

¹Сибирский федеральный университет. Россия, 660074, г. Красноярск, ул. акад. Киренского, 26; э-почта: perpetuityrs@mail.ru, tov-andrey@yandex.ru;

²Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет. Россия, 630008, г. Новосибирск, ул. Ленинградская, 113; э-почта: valery.rudyak@mail.ru.

Поступила 21.06.2017.

ИЗУЧЕНИЕ РЕЖИМОВ СМЕШЕНИЯ ЖИДКОСТИ И НАНОЖИДКОСТИ В Т-ОБРАЗНОМ МИКРОМИКСЕРЕ

В статье численно изучены режимы течения и перемешивания воды и наножидкости с наночастицами оксида алюминия в Т-образном микроканале. Число Рейнольдса варьировалось от 10 до 400, а объемная концентрация наночастиц — от 0 до 10%. Рассматривались наножидкости со средними размерами частиц 50 и 150 нм. Коэффициент вязкости наножидкости задавался из экспериментальных данных. Во всех случаях он превышал коэффициент вязкости воды и зависел не только от концентрации наночастиц, но также от их размеров, причем вязкость наножидкости с меньшими частицами была выше вязкости наножидкости с крупными частицами. Установлено существование стационарного безвихревого режима течения, стационарного вихревого течения с двумя подковообразными вихрями, стационарного течения с двумя вихрями в канале смешения. Показано, что при переходе течения от режима с двумя подковообразными вихрями к режиму течения с двумя одиночными вихрями эффективность смешения возрастает в несколько раз. Установлено, что режимы течения и эффективность смешения существенно зависят и от объемной концентрации частиц и от их размеров.

Ключевые слова: гидродинамика, численное моделирование, Т-образный микросмеситель, микромиксер, смешение, вязкость, наножидкость, наночастицы, перепад давления.

Введение. В последнее время в химической индустрии стала активно продвигаться миниатюризация технологических процессов. Применение микроустройств позволяет значительно интенсифицировать физико-химические процессы по сравнению с классическими крупногабаритными устройствами [1–4].

Можно смело прогнозировать, что уже в ближайшем будущем миниатюризация химических приборов и аппаратов радикально повысит их продуктивность и эффективность. Помимо этого, при помощи микрофлюидных устройств можно проводить секвенирование ДНК, подготовку и анализ образцов, разделение клеток и их обнаружение. Заинтересованность в использовании таких устройств проявляет как промышленность, так и научные круги, из-за их потенциальных возможностей и преимуществ: небольшие количества образца и реагента, меньшее время потребления, низкая стоимость и высокая пропускная способность.

Во многих биомедицинских и промышленных приложениях в последнее время широко применяются наножидкости [4] — двухфазные системы, состоящие из несущей жидкости и наночастиц. В частности их используют для разделения компонентов крови [5], для доставки лекарств [6] и т. п. Весьма перспективно их использование для охлаждения различных микроустройств [4]. Поскольку смешение является одним из основных процессов в подобных приложениях, возникает необходимость создания эффективных перемешивающих микроустройств. В таких устройствах существуют специфические особенности. В частности, вследствие очень малых размеров каналов течение в них обычно является ламинарным, и смешение определяется лишь молекулярной диффузией. Однако из-за низких значений коэффициента диффузии обычно не удается обеспечить необходимую скорость и эффективность перемешивания. Поэтому для ускорения перемешивания применяются специальные устройства – микромиксеры [1–4, 7–11].

Одним из самых простых, но в то же время достаточно эффективных смесителей является Т-образный микромиксер. Режимы течения и смешения однородных жидкостей в таких микромиксерах систематически исследовались ранее, например, в работах [5,12–21]. Целью данной работы является моделирование смешения в Т-образном микромиксере воды и наножидкости на основе воды с частицами Al_2O_3 размерами 50 и 150 нм. Объемная концентрация частиц равнялась 2.5, 5 и 10%.

