



微反应器分形流道中物质利用效率优化研究

康东亮^{1,2}, 沈文豪^{1,2}, 赵亚溥^{1,2*}

1. 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190;

2. 中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049

* E-mail: yzhao@imech.ac.cn

收稿日期: 2019-02-15; 接受日期: 2019-06-13; 网络版发表日期: 2019-10-08

国家自然科学基金(批准号: 11872363, 51861145314)、中国科学院前沿科学重点研究计划(编号: QYZDJSSW-JSC019)和中国科学院战略性先导科技专项(B类)(编号: XDB22040401)资助项目

摘要 自然界广泛存在的分形流道能够实现物质的高效率输运和利用, 对分形流道的研究在医学、化学以及社会学等诸多领域具有非常重要的意义. 本文采用理论分析和数值模拟相结合的方法, 从物质最优化利用角度出发, 讨论分形流道中各级流道的作用和末端流道发育极限. 研究表明, 随着流道内Péclet数(Pe)不断增大, 流道内物质利用率先增大后减小, 可分为3种状态: 对流限制状态、过渡状态和扩散限制状态. 过渡状态对应的物质利用率最高, 而扩散限制状态下物质输运速率最大. 不同限制状态下, 影响物质利用率的因素不同, 物质利用率与 Pe 数分别呈现不同标度关系. 通过优化算法获得分形流道和其流场信息, 与局部分析结果对比发现, 流道从初级向末端发育过程中, 流道逐级收窄, Pe 数降低, 流体状态从扩散限制状态逐步转变为过渡状态. 综合上述分析, 分形流道中物质输运和利用分别在初级流道和末端流道中完成, 各层级分工协作高效率地完成输运和利用的任务, 并且过渡状态是流道发育的最优极限. 本文的研究结果有助于对分形流道的深入理解, 可为页岩油气缝网设计、高效催化反应器设计以及高灵敏传感器设计等应用领域提供理论指导.

关键词 分形流道, 输运与利用, 优化, 标度律

1 引言

物质的高效率输运和利用是存在于自然界中的重要现象, 其主要的表现形式就是跨尺度的分形流道输运, 如肾脏对血液中代谢废物的处理^[1]、矿物质在叶脉中的输运与吸收^[2,3]、氧气在血管中的输运和消耗^[4]等, 这种常见并具有巨大实用价值的问题已被广泛研究, 并被应用于页岩气藏开采^[5,6]、医学微型快速检测

芯片开发^[7]、化学高效率催化器制造以及交通网络设计等诸多领域^[8,9]. 在分形流道系统中, 初级流道(如肾脏动脉)流体处于层流主导状态, 具有直径大、流速高的特点, 能够将物质快速运送至目标区域; 随着向下级流道发展, 流道逐级收窄流速降低, 近末端流道中流体处于扩散主导状态, 流体携带的溶质能够通过扩散迅速抵达反应表面, 使得输运物质被充分利用^[10]. 这种对流和扩散的竞争关系可以用无量纲数Péclet数(Pe)表

引用格式: 康东亮, 沈文豪, 赵亚溥. 微反应器分形流道中物质利用效率优化研究. 中国科学: 技术科学, 2019, 49: 1159-1167

Kang D L, Shen W H, Zhao Y P. The optimization of material utilization efficiency in fractal flow channels of the microreactor (in Chinese). Sci Sin Tech, 2019, 49: 1159-1167, doi: 10.1360/SST-2019-0058

征, Pe 数被定义为对流质量输运速率和扩散质量输运速率的比值, 广泛应用于传质学和传热学等领域^[11], 因此可以通过 Pe 数来表征不同级别流道内溶剂和溶质的输运状态.

Murray^[12,13]从维持血液输运所需功最小的角度对动物血管最优化布局问题进行研究, 指出分形流道中父流道与其子流道管径间的标度关系为 $r_k^\alpha = \sum_1^n r_{k+1}^\alpha$ (层流 $\alpha=3$, 扩散 $\alpha=2$, n 为子级流道数); Bejan和Errera^[14]从分形流道系统中流体流动阻力最小化的角度出发, 对电子芯片最优化传质与传热问题进行研究, 指出体积与传热之间的3/4标度关系^[15,16], 这些模型简洁而有效地描述了分形流道系统的流道特性. Pence^[17]从理论上证明分形流道系统相较于平行流道的优越性; Chen和Cheng^[18]则通过对分形流道系统发育级别对其传热效率影响的研究, 指出分形流道系统层级越多其输运性能越优越. 从自然界的例证可知, 这种流道的分层不可无限向下延伸, 存在合适的最末端流道使物质的输运和利用最优, 解决这个问题需要深入理解各级流道承担角色, 计算其物质利用效率, 当前尚未有从这个角度对分形流道展开系统的研究.

本文从流道对物质最优化利用的角度出发, 使用理论分析和数值模拟相结合的方法对分形流道系统进行分析. 通过标度分析的方式, 从局部入手得到不同流动状态下流道内物质利用率与 Pe 数的标度关系, 发现不同流动状态下限制物质利用率的因素不同. 利用优化算法得到以系统总体物质利用率最优为目标进行优化后的分形流道, 通过对各层级流道的物质输运和利用情况进行分析, 明确各级流道在整体中承担的任务, 发现分形流道系统向下级发育的方向, 确定了末端流道的发育极限.

