



CSTAM 2012-B03-0023

## 十字交叉微通道内微液滴生成的 VOF 模拟

王维萌，陈斌

西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室

第七届全国流体力学学术会议

2012 年 11 月 12—14 日 广西·桂林

# 十字交叉微通道内微液滴生成的 VOF 模拟<sup>1)</sup>

王维萌, 陈斌<sup>2)</sup>

(西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 陕西 西安 710049)

**摘要** 本文采用 VOF 方法对十字交叉微通道内微液滴生成过程进行了三维数值模拟研究, 结果与可视化实验相吻合, 验证了模型的有效性。分析了拉伸挤压、滴状剪切、单分散射流三种单分散微液滴的生成机制并获得了紊流射流、管状流、滑移流和节状形变流等两相流型。本文发现液液两相微流动主要受两相流速、两相界面张力以及连续相粘度的影响。连续相流速增大, 微液滴生成尺寸减小, 生成频率增大; 离散相流速的作用则相反。两相表面张力系数与连续相粘度分别在低  $Ca$  数条件下和高  $Ca$  数条件下对微液滴的生成起主导作用。在拉伸挤压和滴状剪切流型下微液滴生成尺寸随表面张力系数减小而减小, 在射流条件下则反而增大; 对于生成频率的影响规律则恰好相反。微液滴的生成尺寸随连续相粘度的增大而减小, 微液滴的生成频率则随之增大。另外, 离散相流体与壁面的接触角在拉伸挤压流型下对微液滴的生成除了两相界面从外凸变为内凹以外并无太大影响; 但对滴状剪切和单分散射流来说则当离散相壁面接触角减小到某一值时, 微液滴便无法稳定生成, 且此临界接触角随两相流速的增大而增大。

**关键词** 微流控芯片, 微液滴, 十字交叉微通道, VOF, 数值模拟

## 引言

近年来, 以微流控芯片为基础、以操纵微小液滴为手段的微液滴微流控技术发展迅猛, 在生化医药等领域得到了广泛应用。微液滴的制备是操控微液滴的前提, 利用微通道特殊结构来制备微液滴的方式主要包括 T/Y 型交错通道、二维对称流动聚焦通道、三维轴对称共轴聚焦通道以及其它类型如阶梯型微通道等。其中, 流动聚焦类微通道生成的微液滴尺寸范围较广、大小可控、单分散性较好且对壁面材料润湿性要求不高而受到人们的青睐。目前, 许多研究人员通过实验研究、理论分析和数值模拟方法对微通道内生成单分散微液滴的形成机制、尺寸分布、生成频率以及它们的相关影响因素进行了大量的研究, 并且尝试建立一系列理论和模型来预测其各种动力学行为 [1-5]。

本文采用 FLUENT 软件的 VOF 模型 [6, 7] 对十字交叉微通道内的微液滴形成过程进行三维数值模拟, 同时通过可视化实验进行模型验证。在获得了不同的微液滴生成机理后, 分析液液两相流速、表面张力系数、粘度、界面接触角等因素对微液滴生成的影响, 为工程实际应用提供指导。

## 1 物理模型

### 1.1 十字交叉型微通道的结构及几何尺寸

如图 1 所示, 微通道的水平段与垂直段横截面皆为矩形, 通道尺寸可由  $H_D$ 、 $W_D$ 、 $H_C$ 、 $W_C$  四个参数来定义。 $H_D$  和  $W_D$  分别代表水平管道的高和宽度,  $H_C$ 、 $W_C$  分别代表连续相入流段垂直管道的高和宽度。连续相和离散相入流段管道长度经过计算验证当超过  $3W$  时不会对模拟结果产生影响; 水平通道在十字交叉区域后部的两相混合流动直管段长度为  $50W_D$ 。

