

微通道内电渗压力混合驱动 幂律流体流动模拟*

罗艳¹, 李鸣², 杨大勇²

(1. 南昌大学 机电工程学院, 南昌 330031;
2. 南昌大学 信息工程学院, 南昌 330031)

摘要: 为了研究微通道内电渗压力混合驱动幂律流体的流动特性,建立了微通道内电渗压力混合驱动幂律流体的计算模型,其双电层电势、流体的流场分布分别由 Poisson-Boltzmann (P-B) 方程和 Navier-Stokes(N-S) 方程描述.讨论了无量纲 Debye(德拜)参数 K 、壁面 ζ^* 电势和幂律指数 n 对流体流动特性和 Poiseuille 数的影响.结果表明,当压力梯度与外加电场方向一致 ($\Gamma > 0$) 时,剪切变稀流体的速度大于剪切变稠流体;压力梯度与外加电场方向相反 ($\Gamma < 0$) 时,结果相反. Poiseuille 数是无量纲 Debye 常数 K 、壁面 ζ^* 电势和幂律指数 n 的增函数.

关键词: 微流体; 幂律流体; Poiseuille 数; 电渗流

中图分类号: O351.2 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2016.04.005

引 言

近年来,随着微细加工技术的快速发展,微机电系统和微流体技术引起了国内外学者的广泛关注.这些小型化、集成化的系统在不同的工程领域得到广泛运用,例如免疫分析^[1]、DNA 测序分析^[2]、生物医学检测和燃料电池的能量产生、传输^[3]等.

当微通道壁面与流体接触时,固体表面发生水解被极化,吸引溶液中的抗衡离子,这导致固、液界面附近溶液正、负离子数量存在差异,形成带净电荷的液体薄层,称为“双电层”^[4].由于双电层的存在,导致微通道内产生动电现象.目前,国内外学者对电渗驱动下微通道内流体的流动做了广泛研究.Xuan 和 Li^[5]得出了微通道中电渗流的通解,它适用于任意通道形状和壁面电势分布.Zimmerman 等^[6]通过有限元方法模拟了 T 型微通道内幂律流体的流动特性.Wang 等^[7]通过格子 Boltzmann(玻尔兹曼)方法研究了微通道内 Newton(牛顿)流体的流动特性,分析了流体的电黏性效应以及壁面 Zeta 电势的排布对混合效率的影响.Tang 等^[8-9]通过格子 Boltzmann 方法研究了微通道中电渗或压力驱动幂律流体的动电效应,分析了微通道高度和溶液浓度对流体流动特性的影响.Hadigol 等^[10-11]通过数值模拟研究了微通道中幂律流体电

* 收稿日期: 2015-11-25; 修订日期: 2015-12-21

基金项目: 国家自然科学基金(11302095)

作者简介: 罗艳(1990—),女,硕士生(E-mail: 13576997924@163.com);

杨大勇(1978—),男,副教授,博士(通讯作者. E-mail: dayongyang@ncu.edu.cn).

渗压力混合驱动时非均匀壁面电势和双电层 (electric double layer, EDL) 厚度对流体流动特性的影响,还分析了幂律指数和壁面电势对微通道内电渗幂律流体混合效应的影响。杨大勇等^[12]通过有限元方法数值模拟了微通道中电渗流及微混合的离子浓度效应,讨论了壁面电势、介电常数等参数对微通道内流场和浓度场的影响,定量分析了微混合效率。Babaie 等^[13-14]运用有限差分法研究了电渗压力混合驱动幂律流体的动电效应,分析了壁面电势、压力大小以及温度对流体特性的影响。

