

文章编号: 1000-5471(2013)10-0001-07

湿壁面条件下 T 型微通道内两相流数值模拟^①

王琳琳^{1,2}, 胡洪萍¹

1. 西安文理学院 数学与计算机工程学院, 西安 710065;

2. 热流科学与工程教育部重点实验室, 西安交通大学 能源与动力工程学院, 西安 710049

摘要: 采用相场法, 数值模拟 T 型微通道内不可压缩两相流动. 改变毛细数大小, 在壁面和连续相完全浸润的条件下, 得到离散相的两种形成机理: 挤压机理和滴落机理, 并发现挤压机理下离散相的形成对主通道内连续相流动影响较大, 离散相形成前后, 滴落机理下离散相底部壁面的黏性切应力比挤压机理下的大. 对于不同的流量比, 壁面和连续相浸润程度减弱, 挤压机理下离散相长度增加, 离散相前后端形状逐渐不对称, 大流量比下会使离散相在主通道下游脱离, 滴落机理下壁面湿度变化对离散相尺寸和形状影响微弱. 这些基本规律, 为有效控制微通道内离散相的尺寸和制造微通道设备材料的选择提供了依据.

关键词: 微通道; 两相流动; 接触角; 毛细数

中图分类号: TQ021.1

文献标志码: A

随着微电子系统(MEMS)概念的提出, MEMS 中微通道内两相流动引起学者的广泛关注, 通常微通道的宽度小于 1 mm, 流速较小, 通道内可忽略重力的作用, 微重力条件下的流动和传热特性可通过微通道进行研究^[1], 并且微通道内两相流动还可应用到众多研究领域, 例如: 高通量筛选实验^[2]、化学和材料合成、药品开发、生物鉴定、DNA 分析^[3]、微流体逻辑门^[4]等. 微通道系统的主体部分通常由同向流动的微通道、T 型微通道、十字型微通道构成, 其中 T 型微通道最早由 Thorsen 等人报道^[5], 是使用最广泛的微通道之一, 在 T 型微通道的两入口分别注入离散相和连续相, 当毛细数不太大时, 通道内可规律的形成尺寸和间距一定的气泡或液滴, 这种气泡流或液滴流能够加速通道内流体的流动、提高传质能力和换热率. 离散相的形成主要受到连续相的挤压力、黏性力和表面张力作用, 毛细数表示了黏性力相对表面张力的大小, 改变毛细数, 会产生不同类型的离散相, 微通道内两相流动受到壁面约束, 壁面和流体间的湿度也影响通道内的流动, 因此改变毛细数和壁面湿度, 得到不同机理下的流动, 在有效控制离散相尺寸和优化设计微通道等方面具有重要意义.

由于微通道宽度极小, 用实验精确测量离散相的变形、长度、体积和通道内流场、压强的变化难度较大, 研究成本较高. 随着计算机运行速度的飞速提高, 数值模拟已成为研究微通道内流动的另一种重要的研究手段, 目前研究微通道内两相流动常用的数值方法有: 标记粒子单元法(MAC)、流体体积函数法(VOF)、水平集法(LSM)、相场法(PFM)等. 相场法是基于流体自由能量模型, 借助对流 Cahn-Hilliard 方程, 通过化学势描述两相界面分离出不同的流场, 在使用非结构网格时相场模型比其他方法更容易实施, 相场法还能够模拟能量耗散的流动.

本文采用相场法, 结合质量守恒方程和 N-S 方程, 模拟 T 型微通道内的两相流动, 在壁面和连续相完全接润的条件下, 通过改变毛细数大小、研究不同机理下离散相形成中通道内的流动特点和离散相形成前

① 收稿日期: 2013-04-27

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51076126); 西安市科技计划项目(CXY1134WL09).

作者简介: 王琳琳(1981-), 女, 河南长垣人, 博士研究生, 讲师, 主要从事微通道内两相流动的研究工作.

