文章编号: 2096-1472(2022)-08-34-05

DOI:10.19644/j.cnki.issn2096-1472.2022.008.008

基于COMSOL的液滴驱动模型仿真分析及实验研究

陈弘安,梁 威

(上海工程技术大学机械与汽车工程学院,上海 201620) ⊠hongan_chen@foxmail.com; wei.liang@sues.edu.cn



摘 要:基于声表面波微流控技术,提出了利用兰姆波在基板上驱动液滴运动的模型。首先分析了声表面波驱动 理论,得到液滴声流力的表达式,并计算了该模型中兰姆波所激发的声流力大小,然后在COMSOL Multiphysics多物 理仿真软件中建立了两相流仿真模型,模拟了液滴在基板表面的瞬态运动行为,且通过实验校验了仿真结果,最后基于 该仿真模型,探究了液滴密度、动力黏度和表面张力对位移特性的影响。结果表明:液滴的位移特性主要受动力黏度的 影响,这为分离微、纳量级下不同黏度的微流体提供了一定的理论指导。

关键词: 声表面波; 液滴; 仿真; COMSOL Multiphysics 中图分类号: TP391.9 文献标识码: A



Simulation Analysis and Experimental Study of Droplet Driving Model based on COMSOL

CHEN Hongan, LIANG Wei

(School of Mechanical and Automotive Engineering, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai 201620, China) Mongan_chen@totmail.com; wei.liang@sues.edu.cn

Abstract: This paper proposes a model for driving droplet motion on a substrate with Lamb waves based on SAW (Surface Acoustic Wave) microfluidic technology. Firstly, SAW driving theory is analyzed to obtain an expression for acoustic stream forces of droplets and the magnitude of the acoustic stream force excited by the Lamb wave in the model is calculated. Then, a two-phase flow simulation model is established in the COMSOL Multiphysics simulation software, where the transient motion behavior of droplets on the surface of the substrate is simulated and the simulation results are verified by experiments. Finally, based on the simulation model, the effects of droplet density, dynamic viscosity and surface tension on the displacement characteristics are explored. Results show that the displacement characteristics of droplets are mainly affected by the dynamic viscosity, which provides a certain theoretical guidance for the separation of microfluidics with different viscosities at micro- and Nano-scales.

Keywords: SAW; droplet; simulation; COMSOL Multiphysics

1 引言(Introduction)

近年来,微流控技术作为微、纳量级的液体操控技术, 具有微型化、高精度和高灵敏度等优势,一直是生物、化 学、医学和流体力学等交叉领域的前沿。声表面波(Surface Acoustic Wave, SAW)器件具有重量轻、体积小、可靠性 高、设计灵活等优点,在微流控技术中得到了广泛的应用^[1]。 SAW器件主要通过压电材料的逆压电效应将高频电信号转化 成机械振动,同时激发出与外加电信号同频率的声表面波, 这种表面声波会沿基板材料表面传播^[2]。由于声表面波在固体 基板和液体中的速度不同,声表面波在传播路径中遇到液体 时会在固-液界面发生模式转换,转变为漏声表面波(Leaky Surface Acoustic Wave, LSAW),以一定角度θ_R向液体内辐 射能量^[3]。

纵向压力波会在液体内产生声流效应(Acoustic

基金项目:国家自然科学基金资助项目((51505274);上海市"晨光计划"基金资助项目(15CG58);上海市青年东方学者基金资助项目(QD2015036).

Streaming),最终可以驱动液体运动^[4]。这种声表面波技术 被大量应用于微流体的混合^[5]、泵送^[6]、加热^[7]及雾化^[8]等方 面。此外,SCHMITT等人^[9]和LIANG等人^[10]将声表面波技术 应用于非压电基板,通过安装在非压电基板上的单项换能器 (Single Phase Transducer, SPT)激发兰姆波来驱动基板表面 的微液滴运动。本文在前人研究的基础上^[11-13],建立了兰姆波 驱动微液滴运动的有限元分析模型,通过仿真模拟的方法探 究了液滴在兰姆波作用下的运动机理,并着重分析了液滴物 理属性对位移特性的影响。

2 仿真建模(Simulation modeling)

2.1 声流力

如图1所示,液滴吸收漏兰姆波的能量在内部产生声流效 应,通过声流理论可推导出作用于液滴的声流力。



图1 兰姆波驱动液滴运动模型示意图

Fig.1 Schematic diagram of the droplet motion model driven by Lamb wave

由声流力导致的液滴内部粒子位移(ux, uz)可表示为[14]:

 $u_{x} = A \exp(j\omega t) \cdot \exp(-jk_{L}x) \cdot \exp(-\alpha k_{L}z)$

 $u_z = -j\alpha A \exp(j\omega t) \cdot \exp(-jk_L x) \cdot \exp(-\alpha k_L z)$

式(1)和式(2)中, A为兰姆波的振幅; ω 为角频率; k_L 表示 漏兰姆波的波数, $\pm k_L = k_{real} + jk_{imag}$, 其中 k_{real} 是实部, k_{imag} 是虚部,并代表漏兰姆波在液体中能量的耗散。式(2)中, α 代 表兰姆波从基板衍射进入液体的衰减常数, 可表示为:

$$\alpha^2 = 1 - (c_{\text{solid}}/c_{\text{liquid}})^2 \tag{3}$$

其中, *c*solid和*c*liquid分别表示兰姆波在固体基板中和液体中的传播速度。

根据SHIOKAWA等人¹¹⁴和SANKARANARAYANAN等人¹¹⁵的 研究,最终推导得到声流力 $F_s \alpha x \pi z \beta$ 量上的表达式:

 $F_{Sx} = -\rho_{\text{liquid}}(1 + \alpha_1^2) A^2 \omega^2 k_{\text{imag}} \exp 2\left(k_{\text{imag}}x + \alpha_1 k_{\text{imag}}z\right)$ (4) $F_{Sz} = -\rho_{\text{liquid}}(1 + \alpha_1^2) A^2 \omega^2 \alpha_1 k_{\text{imag}} \exp 2\left(k_{\text{imag}}x + \alpha_1 k_{\text{imag}}z\right)$ (5)

式(4)和式(5)中, ρ_{liquid} 为液体密度。式(5)中, $\alpha_1 = -j\alpha$ 。 总的声流力 F_{S} 可由公式 $F_{\text{S}} = \sqrt{F_{\text{S}x}^2 + F_{\text{S}z}^2}$ 导出:

F_S =- ρ_{liquid}(1 + α₁²)^{3/2}A²ω²k_{imag} exp 2 (k_{imag}x + α₁k_{imag}z)(6) 为计算出本模型中声流力的具体值,需对所涉及的各 个参数进行分析。在本文中假设所激励的兰姆波模态为A₀模 态,由先前的研究已知^[10],当兰姆波的频率f等于1 MHz, 相速度c_{solid}等于2,400 m/s时,推动液滴移动的兰姆波临界 幅值为8.66 nm。又因为兰姆波在液体中的传播速度c_{liquid} 等于1,500 m/s,由式(3)可求得固-液表面的衰减常数: $\alpha_1 = -j \sqrt{1 - (c_{\text{solid}}/c_{\text{liquid}})^2} \approx 1.28$ 。同时由Snell定律求得漏 兰姆波向液滴传播的入射角 $\theta_R = \arcsin(c_{\text{liquid}}/c_{\text{solid}}) \approx 38^\circ$ 。 其中,漏兰姆波在液体中的传播呈指数衰减,衰减长度*L*可由 式(7)表示:

 $L = \rho_{\text{solid}} c_{\text{solid}} \lambda / \rho_{\text{liquid}} c_{\text{liquid}} = \rho_{\text{solid}} c_{\text{solid}}^2 / \rho_{\text{liquid}} c_{\text{liquid}} f$ (7) 其中, ρ_{solid} 表示固体基板的密度, λ 表示兰姆波的波长。因此, 根据JIAO等人^[16]的方法可求得在频率f等于1 MHz时, k_{imag} 的值约为-117.84 m⁻¹。

通过以上分析,最终可得到声流力的计算值F_S等于 1495.24 exp 2(-117.84*x*-150.84*z*)。可以看出,由于漏兰 姆波在液体中的耗散特性,声流力F_S在*x*和*z*方向上呈指数 衰减。其中,在固-液接触点(0,0)处声流力取得最大值为 1,495.24 N·m⁻³。

2.2 建模方法

本文采用考虑了润湿壁的多相流模型,对气体环境中 结构基底上液滴的动力学行为进行了模拟。为了简化计算时 间,我们假设了二维的两相流模型。图2展示了模型的几何结 构以及初始配置、半径 R_0 为1.68 mm的半球形液滴($\phi = 1$)置 于水平基板上,其余区域($\phi = 0$)表示空气。其中液滴的密度 和动力黏度分别为1,000 kg·m⁻³和1.08×10⁻³Pa·s,液滴周围 空气的密度和动力黏度分别为1.3 kg·m⁻³和1.7×10⁻⁵Pa·s, 空气和液滴接触面的表面张力为0.072 N·m⁻¹。与液滴接触的固 体壁设为润湿壁,平衡接触角设为90°,滑移长度设为10µm。



