



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ENERGETICKÝ ÚSTAV

ENERGY INSTITUTE

**MODELOVÁNÍ DVOUFÁZOVÉHO PROUDĚNÍ
BUBLIN V MIKROFLUIDICE**

MODELING TWO-PHASE BUBBLE FLOW IN MICROFLUIDICS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Martin Stehlík

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. Pavel Rudolf, Ph.D.

BRNO 2017

Zadání diplomové práce

Ústav: Energetický ústav
Student: **Bc. Martin Stehlík**
Studijní program: Strojní inženýrství
Studijní obor: Fluidní inženýrství
Vedoucí práce: **doc. Ing. Pavel Rudolf, Ph.D.**
Akademický rok: 2016/17

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č. 111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Modelování dvoufázového proudění bublin v mikrofluidice

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

V mikrofluidických zařízeních se často vyskytuje proudění s bublinkami. Bublínky slouží pro promíchávání nebo řízení proudění. Jednou z možností výzkumu je aplikace výpočtových simulací CFD.

Cíle diplomové práce:

Cíle diplomové práce:

- rešerše využití bublinek a jejich proudění v mikrofluidických zařízeních
- přehled metody Volume of Fluid (VoF) pro simulaci vícefázového proudění
- aplikace metody VoF na proudění bublinky v mikrokanálu T-rozvětvení, vyhodnocení vlivu výpočtové sítě, povrchového napětí
- 2D i 3D simulace
- zhodnocení, závěr

Seznam literatury:

KARNIADAKIS, G.E., A. BESKOK a N. ALURU. Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation. 1. Springer, 2005.

HOANG, D.A., V. VAN STEIJN, L.M. PORTELA, M.T. KREUTZER a C.R. KLEIJN. Benchmark numerical simulations of segmented two-phase flows in microchannels using the Volume of Fluid method. Computers & Fluids. 2013, 86(5), 28-36.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2016/17.

V Brně, dne 7. 11. 2016



doc. Ing. Jiří Pospíšil, Ph.D.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

Abstrakt

Práce se zabývá simulací bublin v mikrokanálku a nastaveními, která ovlivňují jejich parametry. První část je věnována rešerši využití mikrofluidních bublin, mikromíchadel a tvorbě kapiček. Druhá část se zabývá simulací tvorby bublin metodou cross flowing. Jsou zde popsána různá nastavení v simulačním programu Fluent. Dále je popsán vliv povrchového napětí na bublinku a ovlivnění její délky rychlostí na vstupu do T-kanálku.

Abstract

The goal of submitted thesis is to perform a computer simulation of bubble creation in T-channel. In the first section of the paper, the theoretical applications of microfluidic bubble, micromachines and droplet formation are described. In the second part of the text, author uses cross flowing method for simulation of bubble creation. Furthermore, several settings in computer simulation software Fluent are mentioned. In addition, the influence of velocity at the T-channel inlet on surface tension and on bubble length is presented.

Klíčová slova

Mikrofluidika, dvoufázové proudění, Reynoldsovo číslo, kapilární číslo, mikromísiče, pasivní mísení, mikrokanál, bubliny, Fluent, cross-flowing

Key words

Microfluidics, two-phase flow, Reynolds number, capillary number, micromixers, passive mixing, microchannel, bubble, Fluent, cross-flowing

Bibliografická citace mé práce:

STEHLÍK, M. *Modelování dvoufázového proudění bublin v mikrofluidice*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2017. 59 s. Vedoucí diplomové práce doc. Ing. Pavel Rudolf, Ph.D..

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci na téma „Modelování dvoufázového proudění bublin v mikrofluidice“ vypracoval samostatně pod vedením doc. Ing. Pavel Rudolf, Ph.D. a s použitím odborné literatury uvedené v seznamu.

V Brně dne:

Bc. Martin Stehlík

PODĚKOVÁNÍ

Rád bych chtěl tímto velmi poděkovat svému vedoucímu práce panu doc. Ing. Pavlu Rudolfovi, Ph.D. za cenné připomínky, rady a odborné vedení této diplomové práce. Dále bych chtěl poděkovat všem, kteří mi byli při vypracování diplomové práce nápomocni.

Obsah

1. Úvod	15
2. Využití mikrofluidních kapiček	16
2.1 Podávání léků.....	16
2.2 Molekulární detekce.....	16
2.3 Zobrazovací analýzy.....	17
3. Dvoufázové proudění	18
3.1 Fázové rozhraní.....	18
3.1.1 Koheze kapaliny.....	18
3.1.2 Povrchové a mezifázové napětí.....	18
3.2 Bezrozměrné veličiny.....	19
4. Mikromíchadla	21
4.1 Pasivní míchání.....	21
4.1.1 T-tvar a Y-tvar.....	21
4.1.2 Paralelní laminace.....	22
4.1.3 Sekvenční laminace.....	23
4.1.4 Vícefázová mikrofluidika a (mikro) kapičkové mísiče.....	23
4.2 Aktivní míchání.....	25
5. Tvorba kapiček	26
5.1 Vznik kapiček v T-kanálku.....	26
5.2 Další způsoby vzniku kapiček.....	27
5.2.1 Flow focusing.....	27
5.2.2 Co-flowing.....	28
5.2.3 Straight through.....	28
6. Volume of fluid	30
6.1 Implicitní řešení.....	31
6.2 Explicitní řešení.....	31
6.2.1 Volba rozhraní.....	32
6.2.1.1 Geo-reconstruct.....	33
6.2.1.2 Compressive.....	33
6.2.1.3 CICSAM.....	33
6.2.1.4 HRIC.....	34
6.3 Rovnice hybnosti.....	34
6.4 Povrchové napětí.....	34
6.4.1 Model CSF a CSS.....	35
6.4.2 Adheze stěn.....	35
7. Simulace bublinky ve 2D	36
7.1 Rovný kanálek.....	36
7.1.1 Tvorba geometrie a sítě.....	36
7.1.2 Nastavení numerického řešiče ANSYS Fluent.....	36
7.1.3 Určení velikosti časového kroku.....	37
7.1.3 Volba diskretizačního schématu.....	38

7.1.4 Nastavení kontaktního úhlu	39
7.1.5 Význam velikosti buněk výpočetní sítě na tloušťku rozhraní	40
7.1.6 Proudění uvnitř bublinky	40
7.2 T-kanálek.....	43
7.2.1 Tvorba geometrie a sítě.....	43
7.2.2 Okrajové podmínky a nastavení ve Fluentu	44
7.2.3 Volba diskretizačního schématu	45
7.2.4 Simulace pomocí geometrického schématu.....	46
7.2.5 Změna rychlostí na vstupu	48
7.2.6 Ovlivňování tvorby bublinky.....	51
8. Simulace bublinky v T-kanálku ve 3D	53
8.1 Tvorba geometrie a sítě.....	53
8.2 Výpočet ve Fluentu a postprocessing.....	53
9. Závěr	55
Seznam použitých zdrojů.....	57
Seznam příloh	59

1. Úvod

V uplynulém desetiletí došlo ke zvýšenému zájmu o chemické reakce a vývoj zařízení na kontrolu a řízení proudu kapalin v mikroměřítku. Tímto problémem se zabývá řada vědních oborů včetně fyziky, elektrotechniky a biologie. Emulze jsou často využívány v produktech osobní péče nebo v potravinářství, avšak v těchto odvětvích nejsou zapotřebí malé kapičky o objemu mikro litrů. Vyšší požadavky jsou kladeny například na mikroreaktory pro vysoce účinnou katalýzu a chemické syntézy nebo na diagnostické testování. Většina laboratorních testů je zrychlena použitím malého množství vzorků a činidel. Často se reakční doba sníží z hodin na sekundy nebo i méně. [1] [2] [3]

V práci jsou shrnuty základní metody mikromísíčů a jejich využití v praxi. Dále se práce zabývá metodami tvorby kapiček (bublinek) v mikrofluidním kanálku. Je popsán model Volume of Fluid (VOF), kterým se modeluje dvoufázové proudění, jeho nastavení a jednotlivá diskretizační schémata.

Předkládaná práce se zabývá modelováním bublinek v mikrokanálku. Simulace jsou provedeny v programu ANSYS Fluent 17.2. Vytváření simulací přispívá ke snižování nákladnosti vývoje a zároveň k jeho zrychlení. Cíl práce je vybrat nejlepší diskretizační schéma na modelování rozhraní mezi fázemi pro model VOF. Dále porovnat jednotlivá nastavení počtu buněk výpočetní sítě a jejich vliv na tvorbu a tloušťku rozhraní. Budou popsány jednotlivá nastavení jako například kontaktní úhel a časový krok a jejich důležitost na výpočet a tvorbu bublinky. Simulace budou provedeny ve 2D i ve 3D.

2. Využití mikrofluidních kapiček

Kapičková (bublínková) mikrofluidika je součástí mikrofluidiky, kde jsou kapičky využívány k přepravě a jako oddělené prostory (mikroreaktory) na sledování reakcí. [1] [2]

Poslední dvě desetiletí se výzkum mikrofluidiky zabývá výhodami, které vyplývají z jedinečného chování tekutin v mikroměřítku. Mikrofluidní kapičky mění dosavadní způsob provádění chemických analýz a s nimi související vybavení. Zlepšují nejen rozsah analýz a jejich citlivost, ale díky velice malému množství používaných látek snižují spotřebu analyzovaných vzorků a potřebných chemických a biologických činidel. Toto je velká výhoda při práci se vzácnými nebo cennými vzorky. Malé množství je také velkou výhodou při manipulaci s nebezpečnými látkami a chemickými reakcemi. Díky rychlému generování bublinek (vysoká rychlost tvorby bublinek v řádech kHz) se zároveň snižuje i potřebný čas na provedení analýzy a různých operací. Díky malým rozměrům je možná analýza jednotlivých buněk nebo dokonce jednotlivých molekul. [1] [2]

Další výhodou mikrofluidních systémů je možnost sledování a kontroly probíhající reakce přidáním činidel v přesných časových intervalech během reakčního procesu. Kromě toho se mikrofluidní kapičky používají jako mikroreaktory s objemem mikro až femto litrů na přímou syntézu částic a uzavření biologických látek pro biomedicínské a biotechnologické aplikace. [1] [2]

2.1 Podávání léků

V medicíně podávání některých léčivých látek ve formě mikrofluidních kapiček má pozitivní vliv na biologickou dostupnost podávaného léku, to znamená na průnik léčiva z místa, kam bylo léčivo podáno (např. z trávicího traktu) do krevního oběhu a jeho následný transport krví k místu účinku. Tedy intenzita účinku je závislá na množství léčiva, které se dostane do krevního oběhu. Typickým příkladem jsou léky obsahující proteiny, které se z trávicího traktu vstřebávají velmi obtížně. Forma mikrofluidních kapiček tento transport výrazně zlepšuje. [2]

Dalším příkladem je umožnění podávání tuků při nutnosti dlouhodobé parenterální výživy (aplikace do žíly), kdy pacient není schopen přijímat potravu ústy. Kontrolováním velikosti kapiček dále můžeme ovlivňovat uvolňování léků a tím řídit přesné dávkování. [2]

2.2 Molekulární detekce

Mikrofluidní kapičky jsou velkým přínosem pro molekulární detekci. Nahradily stávající těžkopádné laboratorní pokusy zmenšením laboratorních systémů. Kapičkové mikrofluidní systémy jsou používány na analytické detekce za použití několika různých technik na analýzy obsahu kapiček. Jsou to například obrazové analýzy, laserová molekulární spektrometrie, kapilární elektroforéza, hmotnostní spektrometrie a jiné. [2]

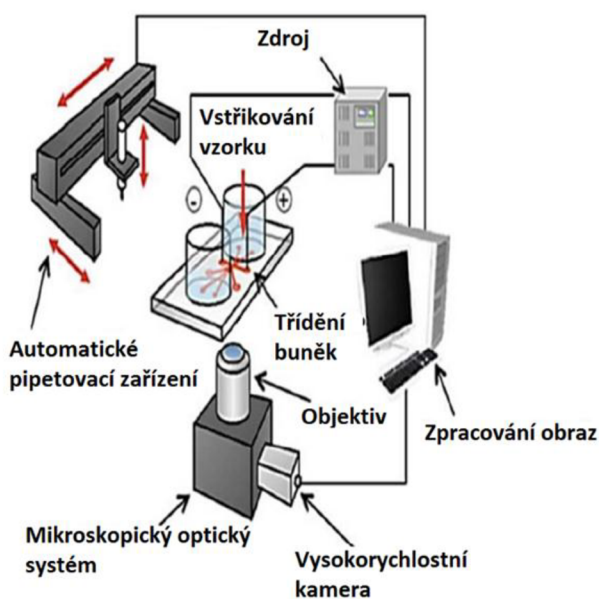
Detekce jednotlivých molekul slouží ke zkoumání fyzikálních vlastností biologických makromolekul a k extrahování genetické informace z DNA. Mnoho proteinových biomarkerů využívaných na sledování například postupu onemocnění jsou v komplexních vzorcích při nízkých koncentracích. Proto je v makroměřítku skoro nemožné tyto jednotlivé molekuly izolovat a analyzovat. Kapičky usnadňují manipulaci molekul a tím zlepšují citlivost experimentů. [2]

2.3 Zobrazovací analýzy

Stále více narůstá použití zobrazovacích analýz ve výzkumu a klinických diagnózách. Pro zobrazovací techniky je nejdůležitější kontrastní látka a její viditelnost. Tím se zvýší jasnost a kvalita pořízeného obrazu. [1]

Jednou ze základních zobrazovacích metod v biochemii je využití mikrofluidních kapiček na měření fluorescence za použití fluorescenčního mikroskopu s kamerou na zachycení jednotlivých kapiček. Fluorescence je jev, který spočívá v absorbování energie světla molekulou o určité vlnové délce. Takto získanou energii prakticky okamžitě ztratí ve formě záření v delší vlnové délce. Fluorescence je způsobován molekulou zvanou Fluorofor. Molekuly Fluoroforu jsou připojeny k makromolekule, která je například protilátkou. Zářením Fluoroforu lze sledovat kde daná protilátka působí. [1]

Na měření aktivit enzymů v jednotlivých buňkách bylo vyvinuto zařízení, které je založeno na stochastickém uzavření buněk do kapičkového mikroreaktoru o velikosti několika pikolitřů. Tento postup vede k rychlejší akumulaci Fluoroforů a tím ke snížení analyzačního času. Fluorescenční mikroskop s kamerou se také používá na zachycení prostorového rozložení a množství molekul v kapičce. Tím lze zjistit změnu tvaru, velikosti a intenzity fluorescence v buňce. [1]



Obr. 1 Schéma zařízení na uzavření jednotlivých buněk do kapiček a analyzování jejich životaschopnosti pomocí vysokorychlostní kamery [1]

3. Dvoufázové proudění

Dvoufázové proudění je proudění dvou fází (nemísitelných kapalin nebo kapalina-plyn), mezi kterými vzniká rozhraní. V porovnání s jednofázovým prouděním má dvoufázové proudění mnoho výhod například v lepším kontrolování a analýze jednotlivých látek a molekul nebo v mísení dvou kapalin. Dvoufázové proudění je ovlivňováno mnoha vlivy. Mezi nejdůležitější patří vlastnosti obou kapalin, jako jsou například setrvačné a viskózní síly a povrchové napětí. Dále to mohou být podmínky proudění, jako je rychlost obou fází nebo jestli je proudění laminární či turbulentní, nebo geometrie kanálku, ve kterém fáze proudí. [3]

3.1 Fázové rozhraní

3.1.1 Koheze kapaliny

Kapalina je držena vcelku kohezními silami. Kohezní síly jsou vyvolány souhrou přitažlivých a odpuzivých sil mezi molekulami. Tyto síly je možno stanovit z experimentu. Vztaženy na jednotku plochy se kohezní síly dají vyjádřit jako kohezní tlak. Částice držené u sebe hlavně van der Waalsovými silami mají malý kohezní tlak (za běžných podmínek 200-400 MPa). Pokud jsou molekuly drženy pohromadě dalšími silami, například u vody vodíkovými můstky a elektrostatickým působením, je hodnota kohezního tlaku mnohem vyšší (voda má přes 2000MPa). Mají-li dvě tekutiny podobné mechanismy kohezních sil a velikost kohezních tlaků, jsou mísitelné. Naproti tomu se vytváří mezi nemísitelnými tekutinami fázové rozhraní. [4]

3.1.2 Povrchové a mezifázové napětí

Pokud je ve dvoufázovém proudění druhým médiem plyn, je napětí mezi těmito dvěma médii nazýváno povrchové napětí (σ), což je vlastnost daného rozhraní. Na povrchu je radiální síla, která působí směrem do bublinky a tím zvětšuje tlak na vnitřní straně. Rozdíl tlaků lze popsat Laplacovou-Youngovou rovnicí (1), což je mechanická rovnováha na zakřiveném fázovém rozhraní. [4]

$$\Delta p = \sigma \cdot \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (1)$$

Δp je rozdíl tlaků mezi fázemi [Pa], R_1 a R_2 jsou hlavní poloměry křivosti [m], σ je povrchové napětí [N/m]

Povrchové napětí působí na povrch bublinky zmenšením plochy rozhraní. Bublinky mají tvar kuliček, protože koule má nejmenší povrch k jejímu objemu. Povrchové napětí závisí na teplotě. [4] [5]

V případě, že jde o dvě nemísitelné kapaliny se veličina σ bude nazývat mezifázové napětí. Mezifázové napětí se liší od povrchového napětí, tím že závisí na složení obou fází. O silách u fázového rozhraní bude rozhodovat především fáze s vyšším kohezním tlakem. [4]

	t [°C]	σ [mN/m]
Voda - vzduch	20	73
	100	58
ethanol - vzduch		22
voda - hexan		51
voda - tetrachlormetan		45
voda - benzen		35
voda - oktanol		8,5

Tabulka 1
Přehled povrchových napětí některých látek [4]

3.2 Bezrozměrné veličiny

Bezrozměrné veličiny jsou důležité pro charakteristiku kapalin dvoufázového proudění a pro jeho vlastnosti.