Математическая модель и численный алгоритм. В работе рассматриваются несжимаемые течения многокомпонентных ньютоновских жидкостей, для описания которых используется гидродинамический подход, основанный на решении уравнений Навье–Стокса (Navier–Stokes). В общем виде система уравнений Навье–Стокса имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla P + \nabla \mathbf{T}. \quad (1)$$

Плотность смеси и ее коэффициент эффективной вязкости выражаются через массовые концентрации f_i компонентов и их парциальные плотности ρ_i и коэффициенты вязкости μ_i следующим образом:

$$\rho = \left[\sum_i (f_i / \rho_i) \right]^{-1}, \mu = \sum_i f_i \mu_i,$$

где эволюция массовых концентраций определяется уравнением

$$\frac{\partial \rho f_i}{\partial t} + \nabla(\rho f_i \mathbf{v}) = \nabla(\rho D_i \nabla f_i), \quad (2)$$

где D_i — коэффициент диффузии i -го компонента. Плотность наножидкости определялась следующим образом:

$$\rho_{nf} = \varphi \rho_p + (1 - \varphi) \rho_w, \quad (3)$$

где φ — объемная концентрация наночастиц, ρ_p , ρ_w — плотности материала наночастиц и воды. Эффективный коэффициент вязкости наножидкости μ_{nf} зависит от объемной концентрации частиц и при рассматриваемых малых и умеренных концентрациях может быть представлен формулой:

$$\mu_{nf} = \mu_w (1 + a\varphi + b\varphi^2), \quad (4)$$

где μ_w — вязкость воды, a и b — коэффициенты, которые задавались из эксперимента.

Коэффициент диффузии наночастиц в воде определялся из уравнения Эйнштейна как

$$D = \frac{k_B T}{3\pi \mu_{nf} d_p}, \quad (5)$$

где μ_{nf} — вязкость наножидкости, d_p — диаметр наночастиц. В качестве граничных условий на стенках каналов для вектора скорости используются условия прилипания, их применимость для ряда микроканалов показана в работах [12-14].

Для решения описанной выше системы уравнений использовался программный комплекс для задач вычислительной гидродинамики σ Flow. Детальное описание численного алгоритма данной программы приведено в [4, 12, 21]. Здесь же отметим лишь некоторые основные моменты численной методики. Разностный аналог конвективно-диффузионных уравнений (1) и (2) находится с помощью метода конечного объема [22–24] для структурированных многоблочных сеток. В этом случае полученная схема автоматически оказывается консервативной. Суть метода заключается в разбиении расчетной области на контрольные объемы и интегрировании исходных уравнений сохранения по каждому контрольному объему для получения

конечно-разностных соотношений. Аппроксимация конвективных членов уравнений переноса (1) и (2) осуществляется с помощью противопоточных схем второго порядка QUICK [25] и TVD [24] соответственно. Для аппроксимации нестационарных слагаемых уравнений гидродинамики применяется неявная схема второго порядка. Диффузионные потоки и источниковые члены аппроксимируются конечно-объемными аналогами центрально-разностных соотношений со вторым порядком точности. Связь между полями скорости и давления, обеспечивающая выполнение уравнения неразрывности, реализуется при помощи SIMPLEC процедуры на совмещенных сетках [22]. Для устранения осцилляций поля давления используется подход Рхи–Чоу (Rhie–Chow), заключающийся во введении монотонизатора в уравнения для поправки давления [26]. Полученные в результате дискретизации исходной системы дифференциальных уравнений разностные уравнения решаются итерационным способом с применением алгебраического многосеточного решателя [27].

Для расчета использовалась четырехблочная сетка, состоящая из 4.5 миллионов узлов. Методические расчеты на последовательности расчетных сеток показали, что такая детализация достаточна для получения приемлемого по точности решения. Детальное тестирование и сопоставление с экспериментом описанной выше методики расчета для перемешивания однородных жидкостей в микроканалах было выполнено в работах [4, 12, 13].

