УДК 532.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНЫХ ПОТОКОВ В МИКРОКАНАЛАХ

Анна Андреевна Шебелева, *аспирант*
Тел. 8 905 972 8795, e-mail: an_riv@mail.ru
Институт инженерной физики и радиоэлектроники СФУ
http://efir.sfu-kras.ru
Андрей Викторович Минаков, *к.ф.-м.н., доцент*
Тел. 8 391 249 4726, e-mail: tov-andrey@ya.ru
Институт инженерной физики и радиоэлектроники СФУ
http://efir.sfu-kras.ru

В работе представлены результаты тестирования методики расчета двухфазных течений в микроканалах, выполнено сравнение численных результатов с экспериментальными данными. Было показано, что значение краевого угла смачивания играет ключевую роль при описании двухфазных потоков в микроканалах.

Ключевые слова: VOF-метод, двухфазные потоки, угол смачивания.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки России на 2014-2016 годы (проект № 3100) и РФФИ (№ 14-08-00961 А)

Поведение жидкостей в микросистемах нельзя считать вполне изученным, оно может существенно отличаться от макроскопических течений, так как характеризуется другим соотношением вязких, поверхностных и инерционных сил [1-4]. В случае двухфазного течения в микроканалах определяющее влияние на скорость движения пузырей газа оказывают капиллярные силы. Такой режим течения, как объект исследования, отличается большой сложностью, особенно в каналах некругового сечения с острыми углами. В микроканалах сложность описания сильно возрастает за счет существенной роли взаимодействия жидкости со стенкой. В связи с этим, разработка эффективной и достоверной численной методики моделирования двухфазных течений в микроканалах является крайне актуальной задачей.

А.А. Шебелева

Проведенный литературный обзор показал, что существует большое количество различных подходов к моделированию течений жидкости с подвижными границами. Все численные алгоритмы разрешения подвижной границы по типу используемой сетки можно условно разделить на три большие группы – лагранжевы, эйлеровы и бессеточные методы.

В бессеточных методах не используется расчетная сетка, или используется только поверхностная, или только для подготовки данных к расчету и анализу результатов.

В лагранжевых алгоритмах расчетные узлы и ячейки движутся вместе со сплошной средой. Этот подход позволяет максимально точно описывать контактную границу и проводить учет сложных граничных условий на ней, например, учесть силу поверхностного натяжения. Однако использование лагранжева подхода требует пересчета сетки на каждом временном шаге, что может быть весьма затратным. Поскольку форма подвижной границы и траектория ее движения часто очень сложны, использование лагранжевых методов может привести к существенному искривлению расчетных ячеек, что вызывает значительные погрешности в результатах расчета.

А.В. Минаков

Эйлеровы методы хороши тем, что для расчетов используют неподвижную, часто ортогональную и равномерную расчетную сетку. При этом отслеживание межфазной границы осуществляется с помощью дискретных лагранжевых или непрерывных эйлеровых маркеров. По способу отслеживания контактной границы эйлеровы методы можно разделить на три большие группы: алгоритмы дискретных точечных маркеров, алгоритмы дискретных или непрерывных поверхностных маркеров и алгоритмы непрерывных объемных маркеров. На сегодняшний день наибольшее распространение получили методы, реализующие идею непрерывных маркеров. Благодаря своей эффективности и простоте реализации, среди алгоритмов непрерывных объемных маркеров наибольшую популярность на сегодняшний день получил метод жидкости в ячейках (VOF). Этот метод по праву считается наиболее эффективным на сегодняшний день для решения задач со свободной поверхностью.

Математическая модель

В данной работе для моделирования двухфазных течений в микроканале использовалась численная методика, основанная на методе жидкости в ячейках [1], хорошо зарекомендовавшем себя для расчета макроскопических течений со свободной поверхностью [2-3]. Идея этого метода состоит в том, что жидкость и газ рассматриваются как единая двухкомпонентная среда, и пространственное распределение фаз, в пределах расчетной области, определяется при помощи специальной функции маркера F(x,y,z,t). Значение функции задает объемную долю жидкой фазы в расчетной ячейке следующим образом: F(x,y,z,t)=0, если ячейка пустая, F(x,y,z,t)=1 если ячейка полностью заполнена жидкостью и 0< F(x,y,z) <1, если через ячейку проходит граница раздела фаз.

