

文章编号:1671-6833(2022)01-0055-07

对称 Y 型分岔微通道微滴分裂数值模拟与实验探究

郑艳萍¹, 张瑞根¹, 梁 帅², 李 洋¹, 徐 刚¹, 舒海涛¹

(1.郑州大学 机械与动力工程学院,河南 郑州 450001;2.广东顺德创新设计研究院,广东 佛山 528311)

摘 要: 利用 ANSYS Fluent 软件中的两相流 VOF 模型,建立了微流控芯片中微滴通过对称 Y 型分岔微通道的三维动力学模型,实现了微滴流动的动态模拟,微滴界面演化的模拟结果与实验结果相吻合验证了该模型的有效性。通过该模型研究了微滴通过对称 Y 型分岔微通道的分裂行为和微滴分裂过程中压力场、速度场的演化过程,揭示了微滴在 4 种不同流型和不同阶段下的破碎机理,得到了微滴各流型与毛细数 Ca 和微滴尺寸之间的关系;根据模拟得到的各类流型数据,在 MATLAB 中拟合得到了该模型下微滴破裂与非破裂边界的预测方程。研究结果不仅为微滴分裂提供了一种简便有效的方法,在生物学、能源化工及食品工程等领域也具有潜在应用价值。

关键词: 微流控; 微滴生成; 液滴分裂; 数值模拟; Y 型分岔

中图分类号: O35 文献标志码: A doi:10.13705/j.issn.1671-6833.2021.05.022

0 引言

近年来,随着微流控技术的飞速发展,基于液滴(微气泡)的微流控过程受到了人们的广泛关注^[1],特别是微滴(微气泡)的形成^[2]、破裂^[3]和聚并^[4]。

国内外的学者对微滴已展开了相关的研究。对于微滴的形成, Garstecki 等^[5]利用十字聚焦型微流控装置得到尺寸从 10 μm 到 1 000 μm 不等的单分散气泡; Cubaud 等^[6]发现十字聚焦型装置生成的微滴尺寸在射流流型中只与两相流速比有关,而滴状流型中则与连续相毛细数 Ca 有关。而在模拟方面, Liu 等^[7]在连续相毛细数 Ca 低值的情况下,采用三维 Lattice Boltzmann 方法来模拟十字聚焦型微通道中微滴的生成,依据连续相毛细数 Ca 和两相流量的变化观测到了滴状流、射流及延展流 3 种不同流型并绘制了流型图来进行区分对比。而对于微滴分裂(破裂), Link 等^[8]研究了 T 型分岔处微滴的破裂行为并基于 Rayleigh-Plateau 不稳定性提出了微滴破裂与不破裂行为的转换规则; Samie 等^[9]在一系列不同分支宽度比的 T 型分岔口处得到了不破裂、无空隙破裂、有空隙破裂和不稳定破裂 4 种流型,并研究了液

滴分配体积与分支宽度比的定量关系。目前关于微滴生成的结构中,十字聚焦型微通道具有结构简单、微滴易控、单分散性好等优点^[10];而对于微滴的分裂,目前大多数学者都只关注于 T 型结构的微滴分裂行为。

综上,目前许多学者都把微滴生成与分裂分别展开独立的相关研究。因此,本研究借助 CFD 商业软件 ANSYS Fluent 中的 VOF 两相流模型对集微滴生成与分裂一体化微流控芯片模型进行仿真分析,同时进行实验验证。探究了微滴在微流控芯片中对称 Y 型分岔微通道内的破裂行为和分配规律,考察了在对称 Y 型分岔处毛细数 Ca 对微滴的流型影响及不同流型间的转换关系。

1 模型及数值算法

1.1 几何模型

三维对称 Y 型分岔微通道几何模型如图 1(a)所示,分散相从主入口进入,并与来自侧面入口的连续相剪切形成液滴,进而在对称 Y 型分岔微通道进行微滴分裂。在微通道内,该结构前部为十字型聚焦微通道,后部为对称 Y 型分岔微通道。如图 1(b)所示,其中两相入口夹角 $\theta = 90^\circ$,连续相和离散相的入口宽度 $W_c = W_d = 100 \mu\text{m}$,为保证

收稿日期:2021-05-20;修订日期:2021-08-25

基金项目:河南省高等学校重点科研项目(20A460023)

