惯性与非惯性状态下流经拐角的胶囊运动与变形

Damien P. Huet、Antoine Morente 和 Guodong Gai
Department of Mathematics, University of British Columbia, 1984 Mathematics Road, Vancouver BC V6T 1Z2, Canada

Anthony Wachs*
Department of Mathematics, University of British Columbia, 1984 Mathematics Road, Vancouver BC V6T 1Z2, Canada and Department of Chemical and Biological Engineering,University of British Columbia, 2360 E Mall, Vancouver BC V6T 1Z3, Canada（日期：2023年5月9日）

arXiv:2305.04129v1 [physics.flu-dyn] 6 May 2023

我们研究了三维弹性胶囊流经带有尖角的方形通道时的惯性与非惯性动力学。我们分析了单个胶囊、两个相互作用的胶囊组成的系统，以及在拐角上游释放的十胶囊序列中胶囊的轨迹、表面积、速度和膜应力。通道雷诺数 Re 的范围为 0.01 至 50，毛细数 Ca（衡量黏性应力与弹性应力之比）的范围为 0.075 至 0.35。我们发现，与非惯性情况相比，在惯性区间内，膜拉伸和应力显著增加，拐角内的速度超调也有所增强。胶囊的最大变形几乎呈线性依赖于 Ca 和 Re。此外，当初始间距 d 小于临界值 d_c时，我们发现两个受限胶囊之间存在排斥机制。前导胶囊的变形会因后续胶囊的存在而减弱。在多个胶囊流经拐角的情况下，我们观察到，尾随胶囊最大表面积的增加最终会在队列末尾趋于饱和。此外，我们发现，无论胶囊在上游的间距如何 d，拐角都会使胶囊彼此分离。本研究有助于制定实用指南，以控制胶囊破裂，并预测惯性与非惯性微流控实验中的通量。

I. 引言

膜包裹流体对象，即胶囊，广泛存在于自然过程和工业过程中，从生物学中的红细胞（RBCs）、循环肿瘤细胞（CTCs）或流动的卵细胞，到制药、化妆品和食品工业中的包封物质 [1]。特别是，微胶囊的研究对于各种生物学应用至关重要，例如生物微胶囊溶液的分选和富集（如分离RBCs或CTCs），以及在靶向药物递送领域高效制造包封活性物质的胶囊 [2, 3]。在过去十年中，微流控器件已被证明能够完成多种任务，包括基于尺寸和可变形性的细胞分选 [4–7], 、浓度富集 [8–10] 以及细胞表征 [11–13]。此外，计算能力的提升近年来使数值研究得以参与微流控器件的设计。例如，Zhu等人 [4] 对一种新颖的微通道几何结构进行了数值研究，该结构由位于微通道中心的半圆柱组成：研究表明，这种设计能够根据细胞的膜变形性高效地分选细胞。最近，研究人员利用他们的微流控设计开展了实验，并得出结论：该设计确实能够仅依据膜刚度对细胞进行分选，且具有相对较高的效能 [5]。在细胞表征方面，Gubspun等人 [11] 提出了一种确定胶囊性质（如膜剪切模量）的方法，即比较胶囊在直微通道中的实验“降落伞”形状与数值模拟形状。尽管大多数微流控研究在斯托克斯条件下进行，但近年来，惯性微流控器件的设计与研究日益增多，这是因为它们能够根据尺寸准确地分选胶囊，并将其从溶剂中提取出来 [7, 14]。微流控器件中的惯性聚焦通常依赖于螺旋形通道，使较重的胶囊集中于通道外侧、曲率较低的边缘，而较轻的胶囊则集中于靠近内侧、曲率较高的边缘。即使在惯性状态下，螺旋形通道这类平滑几何结构通常也不会对悬浮胶囊产生较大的应变或应力，然而，人们对于

* wachs@math.ubc.ca

胶囊在惯性作用下流经常见的尖锐几何结构（如分叉和拐角）时所产生的应变和应力仍知之甚少。此外，这类尖锐几何结构对惯性状态下多个胶囊组成的队列之间流体动力学相互作用的影响，也尚未得到解答。深入了解这些问题对于惯性微流控器件的设计和运行具有实际意义，因为：（i）器件不应损害胶囊的机械完整性，即必须避免胶囊破裂；（ii）细胞分选过程通常在极稀的状态下运行，以避免胶囊相互作用，而更好地理解此类相互作用将使这些器件能够在中等至高浓度下运行，从而优化效能和通量。

过去四十年来，研究人员投入了大量精力，对非惯性状态下胶囊变形进行建模和研究，这主要是因为微循环（如毛细血管）以及传统微流控装置中都会出现这种状态。 [15], Barth`es-Biesel和Ral- lison运用薄壳理论的形式体系，首次发表了小变形极限下，无界蠕动剪切流中弹性胶囊随时间变化的变形解析解 [16]。十多年后，Pozrikidis通过边界积分法（BIM）摆脱了小变形假设 [17]。研究人员还用同一方法考察了内外流体黏度不同的胶囊在剪切流中的有限变形 [18], , 并研究了弯曲应力的作用 [19], , 从而得以考察悬浮于无界剪切流中的红细胞 [20]。除了无界几何结构，Zhao等人 [21] 还使用谱边界积分法模拟了红细胞在直通道和狭窄通道中的运动。随后，Hu等人 [22] 采用类似方法，研究了一个初始为球形的胶囊在宽度与胶囊直径相近的方形通道中流动的情形；他们工作的独到之处在于开展了实验，并显示测得的胶囊形状与计算结果高度吻合。与此同时，Park和Dimitrakopoulos [23] 研究了黏度比不为1的胶囊流经尖锐狭窄处时的变形。最近，Balogh和Bagchi [24–26] 采用前沿追踪法（FTM），分析了红细胞通过复杂几何结构时的运动和变形，这些结构模拟了人体微循环中的毛细血管；他们的模拟尤其呈现了实验中观察到的红细胞与血管壁之间众所周知的无细胞层 [27, 28]。

关于惯性存在时胶囊流动的研究，前述针对小变形的解析理论以及广泛采用的边界积分法（BIM），都未能将流体动量方程中的对流项纳入考量。Doddi 和 Bagchi [29] 首次使用快速张量法（FTM），研究了剪切流中两个相互作用胶囊的惯性效应。他们特别指出，当惯性足够大时，两个胶囊会发生螺旋运动。随后，研究人员考察了可变形胶囊在直微通道中的惯性运动 [30, 31], , 发现胶囊可在远离通道中心线、沿横截面对角线分布的多个位置达到平衡。对于弯曲通道，Ebrahimi 和 Bagchi [32] 最近研究了单个胶囊在大量不同参数条件下的迁移：他们分别改变了通道雷诺数、胶囊可变形性、通道长宽比和曲率。研究显示，当惯性足够大时，恰好会出现两个聚焦位置，分别靠近二次流涡旋（即 Dean涡）的中心。不过，他们的研究并未提及膜的内部应变和应力，因为其目标并非考察胶囊在此类流动中的完整性。

尽管直线和弯曲微通道是微流控器件的重要组成部分，但这些简单几何结构并未涵盖此类器件中常见的众多连接处、拐角和盘绕通道。为弥补这一不足，Zhu & Brandt [33] 研究了单个弹性胶囊在尖角处的非惯性运动及变形。他们发现，无论膜变形性如何，胶囊都会沿着未受扰流动的流线运动。由于润滑力的作用，胶囊接近拐角时速度会降低，沿拐角对角线达到最小值，随后回升至稳态值，并出现随可变形性增加而增大的超调。同样，胶囊的表面积在拐角内达到最大值，随后回升至稳态值，并出现随可变形性增加而加剧的欠调。他们还报告了胶囊膜中的最大应力，该指标可用于评估机械完整性并表征细胞力学性质。他们发现，随着可变形性增加，最大应力的偏差会增大，并从胶囊前部移至顶部。随后，Wang 等人 [8, 9] 考察了单个胶囊通过 Y 形和 T 形连接处时的惯性与非惯性路径选择；这两种连接处在微流控几何结构中都很常见。他们观察到，在高惯性条件下，胶囊不一定会优先进入流量最大的子支路，而且刚性膜（对应较低的毛细管数）会使这一效应更加明显。最近，Lu等人 [10] 研究了中等惯性条件下胶囊在 T形接头中的相互作用和路径选择，旨在富集胶囊溶液。考察一对胶囊时，他们发现，前导胶囊受尾随胶囊存在的影响较小，但反过来则并非如此。他们发现，尾随胶囊进入哪条支路，取决于初始间距以及 T形接头两条子分支之间的流量分配比。随后，他们考察了一串胶囊，并发现两种截然不同的区间：（i）间距较小，胶囊相互作用较强，导致非稳态区间并影响胶囊的轨迹；（ii）间距较大，胶囊相互作用较弱，因此胶囊轨迹与单个胶囊的轨迹相同。有趣的是，他们报告称，两胶囊之间的临界间距

将其绘制为 T 形接头子分支流量分配比的函数后，得到一条不受膜变形性、胶囊尺寸和雷诺数影响的主曲线。

在本研究中，我们探讨了可变形胶囊流经尖角时的惯性与非惯性运动及其相互作用。尖角是微流控器件中非常常见的几何结构。由于这些器件的效率以胶囊通量衡量，而提高流量和胶囊浓度均可优化通量，因此我们的研究目标有两个：首先，量化惯性对单个胶囊在微流控相关几何结构中变形的影响；其次，在考虑一对胶囊和胶囊串的情况下，描述领先胶囊与尾随胶囊之间的流体动力学相互作用和变形差异。本文其余部分安排如下：第二节介绍控制方程、流动构型及所考虑的参数空间。第三节概述数值方法，并研究入口长度的影响。第四节分析单个胶囊在非惯性区间和惯性区间中的运动。第五节分析一对胶囊的二元相互作用，并研究初始间距的影响。第六节考察十胶囊序列流经拐角的情形，并讨论领先胶囊与尾随胶囊之间的速度和变形差异。最后，第七节总结全文。

用于复现本研究中所展示的所有模拟和图表的文档化源代码可在线免费获取 [34]。

II. 控制方程和问题陈述

假设胶囊膜 Γ 无限薄，并由黏度和密度恒定的不可压缩牛顿流体包围。在本研究中，胶囊内外的流体均假设为相同流体：具体而言，它们的黏度比为 1。该流体由质量守恒方程和动量守恒方程描述：

$$\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \nabla \tilde{\boldsymbol{u}} = \frac{1}{\tilde{\rho}} \nabla \tilde{p} + \tilde{\nu} \Delta \tilde{\boldsymbol{u}} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \tilde{\boldsymbol{f}}_{\boldsymbol{b}} \tag{2}$$

其中，$\tilde{\boldsymbol{u}}$ 为速度场，$\tilde{p}$ 为压力场，$\tilde{\rho}$ 为密度，$\tilde{\nu} = \tilde{\mu}/\tilde{\rho}$ 为运动黏度，$\tilde{\mu}$ 为动力黏度，$\tilde{\boldsymbol{f}}_{\boldsymbol{b}}$ 为表征膜对其周围流体作用的体项。带量纲的物理量用 $\sim$ 符号表示。膜具有弹性和抗弯曲性，并且其对流体的作用是局部的，因此 $\tilde{\boldsymbol{f}}_{\boldsymbol{b}}$ 可表示为：

$$\tilde{\boldsymbol{f}}_{\boldsymbol{b}} = \left(\tilde{\boldsymbol{f}}_{\text{elastic}} + \tilde{\boldsymbol{f}}_{\text{bending}} \right) \tilde{\delta}(\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{\Gamma}}), \tag{3}$$

其中，$\tilde{\delta}(\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{\Gamma}})$ 是狄拉克分布，仅在膜表面非零。

剪切膜应力和面积膨胀膜应力采用薄壳理论描述，现简要总结如下。有兴趣的读者可参阅 Green & Adkins [15] 以及 Barth`es-Biesel & Rallison [16] 的解析研究，以了解更多详情。我们采用新胡克定律 [15], ，其表面应变能函数表示为：

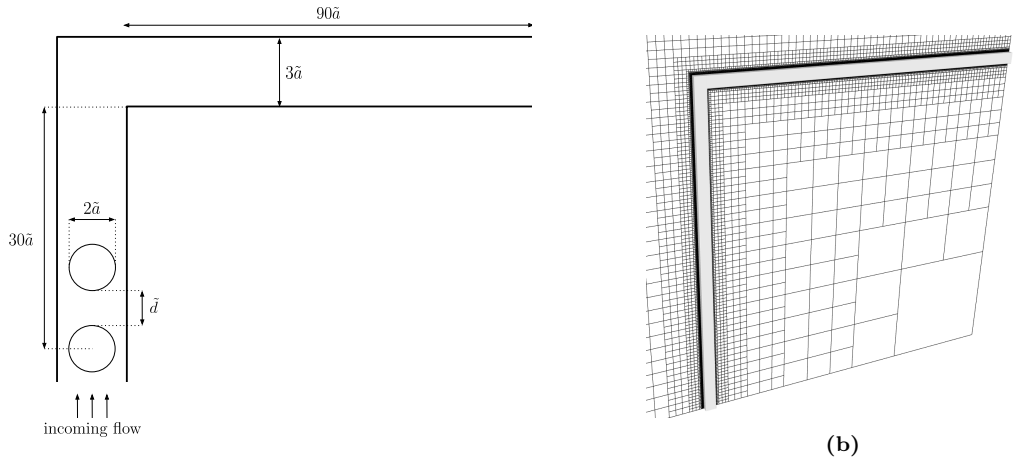
$$\tilde{W_s}^{NH} = \frac{\tilde{E}_s}{2} \left(\lambda_1^2 \lambda_2^2 + \frac{1}{\lambda_1^2 \lambda_2^2} \right), \tag{4}$$

其中，$\lambda_{1,2}$ 是两个切向方向上的主伸长比，E_s 是剪切模量。主应力 $\tilde{\sigma}_{1,2}$ 表示为：

$$\tilde{\sigma}_i = \frac{1}{\lambda_j} \frac{\partial \tilde{W_s}^{NH}}{\partial \lambda_i}, \qquad i, j \in \{1, 2\}, \quad i \neq j. \tag{5}$$

生物膜的弯曲应力由 Helfrich 弯曲能 $\mathcal{E}_b$ [35, 36] 控制：

$$\tilde{\mathcal{E}}_b = \frac{\tilde{E}_b}{2} \int_{\Gamma} \left(2\tilde{\kappa} - \tilde{\kappa}_0 \right)^2 dS, \tag{6}$$



(a) **(b)**

图1： (a) 流体区域几何形状示意图。通道具有边长为 $3\tilde{a}$的方形横截面。(b) 通道的完整视图以及通道对称平面上的计算网格。

其中， E_b 为弯曲模量， $\tilde{\kappa}$ 为平均曲率， $\tilde{\kappa}_0$ 为参考曲率。对式（6）采用变分表述，可得单位面积上的弯曲力 A:

$$\tilde{\boldsymbol{f}}_{\text{bending}}/\tilde{A} = -2\tilde{E}_b(\Delta_s(\tilde{\kappa}) + 2(\tilde{\kappa} - \tilde{\kappa}_0)(\tilde{\kappa}^2 - \tilde{\kappa}_g + \tilde{\kappa}_0\tilde{\kappa}))\boldsymbol{n}, \tag{7}$$