Поскольку свободная поверхность движется вместе с жидкостью, отслеживание перемещения свободной границы в пространстве осуществляется путем решения уравнения переноса объемной доли жидкой фазы в ячейке:

$$\frac{\partial F}{\partial t}+\mathbf{v}\cdot\nabla \mathrm{F}=0, \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{v}$ – вектор скорости двухфазной среды, найденный из решения системы уравнений гидродинамики, состоящей из уравнения сохранения массы или уравнения неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla(\rho\mathbf{v})=0, \tag{2}$$

и уравнений движения или закона сохранения импульса:

$$\frac{\partial \rho\mathbf{v}}{\partial t}+\nabla(\rho\mathbf{v}\cdot\mathbf{v})=-\nabla p+\nabla(\boldsymbol{\tau})+\mathbf{F}, \tag{3}$$

где $\boldsymbol{\tau}$ – тензор вязких напряжений, $\mathbf{F}$ – вектор объемных сил, p -статическое давление, ρ -плотность двухфазной среды.

Составляющие тензора вязких напряжений $\boldsymbol{\tau}_{ij}$ определяются как:

$$\boldsymbol{\tau}_{ij}=\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}-\frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right)$$

где μ – динамическая вязкость двухфазной среды, u_i - компоненты вектора скорости.

Плотность и молекулярная вязкость рассматриваемой двухкомпонентной среды находятся через объемную долю жидкости в ячейке по правилу смеси:

$$\rho=\rho_1 F+(1-F)\rho_2,$$

$$\mu=\mu_1 F+(1-F)\mu_2$$

Здесь ρ_1, μ_1 – плотность и вязкость жидкости, ρ_2, μ_2 – соответственно плотность и вязкость газа. Полученные таким способом величины плотности ρ и вязкости μ входят в уравнения движения и определяют физические свойства двухфазной среды.

При рассмотрении течений жидкости с границей раздела приходится сталкиваться с явлением поверхностного натяжения, пренебречь которым в случае течения в микроканалах нельзя. В микроканалах поверхностное натяжение играет ключевую роль. Изучение течений, контролируемых силами поверхностного натяжения, является очень трудной задачей. Поэтому к достоинствам VOF метода также стоит отнести и то обстоятельство, что данный метод позволяет относительно просто учесть влияние сил поверхностного натяжения.

Чаще всего для моделирования поверхностного натяжения в рамках VOF метода используют CSF (continuum surface force) [4] алгоритм. Суть которого состоит во введении в уравнения движения дополнительной объемной силы $\mathbf{F}_S$ – величина которой определяется из соотношения:

$$\mathbf{F}_S = \sigma \cdot k \cdot \nabla F ,$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения, k – кривизна свободной поверхности, которая определяется как дивергенция вектора нормали:

$$k = \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \right),$$

Нормаль к свободной поверхности вычисляется, в свою очередь, как градиент объемной доли жидкой фазы в ячейке:

$$\mathbf{n} = \nabla F$$

При этом на твердой стенке величина вектора нормали определяется по краевому углу смачивания θ:

$$\mathbf{n} = \mathbf{n_W} \cos(\theta) + \boldsymbol{\tau}_\mathbf{W} \sin(\theta),$$

где $\mathbf{n_w}$, $\boldsymbol{\tau}_\mathbf{w}$ -нормальный и тангенциальный к стенке вектора (рис.1).

Рис. 1. Условия на линии контакта

Используемая методика детально описана в работах [5-6]. Здесь же отметим основные моменты численной методики. Разностный аналог конвективно-диффузионных уравнений находится с помощью метода конечного объема для структурированных многоблочных сеток, при применении которого автоматически выполняется консервативность полученной схемы. Для аппроксимации конвективных членов уравнений гидродинамики (3) используется противопоточная схема второго порядка QUICK. Для аппроксимации нестационарных слагаемых уравнений гидродинамики используется неявная схема первого порядка. Диффузионные потоки и источниковые члены аппроксимируются со вторым порядком точности. Связь между полями скорости и давления реализуется при помощи SIMPLEC процедуры на совмещенных сетках.

