

УДК 532.5, 519.6

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ДИНАМИКИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ КАПЕЛЬ ПРИ ТЕЧЕНИИ В МИКРОКАНАЛАХ

© О. А. Абрамова^{1*}, Ю. А. Питюк¹, Н. А. Воробьев², И. А. Зарафутдинов¹

¹Башкирский государственный университет
Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.

²Институт механики им. Р. Р. Мавлютова УФИЦ РАН
Россия, Республика Башкортостан, 450071 г. Уфа, пр. Октября, 71.

Тел.: +7 (347) 229 96 70.

*Email: abramovacmnds@gmail.com

Работа посвящена трехмерному моделированию динамики деформируемых дисперсных включений в потоке вязкой жидкости в канале при малых числах Рейнольдса ускоренным методом граничных элементов. Программная реализация предусматривает выбор оптимальных алгоритмов в зависимости от размера задачи. Разработанные программные модули были использованы для изучения деформации капель эмульсии, изменения их относительной скорости в потоке, а также для расчета реологических параметров всей системы в целом. Проведены численные эксперименты по моделированию динамики эмульсий различных концентраций в микроканалах.

Ключевые слова: дисперсные системы, численное моделирование, метод граничных элементов, режим Стокса, течения в микроканалах, деформируемые капли, реология.

Введение

В последние десятилетия все большее внимание уделяется изучению поведения и свойств дисперсных систем. Пример таких систем представляют эмульсии, которые встречаются во многих отраслях промышленности: нефтяной, пищевой, строительной, автомобильной, биотехнологии, фармацевтической, а также в микро и нанотехнологиях. Моделирование движения капель эмульсии в стоковом режиме в микроканалах является упрощением задач, возникающих при изучении многофазных течений в пористых средах. Несмотря на то, что модельная задача не отражает всей сложности динамики в пористой среде, она помогает изучить некоторые характерные закономерности поведения эмульсий в микроканалах.

В ряде работ можно найти описание экспериментальных исследований движения дисперсных частиц в различных областях (в цилиндрических [11] и прямоугольных каналах [17], соответствующий обзор литературы можно найти в [8]), а также применения численного моделирования динамики эмульсий в микроканалах. Например, при изучении механики биологических жидкостей в гибких трубках [7], течения полимерных растворов в различных областях с сужениями [6], а также при разработке «лабораторий на чипе» [18]. Расчет динамики капель эмульсии под действием различных внешних полей проводится с помощью численных методов моделирования задач механики сплошных сред, среди которых одними из наиболее популярных являются конечно-разностные методы [9], метод конечных элементов [13], контрольных объемов и метод VOF [2; 5], метод граничных элементов (МГЭ). МГЭ для течений в стоковом режиме изложен в [15] и успешно применялся для расчета динамики и взаимодействия капель с произвольной

деформацией, пузырей и твердых частиц в дисперсных течениях [14; 16; 19].

В настоящей работе используется подход, предложенный и протестированный авторами в предыдущих работах [3–4; 12], в основе которого лежит МГЭ, ускоренный с применением гетерогенных вычислительных систем. Все расчеты проводятся на вычислительной машине с одной графической картой и используется CPU/GPU параллелизм, что позволяет напрямую моделировать трехмерную динамику систем с деформируемыми каплями в каналах различных форм в стоковом режиме за разумное время.

Математическая модель и численная реализация

Рассматривается динамика смеси двух ньютоновских жидкостей капельной структуры в канале (рис. 1). Динамика деформируемых капель одной вязкой жидкости (обозначим 2) в объеме другой жидкости (обозначим 1) при малых числах Рейнольдса, описывается уравнениями Стокса для каждой жидкости:

$$\nabla \cdot \sigma_i = -\nabla p_i + \mu_i \nabla^2 \mathbf{u}_i = 0, \nabla \cdot \mathbf{u}_i = 0, i = 1, 2, \quad (1)$$

где σ – тензор напряжений, \mathbf{u} – скорость, μ – динамическая вязкость, p – давление, которое включает гидростатический компонент.

