

分叉微通道内液滴动力学行为的格子 Boltzmann 方法模拟

梁宏 柴振华 施保昌

Lattice Boltzmann simulation of droplet dynamics in a bifurcating micro-channel

Liang Hong Chai Zhen-Hua Shi Bao-Chang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 204701 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.204701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.204701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I20>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

液滴撞击液膜过程的格子 Boltzmann 方法模拟

Lattice Boltzmann simulation of the droplet impact onto liquid film

物理学报.2016, 65(8): 084702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.084702>

过渡区微尺度流动的有效黏性多松弛系数格子 Boltzmann 模拟

Simulation of micro flow in the transition regime using effective-viscosity-based multi-relaxation-time lattice Boltzmann model

物理学报.2016, 65(1): 014703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.014703>

多孔介质内溶解与沉淀过程的格子 Boltzmann 方法模拟

Lattice Boltzmann simulation of dissolution and precipitation in porous media

物理学报.2015, 64(15): 154701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.154701>

微尺度振荡 Couette 流的格子 Boltzmann 模拟

Lattice Boltzmann modeling of microscale oscillating Couette flow

物理学报.2014, 63(21): 214703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.214703>

任意复杂流-固边界的格子 Boltzmann 处理方法

A novel lattice Boltzmann method for dealing with arbitrarily complex fluid-solid boundaries

物理学报.2014, 63(7): 074703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.074703>

分叉微通道内液滴动力学行为的格子 Boltzmann 方法模拟*

梁宏¹⁾ 柴振华²⁾³⁾ 施保昌^{2)3)†}

1) (杭州电子科技大学物理系, 杭州 310018)

2) (华中科技大学数学与统计学院, 武汉 430074)

3) (华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 武汉 430074)

(2016年4月27日收到; 2016年7月5日收到修改稿)

本文采用格子 Boltzmann 方法模拟了液滴在分叉微通道中的迁移过程, 主要分析壁面润湿性、毛细数、出口流量比对液滴动力学行为的影响机制. 结果表明: 当毛细数足够大时, 液滴在支通道的迁移行为与壁面润湿性密切相关, 对疏水壁面, 液滴在主通道发生破裂生成两个子液滴, 子液滴完全悬浮在支通道中并流向出口. 而对亲水壁面, 液滴首先同样破裂成两个子液滴, 不同于疏水情形, 子液滴紧接着发生二次破裂, 导致部分二次子液滴黏附在固体表面上, 另一部分流向出口; 当毛细数足够小时, 液滴则滞留在分叉口处, 不发生破裂. 最后, 还发现通过调节出口流量比可以使液滴发生非对称破裂或者不破裂完全从流速较大的支通道流出.

关键词: 格子 Boltzmann 方法, 液滴, 微通道

PACS: 47.11.Qr, 47.55.db, 47.55.df

DOI: 10.7498/aps.65.204701

1 引言

液滴在分叉微通道内流动问题常见于强化采油和微流体设备等实际工程应用^[1,2]中. 例如, 在强化采油领域, 油藏中的原油不是连续分布的, 而是分散成许多非连续的微小液滴. 液滴在多孔介质中迁移会碰到多个孔隙与喉道相连接的分叉通道结构. 此外, 分叉微通道也是一种重要的微流控技术, 人们通过控制液滴破裂形态来实现对液滴尺寸的操控. 因此, 开展分叉微通道内液滴动态行为的研究具有重要的现实意义.

近几十年来, 许多学者对分叉微通道内液滴流动问题进行了数值与实验研究. Manga^[3]采用边界积分方法研究了液滴在分叉微通道内的迁移变形过程, 主要考察了毛细数、液滴尺寸及液滴与周围流体的黏性比对液滴流动的影响. 结果发

现增大毛细数与液滴初始尺寸或者减小黏性比可以增加液滴进入流速较大支通道的可能性. 此外, Manga^[3]还研究了两个液滴的相互作用对液滴通过分支通道行为的影响, 结果表明液滴的相互作用有利于更多的液滴进入流速较低的支通道. 在 Manga 的研究中, 液滴的最大变形假设不超过微通道的直径, 因此未观察到液滴破裂的情形. Link 等^[4]实验比较了两种控制生成子液滴尺寸的方法: 采用 T 形微管道 (分叉角为 180°) 和在微通道中排列单个或者多个孤立的障碍物. 实验结果表明利用 T 形微通道可以精确地控制子液滴的尺寸分布, 但其缺点是占用空间太多; 而采用设置障碍物的方法, 子液滴尺寸对障碍物的陈列位置及进来液滴的分布比较敏感, 适用于只追求效率而不追求精度的实际应用. 由于 T 形微通道的设计简单及其精确控制子液滴尺寸的优点, 吸引着许多学者对 T 形微通道内液滴动力学进行更加细致与深入的

* 国家自然科学基金 (批准号: 11602075, 51576079, 11272132) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: shibc@hust.edu.cn

研究 [5-8]. Carlson 等 [9] 采用相场方法模拟了三维液滴在分叉微通道中的动态过程. 数值结果显示了液滴的两种流动特征: 破裂与不破裂. 对于前者他们发现液滴在中心点处发生对称破裂, 生成了两个完全对称的子液滴, 并将液滴的破裂机制归因于 Rayleigh-Plateau 不稳定性. 对于后者的非破裂情形, 液滴整个进入微管道的一个分支通道. 此外, 他们还发现液滴破裂与不破裂间的转化曲线依赖于初始的液滴体积与毛细数的大小. Woolfenden 和 Blyth [10] 以血管中药物胶囊运输为研究背景, 通过边界积分方法研究了弹黏性液滴在带有一个分支的微管道中迁移变形过程. 研究表明液滴的变形动态强烈地依赖于支通道的分叉角度. 此外, 他们发现液滴的变形特征与液滴外层薄膜的刚性、周围流体黏性相关. 增加薄膜的刚性或者减小液滴周围流体的黏性可以减弱液滴的变形. 最近, 丛振霞等 [11] 对 Y 形分叉微通道内气泡的破裂动力学进行了实验研究, 观察到气泡在分叉口的三种不同流型: 无间隙对称破裂、有间隙对称破裂和不破裂. 进一步, 他们还考察了气泡破裂的临界毛细数与气泡初始长度、流体黏度之间的关系, 发现临界毛细数随着流体黏性的增大而增大, 而减小气泡的初始长度可以降低气泡破裂所需的最小毛细数.