作者简介:郑艳萍(1975—),女,河南平顶山人,郑州大学副教授,主要从事结构损伤及破坏机理等研究,E-mail: ypzhang@126.com。

两相流动在微通道内充分发展,本文将两相交汇处下游的孔口通道宽度设为 $W_{ori} = 100\text{ }\mu\text{m}$,长度设为 $L_{ori} = 850\text{ }\mu\text{m}$,设主通道进口压力监测点为 P_{inlet} ,Y 型分岔处壁面监测点压力为 P_Y ,上分裂微通道 i 出口监测点压力为 P_i ,下分裂微通道 ii 出口监测点压力为 P_{ii} 。

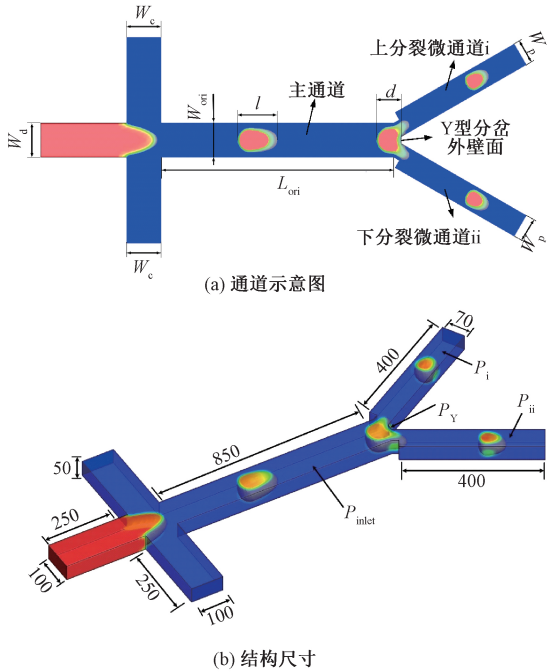


图 1 几何模型(μm)

Figure 1 Geometric model(μm)

1.2 控制方程

在微尺度条件下,液液两相流速较低,可将液液两相均视作不可压缩黏性流体,而微滴的分裂行为是液液两相界面运动和变形的可见结果。因此,基于微滴分裂的物理模型,建立三维对称 Y 型分岔微通道模型,并利用 ANSYS Fluent 仿真软件和 VOF 模型来跟踪界面的演化和发展^[11-12]。

VOF 模型^[13]采用体积分数 α_d 表示一个模拟单元中液滴的比例:

$$\begin{cases} \alpha_d = 0, & \text{无液滴(连续相);} \\ 0 < \alpha_d < 1, & \text{有微滴(混合相);} \\ \alpha_d = 1, & \text{充满液滴(离散相)。} \end{cases} \quad (1)$$

模拟单元内,离散相 α_d 和连续相 α_c 的体积分数之和为 1,即

$$\alpha_d + \alpha_c = 1. \quad (2)$$

根据质量和动量守恒原理,可得求解体积分数主要变量的控制方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = - \nabla P + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}. \quad (4)$$

式中: ρ 为流体密度, kg/m^3 ; \mathbf{v} 为流体速度矢量, m/s ; P 为压力, Pa ; μ 为动力学黏度, $\text{Pa}\cdot\text{s}$; t 为时间, s ; \mathbf{F} 为表面张力, N/m 。

在两相流混合的网格单元中,式(3)和式(4)中的密度 ρ 和黏度 μ 可通过式(5)、(6)计算获得:

$$\rho = \alpha_d \rho_d + (1 - \alpha_c) \rho_c; \quad (5)$$

$$\mu = \varphi_d \mu_d + (1 - \varphi_c) \mu_c. \quad (6)$$

最后,离散相的体积分数 α_d 可通过式(7)计算得到:

$$\frac{\partial \alpha_d}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \alpha_d = 0. \quad (7)$$

VOF 模型的原理是根据不同时刻流场中离散、连续相的体积分数对两相分布进行构造,从而形成两相交界面。

1.3 边界条件和相关参数的设置

以氟油为连续相,去离子水为离散相,两相流的物性参数如表 1 所示^[13]。设置边界条件为壁面无滑移,微通道内的流体为不可压缩定常流动,入口设置为速度入口,微通道出口设置为压力出口。压力-速度耦合采用 PISO 算法,压力差值以及对流量高阶值的计算采用 PRESTO 算法和二阶迎风差分方式,收敛残差设置为 10^{-3} ,时间步长设置为 10^{-5} s 。