2 模型与计算方法

2.1 微反应器流道局部物理模型

由于在各级流道中流道长细比一般较大, 为了研究在各级流道中溶质被输运和消耗的具体情况, 在模拟中将流道简化为一条长直通道如图1所示, 流道的宽度为 W , 高度为 H , 长度为 L , 在流道的底部($y=0$ 处)设置反应器对溶质进行消耗, 设置不同的流场参数来对应各级流道中的流场状态. 携带物质的流体在流道中

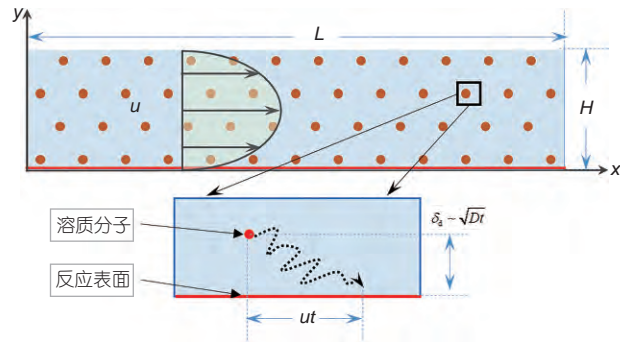


图1 (网络版彩图)微反应器局部流道模型

以层流的形式流过, 在流动过程中溶质分子在扩散的作用下到达流道底部. 在稳定流动和扩散状态下, 流体在流道中的流动是定常平板Poiseuille流动, 且溶质浓度不随时间变化, 即 $\partial c / \partial t = 0$. 因此, 流道内溶剂流动剖面 and 溶质控制方程分别为

$$u(y) = \frac{4u_{\max}}{H}y\left(1 - \frac{y}{H}\right), \quad (1)$$

$$u \frac{\partial c}{\partial x} - D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) = kc, \quad (2)$$

式中, k 为比例常数, 单位 s^{-1} , c 为溶质浓度, 单位 mol/m^3 .

2.2 微反应器流道的物理模型

仿照肾脏结构^[19]内血液中的代谢物过滤以及血液的重吸收过程, 建立二维椭圆形模型并使用优化算法^[20]在模型内以总体物质利用率最优为目标进行流道优化. 在模型两侧设置入口和出口. 在入口处, 携带确定浓度溶质 c_0 的不可压缩牛顿流体在压强差 Δp 的作用下持续流入反应区, 在反应区中溶质被消耗. 达到动态平衡后, 溶剂的流动遵循Navier-Stokes方程:

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \alpha(\varepsilon) \mathbf{u}, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

其中, \mathbf{u} 为流体速度矢量, ρ 为流体密度, 由于溶质的质量相比较于溶剂极少, 因此在反应过程中可以认为流体的密度不变, ε 为孔隙率, $\alpha(\varepsilon)$ 取决于多孔介质中的孔隙分布且

$$\alpha(\varepsilon) = \frac{\mu}{Da \cdot L^2} \cdot \frac{q(1-\varepsilon)}{q+\varepsilon}, \quad (4)$$

$$\varepsilon = \frac{V_{\text{porous}}}{V_{\text{total}}}, \quad (5)$$

式中, Da 为达西数(Darcy number), 是孔隙内流体黏性与内摩擦力之比, 表示孔隙介质渗透能力的大小^[21]. V_{porous} 代表孔隙总体积, V_{total} 代表总体积, μ 为溶剂黏度系数, L 为模型长度, 无量纲数 q 用于调节孔隙率对 $\alpha(\varepsilon)$ 的影响, 使计算过程中对孔隙率变大时的计算更加精确, 溶质在介质中扩散系数 D 为定值的情况下, 其输运和消耗遵循对流扩散方程:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla c - D \nabla^2 c = r, \quad (6)$$

其中, c 为溶质浓度, r 为溶质消耗速率. 假设物质的消耗速率与其在表面的浓度成正比, 即

$$r = k(1 - \varepsilon)c, \quad (7)$$

式中, k 为比例常数, 单位为 s^{-1} . 在模型中的物质利用率为溶质消耗量与流入溶质量的比值, 要达到整体利用效率最优可以令整体的平均反应速率

$$r_{\text{avg}} = \frac{1}{V_{\text{total}}} \int r dV = \frac{1}{V_{\text{total}}} \int k(1 - \varepsilon)c dV \quad (8)$$

的值达到最大.

计算过程通过多场耦合软件COMSOL Multiphysics完成, 边界条件如图2所示, 为了得到复杂度合适的分形结构, 本文在计算过程中设置0.1, 1, 10 Pa三种不同的压强差, 流入物质初始浓度 10 mol/m^3 , 溶质的扩散系数为 $10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$. 优化过程中的目标参数为孔隙率 ε 其取值范围为0~1. 执行过程中, 流体在算法自动生成的流道内流动, 并且流体携带的溶质在与基质接触处被消耗, 通过不断改变模型各处的孔隙率改变流道布局使总体物质利用率更大, 如此迭代直至达到设定的终止条件.

