

УДК 532.5

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАПИЛЛЯРНОГО ТЕЧЕНИЯ ЖИДКОСТИ В МИКРОКАНАЛЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Ч.-Т. Ли, Ч.-Ч. Ли*, Ж.-Е. Лин**, М.-Л. Лю***

Брайант колледж — Пекинский технологический университет, Жухай, Китай

* Университет им. С. Фрейзера, Ванкувер, Канада

** Школа информационных технологий Пекинского технологического университета, Жухай, Китай

*** Университет г. Шаньтоу, Шаньтоу, Китай

E-mails: scat1440@yahoo.com, kdvl890@yahoo.co.uk, jelin@gmu.edu, 12mlliu@gmail.com

С использованием метода конечных элементов и двухфазной модели течения исследуются капиллярные течения в микроканале субмиллиметрового масштаба с учетом поверхностного натяжения. Получены поля скорости течения и давления в микроканале. Показано, что фронт капиллярного течения размывается в микроканале, претерпевая небольшие осцилляции и совершая поступательно-возвратные движения вследствие нелинейного взаимодействия капиллярного течения, сил поверхностного натяжения и граничных условий.

Ключевые слова: двухфазное капиллярное течение, микроканал, поверхностное натяжение, метод конечных элементов.

DOI: 10.15372/PMTF20160522

Введение. Исследование капиллярных микросистем вызывает большой интерес, поскольку они широко применяются в химии, биологии, биомедицине, материаловедении [1]. При исследовании, как правило, используются устройства с высоким разрешением на основе матрицы прибора с зарядовой связью и высокоскоростные камеры для визуализации капиллярных течений в микроканалах.

Капиллярность — природное явление, обусловленное действием сил поверхностного натяжения, возникающих в результате смачивания стенок канала вследствие адгезии и когезии [2]. Это явление имеет место в микросистемах объемом порядка 1 нл и менее. В качестве материала канала используются стекло, полимеры, полидиметилсилоксан, в которых микроканалы формируются в процессе лазерной обработки, создания маски, литографии, травления, фоторезиста [3]. Капиллярные течения используются также в микроэлектромеханических системах в основном вследствие их низких энергетических характеристик и малой стоимости [4–8]. Однако до сих пор не изучено распределение давления в микроканале и не определены условия, при которых начинается процесс капиллярного истечения жидкости. Количество работ, посвященных численным или аналитическим исследованиям капиллярных течений, незначительно (см., например, [9–12]).

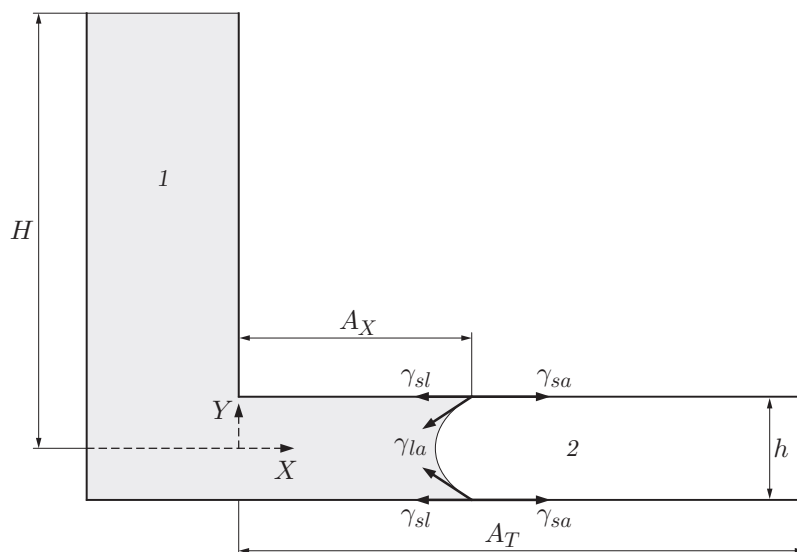


Рис. 1. Геометрия микроканала:
1 — резервуар, 2 — канал

В настоящей работе с помощью численного моделирования исследуются нелинейно-волновые процессы, описываемые системой нелинейных уравнений Навье — Стокса. Выполнен численный расчет капиллярного течения под действием гравитационных сил на L-образном стенде субмиллиметрового масштаба. Для решения уравнений Навье — Стокса с учетом поверхностного натяжения и двухфазности течения используются метод конечных элементов и функции уровня.

1. Постановка задачи. Представленная модель (рис. 1) состоит из капиллярного канала радиусом 10 мм и длиной 100 мм, присоединенного к резервуару с водой радиусом 15 мм и длиной 100 мм (h — высота канала; A_X — размер смачиваемой области вдоль координаты x ; A_T — размер всей области длиной l ; H — высота резервуара с жидкостью, отсчитываемая от оси симметрии микроканала). На поверхности воды в резервуаре ставится условие свободной контактной границы. В начальный момент времени горизонтальный участок канала заполнен воздухом. Под действием сил гравитации и адгезии вода из резервуара поступает в канал и перемещается вдоль его границ. В результате искривления свободной поверхности воды на границе контакта с воздухом появляются силы поверхностного натяжения, вследствие чего в поперечном сечении возникает скачок давления. Колебания давления вызывают соответствующее движение жидкости, которое поддерживается капиллярными и гравитационными силами. Конфигурация жидкой капли, силы поверхностного натяжения и капиллярные силы показаны на рис. 2 (θ — контактный угол; γ_{ij} — поверхностное натяжение между фазами i и j). Поскольку резервуар и канал имеют цилиндрическую форму, решается осесимметричная задача в плоскости rz (r, z — цилиндрические координаты).

