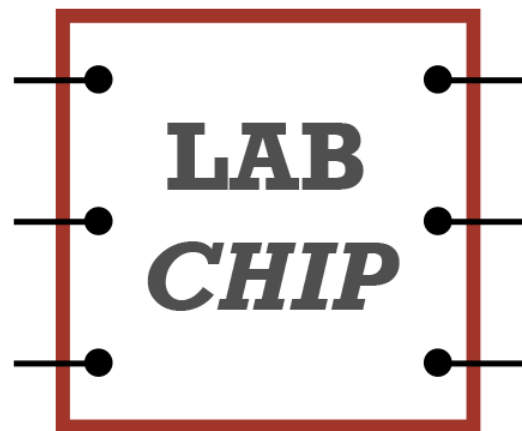




Wykorzystanie metody lattice-Boltzmann do symulacji mikroprzepływów w kanałach układów lab on a chip

W pracy przedstawiono wyniki badań doświadczalnych oraz symulacji komputerowych przepływu płynu komórkowego w mikrokanalach układu LOC, którego struktura odpowiadała strukturze naczyń włosowatych guza nowotworowego. Wyniki symulacji wskazują na znaczne odstępstwa od parabolicznego profilu prędkości płynu w kanałach. Zastosowanie geometrii dwuwymiarowej prowadziło do ponad dwudziestokrotnego skrócenia czasu obliczeń, jednak w istotny sposób wpłynęło na błędy obliczeń. Różnice pomiędzy wartościami doświadczalnymi i wynikami symulacji wahały się w granicach od 15 do ponad 100 %. Dalsze badania będą zmierzały do zastosowania kart obliczeniowych w celu skrócenia czasu obliczeń dla modeli 3D.

Metoda lattice-Boltzmann

Metoda lattice-Boltzmann jest techniką numeryczną umożliwiającą rozwiązanie równania Naviera-Stokesa (NS) dla przepływów nieściśliwych lub quasi ściśliwych, gdy efekt lepkości objętościowej jest zaniedbywany (wartość liczby Macha poniżej 1). Pomimo, iż jest ona ściśle związana z kinetyczną teorią gazu sieciowego, dla którego równanie Boltzmann (1) zostało wyprowadzone, jest to przede wszystkim narzędzie numerycznej mechaniki płynów (CFD), nazywanej też dyskretną mechaniką płynów (DFD) lub obliczeniową statystyczną mechaniką płynów.

$$\vec{u} \cdot \nabla_x f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_u f + \frac{\partial f}{\partial t} = \Omega \quad (1)$$

$$\Omega \equiv \Gamma^{(+)} - \Gamma^{(-)} = \int \left(f_{12}^{(+)} - f_{12}^{(-)} \right) g \sigma(g, \Omega) d\Omega d\vec{u}_2 m_2 \quad (2)$$