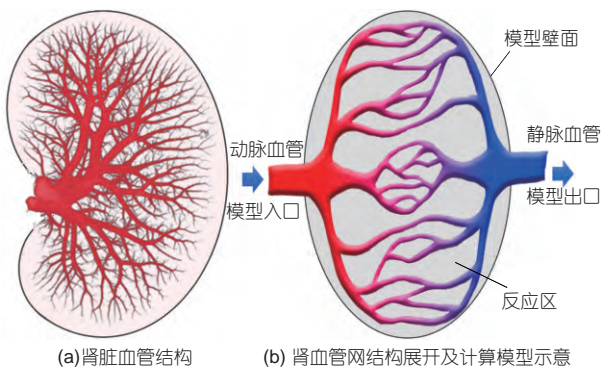


图2 (网络版彩图)模型边界条件示意

3 结果与讨论

3.1 分形流道的局部模拟

为了明确各级流道在分形流道系统中所对应的角色, 本文将分形流道的分支简化为长直单流道对物质的输运和利用问题进行研究. 通过调整扩散系数和流体流动速度获得不同 Pe 数, 使用数值模拟方法得到不同 Pe 数下局部流场中物质的输运和利用情况, 来对应整体流场中的流动状态. 设置流体最大速度的取值范围 $5 \times 10^{-6} \text{ m/s} \leq v_{\text{max}} \leq 5 \times 10^{-3} \text{ m/s}$ 、流体内溶质的扩散系数取值范围 $5 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s} \leq D \leq 5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, 通过对区间内速度和扩散系数的组合, 获得介于 $10^5 \sim 10^{-5}$ 之间的 Pe 数.

在图3中给出了流动速度为 5×10^{-3} , 5×10^{-4} , 5×10^{-5} , $5 \times 10^{-6} \text{ m/s}$ 物质利用率随 Pe 数变化的曲线. 分别在4条曲线上上升段(A_1, B_1, C_1, D_1)、平台段(A_2, B_2, C_2, D_2)和下降段(A_3, B_3, C_3, D_3)各选取一个点, 画出该点对应的物质浓度分布状态, 得到图4. 计算结果显示, 物质利用率在 $Pe \ll 1$ 阶段, 随着 Pe 数的增加迅速增加, 在 $Pe \approx 1$ 附近取得最大值, 随着 Pe 数继续增加, 在剪切Péclet数 $Pe_s \gg 1$ 阶段迅速降低. 通过对物质利用率与 Pe 数的关系曲线进行幂率拟合, 发现在不同阶段标度关系不同. 在 $Pe \ll 1$ 阶段, 流道的物质利用率和 Pe 数的标度指数为1, 并且在不同流动速度下标度基本一致. 图4(a)显示流道内溶质浓度沿流动方向均匀递减, 表明此时溶质的扩散能力远高于对流, 溶液无法通过对流及时进入流道, 使流道内溶液在反应表面后端始终保持较低浓度, 限制了流道对物质的利用, 此时 Pe 数增大, 流道内反应表面对溶质的利用率能够迅速提升, 此时总体物质利用率处于对流限制状态. $Pe_s \gg 1$ 阶段, 物质利用率与 Pe 数存在 $-1/2 \sim -1/3$ 的标度关系. 随着模拟流速的减小, 溶质分子在流道中留滞时间延长, 溶质扩散能力的改变对物质利用率的影响增大, 因此标度指数逐步从 $-1/3$ 减小到 $-1/2$. 从图4(c)可以看出, 此状态下流道内溶质浓度梯度基本与反应表面垂直, 且消耗层未贯穿流道横截面, 表明由于对流输运的能力远远强于扩散, 流道中输送的物质还未被反应表面完全利用就已经流出通道, 因此, 虽然保证了较高的浓度梯度, 但是由于扩散输运时间不足, 物质利用率随着 Pe 数的增大而迅速下降, 此时总体物质利用率处于扩散限制状态. 在 $Pe \approx 1$ 阶段, 流道内的物质利用率达到

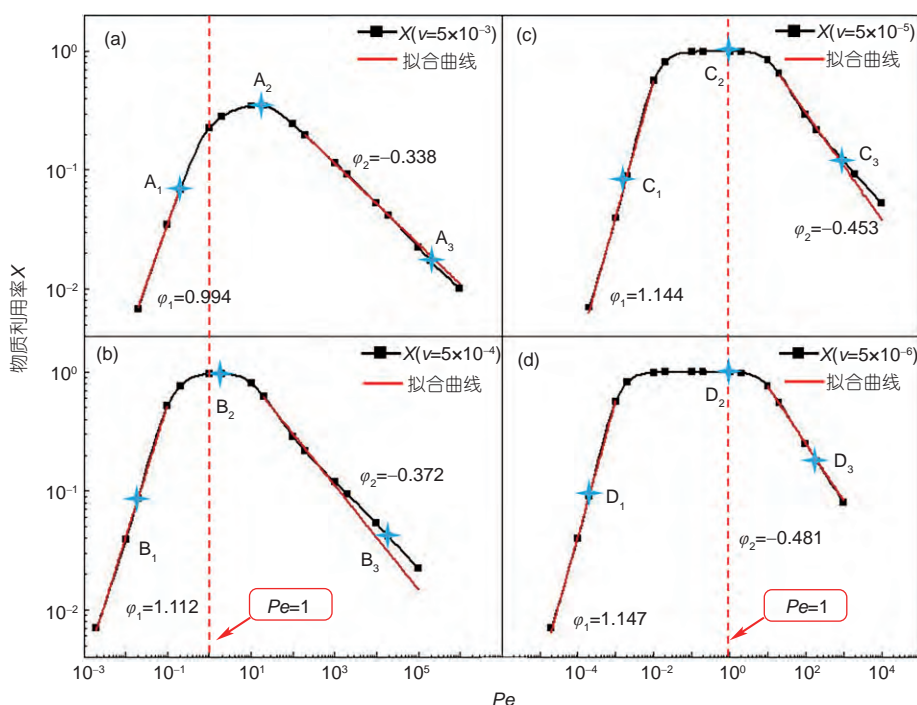


图 3 (网络版彩图)不同Pe数下流道物质利用率变化(ϕ 代表拟合曲线斜率, 标记点依次与图4对应)