Reynoldsovo číslo je jednou z nejdůležitějších bezrozměrných veličin, které nám udává poměr mezi silami setrvačnými a viskózními. [3]

$$Re = \frac{\rho \cdot v \cdot D}{\mu} \quad (2)$$

ρ je hustota kapaliny [kg/m^3], v je rychlost kapaliny v kanálku [m/s], D je hydraulický průměr [m], μ je dynamická viskozita [$\text{Pa}\cdot\text{s}$], Re je Reynoldsovo číslo [-]

Bondovo číslo je další důležitou bezrozměrnou veličinou, které udává vztah mezi gravitační silou a povrchovým (mezifázovým) napětím. V mikroměřítku jsou Reynoldsovo a Bondovo číslo velice malé (někdy $Re, Bo < 1$). [3]

$$Bo = \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot D^2}{\sigma} \quad (3)$$

$\Delta\rho$ je rozdíl hustot kapalin [kg/m^3], g je gravitační zrychlení [m/s^2], Bo je Bondovo číslo (0,07) [-] [3]

Kapilární číslo je v mikrofluidice velice důležité, jelikož zde převažují mezifázové a viskózní síly. Kapilární číslo představuje relativní vliv viskózních sil na povrchové (mezifázové) napětí. [3]

$$Ca = \frac{\mu \cdot v}{\sigma} \quad (4)$$

Další skupinou bezrozměrných veličin je založena na Reynoldsově a kapilárním čísle. Nazývají se Ohnesorgovo číslo a Weberovo číslo. Ohnesorgovo číslo udává význam viskózních sil k setrvačným silám a povrchovému napětí. Zatímco Weberovo číslo porovnává setrvačné účinky na povrchové napětí. [3]

$$Oh = \left(\frac{Ca}{Re}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\mu}{(\rho \cdot d \cdot \sigma)^{\frac{1}{2}}} \quad (5)$$

$$We = Ca \cdot Re = \frac{\rho \cdot v^2 \cdot D}{\mu} \quad (6)$$

Poslední skupinou jsou veličiny, které souvisejí s vlastnostmi tekutin a provozními podmínkami, včetně poměru hustoty, viskozity a průtoku. [3]

$$\alpha = \frac{\rho_c}{\rho_d} \quad (7)$$

$$\beta = \frac{\mu_c}{\mu_d} \quad (8)$$

$$\varphi = \frac{Q_c}{Q_d} \quad (9)$$

Q je průtok [ml/h], dolní indexy c kontinuální a d disperzní fázi. Kontinuální fáze znamená, že je to kapalina, do které se tvoří kapička (kapičku obklopuje). Disperzní fáze je kapalina tvořící kapičku. [3]

4. Mikromíchadla

Mísení pracovních látek, ke kterému dochází v kapičkách není jediná metoda promísení kapaliny v mikrofluidice. Existuje spousta variant a různých geometrií k promísení látek v mikroměřítku. Řada výhod byla již popsána v předchozí kapitole. Kvůli neexistenci turbulentního proudění je zde celá řada nevýhod. Avšak stále více tekutin je testováno v mikrofluidním prostředí, a tím se poskytují možnosti dalšího zpracování. U laminárního proudění se částice pohybují ve vrstvách, jelikož rychlosti nemají flukтуаční složku a tím nedochází k přemísťování částic napříč průřezem. U turbulentního proudění dochází k přestupu částic mezi vrstvami, ale laminární proudění se dá mnohem jednodušeji popsat matematickými rovnicemi. Laminární proudění je proto lépe předvídatelné a tím se kontrola a rychlost míchacího procesu stále zlepšuje. Tyto výhody mohou být použity u rychlých kinetických reakcí nebo pro řešení nestabilních meziproductů látek. Také je umožněno zachycování nestabilních meziproductů během rychlé chemické nebo biochemické reakce. [6] [7] [8] [9] [10] [11]

Míchání v makro-měřítku je realizováno většinou turbulentním prouděním, kde je velké Reynoldsovo číslo ($Re > 2320$). Avšak v mikro-měřítku je toto číslo příliš malé na to, aby zde docházelo k turbulentnímu proudění, a proto se uvažuje pouze laminární proudění. Míchání v mikro-měřítku je rozděleno do dvou základních podskupin: pasivní a aktivní. [6] [7] [8] [9] [10] [11]

4.1 Pasivní míchání

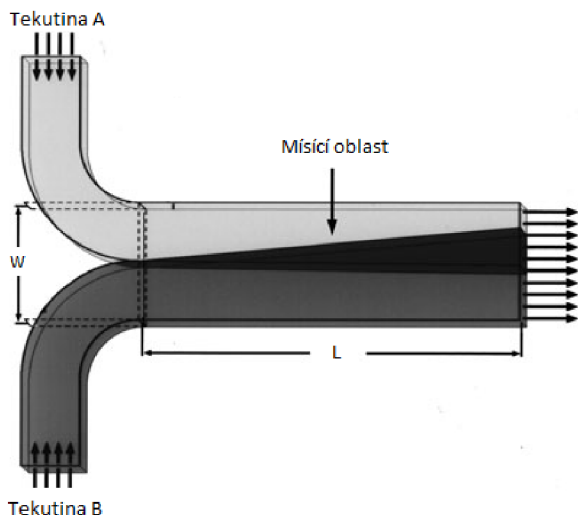
Pasivní míchání spoléhá na energii uvnitř proudění, která je daná tvarem a konstrukcí kanálku. Tyto konstrukce nemají žádné pohyblivé části a nevyžadují žádnou externí energii. Tato zařízení jsou navržena tak, aby docházelo k míchání za pomoci geometrie kanálku. Základní princip je rozdělení toku kapaliny do dvou dalších toků. Tím se zvětší jejich kontaktní plocha a sníží délka difúze. Zároveň se v ohybech vytvoří rotující proud (vír), který pomáhá při promíchání. Principy pasivního míchání jsou například:

- T-tvar a Y-tvar
- paralelní laminace
- sekvenční laminace
- vícefázová mikrofluidika a kapičkové mísiče

[8] [9] [10]

4.1.1 T-tvar a Y-tvar

Nejjednodušší konstrukce mikro-míchadel je T a Y tvar kanálků. Principem míchání dvou látek v tomto typu konstrukce je spojení dvou proudů kanálku do jednoho, kde jsou následně vzájemným kontaktem promíchány. Avšak díky jednoduché konstrukci je míchání závislé na vzájemné difuzivitě látek. Účinnost míchacího procesu lze zvýšit úpravou kanálku, jako například přidáním překážky nebo zdrsňením stěn kanálků. Snížení potřebného času k promíchání, lze také dosáhnout zvýšením rychlosti tekutiny nebo zúžením kanálku. Tím dosáhneme vyššího Reynoldsova čísla a zkrácení délky difúze. [8] [9] [10]



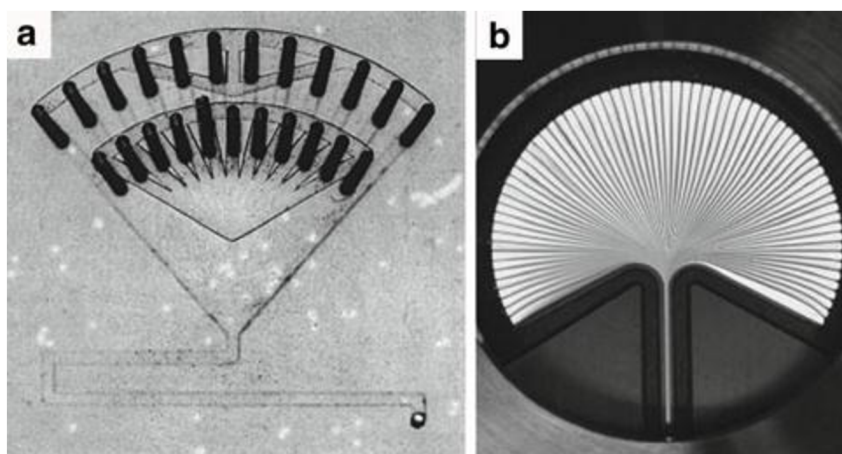
Obr. 2 T-tvar se dvěma vstupy, kde se smíchávají dvě tekutiny (A a B). L je délka kanálku a w je šířka [upraveno dle 9]

4.1.2 Paralelní laminace

Paralelní laminace je vylepšení T a Y tvaru využitím složitější konstrukce. Rozdělením základního přívodního proudu do n podproudů a jejich opětovného spojení do jednoho proudu, se vylepší míchací proces. U tohoto typu mísiců se mísící proces zlepšuje v závislosti na snížení délky difuze a zvětšení plochy pracovních látek. Paralelní laminace se dá dosáhnout dvěma způsoby uspořádání přívodů. Tyto dvě uspořádání jsou známé pod názvy bifurkace a interdigitální uspořádání. [8] [9] [10]

Bifurkace se vyznačuje střídavým uspořádáním přívodů. Tyto přívody jsou spojeny přes inverzní bifurkační kanál, na který dále navazuje složený mísící kanál, ve kterém dochází k samotnému mísení. Pro bifurkaci bylo dokázáno, že mísení je dokončeno za 100ms, avšak 95% míchání je dokončeno za 40ms. [8] [9] [10]

Paralelní tok interdigitálním typem kanálku je používanějším konceptem než bifurkace. Je podobný jako bifurkace, ale na rozdíl od bifurkace je tento typ založený na tlakové ztrátě. Viz obr. 2 b k tlakové ztrátě dojde po propojení více kanálků do jednoho a tím dojde ke snížení délky difuze. [8] [9] [10]

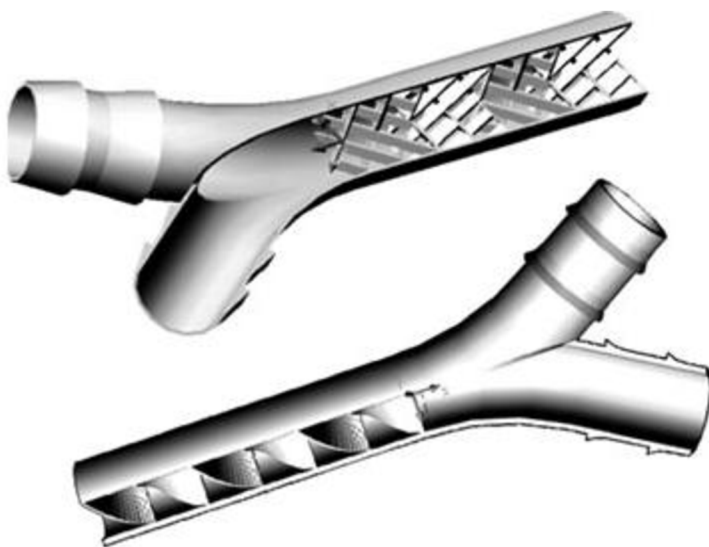


Obr. 2 Zařízení využívající paralelní laminaci
(a) bifurkace
(b) interdigitální uspořádání [9]

Další zajímavý koncept je kruhový mísič, který je založen na několika vstupech. Tyto vstupy jsou umístěny téměř tečně na kruhovou směšovací komoru. Po vstříknutí tekutiny do vstupů se díky vlastní rotaci kapaliny vytvoří vír. Tento typ mísiče měl vynikající výkonnost při nízkých ($Re=4$) i při vysokých ($Re=150$) Reynoldsových číslech. [8] [9] [10]

4.1.3 Sekvenční laminace

Stejně jako paralelní laminace používá sekvenční laminace ke snížení potřebného mísičního času zvětšení plochy pracovních látek a snížení délky difuze. Tato metoda je známa pod zkratkou SAR (split-and-recombine). Rozdíl mezi těmito typy je v metodě potřebné k dosažení laminace kapaliny. Již z názvu plyne, že podstatou laminace je po sobě jdoucí rozdělování a opětovné spojování proudu. Toho lze dosáhnout vložením šikmých prvků do kanálku. Její největší účinnost je při malých Reynoldsových číslech. Nevýhodou SAR je náročnost výroby zařízení, kde je požadována 3D struktura. [8] [9] [10] [11]

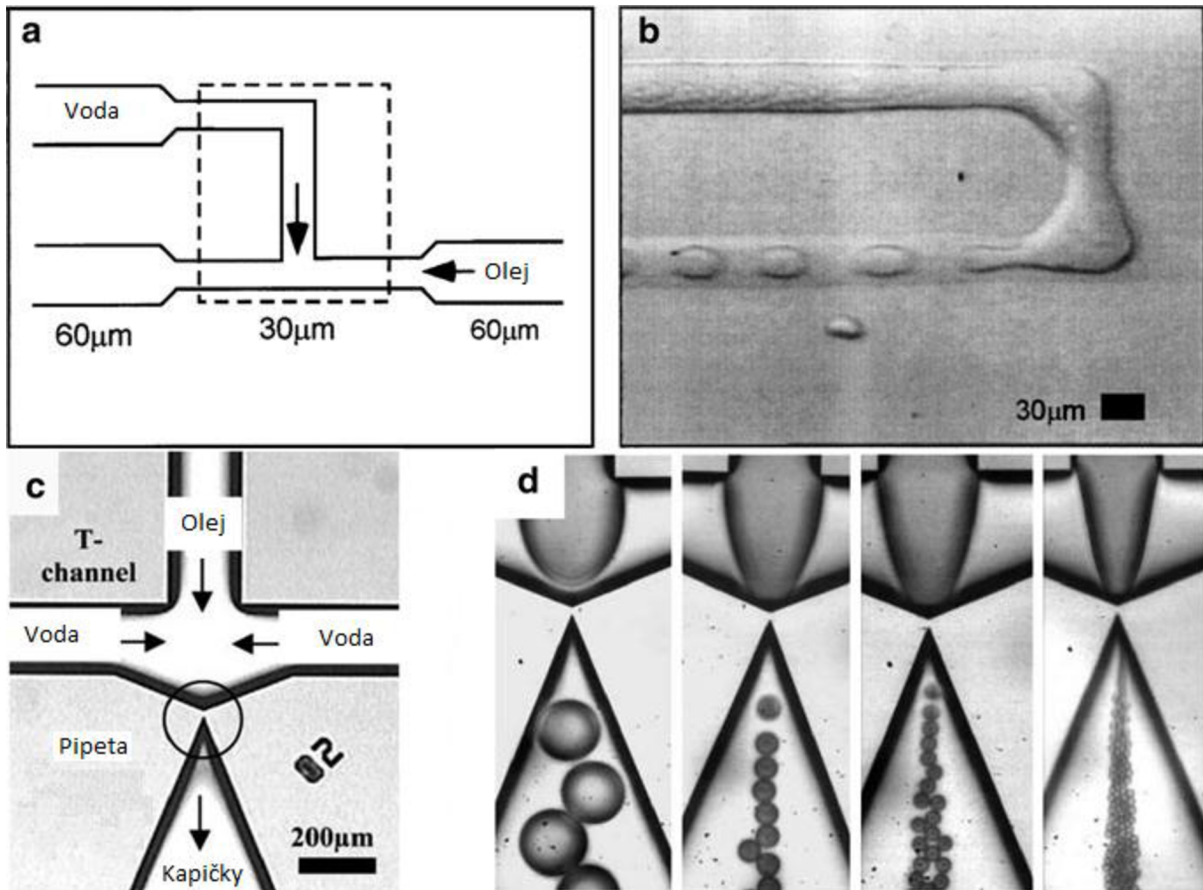


Obr. 4 Průřez kanálkem využívající principu sekvenční laminace [9]

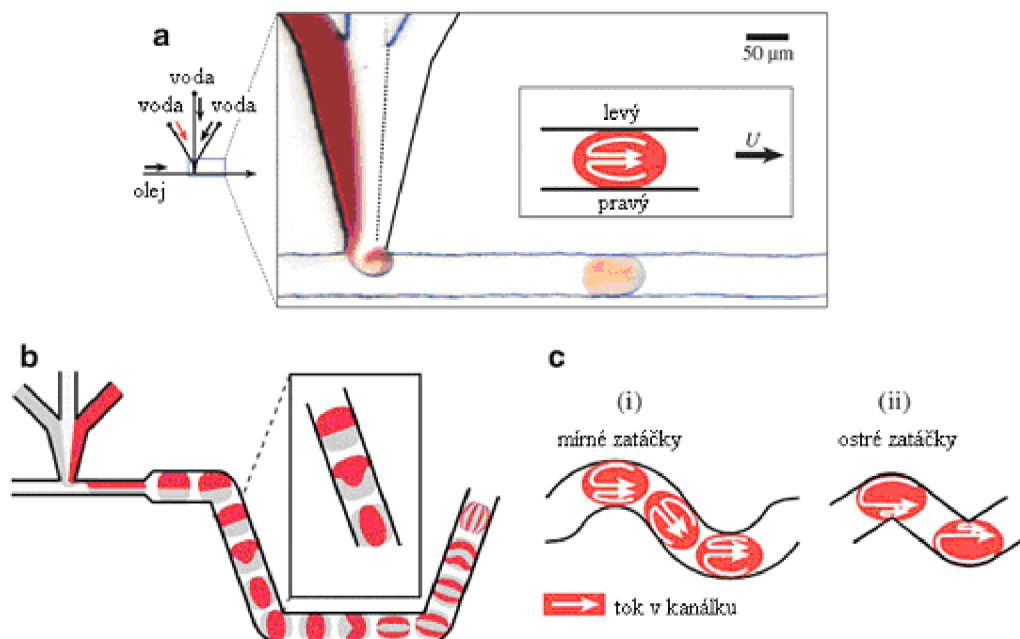
4.1.4 Vícefázová mikrofluidika a (mikro) kapičkové mísiče

Kapičky v mikrofluidice mohou být vytvořeny mnoha způsoby, jako například elektrickým polem, jehlami nebo tryskami. Nejpoužívanější geometrií k vytvoření kapiček v mikrofluidice je T kanálek. Kapičky se vytváří pomocí dvou nemísitelných kapalin, mezi nimiž se vytvoří rozhraní (viz obr. 5 b, d). V závislosti na působení povrchových a viskózních sil vznikne vícefázové proudění.

Kromě sil vzniklých mezi kapalinami hraje také důležitou roli v procesu mísení geometrie kanálku a fyzikální vlastnosti. V obecné rovině platí, že intenzita mísení kapiček je zvýšena snížením délky difuze a kontaktu mezi tekutinami. Navíc kontakt mezi povrchem kapiček a stěnami kanálku vytváří recirkulační proudění. Když je kapička přepravena skrz přímý kanál, jsou tyto proudy vytvářeny v obou polovinách kapičky a skládají se ze dvou proti sobě jdoucích proudů (viz obr. 6 a). Tento proud poskytuje promíchání obou polovin. [8] [9] [10]



Obr. 5
Mechanismus tvorby kapiček za pomoci nestabilního toku mezi nemísitelnými kapalinami [upraveno dle 9]



Obr. 6 Míchání uvnitř kapiček [upraveno dle 9]

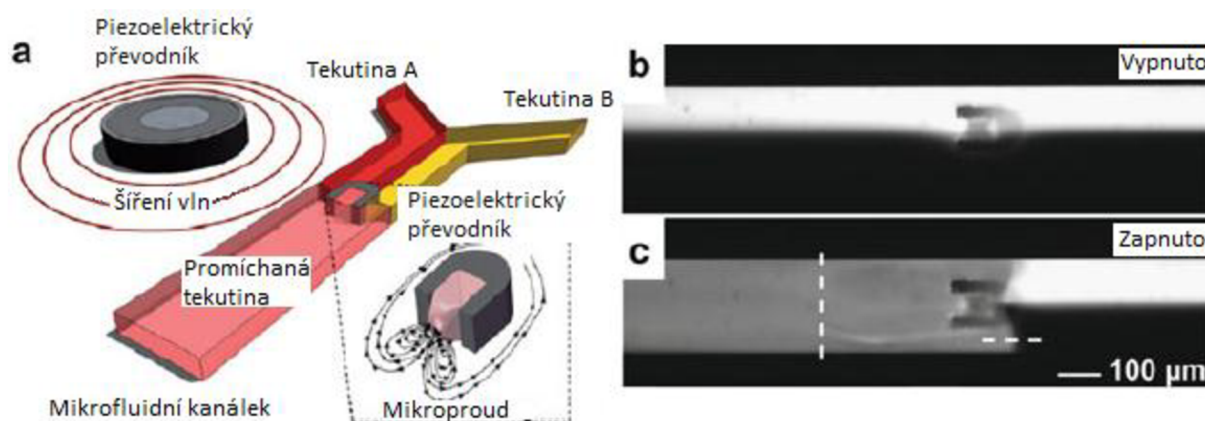
4.2 Aktivní míchání

Aktivní míchání spoléhá na externí energii, která zavádí rychlostní gradienty v míchaných látkách, a tím dochází k míchání. Existují různé metody aktivního míchání, které zlepšují míšící proces. Externí energie může být v podobě například pulzující rychlosti, která je vytvořena pomocí integrovaných mikropump. Ty střídavě zvyšují a snižují rychlost a tím vytváří pulzace. [8] [9] [10]

Další metodou je proměnlivé elektrické pole, které způsobí rychlé změny v pracovní ploše tekutiny. Touto změnou se tekutina promíchá i při velice nízkých hodnotách Reynoldsova čísla ($Re < 1$). [8] [9] [10]

Jiná metoda využívá energii ve formě ultrazvukových vln. Ultrazvukové vlny jsou do kanálků zaváděny integrovanými piezoelektrickými převodníky vyrobenými z keramiky. Ultrazvuk způsobí akustické míchání kolmo na směr proudu, a tím vede ke zlepšení míchání uvnitř kanálku. [8] [9] [10]

Vzhledem k obsahu práce je aktivní míchání zde uvedeno pouze stručně k doplnění problematiky.



