УДК 532.6

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНЫХ ПОТОКОВ VOF МЕТОДОМ С УЧЕТОМ ДИНАМИЧЕСКОГО КОНТАКТНОГО УГЛА

**Шебелева А.А., Минаков А.В.**

*Сибирский Федеральный Университет, Красноярск, Россия*

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

**АННОТАЦИЯ**

Приведены результаты тестирования методики расчета двухфазных течений в микроканале, которая основана на методе жидкости в ячейках (VOF метод) и процедуре CSF для учета сил поверхностного натяжения. При помощи данной методики было проведено математическое моделирование течений двухкомпонентных потоков жидкость-жидкость в микроканале Т-типа. Рассмотрены следующие режимы течения: скользяще-снарядный, ривулетный, параллельный, капельный и серпантинный. Выполнено сравнение численных результатов с экспериментальными данными. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

## ВВЕДЕНИЕ

Численное моделирование динамических процессов смачивания имеет важное значение для целого ряда практических приложений, например для добычи, и транспортировки нефти. Ключевым параметром для моделирования динамического смачивания является угол контакта, важно учитывать и поверхностные силы, действующие на границах канала. О процессах, происходящих на границе твердого тела с другими фазами, судят по углу смачивания и косвенно характеризуют взаимодействие твердого тела с другими фазами. Угол смачивания зависит от многих факторов: механического строения поверхности, адсорбции на ней газов, поверхностно-активных и других веществ, от ее загрязнения, электрического заряда и т.д. Угол смачивания всегда измеряют в сторону более полярной фазы (воды). Если смачивающей жидкостью является вода и угол изменяется в пределах $0° < \theta < 90°$, то такая поверхность по отношению к смачиваемой жидкости называется гидрофильной. Если при аналогичных условиях угол изменяется в пределах $90° < \theta < 180°$, то такая поверхность называется гидрофобной.

Поведение жидкостей в микросистемах нельзя считать вполне изученными, оно может существенно отличаться от макроскопических течений, так как характеризуется другим соотношением вязких, поверхностных и инерционных сил [1]. 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. Расчет двухфазных течений в макроскопических каналах представляет довольно сложную задачу [2]. 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.

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

© Шебелева А.А., Минаков А.В.

временном шаге, что может быть весьма затратным. Поскольку форма подвижной границы и траектория ее движения часто очень сложны, то использование лагранжевых методов может привести к существенному искривлению расчетных ячеек, что вызывает значительные погрешности в результатах расчета.

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 методом решения задач со свободной поверхностью.

Целью настоящей работы являлось тестирование численной методики и исследование течений двухкомпонентных потоков жидкость–жидкость в микроканале Т-типа

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В данной работе, для моделирования двухфазных течений в микроканале Т-типа использовалась численная методика, основанная на методе жидкости в ячейках, которая хорошо зарекомендовала себя для расчета макроскопических течений со свободной поверхностью [3-4]. Идея этого метода состоит в том, что жидкости рассматриваются как единая двухкомпонентная среда, и пространственное распределение фаз в пределах расчетной области определяется при помощи специальной функции маркера F(x,y,z,t), величина которой 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.

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

$$\frac{dF}{dt} + V \cdot \nabla F = 0 \qquad (1)$$

где $V$ – вектор скорости двухфазной среды, найденный из решения системы уравнений гидродинамики, состоящей из уравнения сохранения массы или уравнения неразрывности

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla(\rho \cdot V) = 0 \qquad (2)$$

и уравнений движения или закона сохранения импульса:

$$\frac{d\rho V}{dt} + \nabla(\rho V \times V) = -\nabla p + \nabla(\tau) + \rho g \qquad (3)$$

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

Составляющие тензора вязких напряжений $\tau_{ij}$ определяются как:

$$\tau_{ij} = \mu\left(\frac{dU_i}{dx_j} + \frac{dU_j}{dx_i} - \frac{2}{3}\cdot\delta_{ij}\frac{dU_k}{dx_k}\right) \qquad (4)$$

где $\mu$ - динамическая вязкость двухфазной среды, $U_{ij}$ - компоненты вектора скорости.