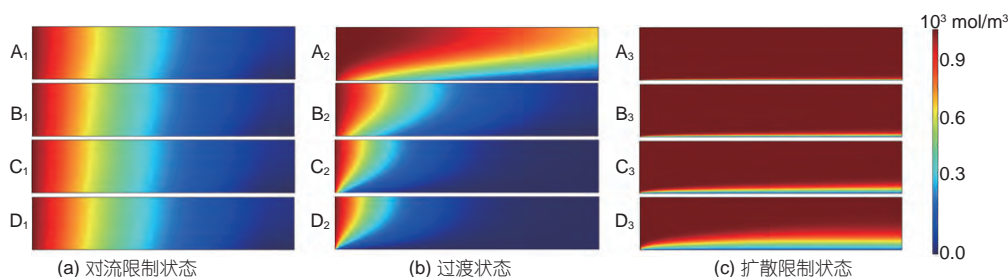


图 4 (网络版彩图)不同状态下流道内物质消耗情况. (a) 对流限制状态; (b) 过渡状态; (c) 扩散限制状态

极限水平, 从图4(b)可以看出, 这种状态介于对流限制与扩散限制状态之间, 溶质的扩散运输能力和对流运输能力基本匹配, 使得在流道末端, 消耗层能够贯穿流道, 物质得到充分利用, 在对流运输能力略低于扩散时, 甚至能够达到100%的利用率, 此时总体物质利用率的状态处于对流限制和扩散限制之间, 因此称为过渡状态. 模拟实验结果说明在不同流动状态下, 限制物质利用率的因素不同, 并且存在过渡状态来调和两种限制因素获得最佳流道方案.

3.2 对流、扩散限制状态的标度分析

在流道内, 溶质分子沿着浓度梯度方向的扩散满

足Fick第一定律 $j_d = -D \nabla c$, 理想状态下认为反应器能够全部消耗抵达反应表面的溶质分子, 因此可认为流道内溶质浓度梯度的值为 $\partial c / \partial y = c_0 / \delta_d$, 其中 δ_d 为流道内消耗层厚度且 $\delta_d \sim \sqrt{D t_d}$, t_d 为扩散时间^[22]. 分子扩散到反应器表面被消耗的速率为 $J_d = -D c_0 W L / \delta_d$. 使用单位长度物质消耗速率 $D c_0 W$ 对反应区表面消耗速率无量纲化得到物质消耗速率 F 与消耗层厚度 δ_d 之间的关系:

$$F = -\frac{J_d}{D c_0 W} \sim \frac{L}{\delta_d}. \quad (9)$$

根据3.1节的模拟结果可以看出, 流体在流道中流

动状态可分为3种: 对流限制状态、扩散限制状态和过渡状态. 在对流限制状态下, 流道内的溶质浓度梯度近似与流动方向平行; 扩散限制状态下溶质浓度梯度近似与流动方向垂直, 并且溶质消耗层只存在于贴近反应器表面上方的薄层, 并未充满整个流道. 过渡状态则是介于两者之间, 以下从对流限制和扩散限制两个方面进行标度分析.

3.2.1 对流限制状态

当消耗层厚度 δ_d 远大于流道高度 H 时($\delta_d \gg H$), 溶剂的流动速度极慢, 在这个过程中可以认为通过对流输送至流道内的溶质分子能迅速扩散, 表现为溶液的浓度梯度与流动方向平行, 此状态下溶质的扩散速率为 $J_{d1} \sim Dc_0HW/\delta_d$, 对流输运速率为 $J_c = c_0Q$ 且 $J_{d1} \approx J_c$, 其中 Q 为流道内的体积流量, 可得 $\delta_d \sim DHW/Q$, 使用分子在扩散作用下通过流道高度 H 的时间 $t_d = H^2/D$ 来表征通道内溶质扩散输运能力; 在相同距离 H 下对流输运所需时间 $t_c = H/u_{\text{mean}} = H^2W/Q$ 来表征对流输运能力, 已知 Pe 数是流道内对流输运速率与扩散输运速率之比, 故而,

$$Pe = \frac{t_d}{t_c} = \frac{H^2/D}{H^2W/Q} = \frac{Q}{DW}. \quad (10)$$

又知 $\delta_d \sim DHW/Q$, 可推出消耗层厚度 δ_d 与 Pe 数的标度关系:

$$\delta_d \sim \frac{H}{Pe}. \quad (11)$$

由式(9)反应表面物质消耗速率 F 与 δ_d 的标度关系, 得出

$$F \sim \frac{L}{H}Pe, \quad (Pe \ll 1). \quad (12)$$

在对流输运能力远弱于扩散能力时, 溶质分子在抵达反应表面被消耗后能够通过扩散得到迅速补充, 但是通过对流输入的溶质却少于消耗, 导致流道内溶质平均浓度下降, 物质的整体利用率降低, 已知反应表面的反应速率与表面处浓度成正比, 可认为此状态下反应表面溶质的消耗率 R 正比于对流输运速率 J_c 又由于此状态下 $J_{d1} \approx J_c$, 因此,

$$R \propto J_c \approx J_{d1} \sim F \sim Pe. \quad (13)$$

物质总利用率:

$$X = \frac{N_{\text{con}}}{N_{\text{total}}} \sim \frac{R \cdot t_d}{c_0 \cdot V_{\text{total}}} \sim \frac{J_{d1} \cdot t_d}{c_0 \cdot V_{\text{total}}} \quad (14)$$

$$\sim \frac{1}{c_0HWL} \frac{Dc_0HWL^2}{\delta_d} \frac{L^2}{D} = \frac{L}{\delta_d} \sim \frac{L}{H}Pe,$$

其中, $t_d = L^2/D$ 为溶质从入口到出口的停留时间, $V_{\text{total}} = HWL$ 为流道总体积. 分析结果表明, 对流限制状态下物质利用率与 Pe 数之间的标度关系为1, 与模拟结果一致.