其中， $\tilde{\kappa}_g$ 为高斯曲率， $\boldsymbol{n}$ 为外法向量。

在 $t = 0$处，将一个半径为 $\tilde{a}$ 的初始球形胶囊放置在宽度为 $W = 3\tilde{a}$ 的方形通道中，距尖角 $h_0 = 30\tilde{a}$ ，如图1所示。在入口边界施加平均横截面速度 U_0 ，同时在出口边界施加流出边界条件 $\partial\tilde{\boldsymbol{u}}_n/\partial\boldsymbol{n} = 0$ 。考虑多个胶囊时，我们采用Lu等人 [10]使用的相同初始条件：仅当先前胶囊的质心前进距离 d后，才在模拟中插入尾随胶囊。我们的问题由以下尾随无量纲数控制：

1. 通道雷诺数 $Re = \tilde{\rho}U_0W/\tilde{\mu}$,
2. 毛细管数 $Ca = \tilde{\mu}U_0\tilde{a}/E_s$，表示黏性应力与弹性应力之比 s,
3. 约化弯曲刚度系数 $E_b = \tilde{E}_b/(\tilde{E}_s a^2)$,
4. 约束比 $\beta = 2\tilde{a}/W$,
5. 胶囊之间的约化初始间隙 $d_0 = d/2\tilde{a} - 1$。

在本研究中，雷诺数 Re 的范围为 0.01 至 50，毛细数 Ca 的范围为 0.075 至 0.35，约化初始间隙 d_0 取值范围为 0.125 至 1。约化弯曲刚度 E_b 和约束比β均保持不变，其中 $\beta = 2/3$和 $E_b = 5 \cdot 10^{-3}$ 采用 Pozrikidis [37]提出的数值。本研究中的参考曲率 $\tilde{\kappa_0}$等于 $-2.09/\tilde{a}$ ，这对于某些生物膜（如红细胞膜 [38, 39]）而言是常见的。在本研究的其余部分，我们使用胶囊半径 $\tilde{a}$ 作为特征长度尺度，并将特征时间尺度定义为胶囊半径与平均横截面速度之比，即 $t = \tilde{a}/U_0$。

III. 数值方法与验证

我们采用自适应前沿追踪法（FTM）求解上述方程：下文简要介绍该数值方法，详细说明见 [40]。方程（1）和方程（2）采用有限体积法，在自适应八叉树网格上通过开源软件 Basilisk [41]求解。膜采用非结构化三角剖分离散，方程（5）采用线性有限元法求解，而方程（7）采用抛物面拟合法求解。膜的三角剖分与八叉树网格通过

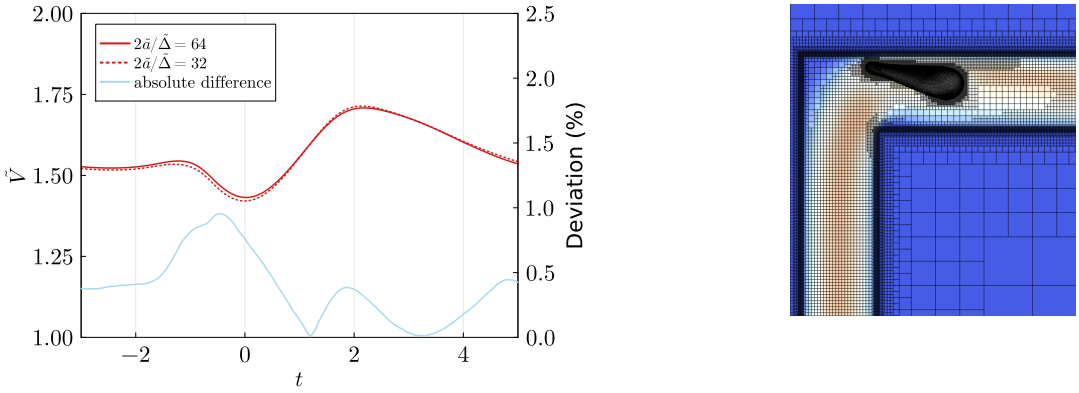


图 2： (a) 胶囊在 $Ca = 0.35$ 和 $Re = 50$ 处的质心速度，分别对应两种网格分辨率：每个初始直径包含 32 个网格单元（红色虚线）和每个初始直径包含 64 个网格单元（红色实线）。蓝色曲线表示这两种网格分辨率下质心速度的偏差。(b) 胶囊及流场对应的形状和网格分辨率：蓝色表示速度为零，红色表示速度较大。

浸入边界法 [42, 43], 进行通信，其中方程（3）中的狄拉克分布采用基于余弦的公式进行正则化：

$$\tilde{\delta}(\boldsymbol{x_0} - \boldsymbol{x}) = \begin{cases} \dfrac{1}{64\tilde{\Delta}^3} \displaystyle\prod_{i=1}^{3} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi}{2\tilde{\Delta}}(x_{0,i} - x_i)\right)\right) & \text{if} \quad |x_{0,i} - x_i| < 2\tilde{\Delta} \\ 0 \quad \text{otherwise} \end{cases}, \tag{8}$$

其中， $\boldsymbol{x_0} = [x_{0,1}\ x_{0,2}\ x_{0,3}]$ 是膜表面离散化中的一个拉格朗日节点的位置，$\tilde{\Delta}$ 是欧拉八叉树网格的局部网格尺寸。我们此前的研究 [40] 重点对当前数值方法进行了全面验证，因此这里不再赘述。不过，下面将研究欧拉网格的收敛性，以及胶囊距拐角的释放距离对结果的影响。

在浸入边界法中，众所周知，如果关注的浸入物体非常接近区域壁面，正则化狄拉克分布的支撑集可能会延伸到流体区域之外 [9, 10, 44]。为了避免靠近壁面的特定膜节点发生非物理的动量损失，必须确保正则化狄拉克分布的支撑集均不延伸到流体区域之外，也就是说，膜节点与区域边界之间始终至少有两个网格单元。因此，我们针对两种不同的网格分辨率，模拟胶囊在形变最大且最接近通道壁时的动力学过程，如图 2b 所示。图 2a 展示了胶囊在拐角内部及下游 V 的速度，分别对应于每个初始胶囊直径上有 32 和 64 个网格单元的欧拉网格分辨率，并展示了这两种配置下速度的偏差。使用这两种网格分辨率计算得到的速度高度吻合；最大差异低于 1%，在所考察的时间范围内，平均差异约为 0.5%。此外，在两种配置下，胶囊尾部与上方拐角壁面之间的润滑层中均有超过 3 个网格单元。这些结果表明，每个胶囊初始直径对应 32 个网格单元的等效网格分辨率足以获得收敛解，并且当前模拟不存在浸入边界模板延伸至流体区域之外的情况。

接下来，我们研究归一化释放距离 D_c （胶囊质心初始位置与拐角之间的距离）对系统的影响。事实上，释放后，胶囊会从球形弛豫至平衡稳态形状，因此，在胶囊进入拐角之前达到这一稳态非常重要。为此，我们在最具挑战性的构型下考察了三个初始距离 $D_c = 15$、30 和 60，即胶囊具有高度可变形性，并处于高度惯性的流动中。入口边界距离拐角 $90a$ ，因此与胶囊之间的距离足够远，不会改变其响应。胶囊质心速度的范数 $\tilde{V}$ 和约化胶囊表面积 $\mathcal{A} = \tilde{\mathcal{A}}/4\pi a^2$ 如图 3 所示，其中约化时间 t 的起点选在胶囊达到最小速度V_{min}的时刻。在图 3a 中，我们注意到，胶囊速度 V 在 $D_c = 15$ 处会在进入拐角之前显著降低：这是因为最初呈球形的胶囊距离通道壁更远，因此其被平流输运的速度比达到稳态形状后更快。我们观察到，在 $D_c = 15$的情况下，图 3a 所示的胶囊速度和图 3b 所示的归一化表面积在胶囊进入拐角之前都没有呈现稳态。因此，应采用更大的初始距离 D_c 。当考虑 $D_c = 30$时，速度和归一化表面积在进入拐角之前都呈现

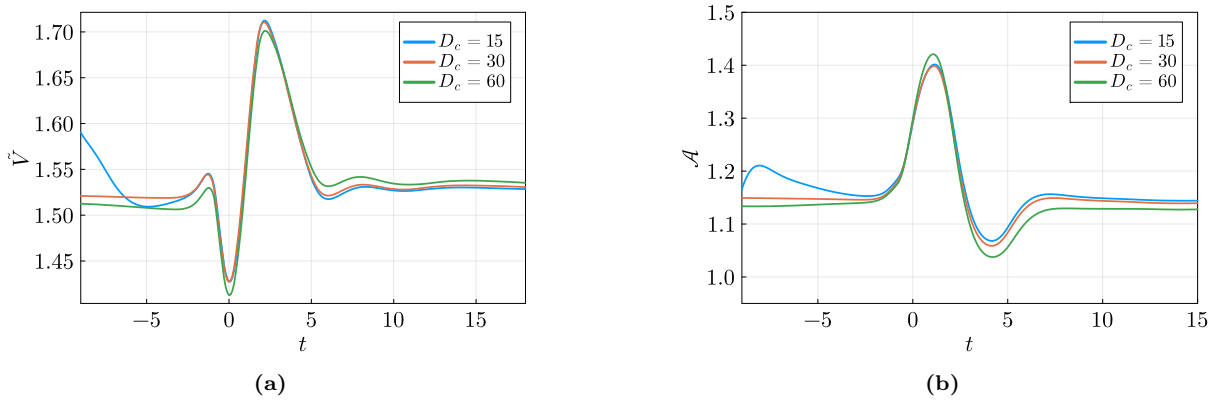


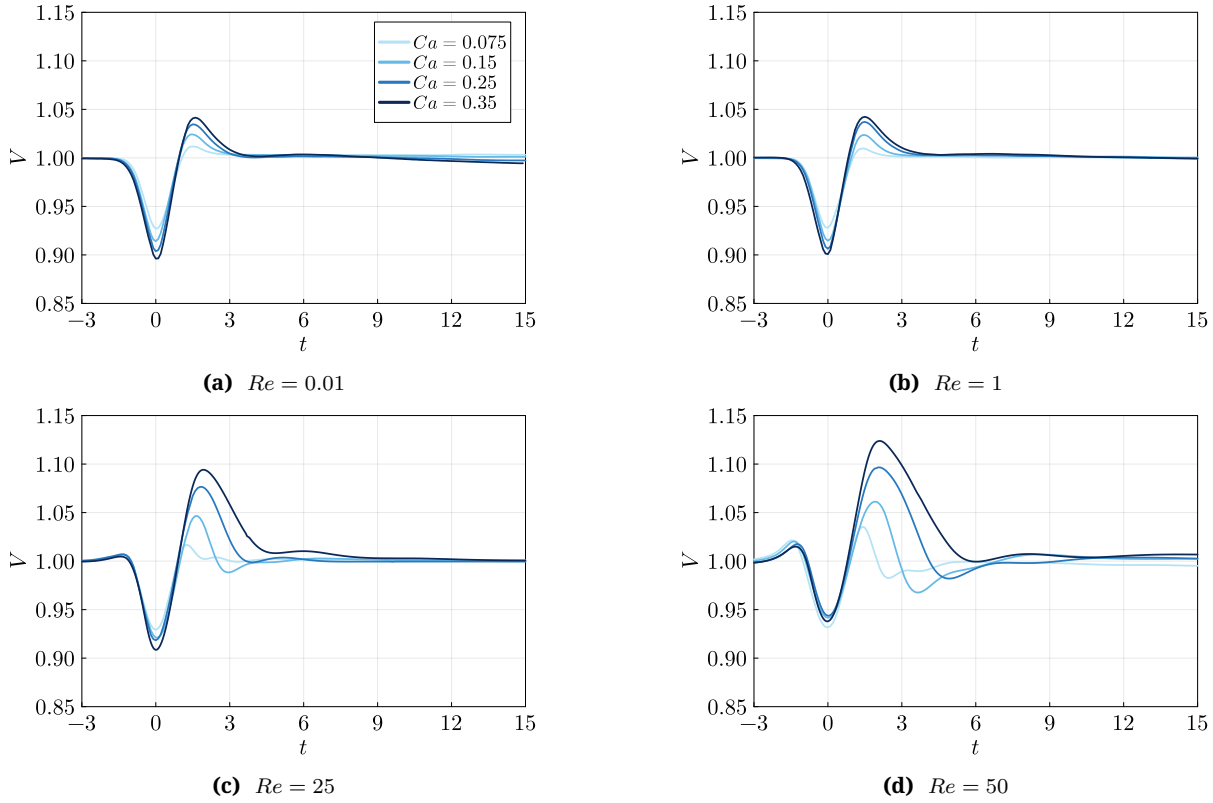
图 3： 质心速度（a ）和归一化表面积（b）：胶囊从三个不同的归一化 d
释放距离 $D_c = 15$、30 和 60 处流经拐角时的情况，参数为 $Re = 50$ 和 $Ca = 0.35$。

稳态值。有趣的是，在拐角内部及其后方，当胶囊在距离拐角 15 个和 30 个初始半径处释放时，其胶囊速度和表面积几乎重合，这表明无论胶囊此前所处的状态如何，拐角都会重置胶囊动力学。对于 $D_c = 30$ ，胶囊的速度和表面积在进入拐角之前均已达到稳态值，这一事实表明该初始释放距离适用于本研究的其余部分。有趣的是，在 $D_c = 60$ 处释放胶囊会导致一个出乎意料的结果：胶囊似乎不再处于稳态运动中，因为在进入拐角之前，其速度略有下降（而其归一化表面积则略有增加）。这表明，在这一具有挑战性的构型下，胶囊从固定的球形形状弛豫至稳态“降落伞”形状需要经历非常长的时间尺度。然而，在 $D_c = 30$和 60 两种情况下，胶囊速度和表面积之间偏差的幅度最多为 3%。由于在 $D_c = 30$的情况下，胶囊到达拐角时已经达到准稳态，且上述差异很小，因此在本研究的其余部分，我们选择 $D_c = 30$ 。同样，这项关于初始释放距离对胶囊动力学影响的简短研究是在最具挑战性的构型下进行的，因为我们采用了最高的雷诺数和最高的毛细数。对于可变形性较低的膜和惯性较弱的流动， $D_c = 30$ 与 60 两种情况之间的差异不那么明显， – 有时甚至不存在 – 。

IV. 单个胶囊的运动与变形

我们研究单个胶囊以 $Ca = 0.075$，0。15，0。25，0。35 和 Re =0。01，1，25，50 的参数穿过方形管道时的运动，扩展了 Zhu & Brandt [33] 在非惯性框架下开展的研究。为了确定惯性效应增强对单个胶囊运动和变形的影响，我们首先回顾胶囊在斯托克斯区间内穿过管道拐角时的整体动力学，详见[33]。胶囊从初始位置释放后，由于远离拐角处的流动具有对称性，便沿通道中心运动。接近拐角时，胶囊速度逐渐降低，直至在拐角区域达到最小值。由于流动加速，胶囊会发生中度至高度变形（取决于所考察的毛细数），其速度也会大幅增加；这一现象称为速度超调。远离拐角后，胶囊进入管道下游支路，逐渐达到稳态（形状和速度），并沿管道中心运动。

我们研究雷诺数 Re 和毛细数 Ca 对胶囊动力学及其变形的影响，报告其表面积 $\mathcal{A}$ 相对于胶囊初始表面积 $\mathcal{A}_{\text{sphere}} = 4\pi\tilde{a}^2$的时间演化，以及胶囊质心速度 V 相对于胶囊进入拐角区域之前的平衡速度 V_{eq} 的变化。在本研究的其余部分，除非另有说明，时间原点均选取为胶囊速度达到全局最小值的时刻，即 $t = 0$ （ $V_{min} = V\ (t = 0)$ ）。我们采用 Zhu & Brandt [33], 提出的这一约定，因为它对应于将胶囊位于拐角中心的位置设为时间原点。