表 1 两相流的物性参数

Table 1 Physical parameters of two-phase flow				
材料	密度 $\rho/$ ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	黏度 $\mu/$ ($\text{Pa}\cdot\text{s}$)	界面张力 $F/$ 接触角/ ($\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$)	($^\circ$)
氟油	1 614	0.018	0.015	120
去离子水	998.2	$1.000\ 5\times 10^{-3}$	0.015	120

1.4 模型的有效性验证

为了验证理论模型的有效性,搭建如图 2 所示的实验平台,在显微镜和高速摄像机下实时观察记录微滴在 Y 型分岔口的行为。实验后,将数值模拟结果与实验数据进行比较,从而可验证理论模型的有效性。在数值模拟中,本研究使用了两个无量纲参数,分别是无量纲时间 t^* 和无量纲颈厚 d^* :

$$t^* = \frac{t - t_0}{t_1 - t_0}; \quad (8)$$

$$d^* = \frac{d}{W_{ori}}. \quad (9)$$

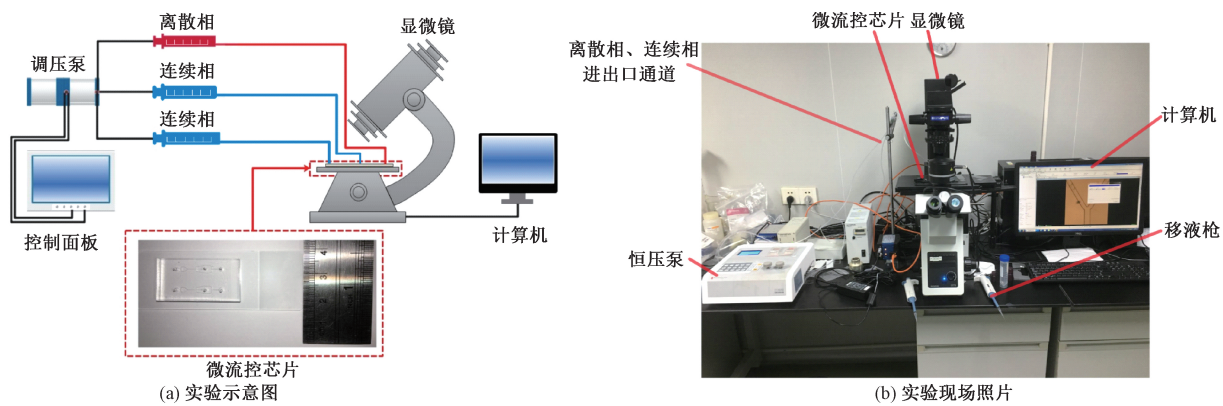


图 2 实验平台

Figure 2 Experimental platform

式中: t_0 为初始时间, s; t 为当前时间, s; t_1 为结束时间, s; d 是微滴分裂过程的内径厚度, μm ; W_{ori} 是两相交汇处下游的主通道宽度, μm (见图 1(a))。

图 3 是对称 Y 型分岔微通道微滴分裂界面

演化的三维实验和三维数值模拟对比。在可接受误差范围内,微滴界面演化的三维实验结果与三维数值模拟的结果相似,吻合较好。相似的界面证明了数学模型的有效性和正确性。因此,本研究采用三维数值仿真模拟分析方法。

2 结果与讨论

2.1 流型

如图 4 所示,本研究通过实验结合数值模拟的方法,归纳总结出对称 Y 型分岔微通道内出现的 4 种典型流型,即永久阻塞破裂型(流型①)、暂时阻塞破裂型(流型②)、只接触 Y 型分岔处破裂型(流型③)和非破裂型(流型④)。

从图 4 可以看出,在流型①中,微滴会一直阻塞主通道、Y 型分岔处和分裂通道;在流型②中,微滴没有堵塞主通道,而是阻塞 Y 型分岔处和分裂通道;在流型③中,微滴不会在主通道和分裂通道中阻塞,只是堵塞了 Y 型分岔处;在流型④中,微滴不会破裂,连续相介质也是一直连通流动的。