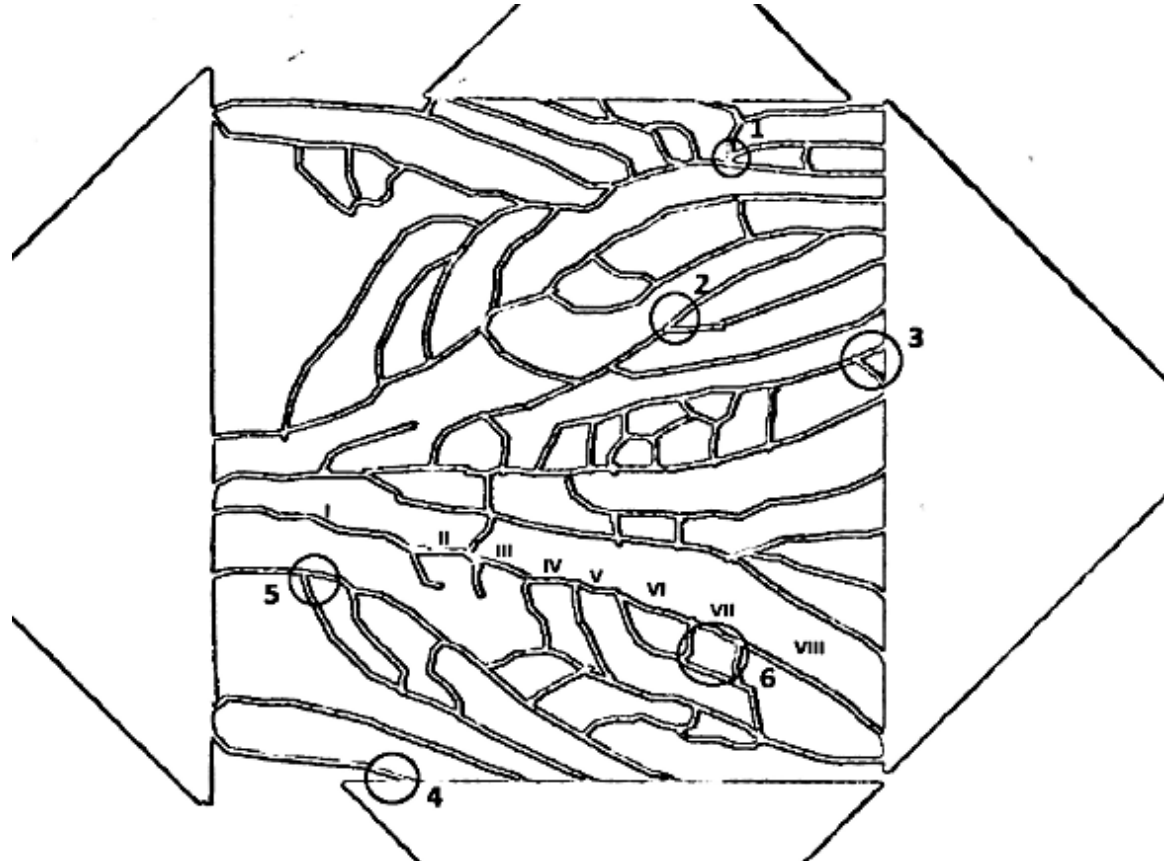
$$\Omega = \omega \left(f^{eq} - f \right) = \frac{1}{\tau} \left(f^{eq} - f \right) \quad (3)$$

gdzie: Ω jest operatorem kolizji opisanym równaniem (3) w przypadku aproksymacji Bhatnagar-Gross-Krook; f , f^{eq} są funkcjami rozkładu prawdopodobieństwa wystąpienia prędkości u dla pojedynczej cząstki, odpowiednio w chwili t i w stanie równowagi; τ , ω - parametry relaksacji modelu, F siła działająca na cząstkę, m masa cząstki.

LBM stanowi odrębny model kinetyczny równania NS i można go sklasyfikować jako jawną, lagrangeowską aproksymację hiperboliczną równania NS o następujących właściwościach: w pełni lokalną, drugiego rzędu dla czasu i przestrzeni, bezwarunkowo liniowo stabilną, wysoce wydajną dla obliczeń równoległych, zdolną do prawidłowego odwzorowania nieregularnych warunków brzegowych oraz efektów mikroskali. Metoda ta z powodzeniem została wykorzystana do symulacji szeregu procesów w inżynierii chemicznej: przepływów jedno i wielofazowych oraz przepływów w ciałach porowatych, mieszanin wieloskładnikowych z reakcją chemiczną oraz międzyfazową wymianą ciepła i masy, przemianą fazową oraz śledzeniem powierzchni międzyfazowej, w tym przepływów burzliwych, jak również przepływów w układach LOC [Zhang J., 2011].

