科学技术出版社, 1990.
MA D Y, WANG J L. *Intensity computation of mechanical engineering structure base of finite element method*[M]. Changchun: Science and Technology Press of Jilin, 1990. (in Chinese)
- [9] *Information about high technology silicone materials*®1991 Dow Corning Corporation[Z]. 1991.
- [10] 周寿增, 董清飞. 超强永磁体-稀土铁系永磁材料[M]. 北京:冶金工业出版社, 1999.
ZHOU SH Z, DONG Q F. *Super permanent magnets-thulium materials*[M]. Beijing : Metallurgy Industry Press, 1999. (in Chinese)
- [11] 刘植. 化工原理[M]. 北京:中国电力出版社, 1997.
LIU ZH. *The principle of chemical industry*[M]. Beijing: China Electric Power Press. 1997. (in Chinese)
- [12] 景思睿, 张鸣远. 流体力学[M]. 西安:西安交通大学出版社, 2001.
JING S R, ZHANG M Y. *Fluidic mechanics*[M]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press. 2001.

作者简介:李淑娴(1978—),女,山东莱芜人,博士研究生,从事微光机电系统的研究。