纵上所述, 对分叉微通道内液滴的流动迁移过程的研究虽然已取得了一些进展, 但相关研究还不够深入 (比如已有研究主要考虑液滴迁移变形过程, 缺乏对液滴破裂及其机理的研究. 另外, 润湿性及出口流量对液滴动态行为的影响在文献中也鲜有报道). 鉴于此, 本文将基于我们最近提出的多相流格子 Boltzmann (LB) 模型 [12], 对分叉微通道内液滴流动问题开展详细的研究, 重点分析不同物理参数: 润湿性、毛细数、出口流量对液滴界面动力学行为的影响.

2 数值方法

2.1 格子 Boltzmann 模型

基于气体动理学理论的 LB 方法是近几十年来发展起来的一种介观数值方法 [13-15], 在模拟复杂多相流动方面相比传统数值方法有一些独特的优势, 比如可以在介观尺度下直观地描述流体间及流固间的微观相互作用、自动追踪流体相界面、易于处理复杂物理边界条件等 [13,14]. 目前, 从流体间微观相互作用力的不同物理背景出发, 已经提出多

种类的多相流 LB 模型, 包括颜色模型、伪势模型、自由能模型 [13]. 最近, 我们基于相场理论发展一类界面求解精度高且数值稳定性更好的多相流 LB 模型 [12], 并应用于高雷诺数 Rayleigh-Taylor 不稳定性问题的研究 [16], 成功地再现了演化后期相界面的产生、破碎、卷吸等复杂界面现象. 另外, 进一步以此模型为基础推广到轴对称多相流情形 [17] 和三相流情形 [18]. 在本文模型中, 利用两个分布函数 f_i 和 g_i 来求解流体界面和速度场, 其对应的演化方程分别为 [12]

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \delta_t F_i(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \delta_t G_i(\mathbf{x}, t), \quad (2)$$

其中, $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ 和 $g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ 为平衡态分布函数, 其具体形式如下 [12]:

$$f_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \phi + (\omega_i - 1)\eta\mu, & i = 0, \\ \omega_i\eta\mu + \omega_i \frac{\mathbf{c}_i \cdot \phi \mathbf{u}}{c_s^2}, & i \neq 0, \end{cases} \quad (3)$$

$$g_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \frac{p}{c_s^2}(\omega_i - 1) + \rho s_i(\mathbf{u}), & i = 0, \\ \frac{p}{c_s^2}\omega_i + \rho s_i(\mathbf{u}), & i \neq 0, \end{cases} \quad (4)$$

其中, ϕ 是序参数, μ 是化学势, η 为可调节参数, ρ 是密度, p 是流体动力学压力, \mathbf{u} 是流体速度, ω_i 为权重系数, 且 $\omega_0 = 4/9$, $\omega_{1-4} = 1/9$, $\omega_{5-8} = 1/36$, $c_s^2 = c^2/3$, \mathbf{c}_i 为离散速度

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} (0, 0)c, & i = 0, \\ (\cos[(i-1)\pi/2], \sin[(i-1)\pi/2])c, & i = 1-4, \\ \sqrt{2}(\cos[(i-5)\pi/2 + \pi/4], \sin[(i-5)\pi/2 + \pi/4])c, & i = 5-8, \end{cases} \quad (5)$$

其中, $c = \delta_x/\delta_t$, δ_x 和 δ_t 分别为单位格子大小和时间步长. 在本文的模拟中, 我们假定 $c = \delta_x = \delta_t = 1$.

$s_i(\mathbf{u})$ 的具体表达式为

$$s_i(\mathbf{u}) = \omega_i \left[\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right]. \quad (6)$$

根据相场理论, 范德瓦耳斯 (van der Waals) 流体的化学势 μ 可表示为^[19]

$$\mu = 4\beta\phi(\phi - 1)(\phi + 1) - k\nabla^2\phi, \quad (7)$$

其中, 参数 k, β 与界面厚度 (D)、表面张力 (σ) 相关^[19],

$$D = \sqrt{\frac{2k}{\beta}}, \quad \sigma = \frac{4}{3}\sqrt{2k\beta}. \quad (8)$$

为了恢复正确的宏观方程, 源项分布函数 $F_i(\mathbf{x}, t)$ 和外力项分布函数 $G_i(\mathbf{x}, t)$ 分别定义为^[12]

$$F_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau_f}\right) \frac{\omega_i \mathbf{c}_i \cdot \partial_t \phi \mathbf{u}}{c_s^2}, \quad (9)$$

$$G_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau_g}\right) \frac{(\mathbf{c}_i - \mathbf{u})}{c_s^2} \cdot [(\Gamma_i(\mathbf{u}) - \Gamma_i(0))\nabla(\rho c_s^2) + (\mathbf{F}_s + \mathbf{F}_a)\Gamma_i(\mathbf{u})], \quad (10)$$

其中, $\Gamma_i(\mathbf{u}) = \omega_i + s_i(\mathbf{u})$, $\mathbf{F}_a = 0.5(\rho_l - \rho_g) \times M \nabla^2 \mu \mathbf{u}$, $\mathbf{F}_s = \mu \nabla \phi$.

在本模型中, 宏观量的计算式如下^[12]:

$$\phi = \sum_i f_i, \quad (11)$$

$$\mathbf{u} = \frac{\sum_i \mathbf{c}_i g_i + 0.5\delta_t \mathbf{F}_s}{\rho - 0.25\delta_t(\rho_l - \rho_g)M\nabla^2\mu}, \quad (12)$$

$$p = \frac{c_s^2}{(1 - \omega_0)} \left[\sum_{i \neq 0} g_i + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho s_0(\mathbf{u}) \right], \quad (13)$$

流体密度 (ρ) 由序参数 (ϕ) 的线性插值函数给出,

$$\rho = \rho_g + \frac{\phi + 1}{2}(\rho_l - \rho_g), \quad (14)$$

其中 ρ_l 和 ρ_g 分别为液体和气体的密度. 在本文的研究中, 液体和气体的密度设定为 $\rho_l = 3.0$, $\rho_g = 1.0$.