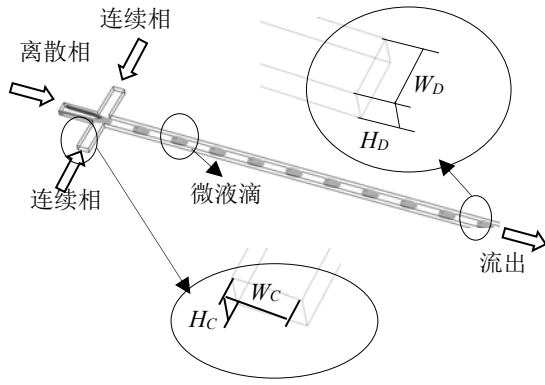
液滴的大小由液滴在管道中心对称平面上的最大长度  $D$  表示, 如图 1(b) 所示。三维十字交叉微通道均使用正六面体网格进行划分, 经过网格无关性验证, 总网格数约为 300000。

### 1.2 参数设置

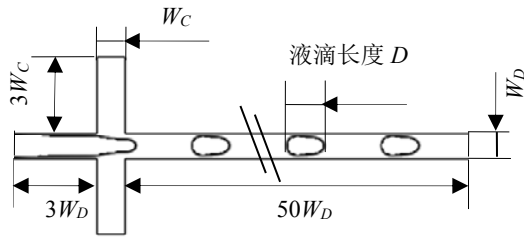
本文数值计算时, 分别以硅油为连续相, 蒸馏水 (添加酒精可改变粘度) 作为离散相。为了模拟统一, 两相密度均近似取水的密度为  $998\text{kg/m}^3$ , 油相为  $970\text{kg/m}^3$ 。假设流动的初始时刻, 通道内全部充满油, 从  $t=0$  时刻, 油和水分别以固定的流速  $U_o$  和  $U_w$  从两相入口流入。计算具体工况见表 1-1。

1) 基金资助项目: 国家自然科学基金 (51176152, 51121092) 资助项目

2) Email: [chenbin@mail.xjtu.edu.cn](mailto:chenbin@mail.xjtu.edu.cn)



a) 十字交叉微通道三维结构



b) 十字交叉微通道尺寸示意图

图1 十字交叉微通道的三维几何结构及尺寸

表 1-1 模拟所用工质物性

工质	粘度 $\mu(\text{Pa}\cdot\text{s})$	界面张力 $\sigma(\text{N/m})$	流速 $U(\text{m/s})$
离散相	水	0.001	0.001
		~0.01	~1.0
连续相	硅油	0.001	0.001
	KF96	~0.056	~1.0

设置 Fluent 求解器时，对于几何界面重构方法采用 PLIC 算法，压力速度耦合采用 PISO 算法，压力差值方案选用 PRESTO! 算法，动能项的离散方式选用二阶迎风格式。时间步长、Courant 数、亚松驰迭代因子等参数根据计算结果的稳定性及收敛性选取。

## 2 物理模型的有效性验证

为了验证模型的有效性，本文以去离子水（加入质量分数 0.5% 的 SDS 作为表面活性剂）和硅油分别作为离散相和连续相流体工质，截面尺寸为  $200\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$  的十字交叉微通道微流控芯片作为试验段，并将可视化实验结果与所作数值模拟结果作对比验证。离散相流量为  $200\sim 15000\mu\text{l/h}$ ；连续相流量为  $100\sim 20000\mu\text{l/h}$ 。在上述条件下，得到了拉伸挤压流型、滴状剪切流型、单分散射流流型、紊乱射流

