

研究论文

微小有限空间内微气泡控制生长的
界面追踪与数值模拟杨朝初¹, 董 涛^{2,3}, 毕勤成¹, 张玉龙²¹ 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;² 厦门大学萨本栋微机电研究中心, 福建 厦门 361005;³ 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 通过对微机电系统微流体器件中气泡生长实验结果的分析, 考虑加热元表面液体微层的作用, 将微气泡生长分为晶核形成、球形气泡、受侧壁挤压的气泡、沿微通道生长的气泡 4 个阶段, 建立了矩形微通道内微气泡控制生长物理模型; 采用 Level Set Method 模拟了矩形微通道内微气泡控制生长过程, 获得了微气泡生长特性。数值模拟结果表明: 微气泡初期生长速率较快, 后期由于凝结率增大使生长速率减缓; 液体温度、微通道宽度、微加热元宽度、加热电压等均对气泡生长始点和生长速率有显著影响。

关键词: 微机电系统; 微流体相变; 微气泡生长; Level Set Method; 微小有限空间

中图分类号: TK 124

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2007) 11-2770-06

Interface tracking and numerical simulation of micro-bubble
controlled growth in micro restrained spaceYANG Zhaochu¹, DONG Tao^{2,3}, BI Qincheng¹, ZHANG Yulong²

¹ State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, Shaanxi, China; ² Peng Tung Sah MEMS Research Center, Xiamen University, Xiamen 361005, Fujian, China; ³ State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: Based on the experimental results of micro-bubble controlled growth in MEMS (micro-electro-mechanical system) devices, the bubble growth process could be divided into four stages, namely, nucleating, spherical bubble, bubble restrained by lateral wall, bubble elongating along the channel. A physical model of micro-bubble growth in the rectangular microchannel was established by considering the micro layer of liquid in the heater. Numerical simulation of micro-bubble growth in the micro restrained space was performed by the Level Set Method and the characteristics of micro-bubble growth were obtained and analyzed. The simulated data showed that micro-bubble grew rapidly in the early stage but grew slowly in the late stage due to the increasing condensation rate on the interface. The results also indicated that the initial temperature of liquid, width of the microchannel, width of the microheater, and the heating voltage had remarkable effects on the bubble inception and bubble growth rate.

Key words: MEMS; microfluidic phase change; micro-bubble growth; Level Set Method; micro restrained space

2007-02-06 收到初稿, 2007-07-25 收到修改稿。

联系人: 董涛。第一作者: 杨朝初 (1976-), 男, 博士研究生。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (50406019); 中国博士后科学基金项目 (2004035669); 江苏省博士后科学研究资助计划项目 (苏人通 2004 [计] 300 号)。

Received date: 2007-02-06.

Corresponding author: DONG Tao, associate professor.

E-mail: nustlibrary@263.net

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (50406019).

引 言

以热气泡作为驱动源的微喷射泵、生物颗粒微制动器、微气泡作为造影剂的超声波检测和治疗系统等^[1], 已取得重大研究进展和广泛应用。此类器件中微流路的水力直径通常为 100 μm 量级、甚至小至数十微米, 与微气泡特征尺寸在同一数量级; 微气泡生长过程不可避免地受到微小空间尺度的影响, 其动力学特性也有别于大空间池沸腾情形^[2]。作者^[3]曾设计完成矩形微通道内气泡控制生长实验, 对微气泡控制生长规律进行了初步探索。然而, 微小空间尺度效应, 给微气泡控制生长实验带来较大困难。

国外关于气泡生长数值模拟的工作多是针对大空间池沸腾情形^[4-8]、应用分子簇模型^[4]或分子碰撞理论^[8], 或者针对小空间内大加热元情形, 如 Jacobi 等^[9]的微管道内传热模型、Yuan 等^[10]的通道内气泡生长与合并模型、Ajaev 等^[11]的有限空间内气泡生长模型等, 几乎不考虑微小有限空间与微加热元对气泡生长的双重影响。国内彭晓峰等^[12]根据常规成核理论引入尺度效应的影响, 按照相变过程的时间序列, 分别以活化分子聚集体和气泡为研究对象, 针对当量直径为 0.5 ~ 1.0 mm 的小尺度通道内的气泡生长特性进行研究, 他们的工作侧重于微尺度相变模型理论研究。

