

# 微型管中液滴流动的三维数值模拟<sup>1)</sup>

于召亮 \* 秦太验 <sup>\*,2)</sup> 练国平 †

<sup>\*</sup>(中国农业大学理学院, 北京 100083)

<sup>†</sup>(Unilever Research Colworth Laboratory, Sharnbrook, Bedford MK44 1LQ, UK)

**摘要** 对于微型设备中的低雷诺数流动, 毛细力和黏性力起主导作用。应用相场方法, 引入自由能泛函, 研究了二相流体在微型管中流动问题及表面浸润现象, 并给出了微型管中二相流体的无量纲输运方程。针对方形微管道, 利用差分法给出了输运方程的数值求解方法。最后, 模拟了方形直管中的液滴流动和变形的过程, 并给出了液滴前后压力差与其它主要物理参数之间的变化关系。结果表明, 压力差随液滴半径增大而增加, 而随毛细管系数的增大而减小。

**关键词** 相场方法, 毛细管系数, 表面张力, 二相流体, 液滴变形

## NUMERICAL SIMULATION OF DROPLET FLOW IN A THREE-DIMENSIONAL MICROFLUIDIC DEVICES<sup>1)</sup>

YU Zhaoliang\* QIN Taiyan<sup>\*,2)</sup> LIAN Guoping<sup>†</sup>

<sup>\*</sup>(College of Sciences, China Agriculture University, Beijing 100083, China)

<sup>†</sup>(Unilever Research Colworth Laboratory, Sharnbrook, Bedford MK44 1LQ, UK)

**Abstract** For low Reynolds number flow in a micro-fluidic device, the capillary and viscous stresses are more important than the inertial forces, as is characteristic of the micro-fluidic devices. Based on the free energy function, a phase-field method is applied for the two-phase flow in a micro-fluidic device and the interaction of the fluid components with a wall. The transport equations of dimensionless form for the two-phase flow are obtained. To solve the transport equations for a micro-fluidic square pipe, a numerical method is proposed using the finite difference method. The numerical simulation of the flow and the deformation of a droplet in a cubic pipe is carried out, and the effects of the capillary number and the drop radius on the deformation and the additional pressure drop ahead of and behind the droplet are studied. The simulations show that the additional pressure drop increases with the droplet size, and decreases with the capillary number.

**Key words** phase field method, capillary number, surface tension, binary fluid, droplet deformation

## 引言

生物芯片、微机电、微传感器等的出现为医学、生物学带来了革命性的进展。随着微流体设备在机械、生物、医药及化学等领域的广泛应用, 微流体控制技术便成为国内外学者的热门研究课题。本文涉及体系中的流动为层流, 所以动量及质量传输可以得到精确控制, 这样在空间限定区域内, 少量的化学物种就能被集聚, 比如, 启动快速混和时间<sup>[1]</sup> 和

反应动力学的高分辨率<sup>[2]</sup>。在两相系统条件下, 当间隔混合物的去稳效应被抑制时, 纳升和微微升液滴能够被精确处理, 产生良好的控制结构<sup>[3~7]</sup>; 实际上, 局部润湿会引起非线性不稳定性, 这种不稳定性可以产生复杂的漂移<sup>[7]</sup> 或振荡样式<sup>[8]</sup>。两相流动特征的多样性在基础层面和基于液滴大小精确调整的有关应用方面都非常有趣。比如: 微小液滴能够用于控制化学反应或者很好地限量输运物质。对

2006-02-24 收到第 1 稿, 2006-10-06 收到修改稿。

1) 联合利华国际合作项目资助。

2) E-mail: tyqin@cau.edu.cn

于有限流动条件的有限区域和拥有适合相应设备表面兼容性质的流体，这种控制一般是可以达到的。在微流体系统中，建模技术的主要挑战表现在流体-流体和流体-固体界面间强烈地表面应变。相场方法是由临界现象动态研究发展起来，能够很好地处理这一问题。本文应用相场模型研究三维微型设备中的液滴流动问题。在低雷诺数状态下，引入自由能泛函，给出方形直管道中输运方程，进而描述了液滴在该管道中的流动及变形过程，在此基础上给出了压力差变化与其他物理参数之间的关系。