Metodyka badań doświadczalnych

W celu weryfikacji wyników symulacji komputerowych, na wstępie przeprowadzono badania doświadczalne przepływu płynu komórkowego w mikrokanalach. Badania te zostały przeprowadzone w układzie LOC, który został zaprojektowany i zbudowany w ramach badań laboratoryjnych. Budowa układu została opisana w artykule [Szafran R., 2013]. Układ pomiarowy składał się z mikrochipa zaopatrzonego w porty przyłączeniowe dla kapilar doprowadzających i odprowadzających płyn z układu, pompy strzykawkowej Medima S1, stereoskopowego mikroskopu optycznego Motic K-400L zaopatrzonego w kamerę Moticam 2300. Przed przystąpieniem do badań układ LOC przemywano wodnym roztworem izopropanolu (9:1 izopropanol/woda) w celu jego zwilżenia i usunięcia pęcherzy powietrza. Następnie układ przemywano wodą destylowaną. Do badań wykorzystywano powszechnie dostępne, liofilizowane drożdże spożywcze (*Saccharomyces cerevisiae*). W badaniach stosowano zawiesinę o stężeniu 2 g/dm³. Zawiesina o niskiej koncentracji komórek umożliwiała prowadzenie obserwacji mikroskopowych przepływu płynu, przyczyn komórki były traktowane jako elementy wskaźnikowe, a dzięki analizie ich przesunięć na kolejnych klatkach filmu, możliwe było wyznaczenie rozkładu wartości wektorów prędkości płynu w poszczególnych kanałach, a w konsekwencji w całym systemie LOC. Na rysunku 1 przedstawiono rozmieszczenie punktów dla których analizowane były prędkości płynu w strukturze kanałów. Zawiesinę drożdży przetłaczano przez mikrosystem ze stałym natężeniem przepływu, wynoszącym 0,2 cm³/h. (0,05 μl/s). Natężenie przepływu kontrolowano za pomocą pompy strzykawkowej, do której podłączona była kapilara doprowadzający zawiesinę do układu LOC.



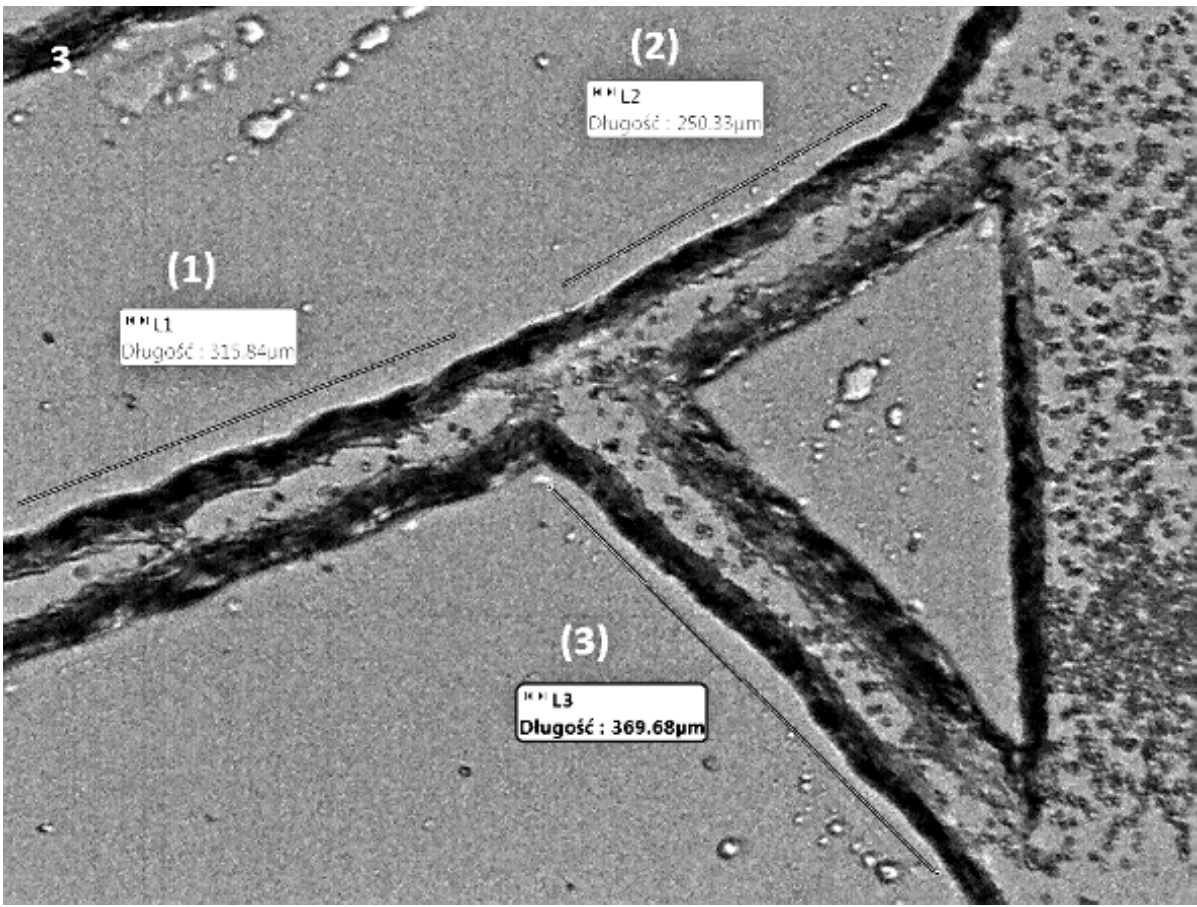
Rys. 1. Struktura mikrokanalów. Cyframi arabskimi i rzymskimi oznaczono przekroje kanałów w których wyznaczano prędkości przepływu płynu.