流流型、管状流型、滑移流型以及节状形变流型。验证结果如图 2 所示，数值模拟与实验结果吻合很好，验证了本文使用的数值模拟方法的有效性。

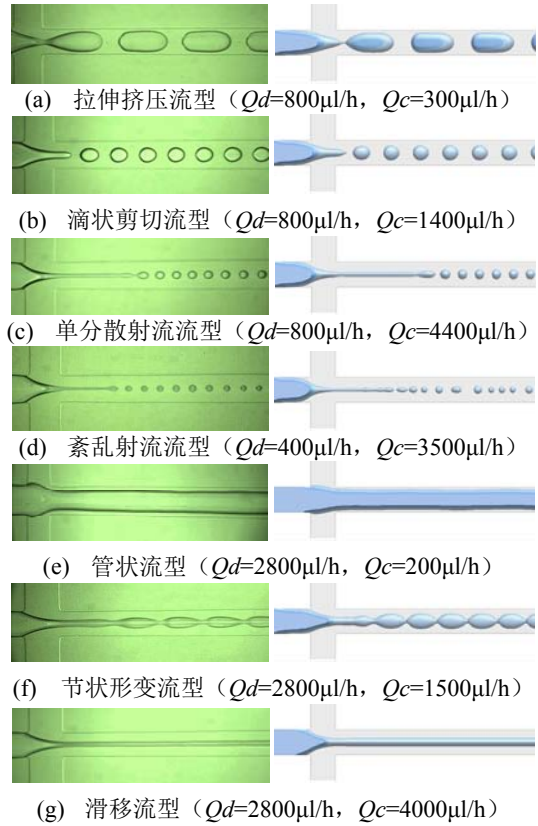


图 2 所得流型的数值模拟结果与实验的对比

对于微尺度流动，通常引入  $Ca$  数来预测微液滴生成的流型。其定义为连续相粘度与流速的乘积与两相表面张力系数的比值。对于能够生成单分散微液滴的拉伸挤压和滴状剪切流型，前人研究较多；对于射流，本文以是否能够产生单分散微液滴为判据，提出射流可分为单分散和紊乱两种流型。当两相流速较小时，微液滴以拉伸挤压模式生成（图 2a），随着连续相  $Ca$  数的增大，流型依次转变为滴状剪切（图 2b）和单分散射流（图 2c），当提高离散相流速后，射流中的单分散射流逐渐消失，完全变为紊乱射流（图 2d）。继续增大离散相流速，上述 4 种流型消失，管道内将无法生成微液滴。这时随连续相  $Ca$  数的增大，两相流型依次变为管状流（图 2e）、节状形变流（图 2f）以及滑移流（图 2g）。其中，管状流和滑移流均属于环状流。对于节状形变流，离散相在通道中形成较粗的变形液柱，而且液柱的直

径发生周期性的变化，每隔一段距离会有一个直径很小的节点，这些节点将液柱分为了许多长度相等的液段。继续增大离散相流量，节状形变流消失，两相流型全部变为环状流。

为了衡量液滴的大小和形状，本文采用液滴在微通道对称平面的轴向最长距离  $D$  和截面宽度  $W$  之比来定义液滴的无量纲尺寸。当  $D/W$  大于 1 时，由拉伸挤压模式形成的液滴将充满整个十字交叉后部水平两相汇聚通道并且与壁面相接触（液滴与壁面之间会形成一层较薄的液膜），此时液滴的形状由于受到壁面限制而形成弹状；当  $D/W$  小于或等于 1 时，液滴的生成过程可能处于滴状剪切或射流模式，并且随着连续相  $Ca$  数的增大，液滴尺寸越小并且形状越接近球形。图 3 给出了模拟中在拉伸挤压流型、滴状剪切流型和单分散射流流型的工况范围内  $D/W$  随连续相  $Ca$  数的变化关系，并与实验结果做了比较，两者吻合较好。

