

doi: 10.12068/j.issn.1005-3026.2020.12.003

基于水平集方法的共轴流型液滴形态 关键参数研究

胡 晟, 刘鑫琦, 吕晓永, 吴东旭
(东北大学秦皇岛分校 控制工程学院, 河北 秦皇岛 066004)

摘 要: 采用水平集方法对共轴流形的液滴成形进行计算和研究. 以液-液两相流为研究对象, 离散相为石蜡和庚烷混合物, 连续相为纯水溶液. 对离散相液体的进样速度、黏度和进样孔径大小分别进行了计算分析. 离散相液体分别以 15 ~ 48 mm/s 的速度进入半径 1 mm 的圆孔通道, 随着流速增大, 喷射高度变长, 周期规律性降低. 同时提高离散相溶液的黏度可以有效降低液滴张力与拖曳力之间的作用时间, 增大液滴生成频率和改善液滴均匀性. 孔径大小直接影响进样口层流的入口速度, 缩小孔径将使进样流速变化剧烈, 挤压后的液滴生成尺寸相对较小.

关 键 词: 微流; 液滴; 水平集方法; 共轴流

中图分类号: O 652.9; TQ 460.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1005-3026(2020)12-1686-06

Research on the Critical Parameters for Droplet Formation in Co-Flow Based on Level Set Method

HU Sheng, LIU Xin-qi, LYU Xiao-yong, WU Dong-xu
(School of Control Engineering, Northeastern University at Qinhuangdao, Qinhuangdao 066004, China.
Corresponding author: HU Sheng, E-mail: husheng@neuq.edu.cn)

Abstract: The generation of droplets in co-flow was studied by the level set method. Taking into account liquid-liquid two phases, the dispersed phased liquid is a mixture combined paraffin oil with heptane, whereas, the continuous phase fluid is aqueous water. Herein, these calculated works were carried out with inlet velocity and viscosity of the dispersed phase fluid, as well as injected hole size. When the dispersed phase fluid with velocity from 15 mm/s to 48 mm/s flows into a hole channel with radius of 1mm, the jetting height increases and the periodic generation reduces as the inlet velocity increases gradually. Meanwhile, increasing its viscous coefficient could decrease the disinfected time between droplet tension and drug force, so that frequency was increased and homogeneous characteristics were improved. The velocity of laminar flow was directly affected by the size of the hole. Owing to shrink the hole size, the sharpness of injected velocity occurs, resulting in the smaller size of the extruded droplet.

Key words: microfluidics; droplet; level set method; co-flow

液滴粒径一般在 10 ~ 100 μm 之间, 体积约为 10⁻¹⁸ ~ 10⁻⁹ L. 由于液滴具有较大的体表面积比, 分子热扩散时间较短, 有利于生化反应实验, 可加快微观研究和传感分析^[1-3]. 当前液滴生成芯片结构主要分为交叉型(如: T 型、V 型、Y 型、L-L 型)、共轴型、流动聚焦型和膜孔渗透型^[4]等. 以上结构在液滴的生成过程中各有优劣, 例如: 交叉型 T 沟道制作简单, 但是液滴的生成速率较慢、粒径调节较为复杂, 需要不停控制离散相和连续相之间的速度比. 流动聚焦型也存在上述问题. 膜孔渗透型的生成速率较高, 然而膜孔的参数已经制备完成, 后期难以调节.

与上述液滴生成方法不同, 目前还有一种共轴型液滴法, 离散相液体进样口流向和连续相流

速方向相同,根据离散相流速大小实现液滴的生成.目前国内学者进行了相关实验^[5]和仿真工作^[6-7].因其制备简单,仅需毛细管即可进行微尺度液滴颗粒的大量生成.上述国内学者对共轴液滴生成相关控制参数进行了实验报告,但是在共轴液滴模型的理论研究方面,采用水平集方法(level set method, LSM)研究进样速度、黏度、进样孔径尺寸以及生成频率却较少报道.

因为公式简单、编程容易、精度较好,水平集方法已经广泛使用在液滴微流控的多种结构研究当中.同时该方法也衍生出自适应网格 LSM,双分辨率 LSM,明锐界面 LSM,保守 LSM,都改善了该方法在微流两相系统研究中的理论预测能力^[8].因此本文采用 LSM 方法对单一离散相流体进样速度、黏度、孔径大小进行分析和研究.