后离散相底部壁面上黏性切应力的变化,并考察不同机理下壁面湿度对离散相尺寸和形状的影响。

1 物理模型和控制方程

1.1 物理模型

文中研究的 T 型微通道结构如图 1 所示,离散相从离散相通道进入,连续相从主通道左侧流入,两流体在宽度是 D 的 T 型通道拐角区域内混合,混合后从主通道右侧流出,其中离散相通道长度是 $3D$,主通道长度是 $32D$, $D = 111 \mu\text{m}$ 。

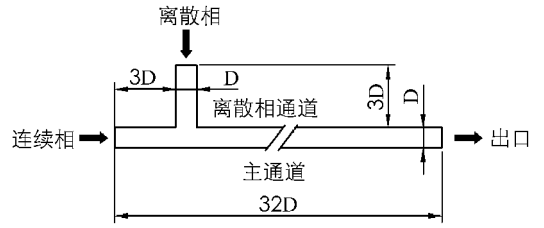


图 1 T 型微通道结构示意图

1.2 控制方程及边界条件

1.2.1 控制方程

微通道中流速很小,雷诺数 $\text{Re} = \frac{\rho_c u_c D}{\mu_c} \leq 1$,说明通道内是黏性不可压缩层流流动,连续性方程和动量方程分别是

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \nabla \cdot \left[-\frac{p}{\rho} \mathbf{I} + \frac{\mu}{\rho} (\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) \right] + \frac{1}{\rho} \vec{F}_\sigma + \vec{g} \quad (2)$$

其中 \vec{u} 是流体的速度, p 是压强,而流体密度 ρ 和黏性系数 μ 分别通过下面方程求出

$$\rho = \rho_d \frac{1-\varphi}{2} + \rho_c \frac{1+\varphi}{2} \quad (3)$$

$$\mu = \mu_d \frac{1-\varphi}{2} + \mu_c \frac{1+\varphi}{2} \quad (4)$$

下标 d 和 c 分别表示离散相和连续相,离散相、连续相对应的相场变量 φ 分别是 $-1, 1$,两相界面就是相场变量从 -1 变化到 1 的区域.相场变量通过对流 Cahn-Hilliard 方程求得

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\epsilon^2} \nabla \phi \quad (5)$$

相场辅助变量 $\phi = -\nabla \cdot \epsilon^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi$, λ 是混合能量密度, γ 是迁移率,通常设两相界面厚度 $\epsilon = \frac{h_c}{2}$, $\gamma = \epsilon^2$,其中 h_c 是网格的特征尺寸. λ 和表面张力系数 σ 满足

$$\sigma = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\lambda}{\epsilon} \quad (6)$$

表面张力 \vec{F}_σ 通过化学势 G 求得,

$$\vec{F}_\sigma = G \nabla \phi \quad (7)$$

其中 $G = \lambda \left[-\nabla^2 \phi + \frac{(\phi^2 - 1)\phi}{\epsilon^2} \right] = \frac{\lambda}{\epsilon^2} \psi$. 经过验证,通道内设置三角形网格的网格数大于 11 000 时,数值模拟结果和网格数无关,故计算中的网格数设置为 32 472 个,并取时间步长是 0.000 1s.

1.2.2 边界条件

设离散相和连续相入口流速大小分别是 u_d 和 u_c ,方向垂直于通道入口边界;通道出口压强为 0 Pa. 两相流体和壁面接触会形成接触角 θ ,其变化范围为 $0 \sim \pi$,两相界面单位法向量和接触角满足关系

$$\vec{n} = \vec{n}_w \cos \theta + \vec{t}_w \sin \theta \quad (8)$$

式中 \vec{t}_w , \vec{n}_w 分别是壁面单位切向量和单位法向量.