Kamerą mikroskopową rejestrowano przepływy komórek drożdży w poszczególnych kanałach. Sekwencje video dzielono na pojedyncze klatki na których śledzono ruch komórek w mikrokanalach. Na podstawie znanej liczby klatek na sekundę oraz wcześniej wyznaczonej liczby klatek potrzebnych do przebycia odcinka kanału, obliczano czas potrzebny na jego przebycie przez poszczególne komórki. Znając czas i przebytą drogę określano prędkość przepływu komórek w poszczególnych kanałach. Dla każdego kanału pomiar powtarzano pięciokrotnie dla pięciu różnych komórek znacznikowych.

Wykonane mikroukłady

Wyniki badań doświadczalnych

Na rysunku 2 przedstawiono zdjęcie mikroskopowe punktu pomiarowego 3 wraz z przepływającą zawiesiną komórek drożdży.



Rys. 2. Zdjęcie punktu pomiarowego 3 z widocznymi znacznikowymi komórkami drożdży.

Tab. 1. Wyniki badań doświadczalnych – wyznaczone prędkości przepływu płynu w poszczególnych kanałach układu LOC

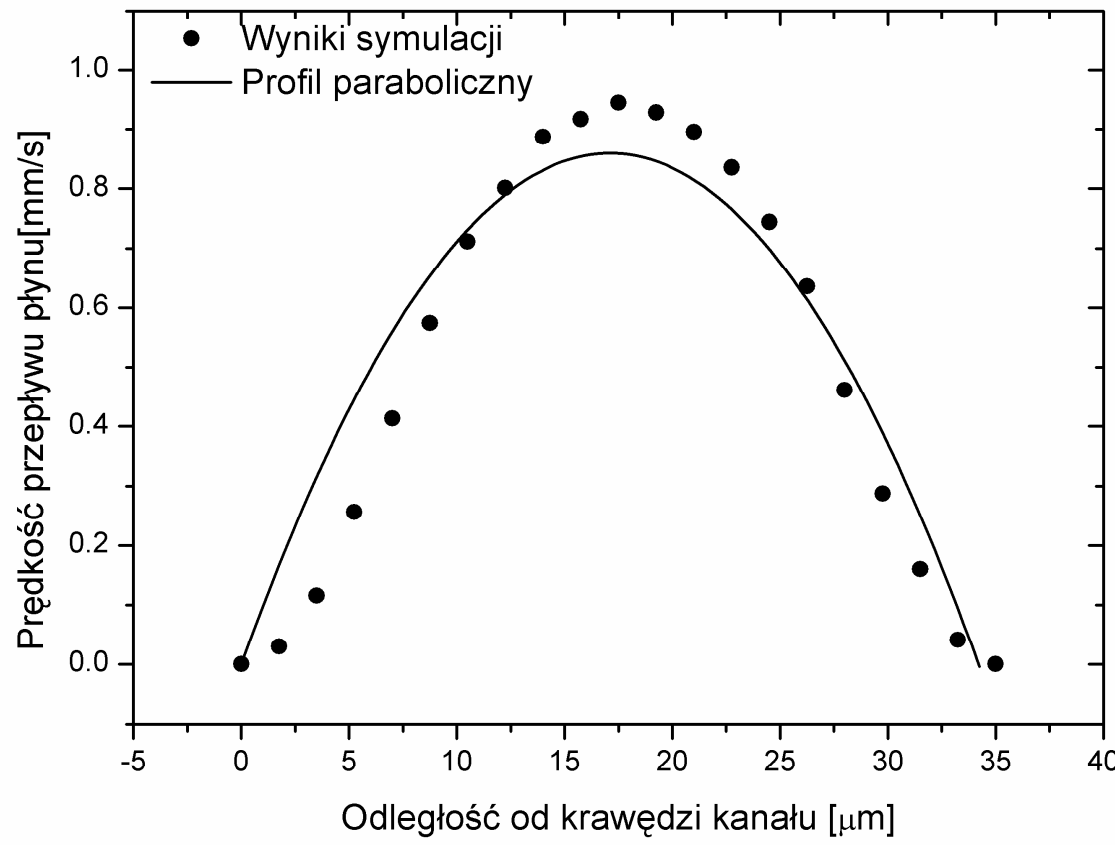
Nr punktu pomiarowego	Nr kanału	Średnia prędkość [mm/s]	Nr punktu pomiarowego	Średnia prędkość [mm/s]
1	1	0,470	I	0,271
	2	0,100		
	3	0,080		
2	1	0,351	II	0,381
	2	0,104		
	3	0,239		
3	1	0,168	III	0,197
	2	0,121		
	3	0,106		
4	1	0,767	IV	0,332
	2	0,718		
5	1	1,660	V	0,567
	2	0,468		
	3	0,206		
6	1	0,204	VI	0,595
	2	0,081		
	3	0,259		
	4	0,130		
			VII	0,330
			VII	0,214