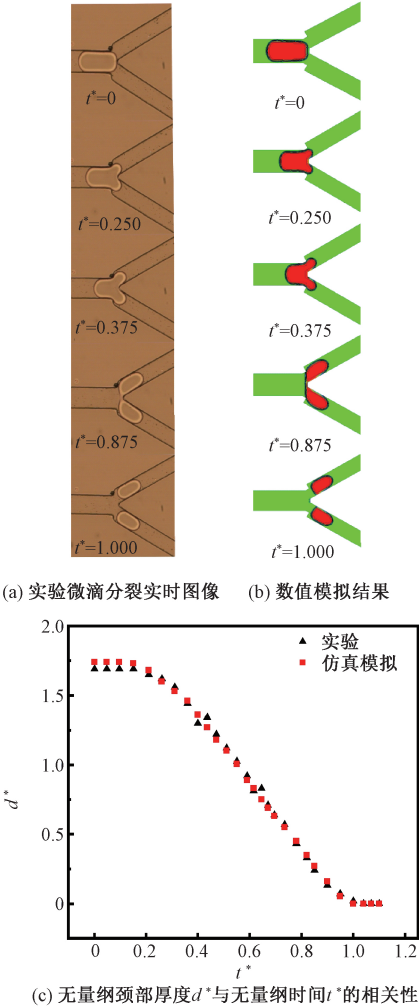


图 3 实验与数值模拟结果对比 ($Ca=0.004, l/W_{\text{ori}}=1.73$)

Figure 3 Comparison of experimental and numerical simulation results ($Ca=0.004, l/W_{\text{ori}}=1.73$)

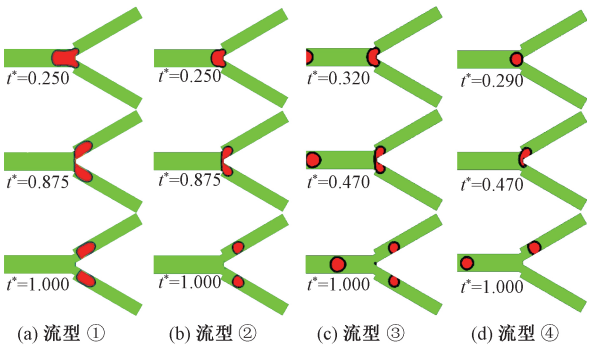


图 4 4 种典型流型

Figure 4 Four typical flow regimes

2.1.1 永久阻塞破裂型

如图 5(a) 所示,永久阻塞流型的破裂可分为进入、挤压和分裂后 3 个阶段。初始进入阶段,微

滴堵塞了主通道。当头部与 Y 型分岔处接触后,对称地进入分裂通道的两个分支。在挤压阶段,大部分微滴仍然堵住主通道。在界面张力的作用下,微滴尾部在主通道内保持凸形,直到大部分微滴进入分裂微通道。挤压阶段结束时,微滴头部增大,阻塞分裂微通道,靠近 Y 型分岔处的微滴颈部变薄。

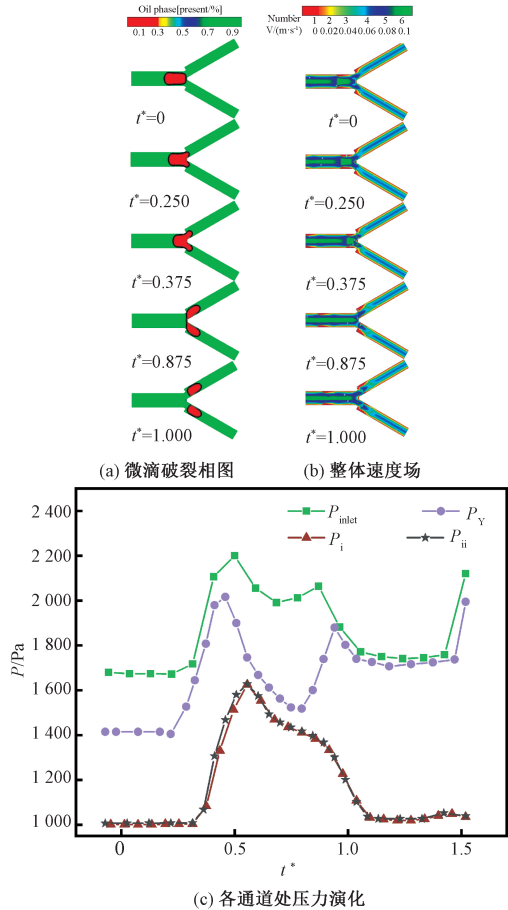


图 5 永久阻塞破裂型 ($Ca=0.004, l/W_{ori}=1.73$)

Figure 5 Permanent blocking rupture type ($Ca=0.004, l/W_{ori}=1.73$)