1.2.3 物性设置

设置离散相的黏性系数是 $0.001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$,离散相和连续相的黏度比是 0.125,表面张力系数是 $0.072 8 \text{ N/m}$. 对本文研究的 T 型微通道两相流动进行数值模拟发现,离散相和连续相的密度比变化不影响脱离的离散相大小,验证了微通道内可忽略重力的作用^[6]. 设置离散相密度和连续相密度都是 1 kg/m^3 . 由布金

汉- π 定理, 微通道内离散相的尺寸受到毛细数和流量比的影响, 其中毛细数 $Ca = \frac{\mu_c u_c}{\sigma}$, 流量比 $Q = \frac{Q_d}{Q_c} = \frac{u_d D}{u_c D} = \frac{u_d}{u_c}$ 表示连续相相对离散相的入口流量大小, Q_d 和 Q_c 分别是离散相和连续相入口流量. 流量比太大或太小, 微通道内易出现平行流, 难以形成脱离的离散相, 文中取流量比分别为 0.125, 0.25 和 0.5.

1.2.4 初始条件

初始时刻离散相通道内充满离散相, 主通道内充满连续相, 两相流体都处于静止状态.

2 离散相两种形成机理

为研究通道内离散相的形成和通道内的流动, 对流量比是 0.5, 毛细数分别是 0.006 和 0.022, 接触角是 0° 的微通道内的两相流动进行模拟, 得到脱离后形状稳定的离散相, 如图 2 所示. 毛细数是 0.006, 离散相前后端形状对称, 其宽度几乎和主通道宽度相同, 离散相和壁面之间仅有少量连续相, 离散相的形成受到壁面的约束, 离散相前端先靠近下壁面, 再向主通道下游移动, 离散相颈部形成, 由于上游连续相的流动被离散相严重阻塞, 使离散相后端受到连续相的挤压力增加^[7], 造成离散相在主通道拐角处断裂, 离散相形成中主要受到连续相的挤压力和表面张力的作用, 这种形成机理称为挤压机理^[6]; 毛细数是 0.022, 离散相在通道拐角稍向主通道下游处脱落, 脱离的离散相前后端不再对称, 类似于子弹形状, 后端变钝, 前端变尖, 离散相尺寸减小, 对主通道阻塞程度减弱, 壁面对离散相的约束减弱, 离散相上下表面的连续相层变厚, 毛细数增大, 说明相对于表面张力黏性力作用增强, 形成中的离散相主要受到黏性力、连续相的挤压力和表面张力的作用, 这种形成机理称为滴落机理^[6]. 经计算发现, 文中模型离散相的形成由挤压机理向滴落机理过渡的临界毛细数 Ca_c 是 0.012.

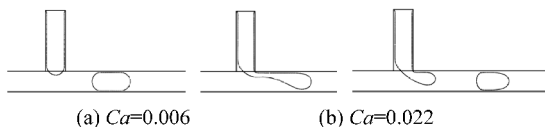


图 2 不同毛细数下微通道内形成的离散相

许多学者采用 PIV 测量法观察微通道内速度的分布^[8-10]. 对于两种形成机理, 数值模拟得到的微通道内离散相脱离前、后流场的变化, 如图 3 所示. 在挤压机理下, 脱离前时刻, 离散相颈部后端连续相的流动受到严重阻碍, 连续相挤压离散相颈部, 颈部变窄使其内部流体速度增大, 并沿颈部表面流动, 受到挤压的离散相颈部逐渐变细, 在 T 型通道拐角处离散相断裂, 此时断裂点处形成两个反向的涡流, 并垂直于离散相表面. 滴落机理下, 离散相脱离前, 离散相下表面和主通道壁面距离稍增大, 离散相后端连续相的流动受阻程度减弱, 沿主通道下游方向流动, 离散相最窄处周围的连续相流动方向和离散相主体部分表面垂直, 离散相最窄的表面被挤向主通道上壁面, 在 T 型微通道拐角的下游离散相脱离, 脱离后, 连续相的流速增加, 但没有涡流产生.

