

针对蒸发弯月面附近微颗粒运动的数值模拟*

潘振海, 王 昊

(北京大学 工学院 微纳米热质传递与能源效率实验室, 北京 100871)

摘要: 蒸发弯月面附近存在复杂的流动结构, 该文建立数值模型以精确模拟蒸发弯月面附近的传热传质过程并描绘液体中微小颗粒的运动轨迹. 一方面, 将弯月面上的蒸发、气相中的蒸汽扩散以及蒸发导致的界面冷却效果耦合求解. 同时利用离散元方法 (DEM) 对颗粒在流体中的运动及其对流场的反作用进行耦合求解. 通过与实验对比, 该计算方法能够准确地描述弯月面附近的微颗粒运动轨迹.

关键词: 蒸发; 弯月面; 热毛细流; 微颗粒; 微流控

中图分类号: O368 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2014.03.012

计 算 符 号

A	面积 (m^2)	C	摩尔浓度 (mol/m^3)
D	扩散系数 (m^2/s)	F_d	流体拖曳力 (N)
f	流体体积力 (N/m^3)	h_{fg}	潜热 (J/kg)
h_l	流体焓 (J/kg)	k	导热系数 ($\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$)
m	颗粒质量 (kg)	m_{net}	质量流率 (kg/s)
m''_{net}	质量流量 ($\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$)	M	摩尔质量 (kg/mol)
\mathbf{n}	界面单位矢量	p	压强 (N/m^2)
R	颗粒半径 (m)	\bar{R}	普适常量 ($\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$)
Re	Reynolds (雷诺) 数	T	温度 (K)
t	时间 (s)	V	速度 (m/s)
$ v $	流体与颗粒的相对速度 (m/s)	β	热扩散系数 ($1/\text{K}$)
μ	动力学粘滞系数 ($\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$)	ρ	密度 (kg/m^3)
σ	表面张力系数 (N/m)	$\bar{\sigma}$	蒸发调节系数
τ	剪切力 (N/m^2)		
下标			
air	空气	equ	平衡

* 收稿日期: 2013-10-10; 修订日期: 2013-12-30

基金项目: 国家自然科学基金 (51276003)

作者简介: 潘振海 (1985—), 男, 山东烟台人, 博士 (E-mail: panzhhpku@163.com);

王昊 (1978—), 男, 云南人, 研究员, 博士, 博士生导师, 北京大学工学院特聘研究员 (通讯作者. Tel: +86-10-82529060; E-mail: hwang@coe.pku.edu.cn).

g	气相(蒸汽与空气的混合)	l	液体
lv	界面	ref	参考值
sat	饱和	sum	合力
v	蒸汽		

引 言

蒸发弯月面在传热、生化分析以及微流控等领域有广泛应用.同时其附近的传热传质过程相当复杂:弯月面上的传质和散热与蒸汽在气相中扩散,界面热毛细流以及自然对流等的耦合.人们已经对蒸发弯月面进行了深入研究^[1-12].Picknett 和 Bexon^[1]对弯月面蒸发过程进行了简化,只考虑蒸汽在气相中的蒸发,提出了用于描述液滴蒸发过程的“蒸汽扩散”模型.该模型之后被广泛用于描述液滴蒸发^[2-4].Dunn 等^[5]和 Saada 等^[6]在以上模型的基础上,进一步考虑了蒸发导致的制冷效应.Buffone 等^[7-8]对毛细管内的蒸发弯月面及其诱导产生的热毛细流进行了一系列实验研究.Chamarthy 等^[9]则通过实验对比了毛细管内热毛细流与自然对流的相对影响,指出重力随着毛细管直径的增加而增加.Davis^[10]则对热毛细失稳的机理及相应研究进行了详细地综述.然而截至目前,较少有针对微小颗粒,比如细胞,在这类弯月面附近运动的模拟研究.近来,Gazzola 等^[11]关注竖直微流道出口处的外凸弯月面,研究微小颗粒在其附近的运动情况,发现颗粒的不对称运动轨迹.本文基于计算流体力学(CFD)方法描述蒸发弯月面附近的热质输送与流动,并与离散元方法(DEM)相结合对微颗粒运动进行精确计算,尝试对 Gazzola 等^[11]的系统进行模拟.