1 理论模型

研究液滴生成必须先求解流场分布,两相流体都属于不可压缩流体(incompressible fluid).因此流场分布满足体积守恒原理:

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

式中: \mathbf{u} 代表流体速度矢量.水平集方法采用变量 Φ 表征两相流不同液体,变量的数值变化区间为 $[0,1]$.当 $\Phi = 0.5$ 时,表示离散相与连续相的分界.数值模型必须约束两相分界面之间具有一定空间厚度,以满足计算的连续性,采用变量 2ε 表示.此数值与离散网格点的间距成正比($2\varepsilon = 3\Delta x$).变量 Φ 描述的水平集函数满足质量守恒定律,如式(2)所示:

$$\partial\Phi/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla\Phi = 0. \quad (2)$$

离散相和连续相应满足动量守恒定律,即 Navier – Stokes 方程:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\eta \mathbf{D}) - \frac{\rho}{Fr^2} \hat{\mathbf{j}} + \frac{1}{We} \kappa \hat{\mathbf{n}} \delta_\varepsilon(\Phi). \quad (3)$$

式中: ρ 和 η 分别为液体密度和黏度; p 为流体压强; $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ 表示流体应变率张量; $\mathbf{n} = \nabla \Phi / |\nabla \Phi|$ 为分离界面处的法向单位矢量; $\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n}$ 是两相分界面的曲率半径; $\delta_\varepsilon(\Phi)$ 是狄拉克函数,用于对界面厚度进行适当的修正,防止数值计算出现较大突变.狄拉克函数由阶跃函数 $H_\varepsilon(\Phi)$ 对时间求导可得,关系式如下^[9]:

$$H_\varepsilon(\Phi) = \begin{cases} 0, \Phi = 0; \\ \frac{\Phi + \varepsilon}{2\varepsilon} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi\Phi}{\varepsilon}\right), 0 < \Phi < 2\varepsilon; \\ 1, \Phi = 1. \end{cases} \quad (4)$$

$$\delta_\varepsilon(\Phi) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} + \frac{1}{2\varepsilon} \cos\left(\frac{\pi\Phi}{\varepsilon}\right), 0 < \Phi < 2\varepsilon; \\ 0, \text{其他}. \end{cases} \quad (5)$$

通过上述 $\delta_\varepsilon(\Phi)$ 和 $H_\varepsilon(\Phi)$ 对分离界面的数学平滑作用,连续相和离散相混合后的液体密度和黏度可线性表示如下:

$$\rho = H_\varepsilon(\Phi) + \frac{\rho_c}{\rho_d} (1 - H_\varepsilon(\Phi)), \quad (6)$$

$$\eta = H_\varepsilon(\Phi) + \frac{\eta_c}{\eta_d} (1 - H_\varepsilon(\Phi)). \quad (7)$$

式中密度与黏度下标 c 和 d 分别表示连续相(continuous phase)和离散相(dispersed phase).

针对式(3), Re , Fr 和 We 为无量纲数,函数关系式如下:

$$\begin{cases} Re = \frac{\rho_c u d}{\eta_c}, \\ We = \frac{\rho_c u^2 d}{\sigma}, \\ Fr = \frac{u \rho_c}{(\rho_c - \rho_d) \sqrt{g d}}. \end{cases} \quad (8)$$

式中: d 为微沟道特征长度; g 为重力加速度; σ 为两相流与固体墙壁的表面张力系数.根据上述数学形式的说明,进行相关的物理与几何建模,共轴流场几何模型如图 1 所示.本文构建圆柱形管壁进行理论建模,为了降低 3D 网格单元的数量,选择 2D 轴对称坐标进行计算和分析.圆柱管半径 R 和高度 H 分别为 19 和 60 mm.下方具有和圆管对称轴重合的锥形喷孔.锥孔底部向上喷射离散相流体进入上方圆管.本文的上、下孔径 R_{h1} , R_{h2} 分别为 1 和 3 mm.

