

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

波型管道微混合器之數值模擬與設計 研究成果報告(精簡版)

計畫類別：個別型
計畫編號：NSC 95-2221-E-168-035-
執行期間：95年08月01日至96年07月31日
執行單位：崑山科技大學機械工程研究所

計畫主持人：周煥銘

計畫參與人員：碩士班研究生-兼任助理：杜政昀、賴信良、王崇漢、謝承軒

處理方式：本計畫可公開查詢

中華民國 96年10月23日

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

計畫名稱：波型管道微混合器之數值模擬與設計

計畫編號：95-2221-E-168-035

執行期限：95 年 08 月 01 日至 96 年 07 月 31 日

主持人：周煥銘 執行機構及單位名稱：崑山科技大學 機械工程系（所）

摘要

在微流體系統中，因受限於低雷諾數之故，因此流體間的混合僅能藉由彼此間的擴散效果來完成。因此，為了企圖改良微流體系統之混合效果，本文使用一週期擾動速度在渠道入口，並通過具波形表面之渠道，分析流體間之混合效果。藉由數值模擬的方式，我們分析渠道內波形表面之震幅與波形表面長度對流體混合效果之影響。結果顯示，當我們增加渠道波形表面之震幅或延長波形表面之長度，均能有效地改良其混合效率。

關鍵詞： 混合；微混合器；波形表面；數值模擬

1. 前言

生物晶片是結合了半導體精密製造技術與生物醫學科技，產業微型化、快速、平行處理的生物與醫療用元件、軟體與系統的新技術。它的應用領域極廣，包括了新藥開發、血液與疾病檢測、國防軍事、環境監控及工業食品檢驗等。而製作生物晶片時，如何使流體在短時間、短距離內能快速達混合、分離等機制，為其基本要求。因此，微渠道的設計為一不可或缺的環節。而在微全程分析系統(micro total analysis system, μ -TAS)、生化檢驗或藥物傳輸等微裝置上，通常需將兩種不同溶液迅速地達成混合，因此能設計出快速混合的微混合器是非常重要的。

而在大部分的微渠道系統中，無論是何種驅動方式，均受限於低雷諾數的影響，因此，流體流速相當緩慢，無法像一般巨觀下的渠道能藉由高雷諾數或紊流來達成快速混合效果，只能藉由彼此間的擴散效應來增加混合效率。因此，要在短時間、短距離內要達

成均勻混合是一件非常困難的工作。所以，有必要設計出能快速混合的微混合器。

一般而言，微混合器可區分為被動式微混合器與主動式微混合器。被動式微混合器典型地應用特殊的渠道結構，使流體流經此渠道產生混沌混合效果，或藉此增加流體間之接觸面積，以加速流體之混合效果。一些已被開發出之被動式混合策略包含：交錯鯊骨式混合器(Staggered herringbone mixer)[1-3]、蜿蜒形混合器(Serpentine mixer)[4-5]、多交錯管混合器[6-7]及鋸齒狀或波行之混合器(zigzag/wave-like mixer)[8-9]等等。主動式微混合器則是利用外加結構或外加勢能，產生週期性或非週期性之擾動，加速流體間之混合效果。典型地主動式混合策略包含：電動不穩定混合器(electrokinetic instability mixer)[10-11]、壓力脈衝式混合器[12-13]、週期電場混合器[14-15]及磁電耦合混合器[16-18]等等。

在過去混合器的設計上，大多僅單獨地考慮主動式混合策略或被動式混合策略；但若能結合兩種混合技巧，將可快速有效地大大提升其混合效果。因此，本文將結合主、被動混合策略，以改良流體間之混合效果。在這個混合技巧中，我們運用週期的擾動速度於渠道入口，並引導此受擾動的流體通過具波形表面之渠道。藉由數值模擬的方式，我們將分析相關參數對流體間之混合效果。

2. 理論分析

2.1 統御方程式

考慮如圖 1 之具波形表面的幾何結構，其中 W 為微渠道之特徵寬度； L_w 為波形表面之長度； L_e 與 L_o 則

分別為渠道之入口與出口之長度。若我們假設使用之流體為牛頓、不可壓縮液體；忽略浮力及重力效應；且兩種不同之混合流體有相同之擴散係數與無化學反應下，則描述電滲流動的統御方程式如下：

