

COMSOL Multiphysics Ver.5.2 専門モジュールイントロダクション

# マイクロ流体モジュール

マイクロ流体装置の Multiphysics シミュレーション  
用ソフトウェア

物質とエネルギーバランスと化学反応

2015 12.1

## 1. マイクロ流体モジュールの概要

出典：<https://www.comsol.jp/microfluidics-module>

### マイクロ流体工学シミュレーション

マイクロフルイディクスモジュールは、マイクロ流体装置を調査するための操作しやすいツールを備えています。ラボオンチップデバイス、デジタルマイクロ流体、動電学的装置と動磁気学的装置、インクジェットのシミュレーションが主な用途です。マイクロフルイディクスモジュールには、すぐに使えるユーザーインターフェースとシミュレーションツール、すなわち単相流、多孔質媒体流、二相流、輸送現象向けのいわゆるフィジックスイインターフェースがあります。

### マイクロスケール流にスケールダウン

マイクロ流体流は、目に見える流れよりも大きさの桁が小さい長さスケールで発生します。マイクロスケールの流体の操作には、多くのメリットがあり、一般に、マイクロ流体システムは小さく、動作が速く、肉眼レベルの同じ操作に比べて少ない流体で処理できます。

エネルギー入出力も簡単に制御できます（たとえば、化学的反応で生成された熱など）。これは、システムの表面对面積体積比が巨視的システムよりはるかに大きいからです。通常、流量の長さスケールが減少すると、システムの表面積に応じて増減する特性の重要性が、流量体積に応じて増減する特性よりも相対的に上昇します。