2. Математическая модель области контакта воды и воздуха. Капиллярное течение полагается двухфазным и ламинарным, для определения межфазной границы используются функции уровня $\varphi(t, \mathbf{x})$. Уравнение $\varphi(t, \mathbf{x}) = 0$ определяет границу контакта. Эволюция функции уровня описывается уравнением переноса

$$\varphi_t + \nabla \cdot (\varphi \mathbf{u}) = 0. \quad (1)$$

Данная модель позволяет описывать не только капиллярное течение в микроканале, но и стационарное течение. Для определения полей скорости и давления решаются уравнения

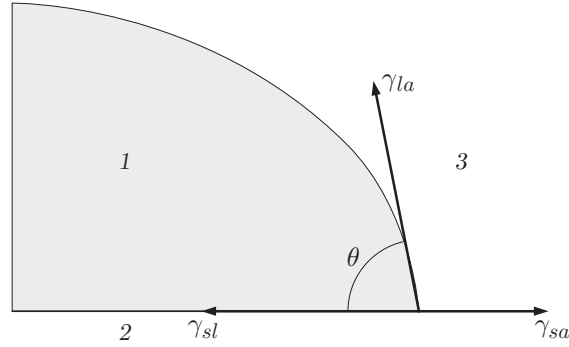


Рис. 2. Конфигурация жидкой капли, силы поверхностного натяжения и капиллярные силы на поверхности контакта жидкости (1), твердого тела (2) и воздуха (3)

Навье — Стокса, описывающие динамику массы и импульса сред с постоянной плотностью с учетом капиллярных сил и сил поверхностного натяжения:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot (p\mathbf{I} + \eta((\nabla\mathbf{u}) + (\nabla\mathbf{u})^T)) + \mathbf{F}_{st} + \rho\mathbf{g}; \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3)$$

где ρ — плотность, кг/м³; η — динамическая вязкость, Н·с/м²; \mathbf{u} — скорость, м/с; p — давление, Па; \mathbf{g} — ускорение свободного падения, м/с²; \mathbf{F}_{st} — поверхностное натяжение, возникающее на поверхности раздела вода — воздух:

$$\mathbf{F}_{st} = \sigma \kappa \nabla\varphi = -\sigma \left(\nabla \cdot \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} \right) \nabla\varphi,$$

κ — средняя кривизна поверхности, описываемая функцией уровня φ :

$$\kappa = - \left(\nabla \cdot \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} \right),$$

σ — коэффициент поверхностного натяжения, Н/м; $\mathbf{n} = \nabla\varphi/|\nabla\varphi|$ — вектор нормали к межфазной поверхности.

Скачок плотности и вязкости при переходе через межфазную поверхность сглаживается по формулам

$$\rho = \rho_{air} + (\rho_{water} - \rho_{air})\varphi, \quad \mu = \mu_{air} + (\mu_{water} - \mu_{air})\varphi,$$

где ρ_{air} , ρ_{water} , μ_{air} , μ_{water} — безразмерные плотности и вязкости воздуха и воды соответственно. Данный подход позволяет моделировать течение, являющееся гладким во всей области.

В случае несжимаемых сред поле скорости является соленоидальным, т. е. $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, поэтому уравнение (1) можно записать в виде закона сохранения:

$$\varphi_t + \mathbf{u} \cdot \nabla\varphi = 0.$$

Для решения уравнения движения межфазной поверхности используется метод конечных элементов: метод должен быть консервативным, не должен давать “паразитных” осцилляций, профиль φ должен быть постоянным в процессе вычислений. В случае одномерной задачи предположение о соленоидальности эквивалентно предположению о постоянстве скорости. В случае многомерных задач скорость изменяется, что приводит к искажению

формы функции φ на межфазной границе. Поэтому в численном расчете в уравнение переноса вносятся дополнительные члены:

$$\varphi_t + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi = \gamma \nabla \cdot \left(\varepsilon \nabla \varphi - \varphi(1 - \varphi) \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \right), \quad (4)$$

где ε — параметр, определяющий толщину межфазного переходного слоя; γ — параметр реинициализации. В большинстве используемых численных методов имеется искусственная вязкость, в результате в процессе вычислений межфазная поверхность “размазывается”. Для того чтобы предотвратить это “размазывание”, необходимо тщательно выбирать параметр γ для сохранения профиля поверхности. В дальнейших расчетах принимается $\gamma = 1$, $\varepsilon = h_c/2$ (h_c — характерный размер сетки в методе конечных элементов в окрестности межфазной поверхности). Процедура получения установившегося решения (4) называется реинициализацией.

3. Поверхностное натяжение. При наличии поверхностного натяжения поверхность жидкости представляет собой эластичную оболочку, площадь которой стремится уменьшиться для минимизации энергии всей системы. Силу поверхностного натяжения можно представить как производную от поверхностной энергии по пространственной координате. На рис. 2 видно, что на поверхность контакта жидкой капли с твердой подложкой и воздухом действуют три поверхностные силы γ_{la} , γ_{sl} , γ_{sa} , удовлетворяющие закону Янга [13, 14]:

$$\gamma_{sa} = \gamma_{sl} + \gamma_{la} \cos \theta.$$

Полная поверхностная энергия капиллярного канала включает четыре составляющие (см. рис. 1): 1) произведение энергии площади свободной поверхности канала, заполненного воздухом, $A_T - A_X$ и силы γ_{sa} ; 2) произведение энергии площади A_X смачиваемой поверхности и силы γ_{sl} ; 3) поверхностную энергию E_0 , запасенную в заполненном резервуаре (E_0 считается постоянной вследствие бесконечно малого количества жидкости, попадающей в микроканал); 4) произведение энергии площади поверхности мениска и силы γ_{la} (вследствие малости ею пренебрегается).