微流控系统中常用的驱动方式有电场驱动和压力驱动两种。压力驱动是微流控芯片发展初期应用最为广泛的驱动方法。压力驱动下的流体运动对生物样品影响小,驱动方式简单,有更好的生物兼容性,且适用于不同材料的管道,除高压条件下,不需要考虑热效应和管道变形等问题。随着微流控系统,尤其是生物芯片和芯片实验室技术的发展,压力驱动输送流体的方式不能满足人们的需求。由于电极制造、信号控制和集成技术的日益成熟,电场驱动流体的方式因其效率高,无需机械运动部件,成本低、运行可靠、寿命长,便于控制和系统集成等优点而广泛应用于微流控系统。一般情况下,在微通道中产生 $1 \sim 10 \text{ mm/s}$ 的电渗流平均速度需要施加大约 $100 \sim 1000 \text{ V/cm}$ 的直流电场^[15]。高电压的直流电场会在溶液中产生可观的 Joule (焦耳) 热。电场强度在 $100 \sim 300 \text{ V/cm}$ 的微通道内, Joule 热产生的能量密度可高达 1 kW/cm^3 ^[16]。Joule 热效应会降低电渗效率和毛细管分离质量,破坏生物样品活性或产生气泡,因此,在实际工程应用中常会结合电场和压力共同作为驱动力,不仅可以避免产生明显的热效应,减小对生物样品的影响,还可提高微器件的集成度便于控制。

本文主要研究电渗压力混合驱动幂律流体的流动特性,分析了无量纲 Debye 参数 K 、壁面 ζ 电势和幂律指数 n 对流体的黏度比及 Poiseuille 数的影响,对深入研究电渗与压力混合驱动微通道内溶液的分离与混合有指导意义。

1 数学模型

本文主要研究二维微通道内电渗压力混合驱动幂律流体的流动特性。图 1 为微通道示意图,微通道内存在压力梯度和外加电场,上、下壁面有 ζ 电势为 Ψ ,间距为 $2H$ 。

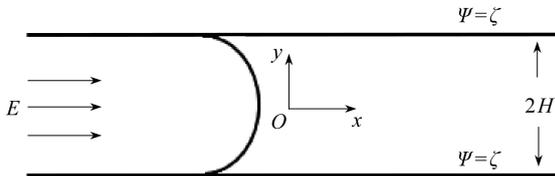


图 1 通道结构示意图

Fig. 1 Schematic of a 2D microchannel

2 理论基础

2.1 非 Newton 流体幂律模型

本文的研究对象为非 Newton 流体中典型的幂律流体。幂律流体的剪切应力定义为

$$\tau = \mu \frac{du}{dy}, \quad (1)$$

式中, u 为流体的流动速度, μ 为流体的黏度, 可表示为

$$\mu = m \left[\left(\frac{du}{dy} \right)^2 \right]^{(n-1)/2}, \quad (2)$$

式中, m 为流体的稠度系数, n 为流体的幂律指数. $n < 1$ 时, 是剪切变稀流体, 如血液、淋巴液等; $n > 1$ 时, 是剪切变稠流体, 如泥浆、油漆等; $n = 1$ 时, 是 Newton 流体, 如水、酒精等大多数纯液体.

2.2 控制方程

根据静电学理论, 微通道内的电势分布可由 Poisson 方程描述, 即

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho_e}{\varepsilon}, \quad (3)$$

式中, φ 为双电层 (EDL) 电势, ε 为流体的介电常数, ρ_e 为单位体积内的静电荷密度.

对称电解质溶液, 单位体积内的静电荷密度为

$$\rho_e = -2n_0 e z \sinh\left(\frac{ez\psi}{k_B T}\right), \quad (4)$$

式中, n_0 为离子浓度, e 为电子所带电量, z 为溶液中离子的化合价, k_B 为 Boltzmann 常数, ψ 为双电层电势, T 为绝对温度.

将方程 (4) 代入方程 (3) 中可得

$$\frac{d^2 \psi}{dy^2} = \frac{2n_0 e^2 z^2}{\varepsilon} \sinh\left(\frac{ez\psi}{k_B T}\right). \quad (5)$$

当微通道内存在温度梯度时, 会改变微通道横截面溶液的离子分布, 且会在微通道的轴向产生额外的压力梯度. 当微通道内的温度梯度小于 $10^{-2} \text{ K}/\mu\text{m}$ 时, 可以忽略温度对电势分布的影响, 产生的轴向压力梯度也可忽略不计^[17]. 本文模拟的通道中产生的热效应并不明显, 远小于 $10^{-2} \text{ K}/\mu\text{m}$, 因此可用平均温度 T_{av} 求解电场和静电荷密度.