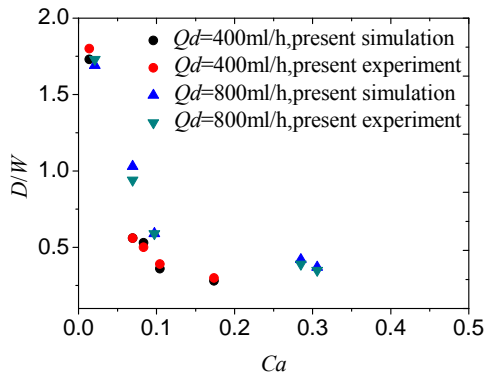


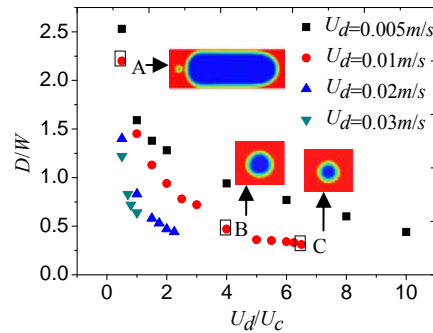
图 3 液滴无量纲尺寸随连续相  $Ca$  数的变化

从图中可以看出，液滴无量纲尺寸随连续相  $Ca$  数的变化趋势随流型的变化而不同。我们发现，当连续相  $Ca$  数减小时，微液滴的尺寸减小。但在拉伸挤压和滴状剪切流型下，微液滴尺寸的减小速率较大；当进入射流时， $D/W$  的值趋向平坦，变化不大。另外我们发现，虽然  $D/W$  的值为 1 时是拉伸挤压和滴状剪切流型的分界线，但  $D/W$  值变化趋势减缓的拐点  $Ca$  数大约为 0.1，两者并不对应。因此，该拐点并非是拉伸挤压向滴状剪切模式变化的转折点。也就是说明在两者的过渡阶段，压力与剪切力的变化共同对微液滴的生成起作用。

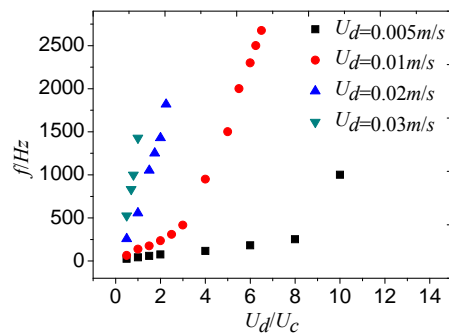
### 3 结果与讨论

#### 3.1 两相流量对微液滴生成的影响

本文对表观速度在 0.001~1m/s 范围内的液液两相流动工况进行数值模拟，获得了具有单分散性和稳定生成频率的微液滴。图 4(a)和 4(b)中展示了固定离散相流速下 ( $\mu_d=0.005\text{Pa}\cdot\text{s}$ ,  $\mu_c=0.056\text{Pa}\cdot\text{s}$ ,  $\sigma=0.03\text{N/m}$ )，微液滴相对尺寸  $D/W$  与生成频率随两相流速比的变化情况。从图中可发现，当两相流速均较低时，微液滴以拉伸挤压状流型生成，随着连续相流速增大，微液滴生成机制逐渐转变为滴状剪切流型，随后变为单分散射流，最后转变为紊流射流。在此过程中，微液滴的尺寸逐渐变小，生成频率逐渐增大。而且随着连续相流速的增大，微液滴尺寸减小趋势变缓，而微液滴生成频率增加趋势却变快。另外，对于离散相流速来说，我们发现相同流速比下，随着离散相流速的增加，液滴的生成尺寸降低速率以及生成频率的增加速率变高，而且当离散相流速大于 0.03m/s 时，微液滴的生成全部以射流形式进行。



a) 液滴尺寸随两相流速比的变化



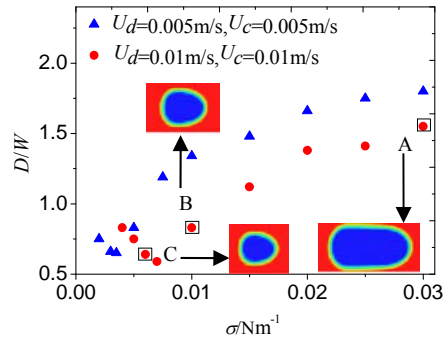
b) 液滴生成频率随两相流速比的变化

图 4 液滴尺寸与频率随两相流速的变化

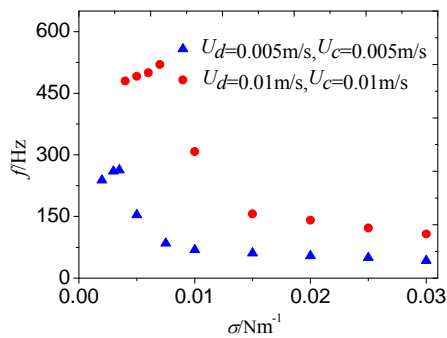


### 3.2 液液两相表面张力对微液滴生成的影响

本文通过对液液两相流体间的表面张力系数进行一系列修改，考察表面张力对十字交叉微通道内微液滴生成的尺寸和频率的影响。微液滴生成的相对尺寸和频率随表面张力系数的变化详见图 5(a)和图 5(b) ( $\mu_d=0.002\text{Pa}\cdot\text{s}$ ,  $\mu_c=0.05\text{Pa}\cdot\text{s}$ )。