图2 液滴在初始状态下水平集函数表示的两相界面和等值线图

Fig.2 The two-phase interface and contour plot represented

by the level set function of the droplet in the initial state

将液滴和空气视为不可压缩的层流,由Navier-Stokes方 程控制:

$$\rho\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u\right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 u + F_{\rm vol} + F_{\rm st} \tag{8}$$
$$\nabla \cdot u = 0 \tag{9}$$

其中, u表示流体速度; ρ 、 $p\pi\mu$ 分别表示流体的密度、压力和动力黏度; F_{vol} 表示体积力,由上文所求的声流力 F_{s} 所贡献; F_{st} 表示液滴的表面张力,由式(10)给出:

$$F_{\rm st} = \sigma \delta \kappa n \tag{10}$$

其中, δ和κ分别表示狄拉克函数和气-液接触面上的局部曲率, *n*是界面法向。

为了跟踪两种流体(空气和液滴)之间界面的演变,该模型 采用水平集的方法^[17]。在该方法中,两相之间的界面由一个 平滑的阶跃函数 表示。 等于0表示空气域,等于1表示液滴 域,在气-液界面的过渡层中, *Φ*从0平滑过渡到1(图2)。借助 这种界面的表示方法,可以通过水平集函数计算自由表面的 运动:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \cdot \nabla \Phi = \gamma \nabla \left[\varepsilon \nabla \Phi - \Phi (1 - \Phi) \cdot n \right]$$
(11)

其中,γ参数决定重新初始化γ的数量,合适的γ值是模型中出 现的最大速度;ε参数决定界面的厚度;界面法向可根据以下 表达式计算:

$$n = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \tag{12}$$

物理性质的变化,例如密度和黏度,由以下公式定义:

$$\rho = \rho_{\rm air} + (\rho_{\rm liquid} - \rho_{\rm air})\Phi \tag{13}$$

$$\mu = \mu_{\rm air} + (\mu_{\rm liquid} - \mu_{\rm air})\Phi \tag{14}$$

由以上定义可知密度和黏度系数跨流体界面平滑的变 化。因此,该模型能够跟踪流体界面并描述物理特性的变 化,如密度、黏度、接触角等。

3 实验方案(Experimental scheme)

为验证仿真结果,我们设计了如下实验。实验装置主要 由兰姆波发生设备和观测设备构成,如图3所示。本文中, 使用非压电材料(玻璃平板,规格:60mm×60mm×1mm) 作为基板,主要依靠胶粘在基板表面的压电换能器来激发兰 姆波,该换能器由PI陶瓷股份有限公司生产,采用极化锆钛 酸铅陶瓷(PZT,规格:4mm×2mm×1mm)制造。使用直 流稳压电源(ATTEN APS3005S-3D)、信号发生器(RIGOL DG1022U)和自制放大电路向压电陶瓷施加电信号激励兰姆 波。通过移液器将微升体积的液滴置于基板上,并位于兰姆 波的传播路径中。最后用高速摄像机(Keyence VM~600C)记 录液滴的运动。



图3兰姆波驱动液滴运动实验平台



4 结果与讨论(Results and discussion)

4.1 仿真模型验证

计算时间设置为0.2 s,时间步长为0.02 s,求解10 μL体 积液滴在声流力和表面张力作用下的瞬态行为,得到如图4(a) 所示的液滴运动过程仿真。图4(b)展示了作用于液滴的声流力 F_s ,声流力的大小在液滴内部沿x和z方向呈指数衰减,衰减程 度由 k_{imag} 的值决定,而 α_1 的值决定了声流力的方向,这与上文 理论分析的结果保持一致。图4(c)为利用高速摄像机记录的液 滴运动多帧合成图像。



(a)液滴运动全过程仿真



(b)液滴所受声流力的方向和衰减



(c)高速摄像机记录的液滴运动多帧合成图像

图4 声流力作用下液滴的运动全过程仿真和实验结果 Fig.4 Simulation and experimental results of the whole process of droplet movement under the action of acoustic streaming force