1 问题描述

基于实验描述^[11],本文考虑一个 PDMS 基底中的一个直径 500 μm 的竖直微流道(图 1),液体为水,自下而上补充并在上端出口处形成一个凸起的弯月面.弯月面的直径设为 150 μm .环境温度设为 25 $^{\circ}\text{C}$,相对湿度设为 50%.

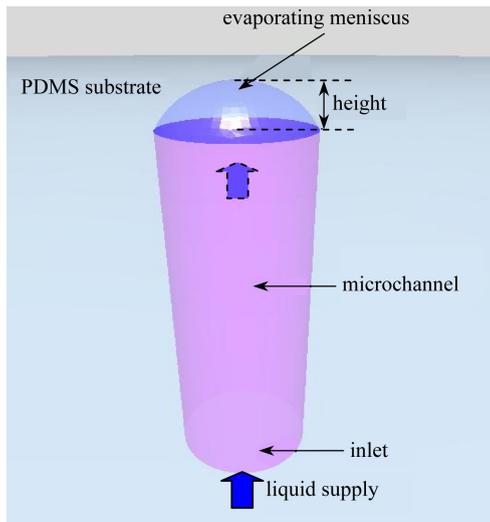


图 1 微流道及弯月面示意图

Fig.1 Scheme of the evaporating meniscus

2 数值模型

2.1 液面上的蒸发

根据分子运动理论,液面上的蒸发流量^[13]为

$$m''_{\text{net}} = \frac{2\bar{\sigma}}{2 - \bar{\sigma}} \left(\frac{\bar{M}}{2\pi\bar{R}} \right)^{1/2} \left(\frac{p_{v,\text{equ}}(T_{\text{lv}})}{T_{\text{lv}}^{1/2}} - \frac{p_v}{T_v^{1/2}} \right). \quad (1)$$

忽略液面上气相与液相间的温度跳跃,得到

$$m''_{\text{net}} = \frac{2\bar{\sigma}}{2 - \bar{\sigma}} \left(\frac{\bar{M}}{2\pi\bar{R}} \right)^{1/2} \frac{1}{T_{\text{lv}}^{1/2}} (p_{v,\text{equ}}(T_{\text{lv}}) - p_v), \quad (2)$$

其中蒸汽的平衡蒸汽压 $p_{v,\text{equ}}(T_{\text{lv}})$ 可以近似地认为等同于饱和蒸汽压:

$$p_{v,\text{equ}}(T_{\text{lv}}) \approx p_{\text{sat}}(T_{\text{lv}}) = p_{\text{sat_ref}} \exp\left(\frac{\bar{M}h_{\text{fg}}}{\bar{R}} \left(\frac{1}{T_{\text{sat_ref}}} - \frac{1}{T_{\text{lv}}} \right) \right). \quad (3)$$

2.2 蒸汽在气相中的扩散

蒸汽在气相中扩散的控制方程为

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla C_v = \nabla \cdot (D \cdot \nabla C_v). \quad (4)$$

其中,扩散系数由当地温度决定如下:

$$D = \frac{T}{T_{\text{ref}}} \cdot D_{\text{ref}}. \quad (5)$$

在蒸发弯月面处,蒸发流量应当与蒸汽扩散流量相同,得到

$$m''_{\text{net}} = M \cdot J = M \cdot \left(-D \frac{\partial C_v}{\partial n} + V_n C_v \right) \Big|_{\text{lv}}, \quad (6)$$

其中方程右边的第1项为蒸汽扩散项,第2项为对流导致的蒸汽流量.该流动由弯月面处的蒸发引起,其流动速度为

$$V_n \Big|_{\text{lv}} = \frac{1}{C_{\text{air}}} \cdot D \frac{\partial C_{\text{air}}}{\partial n} \Big|_{\text{lv}} = - \frac{1}{C_g - C_v} \cdot D \frac{\partial C_v}{\partial n} \Big|_{\text{lv}}. \quad (7)$$