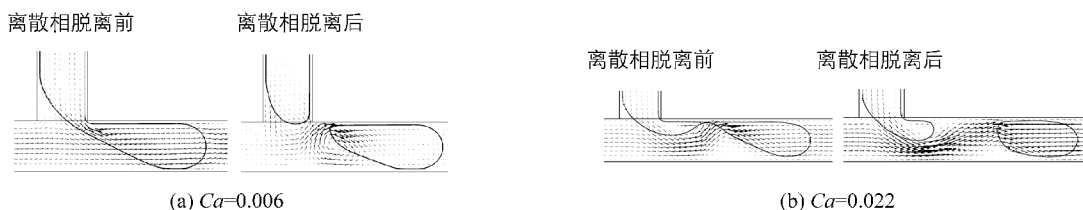


图 3 两种形成机理下, 离散相脱离前、后微通道内流场的变化

由图 3 可见, 接触角为 0° , 离散相和壁面间有一薄层连续相, 使离散相底部受到黏性力的作用. 黏性切应力计算式为

$$\tau = \mu_c \partial u / \partial y \quad (9)$$

其中 τ 是黏性切应力, u 是连续相速度, y 轴垂直于主通道, $\partial u / \partial y$ 是剪切率. Afkhami 等学者在狭窄的通道内放入一细长的离散相, 对上下壁面施加相同的速度, 数值模拟得到随着毛细数增加, 离散相底部壁面上剪切率的变化规律^[11]. 本文得到两种机理下, 连续相和壁面完全浸润时, 在离散相脱离前和其形状稳定后, 离散相底部壁面的黏性切应力变化, 如图 4 所示. 在挤压机理下, 下壁面的黏性切应力比滴落机理下

的小. 脱离前, 越靠近离散相底部, 壁面上的黏性切应力越大, 在距离离散相底部最近的下壁面点处黏性切应力达到最大值, 随着毛细数增加, 最大值由 210 Pa 增大到 360 Pa. 脱离后, 离散相下的主通道壁面上黏性切应力变化剧烈, 离散相的最前、后端对应的壁面点处, 黏性切应力取得极大值, 并且离散相后端最低点对应的壁面点处黏性切应力最小, 离散相底部的壁面上黏性切应力出现波动, 随着毛细数增加, 黏性切应力最大值由 150 Pa 增大到 390 Pa, 离散相前端壁面黏性切应力逐渐比后端的大, 两者之差增至 100 Pa.

由此可见, 随着毛细数增加脱离前后离散相底部的黏性切应力都增加, 而黏性力对离散相表面起到破坏作用, 破坏力的增大使离散相更早脱离, 造成离散相长度缩短. 由于脱离的离散相移动速度比连续相大, 黏性力阻碍离散相的移动, 较大的黏性力使脱离的离散相前端表面发生更大的变形.