因此, 本文以微通道内气泡控制生长实验结果为基础, 建立微小有限空间内微气泡生长模型, 考虑微小有限空间与加热元尺寸的共同影响, 采用 Level Set Method 追踪气泡生长界面, 以期通过数值方法得出微气泡生长规律, 分析微小有限空间内气泡生长特性。

1 微小有限空间内微气泡生长模型与控制方程

根据微通道内微气泡控制生长实验结果^[3], 可将矩形微通道(高宽比大于 1)内微气泡生长过程分为 4 个阶段: 晶核形成; 球形气泡; 受侧壁挤压的气泡; 沿微通道伸长的气泡。

1.1 微小有限空间内微气泡生长模型假设

以实验结果为基础, 建立微小有限空间内微气泡生长模型, 引入以下假设^[1]: (1) 微气泡与微加热元之间在液体微层, 热量由微加热元以导热的方式传递给液体微层, 汽化现象仅发生在气泡与液

体微层之间的相界面上; (2) 由于液体微层的厚度相当薄 (< 10 μm), 微层中液体的横向流动和热对流可忽略不计, 液体微层厚度的变化仅与液体汽化有关; (3) 液体微层中的液体处于饱和状态, 与汽化潜热相比, 液体微层的热容可忽略不计; (4) 矩形微通道的顶壁与侧壁上无热量进出; (5) 微尺度条件下, 重力对流动影响较小, 可忽略不计。

1.2 微小有限空间内微气泡生长控制方程

1.2.1 动量守恒 忽略重力的影响, 气液界面的动量方程可以写成

$$\left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = - \nabla p - \nabla H + \nabla \cdot \mu \left[\nabla \mathbf{u} + \left(\nabla \mathbf{u} \right)^T \right] \quad (1)$$

式中 μ 为界面曲率, 定义为

$$\mu = \nabla \cdot \left[\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right] \quad (2)$$

1.2.2 能量守恒 根据 Son^[13]的推导结果, 气液界面的能量守恒方程可以写成

$$\begin{cases} c_{p,l} \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right] = \nabla \cdot k \nabla T, H > 0 \\ T = T_{\text{sat}}, H = 0 \end{cases} \quad (3)$$

式中 $c_{p,l}$ 为液体比定压热容, k 为界面当量热导率, H 为 Heaviside 阶梯函数。

1.2.3 质量守恒 根据气液界面区域的能量守恒, 可得界面质量守恒方程为^[7]

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{2} \frac{1}{h_{\text{fg}}} k \nabla T \cdot \nabla \quad (4)$$

1.2.4 相界面区域物性参数 界面区域的物性参数, 如密度、动力黏度, 均采用调和插值的方式确定^[14]

$$\mu = \mu_v + \left(\mu_l - \mu_v \right) H \quad (5)$$

$$\mu^* = \mu_v^* + \left(\mu_l^* - \mu_v^* \right) H \quad (6)$$

1.3 微小有限空间内微气泡生长模型补充方程

1.3.1 微加热元中的导热 微加热元的加热过程可处理为具有内热源的固体中的导热问题, 有

$$c_v \frac{\partial T}{\partial t} = - \nabla \cdot \left(k_s \nabla \right) T + \dot{q}_s \quad (7)$$

其中, $\dot{q}_s = P_{\text{heat}}/V_{\text{heater}}$, P_{heat} 为微加热元的加热功率, V_{heater} 为微加热元体积。

1.3.2 汽化界面上的热通量 按照模型假设 (1) 和 (2), 根据 Hsu 和 Graham 由动力学理论导出的汽化传热率方程^[15]以及 Clausius-Clapeyron 方程变形, 可得

$$\dot{q} = a \sqrt{h_{\text{fg}}^2} \left(\frac{M}{2 R T_{\text{sat}}^3} \right)^{1/2} \left(T_{\text{int}} - T_{\text{sat}} \right) \quad (8)$$

其中, R 为摩尔气体常数; M 为工质的摩尔质量;

a 为微加热元中热扩散系数, $a = k \left(\frac{1}{g} \right)$ 。

1.3.3 液体微层中的热通量 微加热元与液体微层之间的热传递按 1 维导热问题处理, 根据模型假设 (1) 及能量平衡, 液体微层中的热通量可按式 (9) 计算^[1]

$$\dot{q}_s(z, t) = \dot{q}(z, t) = \frac{T_s(z, t) - T_{sat}}{\frac{z}{k_l} + \frac{1}{a \sqrt{h_g}} \left(\frac{2RT_{sat}^3}{M} \right)^{1/2}} \quad (9)$$