合并方程(6)和(7),可以得到弯月面上蒸汽离开弯月面的质量流率为

$$m''_{\text{net}} = - \frac{M \cdot D}{1 - C_v/C_g} \frac{\partial C_v}{\partial n} \Big|_{\text{lv}}. \quad (8)$$

假定气相符合理想气体定律,则有蒸汽摩尔浓度为

$$C_g = \frac{P_g}{RT_{\text{lv}}}, \quad (9)$$

$$C_v \Big|_{\text{lv}} = \frac{P_v}{P} \cdot C_g. \quad (10)$$

同时,在弯月面处,由于扩散产生的蒸汽流量应当与蒸发产生的蒸汽流量相同,因此,通过合并方程(2)和(8),可以得到

$$- \frac{M \cdot D}{1 - C_v/C_g} \frac{\partial C_v}{\partial n} \Big|_{\text{lv}} = \frac{2\bar{\sigma}}{2 - \bar{\sigma}} \left(\frac{\bar{M}}{2\pi\bar{R}} \right)^{1/2} \frac{1}{T_{\text{lv}}^{1/2}} (p_{v,\text{equ}}(T_{\text{lv}}) - p_v). \quad (11)$$

弯月面上的总蒸发量则为

$$m_{\text{net}} = \oint_{\text{meniscus}} m''_{\text{net}} dA. \quad (12)$$

2.3 流动控制

蒸汽在气相中扩散的控制方程为假定液相为层流、不可压缩流体,利用 Boussinesq 假设计算重力产生的自然对流,则连续性方程、动力方程以及能量方程分别为

$$\nabla(\rho \mathbf{V}) = 0, \quad (13)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{V}) - \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} - (\rho - \rho_{\text{ref}}) \mathbf{g}, \quad (14)$$

$$\rho \frac{\partial h_1}{\partial t} = \rho \mathbf{V} \cdot \nabla h_1 - \nabla(k \nabla T), \quad (15)$$

$$\rho - \rho_{\text{ref}} = \rho_{\text{ref}} \beta (T - T_{\text{ref}}). \quad (16)$$

对于气相,假定其为理想气体并处于层流状态,则控制方程与液相类似,其密度根据理想气体定律处理,气相与液相之间的弯月面设定为一固定壁面,面向气相的一面假设为无剪切力边界条件也即忽略气体流动对界面的影响;面向液相的一边则受到热毛细效应的影响,控制方程为

$$\tau_1|_{\text{lv}} = \frac{d\sigma}{dT} \nabla T_{\text{lv}}, \quad (17)$$

其中 ∇T_{lv} 为界面上的温度梯度。

2.4 颗粒在流体中的运动及其对流场的作用

颗粒在流体中的运动受到 Newton(牛顿)第二定律控制,

$$F_{\text{sum}} = m \cdot \frac{dv}{dt}, \quad (18)$$

其中的合力 F_{sum} 包括流体拖曳力、重力以及浮力,其中拖曳力^[14]为

$$F_d = 0.5\pi c_d \rho R^2 |v|^2. \quad (19)$$

其中拖曳系数由局部 Reynolds 数 Re 确定,

$$Re = \frac{2\alpha\rho R|v|}{\mu}. \quad (20)$$

由于颗粒尺寸、颗粒与流体间的相对速度均很小,局部 Reynolds 数也很小 ($Re < 0.5$),因此,拖曳系数为

$$c_d = 24/Re. \quad (21)$$

同时,颗粒对流体的反作用力则以体积力的形式施加在颗粒所在的网格中:

$$f = \frac{F_{\text{sum}}}{V}. \quad (22)$$

3 数值处理

以上方程通过使用商业软件 FLUENT 和 EDEM 来进行耦合求解,CFD 计算中用到的网格如图 2 所示,所有计算区域均使用了六面体网格,颗粒直径为 20 μm ,密度与水相近为 1 000 kg/m^3 ,用到的流体的物理性质如表 1 所示。