3.2.2 扩散限制状态

与对流限制状态相反, 扩散限制状态的消耗层 δ_s 远小于 H ($\delta_s \ll H$), 消耗层只是一个处于反应表面上的薄层, 此时消耗层区域内流体在流道内的流动可视作简单剪切流动^[23,24]. Poiseuille流动的速度剖面为 $u(y) = 4u_{\text{max}}y(H-y)/H^2$, 流道内的体积流量 $Q = (2/3)HWu_{\text{max}}$, 在消耗层内 $H \gg y$, 得到消耗层内流体剪切速率为

$$\dot{\gamma} = \frac{6Q}{H^2W}. \quad (15)$$

令 $\hat{x} = x/L$, $\hat{y} = y/L$, $\hat{u} = \dot{\gamma}\hat{y}$, 对式(2)对流扩散方程无量纲化:

$$\frac{\dot{\gamma}L^2}{D} \frac{\partial c}{\partial \hat{x}} - \left(\frac{\partial^2 c}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial \hat{y}^2} \right) = k'c, \quad (16)$$

式中, $k' = kL^2/D$, 由此得出无量纲数 Pe_s , Pe_s 表示在消耗层内溶质分子的对流输运速率与扩散输运速率之比, 联系式(10)中 $Pe = Q/DW$ 和式(15)中剪切速率 $\dot{\gamma}$, 可得到 Pe_s 与 Pe 数的关系:

$$Pe_s = \frac{\dot{\gamma}L^2}{D} = \frac{6Q}{H^2W} \frac{L^2}{D} = 6Pe \left(\frac{L}{H} \right)^2. \quad (17)$$

如果 L 与 H 尺寸差别不大, $Pe \gg 1$ 时 $Pe_s \gg 1$, 在消耗层内, 可认为溶质分子在向反应表面单程扩散, 因此扩散时间 $t_{d2} \approx \delta_s^2/D$, 在此时间内溶质分子随流体流过整个流道, 即对流输运时间 $t_{c2} \approx L/u = L/\dot{\gamma}\delta_s$, 且 $t_{d2} = t_{c2}$, 所以有

$$\left(\frac{\delta_s}{L} \right)^3 = \frac{D}{\dot{\gamma}L} = \frac{1}{Pe_s}. \quad (18)$$

即消耗层厚度 δ_s 与 Pe_s 的标度关系为

$$\frac{\delta_s}{L} \sim Pe_s^{-\frac{1}{3}}. \quad (19)$$

由式(9)无量纲的物质消耗速率 F 与消耗层厚度 δ_d 的标度关系, 可得到物质消耗速率 F 与 Pe_s 的标度关系:

$$F \sim \frac{L}{\delta_s} \sim Pe_s^{\frac{1}{3}}. \quad (20)$$

物质总利用率:

$$X = \frac{N_{con}}{N_{total}} \sim \frac{J_{d2} \cdot t_{d2}}{c_0 \cdot V_{total}} \sim \frac{1}{c_0 WHL} \frac{Dc_0 WL \delta_s^2}{\delta_s D} = \frac{\delta_s}{H}. \quad (21)$$

结合式(19) δ_s 与 Pe_s 的标度关系, 得到流道内物质总利用率 X 与 Pe_s 之间的标度关系:

$$X \sim \frac{L}{H} Pe_s^{-\frac{1}{3}}. \quad (22)$$

因此在 $Pe \gg 1$, $Pe_s \gg 1$ 时的扩散限制状态下, 物质总利用率与 Pe_s 的标度关系为: $X \sim Pe_s^{-1/3}$. Newman等人^[25]使用渐近方法得出在 $Pe \gg 1$ 且 $Pe_s \gg 1$ 时物质消耗速率和 Pe_s 关系的渐近解:

$$F \approx 0.8075 Pe_s^{\frac{1}{3}} + 0.7058 Pe_s^{\frac{1}{6}} - 0.1984 Pe_s^{\frac{1}{3}}. \quad (23)$$

根据无量纲数 Pe_s 的定义, 当剪切流的输运能力小于扩散输运能力时, 会出现 $Pe \gg 1$ 且 $Pe_s \ll 1$ 的情况, 结合式(17)中 Pe_s 与 Pe 的关系, 可知此情况极易出现在反应表面长度 L 远小于流道高度 $H(L \ll H)$ 时, 此情况下消耗层厚度 $L < \delta_{s2} < H$, 这意味着溶质分子的扩散更充分, 消耗层厚度相对更大, 并且流道内浓度差维持 c_0/δ_{s2} 不变, 物质利用效率更高. 虽然本文模拟过程中采用参数 $L/H=5$, 但是随着模拟中对流速度降低和扩散系数