a) 液滴尺寸随两相表面张力系数的变化



b) 液滴生成频率随两相表面张力系数的变化

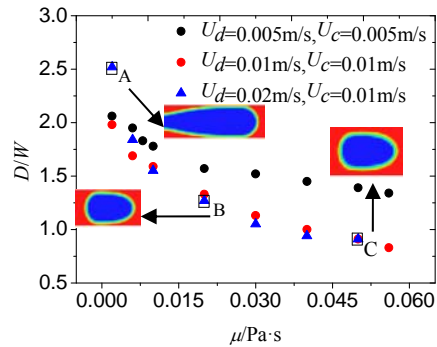
图 5 两相表面张力系数对微液滴生成的影响

从图中可看出，表面张力对微液滴生成的影响随着液液两相流速的变化而不同。在低速条件下 ( $U_d=0.005\text{m/s}$ ,  $U_c=0.005\text{m/s}$ ),  $Ca$  较小，这时表面张力对流动的影响起主导作用，随着表面张力系数的减小微液滴的生成机制逐渐由拉伸挤压转换为滴状剪切，微液滴生成的尺寸也逐渐减小，微液滴生成频率则逐渐增大，而且减小和增大的速率随着表面张力系数的减小而增大。对于相同流速比的高速条件下 ( $U_d=0.01\text{m/s}$ ,  $U_c=0.01\text{m/s}$ ), 其变化趋势与低速条件下大致相同，但由于在较高流速下，表面张力的影响减小，因此在较小表面张力系数范围内随着表面张力系数的增加，微液滴生成尺寸的增

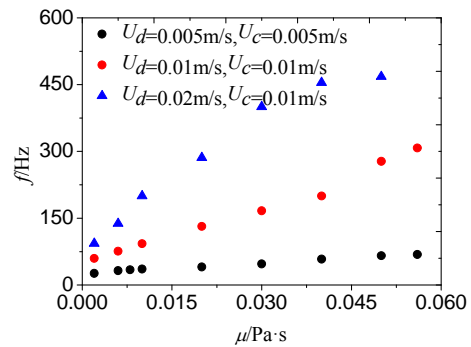
加速率要小于低速条件下的增加速率，但随着表面张力系数的增加，表面张力的影响逐渐增大，液滴的生成尺寸的增加速率迅速增大，而生成频率迅速降低。另外，我们可以注意到当表面张力系数小于某值时，液滴的生成机制转为射流机制，这时，随着表面张力系数的减小，生成液滴的尺寸反而逐渐增大，液柱的长度也逐渐增加，相应的生成频率则逐渐减小。

### 3.3 连续相粘度对微液滴生成的影响

图 6(a)和图 6(b)显示了三种不同液液两相流速条件下微通道内微液滴生成尺寸与频率随连续相粘度的变化 ( $\mu_d=0.002\text{Pa}\cdot\text{s}$ ,  $\sigma=0.01\text{N/m}$ )。从图中发现生成微液滴的尺寸随着连续相流体粘度的增大而减小，微液滴生成的频率随连续相粘度的增大而增大。



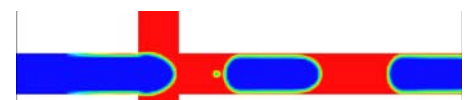
a) 液滴尺寸随连续相粘度的变化



b) 液滴生成频率随连续相粘度的变化

图 6 连续相粘度对微液滴生成的影响

对于所选的三组流速工况，我们发现连续相粘度的影响随两相流速的高低而不同：在低速条件下 ( $U_d=0.005\text{m/s}$ ,  $U_c=0.005\text{m/s}$ ),  $Ca$  数较低，微液滴的生成受连续相粘度影响因素较小，随连续相粘度从  $0.002\text{Pa}\cdot\text{s}$  变化到