迭代求解过程如图 3 所示,颗粒的运动通过 DEM 求解而弯月面的蒸发及其导致的传热、流动等过程则通过 CFD 方法在 FLUENT 中求解,当 CFD 达到每一步收敛后,DEM 开始进行计算并得到颗粒的运动轨迹,之后,颗粒所受到的合力被以反作用力的方式输入 CFD,同时,CFD

开始计算液面蒸发、传热及流动等过程。在 CFD 计算中,利用用户自定义程序模拟弯月面上的蒸发过程。首先根据气相中蒸汽的分布得到界面上的蒸发流量(方程(8)).之后根据该蒸发流量,计算得到界面处对应的蒸汽压(方程(2)).再根据理想气体定律得到界面处的蒸汽浓度(方程(10)).最后以此为边界条件得到蒸汽在气相中的扩散(方程(4)).

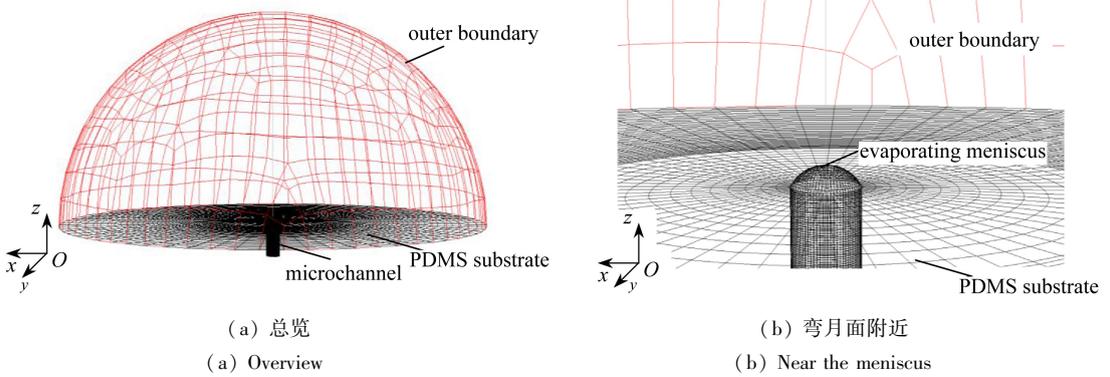


图 2 计算区域及网格划分

Fig.2 Simulation domain and mesh setup

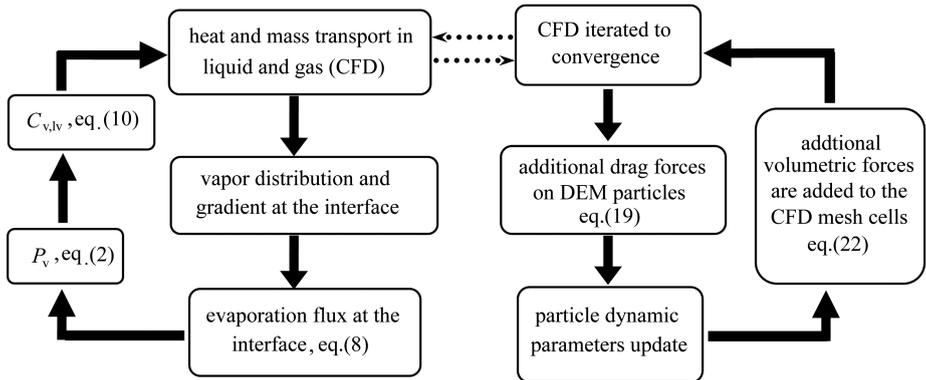


图 3 CFD 与 DEM 耦合求解的迭代示意图

Fig.3 Schematic of the iteration loop and exchanges between CFD and DEM

表 1 流体的物理性质

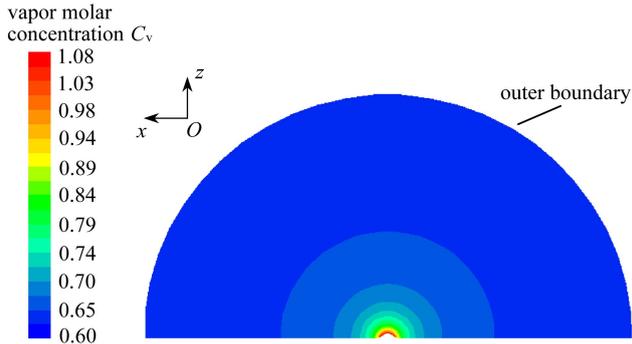
Table 1 Fluid physical properties

physical property	water	air
density, $\rho / (\text{kg}/\text{m}^3)$	997 at 298 K	ideal gas
thermal conductivity, $k / (\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K}))$	0.6	0.024 2
thermal capacity, $c_p / (\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K}))$	4 182	1 006.43
viscosity, $\mu / (\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s}))$	0.001 003	1.789×10^{-5}
vapor molar mass, $M / (\text{kg}/\text{mol})$	0.018	0.029
thermal expansion coefficient, β / K^{-1}	0.000 251	-