(a) $Re = 0.01$ **(b)** $Re = 1$

(c) $Re = 25$ **(d)** $Re = 50$

图 4： 固定雷诺数下胶囊质心速度的时间演化 V。

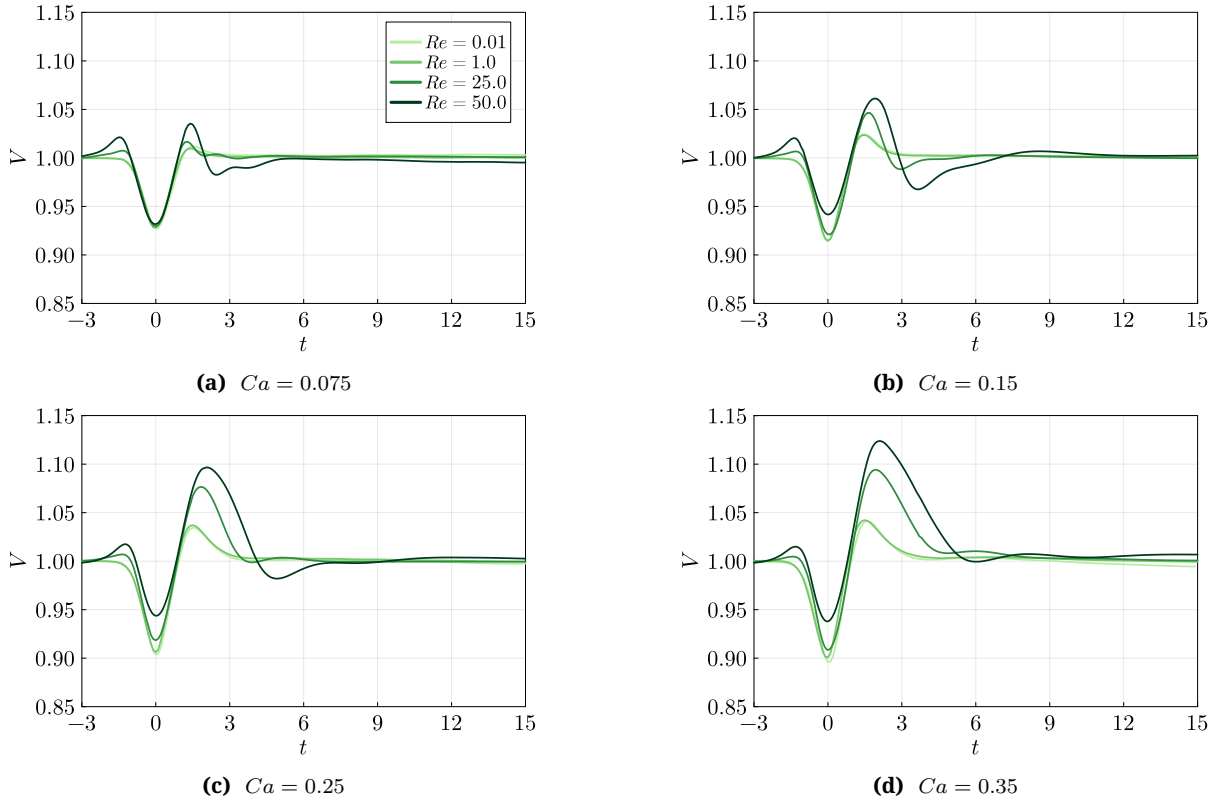
A. 雷诺数和毛细数的影响

为了表征胶囊流过拐角时的动力学行为，我们分析质心速度 V 和表面积 $\mathcal{A}$的时间演化。图4显示了 Ca 从0.075到0.35时胶囊质心的速度。图4的每个子图中， Re 均为常数。相反，图5显示了与图4相同的数据，但每个子图对应一个恒定的 Ca。从这两幅图中，我们观察到所有情况下都存在一个普遍趋势：胶囊以稳定速度 V_{eq}接近拐角，随后在流过拐角时达到全局最小值 V_{min} 和全局最大值 V_{max}，并在拐角下游恢复至 V_{eq} 。此外，我们从图4中观察到，速度极值随 Ca增大而增大。尤其是在惯性更强的区间， $Ca = 0.35$ 处胶囊的最大速度偏差接近 $Ca = 0.075$处胶囊的三倍。

我们从图5中注意到，对应于 $Re = 0.01$ 和 $Re = 1$ 的曲线几乎重合，这表明低惯性区间内胶囊的运动与非惯性区间内的运动非常相似。随着雷诺数增至25和50，与非惯性区间相比，开始出现显著偏差。首先，当胶囊进入拐角区域时，胶囊速度出现一个局部最大值，该最大值与毛细数无关；在 $Re = 25$ 处，它比 V_{eq} 高约1%，在 $Re = 50$处则比 V_{eq} 高约2%。这个局部最大值是胶囊迁移穿过次级通道中心线所致：在这一过程中，胶囊远离通道壁，因此受到的限域效应较弱。随后，在拐角中心处达到最小速度 V_{min} 。有趣的是，在较小的 Ca下， V_{min} 与 Re无关，如图5a中 $Ca = 0.075$所示。相比之下，在较大的 Ca 下，胶囊的最小速度会随着Re略微增加。当 Re 从0.01增至50时，对于 $Ca = 0.25$ 和 $Ca = 0.35$， V_{min} 的差异约为4%。

当胶囊离开拐角区域并向通道中心线迁移时，其速度达到最大值V_{max} ，且该最大值随 Re 和 Ca的增大而增大：在 $Ca = 0.075$时， V_{max} 在 $Re = 0.01$ 至$Re = 50$ 之间增加了3%；而在 $Ca = 0.35$时， V_{max} 在 $Re = 0.01$ 至 $Re = 50$之间增加了约8%。随后，胶囊速度弛豫回到其平衡值，且其弛豫时间随 Re增大而增加。有趣的是，在惯性区间的弛豫阶段观察到了速度过冲，其幅度随 Re增大。弛豫时间不受 Ca影响。

归一化胶囊表面积的时间演化如图6所示，其中 Re 固定；图7则展示了 Ca 固定时的情况。我们观察到，表面积在约 $t = 1$ 处达到最大值 $\mathcal{A}_{max}$ ，随后逐渐弛豫至其平衡值。



(a) $Ca = 0.075$ **(b)** $Ca = 0.15$

(c) $Ca = 0.25$ **(d)** $Ca = 0.35$

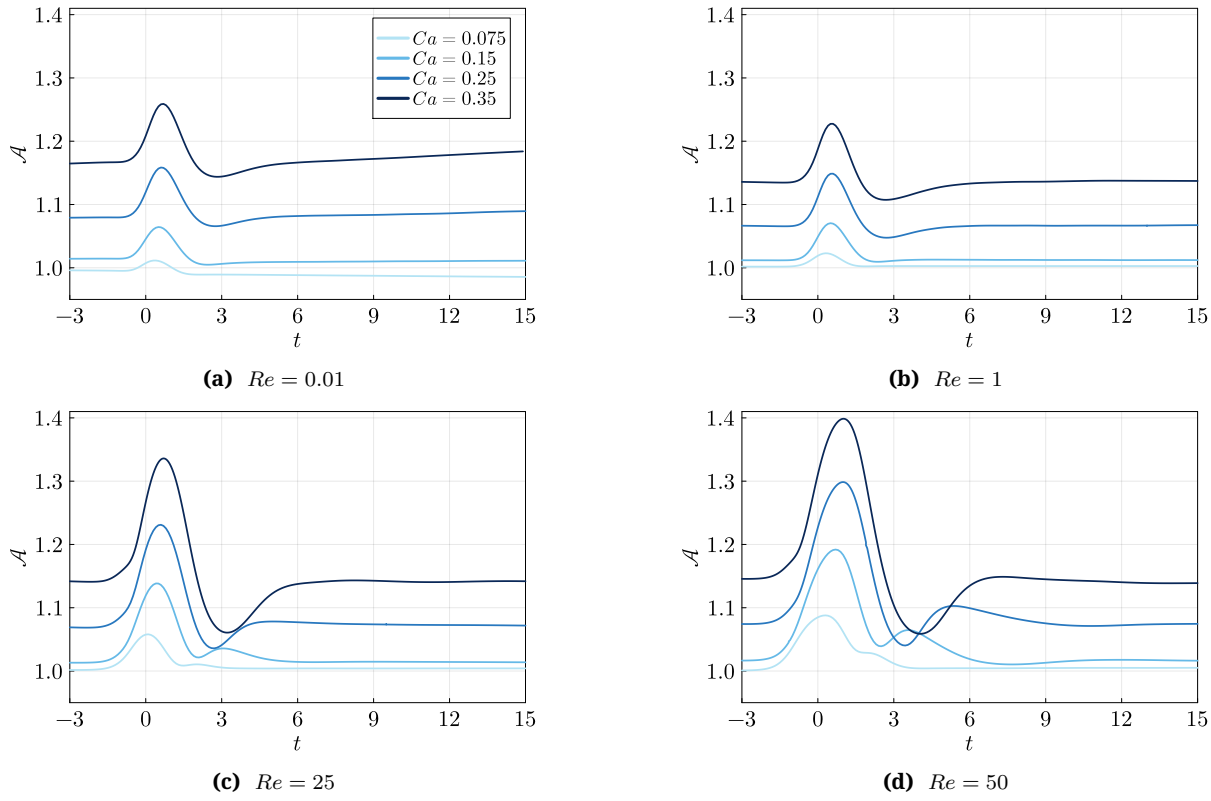
图5：固定毛细数下胶囊质心速度的时间演化 V。

$\mathcal{A}_{eq}$。不出所料，图6证实，较大的 Ca（即高度可变形的胶囊）比 Ca较低时具有更大的表面积。图6还显示，最大表面积的幅度随 Ca增加而增大。此外，在考虑较大的 Ca 时，胶囊表面积的时间演化会出现一些下冲，且随着 Re 增大，这些下冲会更加明显。此外，图7表明， Re 对胶囊变形有非常显著的影响，尤其是在 Ca较大时：在 $Ca = 0.075$下， $\mathcal{A}_{max}/\mathcal{A}_{eq}$ 在 $Re = 0.01$ 与$Re = 50$之间从2%增至8%；而在 $Ca = 0.35$ 下，它在 $Re = 0.01$ 至 $Re = 0.35$之间从8%大幅增至22%。特别是，在 $Ca = 0.35$ 下，胶囊最大表面积从非惯性区间到高惯性状态，增加至球体表面积的比例从9%升至40%。这些表面积偏差非常大，将在下一节进一步讨论。

B. 胶囊的最大变形

胶囊的最大表面积 $\mathcal{A}_{max}$ 如图8所示，它同时是雷诺数和毛细数的函数。为更好地分析图中的趋势，我们还报告了中间雷诺数下的最大表面积，即 $Re = 12.5$ 和 37.5 时的数据。图8中的数据清楚地显示，只要 Ca 低于 0.35 $-$ ，$\mathcal{A}_{max}$ 就会随 Ca 和 Re 呈双线性标度；在 $Ca = 0.35$时，曲线 $\mathcal{A}_{max}(Re)$ 的形状略微凹陷。对于 $\mathcal{A}_{max}(Ca)$，标度斜率约为 0.003；对于 $\mathcal{A}_{max}(Re)$，约为 1.12。这意味着胶囊的最大变形与毛细数成正比，同时也与雷诺数相关。据我们所知，这是首次报告并证实从低 ($Re = 1$) 到中等 ($Re = 12.5$,25, 37.5, 50) 惯性状态下存在这种趋势。我们认为，这一结果可作为预测工具，用于许多研究单个胶囊通过管道拐角的情形；胶囊所表现出的最大变形可衡量其机械完整性，而这在许多微流体应用中都至关重要。

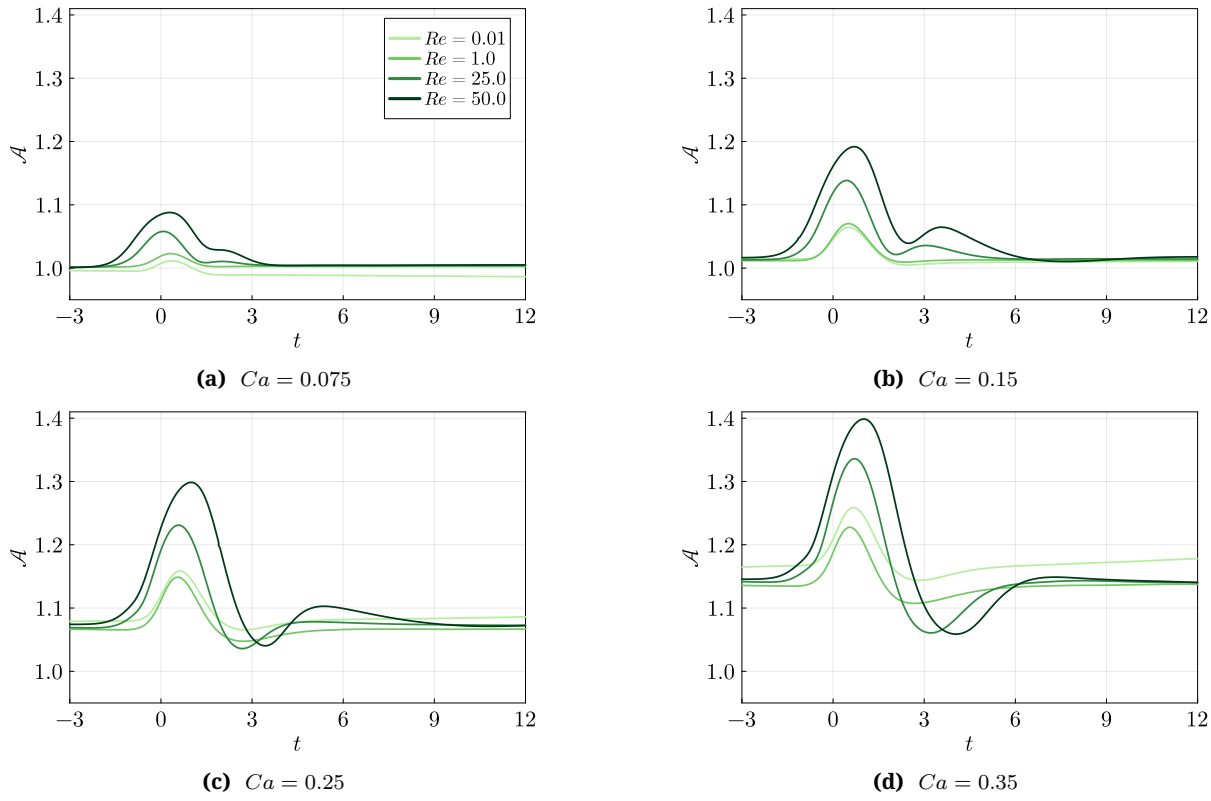
此外，我们在图9中给出了单个胶囊流经拐角时的最大速度和最小速度。在非惯性区间，胶囊的最大速度随 Ca 增大而增大，如图9a所示。在惯性条件下，我们观察到，当 Re 从1变化到50时， V_{max} 增大。在图9a中， $Re = 1$与 $Re = 50$ 之间的 V_{max} 增幅显著，尤其是在 Ca较大时。例如，在 $Ca = 0.35$下，从非惯性区间到高惯性状态，V_{max} 增大约8%。接下来，我们考察最小速度的变化