的增大, 这种作用也会逐步显现, Squires等人^[26]给出在此状态下消耗层厚度 δ_{s2} 与 Pe_s 的标度:

$$\frac{\delta_{s2}}{L} \sim Pe_s^{-\frac{1}{3}}. \quad (24)$$

结合式(20)~(22)可知物质消耗速率 F 和物质总利用率 X 与 Pe_s 之间的标度关系:

$$F \sim Pe_s^{\frac{1}{2}}, \quad X \sim Pe_s^{-\frac{1}{2}}. \quad (25)$$

Ackerberg等人^[27]给出了 $Pe \gg 1$ 且 $Pe_s \ll 1$ 时物质消耗速率 F 和 Pe_s 关系的渐近解:

$$F \approx \pi g(Pe_s) [1 - 0.0463 Pe_s g(Pe_s)], \quad (26)$$

$$g(Pe_s) = \left[\ln(4 Pe_s^{-2}) + 1.0559 \right]^{-1}.$$

通过标度分析得出与数值模拟相同的结论, 当 $Pe \ll 1$ 时, 流道内物质扩散输运能力远大于对流, 流道内物质总体利用率 X 与 Pe 数之间的标度关系为1, 此时溶质消耗层 $\delta_s \gg H$ 覆盖整个流道, 物质利用率受限主要是由于通过对流输入流道的溶质不足导致; 当 $Pe_s \gg 1$, $Pe_s \gg 1$ 时, 流道内物质消耗层不能覆盖整个流道, 物质利用不完全, 物质总体利用率 X 与 Pe_s 存在 $-1/3$ 标度关系, $Pe_s \ll 1$ 时物质总体利用率 X 与 Pe_s 存在 $-1/2$ 标度关系, 这种情况下提高溶质的扩散能力可使物质利用率有明显的提升.

3.3 分形流场分析

3.3.1 分形流场整体分析

通过优化算法获得的分形流场信息如图5所示,

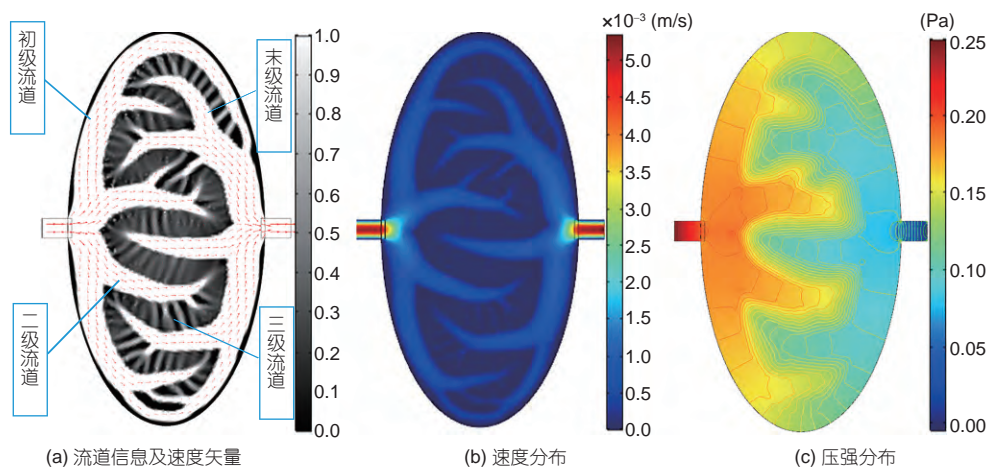


图5 (网络版彩图)反应器流场信息

图5(a)为计算获得的整体流道分布和速度矢量的分布, 图中不同区域灰度差异代表孔隙度不同, 黑色代表孔隙率为0、白色代表孔隙率为1, 灰色为孔隙率介于0~1之间的孔隙基质. 可以看出, 优化后的流道呈分级的分形排布状态, 根据流道结构在整体模型中的作用大致可以分为三级: 一级流道将流体分散输运至模型的区域, 二级流道则将流体均匀输运至介质孔隙中, 三级流道完全发育成孔隙状态. 图5(b)和(c)表明流体在各级流道中所受压强和流动速度分布均匀, 流体的速度随着流道的发育逐级降低, 尤其是在孔隙状态的基质中流体速度降至最低, 在末端孔隙中完成反应过程后, 流体以上述相反的方式快速从介质中汇集流出.

在作用不同压强差的条件下, 本文得到与图5类似的分形流道结构, 使用计盒维数法得到流道的分形维数: $D_f=1.55$ (0.1 Pa), $D_f=1.62$ (1 Pa), $D_f=1.72$ (10 Pa), 可见随着压强差的增大, 流道的分形维数逐步增大, 反应基质在整个模拟空间中占比增多, 流道系统变复杂. 这是因为压强差增大的情况下, 进入流道的流体流速加快, 单位时间内输送至流道系统的溶质增多, 为了能够得到相对应的物质消耗能力, 就需要创造更大的物质反应表面, 因而流道系统随之复杂, 这一结果与Chen和Cheng^[18]的研究相吻合, 证明了模拟结果的正确性. 本文主要是对分形流道结构与物质利用情况的关系进行定性分析, 所以采用复杂度适中的 $D_f=1.62$ 模拟结果进行分析, 研究表明肾脏动脉血管的层级结构二维截面分形维度为1.6左右, 这也与我们得到的结构分形维度基本一致.