为了便于计算分析, 引入 Debye 长度 λ_D 表示双电层的特征厚度:

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon k_B T_{av}}{2n_0 e^2 z^2}}. \quad (6)$$

根据动量守恒原理, 微通道内不可压缩幂律流体的运动满足 Navier-Stokes (N-S) 方程:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0, \quad (7)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{V}}{Dt} = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F}, \quad (8)$$

式中, \mathbf{V} 为速度矢量, $\boldsymbol{\tau}$ 为应力张量, \mathbf{F} 为体积力. 微通道内的流体在流动方向所受的体积力为 $\rho_e E$, E 为外加电场强度, $D(\cdot)/Dt$ 表示对时间求微分.

2.3 控制方程的无量纲化

本文采用的参考速度为 Helmholtz-Smoluchowski (H-S) 电渗速度, 幂律流体的电渗速度为

$$u_{HS} = n \lambda_D^{(n-1)/n} \left(-\frac{\varepsilon \zeta E_x}{m} \right)^{1/n}. \quad (9)$$

引入无量纲参数 Γ , 表示微通道内压力驱动流速度与电渗流速度之比

$$\Gamma = \frac{u_{pd}^n}{u_{HS}^n}, \quad (10)$$

式中, u_{pd} 表示压力驱动下微通道内幕律流体的最大速度, 满足

$$u_{\text{pd}}^n = \left(\frac{n}{n+1} \right)^n \left(-\frac{1}{m} \frac{dp}{dx} H^{n+1} \right), \quad (11)$$

式中, p 为微通道内施加的压力梯度.

为了减少计算量, 本文对上述方程进行无量纲化, 即

$$\begin{aligned} y^* &= y/H, \quad K = H/\lambda_D, \quad u^* = u/u_{\text{HS}}, \\ \zeta^* &= ez\zeta/(k_B T_{\text{av}}), \quad \psi^* = ez\psi/(k_B T_{\text{av}}), \\ A(y^*) &= [(du^*/dy^*)^2]^{(n-1)/2}. \end{aligned}$$

方程(5)、(8)的无量纲形式为

$$\frac{d}{dy^*} \left(\frac{d\psi^*}{dy^*} \right) - K^2 \sinh \psi^* = 0, \quad (12)$$

$$nA(y^*) \frac{d}{dy^*} \left(\frac{du^*}{dy^*} \right) = - \left(\frac{n+1}{n} \right)^n \Gamma - \frac{K^{n+1}}{n^n \zeta^*} \sinh \psi^*. \quad (13)$$

边界条件为

$$\psi_{y^*=1}^* = \zeta^*, \quad \left(\frac{d\psi^*}{dy^*} \right)_{y^*=0} = 0, \quad (14)$$

$$\left(\frac{du^*}{dy^*} \right)_{y^*=0} = 0, \quad (u^*)_{y^*=1} = 0. \quad (15)$$

2.4 流动参数

确定流体的速度场后, 可分析流体的水力学特性. 摩擦因数是分析流体水力学特性的常用参数, 其计算公式如下:

$$f = \frac{2\tau}{\rho u_{\text{HS}}^2}. \quad (16)$$

将方程(1)代入上式, 且将方程(16)两边乘以 Reynolds 数, 可得 Poiseuille 数:

$$P_o = fRe = 2 \left[\left(\frac{du^*}{dy^*} \right)^2 \right]_{y^*=1}^{n/2}, \quad (17)$$

式中

$$Re = \rho u_{\text{HS}}^{(2-n)} H^n / m.$$

另一个重要的参数是流体的黏度比, 表示微通道中某点处流体的黏度 μ 与壁面黏度 μ_w 的比值:

$$\frac{\mu}{\mu_w} = \frac{A(y^*)}{A(y^*)_{y^*=1}}. \quad (18)$$

3 结果分析

本文通过有限元方法(FEM)采用 COMSOL Multiphysics 软件模拟微通道内电渗压力混合驱动幂律流体的流动特性, 讨论施加正、反向压力梯度时无量纲 Debye 参数 K 、壁面 ζ^* 电势、 Γ 以及幂律指数 n 对流体流动特性的影响.