如图 5(b) 所示,微滴中心位置为速度最大处,而其尾部边缘处和 Y 型分岔处的两个直角边缘处存在速度为零的情况。

如图 5(c) 所示,由于永久阻塞型一直存在阻力,导致进口压力 P_{inlet} 和 Y 型分岔处壁面压力 P_Y 在整个过程中都有相似的压力波动,分裂微通道的压力 P_i 、 P_{ii} 在整个阶段的压力波形图一致,都在挤压阶段同时达到压力峰值。在微滴破裂的 3 个阶段中,主通道进口压力比其他 3 个监测点的压力都高,分裂微通道压力 P_i 、 P_{ii} 的波形图一致而且比其他 2 个监测点的压力都低。

2.1.2 暂时阻塞破裂型

如图 6(a) 所示,暂时阻塞破裂型也具有与流

型①相同的 3 个阶段。但暂时阻塞破裂型所在的主通道母微滴没有阻塞主通道。当微滴分裂成两个子微滴后,子微滴便一直堵塞分裂微通道。

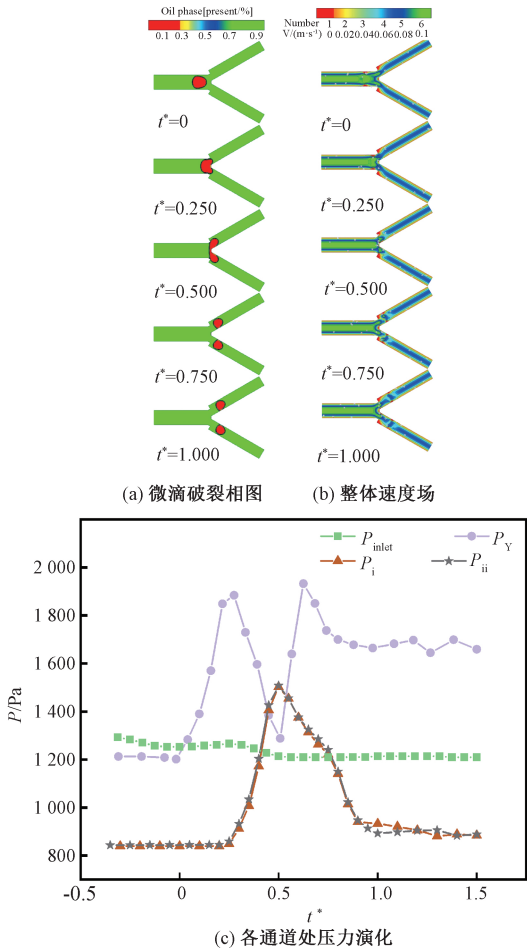


图 6 暂时阻塞破裂型 ($Ca=0.004, l/W_{ori}=1.02$)

Figure 6 Temporarily blocking rupture type ($Ca=0.004, l/W_{ori}=1.02$)

如图 6(b) 所示,对于整体速度流场,微滴流经轨迹及微滴中心位置为速度最大处,而其头部左右边缘两侧和 Y 型分岔处两个直角边缘处存在速度为零的情况。

如图 6(c) 所示,Y 型分岔处壁面压力在整个过程中达到的最大值为 1 880 Pa,在分裂后阶段,压力趋于稳定。在微滴破裂的 3 个阶段中,主通道进口压力一直维持在 1 250 Pa;在微滴进入和分裂后这两个阶段,Y 型分岔处壁面压力比其他 3 个监测点的压力都高。分裂微通道的压力 P_i 、 P_{ii} 在整个阶段的压力波形图一致,都在挤压阶段同时达到压力峰值。

2.1.3 只接触 Y 型分岔处破裂型

如图 7(a) 所示,只接触 Y 型分岔处破裂型也具有与流型①相同的 3 个阶段,但球状微滴始终不完全阻塞主通道和分裂微通道,只在挤压阶段

与 Y 型分岔处壁面接触。在挤压阶段,微滴整体以腰果状分裂。当微滴分裂成两个子微滴后,子微滴并没有阻塞分裂微通道。由于分裂微通道接触角和润湿性的原因,子微滴附着分裂通道内壁。