Obr. 7 Příklad aktivního míchání [upraveno dle 9]

(a) Schéma ultrazvukového míšiče

(b) Průtok kapaliny kanálkem při vypnutém piezoelektrickém převodníku

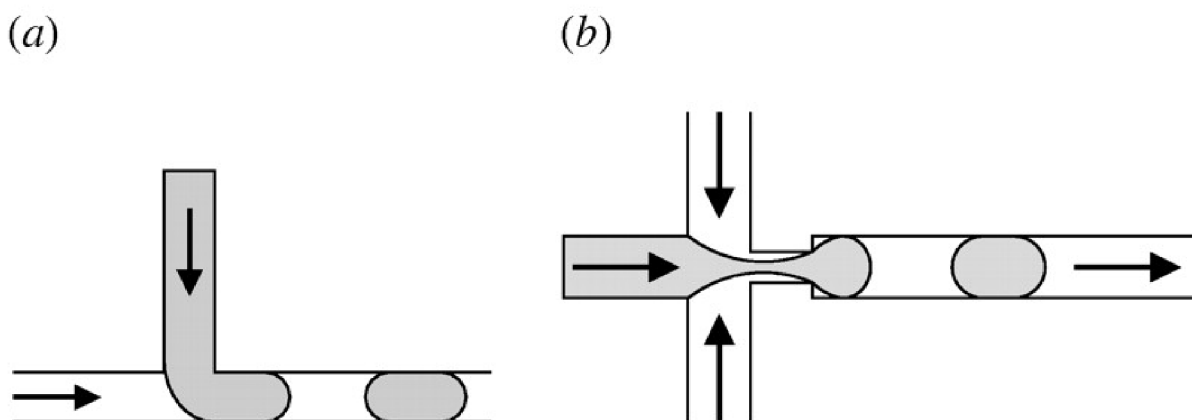
(c) Průtok kapaliny kanálkem při zapnutém piezoelektrickém převodníku

5. Tvorba kapiček

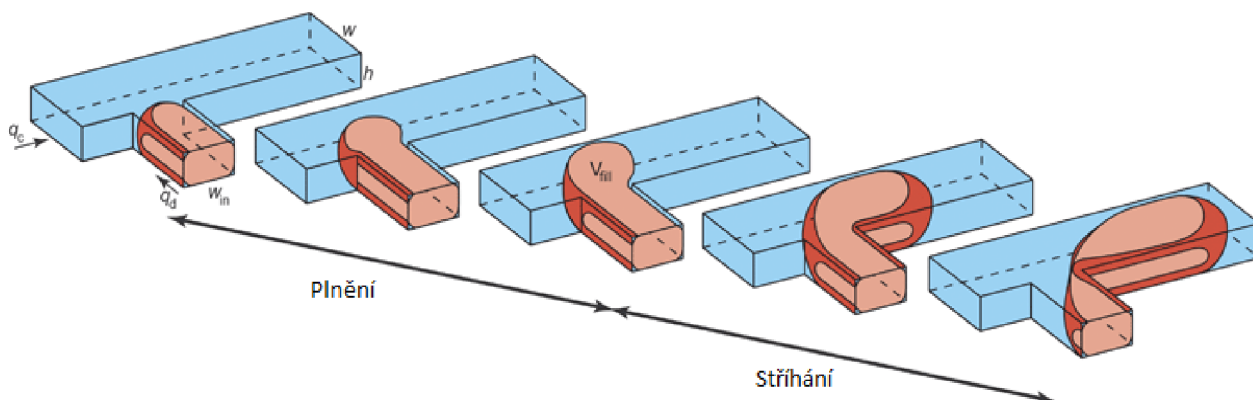
5.1 Vznik kapiček v T-kanálku

T-kanálek je nepoužívanější mikrofluidní zařízení pro tvorbu kapiček (bublinke). Největší výhodou je jednoduchá konstrukce, a přitom vznikají stejnoměrné (monodisperzní) kapičky. Ty jsou tvořeny v T-kanálku dvěma způsoby. V prvním způsobu je v horizontálním kanálku kontinuální fáze a v kolmém kanálku proudí disperzní fáze (tzv. cross-flowing). Kontinuální fáze je vnější fáze, která obklopuje kapičku. Disperzní fáze je vnitřní fáze, která tvoří kapičku. Nejdříve kapalina z kolmého kanálku zaplní část horizontálního kanálku. Proud kontinuální fáze v horizontálním kanálku poté odstříhne zaplněnou část pomocí hrany kanálku a vytvoří se kapička (viz obr. 8). [3]

V druhém způsobu jsou fáze prohozeny. V horizontálním kanálku je disperzní fáze a v kolmém kanálku je kontinuální fáze (tzv. perpendicular flowing). Obvykle se používají dva kolmé kanálky k lepšímu odstřížení. V tomto způsobu je kapička odstřížena jenom pomocí proudění kontinuální fáze. [3]



Obr. 8 Tvoření kapiček metodou (a) cross-flowing (b) perpendicular flowing [12]



Obr. 9 Plnění a stříhání u metody cross-flowing [13]

V kanálku mohou vznikat dva druhy kapiček. Kapička, která zaplňuje celou šířku kanálku (bublinka typu A) a kapička, která je ze všech stran obklopena druhou fází (ve tvaru kuličky – bublinka typu B). U obou způsobů se v případě kapičky typu A délka zmenšuje s poměrem rychlosti kontinuální a disperzní fáze (Q_c/Q_d). [3]

Odhad délky bublinky v závislosti na poměru rychlostí kontinuální a disperzní fáze je popsán vzorcem, který byl ověřen experimentálně. Vztah platí pro Taylorovo proudění a $Ca < 10^{-2}$. Taylorovo proudění je dvoufázové proudění v úzkém kanálku. Bublinky mají obvykle výrazně větší délku, než je šířka kanálku. [14]

$$\frac{L}{w} = 1 + \alpha \cdot \frac{Q_d}{Q_c} \quad (10)$$

L je délka bublinky [mm], w je šířka kanálku [mm], $Q_{c,d}$ je průtok disperzní a kontinuální fáze [$\mu\text{l/s}$] a α je konstanta, která závisí na geometrii T-kanálku ($\alpha \sim 1$) [-]. [14]

Zároveň se má kolem bublinky vytvořit tenký film kontinuální fáze. Tloušťka vzniklého filmu je dána vzorcem, který byl také experimentálně ověřen (Landau–Levich–Bretherton). [14]

$$\frac{2b}{w} = \frac{0,643 \cdot (3Ca)^{\frac{2}{3}}}{1 + 0,643 \cdot 2,5 \cdot (3Ca)^{\frac{2}{3}}} \quad (11)$$

b je tloušťka filmu mezi stěnou kanálku a bublinkou [mm]. [14]

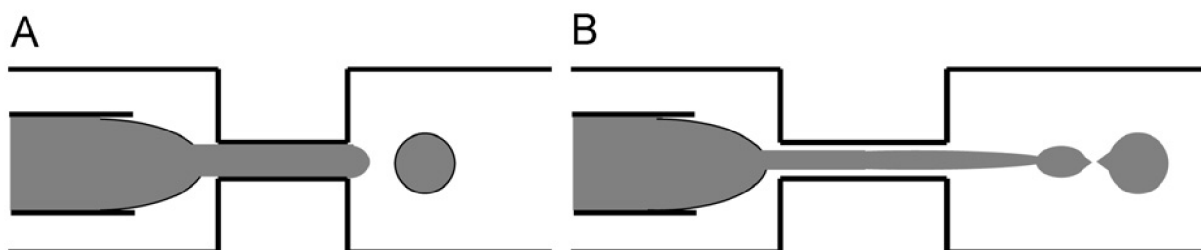
U bublinky typu B je závislost velikosti průměru bublinky u obou metod také stejná. Průměr lineárně klesá s průtokem kontinuální fáze Q_c . Hodnota průměru kapičky je nezávislá na průtoku disperzní fáze Q_d , ale klesá s celkovým průtokem. U způsobu cross-flowing mají kapičky obvykle větší průměr než u způsobu perpendicular flowing. [3]

5.2 Další způsoby vzniku kapiček

5.2.1 Flow focusing

Flow focusing je také jedna z nejpoužívanějších metod v mikrofluidice, která se hlavně používá k vytváření monodisperzních kapiček. Kontinuální fáze proudí hlavním kanálkem kolem kanálku, kterým proudí disperzní fáze. U zúžení se obě fáze potkávají. Disperzní fáze je protlačována skrz zúžení a rozdělována na jednotlivé kapičky. Ve srovnání s metodami v T-kanálku, Flow focusing vytváří obvykle druhý typ kapiček ve tvaru kuliček, jelikož je disperzní fáze umístěna ve středu kanálku, kolem kterého proudí kontinuální fáze (tím je kapička obklopena druhou fází ze všech stran). [3]

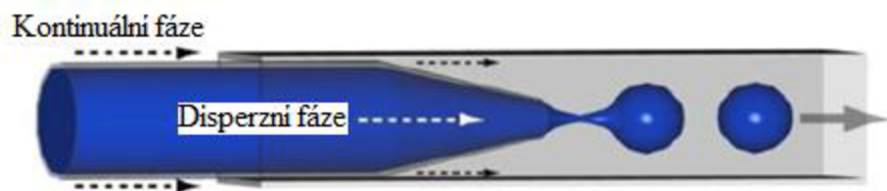
Vznik kapičky je závislý pouze na rychlosti proudění. U pomalého proudění vzniká hned za rozšířením kulatá kapička (obr. 10 A). Se zvyšující se rychlostí dochází za rozšířením k pronikání disperzní fáze do odtokového kanálku. Kapičky se poté tvoří na konci takto vzniklého proudu v odtokovém kanálku (obr. 10 B). [3]



Obr. 10 Vznik kapiček u metody flow focusing (A) při pomalé rychlosti (B) při vyšších rychlostech [3]

5.2.2 Co-flowing

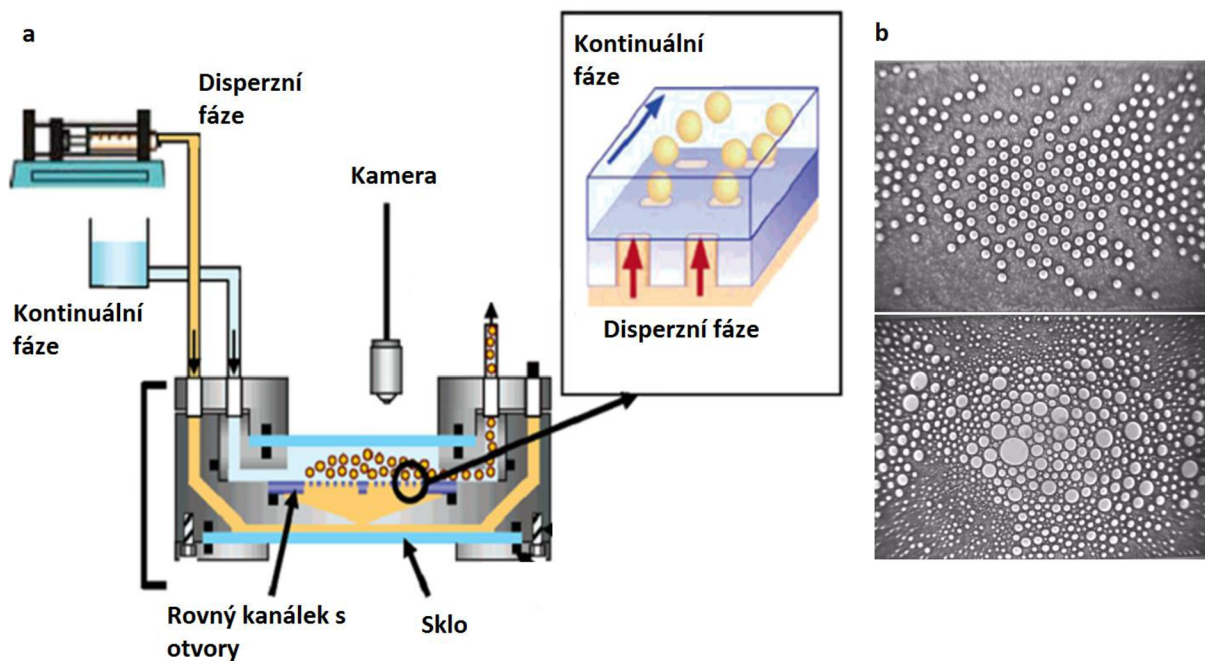
Další používanou metodou vytváření kapiček v mikrofluidice je tzv. **co-flowing**. Tato metoda je podobná metodě flow focusing, kde je disperzní fáze umístěna v kapiláře nebo jehle, kolem které proudí kontinuální fáze. Kapičky se tvoří přímo na hrotu jehly nebo kapiláry. Při vyšších rychlostech, jako u metody flow focusing, dochází k pronikání disperzní fáze do odtokového kanálku a následnému oddělování kapiček na konci vzniklého proudu. Oddělování kapiček je založeno na Rayleigh-Plateově nestabilitě. [3]



Obr. 11 Vznik kapiček za jehlou u metody co-flowing [15]

5.2.3 Straight through

Za účelem zvýšení rychlosti generování kapiček byla vytvořena metoda straight through. Tato metoda generuje mnoho monodisperzních (kulatých) kapiček najednou. Princip metody je v proudění kontinuální fáze skrz rovný kanálek, na jehož dně jsou rovnoměrně rozmístěny otvory, kterými proudí disperzní fáze. Pro tuto metodu je obzvláště důležitá rychlost disperzní fáze. Pokud je disperzní fáze moc rychlá (nadkritická) vytvoří se polydisperzní kapičky neboli kapičky nemají stejnou velikost. Pokud je rychlost pomalejší než nadkritická, jsou generovány monodisperzní kapičky (12 b). [3] [16]



Obr. 12 a) Schéma zařízení využívající metodu straight through [16], b) Nahoře monodisperzní kapičky, dole polydisperzní kapičky [17]

6. Volume of fluid

Volume of fluid (VOF) je model, který umožňuje modelování dvou nebo více nemísitelných kapalin. VOF řeší jednu sadu hybnostních rovnic a sleduje v celé doméně objemový podíl každé z tekutin. V programu Fluent se modelem VOF řeší rozhraní ustáleného (steady) nebo neustáleného (transient) proudění mezi kapalinou a plynem. Příkladem je pohyb velkých i malých bublin nebo pohyb kapaliny po protrhnutí přehrady. [5]

Pro používání modelu VOF jsou však určitá omezení. Například celý kontrolní objem musí být zaplněn jednou nebo více fázemi. Model VOF neumožňuje, aby v doméně byla prázdná oblast neboli v celém objemu musí být zadána kapalina nebo plyn. Model VOF je založen na podmínkách, že kapaliny v kontrolním objemu se nemohou smísit. Jakmile se přidá do kontrolního objemu další fáze, je jí přiřazen objemový podíl ve výpočetní buňce. V každé buňce je objemový podíl jedné nebo více fází. Kapalina q^{th} , která má objemový podíl α_q může mít tři vlastnosti. [5]

$\alpha_q = 0$: Buňka neobsahuje kapalinu q^{th}
 $\alpha_q = 1$: Buňka je zcela zaplněna kapalinou q^{th}
 $0 < \alpha_q < 1$: Buňka obsahuje kapalinu q^{th} v určitém objemovém poměru s další nebo dalšími fázemi.

Rozhraní mezi fázemi se získá řešením rovnice kontinuity pro objemový podíl fáze nebo fází v dané buňce. Pro fázi q^{th} vypadá rovnice následovně. [5]

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (12)$$

$\rho_{q,p}$ [kg/m³] je hustota fáze q a p , \vec{v}_q [m/s²] je vektor rychlosti fáze q , \dot{m}_{pq} [kg/s] je přenos hmoty z místa fáze p na místo fáze q , \dot{m}_{qp} je přenos hmoty z místa fáze q na místo fáze p . [5]

Ve výchozím nastavení je na pravé straně rovnice zdrojový člen S_{α_q} nulový. Pokud je nulový nedochází ke vzniku nebo zániku jedné z fází. Může být zadána uživatelem jako konstanta nebo jako proměnná. Rovnice kontinuity pro objemový podíl je Fluentem řešena buď **explicitně** nebo **implicitně**. [5]

Tato rovnice neřeší objemový podíl primární fáze, ale je řešena jako suma všech objemových podílů. [5]

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (13)$$

6.1 Implicitní řešení

Pokud se používá řešení **implicitní**, bude rovnice kontinuity pro objemový podíl upravena na následující tvar. [5]

$$\frac{\alpha_q^{n+1} \rho_q^{n+1} - \alpha_q^n \rho_q^n}{\Delta t} V + \sum_f (\rho_q^{n+1} U_f^{n+1} \alpha_{q,f}^{n+1}) = \left[S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \right] \quad (14)$$

Δt [s] je velikost časového kroku, index $n+1$ je pro aktuální časový krok, index n je pro předchozí časový krok, U [m^3/s] je objemový průtok skrz buňku a V [m^3] je objem buňky.

Objemový podíl v aktuálním časovém kroku je funkcí dalších veličin, které jsou také v aktuálním časovém kroku. Objemové průtoky přes plochy jsou interpolovány pomocí zvoleného diskretizačního schématu. Transportní rovnice je iteračně řešena pro objemový podíl sekundární fáze v každém časovém kroku. Implicitní řešení může být použito pro nestacionární proudění i pro stacionární proudění. [5]

6.2 Explicitní řešení

Při použití **explicitního** řešení bude rovnice kontinuity upravena následovně. [5]

$$\frac{\alpha_q^{n+1} \rho_q^{n+1} - \alpha_q^n \rho_q^n}{\Delta t} V + \sum_f (\rho_q U_f^n \alpha_{q,f}^n) = \left[S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \right] V \quad (15)$$

Objemový podíl je v aktuálním časovém kroku přímo vypočítán ze známých v předchozím kroku. Explicitní řešení nevyžaduje řešení transportní rovnice v každém časovém kroku. Průtoky přes plochu jsou interpolovány pomocí diskretizačních schémat. [5]

Pokud je použito explicitní řešení je objemový podíl fází získáván každý časový krok nebo každou vypočítanou iterací. Ve výchozím nastavení se objemový podíl počítá každý časový krok. Časový krok lze zpřesňovat pomocí Courantova čísla. Courantovo číslo je bezrozměrné číslo, na kterém závisí změna časového kroku. Ve Fluentu je změnu časového kroku možno nastavit v závislosti na: [5]

Rychlosti

Časový krok se mění v závislosti na velikosti buňky a normálové rychlosti tekutiny k rozhraní. [5]

$$\Delta t_v = C \frac{\Delta x}{v_{fluid}} \quad (16)$$

Δt_v je velikost časového kroku [s], C je Courantovo číslo [-], v_{fluid} [m/s] je rychlost kapaliny a Δx je velikost buňky [m] [5]

Průtoku

Tato metoda je výchozí nastavení pro výpočet časového kroku. Časový krok je vypočítán v závislosti na objemu buňky a součtu výtoků z buňky. [5]

$$\Delta t_v = C \frac{V}{\sum_{buňka} U_f} \quad (17)$$

$V [m^3]$ je objem buňky a $U_f [m^3/s]$ je výtok jedné fáze z buňky [5]

Dále může být časový krok závislý na **průměrném průtoku** z buněk nebo kombinací těchto tří metod. Další volbou je počítání objemového podílu každou iteraci. Tato volba je však méně stabilní a vyžaduje delší výpočetní čas. [5]

6.2.1 Volba rozhraní

Při použití explicitního řešení je třeba zadat typ interpolace rozhraní mezi fázemi. Zvolené rozhraní určí dostupnost jednotlivých diskretizačních schémat. K dispozici jsou tři typy rozhraní. [5]

Ostré – Mezi fázemi je zřetelné rozhraní

Rozptýlené – Mezi fázemi dochází k mísení (fáze pronikají do sebe).