Граничные условия задавались следующим образом: на входе в каналы принимался постоянный расход жидкостей с развитым профилем скорости, а на выходе из канала смешения — условия Неймана, означающие равенство нулю нормальной к поверхности выхода производной от всех скалярных величин. Размеры канала приведены на рис. 1. Высота канала — 200 мкм, а ширина его узкой и широкой частей — 200 и 400 мкм.

В расчетах вычислялся перепад давления между одним из входов и выходом из миксера, а также эффективность смешения. В литературе для количественной характеристики эффективности используют параметр $M = 1 - (\sigma/\sigma_0)^{0.5}$ — эффективность смешения, где $\sigma = V^{-1} \int_V (f - \langle f \rangle)^2 dV$ — среднеквадратичное отклонение массовой доли компонента смеси f от его среднего значения $\langle f \rangle$, $\sigma_0 = \langle f \rangle (1 - \langle f \rangle)$ — максимальное среднеквадратичное отклонение.

Результаты численного моделирования. Течение и смешение рассматриваемых жидкостей в значительной мере определяется их вязкостью. Сегодня

уже надежно установлено экспериментально и моделированием методом молекулярной динамики, что вязкость наножидкостей существенно больше вязкости несущей жидкости. Кроме того, она зависит не только от концентрации наночастиц, но также от их размеров [28–35] и материала [36, 37]. Наконец, она не описывается классическими теориями и корреляциями для крупнодисперсных жидкостей (Эйнштейна (Einstein), Бетчелора (Batchelor) и т. п.). Поэтому, чтобы результаты моделирования были адекватны, необходимо использовать реально измеренные значения коэффициентов вязкости. В данной работе использовались коэффициенты вязкости, полученные в экспериментальных работах [37–39] и приведенные в табл. 1. Результаты измерений хорошо описываются корреляцией (4) с коэффициентами $a = 6$ и $b = 72$ для наножидкости с частицами размером 150 нм. В работе [37], кроме того, экспериментально было установлено, что с уменьшением размера частиц вязкость наножидкости существенно возрастает, в частности, для наножидкости с частицами размером 50 нм результаты измерений хорошо описываются корреляцией (4) с коэффициентами $a = 11$ и $b = 42$.

Анализ табл. 1 показывает, что наножидкость отличается от базовой двумя обстоятельствами. Во-первых, она имеет бóльшую плотность, которая растет пропорционально объемной концентрации наночастиц и при наибольшей концентрации превосходит плотность воды почти на 30%. С другой стороны, вязкость жидкости растет нелинейно с концентрацией и существенно превосходит вязкость воды. Поэтому ясно, что наличие двух этих факторов будет существенно менять характер течения смешивающихся жидкостей в микромиксере. Наконец, вязкость наножидкости зависит и от размера наночастиц, тогда как плотность от нее не зависит. Поэтому целесообразно вначале отдельно изучить влияние на режимы течения и смешения объемной концентрации наночастиц и их размеров.

Исследование влияния концентрации наночастиц. Рассмотрим смешение воды с наножидкостью на основе воды с частицами оксида алюминия со средним размером частиц 150 нм. Через один из входов миксера подается вода с расходом Q_{in} , через другой — наножидкость с таким же, как у воды расходом и с заданной объемной концентрацией наночастиц, которая варьировалась от 0 до 10%, таким образом, общий расход в канале смешения равен $Q = 2Q_{in}$.

Смена режимов течения в рассматриваемом микромиксере характеризуется значением числа Рейнольдса (Reynolds), которое определялось как

$$\text{Re} = \frac{\rho U d_h}{\mu} \quad (6)$$

где $U = Q/(2\rho H^2)$ — среднерасходная скорость в канале смешения, $H = 200$ мкм — высота канала, $d_h = 267$ мкм — гидравлический диаметр. Для определения числа Рейнольдса по формуле (6) использовались вязкость и плотность воды при комнатной температуре. Плотность наножидкости определялась по формуле (3), а вязкость — по формуле (4) с соответствующими коэффициентами, показанными выше. При этом плотность наночастиц Al_2O_3 задавалась равной 3920 кг/м³. Как видно из представленных уравнений, при самой большой объемной концентрации наночастиц вязкость наножидкости в 2.35 раза, а плотность в 1.29 раза выше, чем соответствующие величины для воды. Это приводит к некоторым интересным результатам, рассмотренным далее.