(i) stream function/vorticity 方程式

我們可藉由 stream function/vorticity 方程式來描述渠道內之流體流動情形：

$$\nabla^2 \psi = -\omega, \quad (1)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\bar{V} \cdot \nabla) \omega \right] = \mu \nabla^2 \omega, \quad (2)$$

其中， ψ 為 stream function， ω 為 vorticity， ρ 為流體密度， \bar{V} 為流體之速度，而 μ 則為流體之黏滯係數。

(ii) 流體濃度方程式

流體於渠道內之混合可藉由下式之對流、擴散方程式來描述：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\bar{V} \cdot \nabla) C = D_i \nabla^2 C, \quad (3)$$

其中， C 為流體濃度， D_i 則為流體之擴散係數。

我們假設無因次參數如下：

$$t^* = \frac{u_m}{W} t, x^* = \frac{x}{W}, y^* = \frac{y}{W}, \bar{V}^* = \frac{\bar{V}}{u_m}, \omega^* = \frac{\omega W}{u_m},$$

$$\psi^* = \frac{\psi}{u_m W}, C^* = \frac{C}{C_{ref}}, \quad (4)$$

其中， u_m 為流體平均速度， C_{ref} 則為參考濃度。

應用這些無因次參數，則可得無因次之統御方程式：

$$\nabla^{*2} \psi^* = -\omega^*, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \omega^*}{\partial t^*} + (\bar{V}^* \cdot \nabla^*) \omega^* = \frac{1}{\text{Re}} \nabla^{*2} \omega^*, \quad (6)$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + (\bar{V}^* \cdot \nabla^*) C^* = \frac{1}{\text{Pe}} \nabla^{*2} C^*, \quad (7)$$

其中， $\text{Re} = \frac{\rho u_m W}{\mu}$ 為雷諾數， $\text{Pe} = \frac{u_m W}{D_i}$ 為 Peclet 數。

因為目前模擬為非正交之波形渠道，因此我們可將(5)-(7)式之無因次統御方程式，依座標轉換方式，將其轉換至任意曲線之座標系統，其轉換後之統御方程式，如下：

$$\alpha \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial \xi^2} + 2\beta \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial \eta^2} + P \frac{\partial \psi^*}{\partial \xi} + Q \frac{\partial \psi^*}{\partial \eta} = -\omega^*, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \omega^*}{\partial t^*} + U \frac{\partial \omega^*}{\partial \xi} + V \frac{\partial \omega^*}{\partial \eta} = \frac{1}{\text{Re}} \left(\alpha \frac{\partial^2 \omega^*}{\partial \xi^2} + 2\beta \frac{\partial^2 \omega^*}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 \omega^*}{\partial \eta^2} + P \frac{\partial \omega^*}{\partial \xi} + Q \frac{\partial \omega^*}{\partial \eta} \right), \quad (9)$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + U \frac{\partial C^*}{\partial \xi} + V \frac{\partial C^*}{\partial \eta} = \frac{1}{\text{Pe}} \left(\alpha \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi^2} + 2\beta \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 C^*}{\partial \eta^2} + P \frac{\partial C^*}{\partial \xi} + Q \frac{\partial C^*}{\partial \eta} \right), \quad (10)$$

其中， ξ 、 η 為轉換後之座標， α 、 β 、 γ 、 P 與 Q 則為座標轉換之參數， U 、 V 為座標轉換後之速度，而 J 則為 Jacobian 參數。

2.2 初始與邊界條件

模擬的物理模型如圖 1 所示，首先我們假設一均勻速度進入渠道，渠道壁面無滑動現象，並假設渠道長度足以達完全發展流。至於濃度邊界條件的設定上，我們假設有一無因次濃度 $C_A^* = 1$ ，經由渠道下半段入口進入渠道；且有另一無因次濃度 $C_B^* = 0$ ，經由渠道上半段入口進入渠道。