Ostré/ Rozptýlené – Hybridní přístup, který se skládá z obou rozhraní. Tato volba je použita k zachycení mírně ostrého rozhraní.

Rozhraní	Implicitní řešení	Explicitní řešení
Ostré rozhraní	Compressive BGM (pouze pro stacionární) Modified HRIC	Geo-Reconstruct CICSAM Compressive Modified HRIC
Rozptýlené rozhraní	First Order Upwind Second Order Upwind QUICK	First Order Upwind QUICK
Ostré/Rozptýlené rozhraní	Compressive Modified HRIC	

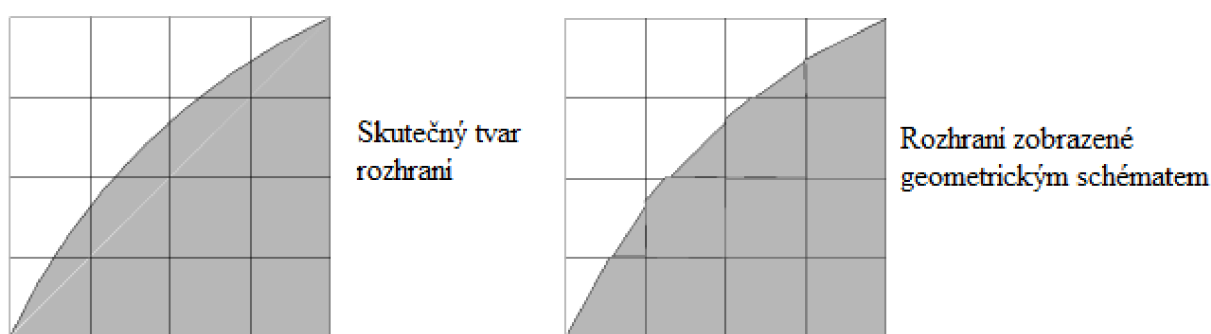
Tabulka 2

Diskretizační schémata dle zvoleného řešení a rozhraní [5]

6.2.1.1 Geo-reconstruct

Geo-reconstruct je geometrické schéma, které používá lineární přístup na zobrazení rozhraní mezi dvěma kapalinami. Lineární přístup spočívá v předpokladu, že rozhraní mezi kapalinami je lineární. To znamená, že v buňce, kde se nachází dvě kapaliny, je rozhraní mezi nimi počítáno jako přímka. Ve Fluentu je toto schéma nejpřesnější a je možné jej použít i na nestrukturované sítě. Je však nejnáročnější na výpočetní čas. [5]

První krok v Geometrickém schématu je nalézt v jaké buňce jsou obsaženy obě fáze na základě objemového podílu. Druhým krokem je výpočet konvekce tekutiny skrz každou buňku na základě lineárního znázornění rozhraní a informace o normálové a tangenciální rychlosti. Třetí krok je výpočet objemového podílu v každé buňce použitím průtoku skrz buňky vypočteného v předchozím kroku. [5]



Obr. 13 Porovnání skutečného rozhraní a zobrazeného geometrickým schématem (lineární přístup)

6.2.1.2 Compressive

Compressive schéma závisí na zvoleném rozhraní. Pokud je Compressive schéma zvolené pro ostré rozhraní je mezi fázemi zřetelné rozhraní. Pokud je pro Compressive schéma zvoleno ostré/rozptýlené rozhraní je vhodné pro zřetelné rozhraní i pro rozhraní, kde dochází k pronikání fázi do sebe. [5]

Schématu HRIC a CICSAM jsou speciálními případy Compressive schématu. Obě jsou založena na kombinaci diferencních přístupů k diskretizaci mezifázového rozhraní. [5]

6.2.1.3 CICSAM

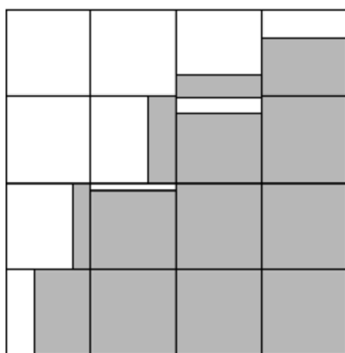
Schéma na zachycení rozhraní CICSAM (The Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes) je založeno na práci O. Ubbink (*Numerical Prediction of Two Fluid Systems With Sharp Interfaces, 1997*). CICSAM je diferencni schéma s vysokým rozlišením, které se používá především na proudění kapalin s velkým poměrem viskozit. Toto schéma má výhodu skoro stejně ostrého rozhraní jako geometrické. [5]

CICSAM schéma je kombinací schémat Hyper-C a ULTIMATE-QUICKEST. Pokud je stěna buňky kolmá k normálovému vektoru rozhraní používá se Hyper-C, pokud je stěna rovnoběžná používá se ULTIMATE-QUICKEST. Mezi schématy se přepíná hladkou směšovací funkcí.

6.2.1.4 HRIC

Všechny schémata pro metodu VOF ve Fluentu mají problém se správným zachycením rozhraní (velká míra difuzivity) nebo často dávají nefyzikální výsledky. Proto bylo vytvořeno schéma na zachycení rozhraní s vysokým rozlišením (high resolution interface capturing) neboli HRIC schéma. HRIC schéma má mít lepší přesnost než předešlá schémata, ale zároveň má být méně náročné na výpočetní čas než Geometrické schéma. [5]

HRIC schéma je také kombinací dvou schémat: Bounded Downwind (DD) a Upwind Differencing (UD). Použití je stejné jako u CICSAM schéma. DD se používá, pokud je stěna buňky kolmá k normálovému vektoru a UD, pokud je rovnoběžná s normálovým vektorem. Mezi schémata se opět přepíná hladkou směšovací funkcí. [5]



Hladká směšovací funkce

Obr. 14 Rozdělení buněk výpočetní sítě hladkou směšovací funkcí [5]

Kombinace schémat se provádí, protože rozhraní mění svou polohu vůči hranám výpočetové sítě. Pokud by se používalo pouze jedno schéma z vybraných schémat docházelo by k velké numerické difuzi (rozostřené rozhraní).

6.3 Rovnice hybnosti

Jediná rovnice hybnosti je řešena skrz celou doménu a výsledné rychlosti jsou sdíleny mezi fázemi. Avšak rychlosti vypočítané v blízkosti rozhraní mohou být nepříznivě ovlivněny, pokud jsou mezi fázemi velké rozdíly rychlostí. Rovnice hybnosti je závislá na objemovém podílu fází a jejich vlastností jako jsou hustota a viskozita. [5]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + p \vec{g} + \vec{F} \quad (18)$$

6.4 Povrchové napětí

Do modelu VOF lze také zahrnout účinky povrchového a mezifázového napětí. Koeficient povrchového napětí lze určit jako konstantu nebo jako funkci teploty pomocí polynomu. Ve Fluentu jsou dva modely pro povrchové napětí. Model povrchových sil – CSF (continuum surface force) a model povrchových napětí – CSS (continuum surface stress).

Význam účinků povrchového napětí je stanoven na základě bezrozměrných čísel. Pokud je $Re \ll 1$ je důležité Ca . Pokud je $Re \gg 1$ pak je důležité We (viz bezrozměrné veličiny). [5]

6.4.1 Model CSF a CSS

Obě metody zavádí přidané proudění na rozhraní v důsledku nerovnováhy tlakových gradientů a povrchových tlakových sil. Model CSS má však několik výhod oproti modelu CSF. Hlavní výhodou je zejména v případě použití proměnného povrchového napětí. Dále model CSS nevyžaduje explicitní výpočty různých zakřiveních. Proto se chová více fyzikálně ve složitějších oblastech, jako například u ostrých rohů. [5]

Síla povrchového napětí u modelu CSF je určena:

$$F_{CSF} = \sigma k \nabla \alpha \quad (19)$$

k je zakřivení rozhraní.

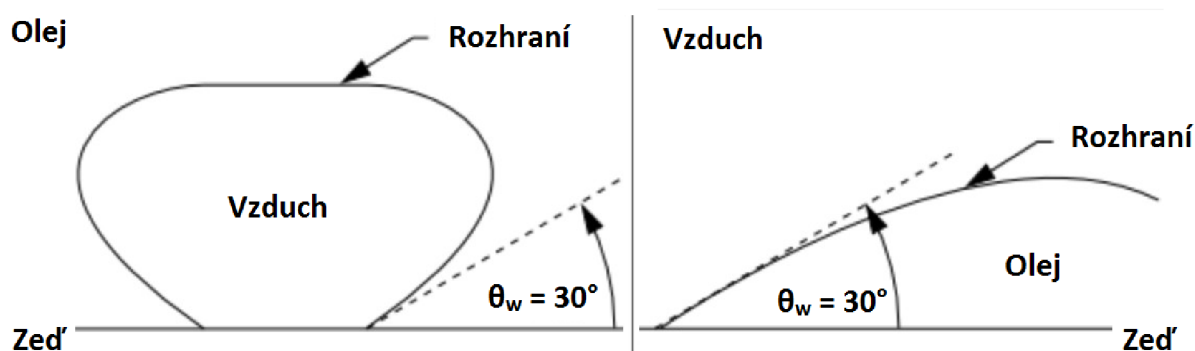
U modelu CSS je síla povrchového napětí určena dle vztahu:

$$F_{CSS} = \nabla \cdot \left[\sigma \left(|\nabla \alpha| I - \frac{\nabla \alpha \varepsilon \nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \right] \quad (20)$$

ε je součin dvou normálových vektorů – původního a transformovaného, I je jednotkový tenzor

6.4.2 Adheze stěn

Model lze rozšířit o kontaktní úhly mezi fází a stěnou kanálku. Změna kontaktního úhlu je dynamická okrajová podmínka k úpravě zakřivení povrchu v blízkosti stěny. Kontaktní úhel θ_w je úhel mezi stěnou a tečnou rozhraní v blízkosti stěny. Ve Fluentu je model pouze pro statický kontaktní úhel. Při pohybu se ale vytváří dynamický kontaktní úhel, pro který ve Fluentu neexistuje model, takže se do výpočtu zanáší nepřesnosti. [5]



Obr. 15 Příklad kontaktního úhlu $\theta_w = 30^\circ$ mezi olejem a vzduchem [5]

7. Simulace bublinky ve 2D

Všechny výpočty a simulace jsou provedeny pomocí programu Ansys Fluent 17.2. Grafické zhodnocení a tvorba obrázků je také vytvořena pomocí programu Fluent. Všechny výpočty byly provedeny na školních PC s procesorem Intel Core i7-3770 se čtyřmi fyzickými jádry o frekvenci 3,40 GHz a RAM paměti 16 GB.

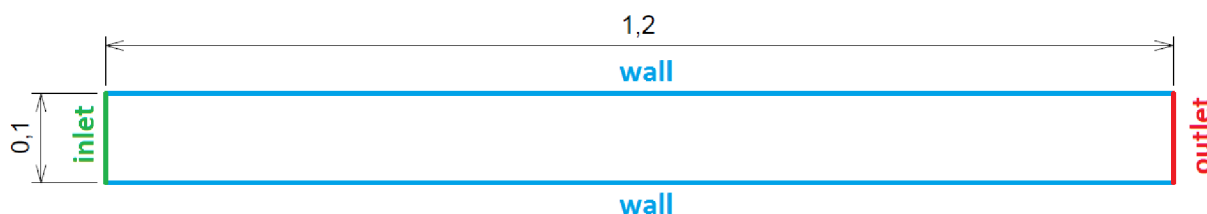
7.1 Rovný kanálek

V této kapitole je popsána simulace bublinky v rovném kanálku, ve které byl zkoušen vliv jednotlivých nastavení na formování bublinky. Byl proveden vliv časového kroku, nejlepší volba diskretizačního schématu, nastavení kontaktního úhlu a v neposlední řadě vliv počtu buněk výpočetní sítě na rozhraní.

			voda	vzduch
Vlastnosti fází (při 20 °C)	hustota	[kg/m ³]	998,2	1,225
	dynam. viskozita	[Pa·s]	1,002·10 ⁻³	1,9·10 ⁻⁵
	povrchové napětí	[N/m]		0,073
Bezrozměrné veličiny		[-]	Re	0,0815
			Ca	1,164·10 ⁻⁵

7.1.1 Tvorba geometrie a sítě

Rozměry rovného kanálku jsou na obrázku 16. Síť byla vytvořena se zjemněním ke stěnám. Zjemnění bylo docíleno pomocí funkce Bias (konkrétně byla zvolena hodnota pro Bias 2). Prvotní výpočty byly provedeny na středně jemné síti s 36 000 prvky. Geometrie i tvorba sítě byly provedeny v programu Ansys Geometry a Ansys Mesh.



Obr. 16 Geometrie rovného kanálku (rozměry v mm) a okrajové podmínky

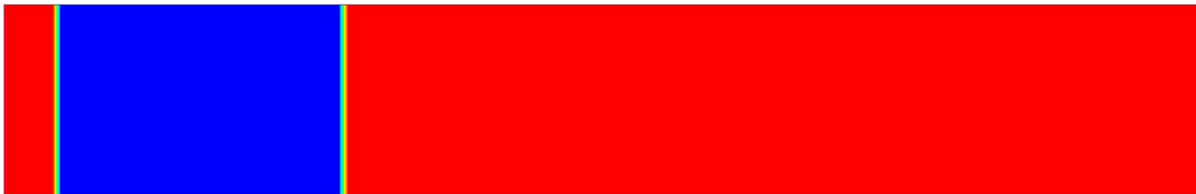
7.1.2 Nastavení numerického řešiče ANSYS Fluent

Rozměry kanálku a rychlost na vstupu vychází z práce D. A. Hoanga [18] pro 3D kanálek. Nejdříve byly nastaveny okrajové podmínky dle obrázku 16. Na stěny kanálku byla nastavena podmínka typu wall, což je podmínka ulpívání kapaliny. Tedy přímo na stěně je rychlost nulová. Na vstupu byla zvolena funkce velocity inlet a na konci domény funkce pressure outlet. Hodnota rychlosti byla nastavena na 0,833 mm/s. Kapalína vytékala do atmosféry, z toho důvodu byla nastavena hodnota přetlaku vůči atmosférickému tlaku 0 Pa.

Prvotní nastavení bylo zvoleno dle doporučení od vedoucího práce. Pro model VOF bylo zvoleno explicitní řešení, pro které bylo vybráno diskretizační schéma HRIC. Toto schéma by mělo mít nejlepší poměr ostroty rozhraní k výpočetnímu času. Pro rovnici hybnosti bylo od počátku nastaveno schéma Second Order Upwind. Pro explicitní řešení je u transportních rovnic (pro časový člen) možné pouze schéma First Order Upwind. Pro

povrchové napětí byl vybrán model CSF (viz kapitola 6.4.1) a rozhraní voda-vzduch (kontinuální fáze je voda a disperzní fáze je vzduch, takže se vytvoří vzduchová bublinka ve vodě). U simulování rozhraní dvoufázového proudění nezáleží, zda je to rozhraní kapalina – plyn (bublinka) nebo kapalina – kapalina (kapička). Kontaktní úhel byl nastaven na hodnotu 140° . Na začátku kanálku byla vyznačena obdélníková oblast pomocí funkce Region o délce 0,15 mm, do které byl vložen vzduch (obr. 17).

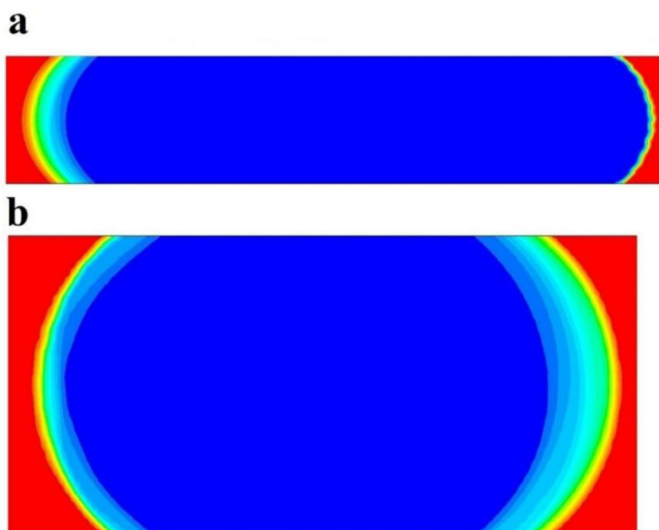
Směr proudění \longrightarrow



Obr. 17 Počáteční rozložení fází (modrá – vzduch, červená – voda)

7.1.3 Určení velikosti časového kroku

Při tvorbě bublinky je nejdůležitější nastavení časového kroku. Je-li časový krok příliš velký, bublinka se vůbec nevytvoří a celá se rozpadne. Naopak při příliš malém časovém kroku je výpočet zbytečně dlouhý. Proto bylo na zjištění optimálního časového kroku použito Courantovo číslo (kapitola 6.2). Výpočet Courantova čísla byl ponechán na výchozím nastavení, takže se časový krok měnil v závislosti na průtoku (rovnice 17). Nejdříve byla nastavena hodnota 0,8, ale na začátku bublinky se rozhraní vlnilo a bublinka se nefyzikálně zvětšila (obr. 18 a), proto bylo Courantovo číslo přenastaveno na 0,2. Porovnání obou Courantových čísel vidíme na obrázku 18. Při tomto nastavením bylo zjištěno, že se časový krok pohybuje mezi $1 \cdot 10^{-7} - 8 \cdot 10^{-7}$ s. Jelikož bylo rozhraní i při nižším Courantově čísle stále rozostřené a přesnost výpočtu nebyla dostatečná (normalizované reziduály rovnice kontinuity se pohybovaly kolem 10^{-1}), byl časový krok nastaven pevně na $1 \cdot 10^{-7}$ s. Pevný časový krok má pozitivní vliv na délku výpočetního času, jelikož se výpočet nekomplikuje další rovnicí.



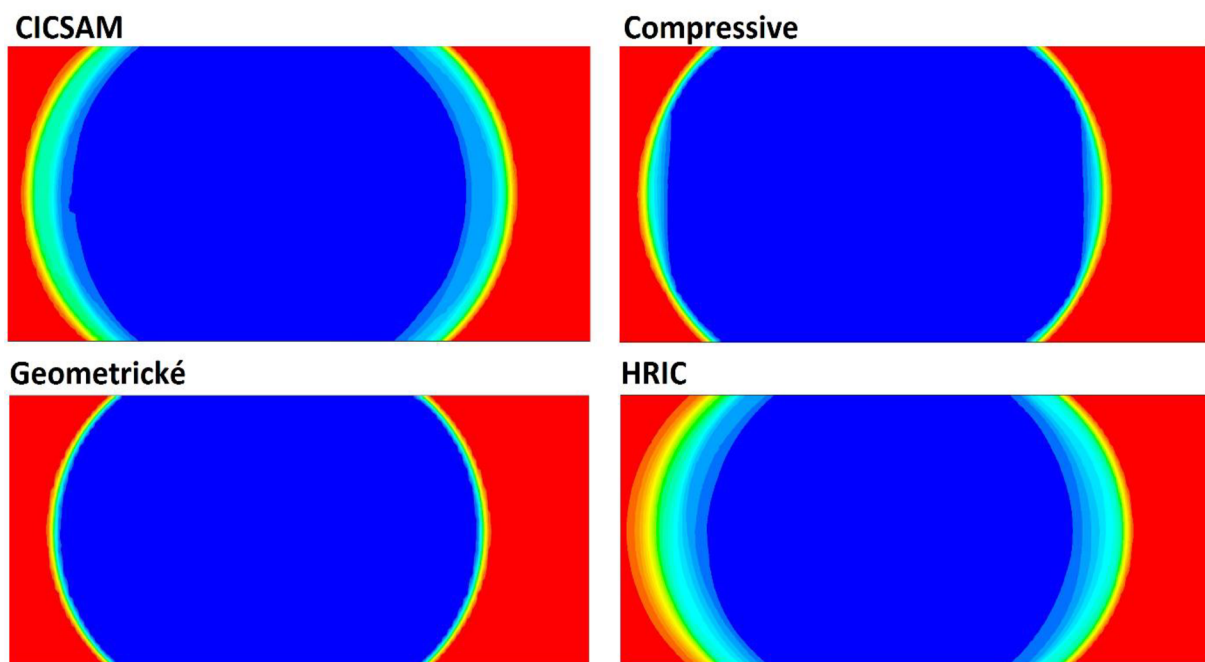
Obr. 18 Vliv Courantova čísla na tvorbu bublinky

- a) Courantovo číslo 0,8 – bublinka se zvětšila
- b) Courantovo číslo 0,2

Posledním dosud nezmiňným důležitým nastavením bylo zvolení počtu iterací do časového kroku. S přihlédnutím k nastavení velice malého časového kroku byla zvolena jedna iterace, neboť každá přidaná iterace prodlouží délku výpočtu. Během jednoho časového kroku dochází jen k velmi malým změnám. Počet iterací do takto malého časového kroku není tedy podstatný. Jedna iterace sice snižuje přesnost výpočtu, ale na vytvoření bublinky je mnohem důležitější velikost časového kroku.