(a) $Re = 0.01$ **(b)** $Re = 1$

(c) $Re = 25$ **(d)** $Re = 50$

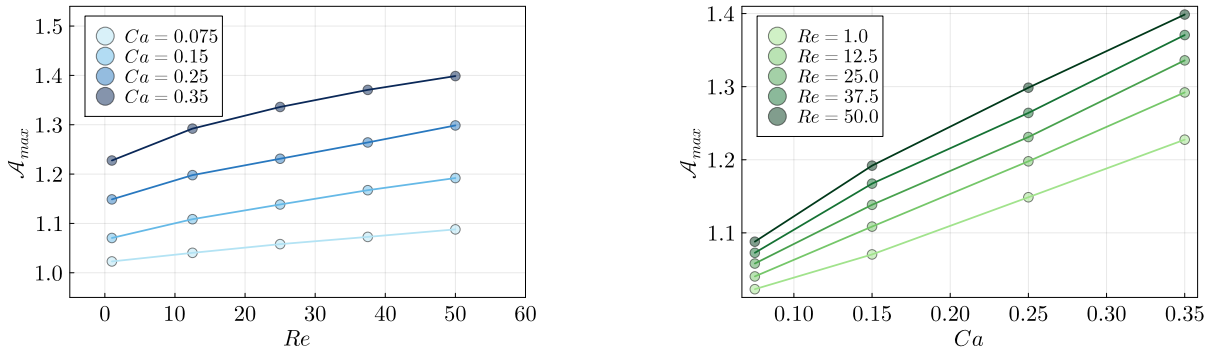
图6： 固定雷诺数下胶囊表面积的时间演化 $\mathcal{A}$ 。



(a) $Ca = 0.075$ **(b)** $Ca = 0.15$

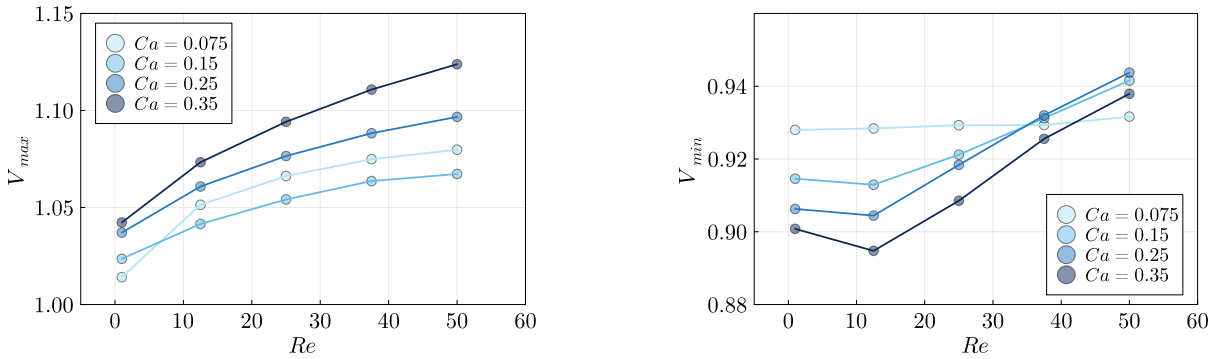
(c) $Ca = 0.25$ **(d)** $Ca = 0.35$

图7： 毛细胶囊表面积的时间演化 $\mathcal{A}$ （毛细数固定）。



(a) $\mathcal{A}_{max}$ 作为 Re的函数　　**(b)** $\mathcal{A}_{max}$ 作为 Ca的函数

图8： 最大　　单个胶囊通过拐角时的最大表面积 $\mathcal{A}_{max}$ 作为 Re 和 Ca的函数。



(a) V_{max}　　**(b)** V_{min}

图1： 单个胶囊通过拐角时，最大（最小）速度 V_{max} （V_{min}）随 Re 和 Ca的变化。

V_{min} 单个胶囊在图9b所示不同 Ca 和 Re 下的情况。总体而言，我们观察到，在 $Re \leq 25$下，无论是非惯性区间还是惯性区间，最小速度都会随 Ca 而降低。在图9b中，我们还观察到，在低惯性且 Ca足够高时， V_{min} 呈现非单调行为：对于 $Ca \geq 0.15$， V_{min} 首先随 Re的增加而降低，在 $Re = 12.5$处达到最小值，随后在 $Re > 12.5$处急剧增加。总体来看，从图9可以观察到，惯性的存在倾向于同时提高胶囊的两个速度极值，尤其是在 Ca较大时。

实验人员实际关注的一个量是胶囊所承受的最大应力，因为它可用于预先预测给定几何形状是否会导致胶囊膜发生塑性变形，甚至破裂[5]。更具体地说，应力张量 $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ 的最大特征值 $\tilde{\sigma}_2$ 能够为膜的机械完整性提供重要信息。在图10中，我们展示了胶囊在 $Ca = 0.35$ 和 $Re = 1$（25和50）下接近并流经拐角时， $\tilde{\sigma}_2$ 在膜表面上的最大值和平均值。我们观察到，$\tilde{\sigma}_{2,\ avg}$呈现出与图7d中观察到的胶囊表面积非常相似的趋势：$\tilde{\sigma}_{2,\ avg}$随时间平滑变化，在 $t = 1$ 附近达到最大值，并在 $t = 2.5$附近出现局部最小值；此外，在低惯性和中等惯性状态 $Re = 1$ 和 $Re = 50$ 之间，偏离稳态的最大值几乎增加了一倍。我们还注意到，进入拐角之前的稳态值 $\tilde{\sigma}_{2,\ avg}$ 与 Re无关，这与图7d中胶囊表面积的情况一致。具体而言，通过比较图7d和图10，我们发现，在 $Ca = 0.35$时，约为1.14的无量纲表面积 $\mathcal{A}$ 对应于约为0.4的平均无量纲膜应力。最大应力的稳态值 $\tilde{\sigma}_{2,\ max}$则在低惯性状态（$Re = 1$）与中等惯性状态（$Re = 25$，50）之间增加了约40%。在拐角内部，$\tilde{\sigma}_{2,\ max}$ 在 $Re = 1$ 和$Re = 50$之间增加了近75%，这证实了处于中等惯性状态的胶囊比处于低惯性状态的胶囊具有更高的破裂风险。

值得注意的是，对于所有 Re，最大应力 $\tilde{\sigma}_{2,\ max}$ 约为平均应力 $\tilde{\sigma}_{2,\ avg}$的两倍：由于我们此前表明，$\tilde{\sigma}_{2,\ avg}$ 与胶囊表面积 – 密切相关，而胶囊表面积是一个相对容易通过实验测量的量 –，因此，实验人员可以将这一观察结果作为经验法则，用于估算胶囊膜中的最大应力并评估膜的机械完整性。

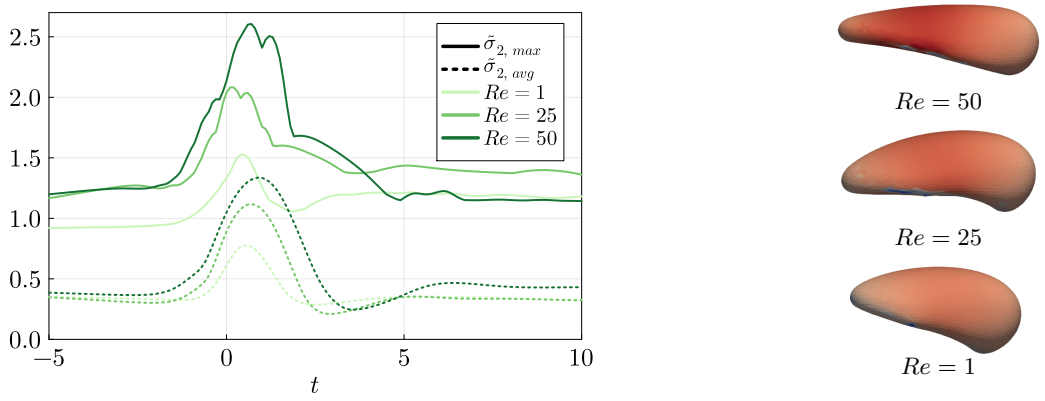


图10： 左：胶囊在 $Ca = 0.35$ 和 $Re = 1$、25 和 50 时的最大张力和平均张力。右：当 $\tilde{\sigma}_{2,\ max}$ 达到其最大值时，按 $\tilde{\sigma}_2$ 着色的胶囊形状。

C. 胶囊形状的演变

现在，我们说明胶囊穿过拐角时的时间演化。图 11 展示了胶囊在对称平面 $z = 0$中连续离散时刻的轮廓。胶囊轮廓分别给出了 $Ca = 0.075$、$Ca = 0.35$ 和 $Re = 0.01$、25 及 50 时的情况。在进入拐角之前，胶囊呈现出由壁面的限域所决定的稳态形状。在 $Ca = 0.35$的情况下，我们观察到了众所周知的“降落伞”形状。在拐角上游，胶囊轨迹与主通道（竖直通道）的中心线重合。当胶囊流经拐角时，其会偏离通道中心线：在非惯性区间，Zhu & Brandt [33] 表明，胶囊轨迹与流线高度吻合。在惯性区间，我们得出了相同的结论。考虑惯性时，随着 Re 增大，胶囊轨迹会穿过次级通道的水平中心线，并逐渐靠近上壁面，随后回归通道中心线。

图11a和图11b显示了在斯托克斯区间内，Ca的影响存在明显差异。将 Ca从0.075增加到0.35，会导致胶囊的平衡形状从轻微变形的椭球体转变为凹形的“降落伞”形状。对于较小的 $Ca = 0.075$，随着 Re 从 $Re = 0.01$ 增加到 $Re = 50$，胶囊的平衡形状保持相似（见图11a、11c和11e）。然而，在较高的 Re下，胶囊在拐角内部的变形变得更加明显，尤其是在图11e中。通过拐角后，对于所有 Re取值，胶囊形状均恢复为在斯托克斯区间内观察到的稳定椭球形状。对于较高的 $Ca = 0.35$，我们观察到，随着 Re增加，胶囊的平衡形状变得越来越凹。在拐角内部，胶囊高度拉长，并且随着 Re − 增加，其尾部也变得越来越长，例如 $Re = 50$情况下的图11f。在高惯性状态下，胶囊与上壁之间会发生强烈的润滑相互作用，从而形成平坦的顶面。

在图12a和图12b中，我们展示了本节所研究的所有工况下，单个胶囊在拐角内达到最大表面积 $\mathcal{A}_{max}$ 和最大速度 V_{max} 时的轮廓。在拐角内，单个胶囊接近上壁面时达到最大表面积，随后很快达到最大速度。从图12a和图12b中，我们尤其观察到，较高的 Re 会使胶囊沿流向拉长，而较高的 Ca 会增加胶囊的凹度。此外，我们注意到，在 Ca较高时，胶囊质心会更靠近轮廓边缘：请注意，图11-12b中绘制的质心对应的是三维胶囊的质心，而非二维轮廓的质心。图11-12b所示结果表明，Ca对胶囊变形有显著影响，而 Re 对胶囊轨迹的影响更为明显，同时也会影响胶囊因拐角上壁处的润滑层而产生的变形。尤其是在 Re较高时，胶囊会发生显著拉伸，这可能导致微流控器件受损，甚至造成破裂。了解 Re对胶囊变形及其造成的损伤的影响，对于设计高效、可靠的微流控器件至关重要。

D. 斯托克斯区间的讨论

我们在图7中观察到，胶囊表面积在 $Re = 1$附近呈现出一种出人意料的非单调行为：在较大的Ca下，胶囊在 $Re = 1$ 处的表面积小于在 $Re = 0.01$ 和 $Re = 25$处的表面积。此外，在图7a中，位于拐角下游 $Re = 0.01$ 和 $Ca = 0.075$ 处的胶囊稳态表面积比

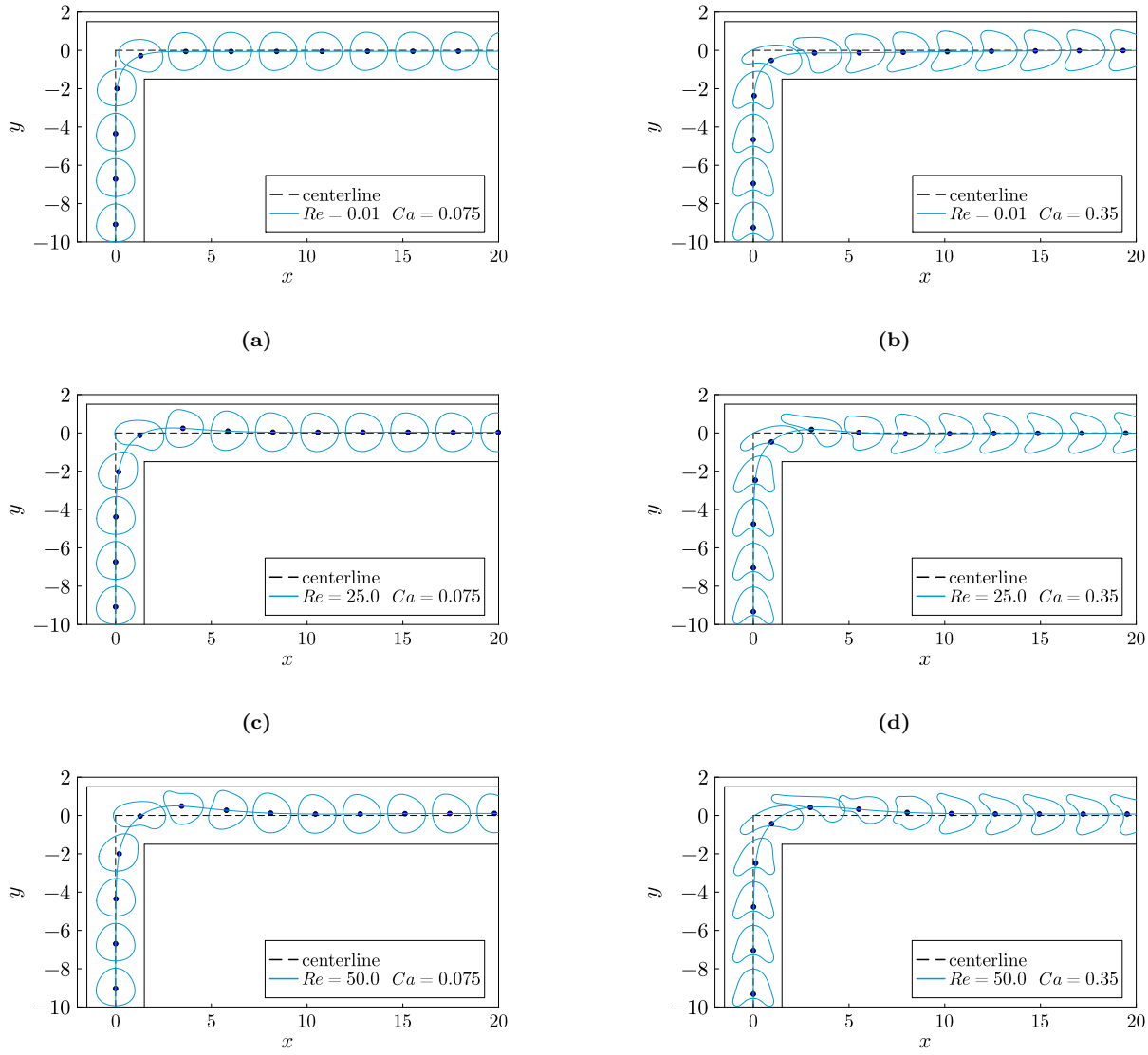


FIG. 11: 不同 Ca 和 Re下的胶囊轮廓序列。每帧之间的时间间隔为 $t = 1.5$.