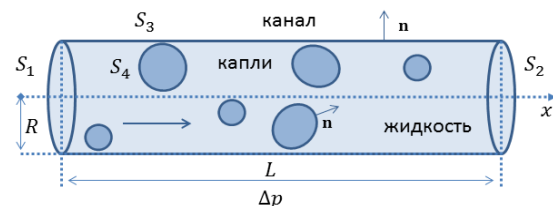


Рис. 1. Схематическое изображение задачи о периодическом течении вязкой жидкости с каплями в канале.

На межфазной границе S_4 задаются следующие условия

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}, \mathbf{f} = \sigma_2 \cdot \mathbf{n}_2 - \sigma_1 \cdot \mathbf{n}_1 = \mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_1 = f \mathbf{n}, \quad (2)$$

$$f = \gamma(\nabla \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})) + (\rho_2 - \rho_1)(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}), \mathbf{x} \in S_4,$$

где \mathbf{f} – вектор нормальных напряжений в жидкости; \mathbf{n} – нормаль к поверхности капли, направленная в жидкость; γ – коэффициент поверхностного натяжения; ρ – плотность; \mathbf{g} – вектор ускорения свободного падения; \mathbf{x} – радиус-вектор рассматриваемой точки.

Для течения в канале справедливо условие прилипания $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0$, $\mathbf{x} \in S_3$, которое дополняется следующими условиями периодичности для скорости и вектора напряжений

$$\mathbf{u}|_{x=0} = \mathbf{u}|_{x=L} = \mathbf{u}_s, \quad (3)$$

$$\mathbf{f}|_{x=L} = -\mathbf{f}|_{x=0} + \mathbf{f}_p = -\mathbf{f}_s + \mathbf{f}_p, \mathbf{f}_p = \mathbf{i}_x \Delta p,$$

где Δp – заданный перепад давления для потока в канале; \mathbf{u}_s и \mathbf{f}_s – неизвестные функции.

Кинематическое условие, описывающее динамику капле, имеет вид

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in S_4, \quad (4)$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ – скорость на поверхности капле, определяемая из решения эллиптической задачи, описанной выше.

Рассматриваемая задача решается методом граничных элементов [15]. Поверхность каждого объекта покрывается сеткой с треугольными элементами, по которым строятся квадратурные формулы граничных интегралов. Далее гранично-интегральные уравнения сводятся к плотной системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно неизвестных компонент скорости на границе. В случае небольшого количества узлов сетки при решении СЛАУ применяются стандартные прямые методы, но при увеличении масштаба задачи возникает нехватка памяти вычислительной системы. Для расчетов больших систем авторами разработано несколько версий МГЭ, ускоренных с помощью распараллеливания на графических процессорах. Более подробно численная реализация описана в [1; 3–4; 12].

Результаты моделирования

Адекватность разработанного подхода подтверждена сопоставлением с экспериментальными данными (рис. 2). В [11] представлены результаты исследования движения деформируемых капле радиуса a сравнимого с радиусом цилиндрического канала R в случаях капле вязкой ньютоновской жидкости, взвешенных в объеме вязкой жидкости (капле силиконового масла в разбавленном водой глицерине). Параметры представлены в табл. 1. Моделирование проводилось до достижения каплями своей стабильной деформированной формы. На рис. 2 представлены результаты сравнения формы капле. При наложении рассчитанного контура капле на экспериментальные изображения из соответствующей статьи, наблюдается достаточно хорошее качественное согласование во всех рас-

сматриваемых случаях. В процессе моделирования также проверялось сохранение объема капле.