為了改良混合效果，我們假設在某一瞬間，渠道入口受一週期性的擾動速度影響，此週期性擾動速度可藉由下式表示：

$$u_{in}^* = 1 + \alpha_p \sin(2\pi^* St + \theta) \quad (11)$$

其中， α_p 為擾動速度之震幅， θ 為擾動速度之相位差。至於 Strouhal 數則定義為：

$$St = \frac{fW}{u_m}, \quad (12)$$

其中， f 為擾動速度之頻率。圖 2 繪出使用此週期擾動速度之圖形。

2.3 數值法與格點系統

我們使用 BTCS 有限差分法離散(8)-(10)之統御方程式；在對流項的處理上，則利用 QUICK 法離散對流項，以確保其數值計算之精度。而離散後之統御方程式則使用 ADI 疊帶法求解。

至於在波形表面的描述上，我們可使用 $f(x^*) = A_m[1 - \cos(2\pi x^*)]$ 描述波形表面，其中， A_m 為無因次的波形表面之震幅，其所產生之格點系統，如圖 3 所示。

2.4 混合效率

為了評估渠道內各截面的定量混合效率 (mixing efficiency) σ ，可定義混合效率為[19]：

$$\sigma(x) = \left[1 - \frac{\int_{\text{lower surface}}^{\text{upper surface}} |C^* - C_\infty^*| d\eta}{\int_{\text{lower surface}}^{\text{upper surface}} |C_0^* - C_\infty^*| d\eta} \right] \times 100\%, \quad (13)$$

其中， C^* 為無因次化之濃度， C_∞^* 為在完全混合時之無因次化濃度， C_0^* 則為完全為混合之無因次化濃度。

3. 結果與討論

模擬的模型如圖 1 所示。我們假設渠道長度 $L=20W$ ，渠道入口長度則為 $L_e=5W$ ；並假設入口擾動速度的頻率、震幅與相位差則分別為 $f=25\text{Hz}$ 、 $\alpha_p=1.5$ 與 $\theta=180$ ；且流體之擴散係數為 $D_i=3 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 。

圖 4 為具波形震幅 $A_m=0.5$ 與波段長度 $L_w^*=6$ 之濃度場分佈圖。在還未受入口週期速度影響下，當流體通過具波形表面之微渠道時，流體間的混合本質上為層流，僅能藉由彼此間之擴散效應來達成其混合效果。但因流體通過具波形之表面，使得流體能沿著一彎曲之流動路徑流動，可藉此來改良其擴散效果，如圖 4(a) 所示。當我們進一步應用週期擾動速度擾動流體時，我們可發現流體間會因此週期性的擾動，使其產生拉伸與摺疊效果，因此可進一步地改良流體間之混合行為，如圖 4(b) 所示。

圖 5 則為沿渠道之定量混合效果。結果顯示，當流體流經直管時，其混合效果於渠道出口僅為 22%；但當我們將渠道設計為波形時，我們可發現於出口處之混合效果則增加為 29%；若進一步地施加週期擾動力於入口處時，我們則可發現於渠道出口處之混合效率可有效地提升至 70%。此結果證實，藉由組合主、被動混合技巧，將可有效地提升流體間之混合效果。

圖 6 則為具不同波形表面震幅下之渠道出口處的定量混合效果。我們可發現，藉由增加渠道表面之波震幅，將可有效地增加流體間之接觸面積，進而改良其混合效果。結果顯示，當波段長度為 $L_w^*=6$ 下，波震幅為 $A_m=0$ 、0.5 與 0.8 時，流體於出口處之定量混合效率分別為 65%、70% 與 82%。

圖 7 則為不同波段長度下之渠道出口處的定量混合效果。我們可發現，藉由增加波段長度，亦可有效地增加流體間之接觸面積，改良其擴散效應。結果顯示，當波震幅在 $A_m=0.8$ 下，波段長度為 $L_w=2$ 、6 與 10 時，流體於出口處之定量混合效率分別為 72%、82% 與 89%。

比較圖 7 與圖 6 可發現，若渠道入口具有相同擾動條件下，當渠道波段長度為 10 與波震幅為 0.8 時，其出口處之定量混合效率較直管於出口處之混合效率約可增加 24%。因此，可再一次證實，結合主、被動混合技巧將可有效地提升流體間之混合效果。