Выражение для полной энергии капиллярного канала (см. рис. 1) можно представить в виде

$$E_s = E_0 + [A_T \gamma_{sa} + A_X (\gamma_{sl} - \gamma_{sa})].$$

Полагая, что сечение капиллярного канала представляет собой прямоугольник шириной w и высотой h , для полной энергии имеем

$$E_s = E_0 + 2(h + w)[l\gamma_{sa} - x(\gamma_{sa} - \gamma_{sl})]. \quad (5)$$

Дифференцируя уравнение (5) по x , получаем эквивалентную капиллярную силу F_s , приложенную к столбу жидкости в направлении x :

$$F_s = -\frac{dE_s}{dx} = 2(h + w)(\gamma_{sa} - \gamma_{sl}) = \Delta p_{la} wh.$$

Поскольку высота канала h значительно меньше его ширины w , выражение для скачка давления Δp_{la} при переходе через межфазную поверхность жидкость — воздух представим в виде [15]

$$\Delta p_{la} = \frac{2(h + w)(\gamma_{sa} - \gamma_{sl})}{wh} \simeq \frac{2(\gamma_{sa} - \gamma_{sl})}{h}. \quad (6)$$

Уравнение (6) можно записать в виде, аналогичном выражению для скачка давления в соответствии с законом Лапласа, путем замены гидравлического радиуса $r_h = D_h/2 = wh/(w + h)$ прямоугольного микроканала на внутренний радиус r капиллярной трубки:

$$\Delta p_{la} = \frac{2(\gamma_{sa} - \gamma_{sl})}{r} \simeq \frac{2\gamma_{la} \cos \theta}{r}. \quad (7)$$

Из (6), (7) следует, что чем меньше размеры канала (капиллярной трубки), тем больше скачок давления на межфазной границе. Для заполненного жидкостью стеклянного микроканала в воздухе при стандартных лабораторных условиях в расчетах принимались следующие значения параметров: поверхностное натяжение $\gamma_{la} = 0,0728$ Н/м, $\rho = 1000$ кг/м³, $\theta = 67,5^\circ$. В этом случае скачок давления на межфазной границе равен

$$\Delta p_{la} \simeq \frac{2 \cdot 0,0728 \cos 67,5^\circ}{10^{-4}} \simeq 5,57. \quad (8)$$

Классическими граничными условиями рассматриваемой задачи являются условия прилипания на стенке, а также кинематические и динамические условия на свободной поверхности. Эти условия можно упростить, используя асимптотический подход [16–21].

4. Метод конечных элементов. Для численного интегрирования уравнений Навье — Стокса (2), (3) с учетом поверхностного натяжения и перемещения межфазной границы капиллярной жидкости и воздуха используется метод конечных элементов. Запишем уравнения в слабой постановке, умножив дифференциальные уравнения на тестовые функции, равные нулю на фиксированной границе, но произвольные вне ее, и проинтегрируем по рассматриваемой области. Поскольку рассматриваемая область имеет сложную геометрию, для интегрирования по пространству используем адаптивные сетки [22–24], а по времени — конечно-разностную схему.

Сначала определим конечномерное пространство пробных функций на множестве кусочно-линейных функций $f(x)$:

$$V_h = \{f(x): f(x) = 0 \ \forall x \in \Lambda \subset \partial\Omega\},$$

где Ω — расчетная область; $\partial\Omega$ — граница области Ω ; Λ — подмножество границы $\partial\Omega$, на которой выполняются условия Дирихле.

Введем пространство векторных функций в соответствии с определением:

$$W_h = \begin{cases} \mathbf{f}(x) = [f_1(x), \dots, f_n(x)]^T & \forall x \in \Omega, \\ f_i(x) = 0 & \forall x \in \Lambda_i \subset \partial\Omega, \quad i = 1, \dots, n \end{cases}$$

($f_i(x)$ — кусочно-линейная функция). Решение уравнения (1) сводится к нахождению функции $\varphi \in V_h$, такой что

$$\int_{\Omega} v \varphi_t dx - \int_{\Omega} \nabla v \cdot (\varphi \mathbf{u}) dx + \int_{\partial\Omega} v \varphi \mathbf{u} \cdot \check{v} dS = 0 \quad \forall v \in V_h, \quad (9)$$

где \check{v} — нормальная составляющая вектора на стенке канала. Если на стенке ставится условие $\mathbf{u} \cdot \check{v} = 0$ (“смачиваемая граница”), то последнее слагаемое в (9) обращается в нуль.

Задача о пространственной дискретизации уравнения реинициализации (4) преобразуется в задачу определения функции $\varphi \in V_h$:

$$\int_{\Omega} v \varphi_t dx - \int_{\Omega} \nabla v \cdot (-f + \gamma \varepsilon \nabla \cdot (\nabla \varphi)) dx + \int_{\partial\Omega} v (f - \gamma \varepsilon \nabla \cdot (\nabla \varphi)) \cdot \check{v} dS = 0 \quad \forall v \in V_h, \quad (10)$$

где $f = \gamma \varphi (1 - \varphi)$. Для того чтобы исключить просачивание через границы, необходимо положить интегралы по границе равными нулю.

Уравнение (9) интегрируется по времени с помощью явного метода Эйлера. Пусть $\varphi^n = \varphi(t_n)$ на временном шаге t_n . Перед переходом на следующий шаг определим промежуточное значение $\varphi_c^{n+1} \in V_h$ по формулам

$$\int_{\Omega} v \frac{\varphi_c^{n+1} - \varphi^n}{dt} dx - \int_{\Omega} \nabla v \cdot (\varphi^n \mathbf{u}^n) dx = 0 \quad \forall v \in V_h. \quad (11)$$

Дополнительно следует определить нормаль к межфазной границе $\hat{n}_c^{n+1} \in W_h$:

$$\int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \frac{\nabla \varphi_c^{n+1}}{|\nabla \varphi_c^{n+1}|} dx = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \hat{n}_c^{n+1} dx = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in W_h. \quad (12)$$

После вычислений по формулам (11), (12) используем аппроксимацию второго порядка по времени для уравнения (4). При $m = 0$ положим $\varphi_l^0 = \varphi_c^{n+1}$. Далее для $m = 1, 2, \dots$ определим $\varphi_l^{m+1} \in V_h$ по формуле