Wyniki symulacji komputerowych LBM

Symulacje komputerowe hydrodynamiki przepływu płynu w mikrokanalach przeprowadzono z wykorzystaniem modelu 2DQ9 dla geometrii identycznej z przedstawioną na rysunku 1. Struktura mikrokanalów zaprojektowana w programie CAD została wyeksportowana w postaci rastrowego pliku graficznego, a następnie wczytywana do solvera LBM MicroFlow 0.2 (www.labchip.pwr.wroc.pl). Oprogramowanie zostało opracowane w ramach badań, jako dedykowane narzędzie do symulacji przepływów płynu w sieci mikrokanalów. Aktualna wersja bazuje na bibliotece C++ Palabos v1.3. Symulacje przeprowadzono dla następujących warunków brzegowych: na wlocie do każdego z kanałów (lewa krawędź struktury) zakładano stałą prędkość (warunek Dirichleta); na wylocie z każdego kanału (krawędzie górna, dolna i prawa) zakładano zerowy gradient prędkości *outflow* (warunek Neumanna); na ścianach kanałów warunek *bounce-back* (odpowiednik warunku braku poślizgu płynu); przyjmowano zerową początkową prędkość płynu w kanale. Parametry symulacji zebrano w tabeli 2.

Tab. 2. Parametry symulacji komputerowych

Prędkość płynu na wlocie do kanału [lattice units]	0.0125
Liczba Reynoldsa charakterystyczna dla geometrii kanału	0.56
Szerokość kanału - wymiar charakterystyczny [μm]	35
Lepkość kinematyczna [lattice units]	0.3571
Czas relaksacji τ [lattice units]	1.571
Bezwymiarowa gęstość płynu	1
Współczynnik relaksacji ω [lattice units]	0.6364



Rys. 3. Profil prędkości płynu w kanale, przekrój nr. VI

Kształt otrzymanych profili prędkości płynu odbiega od profilu parabolicznego w różnym stopniu, w zależności od położenia analizowanego przekroju. Należy jednak pamiętać, iż w pełni paraboliczny profil prędkości płynu uzyskuje się dla przepływów ustalonych w kanałach prostoliniowych o nieskończonej długości przy zaniedbaniu efektów wlotowych. W przypadku sieci kanałów o złożonej strukturze, w efekcie rozwidlania i łączenia kanałów, w których płyn przepływa z różną prędkością, obserwuje się znaczne odstępstwa o nieustalonym w czasie charakterze od zależności teoretycznych. W tabeli 3 przedstawiono wyniki symulacji – średnie prędkości płynu w przekrojach I – VIII oznaczonych na rys. 1.

Tab. 2. Wyniki symulacji: średnie prędkości płynu w kanałach, w przekrojach I – VIII.

Nr przekroju	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Prędkość płynu [mm/s]	0.48	0.63	0.53	0.57	0.60	0.50	0.55	0.53

PODZIĘKOWANIA

Badania zostały sfinansowane w ramach grantu badawczego NCN N N501 042140.