通过 Chapman-Enskog 分析, 可以发现本模型可以恢复到正确的 Cahn-Hilliard 方程和 Navier-Stokes 方程,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \phi \mathbf{u} = \nabla \cdot M(\nabla \mu), \quad (15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (16a)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla \mathbf{p} + \nabla \cdot [\nu \rho (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{F}_s, \quad (16b)$$

且迁移系数 (M)、黏性系数 (ν) 与松弛时间的关系为

$$M = \eta c_s^2 (\tau_f - 0.5) \delta_t, \quad (17)$$

$$\nu = c_s^2 (\tau_g - 0.5) \delta_t. \quad (18)$$

2.2 润湿性边界

润湿性反映了流体与固体壁面接触时相互黏附作用的强度, 也是影响液滴在复杂微管内动态行为的重要参数. 本文将考察壁面润湿性对液滴穿过分叉微管道内的动态影响, 作为预备知识, 需要给出与上述基于相场理论的多相流 LB 模型相匹配的润湿性边界条件. 根据自由能理论, 描述流体与固体表面相互作用的自由能函数可表示为与密度

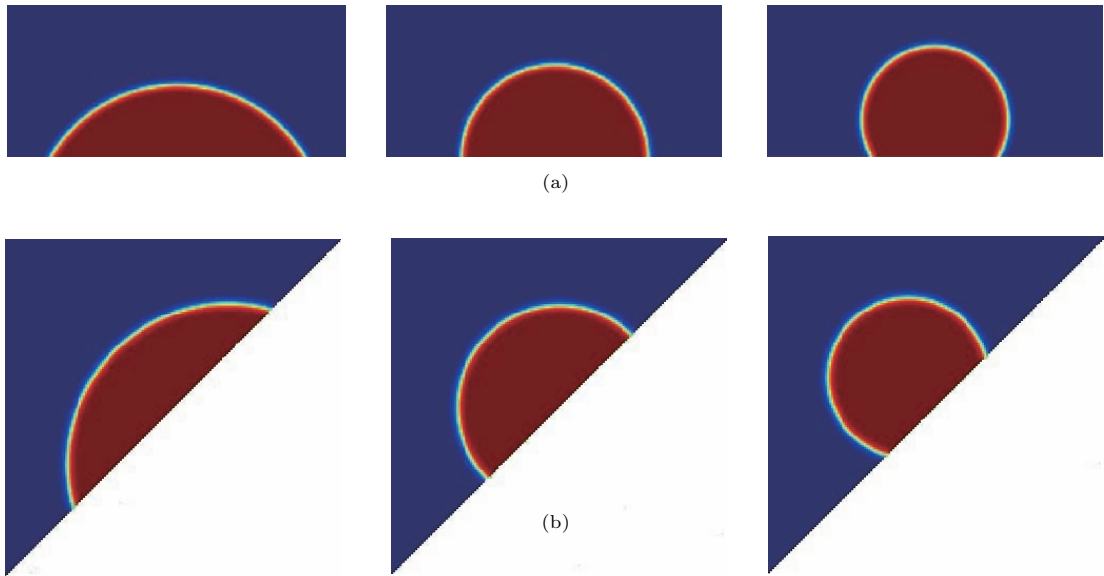


图1 液滴在不同润湿性的 (a) 平板壁面和 (b) 倾斜壁面上铺展的稳态形状, 从左到右的接触角为 $60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$

Fig. 1. The steady shapes of the droplet on the flat and inclined wall with different wettability, the contact angles are $60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$ from left pattern to the right.

相关的幂级数形式^[20]: 保留幂级数的一阶项, 可以得到线性润湿性边界条件; 保留幂级数的三阶项, 则可以得到三次自由能形式的润湿性边界条件,

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi|_S = -\frac{3\sigma}{4k} \cos \theta (1 - \phi^2), \quad (19)$$

其中, \mathbf{n} 是垂直于壁面指向流场内部的单位法向量. (19) 式可以克服线性润湿性边界条件的一些缺点, 如在固体表形成一层非物理液膜和模拟大密度比流动时, 引起数值方法不稳定^[21,22]. 本文将三次自由能形式的润湿性边界条件运用于上述 LB 模型中. 图 1 (a) 列出了液滴在不同润湿性壁面上铺展达到稳态时的形状. 从图 1 (a) 中看出, 当接触角小于 90° 时, 液滴在壁面铺展开来; 而当接触角等于 90° , 液滴在壁面形成半球状; 而当接触角大于 90° , 液滴则最大程度地拱起成球状. 液滴的上述行为与预期结果是相一致的. 进一步, 我们计算了模拟所得的接触角, 其大小分别为 58.4° , 88.5° , 118.3° , 与对应的理论值 (60° , 90° , 120°) 的最大相对误差小于 2.7%. 此外, 我们还模拟了液滴对倾斜壁面的润湿过程并将稳态的液滴形状列在图 1 (b), 从图 1 (b) 中可以看出, LB 模型结合三次自由能形式的润湿性边界条件也能准确地刻画液滴对倾斜壁面的润湿作用. 数值计算所得接触角为 62.0° , 91.5° , 120.5° , 与对应的理论值的最大相对误差小于 3.4%.

3 物理问题描述及边界条件处理格式

本文研究的液滴在分叉微通道内运动问题的物理模型如图 2 所示. 微通道的入口长度和宽度分别记为 L_3 和 W_1 , 下游分支通道的宽度为 W_2 , 其壁面长度分别为 L_2 和 L_4 , 出口的宽度为 W_3 , 分叉点与管道进口处的距离为 L_1 , 两分支管道的夹角称为分叉角度, 记为 2α . 液滴初始时刻放置于微通道的中心处. 在微管道的进口与两出口处, 我们均强加一个泊肃叶 (Poiseuille) 流动的抛物线速度并且进口的最大速度记为 U_1 , 上下出口的最大速度分别为 U_2 和 U_3 . 进口与上下两出口的流量分别记为 Q_1 , Q_2 与 Q_3 , 这里我们考虑无流量的边界条件, 即 $Q_1 = Q_2 + Q_3$. 在速度的驱动下, 液滴将会向右迁移, 经过一定时间的演化, 撞击在分叉固壁上并发生变形与破碎. 在模拟中, L_1 与 L_2 分别设定为 180 与 140 格子单位, $W_1 = W_3 = 80$, $W_2 = 70$, $\alpha = 45^\circ$, $L_5 = 50$. 通过几何计算, L_3 , L_4 与 L_6 可以分别通过如下式子给出:

$$L_3 = \frac{0.5W_1 + L_1 \tan \alpha - W_2 \sqrt{\tan^2 \alpha + 1}}{\tan \alpha}, \quad (20)$$

$$L_4 = \frac{W_3 + L_2 \sin \alpha - 0.5W_1}{\sin \alpha}, \quad (21)$$

与

$$L_6 = L_1 + L_2 \cos \alpha + L_5 - L_3 - L_4 \cos \alpha. \quad (22)$$

液滴的半径设定为 $R = 25$, 初始时刻液滴中心与管道进口的距离为 60, 从而序参数 (ϕ) 的初始分布为

$$\phi(x, y) = \tanh \left(2 \frac{R - \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}}{D} \right), \quad (23)$$

其中界面厚度 $D = 4$, 液滴中心位置 $(x_c, y_c) = (60, 178)$. 根据 (23) 式可知, 序参数 (ϕ) 在液相区和气相区取值分别为 1 和 -1, 在相界面处从 1 扩散到 -1, $\phi = 0$ 定义为界面的位置. 进口处的最大速度 U_1 固定为 0.05.

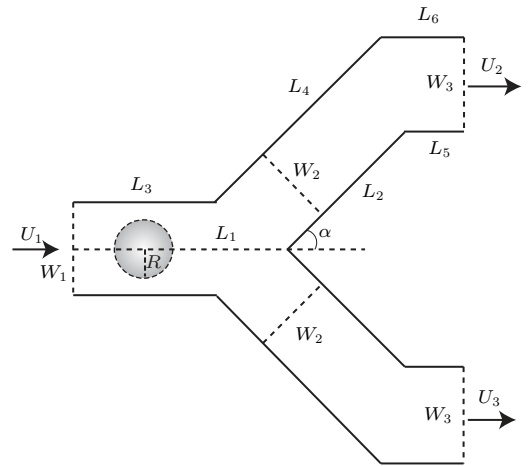


图 2 分叉微管道中液滴运动问题的示意图

Fig. 2. The schematic of the droplet movement in the bifurcating micro-channel.

为了演化计算, 需要对模型中分布函数 f_i 与 g_i 采用合适的边界条件的实现格式. Zhang 等^[23] 针对浓度/温度对流扩散方程设计一类一般浓度边界的半反弹处理格式. 本文将这类设计思想应用于 Cahn-Hillard 方程的 LB 模型中. 边界条件的具体实现格式如下: 进口处为速度边界条件, 对分布函数 f_i 应用如下的边界处理格式,

$$f_i(\mathbf{x}_f, t + \delta_t) = -f_i'(\mathbf{x}_f, t) + 2\omega_i \eta \mu, \quad (24)$$

而对于求解流场的分布函数 g_i , 本文采用 Ladd^[24] 提出的运动边界的反弹格式,

$$g_i(\mathbf{x}_f, t + \delta_t) = g_i'(\mathbf{x}_f, t) - 2\omega_i \rho \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_w}{c_s^2}, \quad (25)$$

其中, \mathbf{x}_f 为流体点, \bar{i} 为 i 的反方向, f'_i, g'_i 为碰撞后的分布函数, \mathbf{u}_w 为微通道进口处的速度. 通道固体壁面处对 f_i 应用 (24) 式, 而对 g_i 采用无滑移反弹边界格式. 两出口边界均为速度边界条件, 本文采用 Guo 等 [25] 提出的非平衡外推格式. 在研究中, 将考察毛细数 (Ca) 对液滴在分叉微通道内运动特征的影响, 其定义为

$$Ca = \frac{\rho_1 \nu U_1}{\sigma}, \quad (26)$$

其中, $\nu = 0.1$. 进一步, 我们定义出口两分支的流量比

$$Q = \frac{Q_3}{Q_2} = \frac{2U_3W_3/3}{2U_2W_3/3} = \frac{U_3}{U_2}. \quad (27)$$

由于微通道两分支关于中心轴对称, 不失一般性, 假设 Q_3 不小于 Q_2 . R/U_1 设定为特征时间, 液滴的运动时间 t 则表示为由 R/U_1 标准化的无量纲时间.

4 数值模拟与分析

4.1 润湿性的影响

壁面润湿性反映流体与壁面黏附作用的强度, 显著影响着流体在固体接触时的流动特征. 由于液滴在运动过程中不会与管道最外层固壁接触, 这里将最外层固壁的接触角设定为 150° , 而仅考虑内层分叉管道的润湿特性对液滴动力学行为的影响. 在本小节的模拟中, 毛细数固定为 0.75, 流量比设定为 1.0. 首先研究液滴在疏水壁面条件下的动态, 图 3 (a) 给出了壁面润湿接触角为 150° 时液滴在分叉微通道的运动过程. 从图中看出, 液滴在进口速度的驱动下往前运动并且带动周围气体流动, 从而与气体之间相互剪切而变形. 不同于平直通道中液滴子弹式的运动形态, 由于液滴前方气流的挤压, 液滴将变得前凹后凸. 当液滴运动到支通道入口处, 由于受到支通道两股相等气流的作用, 液滴停留在分叉口处并沿着支通道方向被逐渐拉长, 从而中轴线的液膜厚度变得越来越小, 液滴最终发生对称破裂, 生成两个尺寸相等的子液滴. 由于壁面的强疏水特性, 液滴会脱离壁面在支通道内往前运动并因表面张力的作用而变得圆润. 作为对比, 我们模拟了液滴在壁面润湿性为 45° (亲水壁面) 的分叉微通道内运动的情形并将结果示在图 3 (b). 从图中看出, 液滴未与支通道壁面接触前, 其动态行为