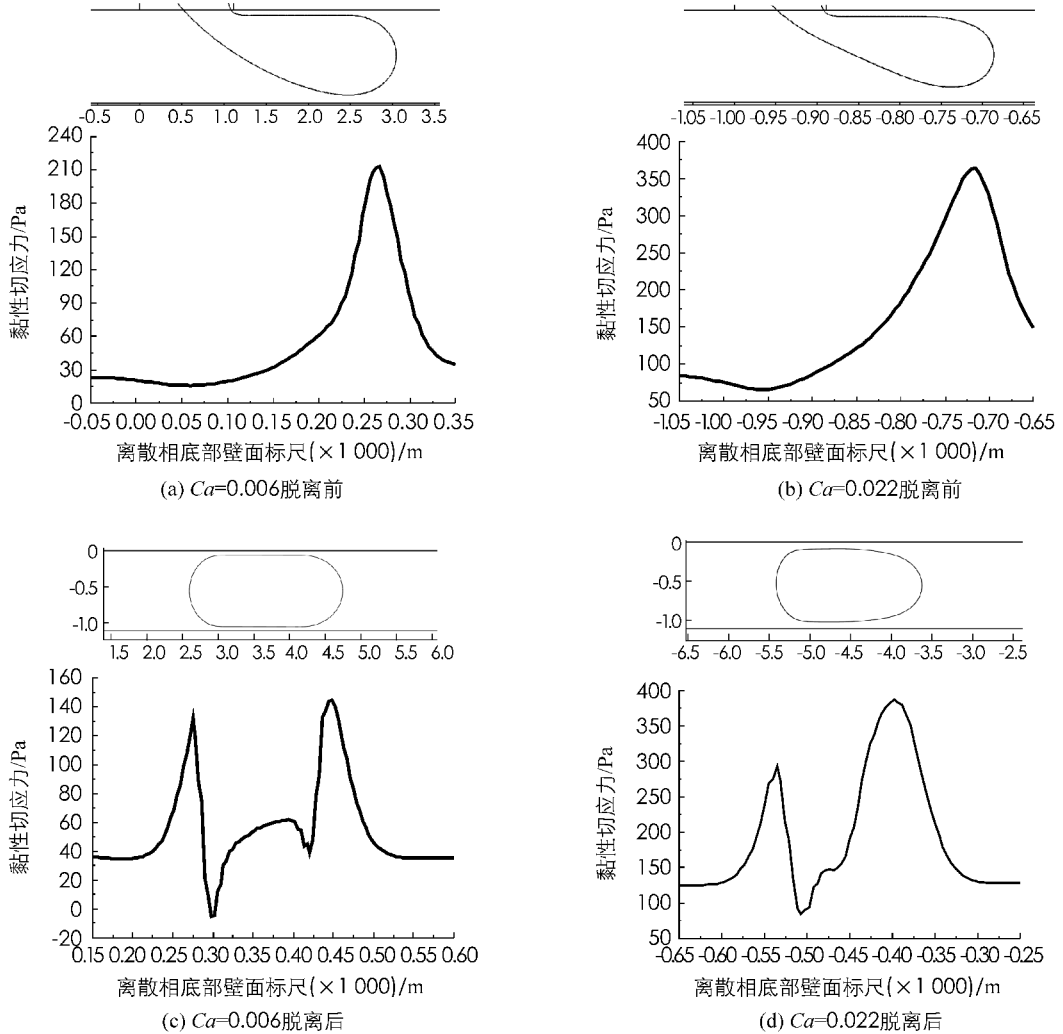


图 4 两种流动机理下离散相底部受到剪切应力的变化

3 接触角对离散相的影响

气体、液体和壁面接触后, 会形成接触角, 接触角的大小由两种流体和壁面及流体之间的吸引力而共同决定, Young 方程给出表面张力系数和接触角间的定量关系^[12-13]

$$\frac{\sigma_{S,G} - \sigma_{S,L}}{\sigma_{G,L}} = \cos\theta \quad (10)$$

式中 $\sigma_{G,L}$, $\sigma_{S,G}$, $\sigma_{S,L}$ 分别表示气体和液体、气体和壁面、液体和壁面的表面张力系数, θ 表示壁面和液体之间的接触角. 将气体换成另一种液体, 上式依然成立. 接触角的大小反应了液体和壁面的浸润程度, 接触角越小, 液体和壁面的湿度越大, 液体和壁面浸润程度越好, 即亲水性越强, $\theta=0$, 液体和壁面完全浸

润; $\theta = \pi$, 液体和壁面完全不浸润. 当液体分子和固体壁面的作用势增强, 液体表面自由能提高, 使其对壁面的附着力增加, 造成壁面和液体的接触角减小, 增强两者的亲水性, 升高温度或增加液体和壁面的作用势都能提高液体和壁面的亲水性^[14].

接触角的大小影响微通道内离散相的脱离时间^[14]和长度^[15-16]. 为考察不同流量比下, 两种形成机理中接触角对离散相长度的影响, 取流量比分别为 0.125, 0.25, 0.5, 毛细数分别为 0.006 和 0.036, 得到离散相长度随接触角的变化, 如图 5 所示. 图中可见, 固定流量比和接触角, 毛细数越大, 离散相长度越小, 同一机理下, 流量比越大, 离散相越长, 接触角在 $0 \sim 20^\circ$ 之间, 壁面和连续相超浸润, 离散相长度基本不变, 接触角大于 20° , 壁面和连续相浸润, 挤压机理下, 离散相长度随接触角的增大而明显增大; 滴落机理下, 随接触角增大, 离散相长度的变化很弱.