3.1 模型验证

图 2 为微通道内电渗流速度的数值解与文献[18]中速度解析解对比图.由图可知,两条速度曲线完全重合,验证了本文有限元模型的正确性.

3.2 无量纲参数分析

图 3 为微通道内施加不同方向压力梯度时流体的速度曲线.当压力梯度与外加电场方向一致时 ($\Gamma > 0$), 压力驱动速度与电渗驱动速度正向叠加增加流动速度, 且流动速度随着幂律指数 n 的增大而减小.当压力梯度与外加电场方向相反时 ($\Gamma < 0$), 压力驱动速度与电渗驱动速度反向叠加减小流动速度, 微通道内流体的流动速度随着 n 的增加而变大.根据方程(2)可知, 流体的黏度随着幂律指数 n 的增加而变大, 微通道内施加相同的压力梯度时, 压力驱动剪切变稀流体的速度大于压力驱动剪切变稠流体的速度.因此, 对于剪切变稀流体, 当 $\Gamma < 0$ 时, 微通道的中心部分出现回流.

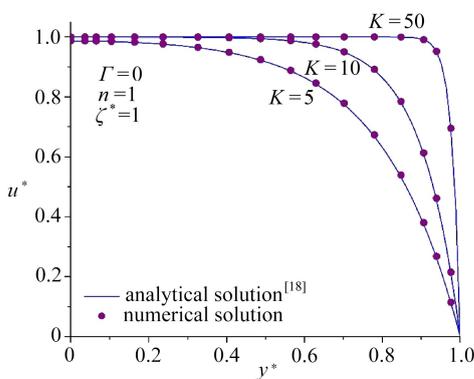


图 2 数值解与解析解的速度对比图

Fig. 2 Comparison of velocity profiles between analytical solution and numerical solution

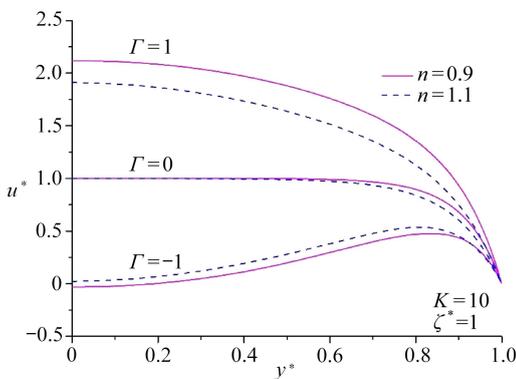


图 3 Γ 对流体速度分布的影响

Fig. 3 Velocity profiles for different values of Γ

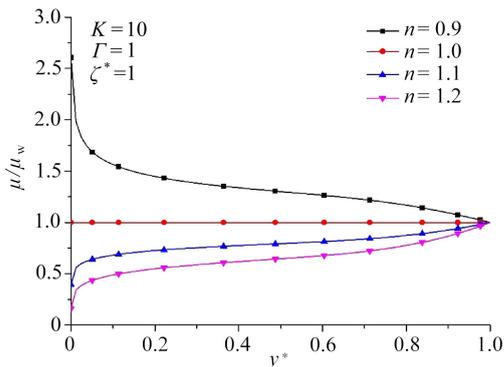


图 4 幂律指数 n 对流体黏度比的影响

Fig. 4 Variation of the viscosity ratio for different values of flow behavior index n

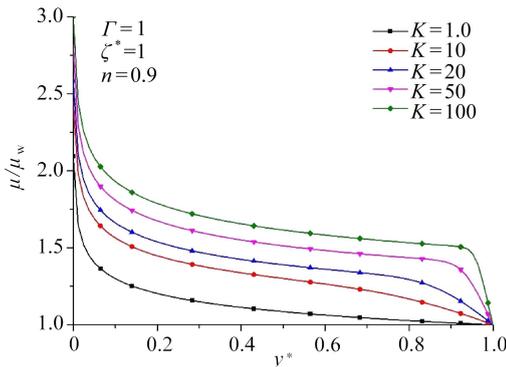


图 5 K 对流体黏度比的影响

Fig. 5 Variation of the viscosity ratio for different K values

图 4 为幂律指数 n 对微通道内流体黏度比的影响.由图可知,微通道内流体的黏度比随着幂律指数 n 的增大而减小.对于 $n < 1$ 的剪切变稀流体,通道中流体的黏度由中心线向壁面降低,黏度比减小;对于 $n > 1$ 的剪切变稠流体,结果则完全相反,流体黏度由中心线向壁面升