与疏水情形的结果是相同的, 而与支通道壁面相接触后, 液滴表现出与疏水壁面情形显著不同的动力学行为. 由于壁面的吸附作用, 液滴会黏附在壁面前进并且被逐渐拉伸, 管道分叉处的液膜变得越来越薄, 最终发生对称破裂, 生成了两个比疏水情形更加修长的子液滴. 生成的子液滴在各自支管道继续运动, 在壁面的黏附与支通道内气流的共同作用下, 液滴底部与上层形成了液膜, 其厚度随着时间演化逐渐变小, 并最终发生了二次破裂: 部分液滴黏附在壁面上不能被驱出, 另一个二次子液滴悬浮在支管道中被驱出. 注意到, Kang 等 [26] 研究了黏附于垂直通道的液滴在重力作用下下降落的问题, 其数值结果表明壁面润湿性对液滴的动态行为有很大的影响: 液滴会脱离疏水壁面完全悬浮在管道内, 而易于黏附在亲水壁面上发生部分破裂. 从我们的数值模拟结果看, 液滴在支通道的运动形态与 Kang 等 [26] 的结果是相符的. 我们还进一步统计了不同壁面润湿性下生成子液滴的体积, 并将结果示在图 4. 从图中看出, 生成子液滴的体积随着壁面接触角的增加而增加, 通过对数据进行拟合可以发现, 子液滴的体积与壁面接触角呈现线性递增关系.

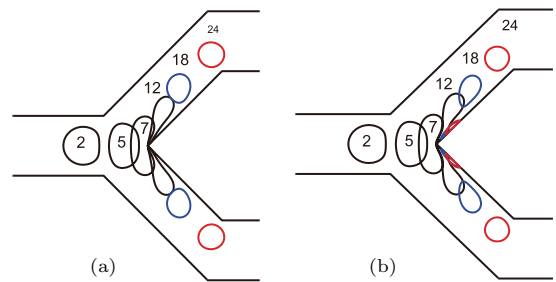


图 3 (网刊彩色) 润湿性对液滴在分叉微通道内动态过程的影响 (a) $\theta = 150^\circ$; (b) $\theta = 45^\circ$

Fig. 3. (color online) The effect of wettability on the droplet dynamics in the bifurcating micro-channel: (a) $\theta = 150^\circ$, (b) $\theta = 45^\circ$.

从上述分析可以看出, 壁面润湿性显著影响着液滴在支通道内迁移破裂的动态行为: 对亲水壁面情形, 部分液滴会黏附在支通道壁面上不被驱出; 而对于疏水壁面, 液滴则脱离壁面完全被驱出. 此外, 生成子液滴的尺寸也会随着接触角的增加而增大. 因此, 壁面的强疏水特性是子液滴生成的有利因素, 在接下来的研究中, 我们将壁面接触角设定为 150° .

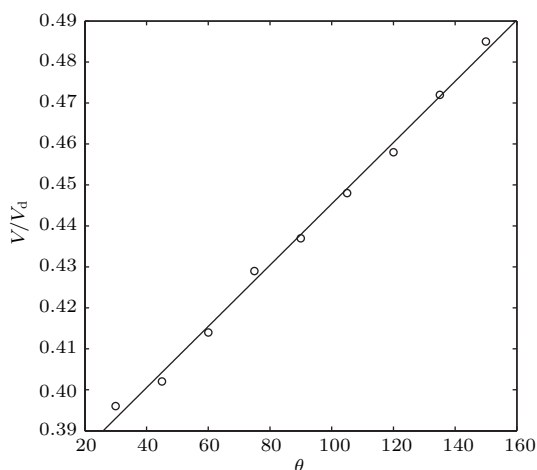


图4 润湿性对生成子液滴体积的影响, V_d 表示液滴的原始体积, 实线是线性拟合的结果

Fig. 4. The effect of wettability on the daughter droplet volume, V_d represents the volume of the initial droplet, and the solid line is the fitted result.

4.2 毛细数的影响

毛细数表征黏性力与表面张力的相对大小, 对于液滴在复杂微管道内的迁移问题, 毛细数 Ca 是一个非常重要的影响参数. 在本文模拟中, 通过调节表面张力 σ 来改变毛细数的值, 并且接触角 θ 和流量比 Q 分别固定为 150° 和 1.0.

图5给出了液滴在三种典型毛细数下的迁移过程. 对于低毛细数 ($Ca = 0.15$) 的情形, 液滴首先以子弹头的形式向右迁移并带动周围气体的流动. 由于支通道的存在, 液滴在靠近分叉口过程中形成了反向气流, 压强也逐渐增大, 从而导致液滴前端发生凹陷形成了前凹后凸的形状. 液滴接着沿着支通道方向逐渐拉伸, 而后往回收缩, 形成类似椭圆的稳定形状. 可以发现在整个演化过程中, 液滴的变形幅度较小, 未观察到液滴破裂的现象. 这是由于毛细数较小, 表面张力相比黏性力更占统治地位, 使液滴不易发生变形. 对于较大毛细数 ($Ca = 0.5$) 的情形, 液滴在主通道内往前运动, 到达分叉口后沿着支通道方向逐渐变长, 然后在分叉点发生断裂, 形成了两个对称的子液滴. 子液滴在支通道内收缩并继续往前运动. 不同于低毛细数情形, 我们可以观察到液滴发生了较大变形、破裂的现象. 这是由于毛细数增大时, 表面张力减小, 液滴保持原来形状的能力减弱. 当继续增大毛细数到 $Ca = 3.0$, 液滴也可以发生对称破裂, 形成了两个大小相同的子液滴. 但由于表面张力作用更加

小, 生成的子液滴变得非常修长, 类似于液膜形状. 图6给出了生成子液滴体积与毛细数的关系曲线, 其中子液滴体积已经由原始液滴体积进行无量纲化. 从图6可以看出当毛细数小于0.03时, 生成子液滴的体积为零, 这表明液滴停留在主通道内不能发生破裂; 而增大毛细数时, 生成子液滴的体积近乎接近于0.5, 这表明液滴发生了对称破裂, 生成了两个完全相同的子液滴.