离散相长度和其形成时间有关, 滴落机理下离散相形成时间比挤压机理下的短, 如图 6 所示, 不同的流动机理下, 接触角对离散相形成时间产生不同的影响. 挤压机理下, 壁面和连续相超浸润, 离散相的形成时间几乎不受接触角影响, 流量比增大离散相形成时间缩短; 壁面和连续相浸润, 离散相形成时间随接触角增长, 除流量比是 0.5、接触角是 40° 外, 固定接触角随流量比增加离散相形成时间缩短. 滴落机理下, 接触角几乎不影响离散相的形成时间, 造成这一机理下的离散相长度和接触角大小几乎无关.

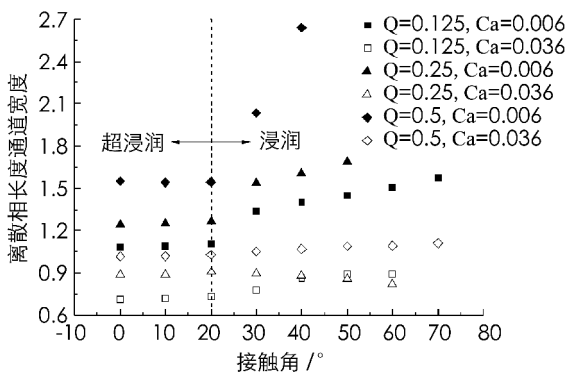


图 5 流量比和毛细数对离散相长度的影响

挤压机理下, 接触角为 40° , 流量比为 0.5 离散相的形成时间比流量比为 0.25 的长, 产生这一现象的原因是离散相的脱离点向主通道下游移动, 如图 7 所示. 接触角为 40° , 连续相和壁面的湿度变小, 离散相对壁面的黏性附着力增强, 使离散相附着在上壁面上, 流量比小, 离散相始终黏在上壁面直至脱离, 随着流量比增大, 同时刻挤入离散相的体积增大, 在下壁面的约束作用下, 促使体积增大的离散相底部和下壁面接触, 这使得离散相和壁面的黏性附着力进一步增加, 造成离散相不能在 T 型通道拐角处脱离, 其脱离点延伸至主通道内, 延长了离散相的形成时间.

离散相形状稳定后, 其前后端表面的曲率半径几乎和流量比无关, 仅与形成机理和接触角有关, 如图 8 所示. 挤压机理下, 接触角增大, 离散相前后端表面的曲率半径随之增大, 壁面和连续相超浸润, 前后端曲率半径大小接近, 前后端曲率半径增长程度非常小, 此时离散相的形状前后对称; 当壁面和连续相浸润时, 离散相后端曲率半径大于前端曲率半径, 并且随着接触角的增大, 离散相后端表面的曲率半径比其前端曲率半径增长程度大, 说明此时离散相的形状不再对称. 滴落机理下, 离散相前后端曲率半径比挤压机理下离散相对应的曲率半径小或接近, 并且几乎不受接触角影响, 离散相后端曲率半径基本是 $54.8 \mu\text{m}$, 比主通道的半径 $55.5 \mu\text{m}$ 稍小, 离散相前端曲率半径比主通道半径小得多, 平均长度是 $34.13 \mu\text{m}$, 说明滴落机理下, 离散相呈前尖后平, 其两端形状不随接触角变化而变化.