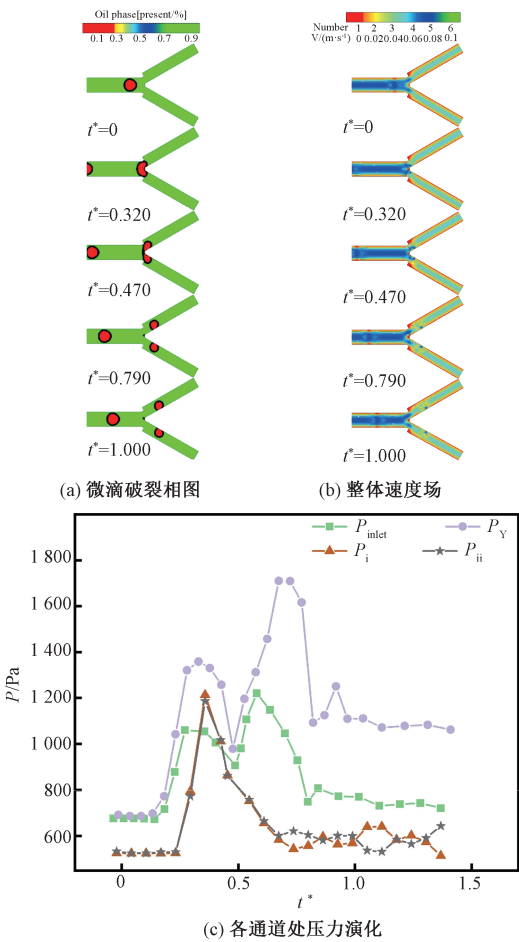


图 7 只接触 Y 型分岔处破裂型 ($Ca=0.004, l/W_{ori}=0.83$)

Figure 7 Only contact Y-shaped bifurcation ($Ca=0.004, l/W_{ori}=0.83$)

如图 7(b) 所示,对于整体速度流场来说,微滴流经轨迹及微滴中心位置为速度最大处,而其头部左右边缘两侧和 Y 型分岔处 2 个直角边缘处存在速度为零的情况。

如图 7(c) 所示,当出现流型③时,由于主通道连续相一直连续流动,微滴只接触 Y 型分岔处壁面进行分裂,故 Y 型分岔处壁面压力比其他 3 个监测点的压力都高;在微滴进入和分裂后这 2 个阶段,分裂微通道压力 P_i 、 P_{ii} 比其他 2 个监测点的压力都低。其中,进口压力和 Y 型分岔处壁面压力在整个过程中都有相似的压力波动,分裂微通道的压力 P_i 、 P_{ii} 在整个阶段的压力大致相似。

2.1.4 非破裂型

如图 8(a) 所示,非破裂型可分为进入、滑动

和不分裂 3 个阶段。进入阶段与上述 3 种流型相似。当微滴接触 Y 型分岔处进入滑动阶段时,微滴会被压缩成腰果状,由于此时微米级别以上的两边腰果状水相体积分布不均匀,导致微滴被动选择向水相体积相对较大一端进行滑动。随后,不平衡的微滴滑过 Y 型分岔处并迅速进入其中一个分支而没有发生分裂。但在下一个微滴到达 Y 型分岔处时,由于前微滴在分裂微通道的阻塞作用,后微滴会选择另一个分裂微通道进行运动。

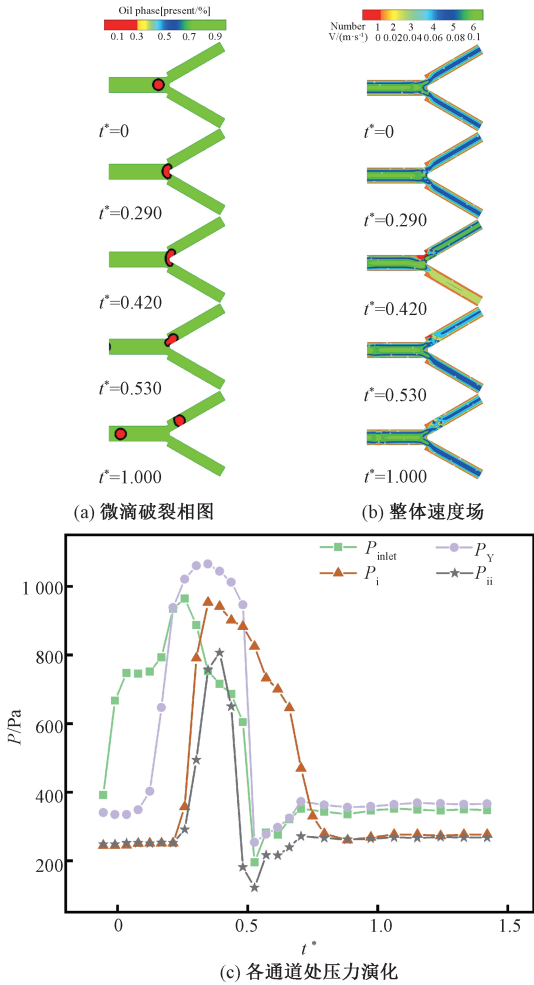


图 8 非破裂型 ($Ca=0.004, l/W_{ori}=0.73$)