3.3.2 流道内浓度分布和反应速率分布

与局部分析相同, 在分形流道系统中, 溶质仍是只在与基质表面接触的过程中被消耗利用. 如图6(a)所示, 在初级流道中, 溶质利用很少被消耗, 图6(b)给出的浓度分布表明, 此时流道内溶质利用处于扩散限制状态, 流道中流体速度快并且流道宽度大, 消耗层只是一个处于流道反应表面上方的薄层, 远未覆盖整个流道, 此部分流道只是把溶质快速输送至分形流道的各处分支, 流体的浓度改变极少. 随着流道向下级发育, 流道细化, 物质反应速率逐级升高, 结合图5(b)和6(b), 流体流动速度在近末级流道大幅下降, 溶质也在此处被迅速利用并随即以相反的过程被收集运出. 在

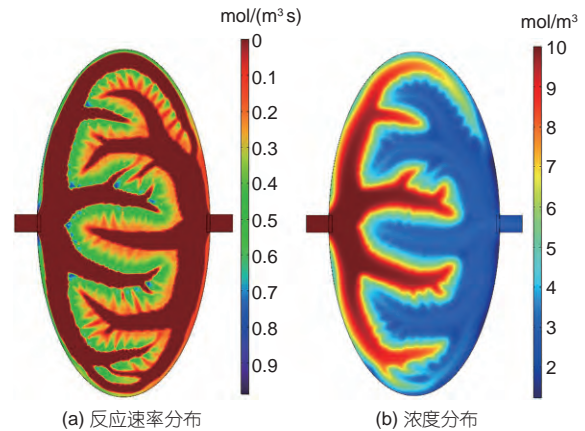


图6 (网络版彩图)反应速率及浓度分布

最末级流道中, 溶质能够充分地扩散到反应表面, 大规模的末端流道也保证了对上级输送的物质的快速消耗, 此时流道内溶质利用情况处于过渡状态, 近乎全部的利用过程都是在近末端尤其是最末端结构中完成. 表明分形流道系统中物质输送和利用在不同级别的流道中完成, 各级流道协同配合使得分形的网络具有极高的物质利用率.

为了进一步明确各级分形流道中物质利用所处的状态, 本文对模拟得出的整体流动网络各级流道的参数进行拾取并取均值, 得到各级流道的 Pe 数和对应的反应速率. 如图7所示, 随着流道逐渐趋向末端, Pe 数下降、反应速率上升, 在流体向末端流道流动的过程中 Pe 数逐步趋近于0, 也就是说流动状态从扩散限制状态向着对流输运能力和扩散输运能力匹配的过渡状态发展, 并在末级流道进入过渡状态. 在此过程中, 未越过去

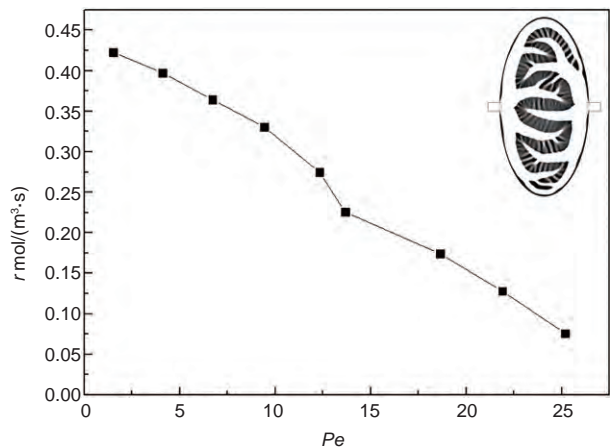


图7 各级流道的 Pe 数和对应的反应速率

渡状态进入输运能力限制利用效率的情况, 这说明模拟得出的流道发育是依照最优化利用效率的方向进行, 不同级别的流道在系统中负责的任务不同, 初级流道主要负责物质输运, 末端流道负责对物质充分利用。

4 结论

本文通过标度分析和数值模拟的方法对微反应器分形流道系统进行研究, 得到以下结论。

(1) 本文通过数值模拟验证了在微反应器分形流道系统中, 不同级别的流道所承担的任务不同: 在初级流道中, 流道尺寸大, 流速快, Pe 数高, 对溶质的利用率低, 但是溶剂和其携带的溶质能够迅速的被运往位于系统各处的末端微反应流道。近末端流道的尺寸小、甚至退化为微观孔隙, 流速慢, Pe 数低, 溶质能够

在其中被迅速地利用, 这样分工协作使物质的输运和利用任务高效完成。

(2) 结合数值分析和理论上的标度分析, 明确了不同流动状态下影响总体物质利用率的限制因素, 得出在不同限制状态下, 流道内总体物质利用率和 Pe 数的标度关系, 得出物质利用的最优状态。

(3) 通过整体分形流道网络和局部流道分析的对比, 发现分形流道系统发育的过程就是流体逐步向物质利用率最优的过渡状态转化的过程, 明确过渡状态即为分形流道系统发育的极限, 当最末端流道中流体利用状态进入过渡状态时流道发育成熟。