Плотность и молекулярная вязкость рассматриваемой двухкомпонентной среды находятся через объемную долю жидкости в ячейке по правилу смеси, где $\rho_1,\mu_1$ - плотность и вязкость жидкости, $\rho_2,\mu_2$ - соответственно плотность и вязкость газа:

$$\rho = \rho_1 F + (1-F)\mu_2 \qquad (5)$$

$$\mu = \mu_1 F + (1-F)\mu_2 \qquad (6)$$

При рассмотрении течений жидкости с границей раздела приходится сталкиваться с явлением поверхностного натяжения, пренебречь которым в случае течения в микроканалах нельзя. Изучение течений, контролируемых силами поверхностного натяжения, является очень трудной задачей. Поэтому к достоинствам VOF метода стоит отнести и то, что данный метод позволяет относительно просто учесть влияние сил поверхностного натяжения. Чаще всего для моделирования поверхностного натяжения в рамках VOF метода используют CSF [5] алгоритм, суть которого состоит во введении в уравнения движения дополнительной объемной силы $F_S$, величина которой определяется из соотношения:

$$F_s = \sigma k \nabla F \qquad (7)$$

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

$$k = \nabla\left(\frac{n}{n|}\right) \quad (8)$$

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

$$n = \nabla F \quad (9)$$

При этом на твердой стенке величина вектора нормали определяется по краевому углу смачивания θ, где $n_w$, $\tau_w$ – нормальный и тангенциальный к стенке вектора:

$$n = n_w \cos\theta + \tau_w \sin\theta \quad (10)$$

Детально используемая методика описана в работе [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.

Такой подход позволяет преодолеть описанные выше трудности с разрешением подвижной межфазной границы раздела. Полученная система разностных уравнений решается итерационным способом с применением многосеточного решателя.

## ДИНАМИЧЕСКИЙ КОНТАКТНЫЙ УГОЛ

Краевой угол натекания (наступающий краевой угол), образуется наступающим фронтом жидкости. Обычно для измерения краевых углов на горизонтальную пластину наносят небольшую каплю. При такой процедуре жидкость натекает (наступает) на твердую поверхность, постепенно вытесняя с нее предшествующую фазу (газ). Различают квазиравновесный угол натекания, измеренный после прекращения растекания, и динамический наступающий краевой угол, измеренный в процессе течения и зависящий от его скорости.

Отступающий краевой угол образуется в момент начала движения линии трехфазного контакта в сторону жидкой фазы. Измеряют следующим образом. Сначала образец помещают в жидкость, то есть принудительно смачивают всю твердую поверхность, потом к пластине подводят пузырек газа. Под его действием жидкость оттекает (отступает) с ранее смоченной поверхности. Поэтому угол, измеренный в момент начала течения жидкости, называется углом оттекания (или отступающим углом). Различие краевых углов при натекании и оттекании называется порядковым гистерезисом.

Рассмотрим модели угла контакта. Первая модель с точки зрения реализации очень проста. Это не значит, что в данной модели динамический угол равен равновесному значению. Так как угол контакта не зависит от геометрии или от скорости линии соприкосновения, то движение свободной поверхности в расчетах вызывает гистерезис.

$$\theta_d = \theta_e \quad (11)$$

где $\theta d$ и $\theta e$ динамический и равновесный контактный угол соответственно.

Вторая модель была предложена Хокингом в 1995 году, на основе более ранней теоретической модели выдвинутой им же в 1983 году. Данная форма согласуется с блоком законов Таннера из гидродинамической теории распространения капли.

$$\theta_d^3 = \theta_e^3 + 9 \cdot Ca_{cl} \ln(\frac{1}{\beta}) \quad (12)$$

Третья модель, является одной из первых эмпирических корреляции, предложенных Джангом и Слаттери в 1979 году, получена на основе данных для распространения силикона и масла через стеклянный капилляр.

$$\frac{\cos\theta_e - \cos\theta_d}{\cos\theta_e + 1} = \tanh(4.96 \cdot Ca_{cl}^{0.702}) \quad (13)$$

Еще одна эмпирическая корреляция, предложенная Бракке и др. (1989) в качестве четвертой модели:

$$\frac{\cos\theta_e - \cos\theta_d}{\cos\theta_e + 1} = 2 \cdot \sqrt{Ca_{cl}} \quad (14)$$

Сложное взаимодействие между вязкостью жидкости, поверхностным натяжением, инерцией и динамическим наступающим (отступающим) контактным углом зависит от функции скорости на линии контакта $U_{CL}$.