これは、等速表面のせん断によって生成される粘性力として流量そのもので明らかであり、慣性力よりも優勢です。これらの 2 つの力の比率を示すレイノルズ数 (Re) は、通常値が小さく、したがって流れは層流です。多くの場合、ほふく (ストークス) 流の枠組みを適用します ( $Re \ll 1$ )。層流とほふく流があると、特に混合がむずかしくなります。したがって質量輸送は拡散に限定されることが多くなりますが、マイクロ流体のシステム拡散でも多くはゆっくりしたプロセスになります。これはマイクロ流体システムにおける化学輸送を表します。マイクロフルイディクスモジュールは、マイクロスケールの流量に特に留意して運動量、熱、質量輸送を処理するために作られたモジュールです。

~~~~~

## 事例紹介

COMSOL の汎用マルチフィジックス機能は、マイクロ流体装置で利用されるさまざまなマイクロスケール効果の取り扱いに最適です。電気泳動、磁気泳動、誘電泳動、電気浸透、電気湿潤など、連成した動電学的シミュレーションと磁気力学シミュレーションのセットアップは簡単です。また、このモジュールに組み込まれた低濃度種機能の化学的拡散と化学反応では、ラボオンチップ装置で発生するプロセスをシミュレートできます。希薄な気体流のシミュレーションでは、すべり流れの枠組みで流動シミュレーションを開始する特殊な境界条件を使用できます。マイクロフルイディクスモジュールには、レベル設定、位相場、移動メッシュ方式という二相流シミュレーション専用の手法もあります。以上のそれぞれについて、マイクロフルイディクスモジュールの機能には、表面引張力、毛細管力、マランゴニー効果が組み込まれています。

## マイクロ流体装置のモデル化のワークフロー

マイクロ流体装置のモデルを作成するには、CAD ファイルをインポートしてソフトウェアでジオメトリを定義するか、COMSOL Multiphysics に組み込みのジオメトリモデル化ツールでジオメトリを定義します。ジオメトリモデルのインポートには、力学 CAD モデルインポート用の CAD インポートモジュール、電子レイアウトインポート用の ECAD インポートモジュール、パッケージ.専用 CAD ソフトウェアパッケージで作成したモデルとの直接リンク用の LiveLink™ 製品といったいくつかの選択肢があります。次のステップでは、適切な流体特性を選択し、最適なフィジックスインタフェースを選択します。初期条件と境界条件をインタフェース内にセットアップします。次に、メッシュを定義します。多くの場合、COMSOL でデフォルトメッシュが自動的にできることがあります。これは物理特性依存のデフォルトですが、その問題には適切な選択肢です。ソルバが選択されます。これも関連物理特性や問題解決に適したデフォルトです。最後に、結果を表示します。以上のステップはすべて COMSOL Desktop®からアクセスできます。マイクロフルイディクスモジュールでは、固定流と時間依存性流を 2 次元と 3 次元で解決できます。また、他のアドオン製品と連成させてモデル化機能を拡張することもできます。たとえば流れの中に放たれた粒子の追跡は、粒子トレーシングモジュールとの組み合わせると可能です。

## 単相流

流量インタフェースは、圧力や流速などの物理的数量と、粘性や密度などの物理的特性で流量問題を定義します。層流のフィジックスインタフェースでは、非圧縮性流と弱圧縮性流を処理します。この流量インタフェースでは、非ニュートン流量のシミュレーションも可能です。ほふく流のフィジックスインタフェースは、レイノルズ数が 1 をかなり下回るときに使用します。これを一般にはストークス流と呼び、粘性流が優勢なときに適しています。通常は、マイクロ流体装置に使用します。

## 二相流

二相流には、レベル設定、位相場、移動メッシュ法という 3 種類の手法を使用できます。これらの手法では、流体インタフェースで区切られた 2 つの流体をモデル化します。ここでは曲率と表面引張力など、移動インタフェースを詳しく追跡します。レベル設定手法と位相場手法では、固定バックグラウンドメッシュを使用し、追加方程式でインタフェースの場所を解決します。移動メッシュ手法では、移動メッシュと境界条件の流動方程式を解いて、流体インタフェースを表現します。その場合、任意のラグランジュ-オイラー (ALE) 法でメッシュ変形の追加方程式を解きます。これらの手法のすべてとそのフィジックスインタフェースは、圧縮性層流と非圧縮性層流の両方をサポートします。どちらかの流体が非ニュートン流体になります。