derivative of surface tension, $d\sigma/dT / (\text{N}/(\text{m} \cdot \text{K}))$	-0.000 15	-
vapor diffusion coefficient in air, $D / (\text{m}^2/\text{s})$	2.55×10^{-5} at 300 K	-
accommodation coefficient, $\bar{\sigma}$	0.03	-
saturated vapor pressure, $p_{\text{sat}} / \text{Pa}$	2 334.6 at 293.15 K	-

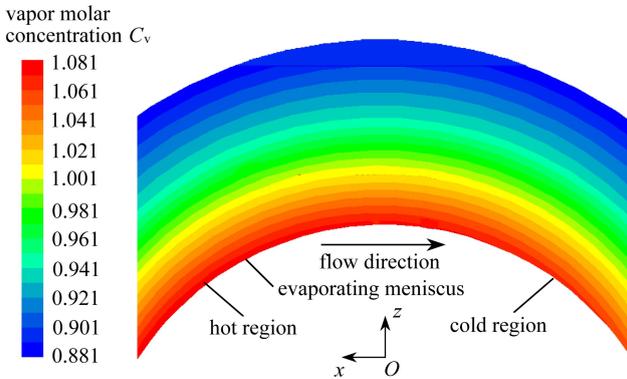
4 结果与讨论

4.1 蒸汽浓度分布

蒸汽的摩尔浓度分布如图 4 所示,其在弯月面处的蒸汽浓度最大,为 1.07 mol/m^3 .其相应的蒸汽压约为 $2\ 600 \text{ Pa}$,略低于其温度下的饱和蒸汽压 $2\ 636.5 \text{ Pa}$.局部蒸汽压与饱和蒸汽压的差别驱动了液体自弯月面向气相蒸发.同时在绝大部分弯月面区域(除弯月面两端),蒸汽浓度基本相同.在流动方向的上游区域,蒸汽浓度稍稍高于流动的下方区域.该差异由于流动上游区域的温度高于下游区域(见 4.3 小节),从而使得上游区域的蒸汽压更高.



(a) 总览
(a) Overview



(b) 弯月面附近
(b) Near the meniscus

图 4 蒸汽浓度分布(单位: mol/m^3)

Fig.4 The contour of vapor concentration(unit: mol/m^3)

4.2 微流道内的流动及弯月面上的温度分布

微流道内的流动状态如图 5 所示,与 Gazzola 等在实验中观察到的流动状况^[11]高度相似.也即,尽管边界条件为轴对称,弯月面下方并没有出现对称的微流动.相反,液体自弯月面一端定向的流向另一端,并在弯月面下方产生了一个单涡流动.同时,在该单涡的下方,又诱导产生了一个小一点的次生涡.这种非对称流动产生的机理可参阅作者之前的分析^[15-16].受此流动的影响,内部温暖的流体被传送到弯月面上的上游区域,从而使得上游处的温度升高(如图 6 所示).流体在弯月面上从上游向下游单向流动的过程中,受蒸发的制冷效果影响,温度不断下

降,直到下游处温度降到最低,从而在弯月面上形成了一个单向的温度梯度分布(图6).该温度梯度分布产生了一个定向的热毛细作用力,从而维持了该定向流动的稳定性.