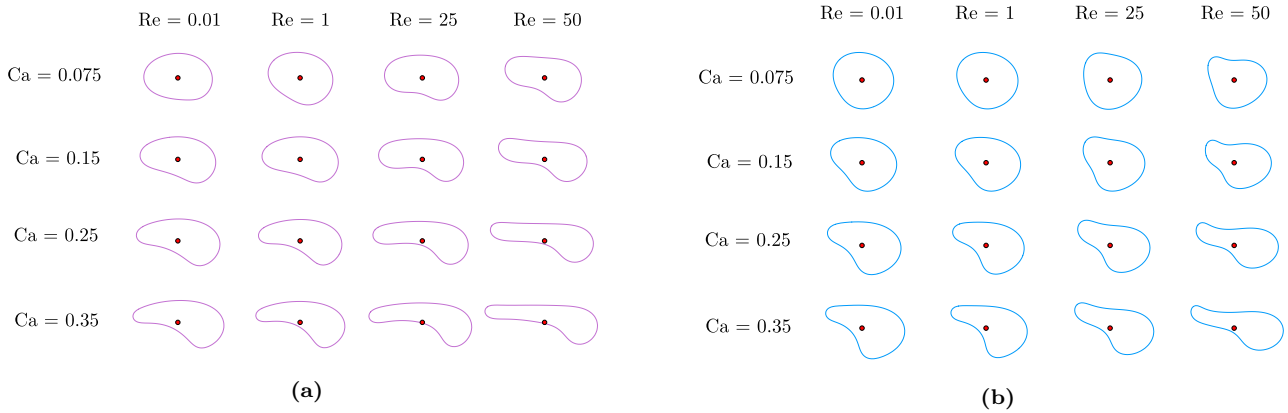


图12： 单个胶囊在不同 Re 和 Ca下通过拐角时的轮廓，其中(a)为最大表面积 $\mathcal{A}$ ，(b)为最大速度 v_{max} 。

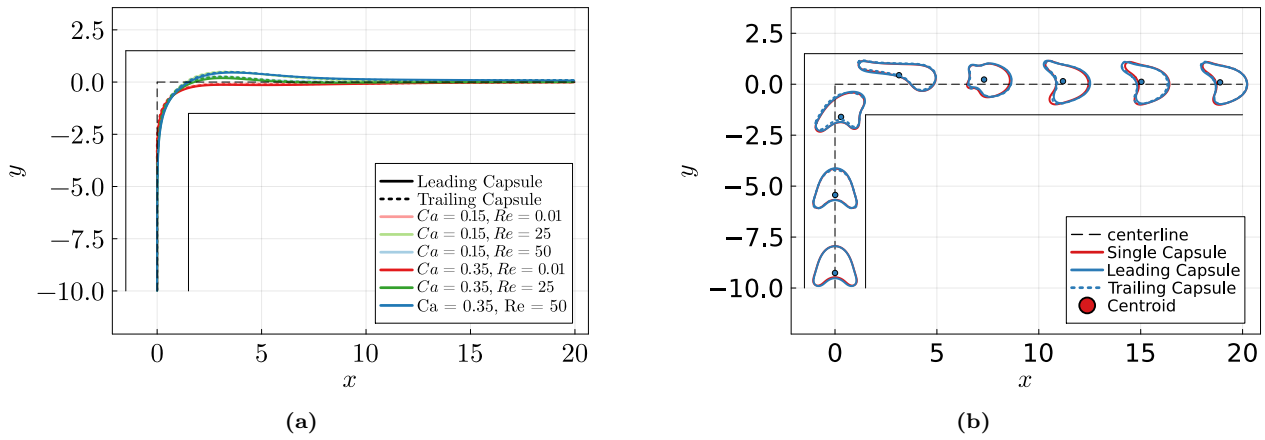


图1： (a) 两个胶囊在不同 Ca 和 Re下的轨迹。(b) 在$Ca = 0.35$、 $Re = 50$、 $d_0 = 0.25$时，前导胶囊和尾随胶囊的轮廓，并与单个胶囊进行比较。

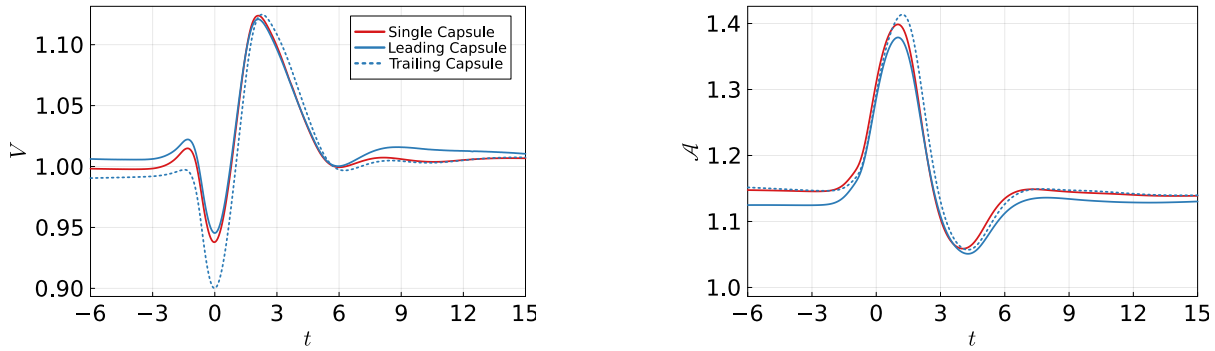
胶囊的初始球形表面积，这表明胶囊内部体积略有损失。这些现象的原因可能与 FTM 的局限性以及仅在 $Re = 0.01$ 情况下数值参数选择欠佳有关。事实上，众所周知，浸入边界法只能渐近地守恒体积，无法达到机器精度。在早期涉及胶囊的 IBM 研究中，体积损失始终很小，通常低于 1% [8–10, 24]。此外，众所周知，斯托克斯条件对基于 PDE 的不可压缩 Navier-Stokes 求解器颇具挑战性，因为在速度黏性泊松问题中求逆的矩阵在低 Re下条件较差。值得注意的是，斯托克斯区间内的胶囊表面积应谨慎解读；不过，这些局限性只影响胶囊表面积，不影响质心速度。此外，我们的求解器在 [40] 中针对斯托克斯条件进行了广泛验证，与 BIM 以及其他 FTM 求解器均表现出极好的一致性。因此，尽管仍需在斯托克斯区间开展进一步研究，但不能排除在高Ca 下， $Re = 0.01$ 处的胶囊表面积在物理上略大于 $Re = 1$处的可能性。最后，本研究的重点是考察胶囊在惯性条件下通过尖角时的运动和变形，也就是说，在这些条件下，我们的 FTM 求解器不会受到上述局限性的影响。

V. 双胶囊系统

本节中，我们考察两个相同的胶囊流经拐角时的情况，并改变胶囊之间的归一化间距˜距离 $d = d/2\tilde{a} - 1$，以及雷诺数和毛细数。Lu等人 [10] 此前研究了流经T形接头的胶囊之间的二元相互作用：他们表明，当 $d_0 \geq 1.3$ 尾随胶囊对前导胶囊的运动影响很小时。相比之下，在他们的T形接头几何结构中，Lu等人观察到，前导胶囊的存在会显著影响尾随胶囊的运动。为深入了解惯性区间和非惯性区间中胶囊流经拐角时相互作用的相关物理特征，我们选取较小的归一化间距 $d_0 = 1$， $1/2$，并且 $1/4$ 考察前导胶囊和尾随胶囊的迁移、动力学及变形等现象。

A. 定性分析：轨迹与胶囊形状

我们首先分析这对胶囊流经拐角时的轨迹和定性形状。图13a展示了在 $Re = 0.01$， 25 和 50 以及 $Ca = 0.15$ 和 0.35 条件下胶囊的轨迹。我们注意到，对应于相同 Ca 的所有曲线均相互重合： Ca 不会影响前导胶囊或尾随胶囊的路径。同样，与 T形接头 [10]中报告的显著不同路径不同，我们发现前导胶囊和尾随胶囊的轨迹没有显著差异。事实上，控制胶囊轨迹的关键参数是雷诺数。随着 Re 增加，惯性会驱使胶囊更靠近上方通道壁，这与第四节中单个胶囊的情况一致。随后，我们在图13b中展示了对称面 $z = 0$ 上的胶囊形状，所示为对应于 $Ca = 0.35$ 和 $Re = 50$ 、初始间距为 $d_0 = 0.25$时变形最明显的胶囊构型。我们将前导胶囊和尾随胶囊的轮廓与相同条件下单个胶囊的轮廓进行比较。定性而言，相互作用的胶囊的变形与单个胶囊的情况相比并无显著



(a) (b)

图1： 时间演化 胶囊在 $Ca = 0.35$处的速度 V和表面积 $\mathcal{A}$， $Re = 50$ 在 $d_0 = 0.25$条件下的变化：前导胶囊、尾随胶囊与单个胶囊的比较。

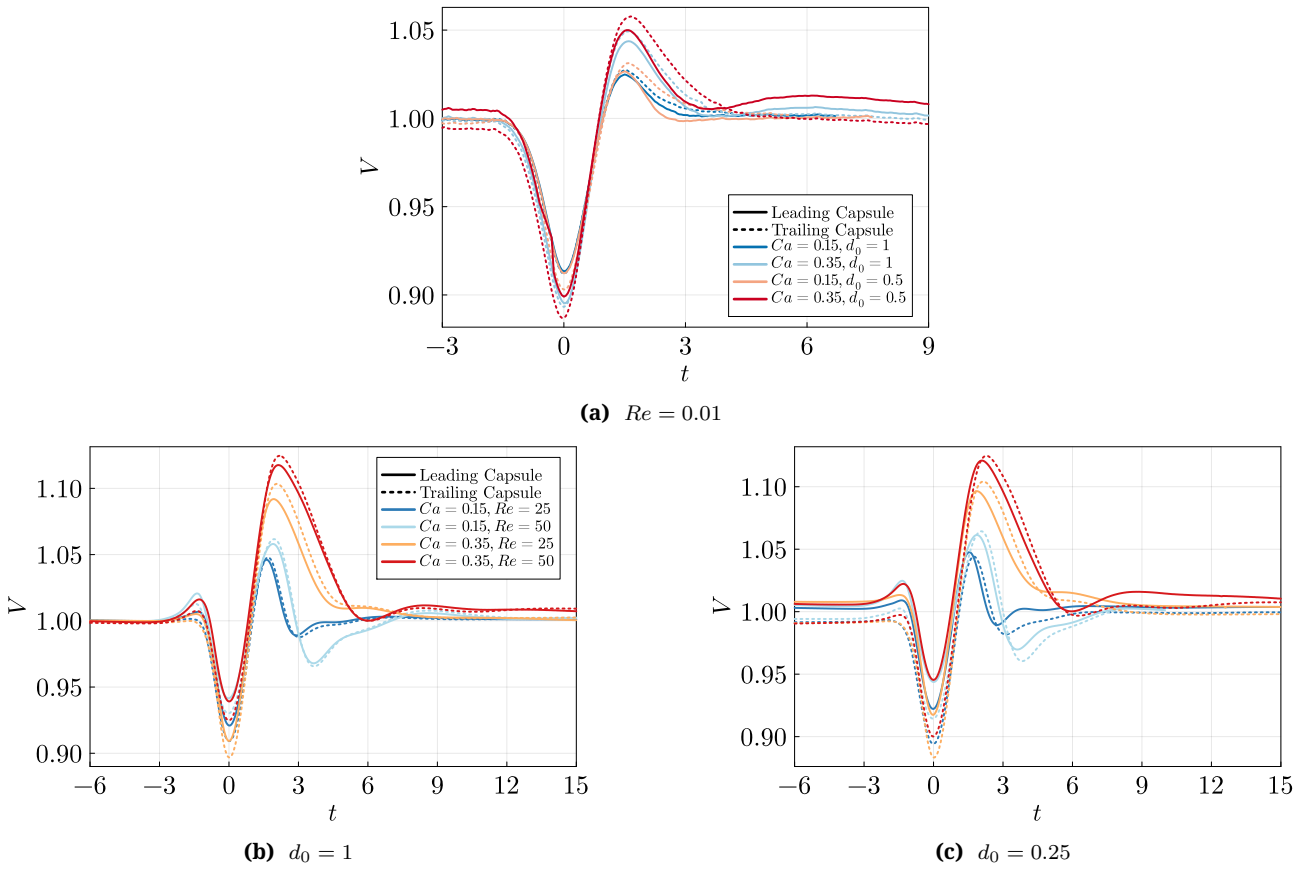
不同。或许更令人意外的是，即使在对应于 $d_0 = 0.25$的强相互作用构型中，前导胶囊和尾随胶囊的定性轮廓也非常相似，几乎重合。请注意，这种定性形状分析依据的是胶囊在对称面 $z = 0$上的轮廓，而前导胶囊和尾随胶囊的实际三维形状可能存在更大差异。

B. 定量分析：速度与膜表面积

现在，我们比较胶囊质心速度的时间演化，以及其表面积随时间的变化，如图14所示。为便于识别相互作用特征，我们首先关注对应于 $Ca = 0.35$、 $Re = 50$ 和 $d_0 = 0.25$的最大变形构型。作为参考，我们还用红色绘出了相同条件下单个胶囊的演化。在本研究的其余部分，除非另有说明，相互作用胶囊的速度均以相同毛细管数和雷诺数条件下单个胶囊的平衡速度 V_{eq} 归一化。采用这种归一化方式，可以对前导胶囊和尾随胶囊的速度进行无偏比较。本节还将单个胶囊的约化速度记为 V_s，前导胶囊的约化速度记为 V_l ，尾随胶囊的约化速度记为 V_t。类似地，分别用 $\mathcal{A}_s$、$\mathcal{A}_l$和 $\mathcal{A}_t$ 表示单个胶囊、前导胶囊和尾随胶囊的归一化表面积。

在图14a中，我们观察到，前导胶囊尚未到达拐角时，其速度已受到尾随胶囊存在的影响，约比单个胶囊高1%。然而， V_l 流经拐角时的极值与 V_s非常接近。经过拐角后， V_l 约比 V_s 大2%，但在更下游处逐渐回落至 V_s 。对于尾随胶囊，我们注意到，前导胶囊的存在对其速度的影响更为明显。在到达拐角之前， V_t 约比 V_s低1%；但在拐角内，其最小值比 V_s低4%。不过， V_t 的最大值与 V_l 和V_s的最大值相同。经过拐角后， V_t 迅速回落至 V_s ，此后保持相近的数值，最终趋近于 V_{eq}。图14b展示了一对胶囊表面积的时间演化。与上文讨论的速度情况类似，前导胶囊的归一化表面积 $\mathcal{A}_l$ 明显受到尾随胶囊存在的影响。前导胶囊的稳态表面积和最大表面积均比单个胶囊低约2%。相比之下，在拐角上游和下游，尾随胶囊的稳态表面积都与单个胶囊非常接近，而其最大值则比单个胶囊高约1%。我们推测，两个胶囊之间较小的间距会扰乱前导胶囊后方的尾流，从而减弱其变形，进而降低其表面积。相反，由于尾随胶囊的尾流不受影响，其表面积与单个胶囊的差异较不显著。

随后，我们展示了不同 Ca、 Re 和 d_0条件下，前导胶囊和尾随胶囊的速度与表面积随时间的演化。我们首先关注胶囊的速度，图15展示了 $Ca = 0.15$ 为 0.35 以及 $d_0 = 0.5$ 为 1 时的情况。两个胶囊的速度均在 $t = 0$ 处达到最小值，并在 $t \approx 2$ 处于$Ca = 0.15$ 和 $Ca = 0.35$时达到最大值。随着 Ca 增大，速度的极值更加显著。初始间距 d_0 对这些极值的影响不太明显，但仍然存在：当 d_0 从 1 减半至 0.5 时，前导胶囊和尾随胶囊的速度最大值均增加约 1%。有趣的是，弛豫时间