这些结论对人工分形流道的设计和末端流道参数的确定有潜在应用价值, 在页岩油气缝网设计、高效催化反应器设计以及高灵敏传感器设计等应用领域可提供理论指导。

参考文献

- 1 Sernetz M, Wübbeke J, Wlczek P. Three-dimensional image analysis and fractal characterization of kidney arterial vessels. *Physica A-Stat Mech Appl*, 1992, 191: 13–16
- 2 McCulloh K A, Sperry J S, Adler F R. Water transport in plants obeys Murray's law. *Nature*, 2003, 421: 939–942
- 3 Price C A, Knox S J C, Brodribb T J, et al. The influence of branch order on optimal leaf vein geometries: Murray's law and area preserving branching. *PLoS ONE*, 2013, 8: e85420
- 4 West G B, Brown J H, Enquist B J. A general model for the origin of allometric scaling laws in biology. *Science*, 1997, 276: 122–126
- 5 Shen W H, Zhao Y P. Combined effect of pressure and shear stress on penny-shaped fluid-driven cracks. *J Appl Mech*, 2018, 85: 031003
- 6 Lin K, Yuan Q Z, Zhao Y P. Using graphene to simplify the adsorption of methane on shale in MD simulations. *Comput Mater Sci*, 2017, 133: 99–107
- 7 Hansen R, Bruus H, Callisen T H, et al. Transient convection, diffusion, and adsorption in surface-based biosensors. *Langmuir*, 2012, 28: 7557–7563
- 8 Zheng X, Shen G, Wang C, et al. Bio-inspired Murray materials for mass transfer and activity. *Nat Commun*, 2017, 8: 14921
- 9 Bejan A, Lorente S. Constructal law of design and evolution: Physics, biology, technology, and society. *J Appl Phys*, 2013, 113: 151301
- 10 Vogel S. Living in a physical world. *J Biosci*, 2004, 29: 391–397
- 11 赵亚溥. 纳米与介观力学. 北京: 科学出版社, 2014
- 12 Murray C D. The physiological principle of minimum work: I. The vascular system and the cost of blood volume. *Proc Natl Acad Sci USA*, 1926, 12: 207–214
- 13 Murray C D. The physiological principle of minimum work: II. Oxygen exchange in capillaries. *Proc Natl Acad Sci USA*, 1926, 12: 299–304
- 14 Bejan A, Errera M R. Deterministic tree networks for fluid flow: Geometry for minimal flow resistance between a volume and one point. *Fractals*, 1997, 05: 685–695
- 15 Bejan A, Rocha L A O, Lorente S. Thermodynamic optimization of geometry: T- and Y-shaped constructs of fluid streams. *Int J Thermal Sci*, 2000, 39: 949–960
- 16 赵亚溥. 力学讲义. 北京: 科学出版社, 2018
- 17 Pence D V. Improved thermal efficiency and temperature uniformity using fractal-like branching channel networks. In: *Proceedings of International Conference on Heat Transfer and Transport Phenomena in Microscale*. Banff, 2000. 142–148
- 18 Chen Y, Cheng P. Heat transfer and pressure drop in fractal tree-like microchannel nets. *Int J Heat Mass Transfer*, 2002, 45: 2643–2648

- 19 Cross S S, Start R D, Silcocks P B, et al. Quantitation of the renal arterial tree by fractal analysis. *J Pathol*, 1993, 170: 479–484
- 20 Olesen L H, Okkels F, Bruus H. A high-level programming-language implementation of topology optimization applied to steady-state Navier-Stokes flow. *Int J Numer Meth Engng*, 2006, 65: 975–1001
- 21 Borrvall T, Petersson J. Topology optimization of fluids in Stokes flow. *Int J Numer Meth Fluids*, 2003, 41: 77–107
- 22 Dahlin A B. Size matters: Problems and advantages associated with highly miniaturized sensors. *Sensors*, 2012, 12: 3018–3036
- 23 王自强. 理性力学基础. 北京: 科学出版社, 2000
- 24 赵亚溥. 近代连续介质力学. 北京: 科学出版社, 2016
- 25 Newman J. The fundamental principles of current distribution and mass transport in electrochemical cells. *J Electroanal Chem*, 1973, 6: 279–297
- 26 Squires T M, Messinger R J, Manalis S R. Making it stick: Convection, reaction and diffusion in surface-based biosensors. *Nat Biotechnol*, 2008, 26: 417–426
- 27 Ackerberg R C, Patel R D, Gupta S K. The heat/mass transfer to a finite strip at small Péclet numbers. *J Fluid Mech*, 1978, 86: 49–65

The optimization of material utilization efficiency in fractal flow channels of the microreactor

KANG DongLiang^{1,2}, SHEN WenHao^{1,2} & ZHAO YaPu^{1,2}

¹ State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

² School of Engineering Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

The fractal flow channels widely existed in nature can realize the efficient transport and utilization of materials. The research on fractal flow channels is of great significance to many fields such as medicine, chemistry, and sociology. Through theoretical analysis and numerical simulations from the perspective of material optimization, this paper has discussed the role of each channel in the fractal channels and the development limit of the final channels. The results show that as the Péclet number (Pe) in the channels increases, the rate of material utilization increases first and then decreases. Three states can be clarified: convection-limited state, transition state, and diffusion-limited state. The rate of material utilization in the transition state is the highest, and the rate of material transport in the diffusion-limited state is the highest. Under different limited states, the factors that affect the material utilization rate are different, and the material utilization rate and Pe number show different scaling relations. The fractal channels and its flow field are obtained through the optimization algorithm and compared with the local analysis. It is found that during the development of the flow channels from the primary to the end, the flow channels are gradually narrowed, the Pe number is reduced, and the fluid state changes from the diffusion-limited state to the transition state. Based on the above analysis, the material transport and utilization in the fractal flow channels are completed in the primary flow channels and the final flow channels, respectively, the transport and utilization are performed efficiently by the cooperation of all levels of channels, and the transition state is the optimal limit of the flow channels development. The results can help to understand the fractal flow channels and provide theoretical guidance for applications such as the design of shale oil and gas seam, high-efficiency catalytic reactor, and highly sensitive sensor.

fractal channels, transport and utilization, optimization, scaling law

doi: 10.1360/SST-2019-0058