Кроме сравнения формы капле также была сопоставлена их относительная скорость в потоке. В [10] авторы, используя метод отражений, получили формулу для определения относительной скорости капле в течении Пуазейля, которая верна в случае небольших a/R для капле, расположенных на осевой линии канала и имеющих ту же плотность, что и несущая жидкость

$$\frac{U_{dr}}{U_{ch}} = 2 - \frac{4\lambda}{3\lambda + 2} \cdot \left(\frac{a}{R}\right)^2 + o\left(\left(\frac{a}{R}\right)^3\right), \quad (5)$$

где $\lambda = \mu_2/\mu_1$ – отношение вязкостей внутренней жидкости к вязкости внешней. В численном эксперименте за скорость капле принималась скорость перемещения ее центра масс. При сравнении рассчитанных значений с экспериментальными данными [11], относительная погрешность не превышала 4%. Как следует из формулы (5), относительная скорость капле всегда превышает среднюю по сечению скорость течения в канале, что и было подтверждено множеством экспериментальных наблюдений, в которых относительная скорость была больше в среднем на 30–60%. Расчеты для всех рассмотренных случаев также подтверждают эти наблюдения.

Проведено сравнение относительной скорости капле, рассчитанной по формуле (5) с результатами численного моделирования движения капле, расположенных на оси цилиндрического канала для случаев с соотношениями вязкостей $\lambda = 0.99$ и $\lambda = 2.04$, но для меньших соотношений радиусов капле и канала $0.1 < a/R < 0.6$. Из графиков на рис. 3 видно, что расчеты достаточно хорошо совпадают с аналитикой для обоих значений λ . Причем, чем меньше a/R , тем согласование лучше.

Исследовалась динамика нескольких капле в цилиндрическом канале радиуса R с постоянным перепадом давления Δp на длине L . Результаты численного моделирования представлены для безразмерного времени $t = t_{nondim} = \gamma t_{dim}/(\mu_1 a)$, где масштабом расстояния служит $a = a_{min}$ радиус самой маленькой капле. Динамика капле в канале характеризуется несколькими безразмерными параметрами: отношением радиуса капле к радиусу канала a/R , отношениями вязкостей внутренней и внешней жидкостей λ , безразмерным параметром $K = Ra|\mathbf{p}_\infty|/\gamma$, $|\mathbf{p}_\infty| = \Delta p/L$. На рис. 4(a) представлены капле равного начального радиуса $a/R = 0.05$ в цилиндрическом канале в начальный момент времени и в момент $t = 9.9$. Вследствие небольшого количества капле и их малого размера присутствие капле изменяет профиль течения внешней жидкости вдали от капле незначительно. Можно видеть, что спустя некоторое время капле распределялись согласно параболическому профилю, характерному для течения Пуазейля. Угол наклона и деформация каждой капле соответствовали локальному капиллярному числу Ca , $Ca = \mu_1 a G/\gamma$, $G = 2\Delta h|\mathbf{p}_\infty|/\mu_1$, Δh – расстояние от центра капле до оси цилиндра.

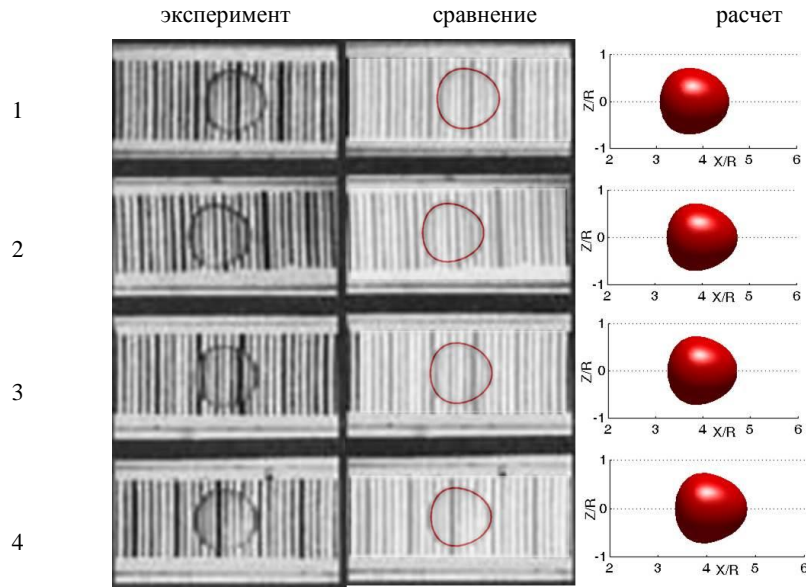


Рис. 2. Сопоставление с экспериментальными данными [11].