Постановка задачи

В данном исследовании была протестирована численная методика расчета двухфазных течений со свободной поверхностью для Т-образного канала, по которому движутся две несмешивающиеся жидкости навстречу друг другу, с различными расходами. Для тестирования были взяты экспериментальные данные из работы [7]. Размеры входного канала: 590×500 мкм, выходного канала: 590×500 мкм, длина выходного канала 0.01 м. Через верхний канал подается вода, через нижний – керосин. Физические свойства, плотность и вязкость соответственно: керосин: 780 кг/м3, 0.0024 кг/м*сек; вода: 998.2 кг/м3, 0.001003 кг/м*сек. Коэффициент поверхностного натяжения на поверхности керосин-вода 0.048 Н/м. Гидравлический диаметр dh=0,54 mm.

Расчет проводится при фиксированном значении расхода воды: 10 мл/час и варьируемом значении расхода керосина 5; 10; 20; 30; 40 и 60 мл/час, для краевого угла смачивания 1^{0} и 78^{0}.

Для расчетов использовалась структурированная расчетная сетка, состоящая из 300 тысяч узлов. В качестве граничных условий на входах задавалось значение массового расхода, на выходе – условия Неймана. На стенках канала задавалось условие прилипания.

Результаты математического моделирования

На рис. 2 представлено распределение плотности двухфазной смеси в центральном сечении канала при различных скоростях жидкости. На рисунке вода подается сверху, керосин подается снизу. Как видно из рис. 2, в канале смешения вода движется в виде отдельных снарядов, разделенных прослойками керосина.

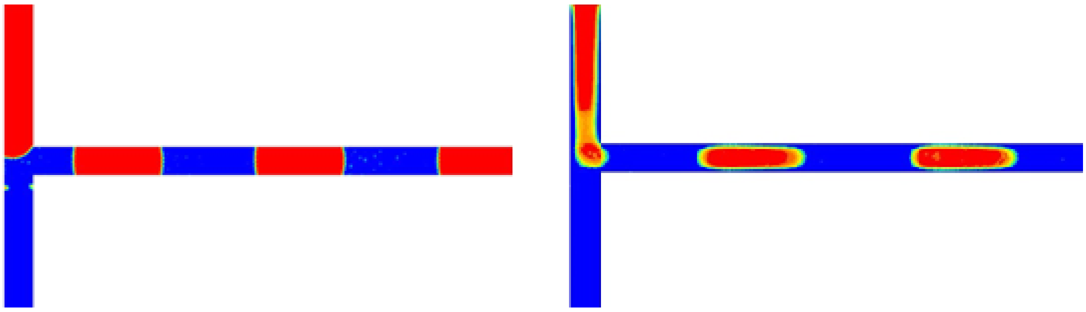

Рис. 2. Qк=10 мл/час. Qв=10 мл/час.
а) угол смачивания 78^{0} б) угол смачивания 1^{0}.

С увеличением расхода керосина частота образования снарядов воды уменьшается, и расстояние между ними увеличивается. Размер самих капель уменьшается (рис.3).

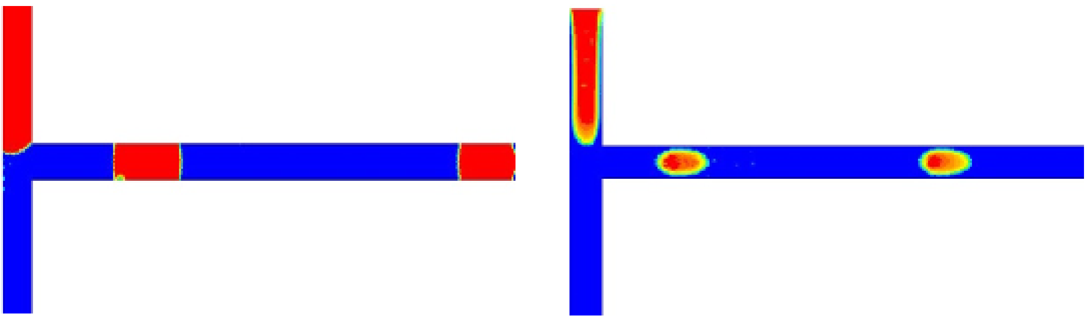

Рис. 3. Qк=40 мл/час. Qв=10мл/час.
а) угол смачивания 78^{0}, б) угол смачивания 1^{0}