0.056Pa·s，微液滴的相对尺寸  $D/W$  从 2.06 减小到 1.45，减小了 30%，微液滴生成频率从 26.0Hz 增加到 58.0Hz，增加了 2.2 倍；在高速条件下 ( $U_d=0.02\text{m/s}$ ,  $U_c=0.01\text{m/s}$ )，则连续相粘度影响较大，此时微液滴的生成机制随着连续相粘度的增大依次从拉伸挤压模式转换为滴状剪切模式，最后进入射流模式。而且微液滴的相对尺寸从 2.51 减小到 0.91，减小了 64%，微液滴生成频率从 93.0Hz 增加到 467.9Hz，增加了 5 倍。

### 3.4 壁面润湿角对微液滴生成的影响

本文最后改变了 VOF 设置中的壁面接触角一项的值来研究壁面润湿性对微液滴的生成影响，图 7 显示了在离散相为水，连续相为油时，壁面接触角分别为  $90^\circ$  和  $0^\circ$  时微通道内微液滴的生成过程（正常模拟设置时的壁面接触角为  $180^\circ$ ）。我们发现随着接触角的减小，通道内水滴的界面相对于油相流体来说从外凸转换为内凹，水相与壁面的接触面积增大。当流速较小时，液滴的生成机制为拉伸挤压模式，这时无无论壁面接触角为  $180^\circ$  或是  $0^\circ$ ，均能生成稳定的单分散液滴；但当两相流速逐渐增大后，微液滴生成进入滴状剪切模式，这时当接触角减小到某一值时，微液滴的生成变为两个较小的液滴紧贴上下壁面生成；对于射流模式，则当接触角减小到某一值时液液两相流动变为环状流，无法稳定生成微液滴。并且此临界接触角随两相流速的增大而增大。

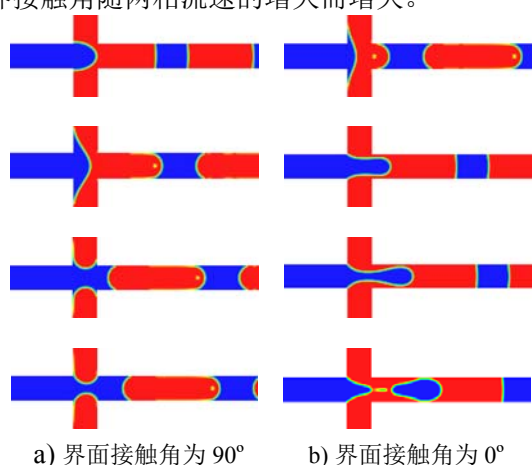


图 7 不同接触角下微液滴的生成过程

( $U_d=0.01\text{m/s}$ ,  $U_c=0.01\text{m/s}$ )

## 4 结 论

本文对十字交叉型微通道内的微液滴生成过程利用 VOF 模型进行了三维数值模拟，并且所得模拟结果与可视化实验吻合良好，具体结论如下：

1) 随着两相  $Ca$  数的变化，微通道内 W/O 微液滴生成表现为不同的机制：在离散相  $Ca$  数较低时，W/O 微液滴的生成模式随着连续相  $Ca$  数的升高，依次经历拉伸挤压模式、滴状剪切模式、单分散射流模式以及紊乱射流模式；当离散相  $Ca$  数较高时，则产生滑移流、节状形变流以及管状流等各种环状流模式。其中只有拉伸挤压模式、滴状剪切模式和单分散射流模式能够生成单分散微液滴。

2) 液液两相的流速对微液滴生成的尺寸和频率有较大影响：固定离散相流速下，微液滴的生成尺寸随连续相流速的增大而减小，微液滴的生成频率随连续相的增大而加快。在相同的连续相流速变化范围内，随着离散相流速的增加，微液滴的生成尺寸降低速率以及生成频率的增加速率变快，而且当离散相流速大于  $0.03\text{m/s}$  时，微液滴的生成全部以射流形式进行。

3) 两相表面张力和连续相粘度对微液滴的影响随  $Ca$  数的变化而不同，在低  $Ca$  数下，表面张力占主导地位；在高  $Ca$  数下，连续相粘度占主导地位。总的来说，生成微液滴的尺寸随表面张力的增大而增大，随连续相粘度的增大而减小。微液滴的生成频率随两相表面张力的增大而减小，随连续相粘度的增大而增大。但对于射流模式下，随表面张力系数的减小，生成微液滴的尺寸反而增加，生成频率降低。