Таблица 1

Экспериментальные значения параметров [11]			
1	2	3	4
$a = 3.63 \cdot 10^{-3} \text{ м}, R = 5 \cdot 10^{-3} \text{ м}, \gamma = 3.63 \cdot 10^{-3} \text{ Н/м},$ $\rho_1 = \rho_2 = 1.089 \cdot 10^{-3} \text{ кг/м}^3$			
$\mu_1 = 0.425 \text{ Па} \cdot \text{с}, \mu_2 = 0.865 \text{ Па} \cdot \text{с}$		$\mu_1 = 0.425 \text{ Па} \cdot \text{с}, \mu_2 = 0.865 \text{ Па} \cdot \text{с}$	
$U = 3.9 \cdot 10^{-3} \text{ м/с}$	$U = 5.25 \cdot 10^{-3} \text{ м/с}$	$U = 3.9 \cdot 10^{-3} \text{ м/с}$	$U = 5.25 \cdot 10^{-3} \text{ м/с}$

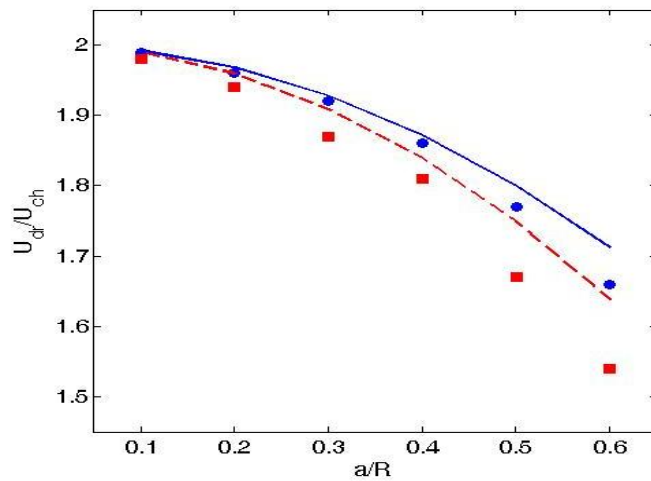


Рис. 3. Относительная скорость капли при движении по оси цилиндрического канала, $\lambda = 2.04$: квадраты – расчеты, штрихованная линия – теория [10]; $\lambda = 0.99$: круги – расчеты, сплошная линия – теория [10].