## 1 二相流体输运方程

自由能泛函是相场方法的一致特征，它决定了有限厚度界面上的表面张力分布以及混合物的平衡属性，如相平衡及润湿属性等。考虑由流体二相流体  $A, B$  构成的混合物，选取 Cahn-Hilliard-van der Waals 自由能的形式<sup>[8]</sup>

$$F = \int_V \left[ \frac{\kappa n}{2} |\nabla \varphi|^2 + nW(\varphi) + f(n) \right] dr \quad (1)$$

其中  $n = n_A + n_B$  是总的粒子数密度， $\varphi = n_B/n$  表示流体  $B$  的摩尔分数， $\kappa$  为用于决定表面张力的常数， $f$  表示纯组份的自由能密度总和， $W$  表示混合物的自由能。由自由能泛函及质量守恒和能量守恒可导出微管道中二相流体的传输方程如下

$$\frac{\partial n_B}{\partial t} = -\nabla \cdot (n_B v) + \nabla \cdot (A \nabla \mu) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} = -\nabla \cdot P - \nabla \cdot (\rho v v) + \nabla \cdot \eta \nabla v \quad (3)$$

其中  $\rho$  为质量密度， $v$  为流体的平均速度， $A = Dn/kT$ ， $D$  为扩散系数， $\eta = \eta^* h(\varphi)$ ， $\eta^* = \max\{\eta_A, \eta_B\}$  为最大黏度系数， $h$  满足如下关系

$$h(\varphi) = \begin{cases} \frac{\lambda - 1}{2\lambda} \tanh\left(\frac{2\varphi - 1}{2\chi}\right) + \frac{\lambda + 1}{2\lambda}, & \lambda \geq 1 \\ \frac{\lambda - 1}{2} \tanh\left(\frac{2\varphi - 1}{2\chi}\right) + \frac{\lambda + 1}{2}, & \lambda < 1 \end{cases} \quad (4)$$

其中  $\lambda = \lambda_B/\lambda_A$  为黏度系数比，参数  $\chi$  为当穿过相分界面时的速度跳跃锐度。为方便数值计算，选取适当的单位时间  $\tilde{T}$ ，尺度  $\tilde{L}$ ，质量  $\tilde{M}$ ，对方程(2),(3)无量纲化得

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = -\hat{\nabla} \cdot \varphi \hat{\nu} + \frac{1}{tPe} \hat{\nabla}^2 [-C^2 \hat{\nabla}^2 \varphi + \hat{W}'(\varphi)] \quad (5)$$

$$\frac{\partial \hat{v}}{\partial \tau} = -\hat{\nabla} \cdot \hat{v} \hat{v} - \hat{\nabla} \hat{p} - \frac{C}{We\Omega} \hat{\nabla} \cdot \hat{\nabla} \varphi \hat{\nabla} \varphi + \frac{1}{Re} \hat{\nabla} \cdot h \hat{\nabla} \hat{v} \quad (6)$$

式中，彼克雷特数  $Pe = \tilde{L}^2/D\tilde{T}$ ，雷诺数  $Re = \tilde{\rho} \tilde{V} \tilde{L}/\eta^*$ ，韦伯数  $We = \tilde{\rho} \tilde{V}^2 \tilde{L}/\sigma$ ，以及凯恩数  $C = \epsilon/\tilde{L}$ 。变量或算子上面带有“~”的表示无量纲变量或算子。需指出，当界面厚度（即凯恩数  $C$ ）趋于零时，相场的 Navier-Stokes 方程表现为明显的分界面特征<sup>[11]</sup>。

流体在微管道流体中流动的边界条件可分为 3 类，即：进口边界条件、出口边界条件和壁面条件。这里的进口边界条件为给定流体的速度和摩尔分数，出口条件为压力边界条件，一般为零压力条件。对于宏观流体，壁面边界条件可用无滑移边界条件，但对于微尺度的流体，特别是气体，由于受剪切率和固液相互作用的影响，壁面边界条件一般用滑移边界条件。由于这里考虑的是液体微流动，滑移边界条件影响较小，而表面浸润影响较大，所以管道中的壁面条件采用无滑移边界条件，但考虑表面浸润。在微管道流体中，用 Cahn-Hilliard-van der Waals 界面模型来描述表面浸润。流体-壁相互作用的边界约束条件为

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \varphi = G \quad (7)$$

这里  $\mathbf{n}$  方向为壁面的法向，指向固体里面。参数  $G$  决定了固体表面的浸润性，当  $G > 0$  时，壁面是亲组份  $B$  的；当  $G < 0$  时，壁面是疏组份  $B$  的。