Пятая модель используется, когда преобладает инерция, высокое значение *Ca*, а так же используются углы $\theta_{mda}$, $\theta_{mdr}$, которые определяются как:

$$\theta_d(U_{cl}) = \begin{cases} \theta_{mda}, if U_{cl} > 0 \\ \theta_{mdr}, if U_{cl} < 0 \end{cases} \quad (15)$$

где $\theta_{mda}$ - максимальный динамический наступающий угол, $\theta_{mdr}$ – минимальный динамический отступающий угол.

Рассмотрим шестую модель:

$$\theta(U_{cl}) = \begin{cases} \min\left[\theta_e + \left(\frac{Ca}{k_r}\right)^{1/3}, \theta_{mda}\right], if U_{cl} > 0 \\ \max\left[\theta_e + \left(\frac{Ca}{k_r}\right)^{1/3}, \theta_{mdr}\right], if U_{cl} < 0 \end{cases} \quad (16)$$

где ka, kr- параметры материала, относящиеся к натеканию и оттеканию, соответственно.

Если выполняется условие θmdr < θd < θmda ,то система находится в капиллярной фазе и используется формула Таннера. Если же контактный угол достиг θmda, θmdr, то система не в капиллярной фазе и используется другой закон.

Выбрать универсальное соотношение для динамического контактного угла, практически невозможно. Помимо основных параметров, есть и другие, такие как шероховатость, неоднородность поверхности, которые влияют на динамический контактный угол. Для идеально смачивающей жидкости очевидно принимать статический угол θ0=0, так как равновесный угол θe≈0. Однако, выбор соответствующего значения угла контакта для частично смачивающих жидкостей не прост. Рассмотрим следующие четыре модели угла контакта.

Помимо этих моделей, ряд других теоретических и эмпирических моделей были предложены в литературе [7,8].

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Было рассмотрено течение несмешивающихся жидкостей в Т-образном микроканале. Размеры входного канала: 2400×200 мкм, выходного канала: 2000×400 мкм. Через верхний канал подается вода, через нижний - керосин. Физические свойства, плотность и вязкость соответственно: керосин: 780 кг/м$^3$, 0.0024 кг/м·сек; вода: 998.2 кг/м$^3$, 0.001003 кг/м·сек. Коэффициент поверхностного натяжения на поверхности керосин-вода 0.048 Н/м.

Для расчетов использовалась структурированная расчетная сетка, состоящая из 500 тысяч узлов. В качестве граничных условий на входах задавалось значение массового расхода, на выходе условия Неймана. На стенках канала задавалось условие прилипания.

Для верификации методики были проведены расчеты течения в рассматриваемом канале для чистой воды. Рассмотрено два значения числа Рейнольдса: Re=30 и 120. Экспериментальные данные были получены с помощью micro-PIV метода. Подробное исследование течения воды в микроканале проведено в работе [9]. Количественное сравнение представлено на рис. 1. Как видно из графика, общее согласие между экспериментальными и расчетными данными хорошее, максимальная погрешность не превышает 10% [9].