高,黏度比增大;当 $n = 1$ 时,流体为 Newton 流体黏度不变,所以黏度比为常数 1.由方程(2)可知,对于 $n < 1$ 的剪切变稀流体,流体的黏度是流体 y 方向速度梯度的减函数.图 3 表明,流体的速度梯度由壁面向中心线减小,所以流体的黏度由壁面向中心线升高,黏度比沿中心线向壁面减小.对于 $n > 1$ 的剪切变稠流体,流体的黏度是流体 y 方向速度梯度的增函数,所以流体的黏度由中心线向壁面增加,黏度比随之变大.

图 5 表明无量纲 Debye 参数 K 对流体黏度比的影响.由图可知,微通道内流体的黏度比随着 K 的增大而变大.当 $K < 20$ 时,沿中心线向壁面方向流体的黏度比变小,变化趋势平缓单调;当 $K > 50$ 时,微通道壁面附近流体的黏度比骤然变小.这是由于当 K 较小(如 $K = 1$) 时,微通道半高 H 与 EDL 特征厚度 λ_D 相等,微通道内产生均匀的电场力使得流体的速度由壁面向中心线逐渐增大,黏度随之由壁面向中心线处逐渐增大.当 $K = 100$ 时,EDL 很薄,集聚在壁面附近,EDL 内产生很大的速度梯度.对于 $n < 1$ 的剪切变稀流体,速度梯度越大流体的黏度越小,由式(18)可知,微通道壁面附近流体的黏度突然变小导致流体黏度比骤降.

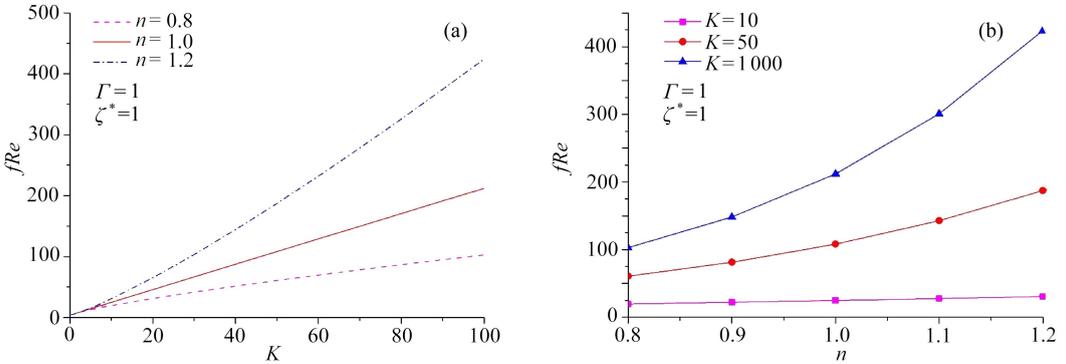


图 6 K 和 n 对 Poiseuille 数的影响

Fig. 6 Variations of the Poiseuille number with K and n

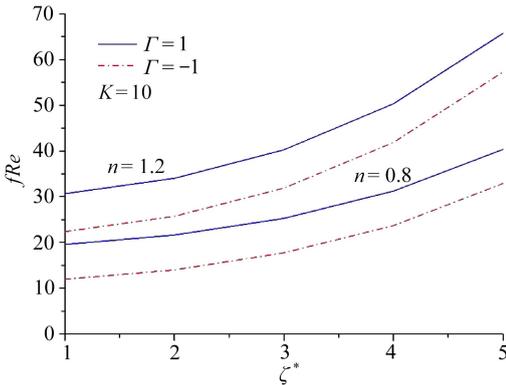


图 7 壁面 ζ^* 电势对 Poiseuille 数的影响

Fig. 7 Variation of the Poiseuille number with the ζ^* potential

图 6 表明无量纲 Debye 参数 K 和幂律指数 n 对 Poiseuille 数的影响.由图 6(a) 可知, Poiseuille 数随着 K 的增大而变大,且增长速度随着 n 的增大而加快.由方程(17)可知, Poiseuille 数是流体速度梯度的指数函数. K 变大,EDL 变薄会产生更大的速度梯度,导致 Poiseuille 数增大.此外,当 $K < 5$ 时, Poiseuille 数几乎不受幂律指数 n 的影响.这是由于 K 较小时,EDL 内的速