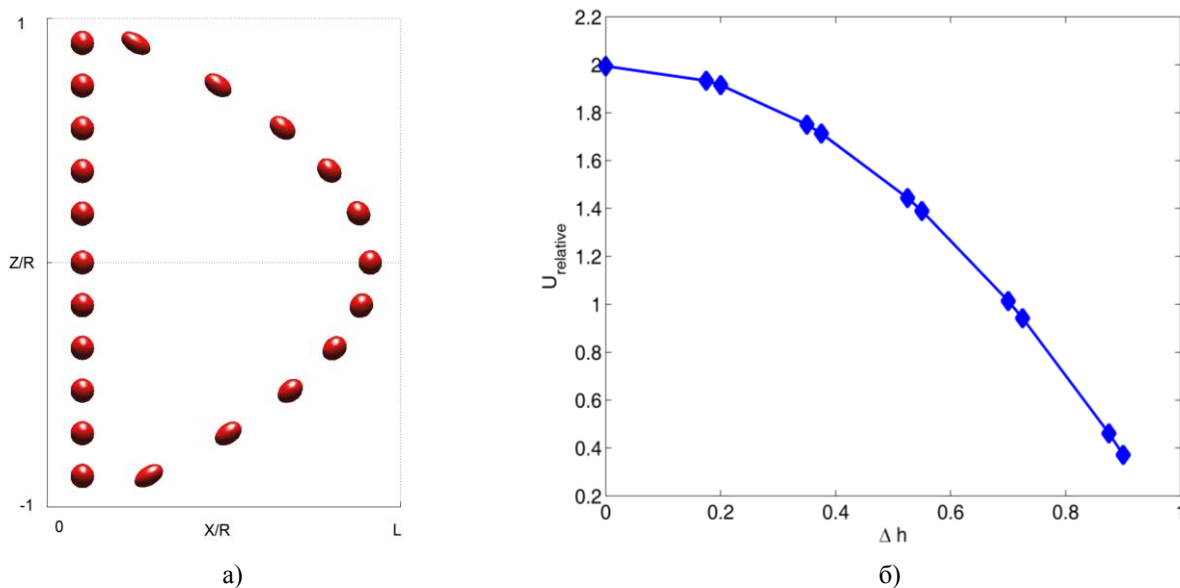


Рис 4. Динамика капель в цилиндрическом канале в разные моменты безразмерного времени (а) и значения относительной скорости в зависимости от позиции капли в канале (б), $\lambda = 1, a/R = 0.05, L/R = 1.5, K = 0.66$.

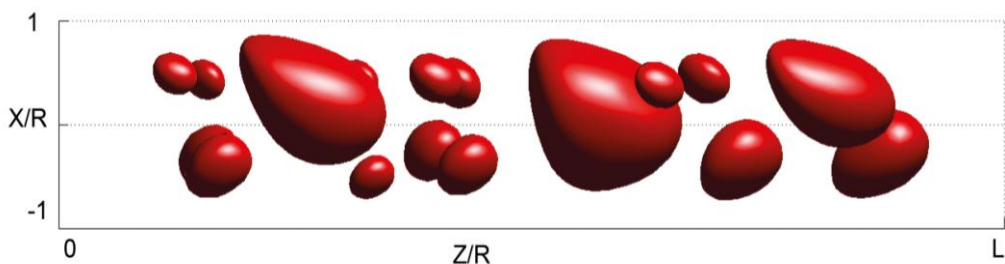


Рис. 5. Периодическое течение капель различного радиуса в цилиндрическом канале, $\lambda = 1, 0.19 \leq a/R \leq 0.75, L/R = 10, 0.38 \leq K \leq 1.5$.

Также на рис. 4(б) представлен график изменения относительной скорости капель в зависимости от Δh . Показано, что при удалении от оси канала, относительная скорость уменьшается.

Интерес также представляет деформация капель радиуса, сравнимого с радиусом канала, здесь можно наблюдать влияние близко расположенных стенок канала на изменение формы капли. На рис. 5 изображены капли различного начального радиуса в периодическом потоке в цилиндрическом канале в момент безразмерного времени $t = 3.5$. С течением времени изначально сферические капли деформировались, причем на изменение формы влияет размер капель и их положение относительно центральной оси канала. Качественно капли малого размера вели себя аналогично малым каплям, рассмотренным в предыдущем случае. В то же время крупные капли деформировались значительно, что объясняется существенным изменением скорости сдвига на расстояниях меньших, чем размер капли.

Разработанный подход к моделированию течения эмульсий в канале можно использовать для исследования поведения деформируемых капель в потоке, а также для расчета и описания изменения реологических характеристик дисперсной среды в целом. Численный эксперимент по расчету вязкости проводился по аналогии с определением вязкости эмульсии в капиллярном вискозиметре. В цилиндрический канал помещается капля вязкой жидкости в объеме другой вязкой жидкости и, под действием заданного постоянного перепада давления, проводится расчет динамики капли. На каждом временном шаге рассчитывается расход через выходное сечение канала и, используя закон Пуазейля $Q = \frac{\pi R^4 \Delta p}{8 \mu_{comp} L}$, находится расчетная динамическая вязкость среды, отношение которой к вязкости несущей фазы рассматривается как относительная вязкость эмульсии, $\mu_{rel} = \mu_{comp} / \mu_1$.