7.1.3 Volba diskretizačního schématu

Z důvodu, že má každé diskretizační schéma své výhody, byla vyzkoušena všechna schémata, která jsou k dispozici k explicitnímu řešení (dle tabulky 2). Všechny výpočty proběhly do času 0,07 s (bylo vypočítáno 700 000 iterací). V tomto čase se již bublinka posunula v kanálku, takže je patrné, které schéma zachytí nejlépe rozhraní. Rozhraní bylo dle očekávání zachyceno nejlépe geometrickým schématem. Podle teorie má být toto schéma nejvíce náročné na výpočetní čas, ale výpočet všech schémat trval 46 až 48 hodin. I u schématu Compressive bylo rozhraní dobře zachyceno, avšak na vrcholu oblouku bublinky bylo rozhraní více rozostřené. Schéma CICSAM zachytilo rozhraní, ale vnitřní část už byla více rozptýlená. HRIC schéma zachytilo rozhraní nejhůře s nejvíce rozostřeným rozhraním. Všechny výsledné obrázky zachycených rozhraní jsou na obrázku 19.



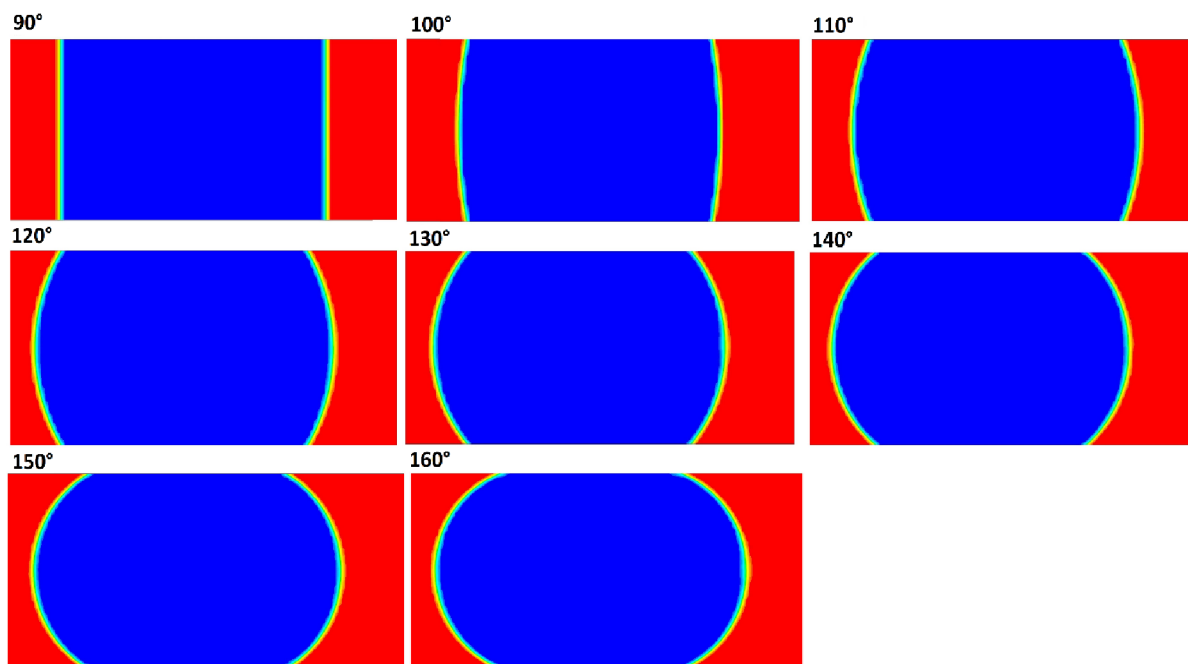
Obr. 19 Rozhraní u různých druhů diskretizačních schémat

7.1.4 Nastavení kontaktního úhlu

Kontaktní úhel byl zkoušen po 10° od hodnoty 90° do hodnoty 160° . Jedná se o okrajovou podmínku nastavení smáčivosti materiálu kanálku. Aby se bublinka vytvořila, je zapotřebí nesmáčivého povrchu (hydrofobní), tedy úhel větší jak 90° . Nad úhel 150° je materiál považován za superhydrofobní. Na obrázku 20 jsou vidět všechna nastavení kontaktního úhlu a změnu bublinky se vzrůstajícím úhlem.

Při nastavení kontaktního úhlu 90° se vložený obdélník vůbec nedeformoval a pouze se posouval rovným kanálkem. Při nastavení většího úhlu se bublinka na počátku zdeformovala a následně dokmitala do konečné podoby, ve které se následně posouvá kanálkem. Formování bublinky s kontaktním úhlem 140° je uveden v příloze.

Všechna nastavení kontaktního úhlu byla počítána pomocí geometrického schématu, z důvodu nejlepšího zobrazení rozhraní mezi fázemi. Opět byl zvolen časový krok $1 \cdot 10^{-7}$ s. Výpočty byly počítány do času 0,05 s.

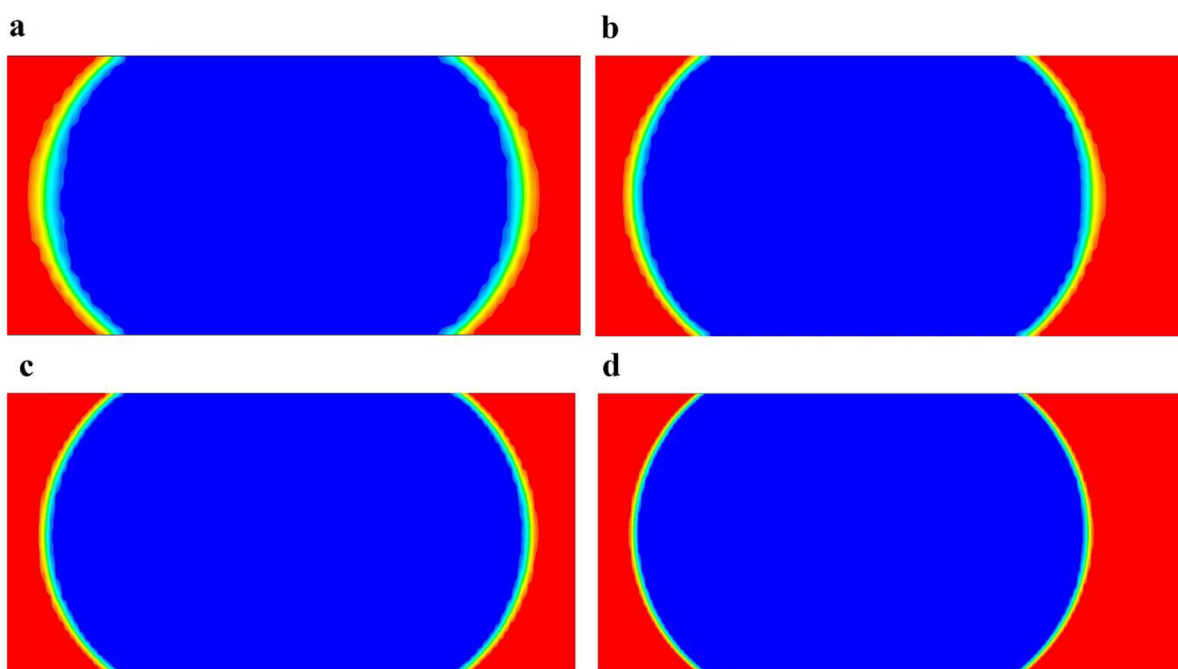


Obr. 20 Různá nastavení kontaktního úhlu

7.1.5 Význam velikosti buněk výpočetní sítě na tloušťku rozhraní

Ke zjištění nejlepšího poměru tloušťky rozhraní a výpočetního času byly vytvořeny celkem čtyři sítě. Důležitým kritériem sítě je poměr délky stran buňky $\frac{a}{b}$ (aspect ratio). Pro výpočet je nejjednodušší, když má buňka tvar čtverce (poměr stran je 1). Všechny vytvořené sítě mají aspect ratio kolem hodnoty 2. První síť má celkově 10 000 buněk, druhá síť 20 000 buněk, třetí síť 36 000 buněk a čtvrtá síť 72 000. Byl zvolen kontaktní úhel 140° .

Rozhraní se podle očekávání nejlépe zachytilo na nejjemnější síti. I druhá nejjemnější síť (s polovičním počtem buněk) zachytila ostré rozhraní. Počet buněk ve 3D se mnohonásobně zvýší, a tím se zvětšuje i náročnost na výpočetní čas. Z hlediska porovnání výsledků ve 2D a 3D je tedy nejjednodušší třetí síť s 36 000 buňkami.



Obr. 21 Vliv počtu buněk na rozhraní a) 10 000 buněk b) 20 000 buněk
c) 36 000 buněk d) 72 000 buněk

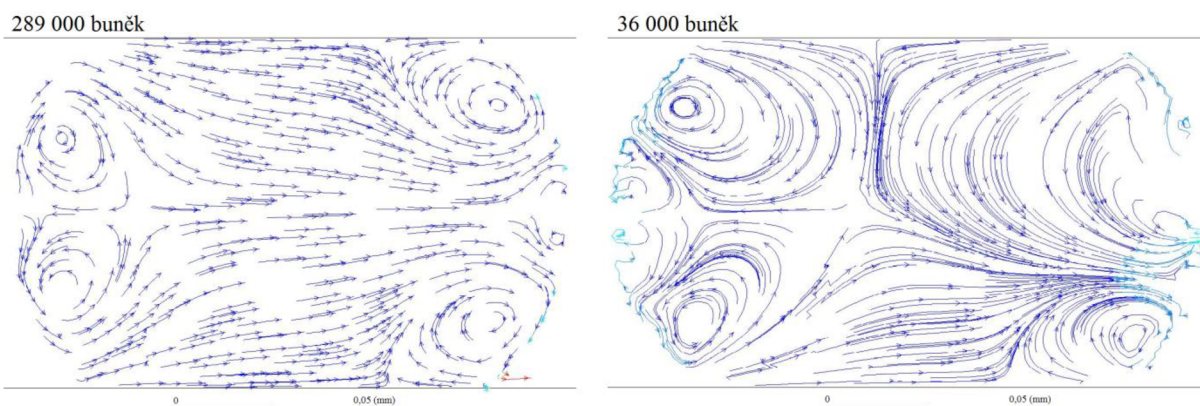
7.1.6 Proudění uvnitř bublinky

Jak bylo zmíněno v kapitole 4, dvoufázové proudění se také používá na mísení dvou nebo více kapalin v kapičce. Díky laminárnímu proudění je mísení v mikrofluidice závislé na vytvoření vírů, které docílí efektivnějšího mísení. Dle teorie se mají v bublince vytvořit dva protiběžné víry, které vzniknou rozdílem rychlostí na stěně a rychlostí ve středu kanálku.

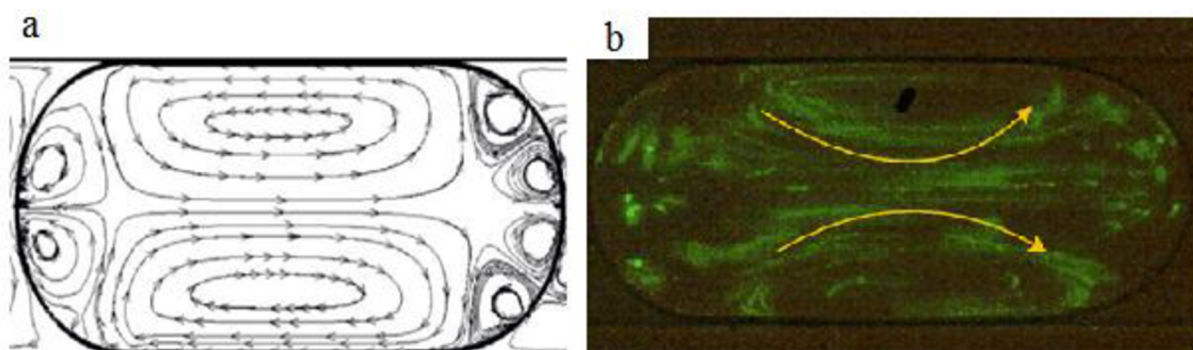
Na porovnání výsledků byla vstupní rychlost nastavena dle práce D. A. Hoanga [18] na 16,66 mm/s, ve které je prezentováno proudění uvnitř bublinky, kde se vytvořilo několik vírů u rozhraní. Ty nejsou ale natolik silné, aby ovlivnily přirozeně vytvořené protiběžné víry uprostřed bublinky.

Podle obrázku 22 se vytvořily celkem čtyři hlavní víry. Jejich rychlost je natolik velká, že potlačila přirozené proudění uvnitř bublinky. Z porovnání vírů je patrné, že nejvíce proudění ovlivňují přední víry, které mají opačný směr, než je tomu v uvedené práci [18] (viz obr. 23 – a). Proudění v bublince je také ovlivněno tenkým vodním filmem mezi bublinkou a stěnou, který se v simulaci nevytvořil. Film kontinuální fáze se nejspíše nevytvořil kvůli velkým buňkám výpočetní sítě u stěny kanálku, i když byly buňky pomocí funkce Bias zmenšeny právě ke stěnám. Zjemnění sítě by také vedlo k tenčímu, ostřejšímu rozhraní a v důsledku toho by se pravděpodobně u rozhraní nevytvořily tak silné víry. Takže by teoreticky nemělo dojít k ovlivnění proudění uvnitř bublinky. Víry u rozhraní se vytvoří vždy v důsledku rozdílných hustot mezi fázemi (viz kapitola 6.4.1).

Z tohoto důvodu byla vytvořena jemnější síť s 289 000 buňkami. Zjemněním sítě bylo docíleno jiného rozložení vírů, zadní víry se přiblížily ke středu bublinky. Na středu přední strany bublinky se začaly tvořit dva menší víry, které jsou patrné z obrázku 22 – a. Vliv vírů u rozhraní se nepodařilo omezit ani s použitím takto jemné sítě. V práci [18] byla použita dynamická síť, která zjemňovala buňky přímo na rozhraní fází, a tím došlo k menším vírům, které neovlivnily proudění v bublince.

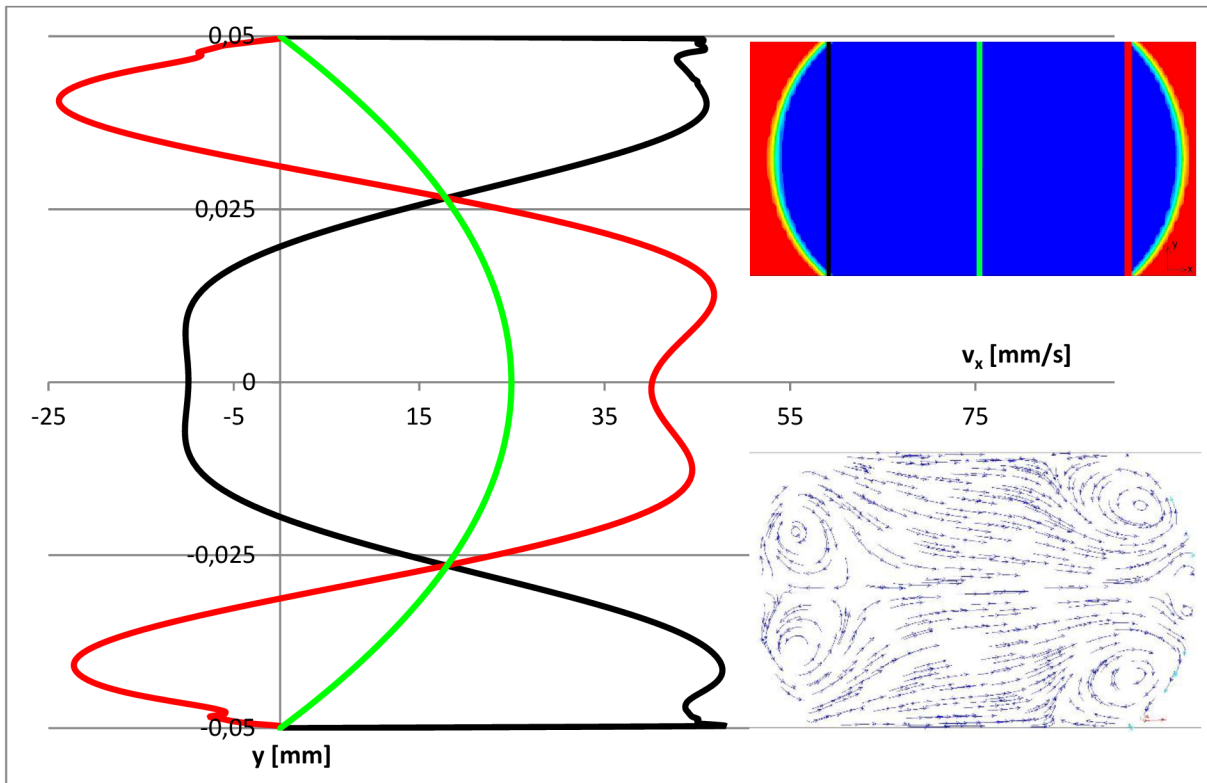


Obr. 22 Porovnání vlivu počtu buněk na tvorbu vírů u rozhraní



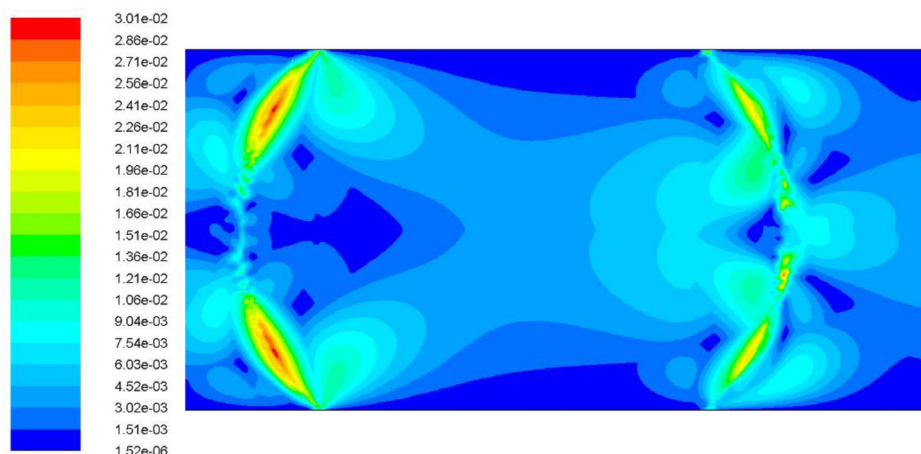
Obr. 23 Rychlosti uvnitř bublinky a) vypočtené rychlosti z [18] b) změřené rychlosti metodou mikro PIV [19]

Na grafu 1 lze vidět x-ové složky rychlostí na různých pozicích bublinky. Rychlosti byly zobrazeny ze simulace s nejjemnější sítí (289 000 buněk). Jsou zde uvedeny rychlosti na začátku bublinky (červená), v jejím středu (zelená) a na konci (černá). Ve středu bublinky má rychlost parabolický průběh. Z toho je patrné, že uprostřed nejsou žádné víry, na krajích jsou rychlosti ovlivněny víry vzniklými u rozhraní.