## 希薄流

分子の平均自由行程が流れの長さスケールと比較可能になると希薄気体流が発生します。クヌーセン数 (Kn) は流動の希薄化効果の重要性の特性を示します。気体が希薄になると (クヌーセン数の増加につれて)、壁のひとつの平均自由行程にあるクヌーセン層によって流動に大きな影響が生じます。クヌーセン数が 0.01 未満のとき、希薄は無視され、マイクロフルイディクスモジュールの層流フィジックスインタフェースは非すべり境界条件で使用できます。少し希薄な気体 ( $0.01 < \text{Kn} < 0.1$ ) の場合、クヌーセン層は、領域の連続ナビエ-ストークス方程式と合わせて壁位置の適切な境界条件でモデル化できます。この場合、マイクロフルイディクスモジュールでは、特別なすべり流フィジックスインタフェースを利用できます。高いクヌーセン数のモデル化では、分子流モジュールが必要です。

## 多孔質媒体流

多孔質媒体を通る流れは、マイクロスケールのジオメトリでも発生します。細孔サイズがミクロン規模の場合、しばしば流れの摩擦が優勢になり、ダルシーの法則を適用できます。マイクロフルイディクスモジュールは、ダルシーの法則に基づいた多孔質媒体流専用のフィジックスインタフェースが特長です。この場合、流れに垂直なせん断応力は無視します。中間流には、ブリンクマン方程式のフィジックスインタフェースを使用できます。このフィジックスインタフェースは、せん断応力を無視できる、多孔質媒体通過流をモデル化します。ごく低速の流動に適したストークス-ブリンクマン定式化と、高速流動による影響を説明するフォルヒハイマー抗力のいずれもサポートしています。マッハ数 0.3 未満の流体には非圧縮性または圧縮性があります。

いずれの多孔質媒体もブリンクマン方程式と層流を使用するフリーおよび多孔質媒体モデル用の特別なフィジックスインタフェースは、両者の間の連成を自動的に提供します。これらのインタフェースは、マイクロ流体多孔質媒体流に適しています。用途としては、たとえばペーパーマイクロ流体や生物組織における輸送があります。

## 電気流体力学効果

マイクロスケールでは、さまざまな電気流体力学効果を流量に反映できます。マイクロフルイディクスモジュールは、このような効果を仮想的にモデル化するすぐれたツールです。所定の印可電圧の電界強度は、良好に増減し、適切な電圧で比較的大きな電界を流体に簡単にかけることができます。電気浸透では、流体表面の荷電した電気二重層 (EDL) にある非補償型のイオンが電界によって移動し、正味流量が生じます。マイクロフルイディクスモジュールには、いくつかの流体壁境界条件のひとつとして特殊な電気浸透速度境界条件が組み込まれています。流体の荷電粒子や偏極粒子の電気泳動力と誘電泳動力は、磁気泳動の際の反磁性力として粒子運動を取り込むときに使用できます。粒子トレーシングモジュールには、すぐに使える電気泳動力と誘電泳動粒子力が組み込まれています。マイクロフルイディクスモジュールと AC/DC モジュールを組み合わせると、AC 誘電泳動をモデル化できます。

電気湿潤現象による接触角度の操作も、マイクロスケールの装置では簡単です。電気湿潤は、各種の新しいディスプレイテクノロジーとして活用されている現象です。マイクロフルイディクスモジュールでは、電圧パラメータなどユーザー定義の式で接触角度を直接操作できます。

「」

## 質量輸送

マイクロフルイディクスモジュールには、希釈種輸送専用のフィジックインタフェースがあります。このインタフェースは、ひとつの成分（溶剤）の濃度が高すぎる（90 mol%以上）混合物における拡散、対流（流量と連成したとき）、電界内の泳動による化学種輸送をシミュレートします。このインタフェースは、通常、ミキサーのパフォーマンスをモデル化するとき 사용됩니다。マイクロ流体装置における化学的反応をモデル化するとき、マイクロフルイディクスモジュールを化学反応工学モジュールと組み合わせることができます。その場合、二成分拡散による濃縮種の輸送も処理できます。