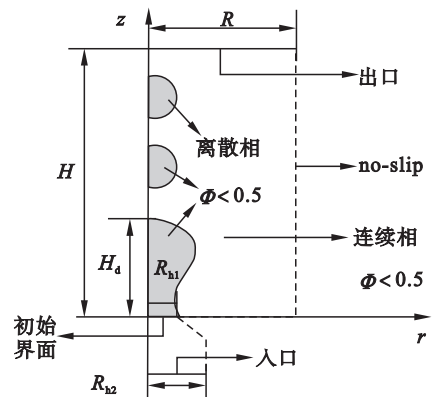


图 1 共轴流体的几何模型与边界条件

Fig. 1 Geometric model and boundary condition for co-flow

右方虚线代表管壁,其边界条件为非滑移边界.底部为离散相液滴流体入口($u_d = -U_0 \mathbf{n}$),顶部为两相流液体的出口通道,它的边界条件为 $L_{\text{exit}} \nabla_t \cdot [-p \mathbf{I} + \eta (\nabla_t \mathbf{u} + (\nabla_t \mathbf{u})^T)] = -p_{\text{exit}} \mathbf{n}$, $\nabla_t \cdot \mathbf{u} = 0$,其中 L_{exit} 和 p_{exit} 分别为出口长度与出口压强. 本文采用 COMSOL 有限元软件进行共轴两相流体建模和仿真分析.

2 仿真结果与分析

首先进行液滴离散相的流速研究,离散相为 70% 石蜡和 30% 庚烷的混合物,连续相为纯净水溶液,密度 ρ_d 和 ρ_c 分别为 $882, 996 \text{ kg/m}^3$,黏度 η_d 和 η_c 分别为 $6.71, 0.958 \text{ mPa}\cdot\text{s}$. 墙壁固相和两相流体之间表面张力系数 σ 为 44.8 mN/m . 对模型进行仿真求解,设定离散相初始速度 $u_d = 15 \text{ mm/s}$,求解结果如图 2a ~ 图 2f 所示. 由图可得,随着下方锥孔不断地注入离散相流体,液体逐渐进入圆柱体内部. 此时液滴受到下方离散相液体推力和上方连续相液体重力的共同作用发生形状变化. 初始条件,连续相对液滴的拖曳力较小,表面张力占主导,液滴在出口慢慢隆起形成半弧形. 液滴不断生长,它受到连续相的拖曳力将逐渐增强,并且液滴上、下速度差造成表面张力不平衡而发生撕裂. 最终撕裂的液滴脱离离散相,进入上方连续相溶液. 根据图 2 的液相分布,可以提取 z 轴方向的两相流相位关系曲线,方便求解液滴形

成过程的尺寸变化和具体位置,如图 3 所示.

分析两相液体的液滴形成,本文考虑在 z 轴 ($r = 0$),固定点 H_d 探点位置提取水平集变量 Φ 的数值. H_d 为液滴形成过程喷射的最大高度. 根据上述的相位可计算出 $u_d = 15 \text{ mm/s}$ 时, $H_d = 18.6 \text{ mm}$,结果如图 4 所示. 从图中的相位变化可说明,速度为 15 mm/s 的液滴成形还不够稳定,周期特性不十分明显. 仿真过程也发现液滴逐渐向上运动中会发生分解,其尺寸均匀性较差. 主要由于离散相液体向上运动克服重力降低了液滴的动能所致.

对离散相进样口流速进行研究,当速度降低为 4 mm/s 时,分离液滴并未形成. 主要由于两相流之间张力过大,进口液体无法克服重力与张力作用顺利进入圆柱管道内部. 反之,提高进样速度 u_d 分别为 $26, 37, 48 \text{ mm/s}$,形成的液滴形状如图 5 所示. 可见,随着离散相进口速度不断提高,液滴流逐渐变成射流流形. 离散相速度的增加,使单分散相液滴破碎程度加剧,尺寸变小.

喷射高度 H_d 变大. 对它们各自 H_d 位置点的相位进行研究,如图 6 所示,进样速度为 26 mm/s 时具有较好的液滴生成周期性,并且液滴的成形较为均匀. 但此速度下的液滴生成频率远低于进样速度为 37 mm/s 的情况. 然而, 48 mm/s 的速度使液滴生成频率更快,液滴单分散性较差,且稳定性不如前者. 调节石蜡和庚烷百分比,可得不同的黏度,如表 1 所示. 随连续相水溶液参数变化,研究黏度的影响.