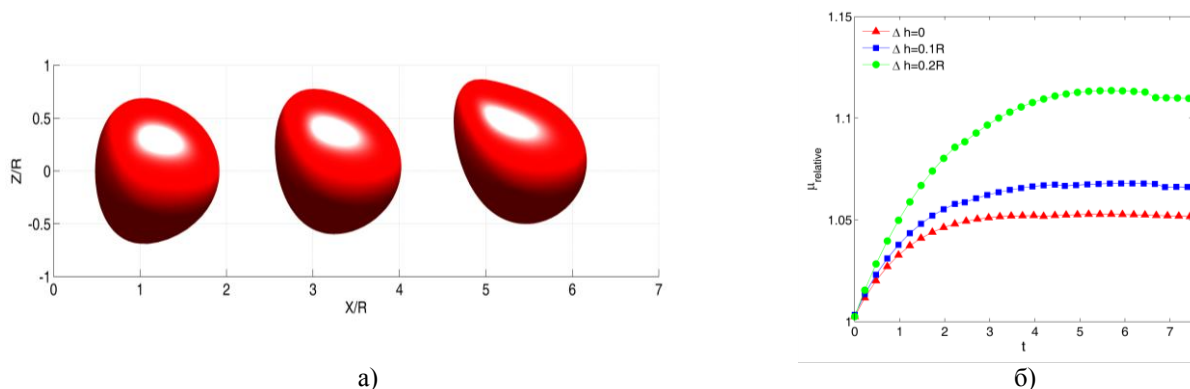


Рис. 6. Форма каплей при течении в цилиндрическом канале при $\Delta h = 0$, $\Delta h = 0.1R$, $\Delta h = 0.2R$ (слева направо), $t = 7$ (а), и график изменения во времени относительной вязкости (б), $\lambda = 1$, $a/R = 0.7$, $L/R = 2.5$, $\alpha = 18.3\%$.

На рис. 6 представлены результаты расчетов для каплей, расположенных на различном расстоянии от оси канала $\Delta h = 0$, $\Delta h = 0.1R$, $\Delta h = 0.2R$ (слева направо) при $\lambda = 1$, $a/R = 0.7$, $L/R = 2.5$, объемной концентрации $\alpha = 18.3\%$ (расчеты для каждой капли проводились отдельно, на одном графике формы совмещены для удобства визуализации). Графики показывают, что при увеличении расстояния от оси канала, соответственно при увеличении капиллярного числа, капли претерпевают большую деформацию и относительная вязкость увеличивается.

Заключение

На основе ускоренного метода граничных элементов проведено численное моделирование динамики деформируемых каплей при течении вязкой жидкости в каналах. Изучена динамика формы каплей, относительная скорость каплей в потоке, изменение относительной вязкости всей системы при различных параметрах течения. Проведено сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными, опубликованными в литературе.

Расчеты показали, что представленный подход может быть использован при моделировании движения каплей в цилиндрическом канале, когда начальный радиус капли сравним с радиусом канала. Подобные исследования представляют не только практический, но и теоретический интерес, поскольку асимптотические теории разработаны для случаев, когда радиус капли либо гораздо меньше, либо гораздо больше радиуса канала. Кроме того, проведение численных экспериментов позволяет изучать подобные задачи для широкого диапазона изменения физических параметров, что не может быть в полной мере предсказано теоретически и исследовано экспериментально.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-31-00074.