计算区域底壁、侧壁、顶壁及对称面上的边界条件确定, 可参见文献 [1], 此处不再赘述。

2 微小有限空间内微气泡生长模拟的

Level Set Method 实施

引入 Level Set 函数 $\phi(x, y, z, t)$, 使得任意时刻的界面 (t) 都是 $\phi(x, y, z, t)$ 的零等值面; 其动力学行为满足式 (10)^[16]; 通过求解式 (11), 可获得 $\phi(x, y, z, t)$ 的稳定解, ϕ_0 是满足式 (10) 的一个解

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u_{int} \cdot \nabla \phi \quad (10)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi}{\sqrt{\phi_0^2 + h^2}} (1 - |\nabla \phi|) \quad (11)$$

对于任意时刻 t , 求解式 (10), 得到 Level Set 函数 $\phi(x, y, z, t)$, 可确定界面的位置; 再对整个界面区域求体积积分, 即可获得气泡的体积。

2.1 控制方程离散

对控制方程中的扩散项采用一阶全隐格式, 对流项和源项采用一阶显式格式分别对空间进行离散, n 代表时层, 有:

动量方程

$$\left[\frac{u^{n+1} - u^n}{t} + u^n \cdot \nabla u^n \right] = -\nabla p^{n+1} - \nabla H + \nabla \cdot \mu \left[\nabla u^{n+1} + \left(\nabla u^n \right) \bar{1} \right] \quad (12)$$

能量方程

$$c_l \left[\frac{T^{n+1} - T^n}{t} + u^n \cdot \nabla T^n \right] = \nabla \cdot k \nabla T^n \quad (13)$$

连续方程

$$\nabla \cdot u^{n+1} = \frac{1}{2} \frac{k}{h_g} \nabla T^{n+1} \cdot \nabla \quad (14)$$

Level Set 函数的控制方程式 (10)、式 (11) 的离散形式为

$$\frac{\phi^n - \phi_0}{t} = -u_{int}^n \cdot \nabla \phi^n \quad (15)$$

$$\frac{\phi^n - \phi_0}{t} = \frac{\phi_0}{\sqrt{\phi_0^2 + h^2}} (1 - |\nabla \phi^n|) \quad (16)$$

式 (16) 中 ϕ^n 为 Level Set 函数重新初始化过程中

间值。

对界面曲率 采用二阶中心差分格式进行离散。为避免求解过程中的数值振荡, 采用二阶 ENO (essentially non-oscillation) 格式^[17]。

2.2 数值求解

对离散方程进行数值求解时, 采用交错网格, 将速度和压力布置在两套相互错开半个网格距离的网格中^[18]。为保证数值模拟过程中压力方程满足质量守恒, 求解动量方程采用投射法^[19] (projection method), 分以下 2 步进行:

第 1 步

$$\left[\frac{u^* - u^n}{t} + u^n \cdot \nabla u^n \right] = -\nabla p^n - \nabla H + \nabla \cdot \mu \left[\nabla u^* + \left(\nabla u^n \right) \bar{1} \right] \quad (17)$$

第 2 步

$$u^{n+1} = u^* - \frac{1}{t} (p^{n+1} - p^n) \quad (18)$$

根据式 (17) 和连续方程 (14), 可导出压力方程为

$$\nabla \cdot \frac{1}{t} \nabla p^{n+1} = \nabla \cdot \frac{1}{t} \nabla p^n + \frac{1}{t} \nabla \cdot u^* - \frac{1}{t} \frac{1}{2} \frac{k_l}{h_g} \nabla T^{n+1} \quad (19)$$

所有离散方程的系数矩阵均为三对角阵, 采用 TDMA (tridiagonal matrix method) 算法^[18] 编写程序, 进行迭代求解。

2.3 计算参数与初始条件

微流体工质为 R113, 初始温度分别为 20、30、40 , 压力为 100 kPa。

微加热元厚度为 0.15 μm , 宽度分别为 3、5、8 μm ; 图 1 给出了计算区域示意图, 其几何参数分别为: 宽 (W) 40、50、60 μm ; 高 (H) 75、100、120、150 μm ; 长 (L) 150、200、240、300 μm 。