Figure 8 Non-rupture type ($Ca=0.004, l/W_{ori}=0.73$)

如图 8(b) 所示,对于整体速度流场来说,当微滴还没接触 Y 型分岔处壁面时,微滴流经轨迹及微滴中心位置为整体速度最大值处。当微滴接触 Y 型分岔处进入滑动阶段时,上分裂微通道的总体速度流场要大于下分裂微通道的总体速度流场,而其 Y 型分岔处两个直角边缘处存在速度为零的情况。

如图 8(c) 所示,分裂微通道的压力 P_i 、 P_{ii} 在整个分裂过程的起始压力值是一致的。由于连续相流体在大部分时期都是连通流动的,故主通道

进口压力 P_{inlet} 、Y 型分岔处壁面压力 P_Y 、分裂微通道的压力 P_i 、 P_{ii} 都出现相似的压力波动情况。

2.2 微滴相图

Leshansky 等^[14]首先提出描述微滴破裂与非破裂边界的方程,将无量纲微滴长度 l^* 与毛细数 Ca 的关系表示为

$$l^* = m Ca^n. \tag{10}$$

式中: $l^* = \frac{l}{W_{ori}}$; m 、 n 都为常数。

结合现有数值模拟结果,拟合曲线与边界,可以得出该模型对应相关参数下的预测方程:

$$l^* = 1.107 Ca^{0.103}. \tag{11}$$

如图 9 所示,拟合曲线 l^* 代表由非破裂型转化破裂型之间的关于无量纲长度 l^* 与毛细数 Ca 的数学模型。

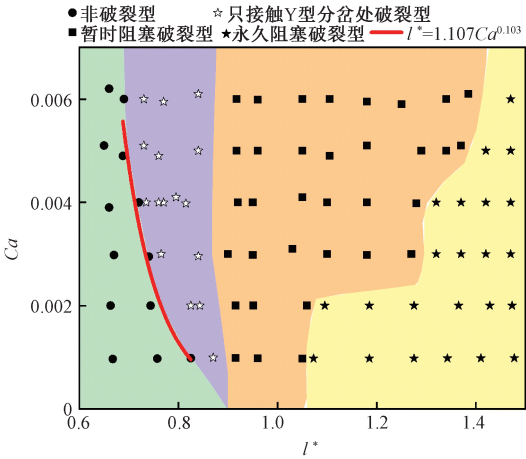


图 9 微滴流动相图
Figure 9 Phase diagram of droplet

当无量纲长度 l^* 小于 0.8 时,随着毛细数 Ca 增加,流态由非破裂型变为破裂型,通过增大毛细数 Ca ,使得上游压力增大,促进微滴分裂变形。当无量纲长度 l^* 为 1.05~1.5 时,随着毛细数 Ca 增加,流型由永久阻塞破裂型变为暂时阻塞破裂型。此外,随着无量纲长度 l^* 减小,流动状态由破裂型向非破裂型转变,微滴形状由柱塞状变为球形,与 Y 型分岔处的壁面接触减少,微滴界面转变速率减小,最终不发生破裂。

3 结论

基于 VOF 模型,建立了微滴通过对称 Y 型分岔微通道的三维动力学模型。实验验证了理论模型的可行性和适用性。仿真实验揭示微滴分裂过程中压力场和速度场的演化过程,得到微滴在不同流动状态下的破碎机理。结论可归纳如下。

(1) 对称 Y 型分岔微通道中观察到 4 种流

型,分别是永久阻塞破裂型、暂时阻塞破裂型、只接触 Y 型分岔处破裂型和非破裂型。破裂型有进入、挤压和分裂后 3 个阶段。非破裂型有进入、滑动和不分裂 3 个阶段。

(2) 微滴进入阶段,在主通道压力作用下,微滴前后界面形成压力差,推动微滴前进。在挤压阶段,微滴先受到来自主通道的上游压力驱动,后受到 Y 型分岔的分裂结构阻碍,在微滴受挤压的前期,Y 型分岔处的压力都会上升。在分裂后阶段,微滴在分裂微通道中分裂成 2 个子微滴,导致流动阻力的减小。