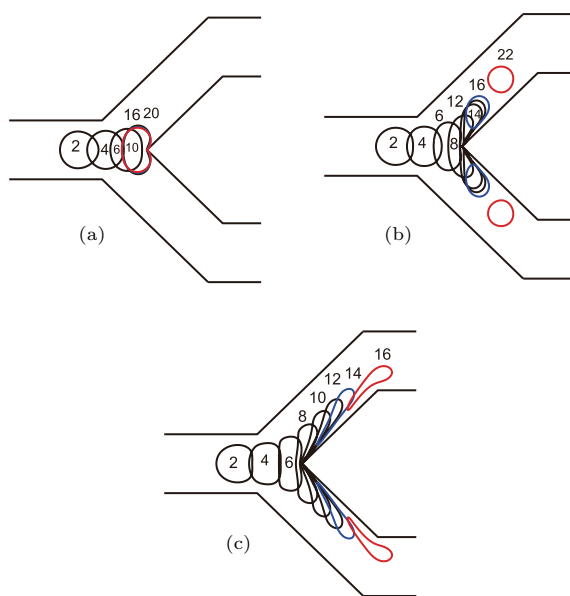


图5 (网刊彩色) 毛细数对液滴穿过分叉微通道的动态过程的影响 (a) $Ca = 0.15$; (b) $Ca = 0.5$; (c) $Ca = 3.0$

Fig. 5. (color online) The effect of capillary number on the droplet dynamics in the bifurcating micro-channel: (a) $Ca = 0.15$; (b) $Ca = 0.5$; (c) $Ca = 3.0$.

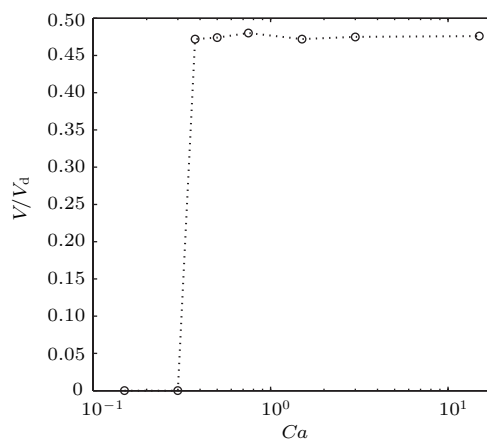


图6 毛细数对生成子液滴体积的影响, V_d 表示液滴的原始体积

Fig. 6. The effect of capillary number on the daughter droplet volume, V_d represents the volume of the initial droplet.

4.3 流量比的影响

复杂微通道通常含有多个通道出口, 出口流量的大小也是影响液滴运动过程的重要参数. 本节通过改变出口处的速度来考察流量比对液滴变形及破碎的影响. 由于两分支通道关于微管道中轴线对称, 不失一般性, 下侧分支通道的流量假设不小于上侧分支通道的流量. 为了便于对比, 我们首先考虑了与图 5(b) 相同的毛细数 $Ca = 0.5$, 但流量比不同的情形.

图 7(a) 给出了在流量比 $Q = 1.2$ 时, 液滴在分叉微通道内的迁移过程. 首先, 液滴在进口速度的驱动下向右运动, 由于下侧分支通道的流速较大, 液滴逐渐朝向下侧分支通道, 不再关于中轴线对称. 经过一定时间的演化, 液滴碰到分叉内壁而滞留, 其两端不停地向两支通道伸展, 在伸展的过程中, 进入下侧分支通道的体积大于另一侧, 形成了非对称的弯月状. 随着时间的推移, 分叉处液膜的厚度也变得越来越大, 并最终发生非对称性断裂, 形成两个尺寸不同的子液滴. 进一步地, 我们增大下侧分支通道的流量至 $Q = 2.0$. 图 7(b) 给出了 $Q = 2.0$ 时液滴在分叉微通道内的动态过程. 从图中可以发现液滴初始以前凹后凸的形式向右迁移并伴随着向下侧凸起, 运动到分叉口处时完全朝向下侧分支通道, 液滴由最初的圆形经历变形成椭圆状 (见 $t = 5$ 时刻). 紧接着, 液滴继续往右迁移, 碰到分叉固体壁面而滞留. 在支通道出口流速的驱动下, 液滴沿着支通道方向伸长, 进入下侧分支通道的液体体积远大于上侧分支通道, 并最终在界面张力的作用下, 将整个液滴拖拽到阻力较小的下侧分支中, 最终沿着支通道流向出口. 对比图 5(b) 的结

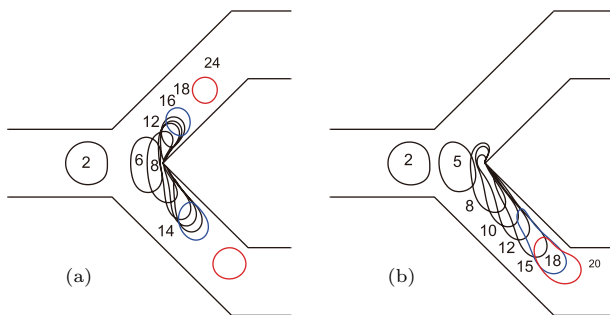


图 7 (网刊彩色) 流量比 (Q) 对液滴穿过分叉微通道的动态过程的影响 (a) $Q = 1.2$; (b) $Q = 2.0$

Fig. 7. (color online) The effect of flux ratio on the droplet dynamics in the bifurcating micro-channel: (a) $Q = 1.2$; (b) $Q = 2.0$.

果, 我们可以发现当两支通道的流量相等时, 液滴发生对称破裂, 从而形成两个完全相同的子液滴; 当一侧支通道的流量大于另一侧, 液滴则发生非对称破裂, 形成两个尺寸不同的子液滴; 当继续增大这一侧分支通道的流量, 液滴将不再发生破裂, 完全进入流速更大的支通道.