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v \frac{\varphi_l^{m+1} - \varphi_l^m}{dt} dx + \int_{\Omega} \gamma \left(\frac{\varphi_l^{m+1} + \varphi_l^m}{2} - \varphi_l^{m+1} \varphi_l^m \right) \nabla v \cdot \hat{n}_c^{n+1} dx - \\ - \varepsilon \gamma \int_{\Omega} \nabla \left(\frac{\varphi_l^{m+1} + \varphi_l^m}{2} \right) \cdot \hat{n}_c^{n+1} (\nabla v \cdot \hat{n}_c^{n+1}) dx = 0 \quad \forall v \in V_h. \end{aligned} \quad (13)$$

Итерации заканчиваются при условии

$$\frac{\|\varphi_l^{m+1} - \varphi_l^m\|}{dt} < \zeta.$$

В расчетах относительная погрешность принималась равной $\zeta = 0,001$. Для того чтобы выполнялось условие (13), требуется несколько шагов по времени, далее, полагая, что $\varphi_l^{m+1} = \varphi_c^{n+1}$, подставляем его в качестве нового значения в уравнение (10). В численных расчетах принималось $\varepsilon = h_c/2$.

После получения нового значения функции φ из (13) используем метод конечных элементов для дискретизации уравнений Навье — Стокса (2), (3) для несжимаемой жидкости с учетом поверхностного натяжения. Пространственное осреднение уравнений Навье — Стокса состоит в нахождении $\mathbf{u} \in W_h$, $p \in V_h$, таких что

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (\rho \mathbf{u})_t \cdot \mathbf{v} dx - \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v}) \rho \mathbf{u} dx = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{v}) p dx - \int_{\Omega} \eta \sum_i \nabla v_i \cdot (\nabla u_i + \mathbf{u}_{x_i}) dx + \\ + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot (\rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st}) dx \quad \forall \mathbf{v} \in W_h, \\ \int_{\Omega} q (\nabla \cdot \mathbf{u}) dx = 0 \quad \forall q \in V_h. \end{aligned}$$

Для получения численного решения определим кривизну поверхности $\varphi = \text{const}$ и градиента функции φ . Приближение $(\nabla \varphi)^{n+1}$ определяется из уравнения

$$\int_{\Omega} (\nabla \varphi)^{n+1} \cdot \mathbf{v} dx = \int_{\Omega} \nabla(\varphi^{n+1}) \cdot \mathbf{v} dx \quad \forall \mathbf{v} \in W_h.$$

Средняя кривизна \varkappa^{n+1} вычисляется в соответствии с соотношением

$$\int_{\Omega} \mathbf{v} \varkappa^{n+1} dx = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} \cdot \frac{(\nabla \varphi)^{n+1}}{|(\nabla \varphi)^{n+1}|} dx \quad \forall \mathbf{v} \in W_h.$$

Промежуточное значение скорости \mathbf{u}_c^{n+1} находится с использованием явного значения p .

Требуется определить $\mathbf{u}_c^{n+1} \in W_h$, такое что

$$\begin{aligned} \frac{1}{dt} \int_{\Omega} (\rho^{n+1} \mathbf{u}_c^{n+1} - \rho^n \mathbf{u}_c^n) \cdot \mathbf{v} \, dx - \int_{\Omega} (\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{v}) \cdot \rho \mathbf{u}_c^{n+1} \, dx = \\ = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \cdot p^n \, dx - \int_{\Omega} \eta^{n+1} \sum_i \nabla v_i \cdot (\nabla u_{ci}^{n+1} + \mathbf{u}_{xi}^n) \, dx + \\ + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot (\rho^{n+1} \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st}^{n+1}) \, dx \quad \forall \mathbf{v} \in W_h, \end{aligned}$$

где

$$\mathbf{F}_{st}^{n+1} = \varkappa^{n+1} (\nabla \varphi)^{n+1}.$$

Далее определяется псевдозначение \mathbf{u}^{n+1} , при этом давление определяется неявным образом. Требуется найти $\mathbf{u}^{n+1} \in W_h$, такое что

$$\begin{aligned} \frac{1}{dt} \int_{\Omega} (\rho^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \rho^n \mathbf{u}^n) \cdot \mathbf{v} \, dx - \int_{\Omega} (\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{v}) \cdot \rho \mathbf{u}^{n+1} \, dx = \\ = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \cdot p^{n+1} \, dx - \int_{\Omega} \eta^{n+1} \sum_i \nabla v_i (\nabla u_{ci}^{n+1} + \mathbf{u}_{xi}^n) \, dx + \\ + \int_{\Omega} \mathbf{v} (\rho^{n+1} \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st}^{n+1}) \, dx \quad \forall \mathbf{v} \in W_h. \end{aligned}$$

Для точного определения \mathbf{u}^n необходимо знать давление p^{n+1} , т. е. найти $p^{n+1} \in V_h$, такое что

$$-\frac{1}{dt} \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u}_c^{n+1} \, dx = \int_{\Omega} \frac{\nabla q \cdot \nabla (p^{n+1} - p^n)}{\rho^{n+1}} \, dx \quad \forall q \in V_h.$$

Окончательно можно получить новое значение \mathbf{u}^{n+1} , т. е. найти $\mathbf{u}^{n+1} \in W_h$, такое что

$$\int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}_c^{n+1}}{dt} \, dx = - \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \frac{\nabla (p^{n+1} - p^n)}{\rho^{n+1}} \, dx \quad \forall \mathbf{v} \in W_h.$$

Для вычислений по описанному алгоритму применяется решатель уравнений Навье — Стокса из пакета программ CFD-ACE+.

Для построения расчетной области используется метод отображенных сеток. Для построения сетки используются 871 точка и 780 четырехугольных элементов (рис. 3).

5. Начальные и граничные условия. Для численного решения необходимо задать функцию φ при $t = 0$. Пусть межфазная граница совпадает с изолинией $\varphi = 0,5$ (в воздухе $\varphi = 0$, в жидкости $\varphi = 1$). “Размазанная” функция Хевисайда используется для задания функции φ в областях $0 \leq \varphi \leq 0,5$, $0,5 < \varphi \leq 1,0$:

$$H(\varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi < -\lambda, \\ 1/2 + \varphi/(2\lambda) + (2\pi)^{-1} \sin(\pi\varphi/\lambda), & -\lambda \leq \varphi \leq \lambda, \\ 1, & \varphi > \lambda. \end{cases}$$

На входе задается гидростатическое давление $p = \rho g H$. В тот момент, когда вода поступает из резервуара в микроканал, функция уровня принимает значение $\varphi = 1$.