在三维笛卡儿网格上可用有限差分法将微分方程(5)和方程(6)离散为代数方程组，其中摩尔分数和压力场取值于立方体单元的中心，而速度分量取值于单元的表面上，同时区域的边界（包括壁面、进口和出口）。时间进展由完全欧拉隐格式决定。在每一个时间步里，4 个场变量  $\phi_{i=1,\dots,4} = \varphi, v_1, v_2, v_3$  的进展方程满足如下关系

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \Delta\tau N_i(\phi_1^{n+1}, \phi_2^{n+1}, \phi_3^{n+1}, \phi_4^{n+1}, p^{n+1}) \quad (8)$$

场  $\phi_i^{n+1}$  和压力  $p^{n+1}$  可以由迭代过程中的第  $n$  个时间步得到。在假设值  $\phi_i^*, p^*$  使余量达到最小值

$$R_i(\phi_i^*) = \phi_i^n - \phi_i^* - N_i(\{\phi_i^*\}, p^*) \quad (9)$$

以及速度满足不可压缩条件时，迭代过程终止。压力建正值由 SIMPLE 或 PISO 算法取得。

## 2 数值模拟结果

当模拟液滴破裂时，彼克雷特数、凯恩数的选取比较重要。若模拟两种不融和的流体，彼克雷特数

的理论值应趋于无穷, 同时凯恩数的理论值应趋于零, 但这对于数值模拟是不切实际的。对于微型设备而言, 比较合理的取值应为  $C \approx 0.01$ ,  $Pe \approx 10$ 。

## 2.1 液滴变形比率

在简单的剪切流中液滴的变形与破裂依赖于液滴与基体的黏度比  $\lambda = \eta_d/\eta_c$ , 毛细管系数  $C_a = \eta_c \dot{\gamma} R / \sigma$ , 其中  $\dot{\gamma}$  为剪切比率,  $R$  为液滴半径。液滴的变形可用变形比率(泰勒参数)  $D = (L - B)/(L + B)$  来描述<sup>[9,10]</sup>, 其中  $L$  为液滴长轴的长度,  $B$  为液滴短轴的长度。

在方形直管道(几何尺寸均取  $180\mu\text{m} \times 30\mu\text{m} \times 30\mu\text{m}$ )中, 当取液滴直径  $R = 6\mu\text{m}$ , 毛细管系数  $C_a = 0.3$ , 凯恩数  $C = 0.06$ ,  $Pe = 18$ , 油和水的黏性比  $\lambda = 4.2$  时, 液滴的变化情况如图 1、图 2 所示, 其中  $T$  为无量纲时间。图 1 为液滴在  $T = 5$  时刻的形状, 变形比率  $D = 0.38$ ; 图 2 为液滴在  $T = 20$  时刻的形状, 变形比率  $D = 0.46$ 。液滴在  $T = 20$  时刻