度梯度较小且幂律指数 n 的变化区间很小,故而 Poiseuille 数的变化不明显.同理,如图 6(b) 中 $K = 10$ 时,幂律指数 n 对 Poiseuille 数的影响很小,可以忽略不计.

图 7 表明当无量纲 Debye 参数 $K = 10$ 时, ζ^* 电势对 Poiseuille 数的影响.无论压力梯度与外加电场方向相同 ($\Gamma > 0$) 或相反 ($\Gamma < 0$), Poiseuille 数都随着壁面 ζ^* 电势的增加而变大,且增长趋势随着幂律指数 n 的增大而加快.增加壁面 ζ^* 电势使得壁面附近静电荷密度变大,产生更大的电场力,使 EDL 内流体的速度梯度增大、Poiseuille 数变大.此外,压力梯度与外加电场方向相反时的 Poiseuille 数小于压力梯度与外加电场方向一致时的 Poiseuille 数.

4 总 结

本文采用无量纲数学模型研究微通道中电渗压力混合驱动幂律流体的流动特性.考虑了无量纲 Debye 参数 K 、壁面 ζ^* 电势和流体的幂律指数 n 对流体的黏度比及 Poiseuille 数的影响.当压力梯度与外加电场方向一致 ($\Gamma > 0$) 时,剪切变稀流体的黏度比由中心线向壁面降低,而剪切变稠流体的黏度比变化趋势则相反;微通道内流体的黏度与壁面黏度的比值随着 K 的增加而变大.

Poiseuille 数是无量纲 Debye 参数 K 、壁面 ζ^* 电势和幂律指数 n 的增函数. Poiseuille 数随着 K 的增加而变大,且增长速度随着 n 的变大而加快.当 K 较小 ($K < 10$) 时,幂律指数 n 对 Poiseuille 数的影响很小,可以忽略不计.无论压力梯度与外加电场方向相同或相反, Poiseuille 数都随着壁面 ζ^* 电势的增加而变大,且增长趋势随着幂律指数 n 的增加而上升.压力梯度与外加电场方向相反时的 Poiseuille 数小于压力梯度与外加电场方向一致时的 Poiseuille 数.

参考文献 (References):

- [1] Cheng S B, Skinner C D, Taylor J, Attiya S, Lee W E, Picelli G, Harrison D J. Development of a multichannel microfluidic analysis system employing affinity capillary electrophoresis for immunoassay[J]. *Analytical Chemistry*, 2001, **73**(7): 1472-1479.
- [2] Buchholz B A, Doherty E A S, Albarghouthi M N, Bogdan F M, Zahn J M, Barron A E. Microchannel DNA sequencing matrices with a thermally controlled "viscosity switch"[J]. *Analytical Chemistry*, 2001, **73**(2): 157-164.
- [3] Choban E R, Markoski L J, Wieckowski A, Kenis P J A. Microfluidic fuel cell based on laminar flow[J]. *Journal of Power Sources*, 2004, **128**(1): 54-60.
- [4] 李战华, 吴健康, 胡国庆, 胡国辉. 微流控芯片中的流体流动[M]. 北京: 科学出版, 2012. (LI Zhan-hua, WU Jian-kang, HU Guo-qing, HU Guo-hui. *Fluid Flow in Microfluidic Chips*[M]. Beijing: Science Press, 2012. (in Chinese))
- [5] XUAN Xiang-chun, LI Dong-qing. Electroosmotic flow in microchannels with arbitrary geometry and arbitrary distribution of wall charge[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2005, **289**(1): 291-303.
- [6] Zimmerman W B, Rees J M, Craven T J. Rheometry of non-Newtonian electrokinetic flow in a microchannel T-junction[J]. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2006, **2**(6): 481-492.
- [7] Wang J, Wang M, Li Z. Lattice Poisson-Boltzmann simulations of electro-osmotic flows in microchannels[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2006, **296**(2): 729-736.
- [8] Tang G H, Li X F, He Y L, Tao W Q. Electroosmotic flow of non-Newtonian fluid in micro-