4. 結論

在微流體系統中，流體間之混合僅能藉由擴散達成。因此，其混合效果相當差，且需要非常長的渠道來能獲得可接受的混合效果。然而，目前研究的結果顯示，藉由組合主、被動混合技巧，也就是應用波形渠道改良擴散效果，與使用週期擾動速度於渠道入口，以增加流體間之拉伸與摺疊效果；將可有效地改良流體間之混合效果。模擬結果顯示，流體間之混合效果，可藉由增加波形表面之震幅與波壁段之長度，獲得有效的改良。整體而言，我們建議的混合方法，將可得到 89% 的混合效果。

參考文獻

- [1] A.D. Stroock, S.K.W. Dertinger, A. Ajdari, I. Mezic, H.A. Stone, G.M. Whitesides, Science 295 (2002) 647-651.
- [2] A.D. Stroock, S.K.W. Dertinger, G.M. Whitesides, A. Ajdari, Anal. Chem. 74 (2002) 5306-5312.
- [3] M. Camesasca, M. Kaufman, I. Manas-Zloczower, J.

Micromech. Microeng. 16 (2006) 2298-2311.

[4] R.H. Liu, M.A. Stremmer, K.V. Sharp, M.G. Olsen, J.G. Santiago, R.J. Adrian, H. Aref, D.J. Beebe, J. Microelectromech. Syst. 9 (2000) 190-197.

[5] D.S. Kim, S.H. Lee, T.H. Kwon, C. H. Ahn, Lab Chip 5 (2005) 739-747.

[6] B. He, B.J. Burke, X. Zhang, R. Zhang, F.E. Regnier, Anal. Chem. 73 (2001) 1942-1947.

[7] J. Melin, G. Giménez, N. Roxhed, W.V.D. Wijngaart, G. Stemme, Lab Chip 4 (2004) 214-219.

[8] V. Ménégaud, J. Josserand, H.H. Girault, Anal. Chem., 74 (2002) 4279-4286.

[9] C.K. Chen, C.C. Cho, J. Colloids Interface sci., 312 (2007) 470-480.

[10] M.H. Oddy, J.G. Santiago, J.C. Mikkelsen, Anal. Chem. 73 (2001) 5822-5832.

[11] S.M. Shin, I.S. Kang, Y.K. Cho, J. Micromech. Microeng. 15 (2005) 455-462.

[12] I. Glasgow, N. Aubry, Lab Chip 3 (2003) 114-120.

[13] I. Glasgow, S. Lieber, N. Aubry, Anal. Chem., 76 (2004) 4825-4832.

[14] H. Chen, Y. Zhang, I. Mezic, C. Meinhart, L. Petzold, in: Proc. 2003 ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition (Washington, D.C.), 2003, 55017.

[15] Y. Zhang, D. Follman, H. Chen, I. Mezic, C. Meinhart, L. R. Petzold, N.C., in: Proc. 2003 ASME International Mechanical Engineering Congress and RD&D Expo. (Washington, D.C.), 2003, 44005.

[16] H.H. Bau, J. Zhong, M. Yi, Sens, Actuators B 79 (2001) 207-215.

[17] K.S. Ryu, K. Shaikh, E. Goluch, Z. Fan, C. Liu., Lab Chip, 4 (2004) 608-613.

[18] L.H. Lu; K.S. Ryu, C. Liu., J. Microelectromech, Syst. 11 (2002) 462-469.

[19] D. Erickson, D. Li, Langmuir 18 (2002) 1883-1892.

Abstract

The straight microchannels used in conventional microfluidic devices yield a poor mixing performance because the fluid flow is restricted to the low Reynolds number regime, and hence mixing takes place primarily as a result of diffusion. In an attempt to improve the mixing efficiency of pressure-driven microfluidic flows, the current study applies periodic velocity perturbations to the species flows at the microchannel inlet and incorporates a wavy-wall section within the mixing channel. Numerical simulations are performed to analyze the respective effects on the mixing efficiency of the geometric amplitude of the wavy surface, and the length of the wavy-wall section. Overall, the results reveal that the mixing performance is improved by increasing the geometric wave amplitude or the length of the wavy-wall section.