(a) $Re = 0.01$

(b) $d_0 = 1$

(c) $d_0 = 0.25$

图1前导胶囊和尾随胶囊在不同 Ca、 Re 和 d_0下的 V 时间演化。

V_t 从 V_{eq} 到 V_l的弛豫时间显著缩短： V_t 时约为 3 个时间单位，而 V_l时则超过 10 个时间单位。图15b和图15c分别绘出了惯性状态下 $Re = 25$ 为 50、$Ca = 0.15$ 为 $Ca = 0.35$ 且 $d_0 = 1$ 为 0.25 时的胶囊速度。结果与非惯性区间相似： Ca 会加大速度偏差，且尾随胶囊的极值更加显著。值得注意的是，图15b和图15c呈现出非常相似的行为：因此，间距似乎不会影响拐角内胶囊的速度；其影响仅限于拐角上游和下游的胶囊速度。我们将在第V节C中进一步讨论这一观察结果。

分析不同 Re、 Ca 和 d_0条件下胶囊的表面积时，我们发现了类似的规律：尾随胶囊的表面积始终大于前导胶囊的表面积；增大毛细管数和雷诺数、减小初始间距，都会强化这一现象。具体而言，表I列出了前导胶囊的最大表面积，表II列出了尾随胶囊的最大表面积。从表I和表II可以看出，前导胶囊的最大表面积最多比尾随胶囊高5%。附录A提供了完整的时间相关数据。

C. 间距的时间演化

现在分析本节所研究的两个受限胶囊之间间距的时间演化。图16显示了 $Ca = 0.15$ 和0.35、 $Re = 25$ 和50以及 $d_0 = 1$、0.5和0.25情况下随时间变化的间距。在该图中，我们注意到，在所有情况下，尾随胶囊释放后，间距都会立即减小。这是因为尾随胶囊释放时呈球形，因此其位置比前导胶囊距离通道壁更远，导致其在达到稳态形状之前先经历加速， – 通常在不到五个时间单位内完成。在 $d_0 = 1$的情况下，当前导胶囊接近拐角时，间距 d保持稳定，随后在拐角内先达到最小值，再达到最大值；当尾随胶囊离开拐角区域后，间距再次趋于稳定。有趣的是，稳定

d_0		$Re = 0.01$	$Re = 25$	$Re = 50$
1	$Ca = 0.15$	1.065	1.138	1.193
	$Ca = 0.35$	1.263	1.334	1.399
0.5	$Ca = 0.15$	1.065	1.135	1.186
	$Ca = 0.35$	1.247	1.323	1.383
0.25	$Ca = 0.15$	1.068	1.129	1.180
	$Ca = 0.35$	1.236	1.308	1.379

表I: 不同 Ca、 Re 和 d_0 下前导胶囊的 $\mathcal{A}_{max}$ 最大表面积。

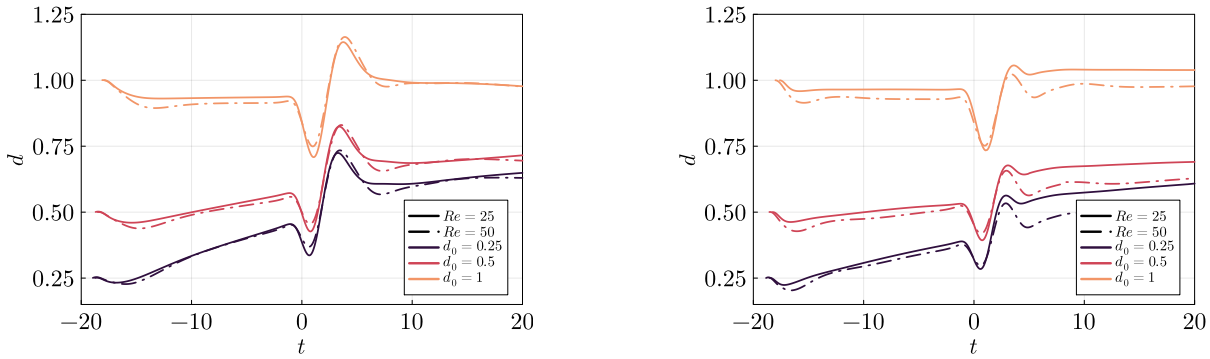
d_0		$Re = 0.01$	$Re = 25$	$Re = 50$
1	$Ca = 0.15$	1.068	1.143	1.201
	$Ca = 0.35$	1.271	1.342	1.417
0.5	$Ca = 0.15$	1.070	1.144	1.204
	$Ca = 0.35$	1.277	1.345	1.414
0.25	$Ca = 0.15$	1.069	1.148	1.204
	$Ca = 0.35$	1.277	1.344	1.41

表II: 不同 Ca、 Re 和 d_0 下尾随胶囊的 $\mathcal{A}_{max}$ 最大表面积。

拐角下游的间距比拐角之前的稳态值最多大10%，这表明拐角会将两个胶囊分隔开来。此外， $Re = 25$ 情况下的初始间距大于 $Re = 50$情况下的初始间距：这只是由我们的释放机制造成的假象。事实上，在 $Re = 50$ 时，胶囊的稳态"降落伞"形状比在 $Re = 25$时展开得更快，因此在 $Re = 50$ 时尾随胶囊朝向前导胶囊的初始加速阶段比在 $Re = 25$ 时更短。当 $d_0 = 0.5$ 和 $d_0 = 0.25$时，我们观察到，间距持续增大，直到胶囊到达拐角区域；在那里，间距呈现出与 $d_0 = 1$情况下相同的行为，并在拐角下游继续增大。虽然在所考察的时间范围内， d 的稳态值尚未明确达到，但我们可以外推其趋势并得出结论：间距似乎会饱和于0.6至0.8之间的数值，具体取决于 Re、 Ca和 d_0。因此，我们所研究的这对受限胶囊表现出一个最小稳定间距 d_{min}。此外，我们注意到，在初始间距较小的情况下， d的斜率更大，这表明胶囊的相对速度是其间距的函数。为进一步研究这一行为，我们在图17中展示了两个胶囊在 $Ca = 0.35$、 $Re = 50$ 和 d_0 时的速度，其中 d_0 从0.25变化到1。我们观察到，在进入拐角之前以及位于拐角下游时，尾随胶囊的速度均低于前导胶囊，并且速度差会随着间距减小而增大。该速度差证实了上述关于间距的观察结果，特别是较小的间距会导致两个胶囊之间更大的相对速度，即更强的排斥行为。此外，我们在图17中注意到，前导胶囊与尾随胶囊之间速度最小值的差异始终大于其速度最大值之间的差异。因此，尾随胶囊在拐角区域内的停留时间始终长于前导胶囊，拐角倾向于将这对胶囊分隔开来。当前对胶囊通过拐角时二元相互作用的分析表明，所研究的两个胶囊确实会在这种几何结构中相互作用，从而影响它们的运动和变形。特别是，尾随胶囊往往比前导胶囊变形更明显，而拐角倾向于将这对胶囊分隔开来。由此自然产生的一个问题是：如果考虑多于两个胶囊，这些效应是否会累积。

VI. 频繁胶囊列车

在最后一节中，我们研究十胶囊序列流经拐角时的行为。我们采用上一节中使用的相同程序插入每个胶囊：当前一个胶囊前进了缩减距离 $\Delta d = 2\tilde{a}(1 + d_0)$ 后，一个新的初始球形胶囊会立即出现在距离拐角 $D_c = 30$ 个半径处。当胶囊距离初始анза



(a) $Ca = 0.15$ **(b)** $Ca = 0.35$

FIG. 16: d 在不同初始间距 d_0 和雷诺数 Re下的时间演化 .

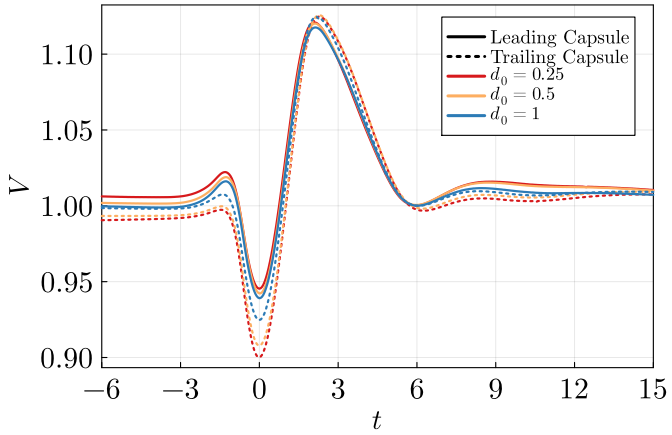
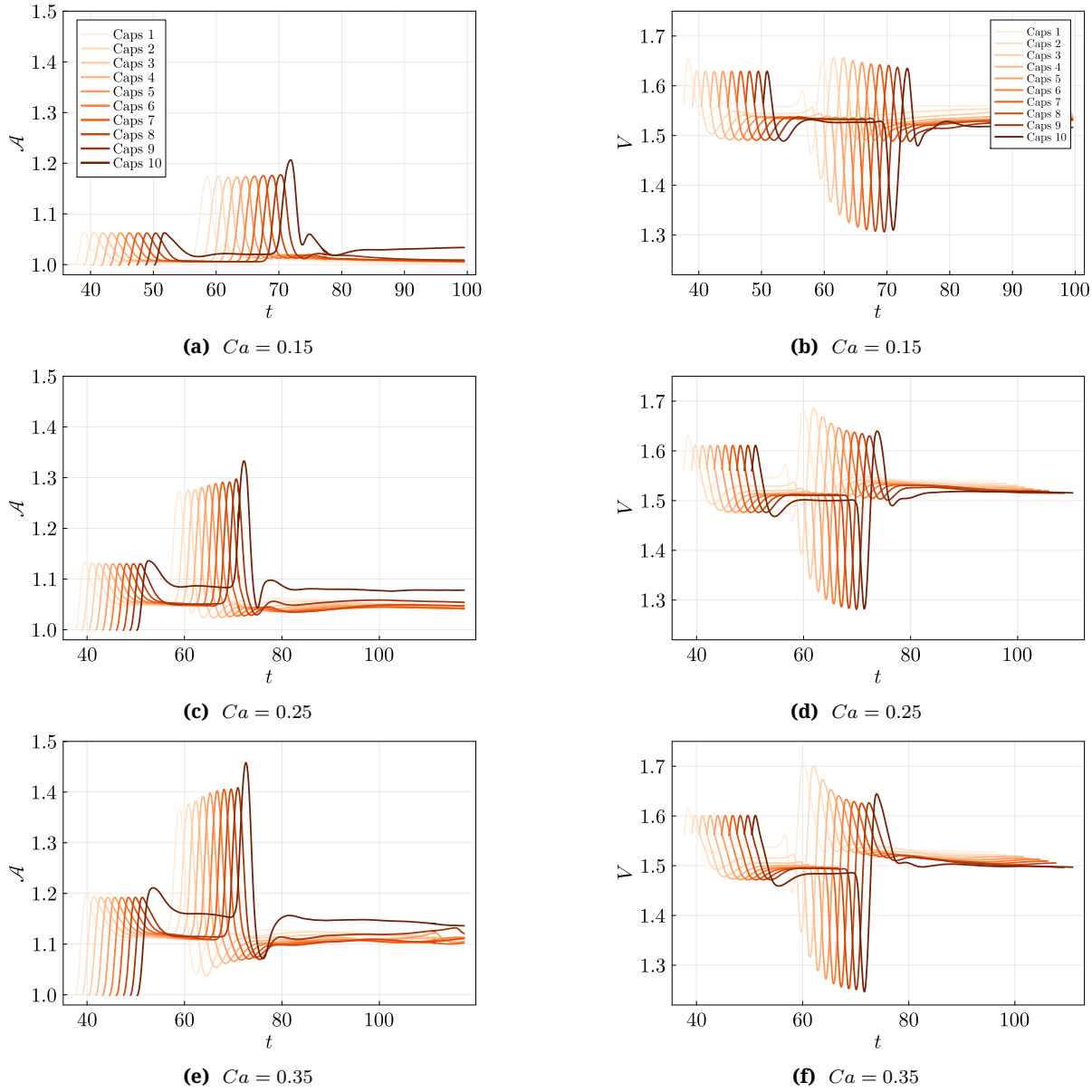


图17： t 的影响 初始间距 d_0 对 $Ca = 0.35$处胶囊速度 V演化的影响， $Re = 50$.

距离流出边界一个直径。我们的目标是确定：当考虑的胶囊数量超过两个时，先前双胶囊分析的发现是否会累积，尤其是胶囊表面积增大以及第 V 节中报告的分离效应。为此，我们在图 18 中绘制了当 $Re = 50$, $d_0 = 0.125$ 和 Ca 从 0.15 到 0.35 变化时，队列中每个胶囊的归一化表面积和速度。 $d_0 = 1$ 情况下得到的同一图示见附录 B。在图 18 中，颜色的深浅对应胶囊在队列中的位置：颜色越深，胶囊数量越大，即沿胶囊列越靠下游。如第 V 节所述，胶囊表面积和速度的初始峰值是插入伪影，并不影响本节重点讨论的物理现象。我们在图 18 中观察到，最后一个胶囊的行为与队列中其他胶囊显著不同。在第 V 节中，我们推测前导胶囊和尾随胶囊的表面积差异，是因为前导胶囊的尾流受到尾随胶囊存在的显著影响。图 18 中的当前观察结果证实了这一说法：队列中的所有胶囊的尾流都会受到尾随胶囊的影响，唯独最后一个胶囊例外。因此，它的变形更大，并延伸至更靠近通道壁的位置，从而降低了它的速度。我们还注意到，在图 18 中，这种效应会随着 Ca增大而增强。虽然在一对胶囊的情况下这一效应值得关注，但对于胶囊列的研究而言，它的关联性较低，因为典型的微流体应用只与胶囊列的核心部分有关。因此，本节余下部分的分析将聚焦于队列中的前九个胶囊。

正如预期的那样，对于每个胶囊以及所有 Ca，在到达拐角之前，直通道中都会达到稳态。随着胶囊数量的增加，即随着我们沿胶囊串向下游移动，尽管稳态表面积保持不变，但我们观察到胶囊的速度逐渐降低。特别是，第一个胶囊与第九个胶囊的稳态速度之差会随着 Ca 的增加而增大。当胶囊进入拐角区域时，它们呈现出此前在第四节和第五节中描述过的典型变化模式，随后逐渐趋于稳态值。对于胶囊的速度和表面积而言，不同胶囊的偏差模式形状都表现出惊人的相似性，只是在时间和幅度上存在偏移。更准确地说，