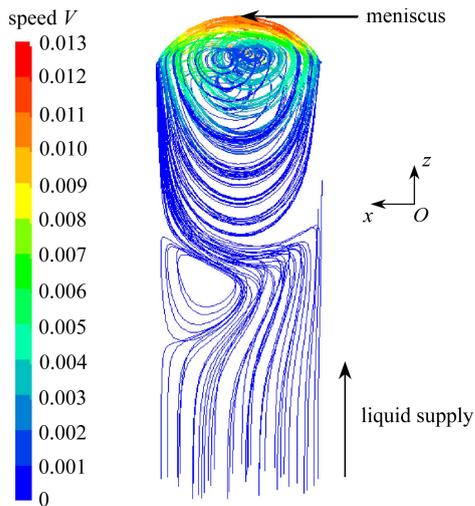


图5 微流道内的微流动状态(单位: m/s)

Fig.5 The flow pathlines in the microchannel(the color indicates the velocity magnitude)(unit: m/s)

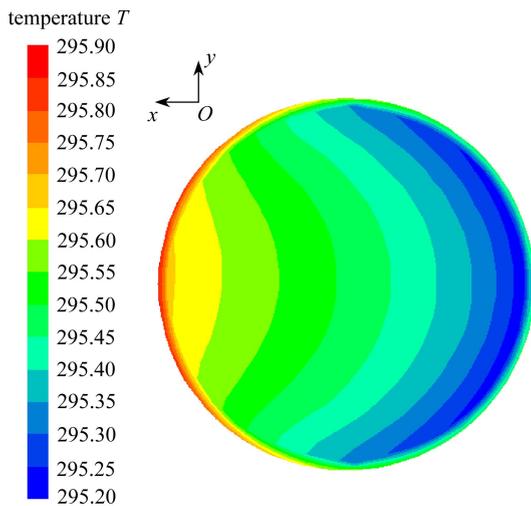
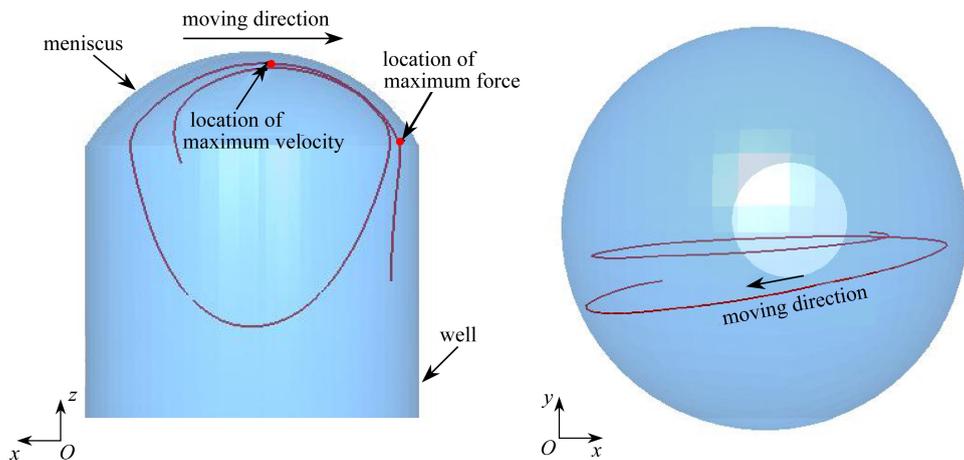


图6 弯月面上的温度分布(单位: K)

Fig.6 Temperature distribution on the meniscus (unit: K)