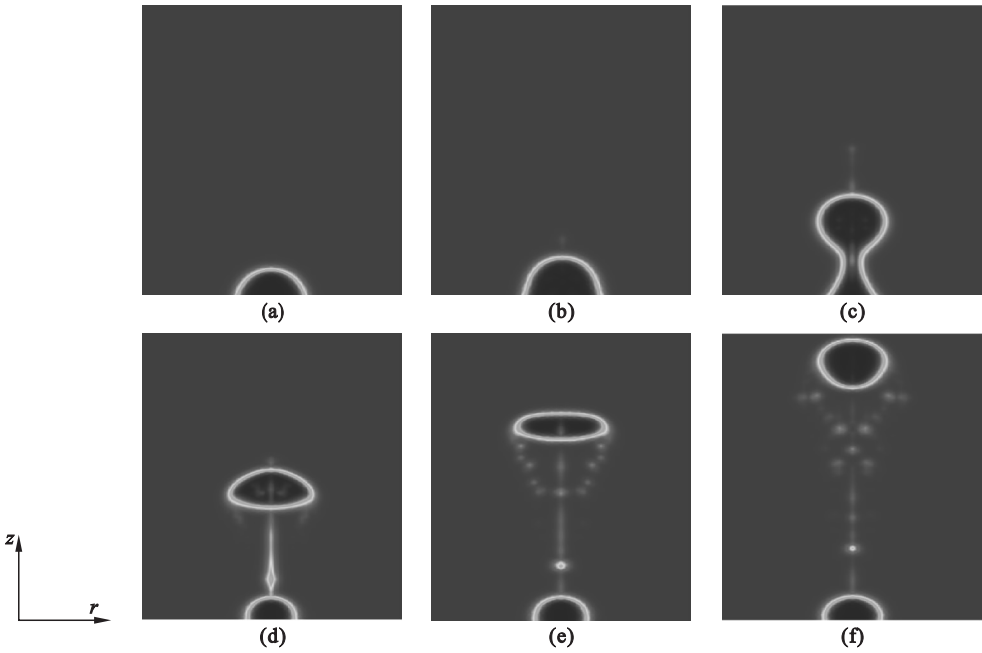


图 2 不同时刻的液滴成形过程
Fig.2 Droplet formation in different time
(a) ~ (f) 分别为 1 s, 2 s, 3 s, 3.1 s, 3.2 s, 3.3 s.

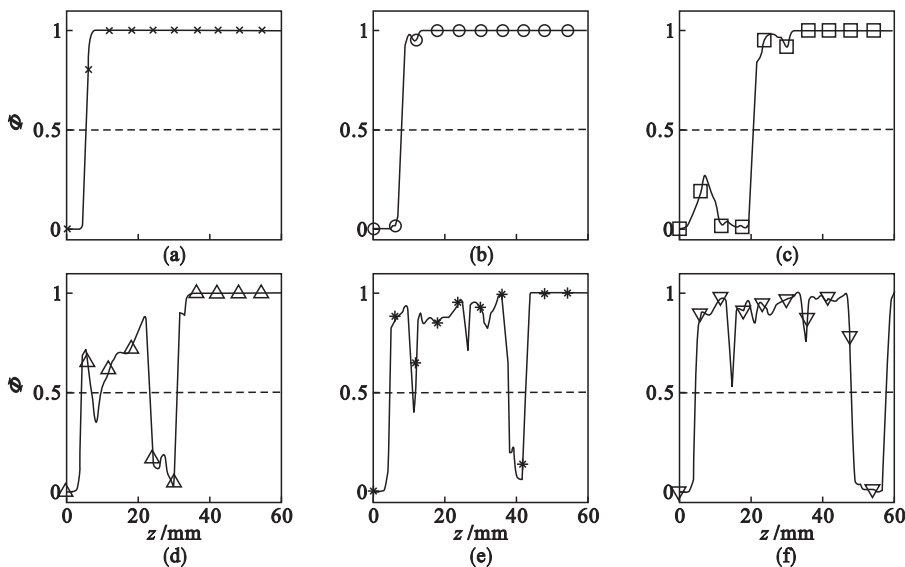


图 3 不同时刻 $r=0$ 的两相流相位分布曲线
Fig.3 Distribution of two phase fluid in different time at $r=0$
(a) ~ (f) 分别为 1 s,2 s,3 s,3.1 s,3.2 s,3.3 s.