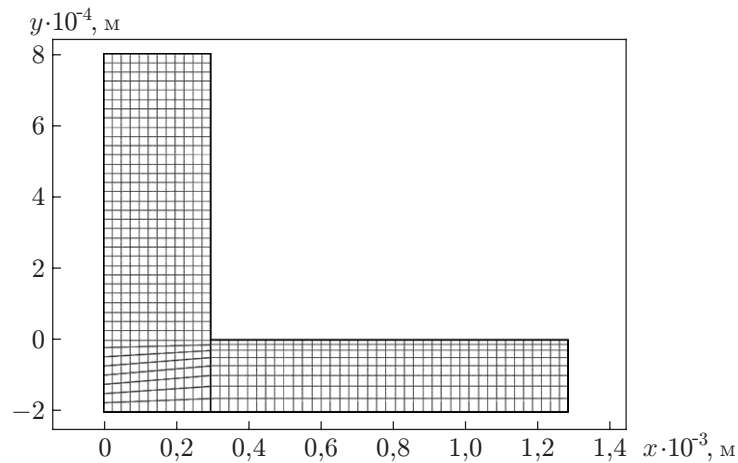


Рис. 3. Структура сетки в расчетной области

На выходе давление принимает значение $p = 5,57$ в соответствии с формулой (8) для модели с фиксированным объемом микроканала L-образной формы и на функцию φ не накладывається дополнительных условий.

На стенках канала задаются условие обращения в нуль нормальной составляющей скорости

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_{wall} = 0$$

и условие проскальзывания при наличии силы трения

$$\mathbf{F}_{fr} = -\frac{\eta}{\beta} \mathbf{u},$$

где β — “длина” проскальзывания. Граничные условия позволяют задать величину контактного угла θ , в рассматриваемом примере $\theta = 67,5^\circ$, а “длина” проскальзывания равна размеру элемента сетки.

Расчеты проводились при следующих значениях параметров: $\theta = 3\pi/8$ рад, $p = 10^5$ Па, $T = 293$ К, $g = 9,81$ м/с², $\rho_{water} = 1000$ кг/с³, $\rho_{air} = 1,293$ кг/с³, $\mu_{water} = 8,90 \cdot 10^{-4}$ Па · с, $\mu_{air} = 1,85 \cdot 10^{-6}$ Па · с, $\sigma = 7,2 \cdot 10^{-2}$ Н/м.

6. Результаты исследования и их обсуждение. Эволюция межфазной границы контакта жидкости и воздуха в капиллярном канале в течение первых 5 мс показана на рис. 4. Под действием силы поверхностного натяжения фронт жидкости изгибается и движется вдоль границ. После того как жидкость поступает в микроканал, передний фронт принимает форму мениска. Контактный угол во время расчета не меняется, что свидетельствует о надежности и точности предложенного метода.

На выходе давление полагается равным $p = 5,57$ при отсутствии вязких касательных напряжений, а на стенке ставится условие проскальзывания, задающее контактный угол $\theta = 67,5^\circ$. Рассматривается изотермическое нетурбулентное течение, так как условия течения предполагают его ламинарность. На рис. 4 видно, что в начальный момент времени вследствие искривления поверхности вода поступает в горизонтальный канал и формируется вогнутый мениск. Вследствие наличия контактного угла поверхность контакта практически не меняет форму и движется вправо по каналу.

На рис. 5 представлено поле скорости в различные моменты времени. Видно, что жидкость выталкивается к контактной границе, затем прижимается к низу канала, незначительно осциллируя, и под действием капиллярных сил движется далее. В окрестности соединения резервуара и канала (угол модели) наблюдается возвратное течение, обусловленное гравитационными силами, заставляющими жидкость скапливаться внизу канала.