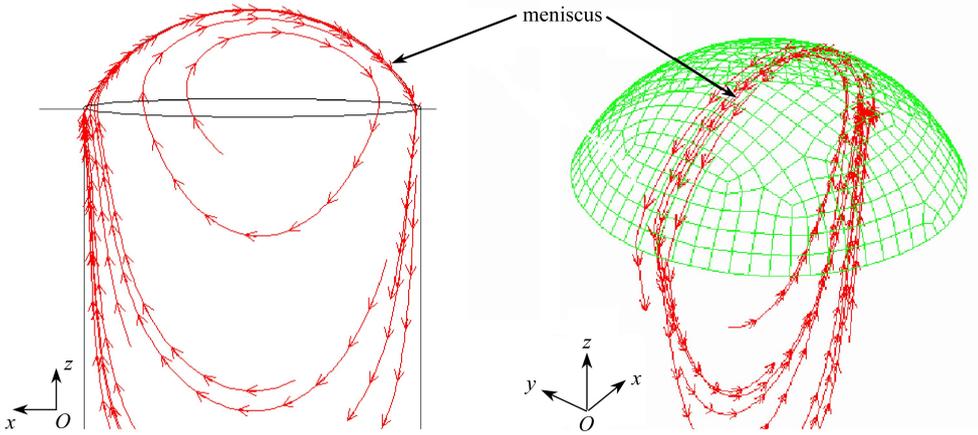
4.3 颗粒在微流道内的运动

图7展现了微流道内颗粒的运动轨迹(图7(a))与微流道内流动迹线(图7(b))间的对比.颗粒在0.7 s的时间内运动了约2074 μm .由于颗粒尺寸较小,颗粒运动轨迹与流动迹线相吻合.颗粒运动速度随时间的变化如图8所示.两个最大速度峰值分别发生在0.054 s和0.524 s,相对应的颗粒转动周期为约0.47 s.其最大速度为11 mm/s,略低于微流道内液体流动的最大速度13 mm/s.最大加速度发生在弯月面拐角处,那里速度方向变化最大.最大加速度为1.33 m/s^2 ,其对应的合力为 5.57×10^{-12} N.



(a) 颗粒运动轨迹

(a) Particle track



(b) 微流道内的流动迹线

(b) Flow pathlines in the microchannel

图7 弯月面附近颗粒运动轨迹与流动迹线

Fig.7 The particle track and flow pathlines near the meniscus

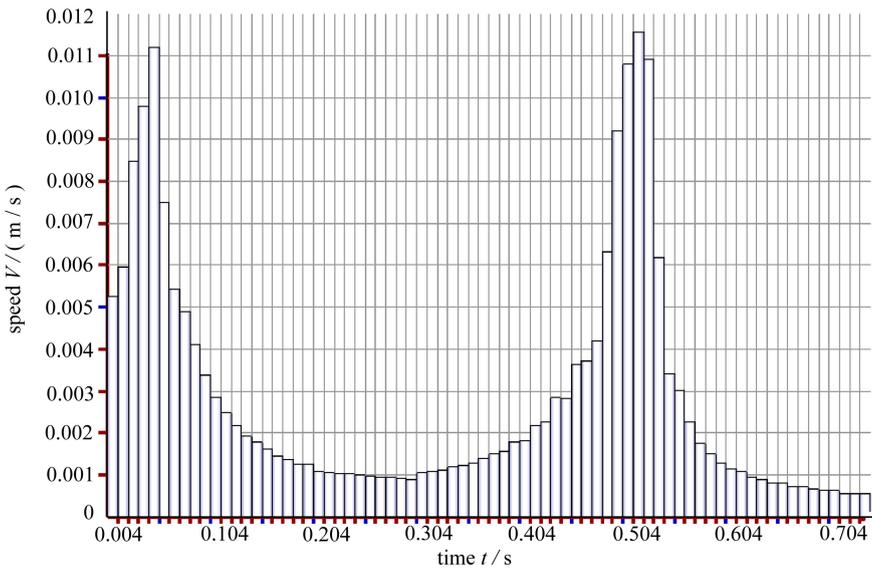


图8 颗粒速度随时间变化柱状图

Fig.8 The particle velocity magnitude histogram with time

5 总 结

本文建立了一个可精确地描述微颗粒在蒸发弯月面附近运动的数值模型。弯月面上的蒸发、蒸汽扩散、热毛细流动、自然对流以及颗粒与流体间的相互力的作用耦合求解在一起。计算得到流动状态及颗粒运动状态与以往文献中的实验相吻合。在热毛细流的作用下，颗粒呈现不对称的环形轨迹。