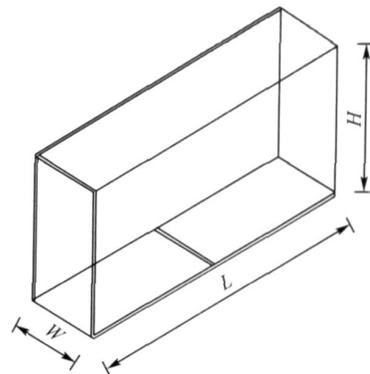


图 1 计算区域示意图

Fig. 1 Schematic diagram of computational domain

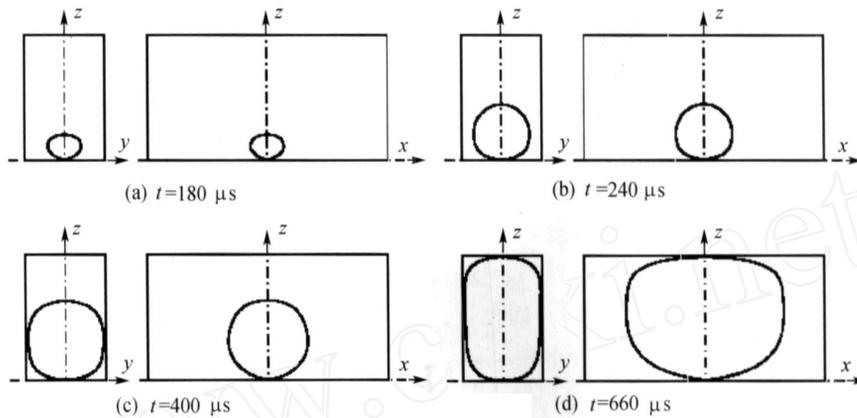


图 2 不同时刻微气泡的形状

Fig. 2 Microbubble shape varies with time ($W_{\text{heater}} = 3 \mu\text{m}$, $W = 50 \mu\text{m}$, $H = 75 \mu\text{m}$, $L = 150 \mu\text{m}$)

3 微小有限空间内微气泡生长数值模拟结果与分析

3.1 微气泡形状

图 2 显示了不同时刻微气泡形状的变化。生长初期，气泡形状为近似球形 [图 2 (a)、(b)]；当气泡生长受到侧壁限制后，气泡形状不再保持球形 [图 2 (c)]；当微气泡继续增大到与通道顶壁接触后，气泡形状则呈拉长的气柱状 [图 2 (d)]。表明微小有限空间内的气泡生长特性与大空间池沸腾有明显差异。

3.2 液体初始温度对微气泡生长的影响

图 3 显示了液体温度对微气泡生长速率的影响。液体温度越高，微气泡生长始点越靠前，相同体积时刻的生长速率也越大。液体温度越高，微加热元附近的液体微层只需吸收较少的热量即可满足气泡成核条件，因而气泡生长始点越靠前。液体微层中饱和液体的持续蒸发需要周围液体持续的补充，较高的液体温度可缩短使补充的液体达到饱和的时间，所以气泡的生长速率较快。

微气泡的生长过程，实质上是蒸发和凝结动态过程的综合作用结果：在生长初期，蒸发率远大于凝结率，微气泡生长速率较高；在生长后期，由于气泡表面积增大，使凝结率上升，而蒸发率基本维持不变，因而使后期的生长速率减缓。