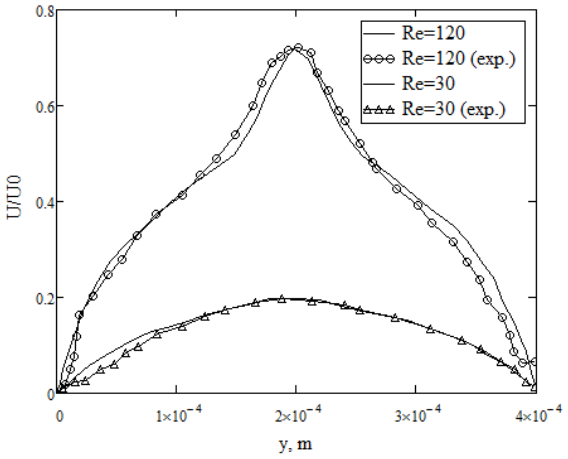


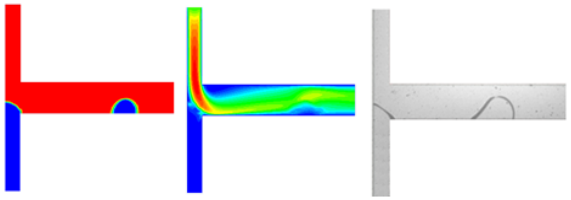

Рис. 1 Профили скорости в центральном сечении канала

## РЕЗУЛЬТАТЫ

Далее приведены результаты моделирования течений двухкомпонентных потоков жидкость – жидкость. Расчетные результаты сравнивались с экспериментальными данными, полученными в Институте теплофизики им.С.С.Кутателадзе СО РАН с помощью micro-PIV метода.

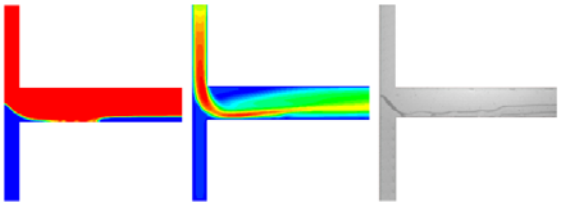
Для расхода воды 1300 мкл/мин и расхода керосина 24 мкл/мин наблюдается скользяще-снарядный режим течения (рис. 2). Этот режим характеризуется образованием отдельных капель керосина, которые движутся по стенке канала. На рис. 2 представлено качественное сравнение результатов расчета с экспериментальными фотографиями течения в микроканале. Как видно, наблюдается хорошее качественное согласие эксперимента и расчета.

Небольшое отклонение формы капли связано с тем, что в настоящий момент значение краевого угла смачивания в эксперименте определяется с погрешностью и это сказывается на точности расчета. Кроме того, добиться идеального совпадения сложно, поскольку процесс нестационарный и в расчете трудно «поймать» момент времени, зафиксированный на экспериментальной фотографии.



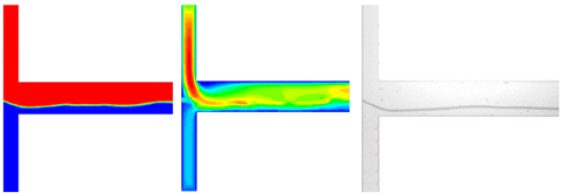
а) б) в)

Рис. 2 Скользяще-снарядный режим течения: а) плотность; б) модуль скорости; в) эксперимент



а) б) в)

Рис. 3 Ривулетный режим течения: а) плотность; б) модуль скорости; в) эксперимент

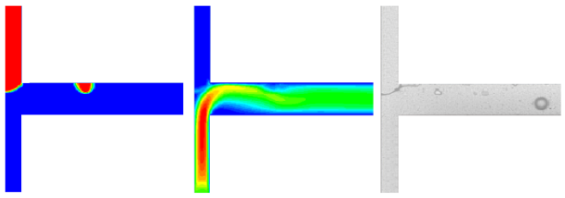


а) б) в)

Рис. 4 Параллельный режим течения: а) плотность; б) модуль скорости; в) эксперимент

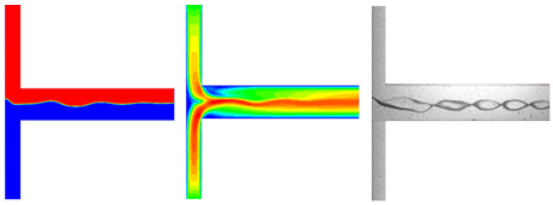
При увеличении расхода воды 4000 мкл/мин и керосина 240 мкл/мин был зафиксирован ривулетный режим течения (рис. 3). В данном режиме течение керосина осуществляется в виде струйки, двигающейся по стенкам канала. При этом струйка жидкости не является сплошной, а сопровождается разрывами. Как видно из рис. 4, наблюдается хорошее согласие результатов расчета и эксперимента

Для расхода воды 960 мкл/мин и расхода керосина 240 мкл/мин наблюдается параллельный режим течения (рис. 4). В параллельном режиме расход керосина выше и течение керосина происходит в виде сплошной пленки по стенки.