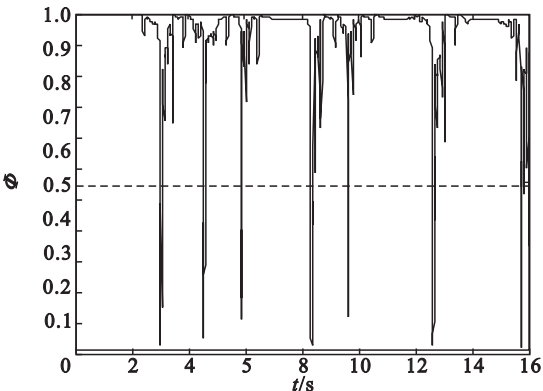


图 4 H_d 位置处随时间变化的相位关系曲线
Fig.4 Curve of phase change with time at H_d position

与 70% 石蜡 + 30% 庚烷的离散相液体进行对比,且连续相和输入速度保持不变,两种液体各自的 H_d 值随时间变化的相位如图 7 和图 8 所示. 为了更直观表达曲线特征,本文仅显示液滴分离处 8 ~ 16 s 的时间变化曲线. 从图 7 和图 8 可发现,随着黏度增大,在速度不变的条件下,液滴的生成周期增大,频率变慢. 该现象主要由于黏度数值增大,离散相和连续相液体之间的表面张力增强,需要更多的时间克服表面张力作用才能撕裂成固定尺寸的液滴. 但是速度不断增大至 48 mm/s,原本呈非周期性的喷射流形,也逐渐还原为周期性的液滴流. 形成的液滴具有较好的均匀性,然而尝

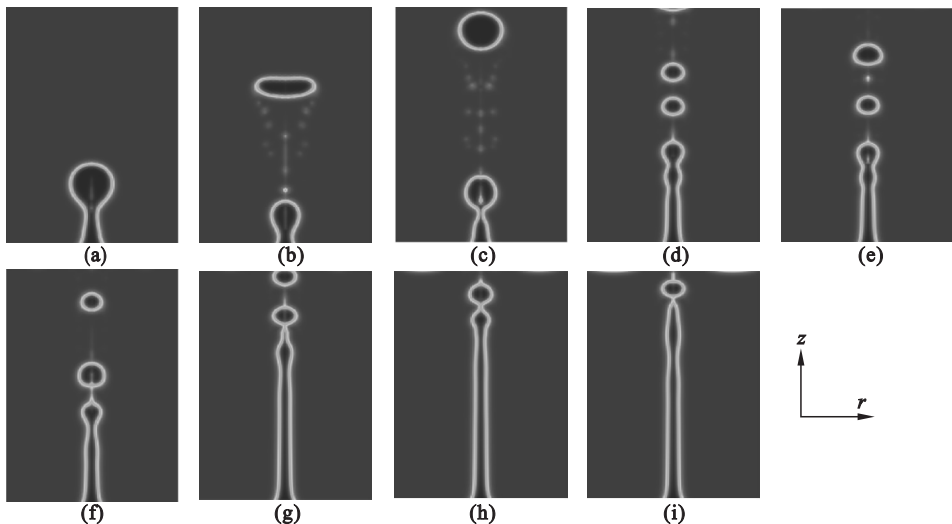


图 5 不同流速条件下液滴随时间变化相位图
Fig.5 Droplet changes with time under different inlet velocities

(a) ~ (c): $u_d = 26$ mm/s, 时间分别是 1.1 s,1.3 s,1.4 s; (d) ~ (f): $u_d = 37$ mm/s, 时间分别是 1.1 s,1.3 s,1.4 s; (g) ~ (i): $u_d = 48$ mm/s, 时间分别是 1.1 s,1.3 s,1.4 s.