♠析液滴运动的全过程,发现液滴在基板表面运动时, 前后端的位移并不是同时发生的。液滴前端率先突破前进接 触角向前铺展,后端此时未发生位移。由于表面张力的存 在,液滴将被逐渐拉长,当液滴的形变达到一定程度之后, 液滴的后端才开始移动。当液滴后端接触线向上抬起时向前 移动,而此时的前端未达到前进接触角不发生移动,液滴将 呈现收缩状态。通过分析液滴位移的全过程,可以看出液滴 的整体形变表现为周期性的收缩一铺展振荡。实验和仿真结果 都较好地吻合了这一现象。但液滴的振荡频率远小于激励信 号的频率,这是由于高频的激励信号在液滴内部引起了快速 的流体流动^[18],液滴整体并不能及时响应高频激励。

此外,考虑到液滴物理属性对运动的影响,我们选择水 滴和油滴两种代表性的液体,对其在声流力作用下的位移特 性做了研究。水滴和油滴的物理属性如表1所示。为简化分 析,在本模型中只考虑水滴和油滴的密度ρ、动力黏度μ以及 表面张力σ三个物理属性之间的差异。如图5(a)和图5(c)所示为 仿真结果,在相同的时间内,水滴相对于油滴在基板表面获 得更大的移动距离,吻合如图5(b)和图5(d)所示的实验结果。 仿真结果和实验结果的一致性验证了该模型可用于求解不同 物理属性液滴在声流力作用下的位移特性。

表1 水和油在20℃时的材料参数

Tab.1 Material parameters of water and oil at 20 °C

物质	$ ho/{ m kg}\cdot{ m m}^{-3}$	$\mu/Pa \cdot s$	$\sigma/\mathrm{N}\cdot\mathrm{m}^{-1}$
水	1,000	0.001	0.072
油	1,260	0.046	0.063



图5水滴和油滴运动过程的仿真和实验对比

Fig.5 Simulation and experimental comparison of the motion process of water deplets and oil droplets 通过之前的研究发现,液滴的物理属性对位移特性有着显著的影响。进一步探究液滴某单一属性对运动位移的影响,很难在实验中通过控制变量的方法实现,因此本文合理

4.2 密度对液滴运动位移的影响

地采用了仿真分析作为这些问题的解决方案。

为探究水滴和油滴密度对运动位移的影响,保持其动力 黏度和表面张力不变,以水滴和油滴的密度为上下区间,在 模型中分别定义液滴的密度为1,000 kg·m⁻³、1,080 kg·m⁻³、 1,170 kg·m⁻³、1,260 kg·m⁻³进行计算。如图6所示为不同 密度下液滴的时间-位移曲线。

从图6(a)中可以看出,当液滴的动力黏度μ等于 0.001 Pa·s,表面张力σ等于0.072 N·m⁻¹时,密度对位 移具有一定的影响,密度小的液滴在基板上具有较大的位 移速度。而当液滴的动力黏度为0.046 Pa·s,表面张力为 0.063 N·m⁻¹时,密度对位移并没有显著的影响,如图6(b)所 示。从图6中可知,密度对运动位移特性的影响在两组动力黏 度和表面张力中表现出不一致性。



Fig.6 The displacement characteristics of droplets a different densities

4.3 动力黏度对液滴运动位移的影响

为探究水滴和油滴动力黏度对运动位移的影响,保持 其密度和表面张力不变,以水滴和油滴的动力黏度为上下 区间,在模型中分别定义液滴的动力黏度为0.001 Pa·s、 0.015 Pa·s、0.030 Pa·s、0.046 Pa·s进行计算。如图7所 示为不同动力黏度下液滴的时间-位移曲线。从图7中可以看 出,当液滴的密度和表面张力确定时,动力黏度的变化对液 滴的运动速度有显著的影响,其中动力黏度小的液滴具有更 大的运动速度和加速度。同时,在两组密度和表面张力不同 的液滴中,动力黏度对运动位移的影响具有一致性。





4.4 表面张力对液滴运动位移的影响

为探究水滴和油滴表面张力对运动位移的影响,保持 其密度和动力黏度不变,以水滴和油滴的表面张力为上下区 间,在模型中分别定义液滴的表面张力为0.063 N·m⁻¹、 0.066 N·m⁻¹、0.069 N·m⁻¹、0.072 N·m⁻¹进行计算。如 图8所示为不同表面张力下液滴的时间-位移曲线。从图8中可 知,油滴和水滴表面张力之间的差异对液滴运动位移的影响 基本可以忽略。



(D) 密度为1,200 kg·m, 动力 新度为0.040 Pa·s

Fig.8 The displacement characteristics of droplets a different surface tension

5 结论(Conclusion)