(3) 毛细数 Ca 的增加提供了一个更可观的上游压力来促进微滴变形,有利于微滴破裂。而随着微滴尺寸减小,微滴形状由柱塞状变为球形,微滴变形减小,形成非破裂流型。

(4) 通过仿真实验总结出描述微滴破裂与非破裂边界关于无量纲长度 l^* 与毛细数 Ca 的方程。

参考文献:

[1] 林炳承,秦建华.微流控芯片实验室[J].色谱,2005(5):456-463.
[2] UTADA A S, LORENCEAU E, LINK D R, et al. Monodisperse double emulsions generated from a microcapillary device[J]. Science, 2005, 308(5721):537-541.
[3] FU T T, MA Y G, FUNFSCHILLING D, et al. Dynamics of bubble breakup in a microfluidic T-junction divergence[J]. Chemical engineering science, 2011, 66(18):4184-4195.
[4] JOSE B M, CUBAUD T. Droplet arrangement and coalescence in diverging/converging microchannels[J]. Microfluidics and nanofluidics, 2012, 12(5):687-696.
[5] GARSTECKI P, GITLIN I, DILUZIO W, et al. Formation of monodisperse bubbles in a microfluidic flow-focusing device[J]. Applied physics letters, 2004, 85(13):2649-2651.
[6] CUBAUD T, MASON T G. Capillary threads and viscous droplets in square microchannels[J]. Physics of fluids, 2008, 20(5):053302.
[7] LIU H H, ZHANG Y H. Droplet formation in microfluidic cross-junctions[J]. Physics of fluids, 2011, 23(8):082101.
[8] LINK D R, ANNA S L, WEITZ D A, et al. Geometrically mediated breakup of drops in microfluidic devices[J]. Physical review letters, 2004, 92(5):054503.
[9] SAMIE M, SALARI A, SALARI A, et al. Breakup of

microdroplets in asymmetric T junctions [J].Physical review E, statistical, nonlinear, and soft matter physics, 2013, 87(5): 053003.

[10] TAN Y C, CRISTINI V, LEE A P. Monodispersed microfluidic droplet generation by shear focusing microfluidic device [J].Sensors and actuators B: chemical,2006,114(1):350-356.

[11] 张沙,谷正气,赵敬凯,等.基于 VOF 模型与动网格技术的油气悬架气液两相流数值模拟 [J].中国机械工程,2016,27(15):2091-2099,2106.

[12] CHEN B, GUO F, LI G, et al. Three-dimensional simulation of bubble formation through a microchannel T-junction [J]. Chemical engineering & technology, 2013,36(12):2087-2100.

[13] 徐刚,梁帅,刘武发,等.流动聚焦型微流控芯片微通道结构优化 [J].郑州大学学报(工学版),2020,41(4):87-91.

[14] LESHANSKY A M, PISMEN L M. Breakup of drops in a microfluidic T junction [J]. Physics of fluids, 2009, 21(2):023303.

Numerical Simulation and Experimental Investigation of Droplet Splitting in Symmetric Y-type Bifurcation Microchannels

ZHENG Yanping¹, ZHANG Ruigen¹, LIANG Shuai², LI Yang¹, XU Gang¹, SHU Haitao¹
(1.School of Mechanical and Power Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China; 2.Guangdong Shunde Innovation Design Institute, Foshan 528311, China)

Abstract: Using the two-phase flow VOF model in the ANSYS Fluent software, a three-dimensional dynamic model of the droplet in the microfluidic chip passing through the symmetric Y-type bifurcation microchannel was established, and the dynamic simulation of the droplet flow and the simulation result of the droplet interface evolution were realized. It was consistent with the experimental results to verify the effectiveness of the model. Through this model, the splitting behavior of the droplet passing through the symmetric Y-type bifurcation microchannel and the evolution process of the pressure field and velocity field during the droplet splitting process were studied, and the breaking mechanism of the droplet under four different flow patterns and different stages was revealed. The relationship between the flow pattern of the droplet and the capillary number Ca and the droplet size was obtained; according to the various flow pattern data obtained by the simulation, the prediction of the droplet rupture and non-rupture boundary under the model was obtained by fitting in MATLAB equation. This research not only provided a simple and effective method for droplet splitting, but also had potential application value in the fields of biomedicine, energy chemical industry and food engineering.

Keywords: microfluidics; droplet formation; droplet splitting; numerical simulation; Y-type bifurcation