参考文献(References):

- [1] Picknett R G, Bexon R. The evaporation of sessile or pendant drops in still air[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1977, **61**(2): 336-350.
- [2] Hu H, Larson R G. Evaporation of a sessile droplet on a substrate[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2002, **106**(6): 1334-1344.
- [3] Popov Y O. Evaporative deposition patterns: spatial dimensions of the deposit[J]. *Physical Review E*, 2005, **71**(3): 036313.
- [4] Nguyen T A, Nguyen A V. Increased evaporation kinetics of sessile droplets by using nanoparticles[J]. *Langmuir*, 2012, **28**(49): 16725-16728.
- [5] Dunn G J, Wilson S K, Duffy B R, David S, Sefiane K. The strong influence of substrate conductivity on droplet evaporation[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2009, **623**: 329-351.
- [6] Saada M A, Chikh S, Tadrist L. Evaporation of a sessile drop with pinned or receding contact line on a substrate with different thermophysical properties[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2013, **58**(1/2): 197-208.
- [7] Buffone C, Sefiane K. IR measurements of interfacial temperature during phase change in a confined environment[J]. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2004, **29**(1): 65-74.
- [8] Buffone C, Sefiane K, Christy J R E. Experimental investigation of self-induced thermocapillary convection for an evaporating meniscus in capillary tubes using micro-particle image velocimetry[J]. *Physics of Fluids*, 2005, **17**(5): 052104.
- [9] Chamrathy P, Dhavaleswarapu H K, Garimella S V, Murthy J Y, Wereley S T. Visualization of convection patterns near an evaporating meniscus using μ PIV[J]. *Experiments in Fluids*, 2008, **44**(3): 431-438.
- [10] Davis S H. Thermocapillary instabilities[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1987, **19**: 403-435.
- [11] Gazzola D, Scarselli E F, Guerrieri R. 3D visualization of convection patterns in lab-on-chip with open microfluidic outlet[J]. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2009, **7**(5): 659-668.
- [12] Chen C T, Chieng C C, Tseng F G. Uniform solute deposition of evaporable droplet in nanoliter wells[J]. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2007, **16**(5): 1209-1218.
- [13] Schrage R W. *A Theoretical Study of Interphase Mass Transfer*[M]. New York: Columbia University Press, 1953.
- [14] Schiller L, Naumann A. A drag coefficient correlation[J]. *Vdi Zeitschrift*, 1935, **77**: 318-320.
- [15] PAN Zhen-hai, WANG Hao. Symmetry-to-asymmetry transition of Marangoni flow at a convex volatilizing meniscus[J]. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2010, **9**(4/5): 657-669.
- [16] PAN Zhen-hai, WANG Fen, WANG Hao. Instability of Marangoni toroidal convection in a microchannel and its relevance with the flowing direction[J]. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2011, **11**(3): 327-338.

Modeling of Micro-Particle's Motion Near an Evaporating Meniscus

PAN Zhen-hai, WANG Hao

*(Laboratory of Heat and Mass Transport at Micro-Nano Scale,
College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, P.R.China)*

Abstract: The transport process and flow structure near an evaporating meniscus are highly complicated due to various coupling factors. A numerical model was developed to describe the physical process and motion of a micro-particle near an evaporating meniscus. The evaporation and its cooling effect on the interface, vapor diffusion in the gas domain, as well as thermocapillary flow were considered together with computational fluid dynamics (CFD). At the same time, the particle's motion was tracked with discrete element method (DEM). The interaction between the micro flow field and the particle, including drag force and buoyancy force, was considered. The simulation results agree well with the experiments in previous published literatures.

Key words: evaporation; meniscus; thermocapillary flow; micro-particle; microfluidics

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(51276003)