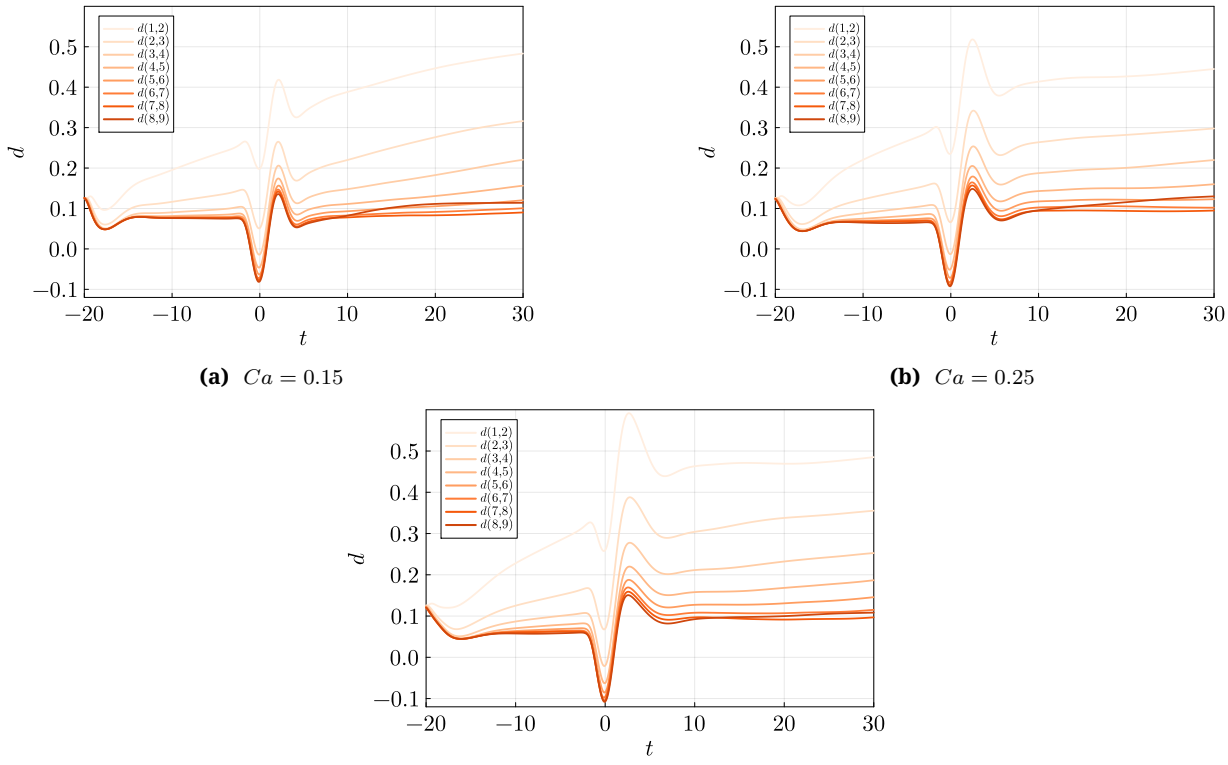
(a) $Ca = 0.15$ **(b)** $Ca = 0.15$

(c) $Ca = 0.25$ **(d)** $Ca = 0.25$

(e) $Ca = 0.35$ **(f)** $Ca = 0.35$

图 18： 在 $Re = 50$ 和 $d_0 = 1/8$ 条件下， $Ca = 0.15$、0.25 和 0.35 时十个胶囊的约化表面积和速度的时间演化。

随着胶囊数量增加，表面积曲线向上移动，而速度曲线向下移动。因此，随着胶囊数量增加，胶囊的最大表面积增大，速度极值减小。 Ca 增大时，这种行为会更加明显。此外，我们在图 19 中比较了队列中每对胶囊之间的归一化间距 d 。在图 19 中，每条曲线在时间上都经过平移，使得 $t = 0$ 对应于 d_{min} 位于拐角内。对于所有 Ca，我们观察到，第一个和第二个胶囊之间的间距 d(1,2)增大至接近 0.5 的稳态值，并且拐角对 d(1,2)的下游演化影响甚微：这一行为与上一节研究的两个胶囊的情况相同。然而，沿胶囊串向下游移动时，拐角之前 d 的增长越来越慢，直到胶囊数量大于 7 时保持恒定，达到一个稳态值$d \approx 0.7$，该值仅随 Ca增大而略微降低。拐角引起的瞬态阶段结束后，胶囊数量 i 大于 7 时， $d(i, i+1)$达到一个略高于进入拐角前的稳态值。换言之，拐角会增大间距，因此表现出分离效应。无论初始间距 d_0如何，都能观察到这种分离效应；上一节仅考虑两个胶囊时也是如此。



(a) $Ca = 0.15$ **(b)** $Ca = 0.25$

(c) $Ca = 0.35$

图 19： d 对于由 10 个胶囊组成的队列，在 $Re = 50$ 和 $d_0 = 0.125$ 条件下随时间的演化，分别对应于 (a) $Ca = 0.15$、(b) $Ca = 0.25$ 和 (c) $Ca = 0.35$。

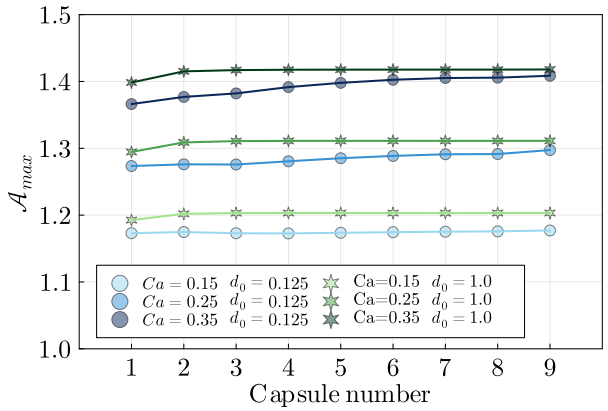


图 20： $\mathcal{A}_{max}$ 作为胶囊数量的函数。

最后，为了进一步研究胶囊数量对囊泡动力学的影响，我们在图 20—21 中绘制了不同毛细数和间距下队列中每个胶囊的最大表面积以及最大和最小速度。第一个胶囊与第九个胶囊之间的最小速度差异（最大速度差异）在 $Ca = 0.35$ 时约为 15%（约 7%），而在 $Ca = 0.15$时约为 11%（约 2%）。类似地，第一个胶囊与第九个胶囊之间的最大表面积差异在 $Ca = 0.35$ 时约为 4%，在 $Ca = 0.15$时小于 1%。这些结果对应于 $d_0 = 0.125$；而在 $d_0 = 1$ 的情况下，胶囊表面积和速度的极值偏差均低于 1%（$Ca = 0.35$ 的情况除外，此时速度偏差为 2%）。在 $d_0 = 1$ 情况下观察到的极小偏差表明，对于该间距，胶囊之间的相互作用非常弱。因此，存在一个临界间距 d_c，当间距低于该值时会观察到胶囊相互作用，其中 $0.125 < d_c < 1$。

d_c 小于这一事实 1 令人惊讶的是，归一化间距为 $d_0 = 1$ 通常会被

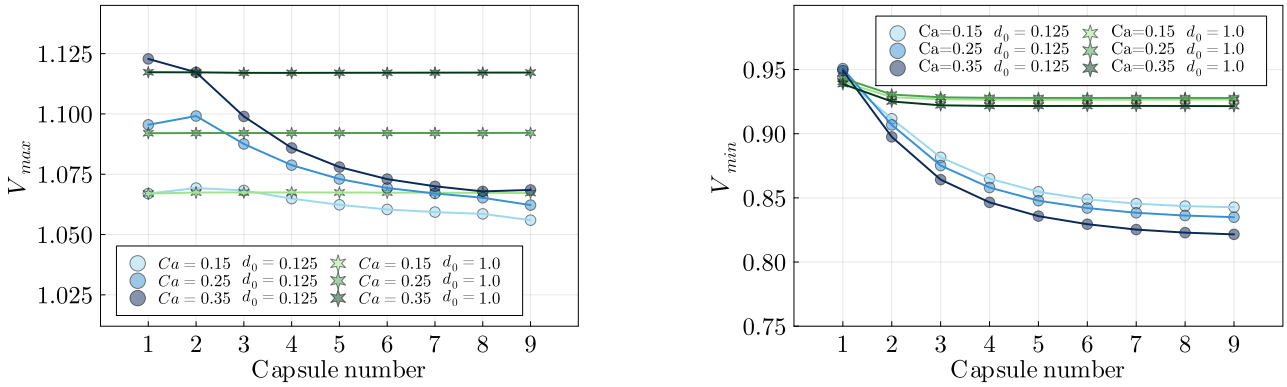


图 21： (a) V_{max} 和 (b) V_{min} 随胶囊数量的变化。

归类为其他几何构型中的强相互作用区间，例如 Lu等人 [10]研究的 T形接头。我们观察到相互作用较弱，主要可能是因为胶囊在拐角区域的停留时间较短。事实上，Lu等人表明，在 T形接头几何构型中，停留时间是决定胶囊所选路径的关键因素。临界间距如此之小的另一个原因，与我们研究的构型受到高度限制有关：胶囊形状和行为主要受壁面影响，而其他胶囊引起的流场微小扰动对每个胶囊动力学的影响微乎其微。未来的研究可以探索更宽通道中胶囊串的动力学，即在限制较少的构型中，每个胶囊受到前方相邻胶囊尾流扰动的影响可能更大。

七、结论

本研究探讨了三维弹性胶囊在惯性和非惯性状态下流经尖角时的动力学行为。分析了在尖角上游释放单个胶囊、两个胶囊以及由十个胶囊组成的队列时，胶囊的轨迹、表面积、速度和膜应力。通道雷诺数范围为 0.01 至 50，表示黏性应力与弹性应力之比的毛细数范围为 0.075 至 0.35，两个胶囊之间的初始归一化间距则从 1 变化至 0.125。本研究旨在提供实用指南，以便预测胶囊破裂并估算惯性微通道中的通量。

Zhu & Brandt [33], 此前研究了无惯性情况下单个胶囊的行为，并报告称，无论毛细数如何，胶囊都会紧随流线运动。在惯性流中，我们发现，对于所考察的所有雷诺数和毛细数，这一结论仍然成立。由于惯性流的流线会穿过次级通道的中心线 – （即拐角下游的水平通道 –），随着雷诺数增大，胶囊的位置会越来越靠近上壁，在毛细数较大的情况下尤其如此。然而，得益于强烈的润滑力，未观察到胶囊与次级通道壁面发生碰撞。在他们的研究中，Zhu & Brandt 还分析了胶囊质心的速度以及胶囊膜的表面积：他们发现，胶囊速度在拐角处降低，并在刚经过拐角后升高，且膜的可变形性越大，速度超调越明显。研究还发现，胶囊表面积达到最大值的时间略晚于速度达到最小值的时间。在惯性区间内，我们观察到，随着雷诺数增大，这种行为会更加明显。然而，我们在 $Re = 1$ 得到的结果与非惯性区间中的结果并无显著差异，这与 Wang 等人 [8, 9]得出的相同结论相吻合。此外，在惯性足够强时，随着胶囊弛豫至稳态，会观察到胶囊表面积低于平衡表面积。换言之，胶囊经过拐角后会立即围绕其稳态形状振荡。这一现象会随着毛细数增大而更加明显。此外，我们报告称，只要毛细数保持在 0.35 以下，胶囊最大表面积 $\mathcal{A}_{max}$ 与雷诺数之间便呈线性关系。在 $Ca = 0.35$， $\mathcal{A}_{max}$ 与 Re 之间的关系并非完全线性，曲线 $\mathcal{A}_{max}(Re)$略呈凹形。此外，从 $Re = 1$ 到 $Re = 50$，最大表面积在整个 Ca范围内近乎线性地增加。在 $Ca = 0.35$，我们比较了膜应力与胶囊表面积，发现：(i) 平均应力的时间演化与膜表面积的时间演化高度相关；(ii) 在我们的构型中，最大应力值是平均应力值的两倍

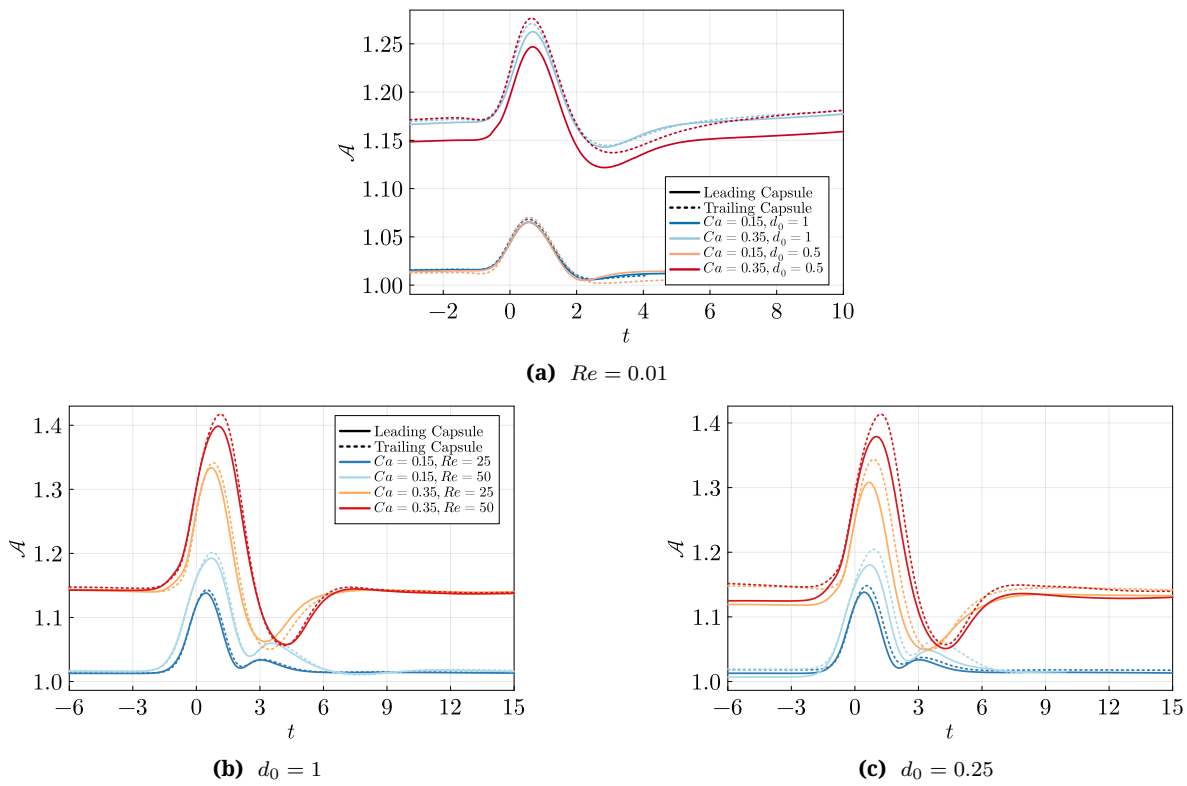
。因此，通过实验观察胶囊表面积，可以可靠地了解平均应力，并估算胶囊的最大应力。这一发现对于设计需要避免胶囊破裂的微流控器件，以及开发旨在实现可控胶囊破裂的靶向药物递送方法，都至关重要。

随后，我们研究了拐角几何结构中多个胶囊之间的相互作用。首先，考察了初始间距不同的两个胶囊。与单个胶囊的情况类似，前导胶囊和尾随胶囊的轨迹均未表现出明显偏离流线的现象。在所考察的初始间距范围内，尾随胶囊的速度通常低于前导胶囊的速度，也低于相同雷诺数和毛细数条件下单个胶囊的速度。类似地，前导胶囊的速度高于相同条件下单个胶囊的速度。这种速度差也体现在这对胶囊之间间距的时间演化 d 中。具体而言，我们发现，初始位于 $d_0 \leq 0.5$ 的胶囊往往会彼此分离。这表明两个受限胶囊之间存在一个最小稳定间隙$d_{min} > 0.5$ 。这一效应的系统分析留待未来研究。相反，在拐角内部，尾随胶囊的表面积大于相同条件下前导胶囊和单个胶囊的表面积。然而，在我们考虑的强限域构型中，即使胶囊彼此非常接近，这些效应的幅度也很小：前导胶囊和尾随胶囊的速度与单个胶囊相比仅相差几个百分点。接下来，我们考察了胶囊串的情况，并试图确定两个胶囊中观察到的效应是否会累积。初始间距较大时 $d_0 = 1$不会发生相互作用；而在 $d_0 = 1/8$的情况下，我们发现尾随胶囊的稳态表面积和极值表面积最多增加 5%，并最终在胶囊串尾部、约第九个胶囊处达到饱和。在所有情况下，拐角都会使这对胶囊以及胶囊串彼此分离；对拐角区域内胶囊速度时间演化的分析进一步证实了这一点。