图 8(a) 给出了不同流量比下支通道中生成子液滴的体积. 从图中可以看出, 当流量比为 1.0 时, 上下两支通道内产生了两个相同的子液滴, 其体积与液滴原始体积之比均为 0.5; 而当流量比大于 1.0 而小于 1.6 时, 下支通道内获得子液滴的体积始终大于另一侧, 并且其体积随着流量比的增加而增加, 而另一侧则随之减小. 这是由于下支通道的流速相对较高, 受到流体阻力较小, 液滴在变形过程中更多部分进入下支通道, 进而发生破裂, 生成了尺寸更大的子液滴; 而当流量比大于 1.6 时, 上支通道内的液体体积为零, 而下支通道内获得液滴的体积接近于 1.0, 这表明液滴不再发生破裂, 而是完全地流入了下支通道. 图 8(b) 给出了上下分支通道内

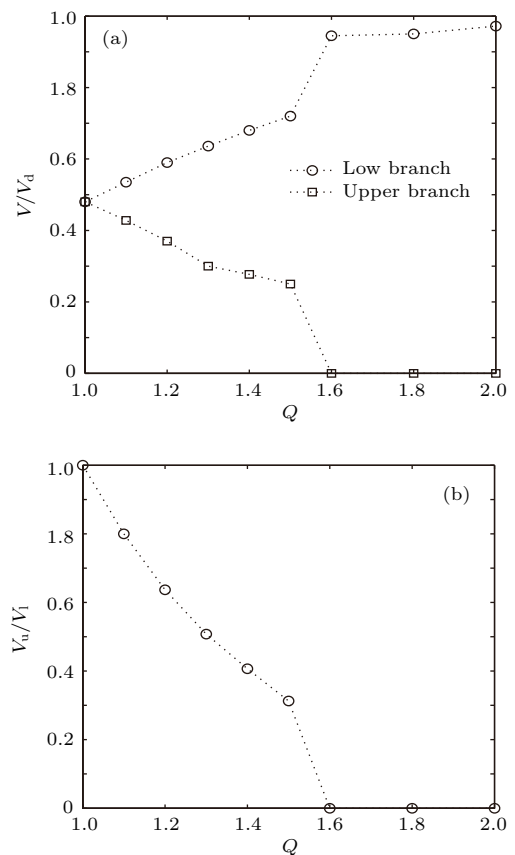


图 8 流量比 (Q) 对 (a) 上下分支通道中生成子液滴体积及 (b) 体积比率的影响

Fig. 8. The effect of flux ratio on (a) the daughter droplet volumes in upper and lower branched channels and (b) volume ratio.

子液滴体积比与流量比(Q)之间的关系. 从图中可以清楚地看出, 子液滴体积比随着 Q 的增加而减小, 当 Q 增大至1.6时, 子液滴体积比为零, 这表明液滴完全进入了下支通道.

基于上述分析可以发现, 该问题存在一个临界流量比, 即在一定的流量比下, 整个液滴不发生破裂而完全地进入下分支通道, 而当流量比低于这个临界值时, 液滴则发生破裂, 从而在上下分支通道中均产生了子液滴. 这里我们定义这个临界值为液滴不破裂进入一侧分支通道的临界流量比, 记为 Q^c . 图9给出了毛细数(Ca)及流量比(Q)对液滴的动态行为的影响. 从图中可以看出, 当毛细数较小($Ca \leq 0.3$)时, 液滴将不会发生破裂: $Q = 1.0$ 时, 液滴停留在主通道内; 而 $Q \geq 1.0$ 时, 液滴进入流量较大的支通道. 这是由于低毛细数下, 表面张力相比黏性力更加占统治地位, 液滴不易发生变形与破裂. 当毛细数增大时, 液滴将不会滞留在主通道内, 其动态行为取决于流量比的大小: 当流量比小于临界值时, 液滴将发生破裂形成子液滴; 而当流量比大于临界值, 液滴将不会破裂, 而是从流量较大的支通道流向出口. 进一步, 从图中可以发现临界流量比 Q^c 随着毛细数的增大而增大, 也就是说, 对于毛细数较大的情形, 需要更大的出口流速, 液滴才能完全的流入这一支通道中.

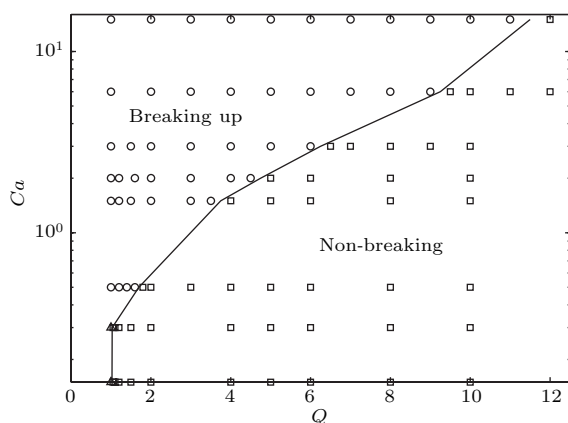


图9 流量比及毛细数对液滴行为的影响 圆圈表示液滴破裂情形, 正方形表示液滴不破裂进入下支通道情形, 三角形表示液滴不破裂停留在主通道情形, 实线表示临界流量比与毛细数的关系

Fig. 9. The effects of flux ratio and capillary number on the droplet dynamics, circle represents the breakup case of the droplet, square represents the case that the droplet does not break up and enter into a branched channel, triangle represents the case that the droplet does not break up and stays in main channel, the solid line represents the relationship between the critical flux ratio and capillary number.

5 结 论

在本文中, 将三次自由能形式的润湿性边界条件耦合于基于相场理论的多相流LB模型中, 并通过模拟液滴在不同润湿性的平板或者倾斜壁面上的铺展问题, 发现本文模型可以正确地刻画液滴与壁面的相互作用. 基于上述模型, 对液滴在分叉微通道中迁移问题开展了详细研究, 重点分析了润湿性、毛细数与出口流量比对液滴流动特性的影响. 得到以下主要结论.

1) 润湿性显著影响着液滴在支通道的破裂动态: 对疏水壁面, 液滴破裂生成两个子液滴, 子液滴随后以悬浮形式流向支通道的出口; 而对亲水壁面, 液滴则发生了二次破裂, 导致部分二次子液滴黏附在固壁上不能被驱走, 另一部分则流向出口. 另外, 发现生成子液滴的尺寸随着接触角的增大而增大, 因而超疏水壁面是子液滴形成的有利因素.

2) 毛细数影响着液滴在分叉微管道中的动态行为: 当毛细数较小时, 液滴滞留在分叉障碍物的前端, 未发现液滴破裂情形; 当毛细数较大时, 液滴破裂成两个对称的子液滴, 并且发现子液滴的伸长长度随着毛细数的增大而增大.