3.3 微通道截面对微气泡生长的影响

图 4 显示了当微管道宽度一定时，高宽比 (>1) 对微气泡生长速率的影响。越小，气泡后期的生长速率越缓慢。其原因可能是：当气泡沿微

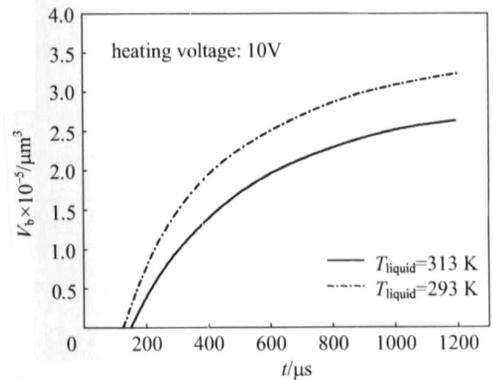


图 3 不同初始流体温度条件下的微气泡生长

Fig. 3 Bubble growth rate vs initial fluid temperature

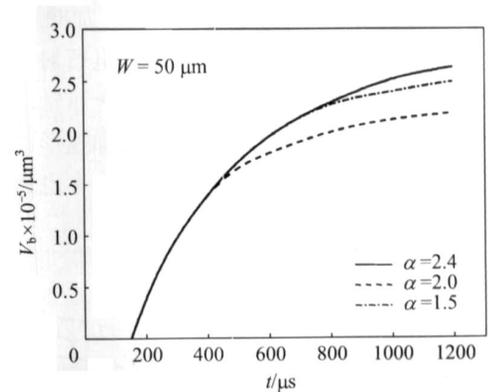


图 4 不同微通道高宽比时的微气泡生长速率

Fig. 4 Bubble growth rate vs microchannel aspect ratio

通道轴向伸长，在远离微加热元的两端界面区域凝结率增大。图 4 的数值模拟结果与 MEMS 器件中微气泡控制生长实验结果^[31] (相同工况) 较为一致。

3.4 微加热元宽度对微气泡生长的影响

图 5 显示了加热元宽度对微气泡生长速率的影

响。微加热元宽度越大，微气泡体积增大的速率越高，且微气泡开始生长的始点稍靠前。其原因可能是：由于气泡成核与气泡生长需要有一定范围的饱和液体微层，而微加热元表面热通量达到 $10 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-2}$ 量级，微加热元宽度过窄则不利于形成足够宽度的饱和液体微层，因此宽度为 $3 \mu\text{m}$ 的微加热元气泡生长始点最靠后，生长速率最慢，这也是 Lee 等^[8] 在实验中观测到微加热元宽度越小，气泡生长始点越靠后、成核温度越高的原因。因此，在设计微气泡生长器件时，为保证其生长速率，应使微加热元具有足够的宽度。

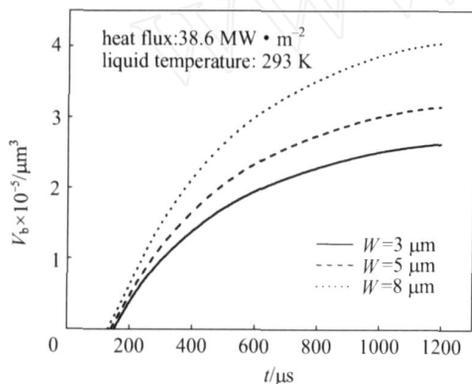


图 5 不同微加热元宽度时的微气泡生长速率
Fig 5 Microbubble growth vs microheater width

3.5 加热电压对微气泡生长的影响

图 6 显示了加热电压对微气泡生长的影响。微气泡的生长速率随加热的升高而加快，且气泡生长始点也提前。对于给定的微加热元，加热电压越高，热通量也越高，图中的 3 种加热电压对应的热通量分别为 38.6、44.8、52.2 $\text{MW} \cdot \text{m}^{-2}$ ；热通量越高，微加热元表面饱和液体微层加速形成，从而使气泡成核提前，初期微气泡生长速率也越大。

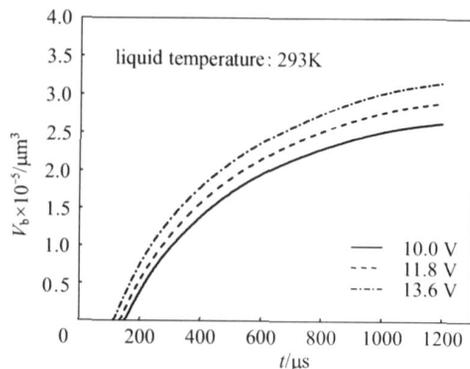


图 6 不同加热电压时的微气泡生长速率
Fig 6 Microbubble growth vs heating voltage

4 结 论

根据矩形微通道内微气泡控制生长实验结果，考虑微加热元壁面附近液体微层效应，建立了微小有限空间中微气泡生长模型；采用 Level Set Method 模拟微气泡的生长过程，分析了微气泡生长过程中的影响因素。结论如下。

- (1) 在生长初期，微气泡生长速率较快；生长后期则由于凝结率增大使生长速率减缓。
- (2) 液体温度对微气泡生长有明显影响，液体温度越高，微气泡生长始点越靠前，生长速率也高。
- (3) 微通道截面形状对微气泡后期的生长有一定影响；当微通道的宽度一定时，高宽比越小，后期的气泡生长速率越缓慢。
- (4) 相同加热条件下，微加热元宽度越小，微气泡的生长始点越晚，生长速率也越缓慢。
- (5) 加热电压通过热通量影响微气泡的生长，加热电压越高，微气泡生长速率也越高。