我们认为，本研究向制定实用指南迈进了一步，有助于避免胶囊在惯性和非惯性微流控实验中发生破裂。未来的研究可以考察具有应变-˜硬化弹性行为的胶囊膜，例如由 Skalak 定律 [45], 所描述的膜，同时改变约束比 $\beta = 2\tilde{a}/W$ ，以研究高通量微流控器件。特别是在较低约束比的情况下，我们预计会观察到更强的胶囊相互作用，以及胶囊在拐角内部及下游沿横向流的迁移。最后，本研究还有助于开发膜表征技术，通过胶囊沿拐角运动过程中随时间变化的演化，推断所关注胶囊的黏弹性膜性质。

附录 A：两个相互作用的胶囊的表面积随时间的演化

图 22 展示了非惯性区间内（图 22a）以及在 $Re = 25$ 和 $Re = 50$ 条件下，领先胶囊和尾随胶囊表面积的演变，其中初始间距 d_0 分别为 1（图 22b）和 0.25（图 22c）。



(a) $Re = 0.01$

(b) $d_0 = 1$

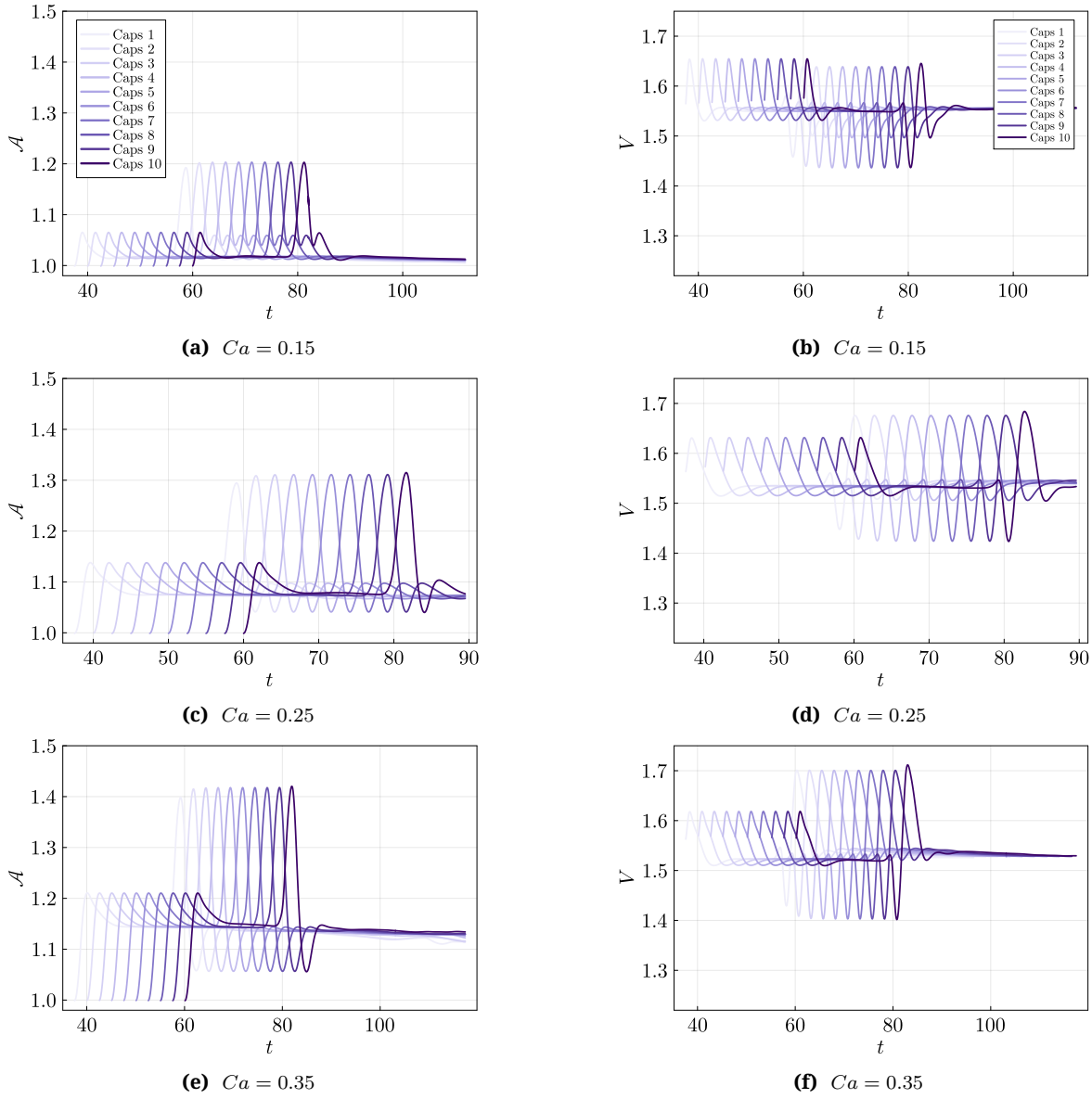
(c) $d_0 = 0.25$

图 22： 不同间距 d_0 以及不同毛细管数和雷诺数 Ca 和 Re下，前导胶囊与尾随胶囊的约化表面积 $\mathcal{A}$ 随时间的演化。

附录 B：大初始间距下的胶囊串

我们在图23中给出了由10个胶囊组成的队列以 $Re = 50$、 $Ca = 0.35$ 流经拐角时，每个胶囊的表面积和速度的时间演化，以及胶囊之间减小的初始间距$d_0 = 0.125$。如图所示，在这一状态下，各胶囊之间没有相互作用，因为每个胶囊的表面积和速度演化几乎完全相同。

[1] D. Barthes-Biesel，“流动中弹性胶囊和囊泡的运动与变形”， *Annual Review of fluid mechanics*，第 48 卷，第 25–52 页，2016 年。[2] Y. H. Bae 和 K. Park，“肿瘤靶向药物递送：神话、现实与可能性”， *Journal of controlled release*，第 153 卷，第 3 期，第 198 页，2011 年。[3] P. Kumari、B. Ghosh 和 S. Biswas，“用于癌症靶向药物递送的纳米载体”，*Journal of drug targeting*，第 24 卷，第 3 期，第 179–191 页，2016 年。[4] L. Zhu、C. Rorai、D. Mitra 和 L. Brandt，“按可变形性分选胶囊：一项数值研究”，*Soft Matter*，第 10 卷，第 39 期，第 7705–7711 页，2014 年。[5] E. H¨aner、D. Vesperini、A.-V. Salsac、A. Le Goff 和 A. Juel，“根据刚度对胶囊进行分选：从原理到应用”， *Soft Matter*，第 17 卷，第 13 期，第 3722–3732 页，2021 年。[6] E. H¨aner、M. Heil 和 A. Juel，“T形接头中胶囊的变形与分选”，*Journal of Fluid Mechanics*，第 885 卷，A4 页，2020 年。[7] Y. Fang、S. Zhu、W. Cheng、Z. Ni 和 N. Xiang，“使用微型惯性微流控离心机高效提取生物颗粒”， *Lab on a Chip*，第 22 卷，第 18 期，第 3545–3554 页，2022 年。[8] Z. Wang、Y. Sui、A.-V. Salsac、D. Barth`es-Biesel 和 W. Wang，“有限惯性下球形胶囊在分支管道流动中的运动”， *Journal of Fluid Mechanics*，第 806 卷，第 603–626 页，2016 年。[9] Z. Wang、Y. Sui、A.-V. Salsac、D. Barth`es-Biesel 和 W. Wang，“球形胶囊在微流控分支通道中的路径选择：迈向富集装置的设计”， *Journal of Fluid Mechanics*，第 849 卷，第 136–162 页，2018 年。



(a) $Ca = 0.15$ **(b)** $Ca = 0.15$

(c) $Ca = 0.25$ **(d)** $Ca = 0.25$

(e) $Ca = 0.35$ **(f)** $Ca = 0.35$

图23： $Ca = 0.15$下， $Re = 50$ 和 $d_0 = 1$ 时十个胶囊的约化表面积和速度随时间的演化，0.25和0.35。

[10] R. Lu, Z. Wang, A.-V. Salsac, D. Barth`es-Biesel, W. Wang, and Y. Sui, 《分支微通道中球形胶囊列的路径选择》，*Journal of Fluid Mechanics*，第923卷，2021年。[11] J. Gubspun, P.-Y. Gires, C. d. Loubens, D. Barthes-Biesel, J. Deschamps, M. Georgelin, M. Leonetti, E. Leclerc, F. Edwards-L´evy, and A.-V. Salsac, 《交联血清白蛋白微胶囊力学性质的表征：尺寸和蛋白质浓度的影响》，*Colloid and Polymer Science*，第294卷，第8期，第1381–1389页，2016年。[12] T. Lin, Z. Wang, R. Lu, W. Wang, and Y. Sui, 《一种表征流动微胶囊膜黏度的高通量方法》，*Physics of Fluids*，第33卷，第1期，第011906页，2021年。[13] Z. Wang, R. Lu, W. Wang, F. Tian, J. Feng, and Y. Sui, 《癌细胞通过狭窄微通道的计算模型》，*Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*，第1–15页，2023。[14] Z. Zhu, D. Wu, S. Li, Y. Han, N. Xiang, C. Wang, and Z. Ni, 《一种采用拼图法制造、用于精确基于尺寸的细胞分离的聚合物薄膜惯性微流控分选器》，*Analytica Chimica Acta*，第1143卷，第306–314页，2021年。[15] A. E. Green and J. E. Adkins, 《大弹性变形与非线性连续介质力学》，1960年。[16] D. Barthes-Biesel and J. Rallison, 《线性剪切流中自由悬浮胶囊的时变形变》，*Journal of Fluid Mechanics*，第113卷，第251–267页，1981年。[17] C. Pozrikidis, 《简单剪切流中由弹性膜包围的液囊的有限变形》，*Journal of Fluid Mechanics* 297, 123 152, 1995，第 卷，第 – 页。

[18] S. Ramanujan and C. Pozrikidis, 《简单剪切流中由弹性膜包围的液囊的变形：大变形及流体黏度的影响》, *Journal of fluid mechanics*, 第361卷, 第117–143页, 1998年。[19] C. Pozrikidis, 《膜弯曲刚度对简单剪切流中胶囊变形的影响》, *Journal of Fluid Mechanics*, 第440卷, 第269页, 2001年。[20] C. Pozrikidis, 《流动诱导红细胞变形的数值模拟》, *Annals of biomedical engineering*, 第31卷, 第10期, 第1194–1205页, 2003年。[21] H. Zhao, A. H. Isfahani, L. N. Olson, and J. B. Freund, 《流动血细胞的谱边界积分法》, *Journal of Computational Physics*, 第229卷, 第10期, 第3726–3744页, 2010年。[22] X.-Q. Hu, B. S´ev´eni´e, A.-V. Salsac, E. Leclerc, and D. Barth`es-Biesel, 《方形截面微流控通道中流动胶囊的膜性质表征：膜本构定律的影响》, *Physical Review E*, 第87卷, 第6期, 第063008页, 2013年。[23] S.-Y. Park and P. Dimitrakopoulos, 《微流控狭窄部中弹性胶囊的瞬态动力学》, *Soft matter*, 第9卷, 第37期, 第8844–8855页, 2013年。[24] P. Balogh and P. Bagchi, 《复杂几何结构中细胞尺度血流建模的计算方法》, *Journal of Computational Physics* 334, 280 307, 2017 , 第 卷, 第 – 页。[25] P. Balogh and P. Bagchi, 《模拟微血管网络分叉部位的红细胞分配分析》, *Physics of Fluids*, 第30卷, 第5期, 第051902页, 2018年。[26] P. Balogh and P. Bagchi, 《模拟微血管网络中的无细胞层》, *Journal of fluid mechanics*, 第864卷, 第768–806页, 2019年。[27] G. Bugliarello and J. Sevilla, 《细玻璃管中稳态和脉动血流的速度分布及其他特征》, *Biorheology*, 第7卷, 第2期, 第85–107页, 1970年。[28] B. Namgung, P. K. Ong, P. C. Johnson, and S. Kim, 《无细胞层变化对小动脉壁面剪切应力的影响》, *Annals of biomedical engineering*, 第39卷, 第359–366页, 2011年。[29] S. K. Doddi and P. Bagchi, 《惯性对简单剪切流中两个液囊间流体动力学相互作用的影响》, *International journal of multiphase flow*, 第34卷, 第4期, 第375–392页, 2008年。[30] A. Kilimnik, W. Mao, and A. Alexeev, 《通道流中可变形胶囊的惯性迁移》, *Physics of fluids*, 第23卷, 第12期, 第123302页, 2011年。[31] A. H. Raffiee, S. Dabiri, and A. M. Ardekani, 《微通道中可变形胶囊的弹性惯性迁移》, *Biomicrofluidics*, 第11卷, 第6期, 第064113页, 2017年。[32] S. Ebrahimi and P. Bagchi, 《弯曲微通道中可变形胶囊的惯性与非惯性聚焦》, *Journal of Fluid Mechanics* 929, 2021 , 第 卷。

[33] L. Zhu and L. Brandt, 《变形胶囊通过拐角时的运动》, *Journal of Fluid Mechanics*, 第770卷, 第374–397页, 2015年。[34] D. P. Huet, 2022年。[35] W. Helfrich, 《脂质双层的弹性性质：理论与可能的实验》, *Zeitschrift für Naturforschung c*, 第28卷, 第11-12期, 第693–703页, 1973年。[36] O.-Y. Zhong-Can and W. Helfrich, 《囊泡膜的弯曲能：形状能一阶、二阶和三阶变分的一般表达式及其在球体和圆柱体中的应用》, *Physical Review A* 39, 10, 5280, , 第 卷, 1989 第 页。[37] C. Pozrikidis, 《胶囊和生物细胞的计算流体动力学》, 2010年。[38] C. Pozrikidis, 《红细胞的静息形状与膜自发曲率》, *Mathematical Medicine and Biology: A Journal of the IMA* 22, 1, 34 52, 2005 , 第 卷, 第 – 页。[39] A. Z. Yazdani and P. Bagchi, 《稀剪切流中单个红细胞和双凹囊的相图与呼吸动力学》, *Physical Review E*, 第84卷, 第2期, 第026314页, 2011年。[40] D. P. Huet and A. Wachs, 《用于大型复杂区域中浸没生物囊的笛卡尔八叉树自适应前沿跟踪求解器》, *arXiv preprint arXiv:2211.15814*, 2022年。[41] S. Popinet, 《Serre–Green–Naghdi方程的四叉树自适应多重网格求解器》, *Journal of Computational Physics* 302, 336 358, 2015 , 第 卷, 第 – 页。[42] C. Peskin, 《心脏血流的数值分析》, *Journal of Computational Physics* 25, 3, 220 252, , 第 卷, 1977 第 – 页。[43] C. Peskin, 《浸入边界法》, *Acta Numerica*, 第11卷, 第1期, 第479–517页, 2002年。[44] M. Uhlmann, 《采用直接强制法模拟颗粒流的浸入边界法》, *Journal of Computational Physics* 209, 2, 448 476, 2005 , 第 卷, 第 – 页。[45] R. Skalak, A. Tozeren, R. Zarda, and S. Chien, 《红细胞膜的应变能函数》, *Biophysical journal*, 第13卷, 第3期, 第245页, 1973年。