4) 壁面润湿角对微液滴生成的影响随流型的不同而不同：对于拉伸挤压流型，随着离散相流体壁面接触角的减小，离散相界面相对于连续相流体从外凸变为内凹，这时离散相与壁面接触面积增大，而且仍能稳定生成微液滴。随着两相流速的增大，液滴的生成进入滴状剪切和射流模式，这时随着壁面接触角减小，微液滴的生成频率降低，生成难度加大，当角度减小到一定值时，管道内微液滴以上下两层贴壁的形式存在或形成环状流无法稳定生成液滴。此临界角度随两相流速的增大而增大。

## 参考文献

- 1 Ward, T.; Faivre, M.; Abkarian, M.; Stone, H.A. Microfluidic flow focusing: Drop size and scaling in pressure versus flow-rate-driven pumping. *Electrophoresis* 2005, 26, 3716-3724.
- 2 Collins, J.; Lee, A.P. Control of serial microfluidic droplet size gradient by step-wise ramping of flow rates. *Microfluid Nanofluid* 2007, 3, 19-25.
- 3 Guillot, P.; Colin, A.; Utada, A.S.; Ajdari, A. Stability of a jet in confined pressure-driven biphasic flows at low Reynolds numbers. *Phys. Rev. Lett.* 2007, 99, 104502:1-104502:4.
- 4 Cubaud, T.; Mason, T.G. Capillary threads and viscous droplets in square microchannels. *Phys. Fluids* 2008, 20, 053302:1-053302:11.
- 5 Nie, Z.H.; Seo, M.S.; Xu, S.Q.; Lewis, P.C.; Mok, M.; Kumacheva, E.; Whitesides, G.M.; Garstecki, P.; Stone, H.A. Emulsification in a microfluidic flow-focusing device: effect of the viscosities of the liquids. *Microfluid Nanofluid* 2008, 5, 585-594.
- 6 Guo, F., and Chen, B. "Numerical Study on Taylor Bubble Formation in a Micro-channel T-Junction Using VOF Method" *Microgravity Sci. Technol.*, 21, pp.S51-S58.
- 7 Brackbill, J. U., Kothe, D. B., and Zemach, C. "A continuum method for modeling surface tension." *J. Comput. Phys.*, 100, pp.335-354.

## Numerical Simulation of Micro-droplet Formation in A Cross-Junction Micro-channel Using VOF Method

WANG Weimeng    Chen Bin

(State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China)

**Abstract** A volume-of-fluid (VOF) method of commercial software FLUNET is used to study the 3D micro-droplets formation in a cross-junction micro-channel, and squeezing, dripping, steady jetting which can generate monodisperse droplets and unsteady jetting, tubing, threading, deformation flowing regimes are obtained. And the numerical results agree well with experimental measurements, which confirms the validation of our model. The immiscible liquid-liquid two-phase flow is influenced by the velocity, the surface tension coefficient and the viscosity of two phases. The length of droplets decreases with an increase of the velocity of continuous phase, while the generation frequency of droplets increases. The influence of dispersed phase is in contrast to that of continuous phase. The flow is dominated by the surface tension in a low  $Ca$  while the viscosity of continuous phase dominates the flow in a high  $Ca$ . In squeezing and dripping regimes the length of droplets decreases with a decrease of the surface tension coefficient, while in the jetting regime the length of droplets increases. The trend of generation frequency of droplets is in contrast to that of droplets length. The length of droplets decreases with an increase of the viscosity of continuous phase, while the generation frequency of droplets increases. Otherwise, the reduction of wall contact angle of dispersed phase will cause the interface of two phases changing into inset from outset, but there is no effect on generation of droplets. As for dripping and jetting regimes, it is difficult for formation of droplets when wall contact angle of dispersed phase reaches a limit value, and this value increase with an increase of the velocity of two phases.

**Key words** micro-fluidics, micro-droplets, cross-junction micro-channel, VOF, numerical simulation