## 柔軟性に富みロバスタなマイクロ流体工学シミュレーションのプラットフォーム

Microfluidics（マイクロ流体工学）インタフェースごとに、基本物理的原理を偏微分方程式が、対応する初期条件と境界条件とともに表現されています。COMSOL の設計では物理特性を重視しており、それぞれの機能で解いた方程式だけでなく、その基本方程式システムもすべてアクセスできます。さらにユーザー定義の方程式や式をシステムに追加できる柔軟性も備えています。たとえば、流体の粘性に大きな影響を与える種の輸送モデルは濃度依存の粘性を入力するだけで作成でき、スクリプトの記述やコーディングは不要です。COMSOL が方程式をコンパイルすると、これらユーザー定義の式で生成された複雑な連成は方程式システムに自動的に組み込まれます。方程式は、有限要素法とさまざまな工業用強度ソルバで解きます。解法が得られると、さまざまな後処理ツールで、データを調べることができます。あらかじめ定義しておいたプロットが自動的に生成されてデバイスの反応が表示されます。COMSOL は、圧力、速度、せん断速度、渦度といった（使いやすいメニューでアクセスできる）定義済みの数量などのさまざまな物理的数量を評価できる柔軟性と、任意のユーザー定義の式を備えています。

## Excel® および MATLAB® とのインターフェース

マイクロフルイディクスモジュールは、Microsoft® Excel® LiveLink™ for Excel® を介して組み合わせることができます。この LiveLink™ 製品は、パラメータ、変数、メッシュの制御用として、あるいはシミュレーションの実行用として COMSOL タブと特殊ツールバーを Excel リボンに追加します。さらに、この製品は、COMSOL Desktop® のパラメータリストと変数リスト用の Excel ファイルをインポートし、エクスポートします。

スクリプトプログラミングで COMSOL シミュレーションを実行したい場合は、LiveLink™ for MATLAB® の持つインタフェースで MATLAB® と COMSOL を組み合わせて使用できます。この LiveLink™ を利用すれば、豊富な MATLAB コマンドから COMSOL Desktop® の機能を

すべてアクセスできます。この方法は、マイクロ流体のシミュレーションに COMSOL Desktop® を使用する方法に対して、プログラムを利用した代替の方法です。

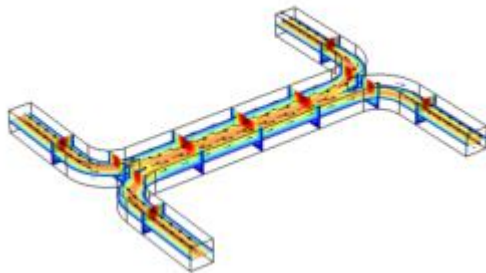
## 2. チュートリアル

### 拡散制御型マイクロミキサ

出典：INTRODUCTION TO Microfluidics Module p.20 以降

#### はじめに

この例は、制御された拡散性混合のために設計されるマイクロチャネルの H 形状配列をシミュレーションします。



#### 手順

##### モデルウィザード

1. デスクトップの COMSOL アイコンをダブルクリックします。ソフトウェアが起動すると画面にモデルウィザードを使う（COMSOL モデルを新規作成）かブランクモデルを使う（手動で COMSOL モデルを新規作成）かを選択する画面が表示されます。ここではモデルウィザードを選択します。COMSOL がすでに起動している場合にはファイルメニューで新規を選択後にモデルウィザードを選択します。



2. 空間次元を選択ウィンドウで 3D をクリックします。
3. フィジックスを選択し流体流れ > 单相流をツリーで展開し、クリープ流れを選択します。

4. スタディをクリックします。
5. プリセットスタディの下のスタディツリーで定常状態を選択します。
6. 完了をクリックします。

## ジオメトリ

ジオメトリを右クリックして、ワークプレーンを選択します。そして、平面ジオメトリを選択して、以下のジオメトリを作成します。

### 長方形 1

1. 平面ジオメトリを右クリックして、長方形を選択します。
2. 設定欄において、幅を  $140[\mu\text{m}]$ 、高さを  $60[\mu\text{m}]$  とします。
3. 作成ボタンをクリックします。

### 長方形 2

1. 平面ジオメトリをクリックして、長方形を選択します。
2. 設定欄において、幅を  $120[\mu\text{m}]$ 、高さを  $50[\mu\text{m}]$  とします。