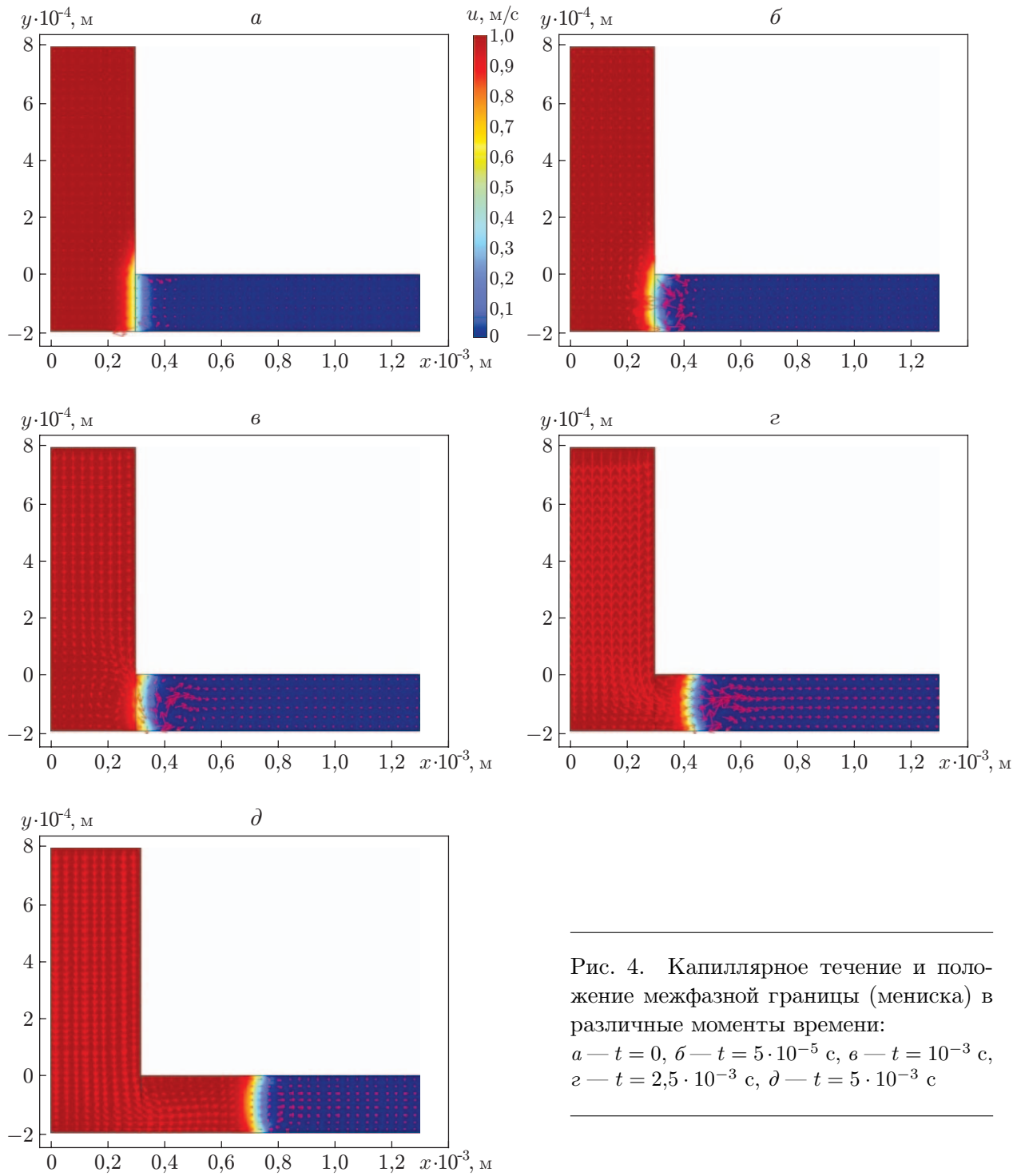
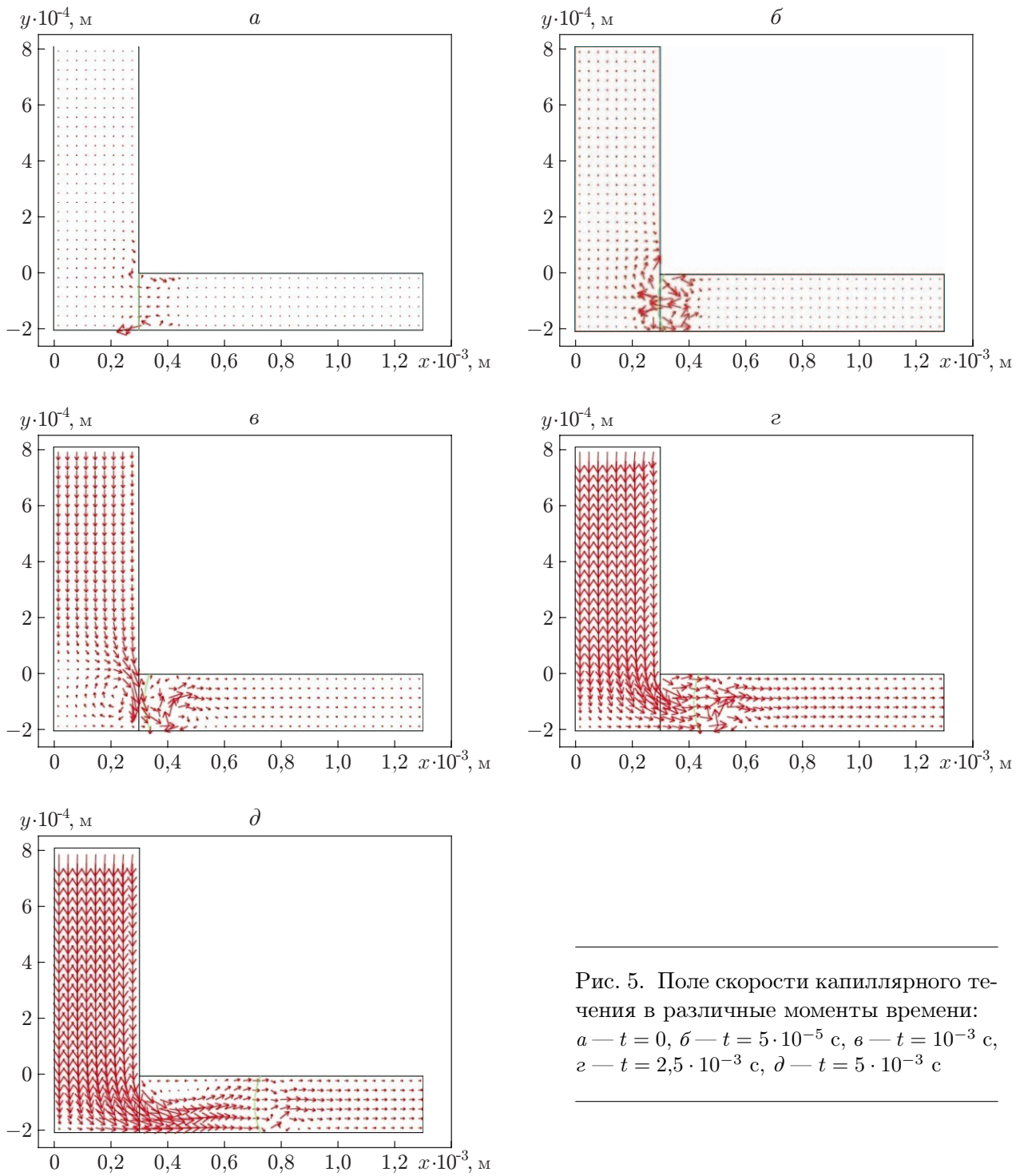