- channels[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2009, **157**(1/2): 133-137.
- [9] Tang G H, Ye P X, Tao W Q. Electroviscous effect on non-Newtonian fluid flow in microchannels[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2010, **165**(7/8): 435-440.
- [10] Hadigol M, Nosrati R, Raisee M. Numerical analysis of mixed electroosmotic/pressure driven flow of power-law fluids in microchannels and micropumps[J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2011, **374**(1/3): 142-153.
- [11] Hadigol M, Nosrati R, Nourbakhsh A, Raisee M. Numerical study of electroosmotic micromixing of non-Newtonian fluids[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2011, **166**(17/18): 965-971.
- [12] 杨大勇, 王阳. 微通道中电渗流及微混合的离子浓度效应[J]. 应用数学和力学, 2015, **36**(9): 981-989.(YANG Da-yong, WANG Yang. Effects of ion concentration on electroosmotic flow and micromixing in microchannels[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2015, **36**(9): 981-989.(in Chinese))
- [13] Babaie A, Sadeghi A, Saidi M H. Combined electroosmotically and pressure driven flow of power-law fluids in a slit microchannel[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2011, **166**(14/15): 792-798.
- [14] Babaie A, Saidi M H, Sadeghi A. Electroosmotic flow of power-law fluids with temperature dependent properties[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2012, **185/186**: 49-57.
- [15] Brown A B D, Smith C G, Rennie A R. Pumping of water with ac electric fields applied to asymmetric pairs of microelectrodes[J]. *Physical Review E*, 2000, **63**(1): 016305.
- [16] Mala G M, LI Dong-qing. Flow characteristics of water in microtubes[J]. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 1999, **20**(2): 142-148.
- [17] Vocale P, Geri M, Cattani L, Spiga M. Electro-osmotic heat transfer in elliptical microchannels under H1 boundary condition[J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2013, **72**: 92-101.
- [18] Zhao C, Zholkovskij E, Masliyah J H, Yang C. Analysis of electroosmotic flow of power-law fluids in a slit microchannel[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2008, **326**(2): 503-510.

Simulation of Mixed Electroosmotic and Pressure-Driven Flows of Power-Law Fluids in Microchannels

LUO Yan¹, LI Ming², YANG Da-yong²

(1. School of Mechanical & Electrical Engineering, Nanchang University,

Nanchang 330031, P.R.China;

2. Information Engineering School, Nanchang University,

Nanchang 330031, P.R.China)

Abstract: The pressure effects on electroosmotic flows of power-law fluids in microchannels were investigated. The electric double layer (EDL) potential was described with the Poisson-Boltzmann (P-B) equation, and the flow field distribution of the power-law fluid was characterized with the Navier-Stokes (N-S) equation. Numerical simulation was carried out to discuss the influences of the dimensionless Debye-Huckel parameter, the wall Zeta potential and the flow behavior index on the flow properties and the Poiseuille number. The results reveal that, in the case of the same pressure gradient direction with the electric field direction, the velocity of a shear-thinning fluid is higher than that of a shear-thickening one, whereas the result will be opposite for a reverse pressure gradient direction. The Poiseuille number is an increasing function of the dimensionless Debye-Huckel parameter, the Zeta potential and the flow behavior index.

Key words: microfluidics; power-law fluid; Poiseuille number; electroosmotic flow

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(11302095)

引用本文/Cite this paper:

罗艳, 李鸣, 杨大勇. 微通道内电渗压力混合驱动幂律流体流动模拟[J]. 应用数学和力学, 2016, 37(4): 373-381.

LUO Yan, LI Ming, YANG Da-yong. Simulation of mixed electroosmotic and pressure-driven flows of power-law fluids in microchannels[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2016, 37(4): 373-381.