3. 位置を  $xw$  で  $10[\mu\text{m}]$ 、 $yw$  で  $10[\mu\text{m}]$  とします。
4. 作成ボタンをクリックします。
- 5.

### 差 1

1. 平面ジオメトリを右クリックして、プリアンおよび分割>差 を選択します。
2.  $r1$  だけ選択します。
3. 追加オブジェクトで  $r1$  を追加します。
4. 差オブジェクトのアクティブを ON にて、 $r2$  だけ選択します。
5. 差オブジェクトで  $r2$  を選択します。
6. 作成 をクリックします。



#### フィレット 1

1. 平面ジオメトリを右クリックして、フィレットを選択します。
2. `dir1` において点 3,5 を選択します。
3. 設定欄において、フィレット半径を  $10[\mu\text{m}]$  とします。
4. 作成ボタン をクリックします。

#### フィレット 2

1. 平面ジオメトリを右クリックして、フィレットを選択します。
2. `fil1` において点 1,9 を選択します。
3. 設定欄において、フィレット半径を  $20[\mu\text{m}]$  とします。
4. 作成ボタン をクリックします。

#### 鏡 1

1. 平面ジオメトリを右クリックして、変換>鏡を選択します。
2. オブジェクト `fil2` だけを選択します。
3. 設定欄において、入力オブジェクトを保持にチェックマークをつけます。
4. 鏡映線上ベクトルを `xw` は  $0[\mu\text{m}]$ 、`yw` は  $1[\mu\text{m}]$  と入力します。
5. 作成ボタン をクリックします。

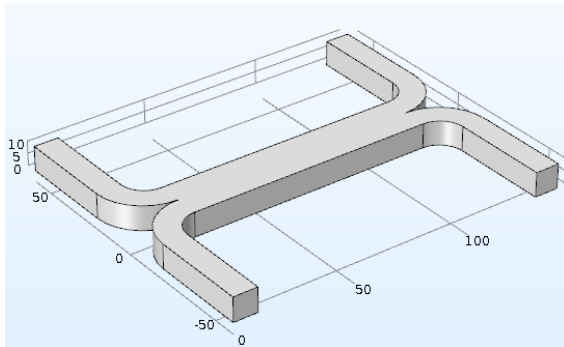
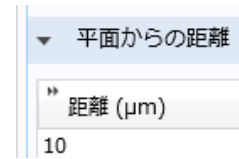
#### 和 1

1. 平面ジオメトリを右クリックして、プリアントと分割>和 を選択します。
2. オブジェクト `fil2` と `mir1` のみ選択します。
3. 設定欄において、内部境界条件を保持 のチェックマークをはずします。
4. 作成ボタン をクリックします。

## 押し出し 1

平面図形を押し出して、3次元図形にします。

1. ワークプレーンを右クリックして、押し出しを選択します。
2. 設定欄において、平面からの距離を  $10[\mu\text{m}]$  と入力します。
3. 平面全体を選択します。
4. 作成ボタン をクリックします。



## グローバル定義

## パラメータ

1. グローバル定義を右クリックして、パラメータを選択します。
2. 以下のように、パラメータを入力します。

| パラメータ   |                                     |                                       |          |
|---------|-------------------------------------|---------------------------------------|----------|
| ▼ パラメータ |                                     |                                       |          |
| 名前      | 式                                   | 値                                     | 説明       |
| D       | $5\text{e-}11[\text{m}^2/\text{s}]$ | $5\text{E-}11 \text{ m}^2/\text{s}$   | 拡散係数     |
| fr      | $15[\text{pl}/\text{s}]$            | $1.5\text{E-}14 \text{ m}^3/\text{s}$ | 流入速度     |
| c0      | $1[\text{mol}/\text{m}^3]$          | $1 \text{ mol}/\text{m}^3$            | 流入濃度     |