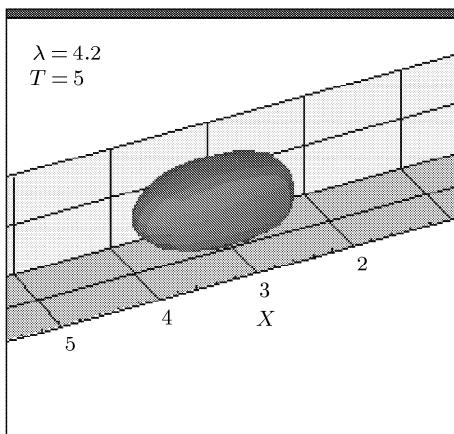


图 1 液滴在  $T = 5$  时刻的形状

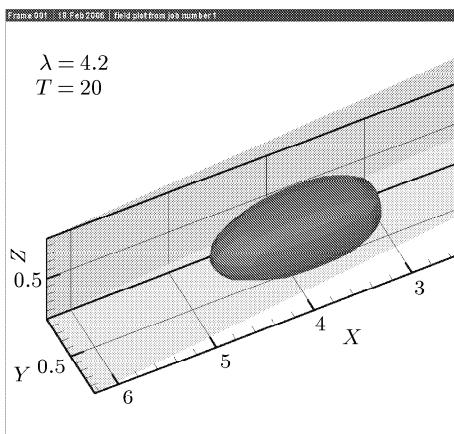


图 2 液滴在  $T = 20$  时刻的形状

后的形状基本保持稳定, 即其变形比率逐渐逼近稳定值。

## 2.2 液滴前后的压力差与各物理参数的关系

对于以压力作为驱动力的微管道流, 测试压力差与其他物理差数的关系是非常必要的。图 3 给出黏度比  $\lambda = 8$  时, 毛细管系数  $C_a$  取不同值时, 压力差随液滴半径的变化情况。图中  $L = 30\mu\text{m}$  为方形管的宽度,  $\Delta P$  为液滴前后的压力差, 为  $V$  进口流体的流速。由图中结果可以发现, 液滴半径增大, 压力差也增大。而当毛细管系数增大时, 压力差减小。

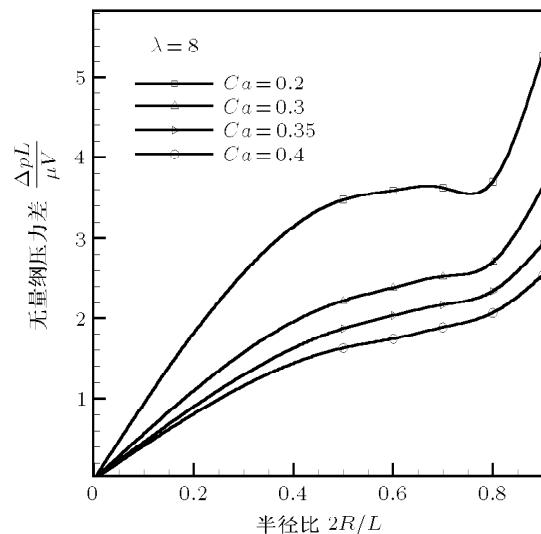


图 3 压力差随液滴半径的变化

## 3 结 论

本文采用自由能泛函, 研究了微型设备中液体混和的二相流体模型, 给出了二相流体的输运方程及其数值求解方法, 模拟了方形直管道中的液滴流动和变形的过程, 并给出了压力差与其它主要物理参数之间的变化关系。通过数值模拟结果发现, 微型管中液滴前后的压力差随液滴半径增大而增加, 而随毛细管系数的增大而减小。压力差达到最大值的时刻与液滴的变形比率趋稳的时刻有关。在表面张力的作用下, 对于毛细管系数不同的液体, 有不同的液滴变形方式。

## 参 考 文 献

- 1 Knight JB, Vishwanath A, et al. Hydrodynamic focusing on a silicon chip: Mixing nanoliters in microseconds. *Phys Rev Lett*, 1998, 80: 3863~3866
- 2 Baroud CN, Okkels F, Brody JP, et al. Reaction-diffusion dynamics: Confrontation between theory and experiment

- in a microfluidic reactor. *Phys Rev E*, 2003, 67: 060104/1-4
- 3 Anna S, Bontoux N, Stone HA. Formation of dispersions using “flow focusing” in microchannels. *Appl Phys Lett*, 2003, 82: 364~366
- 4 Link DR, Anna SL, Weitz DA, et al. Geometrically mediated breakup of drops in microfluidic devices. *Phys Rev Lett*, 2004, 92: 054503-1/4
- 5 Gan'an-Calvo AM, Gordillo JM. Perfectly monodisperse microbubbling by capillary flow focusing. *Phys Rev Lett*, 2001, 87: 274501/1-4
- 6 Thorsen T, Roberts RW, Arnold FH, et al. Dynamic pattern formation in a vesicle-generating microfluidic device. *Phys Rev Lett*, 2001, 86: 4163-6
- 7 Dreyfus R, Tabeling P, Willaime H. Ordered and disordered patterns in two-phase flows in microchannels. *Phys Rev Lett*, 2003, 90: 144505/1-4
- 8 Kuksenok O, Jasnow D, Yeomans J, et al. Periodic droplet formation in chemically patterned microchannels. *Phys Rev Lett*, 2003, 91: 108303/1-4
- 9 Stone HA. Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids. *Annu Rev Fluid Mech*, 1994, 26: 65~102
- 10 Taylor GI. The viscosity of a fluid containing small drops of another fluid. Proc. R. Soc. London, Ser. A, 1932, 138: 41~48
- 11 Jacqmin D. Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. *J Comp Phys*, 1999, 155: 96~127