Рис. 4. Капиллярное течение и положение межфазной границы (мениска) в различные моменты времени:
a — $t = 0$, *б* — $t = 5 \cdot 10^{-5}$ с, *в* — $t = 10^{-3}$ с,
г — $t = 2,5 \cdot 10^{-3}$ с, *д* — $t = 5 \cdot 10^{-3}$ с



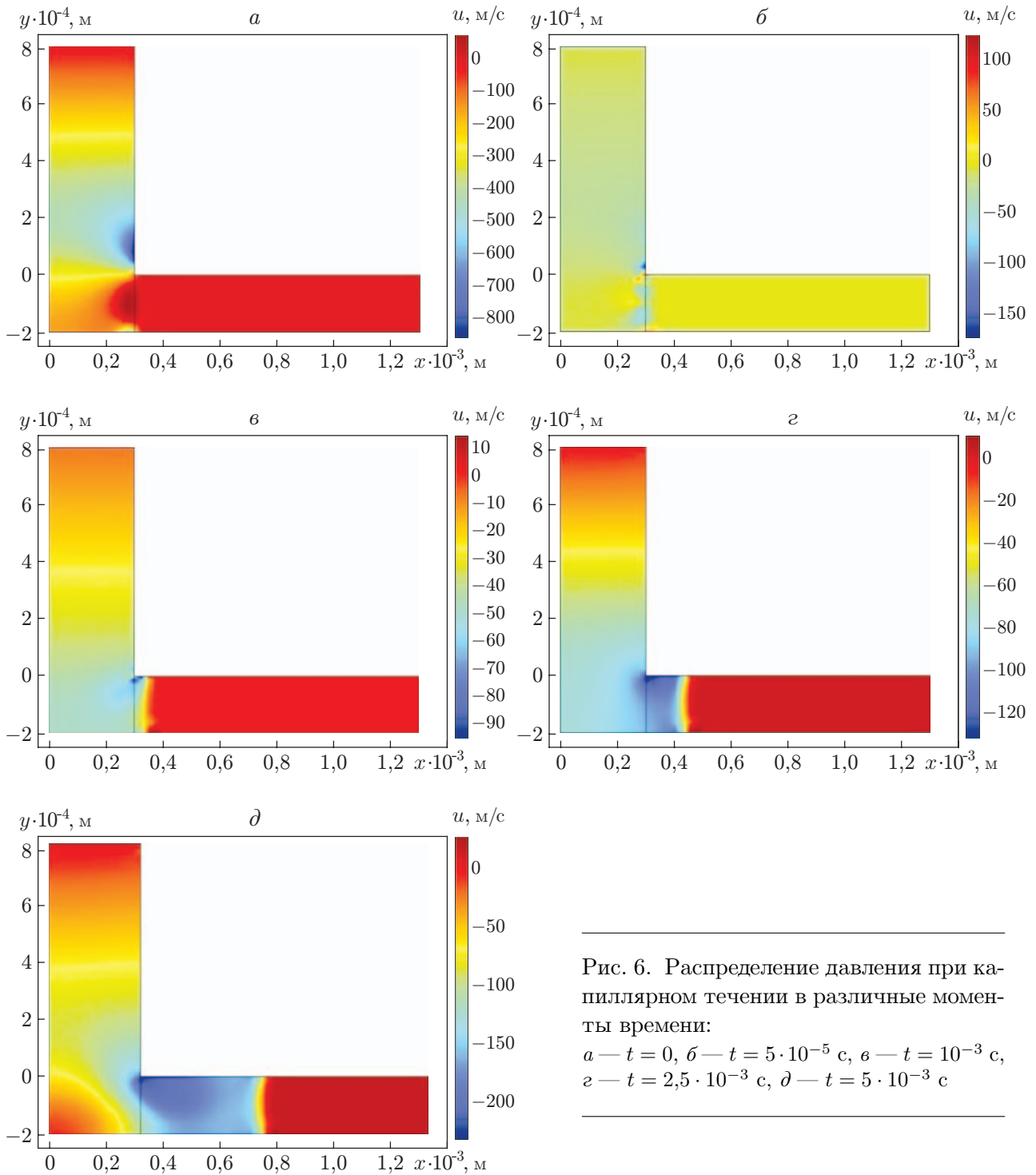


Рис. 6. Распределение давления при капиллярном течении в различные моменты времени:

$a - t = 0$, $б - t = 5 \cdot 10^{-5}$ с, $в - t = 10^{-3}$ с, $г - t = 2,5 \cdot 10^{-3}$ с, $д - t = 5 \cdot 10^{-3}$ с

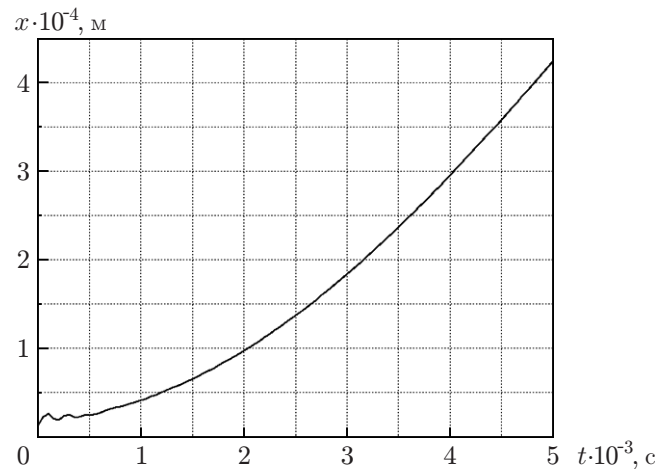


Рис. 7. Зависимость от времени положения точки контакта межфазной поверхности со стенками при капиллярном течении жидкости в микроканале со скоростью $u = 0,116 \text{ м/с}$

Затем под действием капиллярных сил жидкость растекается по микроканалу. Максимальное значение скорости зафиксировано внизу канала вблизи границы контакта, что обусловлено взаимодействием сил поверхностного натяжения и наличием граничного условия “смачиваемой стенки”.