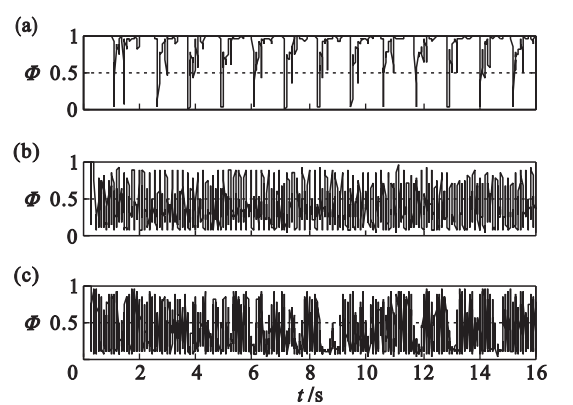


图 6 不同 H_d 位置随时间的相位关系曲线
Fig.6 Phase changed in the time for different H_d position
(a)— $u_d = 26$ mm/s, $H_d = 20$ mm; (b)— $u_d = 37$ mm/s, $H_d = 26.06$ mm; (c)— $u_d = 48$ mm/s, $H_d = 51.52$ mm.

| 表 1 不同石蜡与庚烷百分比仿真参数 Table 1 Simulated parameters of different percent between paraffin oil and heptane | | | |
|--|---|---|---|
| 百分比/% 石蜡 + 庚烷 | $\rho_d /$ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) | $\eta_d /$ ($\text{mPa} \cdot \text{s}$) | $\sigma /$ ($\text{mN} \cdot \text{m}^{-1}$) |
| 80 + 20 | 843 | 15.7 | 45.4 |
| 90 + 10 | 865 | 35.3 | 44.4 |

试将速度提高到 89 mm/s,90% 石蜡 + 10% 庚烷的结果显示生成液滴的周期性降低,与图 5g ~ 5i 类似.

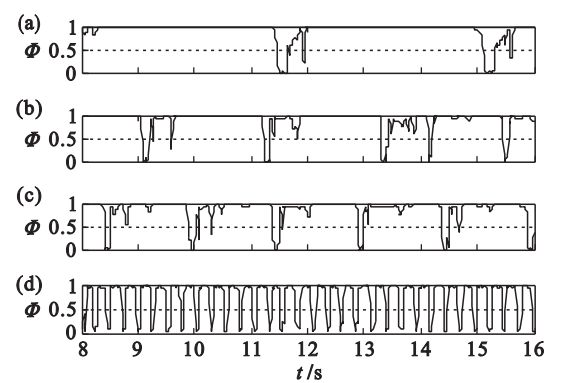


图 7 80% 石蜡 + 20% 庚烷对不同速度的 H_d 位置相位曲线
Fig.7 Phase curves of different velocities at H_d position for 80% paraffin oil and 20% heptane
(a)— $H_d = 18.79$ mm; (b)— $H_d = 20$ mm;
(c)— $H_d = 22.42$ mm; (d)— $H_d = 33.33$ mm.

最后对入射孔径 HR1 进行研究,计算结果如图 9 所示. 本文以离散相 90% 石蜡 + 10% 庚烷为研究对象,初始速度为 48 mm/s. 设置孔径 HR1 分别为 3 mm 和 2 mm,且其余参数保持不变. 与图 8d 相比,缩小孔径能够增大分离界面处的层流速度,进而增加液滴的生成频率. 但是因为孔径的降低,相应生成液滴的尺寸也受到限制. 另外也证

明了液滴生成频率与输入孔径有间接关系,对液滴尺寸与均匀特性具有较大的影响. 上述仿真研究与文献[9 - 10]仿真结果一致.

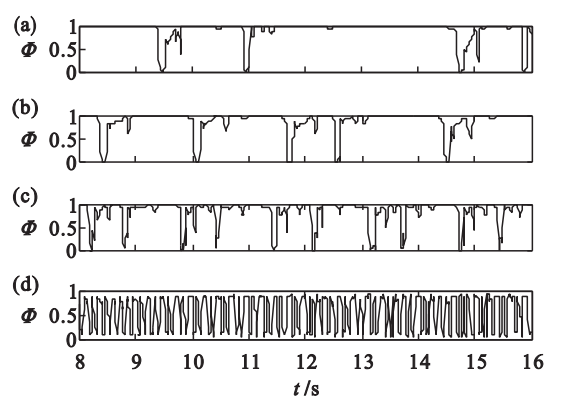


图 8 90% 石蜡 + 10% 庚烷对不同速度的 H_d 位置相位曲线
Fig.8 Phase curves of different velocities at H_d position for 90% paraffin oil and 10% heptane
(a)— $H_d = 19.39$ mm; (b)— $H_d = 25.45$ mm;
(c)— $H_d = 26.67$ mm; (d)— $H_d = 33.33$ mm.