| alpha   | $0.5[(\text{m}^3/\text{mol})^2]$    | $0.5 \text{ m}^6/\text{mol}^2$        | 粘度に関する因子 |

## 定義

1. リボンメニューの定義を選択し、コンポーネントカップリング>平均を選択します。
2. 設定欄において境界を選択します。
3. 境界 22 を選択します。

## 材料 1

1. コンポーネント 1>材料を右クリックして、ブランク材料を選択します。
2. ジオメトリ全体を選択します。
3. 設定欄において、材料コンテンツで以下のように値を入力します。

| ▼ 材料コンテンツ                           |     |     |      |                   |
|-------------------------------------|-----|-----|------|-------------------|
| 特性                                  | 名前  | 値   | 単位   |                   |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 密度  | rho | 1000 | kg/m <sup>3</sup> |
| <input type="checkbox"/>            | 動粘度 | mu  | 1e-3 | Pa·s              |

## クリープ流れ

### 流体特性

動粘度をユーザ定義にして、以下のように式を入力します。

動粘度:

$\mu$  ユーザ定義 ▼

Pa·s

### 流入口 1

1. クリープ流れを右クリックして、流入口を選択します。
2. 境界 2 だけを選択します。
3. 設定欄において、境界条件を層流流入とします。
4. 層流流入を流量として、流量  $V_0$  に、 $fr/2$  として、流入長  $L_{entr}$   $100[\mu m]$  とします。

#### 流入口 2

1. 流入口 1 を右クリックして、複製を選択します。
2. 境界 8 だけを選択します。

#### 流出口 1

1. クリープ流れを右クリックして、流出口を選択します。
2. 境界を 20、22 を選択します。

#### 対称性 1

1. クリープ流れを右クリックして、対称性を選択します。
2. 境界 4 だけ選択します。

#### メッシュ 1

##### フリーメッシュ 1

1. メッシュ 1 を右クリックして、その他の操作>フリーメッシュ四辺形を選択します。
2. 境界 4 を選択します。

##### サイズ

1. メッシュ 1 のサイズを選択します。
2. 設定欄において、要素サイズの次で校正を流体力学にし、規定の部分を選択して新井を選びます。

##### スイープ 1

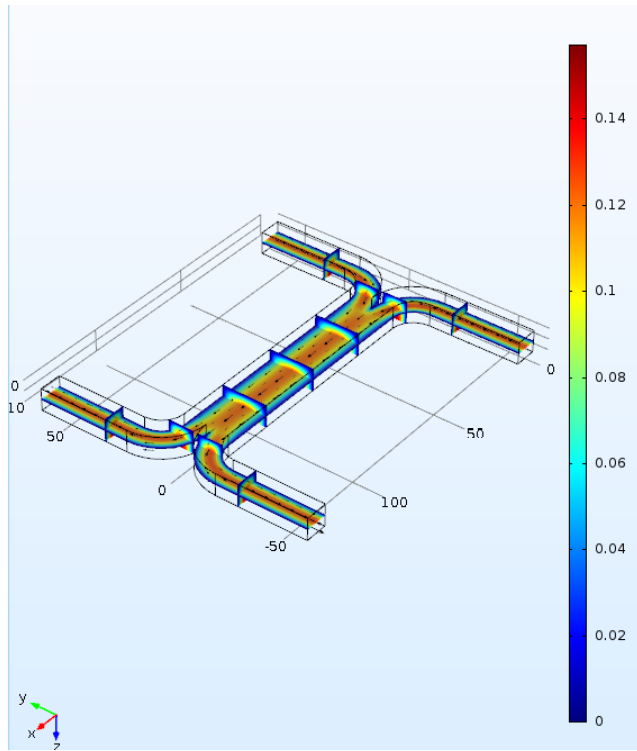
1. メッシュ 1 を右クリックして、スイープを選択します。
2. 作成ボタンをクリックします。

## スタディ 1

1. スタディ 1 を選択します。
2. クリープ流れだけにチェックボックスをつけます。
3. 計算ボタンを押します。

## 結果

1. 結果を右クリックして、3D プロットグループを作成します。
2. 3D 表示グループを右クリックして、断面を選択します。
3. 設定欄において、式として  $\text{spf.U}$  を入力して、単位に  $\text{mm/s}$  を選択します。
4. 断面 1 を右クリックして、複製を押します。
5. 設定欄において、平面データの平面を  $yz$  平面数、平面数 1 とします。
6. 断面 2 を右クリックして、複製を押します。
7. 設定欄において、平面データの平面を  $zx$  平面数、平面数 2 とします。
8. 3D プロットグループを右クリックして、矢印(ボリューム上)を選択します。
9. 設定欄において、ポイントで  $x$  は 14、 $y$  は 21、 $z$  を 3 と入力します。
10. カラーの設定は黒とします。
11. 3D プロットグループにおいてプロットボタンをおすと以下の結果が表示されます。



以上