На рис. 6 впервые для течения в микроканалах с учетом капиллярных сил представлено распределение поверхностного давления. При $t = 0$ горизонтальный канал заполнен воздухом, а резервуар — водой, в результате чего возникает градиент статического давления. Область максимального давления расположена на внутренней стенке в окрестности соединения резервуара и канала. При $t = 5 \cdot 10^{-4} \text{ с}$ наблюдается изменение градиента давления еще до момента начала действия капиллярных и гравитационных сил. В момент окончания вычислений скачок давления на поверхности контакта жидкость — газ достигает 300 Па. Такой скачок обусловлен действием сил поверхностного натяжения, которые заставляют воду и воздух двигаться по горизонтальному каналу, преодолевая силу сопротивления. Результаты расчетов показывают, что течение в канале определяется большим градиентом давления.

Интегрируя функцию уровня по горизонтальному направлению канала, определяем положение точки контакта с межфазной поверхностью. На рис. 7 приведена зависимость положения этой точки от времени. Небольшие осцилляции кривой могут быть следствием размытия фронта в начальный момент времени под действием капиллярных сил. Это свидетельствует о нелинейности, возникающей в результате взаимодействия сил поверхностного натяжения и сил, имеющих место на смачиваемой поверхности.

Заключение. Предложена микромодель и численно исследовано капиллярное течение и поведение контактной границы в канале. Изучены основные характеристики капиллярного течения, получены поля скорости и давления. В окрестности соединения канала и резервуара обнаружено возвратное течение, обусловленное действием капиллярных и гравитационных сил. Получена зависимость от времени положения точки контакта с межфазной поверхностью.

Результаты расчетов, полученные с использованием предложенной математической модели, дают новую информацию о капиллярном течении в микроканале и могут быть использованы для совершенствования основанных на этом явлении технологий, применяемых в химии, биомедицине и машиностроении.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Beebe D. J., Mensing G. A., Walker G. M.** Physics and applications of microfluidics in biology // Annual Rev. Biomed. Engng. 2002. N 4. P. 261–286.
2. **Washburn E. W.** The dynamics of capillary flows // Phys. Rev. 1921. N 17. P. 273–282.
3. **Kim E., Xia Y., Whitesides G. M.** Polymer microstructures formed by moldings in capillaries // Nature. 1995. V. 376. P. 581–584.
4. **Schwiebert M. K., Leong E. H.** Underfill flow as viscous flow between parallel plates driven by capillary action // IEEE Trans. Components, Packaging Manufactur. Technol. 1996. V. 19. P. 133–137.
5. **Weilin Q., Mala G. M., Lee D. Q.** Pressure-driven water flows in trapezoidal silicon microchannels // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2000. V. 43. P. 353–361.
6. **Kim E., Whitesides G. M.** Imbibition and flow of wetting liquids in non-circular capillaries // J. Phys. Chem. 1997. V. 101. P. 855–863.
7. **Zhu Y., Petkovic-Duran K.** Capillary flow in microchannels // Microfluid Nanofluid. 2010. N 8. P. 275–282.
8. **Jong W. R., Kuo T. H., Ho S. W., et al.** Flows in rectangular microchannels driven by capillary force and gravity // Intern. Comm. Heat Mass Transfer. 2007. V. 34. P. 186–196.
9. **Mason G., Morrow N. R.** Effect of contact angle on capillary displacement curvatures in pore throats formed by spheres // J. Colloid Interface Sci. 1994. V. 168. P. 130–141.
10. **Turian R., Kessler F.** Capillary flow in a noncircular tube // AIChE J. 2000. V. 46. P. 695–702.
11. **Ericson D., Li D., Park C. B.** Numerical simulations of capillary-driven flows in nonuniform cross-sectional capillaries // J. Colloid Interface Sci. 2002. V. 250. P. 422–430.
12. **Young W. B.** Analysis of capillary flows in non-uniform cross-sectional capillaries // Colloids Surfaces. A. Physicochem. Engng Aspects. 2004. V. 234. P. 123–128.
13. **Israelachvili J. N.** Intermolecular and surface forces. L.: Academic, 1985.
14. **de Gennes P. G.** Wetting: statics and dynamics // Rev. Mod. Phys. 1985. V. 57. P. 827–890.
15. **Tas N.** Nanofluidic bubble pump using surface tension directed gas injection // Anal. Chem. 2002. V. 74. P. 2224–2227.
16. **Voinov O. V.** Hydrodynamics of wetting // Fluid Dynamics. 1976. N 11. P. 714–721.
17. **Baiocchi C., Pukhnachev V. V.** Problems with one-sided constraints for Navier — Stokes equations and the dynamic contact angle // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 1990. V. 31, N 2. P. 185–197.
18. **Dussan V. E. B., Davis S. H.** On the motion fluid-fluid interface along a solid surface // Fluid Mech. 1974. V. 65. P. 71–95.
19. **Dussan V. E. B.** On the spreading of liquids on solid surfaces: Static and dynamics contact lines // Annual Rev. Fluid Mech. 1979. V. 11. P. 371–400.
20. **Pukhnachev V. V., Solonnikov V. A.** On the problem of dynamic contact angle // J. Appl. Math. Mech. 1982. V. 46. P. 771–779.
21. **Voinov O. V.** Dynamics of wetting of a solid by liquid: movement of thin film // Encyclopedia of surface and colloid science. N. Y.: Marcel Dekker Inc., 2002. P. 1546–1559.
22. **Gordon W. N., Hall C. A.** Construction of curvilinear coordinate systems and application to mesh generation // Intern. J. Numer. Methods Engng. 1973. V. 7. P. 461–477.
23. **Gordon W. N., Thiel L. C.** Transfinite mappings and their application to grid generation // Numerical grid generation. N. Y.: Elsevier, 1982. P. 171–192.
24. **Liou Y. C., Jeng Y. N.** A transfinite interpolation method of grid generation based on multipoints // J. Sci. Comput. 1998. V. 13. P. 105–114.

*Поступила в редакцию 2/XII 2013 г.,
в окончательном варианте — 10/X 2014 г.*