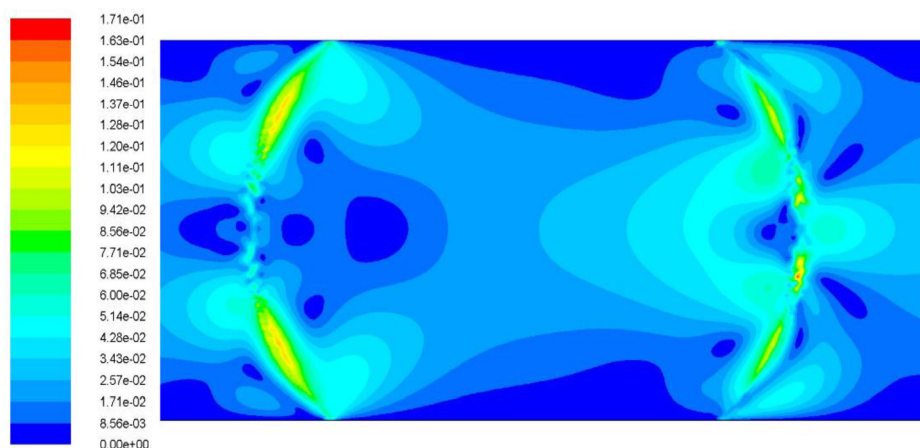


Graf 1 x-ová složka rychlosti průřezem kanálku

Velké rychlosti v rozhraní také ovlivňuje Courantovo číslo, které je závislé na jednotlivých průtocích z buněk (viz vzorec 17). Rychlost v celé doméně je v porovnání s rychlostí přímo v rozhraní velice malá. Proto je i Courantovo číslo mnohonásobně větší, než je tomu ve zbytku domény. Dle obrázku níže se Courantovo číslo pohybuje v celé doméně na mnohem nižších hodnotách (menší o několik řádů) a pouze na zadní straně bublinky se toto číslo pohybuje v maximálně nastavených mezích. Také lze pozorovat, že nejvyšší rychlosti jsou na zadní straně, kde vznikají dva víry. Vysoké rychlosti mohou být také způsobeny parazitními proudy u rozhraní.



Obr. 24 Courantovo číslo



Obr. 25 Velikosti rychlosti

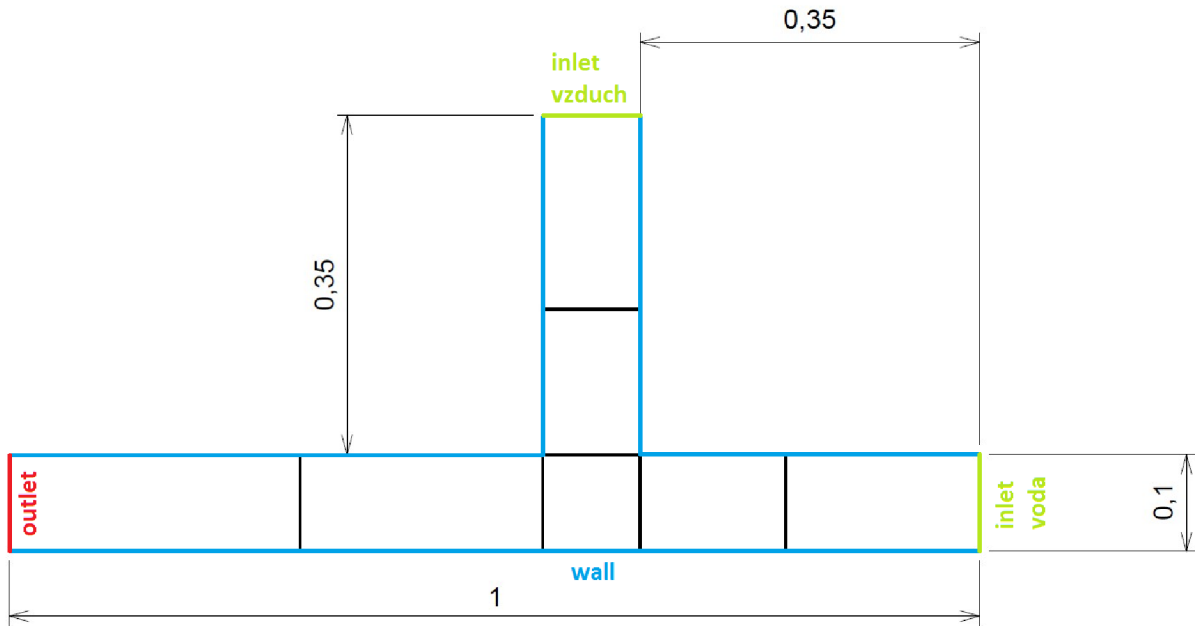
7.2 T-kanálek

V této kapitole jsou popsány výsledky ze simulace tvorby bublinky v T-kanálku. Základní nastavení vycházela z výsledků u rovného kanálku. Tvorba bublinky je provedena pomocí metody cross flowing (viz kapitola 5). Dále bylo zkoušeno, zda se délka bublinky chová podle teorie a jaká nastavení mají na délku bublinky a její formování vliv. Všechna nastavení byla zkoušena ve 2D kvůli délce a náročnosti výpočtu.

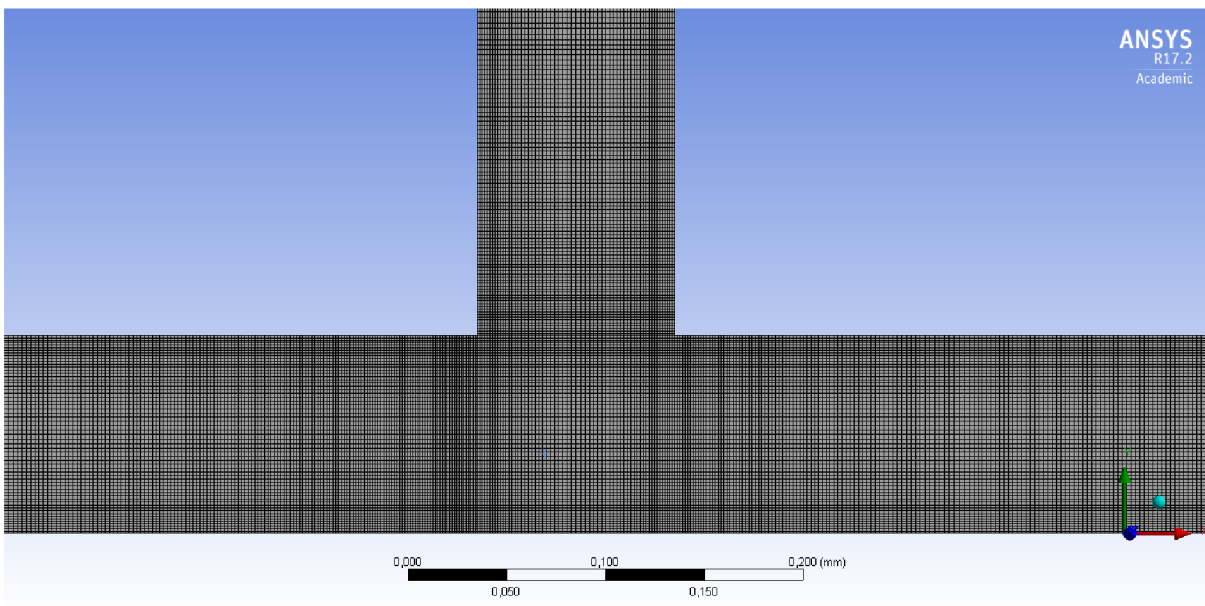
7.2.1 Tvorba geometrie a sítě

Šířka kanálku byla shodná s rovným kanálkem ($w = 0,1 \text{ mm}$). Za účelem ustálení rychlostí a vytvoření laminárního proudění byl zvolen delší přítokový kanálek vzduchu a vody. Celkové rozměry T-kanálku jsou na obrázku 26.

Nastavení velikosti buněk výpočetní sítě bylo zvoleno stejné jako u rovného kanálku (36 000 buněk). V kanálku byla vytvořena dekompozice pro zjemnění k rohu kanálku, kde se bublinka odstříhne. Toto zjemnění bylo opět docíleno funkcí Bias. Výsledná síť má počet buněk 40 000 a aspect ratio je 2,6.



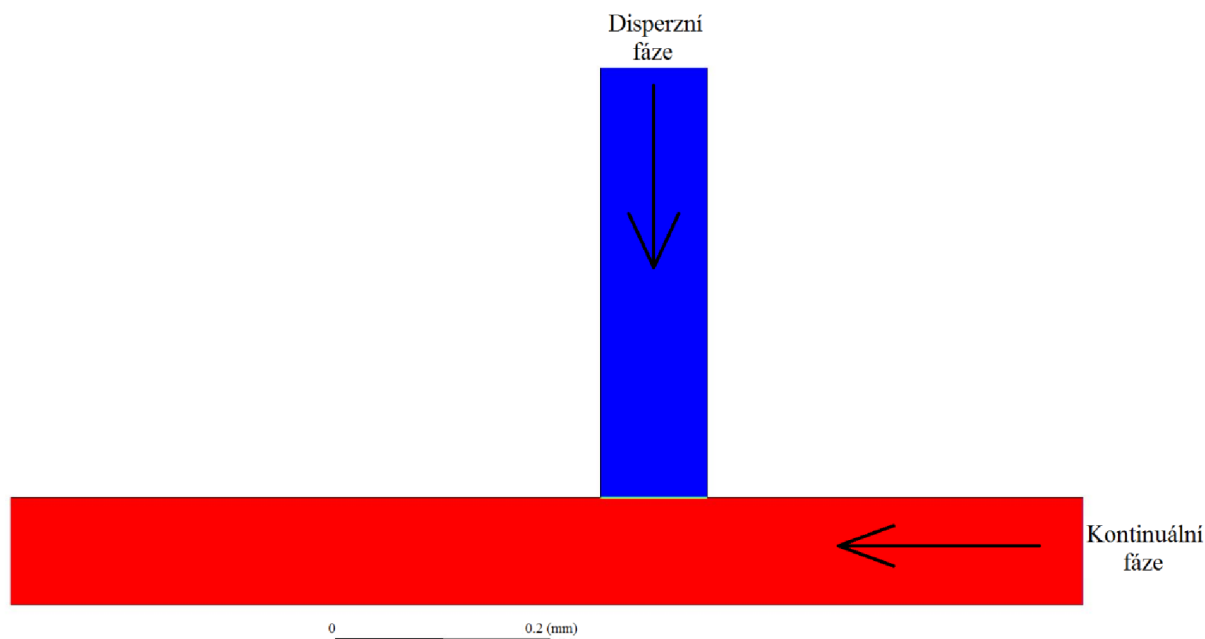
Obr. 26 Geometrie kanálku, dekompozice na tvorbu sítě a okrajové podmínky. Rozměry jsou v mm.



Obr. 27 Detail části zjemnění sítě

7.2.2 Okrajové podmínky a nastavení ve Fluentu

Okrajové podmínky byly zvoleny stejně jako u rovného kanálku (obr. 26). Na stěny kanálku byla opět zvolena podmínka typu wall, na výtok z domény podmínka pressure outlet (0 Pa), na vstupu vody do hlavního kanálku podmínka velocity inlet o velikosti rychlosti 0,417mm/s, na vstupu vzduchu do kolmého kanálku byla zvolena dvojnásobná rychlost, tak aby se $\varphi = 0,5$ (viz bezrozměrné veličiny kapitola 3). Rychlost vzduchu byla tedy 0,834 mm/s. Funkcí Region byla opět vytvořena oblast do kolmého kanálku, kde byl následně umístěn vzduch (obr. 28).



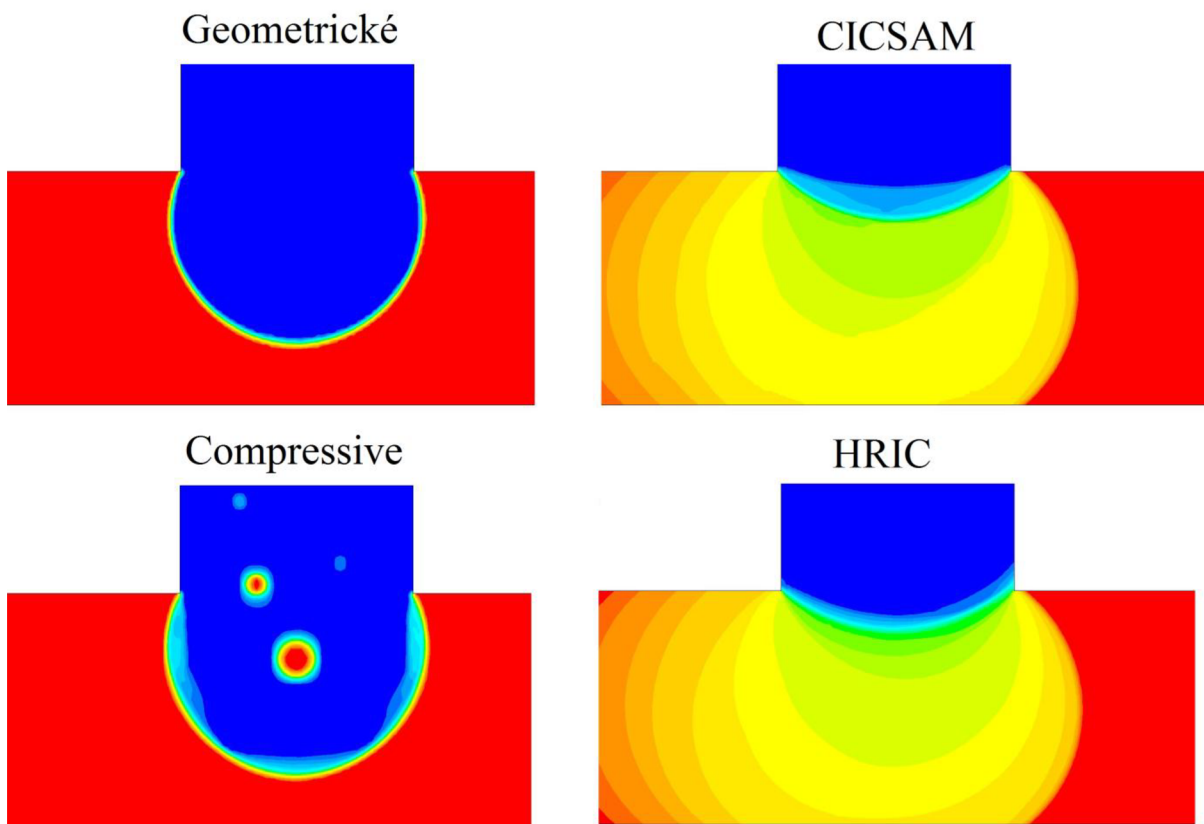
Obr. 28 Počáteční rozložení fází v T-kanálku

7.2.3 Volba diskretizačního schématu

Jelikož všechna dostupná diskretizační schémata pro explicitní řešení byla schopná vytvořit bublinku, která se následně pohybovala rovným kanálkem, byla odzkoušena také k tvorbě bublinky v T-kanálku. Nastavení kontaktního úhlu bylo zvoleno na 140° . Výpočet byl zastaven v čase 0,08 s (po 800 000 iteracích). V tomto čase je už patrné, které schéma dokáže vytvořit bublinku a které schéma je nepoužitelné.

Z obrázku 29 vyplývá, že geometrické schéma je opět nejlepší pro zachycení nejostřejšího rozhraní i celkově na tvorbu bublinky. Compressive schéma zachytilo rozhraní hůře než geometrické schéma a zároveň se do vzduchové bublinky dostaly kapičky vody. Poslední dvě schémata HRIC i CICSAM dopadla nejhůře, protože se bublinka v hlavním kanálku úplně rozpadla.

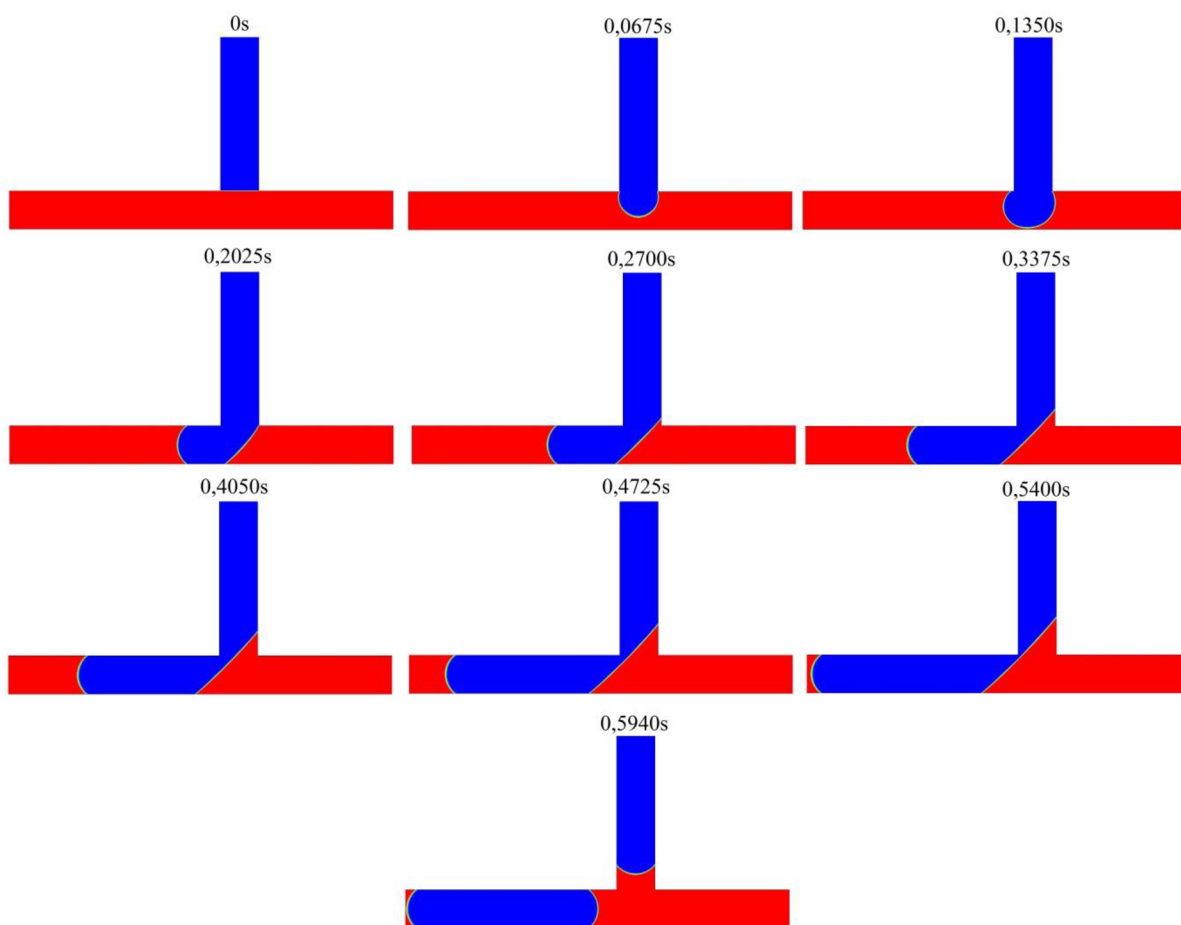
Bylo vyzkoušeno i implicitní řešení, které však má dostupná pouze schémata Compressive a HRIC. Obě se chovala stejně i při zvolení vyššího řádu přesnosti (Second Order Upwind) pro transportní rovnici (2. řád pro časový člen). Proto lze konstatovat, že nejlepší nastavení na zachycení rozhraní bublinky v mikrokanálku je použití explicitního řešení s geometrickým schématem.