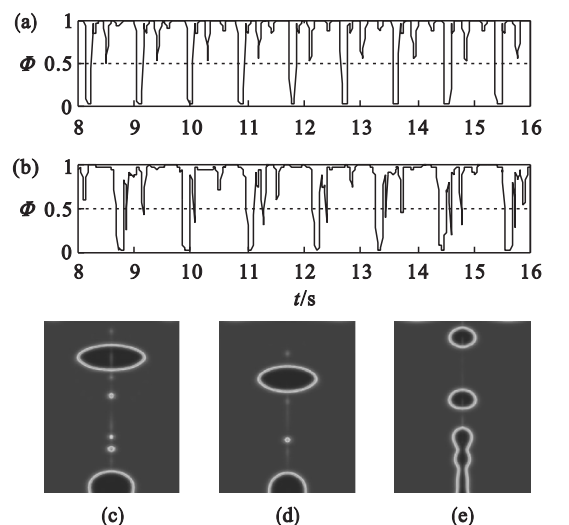


图 9 90% 石蜡 + 10% 庚烷的孔径对比
Fig.9 Comparison with different hole size for 90% paraffin oil and 10% heptane
(a)—孔径 3 mm 相位曲线; (b)—孔径 2 mm 相位曲线;
(c)—孔径 3 mm 液相图; (d)—孔径 2 mm 液相图;
(e)—孔径 1 mm 液相图.

3 结 论

- 1) 共轴流体离散相输入速度越快,流形逐渐由液滴流过渡为射流,且喷射长度加长,周期性降低.
- 2) 离散相比连续相的黏度值相差越大,液滴生成的周期性越好.

3) 孔径越大,液滴的生成尺寸越大,但周期变长,均匀性降低.

参考文献：

[1] Zhu P A,Wang L Q. Passive and active droplet generation with microfluidics; a review [J]. *Lab on a Chip*, 2017, 17 (1); 34 – 75.

[2] Olzmann J A,Carvalho P. Dynamics and functions of lipid droplets[J]. *Nature Reviews Molecular Cell Biology*, 2019, 20(3); 137 – 155.

[3] Kaminski T S, Garstecki P. Controlled droplet microfluidic systems for multistep chemical and biological assays [J]. *Chemical Society Reviews*, 2017, 46(20): 6210 – 6226.

[4] Shang L R, Cheng Y, Zhao Y J. Emerging droplet microfluidics[J]. *Chemical Reviews*, 2017, 117(12): 7964 – 8040.

[5] 孙嘉禾,伊春明,张金松. 垂直共轴锥管中石蜡/乙醇液液两相流研究[J]. 计量与测试技术, 2019, 46(8): 15 – 18. (Sun Jia-he, Yi Chun-ming, Zhang Jin-song. The study of paraffin-ethanol two-phase flow in a tapered co-flow tube [J]. *Metrology & Measurement Technique*, 2019, 46 (8): 15 – 18.)

[6] 李泽甫,王晓军,杨怡,等. 微流控法二乙烯基苯乳液粒子成型机理研究[J]. 强激光与粒子束, 2014, 26(5): 167 – 171.

(Li Ze-fu, Wang Xiao-jun, Yang Yi, et al. Diviyl benzene emulsion droplets generation with microfluidic method[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2014, 26(5): 167 – 171.)

[7] 王 颢元,邓朝俊,王翰霖,等. 共轴流水包油型微液滴形成过程的实验与数值模拟研究[J]. 高校化学工程学报, 2017, 31(2): 291 – 298.

(Wang Hao-yuan, Deng Chao-jun, Wang Han-lin, et al. Experimental and numerical investigation of oil-in-water micro-droplet formation in a co-flowing system[J]. *Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities*, 2017, 31 (2); 291 – 298.)

[8] Sharma A. Level set method for computational multi-fluid dynamics: A review on developments, applications and analysis[J]. *Sadhana*, 2015, 40(3): 627 – 652.

[9] Lakdawala A M,Gada V H,Sharma A. A dual grid level set method based study of interface-dynamics for a liquid jet injected upwards into another liquid [J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2014, 59: 206 – 220.

[10] Shahin H, Mortazavi S. Three-dimensional simulation of microdroplet formation in a co-flowing immiscible fluid system using front tracking method[J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2017, 243: 737 – 749.