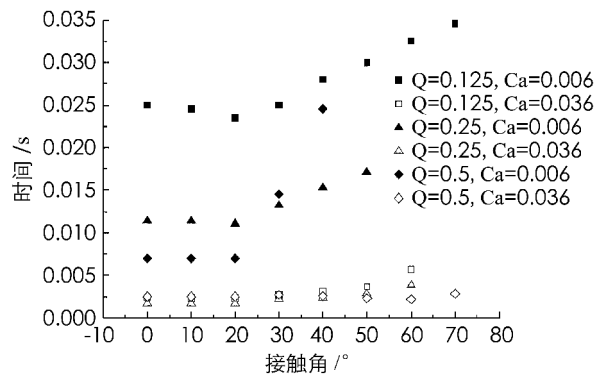


图 6 接触角对离散相形成时间的影响

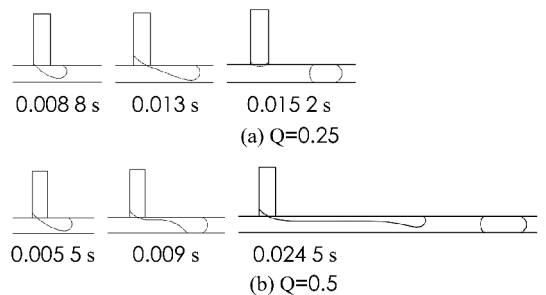


图 7 挤压机理作用大接触角下离散相的形成过程, 其中接触角为 40°

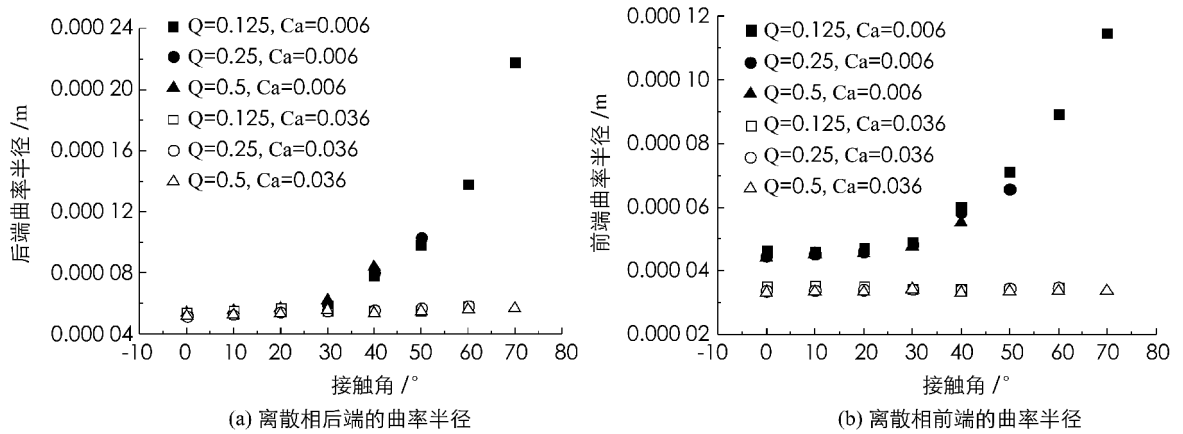


图 8 不同流动机理下, 离散相前、后端曲率半径的变化

4 结 论

本文通过相场法, 在壁面和连续相完全浸润的条件下, 模拟两种机理下 T 型微通道内的两相流动, 得出滴落机理下离散相脱离对流场的影响较大, 离散相脱离点周围形成对涡, 滴落机理下离散相底部壁面黏性切应力比挤压机理下的大。不同的流量比下, 壁面和连续相浸润时, 随着连续相和通道壁面浸润程度的减弱, 挤压机理下离散相长度和形成时间增加, 脱离后的离散相前、后端形状逐渐不对称, 并且在大量流量比下, 增大接触角会使离散相的脱离点移至主通道下游。滴落机理下连续相和通道壁面浸润程度对离散相长度、形成时间和离散相形状影响较弱。

参考文献:

- [1] GALBIATI L, ANDREINI P. Flow Pattern Transition for Horizontal Air-Water Flow in Capillary Tubes: A Microgravity Equivalent System Simulation [J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 1994, 21(4): 461-468.
- [2] VOLKERT S, MICHIEL K, CHIRS K. μ -PIV Study of the Formation of Segmented Flow in Microfluidic T-Junctions [J]. Chemical Engineering Science, 2007, 62(24): 7505-7514.
- [3] MARK B, BRAIN J, SUNDARESH B, et al. An Integrated Nanoliter DNA Analysis Device [J]. Science, 1998, 282(5388): 484-487.
- [4] MANU P, NEIL G. Microfluidic Bubble Logic [J]. Science, 2007, 315(9): 832-835.
- [5] TOOD T, RICHARD R, FRANCES A, et al. Dynamic Pattern Formation in a Vesicle-Generating Microfluidic Device [J]. Physical Review Letters, 2001, 86(18): 4163-4166.
- [6] MENECH M, GARSTECKI P, JOUSSE F, et al. Transition From Squeezing to Dripping in a Microfluidic T-Shaped Junction [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2008, 595(1): 141-161.
- [7] 王琳琳, 李国君, 田 辉, 等. T 型微通道内气液两相流数值模拟 [J]. 西安交通大学学报, 2011, 45(9): 65-69.
- [8] KINOSHITA H, KANEDA S, FUJII T, et al. Three-Dimensional Measurement and Visualization of Internal Flow of a Moving Droplet Using Micro-PIV [J]. Lab on a Chip, 2007, 7(3): 338-346.
- [9] MALSCH D, KIELPINSKI M, MERIHAN R, et al. μ -PIV-Analysis of Taylor Flow in Microchannels [J]. Chemical Engineering Journal, 2008, 135(1): S166-S172.
- [10] OISHI M, KINOSHITA H, FUJII T, et al. Confocal Micro-PIV Measurement of Droplet Formation in a T-Shaped Micro-Junction [J]. Journal of Physics: Conferences Series, 2009, 147(1): 1-9.
- [11] AFKHAMI S, LESHANSKY A, RENARDY Y, et al. Numerical Investigation of Elongated Drops in a Microfluidic T-Junction [J]. Physics of Fluids, 2011, 23(2): 1-14.
- [12] PENG S, WILLIAMS R. Controlled Production of Emulsions Using a Cross: Ow Membrane. Part I: Droplet Formation From a Single Pore. Transactions of the Institution of Chemical Engineers, 1998, 76(A): 894-901.
- [13] GRAF K, KAPPL M. Physics and Chemistry of Interfaces [M]. Hoboken: John Wiley & Sons Inc, 2006.

- [14] GARSTECKI P, FUERSTMAN M, STONE H, et al. Formation of Droplets and Bubbles in a Microfluidic T-Junction-Scaling and Mechanism of Break-up [J]. *Lab on a Chip*, 2006, 6(3): 437–446.
- [15] SHAZIA B, JULIA M, WILLIAM Z. Simulations of Microfluidic Droplet Formation Using the Two-Phase Level Set Method [J]. *Chemical Engineering Science*, 2011, 66(20): 4733–4741.
- [16] SHI B, VIJAY V. Molecular Dynamics Simulation of the Contact Angle of Liquids on Solid Surfaces [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2009, 130(3): 1–5.
- [17] SANG L, HONG Y, WANG F. Investigation of Viscosity Effect on Droplet Formation in T-Shaped Microchannels by Numerical and Analytical Methods [J]. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2009, 6(5): 621–635.

On Numerical Simulation of Two-Phase Flow in a T-Junction Micro-Channel in Wet Wall Condition

WANG Lin-lin^{1,2}, HU Hong-ping¹

1. School of Mathematical and Computer Engineering, Xi'an University of Arts and Science, Xi'an 710065, China;

2. Key Laboratory of Thermal Fluid Science and Engineering of MOE, School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

Abstract: In a phase field method, the numerical simulations have been performed in this paper to investigate the incompressible two-phase flow in a T-junction micro-channel. The squeezing and dripping regimes have been obtained by changing capillary numbers as the continuous phase and solid wall have been completely contacted. The continuous phase flow is great influenced in the squeezing regime during the dispersed phase formation, and the shear stress beneath the droplet in the dripping regime is larger than in the squeezing regime before and after the droplet detachment. With different flow-rate ratios, the droplet length increases and the droplet shape is asymmetric with decreasing the surface wettability between the continuous phase and wall in the squeezing regime, and the droplet departure position moves in the downstream in the main channel with increasing flow-rate ratios and decreasing the surface wettability. The influence of the surface wettability on the droplet size and shape is weak in the dripping regime. The results provide a reference for effective control of the droplet size in micro-channels and the materials choice for the manufacturing micro-devices.

Key words: micro-channel; two-phase flow; contact angle; capillary number

责任编辑 周仁惠