а) б) в)

Рис. 5 Капельный режим течения: а) плотность; б) модуль скорости; в) эксперимент



а) б) в)

Рис. 6 Серпантинный режим течения: а) плотность; б) модуль скорости; в) эксперимент

При этом течение является нестационарным и сопровождается колебаниями свободной поверхности. Этот факт подтверждается данными эксперимента.

Для расхода воды 10 мкл/мин и расхода керосина 2400 мкл/мин наблюдается капельный режим течения (рис. 5). В капельном режиме расход воды по отношению к керосину очень мал. Данный режим течения характеризуется образованием отдельных капель, которые время от времени отлетают от стенки и двигаются в потоке.

Очень интересный режим течения был получен при одинаковом соотношении расходов воды 4000 мкл/мин и керосина 4000 мкл/мин на входах (рис. 6). Граница раздела не является плоской, а является серпантинной поверхностью. Интересно, что этот режим является стационарным. Такое формирование течения в серпантинном режиме происходит из-за развития неустойчивости Кельвина-Гельмгольца. Похожее явление наблюдалось при изучении течения воды в микроканале при Re>145 [10].

## ВЫВОДЫ

Проведено исследование течений двухкомпонентных потоков жидкость-жидкость в микроканале Т-типа. Изучена структура течений для нескольких режимов при различных соотношениях расходов воды и керосина на входе в микроканал. Были получены следующие режимы течения: скользяще-снарядный, ривулетный, параллельный, капельный и серпантинный. В целом, по результатам тестирования было показано, что численная методика хорошо описывает эксперимент.

© Шебелева А.А., Минаков А.В.

**ЛИТЕРАТУРА**


1. Rudyak V., Minakov A. Modeling and Optimization of Y-Type Micromixers // Micromachines. – 2014. – Vol. 5. – N 4. – P. 886 – 912.
2. Guzei D.V., Minakov A.V., Pryazhnikov M.I., Dekterev A.A. Numerical modeling of gasliquid flows in mini- and microchannels // Thermophysics and Aeromechanics. – 2015. – Vol. 22. – N 1. – P. 61 – 71.
3. Minakov A.V. Numerical algorithm for moving boundary fluid dynamics problems and its testing // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2014. – Vol. 54. – N 10. – P. 1560 –- 1570.
4. Минаков А.В. Численный алгоритм решения пространственных задач гидродинамики с подвижными твердыми телами и свободной поверхностью // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2008. - N 4 (36). – С. 95 – 105.

   Minakov A.V. Chislennyy algoritm resheniya prostranstvennykh zadach gidrodinamiki c podvizhnymi tverdymi telami i svobodnoy poverkhnostyu // Sibirskiy zhurnal industrialnoy matematiki. – 2008. - N 4 (36). – S. 95 – 105.
5. Brackbill J.U., Kothe D.B., Zemach C.A. A continuum method for modeling surface tension // J. Comput. Phys. – 1992. – P. 335.
6. Gavrilov A.A., Minakov A.V., Dekterev A.A., Rudyak V.Y. A numerical algorithm for modeling laminar flows in an annular channel with eccentricity // J. Appl. Ind. Math. – 2011. – N 5. – P. 559 – 568
7. Bayer I.S, Megaridis C.M. Contact angle dynamics in droplets impacting on flat surfaces with different wetting characteristics // J. Fluid Mechanics. – 2006. – Vol. 558. – P. 415 – 449.
8. Hocking L. On the contact angels in evaporating liquids // Phys. Fluids. – 1995. – Vol.7. – P. 2950 – 2955.
9. Minakov A.V., Rudyak V.Y., Gavrilov A.A., Dekterev A.A. Mixing in a T-shaped micromixer at moderate Reynolds numbers // Thermophys. Aeromech. – 2012. – N 19. – P. 385 – 395.
10. Minakov A., Yagodnitsina A., Lobasov A., Rudyak V., Bilsky A. Study of fluid flow in micromixer with symmetrical and asymmetrical inlet conditions // La Houille Blanche. – 2013. – N 5. – P. 12 – 21.