Keywords: Mixing; Micromixer; Wavy-wall; Numerical simulation

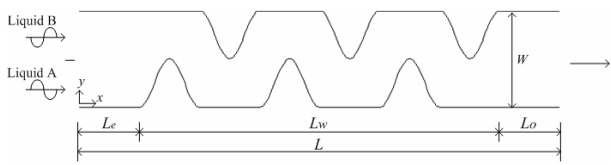


圖 1 波形渠道之幾何模型

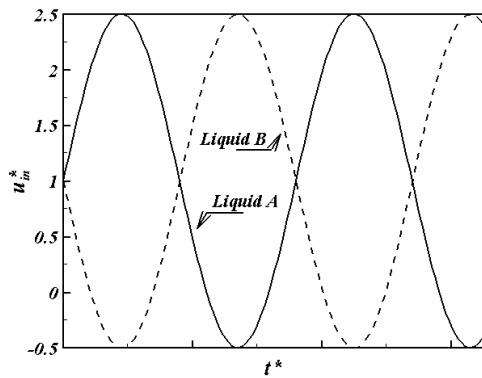


圖 2 入口週期擾動速度

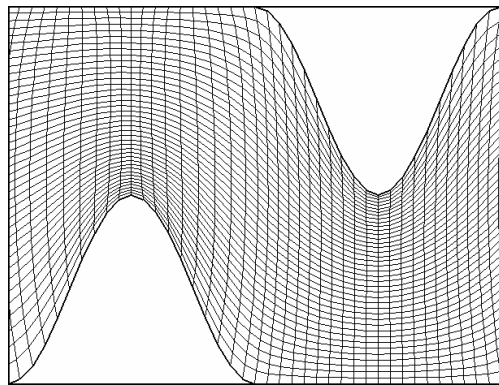


圖 3 格點系統

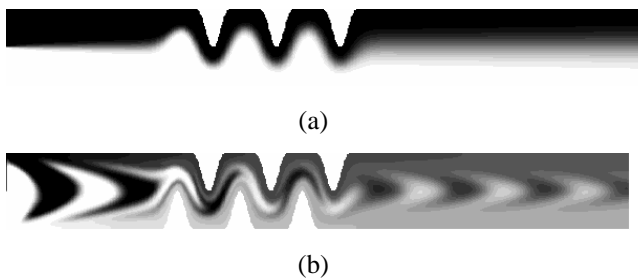


圖 4 濃度場分佈(a)t*=0, 與(c)t*=60

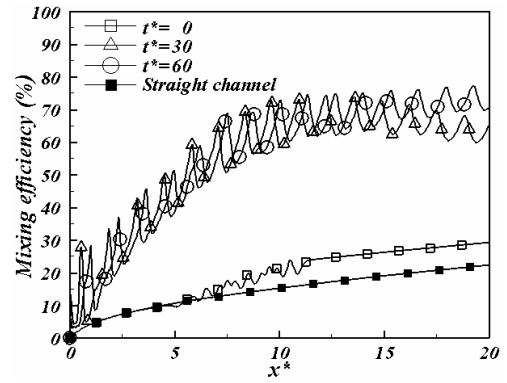


圖 5 沿渠道之定量混合效率

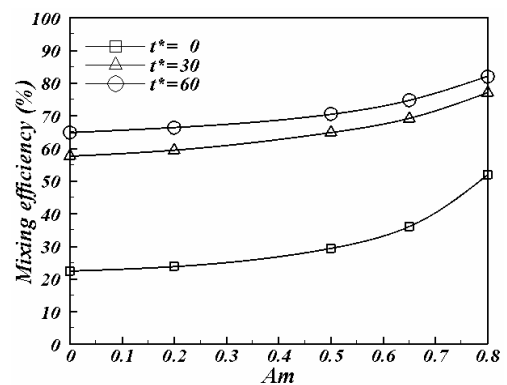


圖 6 波形表面震幅對定量混合效果之影響

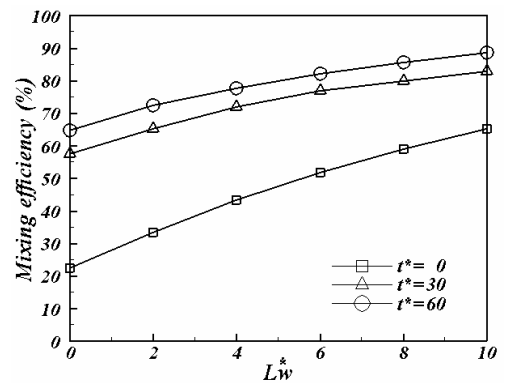


圖 7 波形表面長度對定量混合效果之影響