ЛИТЕРАТУРА

1. Абрамова О. А., Иткулова Ю. А., Гумеров Н. А. Моделирование трехмерного движения деформируемых каплей в стоковом режиме методом граничных элементов // Вычисл. мех. сплош. сред. 2013. Т. 6 №2. С. 214–223.
2. Ковалева Л. А., Мусин А. А., Фатхуллина Ю. И. Нагрев эмульсионной капли сверхвысокочастотным электромагнитным полем // Теплофизика высоких температур. 2018. Т. 56 №2. С. 1–6.
3. Abramova O. A., Itkulova Yu. A., Gumerov N. A. FMM/GPU Accelerated BEM Simulations of Emulsion Flows in Microchannels // Contribution paper of ASME 2013 IMECE, 2013.
4. Abramova O. A., Pityuk Yu. A., Gumerov N. A., Akhatov I. Sh. High performance BEM simulation of 3D emulsion flow // Communications in Computer and Information Science (CCIS). 2017. Vol 753. P. 317–330.
5. Fatkhullina Y. I., Musin A. A., Kovaleva L. A., Akhatov I. Sh. Mathematical modeling of a water-in-oil emulsion droplet behavior under the microwave impact // J. of Physics: Conference Series. 2015. P. 574.
6. Graham M. D. Fluid dynamics of dissolved polymer molecules in confined geometries // Annu. Rev. Fluid Mech. 2011. Vol. 43. P. 273–298.
7. Grotberg J. B., Jensen O. E. Biofluid mechanics in flexible tubes // Annu. Rev. Fluid Mech. 2004. Vol. 36. P. 121–147.
8. Guido S., Preziosi V. Droplet deformation under confined Poiseuille flow // Adv. Colloid Inter. Sci. 2010. Vol. 161. P. 89–101.
9. Gupta A., Sbragaglia M., Scagliarini A. Hybrid Lattice Boltzmann/Finite Difference simulations of viscoelastic multi-component flows in confined geometries // J. Comput. Phys. 2015. Vol. 291. P. 177–197.
10. Hetsroni G., Habel S., Wacholder E. The flow field in and around a droplet moving axially within a tube // J. Fluid Mech. 1970. Vol. 41. No. 4. P. 689–705.
11. Ho B. P., Leal L. G. The creeping motion of liquid drops through a circular tube of comparable diameter // J. Fluid Mech. 1975. Vol. 71. No. 2. P. 361–383.
12. Itkulova (Pityuk) Yu. A., Abramova O. A., Gumerov N. A., Akhatov I. S. Boundary element simulations of free and forced bubble oscillations in potential flow // Proceedings of the ASME2014 International Mechanical Engineering Congress & Exposition. V 7, IMECE2014-36972, 2014.
13. Keir G., Jegatheesan V. A review of computational fluid dynamics applications in pressure-driven membrane filtration // Rev. Environ. Sci. Biotechnol. 2014. Vol. 13. P. 183–201.
14. Loewenberg M., Hinch E. J. Numerical simulation of a concentrated emulsion in shear flow // J. Fluid Mech. 1996. Vol. 321. P. 395–419.
15. Pozrikidis C. Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow. Cambridge, MA: Cambridge University Press, 1992. 259 p.
16. Rallison J. M., Acrivos A. A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow // J. Fluid Mech. 1978. Vol. 89. No.1. P. 191–200.
17. Sarrazin F., Loubiere K., Prat L., Gourdon C., Bonometti T., Magnaudet J. Experimental and numerical study of droplets hydrodynamics in microchannels // AIChE Journal. 2006. Vol. 52. No.12. P. 4061–4070.
18. Stone H. A., Stroock A. D., Ajdari A. Engineering flows in small devices: microfluidics toward a Lab-on-a-Chip // Annu. Rev. Fluid Mech. 2004. Vol. 36. P. 381–411.
19. Zinchenko A. Z., Davis R. H. A multipole-accelerated algorithm for close interaction of slightly deformable drops // J. Comp. Phys. 2005. Vol. 207. P. 695–735.

Поступила в редакцию 14.09.2018 г.

STUDYING OF THE DEFORMABLE DROPLET DYNAMICS IN CHANNEL FLOW

© O. A. Abramova^{1*}, Yu. A. Pityuk¹, N. A. Vorob'ev², I. A. Zarafutdinov¹

¹Bashkir State University

32 Zaki Validi Street, 450076 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.

²Mavlyutov Institute of Mechanics, Ufa Research Center of RAS

71 Oktyabrya Avenue, 450054 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.

Phone: +7 (347) 229 96 70.