数值模拟结果表明，采用 Level Set Method 模拟微小有限空间微气泡的生长过程是可行的。在后续工作中，应进一步完善微小有限空间内微气泡生长的物理模型，提高数值模拟结果的可靠性。

符 号 说 明

- A —— 截面积, μm^2
- D_h —— 水力直径, μm
- H —— 高度, μm
- h —— 比焓, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
- L —— 长度, μm
- p —— 压力, Pa
- S —— 面积, μm^2
- T —— 温度, K
- U —— 电压, V
- u, v, w —— 速度, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
- V —— 体积, μm^3
- W —— 宽度, μm
- 高宽比
- 厚度, μm
- 加热脉冲周期, ms
- μ —— 黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$
- ϕ —— Level Set 函数

下角标

- b —— 气泡
- heater —— 加热元

References

- [1] Dong Tao (董涛). Controlled micro-bubble growth, phase change flow and heat transfer in MEMS devices and design of "chip lab" for microfluidic phase change. Postdoctoral Report. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2005
- [2] Dong T, Yang Z, Wu H. Molecular simulations of R141b flow boiling in micro/nano channel: interfacial phenomena. *Energy Conversion and Management*, 2006, 47: 2178-2191
- [3] Dong Tao (董涛), Yang Zhaochu (杨朝初), Bi Qincheng (毕勤成), et al. Controlled growth of micro-bubble in rectangular microchannel of MEMS devices. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 2007, 58 (1): 54-60
- [4] Oh S D, Seung S S, Kawk H Y. A model of bubble nucleation on micro line heater. *Journal of Heat Transfer*, 1999, 121: 220-225
- [5] Han Y Y, Seiichi K, Yoshiaki O. Direct calculation of bubble growth, departure, and rise in nucleate pool boiling. *International Journal of Multiphase Flow*, 2001, 27: 277-298
- [6] Robinson A J, Judd R L. Bubble growth in a uniform and spatially distributed temperature field. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2001, 44: 2699-2710
- [7] Son G, Ramanujapu N, Dhir V K. Numerical simulation of bubble merge process on a single nucleation site during pool nucleate boiling. *Journal of Heat Transfer*, 2002, 124: 51-62
- [8] Lee J Y, Park H C, Jung J Y. Bubble nucleation on micro line heater. *Journal of Heat Transfer*, 2003, 125: 687-692
- [9] Jacobi A M, Thome J R. Heat transfer model for evaporation of elongated bubble flows in microchannels. *Journal of Heat Transfer*, 2002, 124: 1131-1136
- [10] Yuan H, Oguz H N, Prosperetti A. Growth and collapse of a vapor bubble in a small tube. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1999, 42: 3643-3657
- [11] Ajaev V S, Homsy G M, Homsy S J, Morriss S. Dynamic response of geometrically constrained vapor bubbles. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2002, 254: 346-354
- [12] Tian Ye (田野), Peng Xiaofeng (彭晓峰), Wang Buxuan (王补宣). Characteristics of growing process of bubbles in narrow tubes. *Journal of Engineering Thermophysics (工程热物理学报)*, 2002, 23 (4): 470-472
- [13] Son G. A numerical method for bubble motion with phase change. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 2001, 39: 509-523
- [14] Patankar S V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Washington D C: Hemisphere, 1980
- [15] Guo Zhanxiong, EL-Genk M S. Liquid microlayer evaporation during nucleate boiling on the surface of a flat composite wall. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1994, 37: 1641-1655
- [16] Liu Ruxun (刘儒勋), Wang Zhifeng (王志峰). Numerical Simulation and Dynamic Interface Tracking (数值模拟方法和运动界面追踪). Hefei: Press of Chinese University of Science and Technology, 2001
- [17] Liu Ruxun (刘儒勋), Shu Qiwan (舒其望). Some New Method in Computational Fluid Dynamics (计算流体力学的若干新方法). Beijing: Science Press, 2003
- [18] Tao Wenquan (陶文铨). *Numerical Heat Transfer (数值传热学)*. 2nd. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 2001
- [19] Brown D L. Accuracy of projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations//Workshop on Numerical Simulation of Incompressible Flows. Half Moon Bay, California, 2001