Obr. 29 Diskretizační schémata při tvorbě bublinky v T-kanálku

7.2.4 Simulace pomocí geometrického schématu

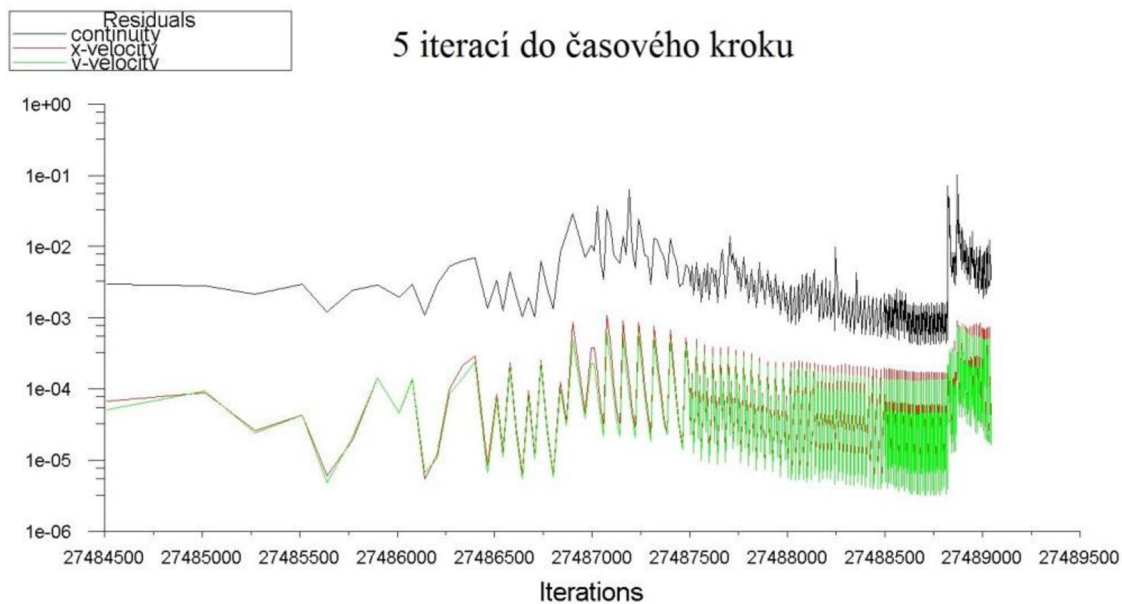
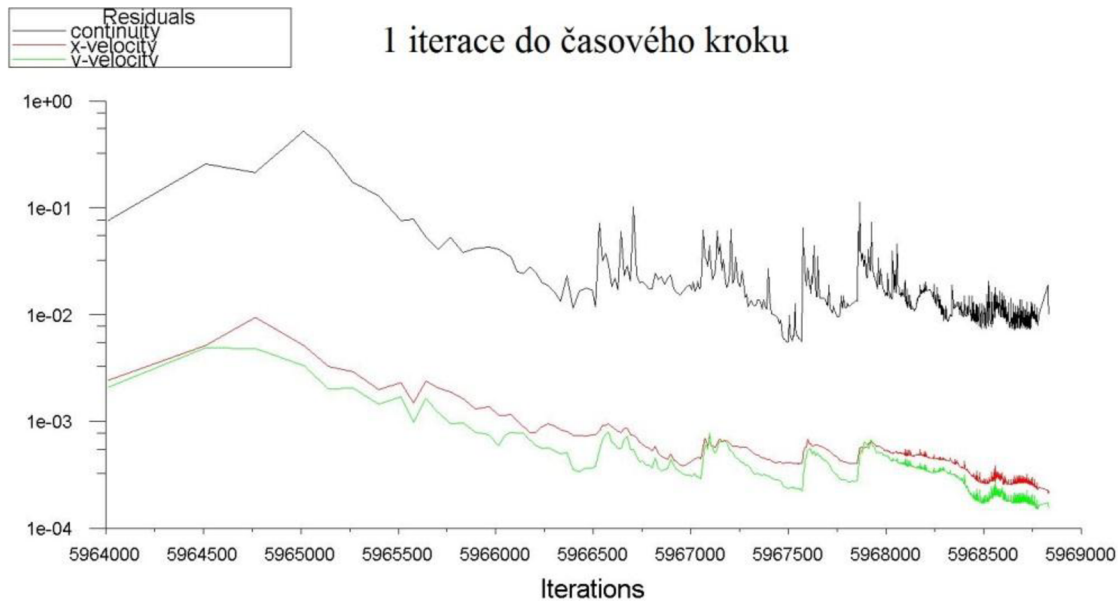
Geometrické schéma je tedy nejlepší na modelování a tvorbu bublinky v T-kanálku. Nejlépe zachytilo rozhraní a zároveň se nevytvořily žádné nestability ve formě pronikání jedné fáze do druhé, jako u schéma Compressive. Bylo ponecháno předchozí nastavení s kontaktním úhlem 140° a modelem CSF pro povrchové napětí. Povrchové napětí bylo opět zvoleno $0,073 \text{ N/m}$ (při teplotě $20 \text{ }^\circ\text{C}$). Takto nastavený výpočet byl zastaven, když se bublinka odštíhla pomocí rohu kanálku. K odštížení došlo v čase $0,594 \text{ s}$. Bylo tedy spočteno $5\,940\,000$ iterací a výpočet trval celkem 10 dní.



Obr. 30 Tvorba bublinky v T-kanálku metodou cross flowing

K odtržení došlo tehdy, když bublinka zabírala celý odtokový kanálek. V tomto případě byla délka bublinky ovlivněna okrajovou podmínkou na výstupu z domény. V souboru (viz příloha) je vidět, jak se začátek bublinky třikrát vrátí (pulzuje) než se konec odstříhne o roh kanálku.

S tímto výpočtem proběhl souběžně další výpočet, u kterého byl změněn pouze počet iterací do časového kroku. Jak již bylo zmíněno, z důvodu velice malého časového kroku není nutné počítat 20 iterací v rámci jednoho časového kroku (výchozí nastavení). Proto bylo nastaveno 5 iterací. Výpočet trval zhruba trojnásobnou dobu oproti výpočtu s 1 iterací neboli 28 dní. Porovnaná rezidua jsou na obrázku 31. Lze vidět, že přesnost rovnice kontinuity i rychlostí se zhruba o řád zlepšila, avšak na úkor velké časové náročnosti. Tvorba bublinky a čas odstřížení byl stejný jako výpočet s 1 iterací, proto lze konstatovat, že počet iterací do časového kroku nemá na tvorbu bublinky vliv.



Obr. 31 Porovnaná rezidua

7.2.5 Změna rychlostí na vstupu

S předchozím nastavením se sice bublinka vytvořila, avšak byla stejně dlouhá jako celý odtokový kanálek. Proto bylo potřeba odtokový kanálek prodloužit. Odtokový kanálek byl tedy prodloužen z délky 0,55 mm na délku 0,85 mm. Síť se prodloužením zvětšila na 47 000 buněk.

Jak již bylo zmíněno, velikost bublinky je u této metody závislá na poměru průtoku kontinuální a disperzní fáze. Poměr průtoků je vyjádřen pomocí bezrozměrné veličiny $\varphi = \frac{Q_c}{Q_d}$. Ta měla hodnotu v prvotním nastavení 0,5.

Podle teorie by bublinka neměla měnit svou délku s celkovým průtokem. K potvrzení teorie z důvodu časové náročnosti byl zvolen přístup zvyšování rychlosti. Veličina φ se neměnila a zůstávala na hodnotě 0,5. Rychlost byla vždy zvětšena dvojnásobně. Nejdříve se tedy rychlost zvětšila z původní hodnoty kontinuální fáze (0,417 mm/s) na hodnotu 0,833 mm/s a disperzní fáze (0,833 mm/s) na hodnotu 1,666 mm/s. Takto byla zvětšována až na hodnotu kontinuální fáze 6,664 mm/s a disperzní fáze 3,332 mm/s.

Potřebný čas na tvorba bublinky se s dvojnásobnou rychlostí zmenšil na polovinu. Výsledný čas při nejvyšší rychlosti byl pouhých 0,08 s. Výsledná délka bublinky se neměnila se zvyšující se rychlostí, takže byla teorie potvrzena.

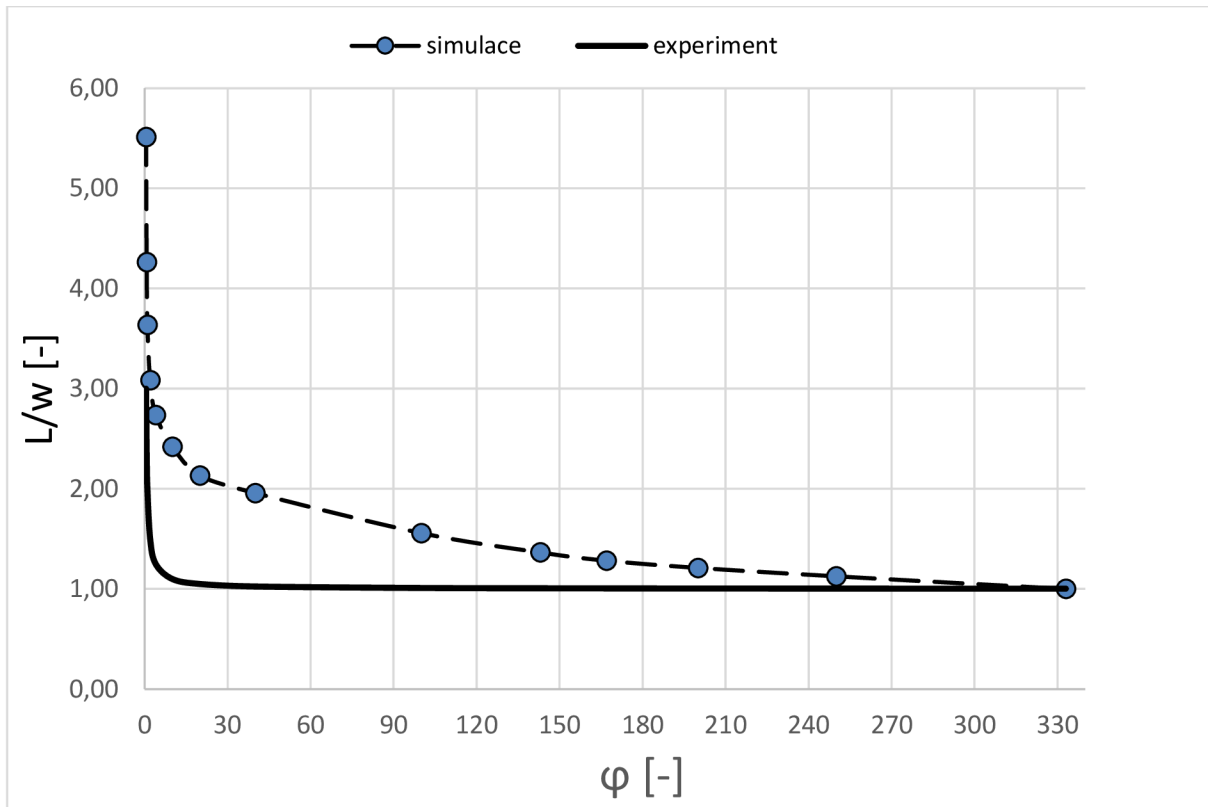
Cílem je však délku bublinky zmenšit. Délka bublinky by se měla zmenšovat se zvyšující se veličinou φ . Odhad délky bublinky na základě experimentálně ověřeného vztahu je (viz kapitola 5.1): $\frac{L}{w} = 1 + \alpha \frac{Q_d}{Q_c}$. Hodnota konstanty α byla zvolena 1. Rychlost disperzní fáze zůstávala na konstantní hodnotě 1,666 mm/s a velikost kontinuální fáze se zvětšovala. Nejdříve se rychlost vody zvětšila na hodnotu 1,2495 mm/s. Tím se hodnota φ zvětšila na 0,75. Poté byla rychlost obou vstupů stejná, takže se $\varphi = 1$. Pak byla rychlost vody zvýšena dvojnásobně, takže se φ změnilo na hodnotu 2 a poté na 4. Hodnota se zvětšovala až došlo k vytvoření bublinky typu B (kapitola 5.1), která je obklopena ze všech stran druhou fází. Všechny hodnoty φ jsou v tabulce 3. Ze získaných výsledků byl vytvořen graf závislosti L/w na φ , kde L je délka bublinky a w je šířka kanálku. Kritická hodnota φ je 333, při které je délka bublinky 0,1 mm, takže je stejně dlouhá jako šířka kanálku. Nad kritickou hodnotou φ se začne tvořit bublinka typu B.

v_c	φ	L	L/w	$(v_d/v_c)+1$	t
[mm/s]	[-]	[mm]	[-]	[-]	[s]
0,833	0,5	0,551	5,51	3,00	0,25
1,2495	0,75	0,426	4,26	2,33	0,23
1,666	1	0,364	3,64	2,00	0,18
3,332	2	0,309	3,09	1,50	0,15
6,664	4	0,274	2,74	1,25	0,125
16,66	10	0,242	2,42	1,10	0,107
33,32	20	0,213	2,13	1,05	0,095
66,64	40	0,196	1,96	1,03	0,085
166,6	100	0,156	1,56	1,01	0,061
238,28	143	0,136	1,36	1,01	0,049
278,27	167	0,128	1,28	1,01	0,0435
333,2	200	0,121	1,21	1,01	0,038
416,5	250	0,113	1,13	1,00	0,0332
554,778	333	0,100	1,00	1,00	0,0276

Tabulka 3 Délka bublinky L v závislosti na zvoleném φ ($v_{c,d}$ je rychlost kontinuální a disperzní fáze, t je čas odstrižení bublinky o roh kanálku)



Obr. 32 Měření délky bublinky



Graf 2 Závislost délky bublinky a času odstřížení na veličině φ

Z porovnání údajů s vypočtenými simulacemi a provedenými experimenty uvedenými v práci [19] vyplývá, že tento trend závislosti délky bublinky na φ je správný. Délka bublinky při $\varphi = 0,5$ je však skoro dvojnásobná oproti experimentálně odvozenému vzorci. To může být z důvodu nevytvoření filmu kontinuální fáze mezi bublinkou a stěnou nebo nepřesnosti ve výpočtu (např. neexistence modelu dynamického úhlu). Se zmenšující se hodnotou φ se rozdíl hodnot délky zmenšují. Rychlost, která byla potřebná k vytvoření kritické hodnoty φ je však příliš velká a nejspíše by ji nebylo možné v mikrokanálku dosáhnout.

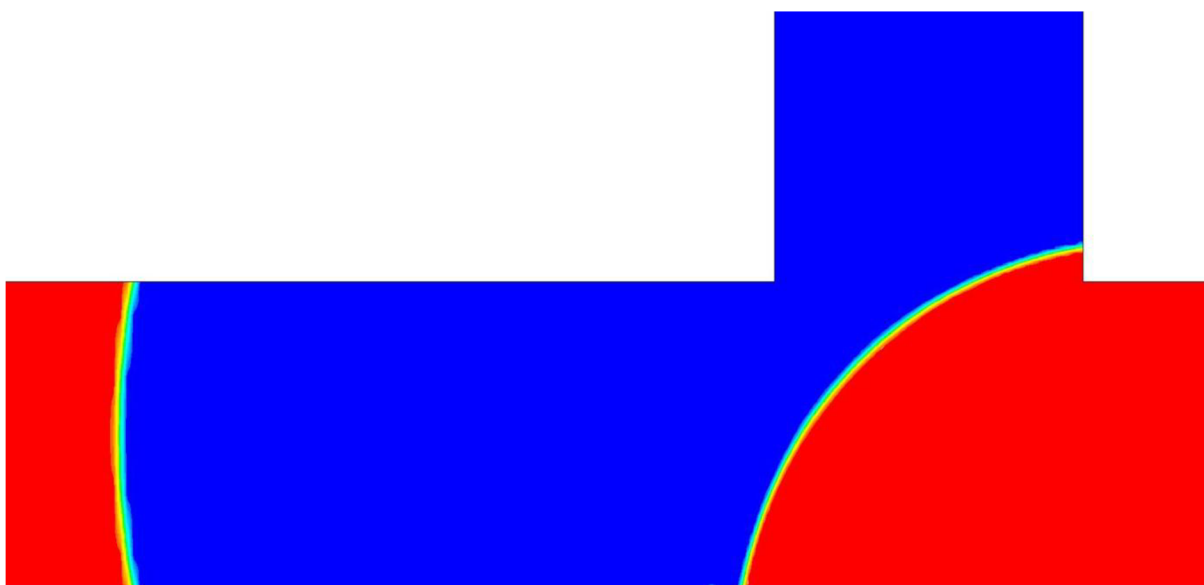
Bublinka typu B, kterou ze všech stran obklopuje druhá fáze, by bylo možné vytvořit rozšířením hlavního kanálku. Tím by se délka bublinky zmenšila a ke kritické hodnotě φ by došlo při menší rychlosti kontinuální fáze.

7.2.6 Ovlivňování tvorby bublinky

Délku a tvorbu bublinky mohou ovlivnit další dvě nastavení. Prvním je model povrchového napětí a druhým je podmínka na výstupu.

Model povrchového napětí CSF byl porovnán s modelem CSS (kapitola 6.4). Ověření proběhlo i s vlivem kontaktního úhlu na tvorbu bublinky. Byl zvolen úhel 140° a 100° pro oba modely povrchového napětí. Porovnání vlivu kontaktního úhlu a modelu povrchového napětí proběhlo za konstantní hodnoty $\varphi = 0,75$.

Model povrchového napětí výslednou délku bublinky ani její tvorbu neovlivnil. Pouze pro úhel 100° byl krček při odstřížení více prohnutý než při úhlu 140° . Délka bublinky klesla v závislosti na zmenšení kontaktního úhlu. Příčinou je při menším nastavení úhlu více prohnutý krček, který se rychleji odstříhne o roh kanálku.



Obr. 33 Vznik krčku při nastavení kontaktního úhlu 100°

CSF úhel 100°



CSF úhel 140°



CSS úhel 100°



CSS úhel 140°



Obr. 34 Porovnání vlivu kontaktního úhlu a modelu povrchového napětí na délku a tvorbu bublinky

Druhým nastavením, u kterého je předpoklad ovlivnění tvorby celé bublinky, je podmínka na výstupu pressure outlet. Proto byla zvolena podmínka velocity inlet s opačným směrem (aby rychlost směřovala z domény). Rychlost byla nastavena podle rovnice kontinuity neboli sečetly obě rychlosti na vstupu. Výsledná rychlost byla na výstupu nastavena na 2,9155 mm/s. Bublina se vytvořila stejným způsobem a odstříhla se ve stejný čas. Proto je pravděpodobné, že podmínka na výstupu pressure outlet neovlivní tvorbu bublinky i při nastavení jiných vstupních rychlostí.