Было проведено количественное сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными [7]. На рис. 4 представлена зависимость длины снаряда воды от расхода керосина. Как видно, наблюдается достаточно хорошее согласование расчета и эксперимента. При этом при низких значениях расхода керосина лучше согласуются результаты расчета со значением краевого угла смачивания 1, а при больших расходах – 78. Это показывает влияние краевого угла смачивания и необходимость разработки модели динамического контактного угла.

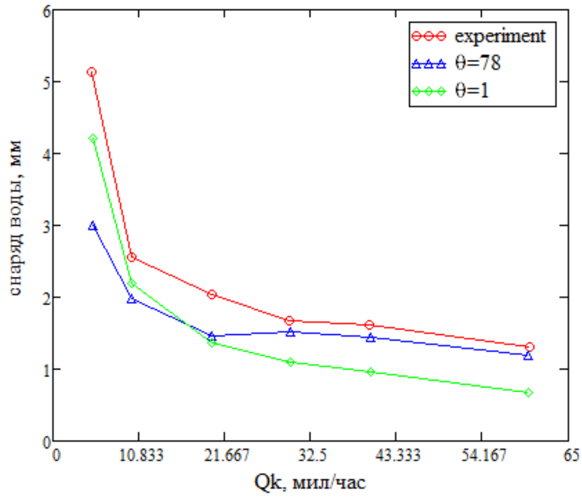

Рис. 4. Зависимость длины снаряда воды от расхода керосина, для двух углов смачивания: θ=78 ^{0}, θ=1 ^{0}

Заключение

Разработана и протестирована численная методика расчета двухфазных течений со свободной поверхностью в микроканале. Методика расчета учитывает нестационарность и трехмерность процесса движения и образования снарядов в микроканалах, а также поверхностное натяжение и эффекты смачивания поверхностей. Расчетный алгоритм легко адаптируется к реальной геометрии любого микроканала. Численное решение в целом хорошо качественно и количественно согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

Литература

1. *Rudyak V., Minakov A.* Modeling and Optimization of Y-Type Micromixers // Micromachines. 2014. V. 5. N. 4. P. 886 – 912.

2. *Minakov A.V.* Numerical algorithm for moving boundary fluid dynamics problems and its testing // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2014. V. 54. N. 10. P. 1560 –1570.

3. *Минаков А.В.* Численный алгоритм решения пространственных задач гидродинамики с подвижными твердыми телами и свободной поверхностью // Сибирский журнал индустриальной математики. 2008. N. 4 (36). C. 95-105.

4. *Yagodnitsyna Anna, Kovalev Alexander, Bilsky Artur*. Experimental investigation of immiscible liquids flow in a T-shaped microchanne // 110th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing. Naples – Italy 2015, 15-18 June.

5. *Brackbill J.U., Kothe D.B., Zemach C.A.* A continuum method for modeling surface tension // J. Comput. Phys. 1992. P. 335.

6. *Минаков А.В.* Численное моделирование нестационарных течений несжимаемой жидкости со свободной поверхностью при помощи VOF метода // Вестник сибирского государственного аэрокосмического университета. 2008. № 2. Т. 19. С. 9–13.

7. *Siva Kumar, Reddy Cherlo, Sreenath Kariveti, S. Pushpavanam* Experimental and Numerical Investigations of Two-Phase (Liquid-Liquid) // Ind. Eng. Chem. Res. 2010. N. 49. P. 893-899

Numerical modeling of two-phase flows in microchannels

Anna A. Shebeleva, *Postgraduate, Siberian federal university*

Andrey V. Minakov, *PhD, Siberian federal university*

Results of testing methodology for calculating two-phase flows based on the method of fluid in the cells (VOF method), in the microchannel are considered in this work. Numerical results are compared with experimental data. It has been shown that the value of the contact angle plays a key role in the description of two-phase flow in microchannels.

Keywords – VOF-method, two-phase flows, the contact angle.