*Email: abramovacmnds@gmail.com

Modeling of motion of two-phase liquids in microchannels of different shape is needed for a variety of industrial applications, such as enhanced oil recovery, advanced material processing, and biotechnology. Development of efficient computational techniques is required for understanding the mechanisms of many effects in “liquid-liquid” systems, such as the jamming of emulsion flows in microchannels and blood cell motion in capillaries. In the present study, a mathematical model of a three-dimensional flow of a mixture of two Newtonian liquids of a droplet structure in microchannels at low Reynold's numbers is considered. The developed approach is based on the boundary element method for three-dimensional problems accelerated via utilization of a heterogeneous computing architecture (multicore CPUs and graphics processors). Implementation of the software enables selection of optimal algorithms depending on the problem size. The developed program code is used for studying of the emulsion droplet deformation and relative droplet velocity in channel flow; it was also utilized for calculation of the emulsion rheology characteristics. The features of the dynamics of different type of emulsions in microchannels are discussed. The developed approach can be used for solution of problems related to emulsion flows in microscale.

Keywords: dispersed systems, numerical simulations, boundary element method, Stokes flow, microchannel flow, deformable droplets, rheology.

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at bulletin_bsu@mail.ru if you need translation of the article.

REFERENCES

1. Abramova O. A., Itkulova Yu. A., Gumerov N. A. *Vychisl. mekh. splosh. sred.* 2013. Vol. 6 No. 2. Pp. 214–223.
2. Kovaleva L. A., Musin A. A., Fatkhullina Yu. I. *Teplofizika vysokikh temperatur.* 2018. Vol. 56 No. 2. Pp. 1–6.
3. Abramova O. A., Itkulova Yu. A., Gumerov N. A. Contribution paper of ASME 2013 IMECE, 2013.
4. Abramova O. A., Pityuk Yu. A., Gumerov N. A., Akhatov I. Sh. *Communications in Computer and Information Science (CCIS).* 2017. Vol 753. Pp. 317–330.
5. Fatkhullina Y. I., Musin A. A., Kovaleva L. A., Akhatov I. Sh. *J. of Physics: Conference Series.* 2015. Pp. 574.
6. Graham M. D. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2011. Vol. 43. Pp. 273–298.
7. Grotberg J. B., Jensen O. E. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2004. Vol. 36. Pp. 121–147.
8. Guido S., Preziosi V. *Adv. Colloid Inter. Sci.* 2010. Vol. 161. Pp. 89–101.
9. Gupta A., Sbragaglia M., Scagliarini A. *J. Comput. Phys.* 2015. Vol. 291. Pp. 177–197.
10. Hetsroni G., Habel S., Wacholder E. *J. Fluid Mech.* 1970. Vol. 41. No. 4. Pp. 689–705.
11. Ho B. P., Leal L. G. *J. Fluid Mech.* 1975. Vol. 71. No. 2. Pp. 361–383.
12. Itkulova (Pityuk) Yu. A., Abramova O. A., Gumerov N. A., Akhatov I. S. *Proceedings of the ASME2014 International Mechanical Engineering Congress & Exposition. V 7, IMECE2014-36972,* 2014.
13. Keir G., Jegatheesan V. *Rev. Environ. Sci. Biotechnol.* 2014. Vol. 13. Pp. 183–201.
14. Loewenberg M., Hinch E. J. *J. Fluid Mech.* 1996. Vol. 321. Pp. 395–419.
15. Pozrikidis C. *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow.* Cambridge, MA: Cambridge University Press, 1992.
16. Rallison J. M., Acrivos A. *J. Fluid Mech.* 1978. Vol. 89. No.1. Pp. 191–200.
17. Sarazin F., Loubiere K., Prat L., Gourdon C., Bonometti T., Magnaudet J. *AIChE Journal.* 2006. Vol. 52. No.12. Pp. 4061–4070.
18. Stone H. A., Stroock A. D., Ajdari A. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2004. Vol. 36. Pp. 381–411.
19. Zinchenko A. Z., Davis R. H. *J. Comp. Phys.* 2005. Vol. 207. Pp. 695–735.

Received 14.09.2018.