Veškerá nastavení jsou tedy správná a velikost a tvorba bublinky záleží pouze na rychlosti obou vstupů.

8. Simulace bublinky v T-kanálku ve 3D

Tato kapitola se zabývá tvorbou bublinky ve 3D.

8.1 Tvorba geometrie a sítě

Doména pro 3D má stejné rozměry jako původní T-kanálek ve 2D v kapitole 7.2.1. Protože je zapotřebí co nejvíce snížit počet buněk v síti, byl vybrán kratší typ kanálku. Geometrie T-kanálku je tedy stejná jako na obrázku 26. Hloubka kanálku byla zvolena 0,33 mm dle zdroje [18].

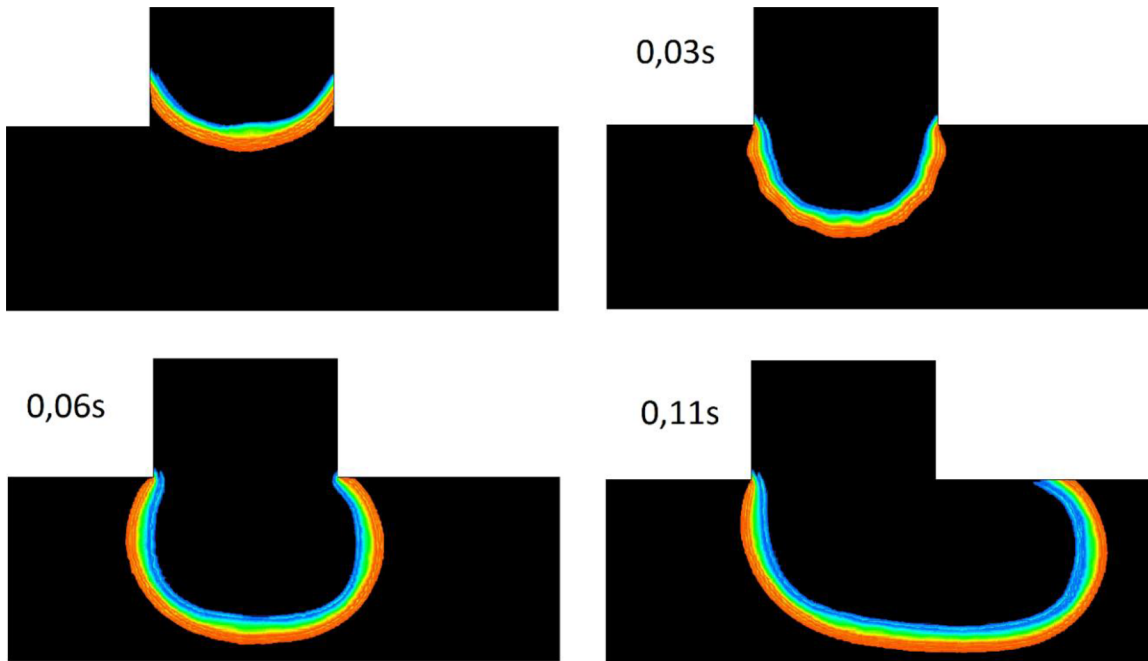
Síť byla tvořena stejným způsobem jako již zmiňovaný T-kanálek ve 2D. Konečná verze kanálku ve 3D má 798 000 prvků. Zjemnění sítě bylo opět provedeno ke stěnám kanálku a ke hraně, kde se bublinka odtrhne.

8.2 Výpočet ve Fluentu a postprocessing

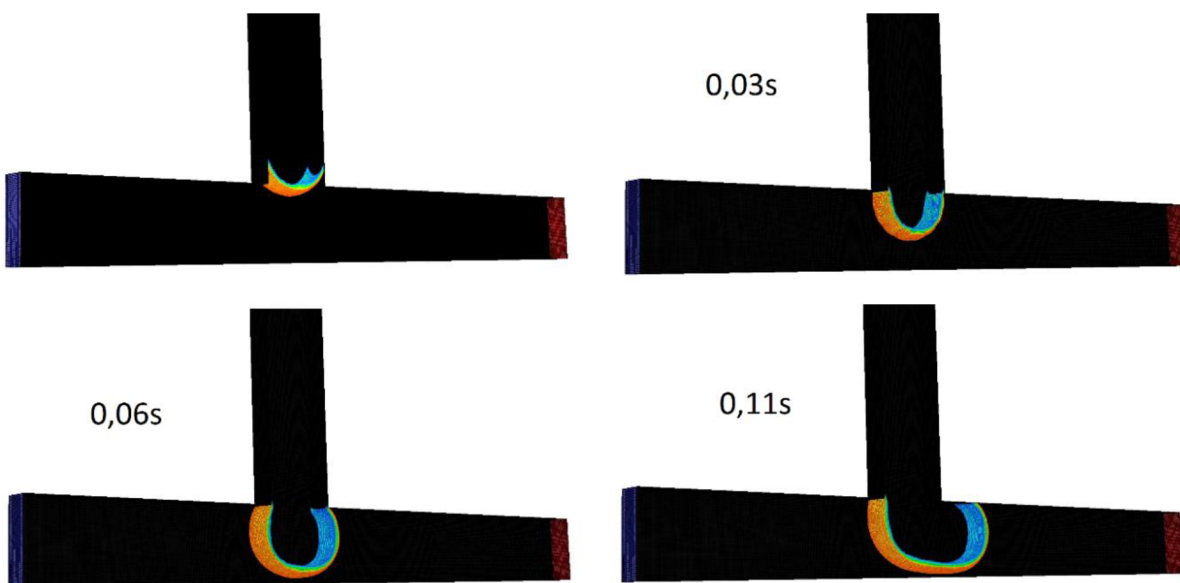
Nastavení okrajových podmínek bylo stejné jako u kanálku ve 2D. Rychlost byla nastavena při hodnotě $\varphi = 0,75$ (viz tabulka 3). Při této hodnotě φ bylo dokázáno, že tvorba bublinky není ovlivněna jiným nastavením (viz kapitola 7.2.6). U kratšího typu kanálku má odtokový kanálek délku 0,55 mm a délka bublinky při nastavení hodnoty $\varphi = 0,75$ byla ve 2D pouze 0,42 mm. Z toho vyplývá, že by nemělo dojít k ovlivnění bublinky výstupní okrajovou podmínkou, a proto není potřeba použít prodloužený typ kanálku.

Úlohu se nepodařilo dopočítat z důvodu časové náročnosti. Výpočet probíhal na školním clusteru na 7 jádrech a trval celkem 50 dní. Za tuto dobu bylo spočteno přes milión iterací (viz obrázek 33 – 0,11 s). Bublinka se dle výpočtu ve 2D má odštíhnout v čase 0,23 s, takže by k dokončení bylo zapotřebí spočítat dalších 1,2 miliónu iterací.

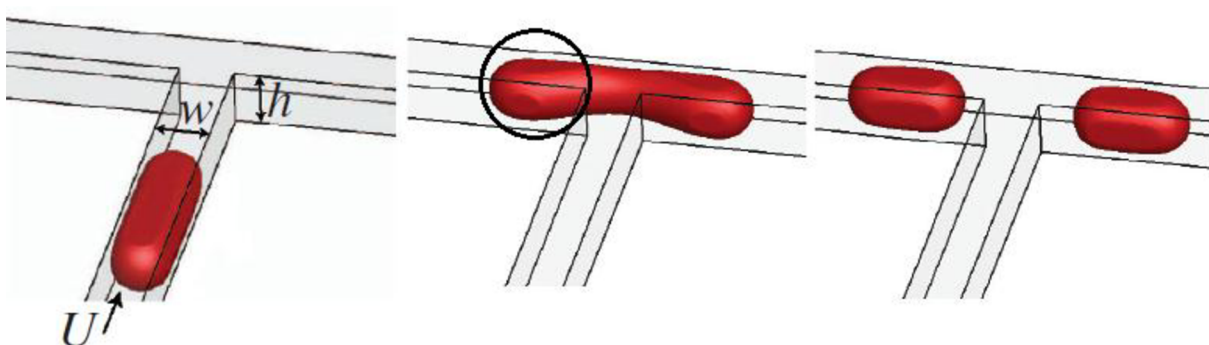
Z uvedených obrázků je zřejmé, že tenký vodní film kolem bublinky se nevytvořil stejně jako ve 2D. Nejvíce je to zřetelné na rozích kanálku, kde má být mezi bublinkou a stěnou kanálku kontinuální fáze, aby došlo k zaoblení bublinky v rohu kanálku.



Obr. 35 Průběh tvorby bublinky z předního pohledu



Obr. 36 Tvorba bublinky



Obr. 37 Vodní film mezi stěnou a bublinkou [18]

9. Závěr

V předkládané práci bylo simulováno dvoufázové proudění bublinek v mikrokanálku. Cílem práce bylo popsat vliv jednotlivých nastavení na tvorbu bublinky. Byla vyzkoušena různá diskretizační schémata, velikosti výpočetních sítí, modely povrchového napětí a jejich vliv na tloušťku a tvar rozhraní. Všechna nastavení byla nejdříve vyzkoušena ve 2D. Následně bylo vybráno nejlepší nastavení, které bylo simulováno ve 3D.

V první teoretické – rešeršní části se diplomová práce zabývá využitím mikrofluidních bublin. Používají se například v chemických laboratořích na různé analýzy. Další velkou oblastí využití je mísení dvou nebo více kapalin přímo uvnitř kapičky. Nespornou výhodou mikrofluidních zařízení je jejich velikost a potřeba malého množství testované látky a činidel. V další kapitole rešeršní části je uveden vliv koheze kapalin na tvorbu rozhraní mezi dvěma nemísitelnými kapalinami. Je popsáno povrchové a mezifázové napětí a jsou vysvětleny důležité bezrozměrné veličiny. Další kapitola se zabývá pasivními mikromísíči a jejich rozdílnými principy mísení kapalin. Dále jsou uvedeny metody na tvorbu bublinek v T-kanálku a parametry ovlivňující výslednou podobu bublinky. Tématem poslední části je metoda Volume of fluid (VOF). Jsou zde popsána diskretizační schémata, jejich výhody, nastavení povrchového napětí a vliv adheze stěny na kapalinu.

Ve výpočtové části je proveden nejdříve návrh rovného kanálku, ve kterém se simuloval vliv různých nastavení na rozhraní bublinky. Pracovními látkami jsou voda a vzduch. Byla vybrána varianta vzduchové bublinky ve vodě. Nejdříve bylo nutno zjistit velikost časového kroku. Bylo proto použito Courantovo číslo, které je závislé na rychlosti vystupující z buňky výpočetní sítě a časovém kroku. Na základě Courantova čísla byla nakonec zvolena pevná hodnota časového kroku 10^{-7} s. Toto nastavení se ukázalo jako kritické k vytvoření rozhraní mezi fázemi. Díky malému časovému kroku byla zvolena jedna iterace v rámci jednoho časového kroku. Dále byl zkoušen vliv diskretizačních schémat dostupných pro explicitní řešení na ostrost rozhraní. Nejostřejší rozhraní vykreslilo geometrické schéma, které má být dle teorie ze všech dostupných schémat nejnáročnější na výpočetní čas. Výpočet však trval u všech schémat zhruba stejně dlouho, proto je geometrické schéma nejvhodnější pro tento typ úlohy. V následující simulaci byl zkoušen vliv kontaktního úhlu. Úhel se měnil od 90° do hodnoty 160° . Bublinka se s narůstajícím úhlem formovala dle předpokladu. Dále byl zkoumán vliv velikosti buněk výpočetní sítě na ostrost rozhraní. Byla vybrána síť s nejlepším poměrem ostrosti rozhraní k počtu buněk výpočetní sítě. Velikost buněk také ovlivnilo celkové proudění v bublince. Na okrajích rozhraní se vytvořily víry, které ovlivňovaly přirozené proudění. Teoreticky by tento problém mohl být vyřešen použitím dynamické sítě, která by zmenšovala buňky přímo na rozhraní. Výpočet s využitím dynamické sítě a vliv na proudění v bublince by mohl být předmětem další práce.

V druhé výpočtové části se práce zabývá simulací tvorby bublinky v T-kanálku. Byla vybrána metoda cross flowing. V této metodě je disperzní fáze v kolmém kanálku a kontinuální fáze je v hlavním kanálku. Aby se vytvořila vzduchová bublinka ve vodě, představuje disperzní fáze vzduch a kontinuální fáze vodu. Velikost buněk výpočetní sítě byla zvolena stejně jako u druhé nejjemnější sítě. Poměr rychlostí disperzní a kontinuální fáze byl nastaven tak, aby bezrozměrná veličina $\phi = 0,5$. Všechna diskretizační schémata byla znovu vyzkoušena, jelikož každé schéma vytvořilo bublinku. Rozhraní bylo opět nejlépe zobrazeno geometrickým schématem, které bylo následně použito k vytvoření bublinky v T-kanálku. Simultánně proběhl výpočet, ve kterém byl počet iterací v rámci jednoho časového kroku

zvýšen na pět. Bublinka se odstříhla ve stejný čas a měla stejnou délku, proto lze konstatovat, že počet iterací nemá vliv na tvorbu bublinky. Následně byla zjišťována závislost délky bublinky na hodnotě φ . Výsledek byl porovnán s experimentálně ověřenými hodnotami. Délka bublinky v závislosti na φ má stejný trend, ale hodnoty délky jsou vyšší (zvláště u nižších hodnot φ), než je tomu z výpočtu experimentálně ověřeného vzorce. Faktorů, které mohou ovlivňovat délku je více, například vytvoření tenkého filmu kontinuální fáze mezi bublinkou a stěnou nebo parazitní proudy u rozhraní.

Poslední část se zabývá simulací bublinky ve 3D. Bylo použito stejné nastavení velikosti buněk výpočetní sítě, jako ve 2D kanálku a rychlosti byly nastaveny podle hodnoty $\varphi = 0,75$. Bublinka se chovala stejně jako ve 2D kanálku. Výpočet se nepodařilo dokončit z důvodu velké časové náročnosti. Celkem výpočet trval 50 dní a k odstřížení bublinky by byl potřeba dvojnásobný čas. Z tvorby bublinky lze říci, že se bublinka pravděpodobně vytvoří stejně, takže se výpočet ve 2D dá považovat za vyhovující. Výpočet ve 3D by tak sloužil pouze jako kontrola již vypočítaných simulací ve 2D.

Seznam použitých zdrojů

- [1] YU BASOVA, Evgenia a Frantisek FORET. *Droplet microfluidics in (bio)chemical analysis.* , 22-38. DOI: 10.1039/C4AN01209G.
- [2] WEI-LUNG, Chou, Lee PEE-YEW, Yang CING-LONG, Huang WEN-YING a Lin YUNG-SHENG. *Recent Advances in Applications of Droplet Microfluidics* [online]. 2015, , 1249-1271 [cit. 2017-04-10]. DOI: 10.3390/mi6091249. ISSN 2072-666X.
- [3] ZHAO, Chun-Xia a Anton P.J. MIDDELBERG. *Two-phase microfluidic flows.* 2011, 1394–1411.
- [4] WICHTERLE, Kamil. *Povrchové / mezifázové napětí v hydrostatice a hydrodynamice.* Praha: Česká společnost chemického inženýrství, 1997. ISBN 80-86059-24-3.
- [5] ANSYS Customer Portal [online]. United States: ANSYS [cit. 2017-05-16]. Dostupné z: https://support.ansys.com/AnsysCustomerPortal/en_us/Knowledge+Resources/Online+Documentation/Previous+Releases/17.2
- [6] WEIBEL, D a G WHITESIDES. Applications of microfluidics in chemical biology. *Current Opinion in Chemical Biology* [online]. 2006, vol. 10, issue 6, s. 584-591 [cit. 2015-04-12]. DOI: 10.1016/j.cbpa.2006.10.016
- [7] Stone, H.A., Stroock, A.D., Ajdari, A. Engineering Flows in Small Devices: Microfluidics Toward Lab-on-Chip, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 36, s. 381-411. doi: 10.1146/annurev.fluid.36.050802.122124
- [8] KARNIADAKIS, George, Ali BEŞKÖK a Narayana Rao ALURU. *Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation.* New York: Springer, 2005, xxi, 817 s. Interdisciplinary applied mathematics. ISBN 03-872-2197-2.
- [9] CAPRETTO, Lorenzo, Wei CHENG, Martyn HILL a Xunli ZHANG. Micromixing Within Microfluidic Devices. [online]. s. 27 [cit. 2014-03-08]. DOI: 10.1007/128_2011_150. Dostupné z: http://link.springer.com/10.1007/128_2011_150
- [10] LEE, Chia-Yen, Chin-Lung CHANG, Yao-Nan WANG a Lung-Ming FU. Microfluidic Mixing: A Review. *International Journal of Molecular Sciences* [online]. 2011, vol. 12, issue 12, s. 3263-3287 [cit. 2014-03-14]. DOI: 10.3390/ijms12053263. Dostupné z: <http://www.mdpi.com/1422-0067/12/5/3263/>
- [11] SENTURIA, Stephen D. *Microsystem design.* Boston: Kluwer Academic, 2002, xxvi, 716 s. ISBN 0-7923-7246-8.
- [12] T SULLIVAN, Matthew a Howard A STONE. *The role of feedback in microfluidic flow-focusing devices.* , 1-13. DOI: 10.1098/rsta.2008.0003.
- [13] VAN STEIJN, Volkert, Chris R. KLEIJN a Michiel T. KREUTZER. *Predictive model for the size of bubbles and droplets created in microfluidic T-junctions.* , 2513-2518. DOI: 10.1039/C002625E.

- [14] GARSTECKI, Piotr, Michael J. FUERSTMAN, Howard A. STONE a George M. WHITESIDES. Formation of droplets and bubbles in a microfluidic T-junction—scaling and mechanism of break-up. *Lab on a Chip* [online]. 2006, (3), 437-446 [cit. 2017-05-22]. DOI: 10.1039/b510841a. Dostupné z: <http://www.princeton.edu/~stonelab/Publications/pdfs/From%20Howard/LabOnAChipSoftMatter/GarsteckiFuerstmanStoneWhitesidesLabOnAChip06.pdf>
- [15] BADILESCU, Simona a Muthukumarán PACKIRISAMY. *Microfluidics-Nano-Integration for Synthesis and Sensing* [online]. 2012, , 1278-1310 [cit. 2017-04-11]. DOI: 10.3390/polym4021278. Dostupné z: <http://www.mdpi.com/2073-4360/4/2/1278/html>
- [16] RONG-CONG, Luo a Chen CHIA-HUNG. *Structured Microgels through Microfluidic Assembly and Their Biomedical Applications* [online]. 2012, , 23 [cit. 2017-04-10]. DOI: 10.4236/soft.2012.11001.
- [17] YUNKER, Peter. *Active protein-coated drops assembled via hydrophobic interactions: a new approach to cell communication and drug delivery* [online]. In: . [cit. 2017-04-10].
- [18] HOANG, Duong A., Volkert van STEIJN, Luis M. PORTELA, Michiel T. KREUTZER a Chris R. KLEIJN. *Benchmark numerical simulations of segmented two-phase flows in microchannels using the Volume of Fluid method*. J.M. Burgers Centre for Fluid Mechanics, 2013.
- [19] XIAO-BIN, Li, Li FENG-CHEN, Yang JUAN-CHENG, Marie a Masamichi OISHI. Study on the mechanism of droplet formation in T-junction microchannel. *Chemical Engineering Science* [online]. 2015, 13 [cit. 2017-05-16]. DOI: 10.1016/j.ces.2011.10.048. Dostupné z: https://www.researchgate.net/publication/251552253_Study_on_the_mechanism_of_droplet_formation_in_T-junction_microchannel

Seznam příloh

1. CD – ROM, kde je umístěna diplomová práce ve formátu pdf a soubory s formováním a tvorbou bublinky ve formátu gif