3) 出口流量比控制子液滴的尺寸: 当出口流量比为1时, 液滴发生对称破裂, 形成两个相同的子液滴; 当流量比大于1时, 液滴发生非对称破裂, 形成两个尺寸不同的子液滴, 并且尺寸比随着流量比的增大而增大; 而当流量比足够大时, 液滴则不发生破裂, 完全从流速较大的支通道流出. 最后, 还发现临界流量比与毛细数呈现递增关系.

参考文献

- [1] Teh S Y, Lin R, Hung L H, Lee A P 2008 *Lab on Chip* **8** 198
- [2] Seemann R, Brinkmann M, Pfohl T, Herminghaus S 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 016601
- [3] Manga M 1996 *J. Fluid Mech.* **315** 105
- [4] Link D, Anna S L, Weitz D, Stone H A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 054503
- [5] Guillot P, Colin A 2005 *Phys. Rev. E* **72** 066301
- [6] Garstecki P, Fuerstman M J, Stone H A, Whitesides G M 2006 *Lab on Chip* **6** 437
- [7] De Menech M, Garstecki P, Jousse F, Stone H A 2008 *J. Fluid Mech.* **595** 141
- [8] Christopher G F, Noharuddin N N, Taylor J A, Anna S L 2008 *Phys. Rev. E* **78** 036317

- [9] Carlson A, Do-Quang M, Amberg G 2010 *Int. J. Multiphase Flow* **36** 397
- [10] Woolfenden H, Blyth M 2011 *J. Fluid Mech.* **669** 3
- [11] Cong Z X, Zhu C Y, Fu T T, Ma Y G 2015 *Sci. China: Chem.* **45** 34 (in Chinese) [丛振霞, 朱春英, 付涛涛, 马友光 2015 中国科学: 化学 **45** 34]
- [12] Liang H, Shi B C, Guo Z L, Chai Z H 2014 *Phys. Rev. E* **89** 053320
- [13] Guo Z L, Shu C 2013 *Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering* (Singapore: World Scientific) pp239–285
- [14] Xu A G, Zhang G C, Li Y J, Li H 2014 *Progress In Physics* **34** 136 (in Chinese) [许爱国, 张广财, 李英骏, 李华 2014 物理学进展 **34** 136]
- [15] Chai Z H, Shi B C, Guo Z L 2016 *J. Sci. Comput.* **69** 355
- [16] Liang H, Li Q X, Shi B C, Chai Z H 2016 *Phys. Rev. E* **93** 033113
- [17] Liang H, Chai Z H, Shi B C, Guo Z L, Zhang T 2014 *Phys. Rev. E* **90** 063311
- [18] Liang H, Shi B C, Chai Z H 2016 *Phys. Rev. E* **93** 013308
- [19] Rowlinson J S, Widom B 1982 *Molecular Theory of Capillarity* (Oxford: Clarendon)
- [20] De Gennes P G 1985 *Rev. Mod. Phys.* **57** 827
- [21] Lee T, Liu L 2010 *J. Comput. Phys.* **229** 8045
- [22] Huang J J, Huang H, Wang X 2015 *Int. J. Numer. Methods Fluids* **77** 123
- [23] Zhang T, Shi B C, Guo Z L, Chai Z H, Lu J H 2012 *Phys. Rev. E* **85** 016701
- [24] Ladd A J 1994 *J. Fluid Mech.* **271** 285
- [25] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C 2002 *Chin. Phys.* **11** 366
- [26] Kang Q, Zhang D, Chen S 2002 *Phys. Fluids* **14** 3203

Lattice Boltzmann simulation of droplet dynamics in a bifurcating micro-channel*

Liang Hong¹⁾ Chai Zhen-Hua²⁾³⁾ Shi Bao-Chang^{2)3)†}

1) (Department of Physics, Hanzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, China)

2) (School of Mathematics and Statistics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

3) (State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

(Received 27 April 2016; revised manuscript received 5 July 2016)

Abstract

The droplet dynamic in a bifurcating micro-channel, as one of the basic multiphase problems, is frequently encountered in the fields of science and engineering. Due to its great relevance to many important applications and also its fascinating physical phenomena, it has attracted the increasing attention in the past decades. However, this problem is still not fully understood since it is very complicated: the droplet behaviors may be influenced by several physical factors. To clearly elucidate the physics governing droplet dynamics in a bifurcating micro-channel, a detailed numerical study on this problem is conducted. The present investigation is based on our recently developed phase-field-based lattice Boltzmann multiphase model, in which one distribution function is used to solve the Cahn-Hilliard equation, and the other is adopted to solve the Navier-Stokes equations. In this paper, we mainly focus on the effects of the surface wettability, capillary number and outlet flux ratio on the droplet dynamics, and the volume of the generated daughter droplet is also presented. The numerical results show that when the capillary number is large enough, the droplet behaviors depend critically on surface wettability. For the nonwetting case, the main droplet breaks up into two daughter droplets, which then completely suspend in the branched channels and flow towards the outlet. While for the wetting case, the main droplet also breaks up into two daughter droplets at first, and then different behaviors can be observed. The daughter droplet undergoes a secondary breakup, which results in part of droplet adhering to the wall, and the remaining flowing to the outlet. The volume of the generated daughter droplet is also measured, and it is shown that it increases linearly with contact angle increasing. When the capillary number is small enough, the droplet remains at the bifurcating position, which does not break up. Finally, we also find that the outlet flux ratio affects the rupture mechanism of the droplet. When the outlet flux ratio is 1, the droplet is split into two identical daughter droplets. When the outlet flux ratio increases, an asymmetric rupture resulting in the generation of two different daughter droplets, will be observed. However, if the outlet flux ratio is larger enough, the droplet does not breakup, and flows into the branched channel where the fluid velocity is larger. Here we define a critical outlet flux ratio, below which the droplet breakup occurs, and above which the droplet does not break up. The relationship between the capillary number and the critical outlet flux ratio is examined, and it is found that the critical outlet flux ratio increases with capillary number increasing.

Keywords: lattice Boltzmann method, droplet, micro-channel

PACS: 47.11.Qr, 47.55.db, 47.55.df

DOI: 10.7498/aps.65.204701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11602075, 51576079, 11272132).

† Corresponding author. E-mail: shibc@hust.edu.cn