本文建立了两相流仿真模型,模拟了液滴在兰姆波作用 下的瞬态运动行为,且通过实验校验了仿真模型的正确性。 基于该仿真模型,我们对水滴和油滴的密度 动力黏度和表 面张力三个物理属性进行了探究,通过比较发现,动力黏度 是影响液滴位移距离和运动速度的五导因素。虽然密度对液 滴的运动速度有一定的影响,但其作用效果受限于液滴的动 力黏度,仅在低动力黏度的液滴中呈现。而水滴和油滴的表 面张力差异对液滴位移和运动速度的影响几乎可以忽略。以 上研究表明,该兰姆波驱动模型可用于分离不同动力黏度的 微流体,为该模型的实际应用提供了一定的理论指导。

参考文献(References)

- WINKLER A, HARAZIM S M, MENZEL S B, et al. SAW– based fluid atomization using mass-producible chip devices[J]. Lab on a Chip, 2015, 15(18):3793-3799.
- [2] 潘小山,刘芮形,王琴,等.声表面波传感器的原理及应用综述[]].传感器与微系统,2018,037(004):1-4.
- [3] FU Y Q, LUO J K, NGUYEN N T, et al. Advances in piezoelectric thin films for acoustic biosensors, acoustofluidics and lab-on-chip applications[J]. Progress in Materials Science, 2017, 89:31-91.
- [4] SHILTON R J, TRAVAGLIATI M, BELTRAM F, et al. Nanoliter-droplet acoustic streaming via ultra high frequency

surface acoustic waves[J]. Advanced Materials, 2014, 26(29):4941–4946.

- [5] ZHANG S P, LATA J, CHEN C, et al. Digital acoustofluidics enables contactless and programmable liquid handling[J]. Nature communications, 2018, 9(1):1–11.
- [6] SESEN M, DEVENDRAN C, MALIKIDES S, et al. Surface acoustic wave enabled pipette on a chip[J]. Lab on a Chip, 2017, 17(3):438-447.
- [7] LI L, WU E, JIA K, et al. Temperature field regulation of a droplet using an acoustothermal heater[J]. Lab on a Chip, 2021, 21(16):3184–3194.
- [8] ROUDINI M, NIEDERMEIER D, STRATMANN F, et al. Droplet generation in standing-surface-acoustic-wave nebulization at controlled air humidity[J]. Physical Review Applied, 2020, 14(1):014071.
- [9] SCHMITT M, STICH S, FROMM S, et al. Detection and removal of droplets on non-piezoelectric substrates via mode conversion of Lamb waves[C]. New York: IEEE, 2010:304–308.
- [10] LIANG W, LINDNER C. Investigations of droplet movement excited by Lamb waves on a non-piezoelectric substrate[J]. Journal of Applied Physics, 2013, 114(4):044501.
- [11] 丁文政梁威,朱鹏飞,等.基于兰姆波技术的倾斜凸透镜基板 上水滴运动研究[]].汽车技术,2020(7):6.
- [12] 关昭,梁威.基于兰姆波在倾斜镜子基板上的油水微分离实验].应用声学,2019,38(2):9.
- [13] 田昱鑫,梁威,丁文政,等.基于兰姆波在非压电基板驱动油滴运动的实验[J].压电与声光,2020,42(1):5.
- SHIOKAWA S, MATSUI Y, UEDA T. Liquid streaming and droplet formation caused by leaky rayleigh waves[C]. New York: IEEE, 1989:643-646.
- [15] SANKARANARAYANAN S K R S, CULAR S, BHETHANABOTLA V R, et al. Flow induced by acoustic streaming on surface-acoustic-wave devices and its application in biofouling removal: A computational study and comparisons to experiment[J]. Physical Review E, 2008, 77(6):066308.
- [16] JIAO Z J, HUANG X Y, NGUYEN N T. Scattering and attenuation of surface acoustic waves in droplet actuation[J]. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 2008, 41(35):355502.
- [17] SETHIAN J A. Level set methods and fast marching methods: Evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science[M]. Cambridge: Cambridge university press, 1999:89–92.
- [18] BRUNET P, BAUDOIN M, MATAR O B, et al. Droplet displacements and oscillations induced by ultrasonic surface acoustic waves: A quantitative study[J]. Physical Review E, 2010, 81(3):036315.

作者简介:

- 陈弘安(1997-),男,硕士生.研究领域: 声表面波激发器的应 用研究.
- 梁 威(1985-), 女, 博士, 副教授.研究领域: 声表面波传感 器与激发器的检测和控制.