Подобно смешению двух однородных жидкостей [12–16], при смешении обычной жидкости и наножидкости можно выделить несколько режимов течения. Для малых значений числа Рейнольдса ($\text{Re} < 10$) наблюдается ползущее безвихревое течение с достаточно плохим смешением. В области чисел Рейнольдса от 10 до 140 существует стационарное вихревое симметричное течение, эффективность смешения в котором меньше, чем в предыдущем режиме. Смешение обычной жидкости (в данном случае воды) и наножидкости имеет характерные особенности, обусловленные диффузией наночастиц. На начальном этапе через один вход микромиксера входит вода (концентрация наночастиц равна нулю), а через другой — наножидкость с заданной объемной концентрацией частиц φ . При полном смешении в Т-образном микроканале получится наножидкость с некоторой средней концентрацией. Если на входе расходы одинаковы, то итоговая концентрация смешанной наножидкости будет равна $\varphi/2$. Поэтому иллюстрацией смешения может служить изменение объемной концентрации наночастиц. В качестве примера такого смешения при малых числах Рейнольдса на рис. 2 приведены изолинии концентрации воды и наножидкости при различных объемных концентрациях частиц на расстояниях 300, 800, 1300 и 2200 мкм от входа в канал смешения. Здесь и далее синий цвет — 100% концентрации воды, красный цвет — максимальная концентрация наночастиц, которая в зависимости от исследуемой наножидкости равна 2.5, 5 или 10%. Как видно, перемешивание жидкости и наножидкости в этом режиме действительно очень слабое и наблюдается лишь на линии контакта жидкостей. С ростом концентрации наночастиц перемешивание несколько возрастает, хотя коэффициент диффузии падает из-за увеличения

коэффициента вязкости. Далее, с увеличением числа Рейнольдса в миксере формируется пара симметричных подковообразных вихрей, которые образуются у левой торцевой стенки миксера и распространяются в канал смешения. Эти вихри появляются из-за развития вторичных течений, обусловленных действием связанного с поворотом потока центростремительного ускорения, и их принято называть вихрями Дина (Dean).

Структура вихрей Дина в этом режиме показана на рис. 3 при помощи изоповерхности λ_2 (или Q -критерий), которая показывает образовавшиеся вихревые структуры. Здесь λ_2 представляет собой второе собственное значение тензора $(\mathbf{S}^2 + \mathbf{\Omega}^2)$, где \mathbf{S} — тензор скоростей деформации, а $\mathbf{\Omega}$ — тензор завихренности. Поле скоростей для такой сложной вихревой структуры показано на рис. 4, а. В поперечном сечении канала в этом режиме отчетливо видны четыре вихря, которые на самом деле являются разными ветвями двух подковообразных вихрей, входящими в канал смешения миксера подобно двум подковам или спицам. Обращает на себя внимание тот факт, что с увеличением объемной концентрации наночастиц и, соответственно, с увеличением вязкости подковообразный вихрь в наножидкости заметно уменьшается по сравнению с подковообразным вихрем в потоке воды (рис. 3). При смешении двух однородных одинаковых по физическим характеристикам жидкостей эти вихри симметричны [13]. Естественно, вследствие разницы вязкостей, картина смешения здесь также не является симметричной.

На рис. 5 приведены изолинии концентрации наночастиц при числе Рейнольдса, равном 140 на расстояниях 300, 800, 1300 и 2200 мкм от входа в канал смешения. Из рисунков видно, что более вязкая и плотная наножидкость оттесняет воду от стенок канала, как бы обволакивая ее. С увеличением концентрации наночастиц и увеличением числа Рейнольдса этот эффект усиливается, что приводит к увеличению площади контакта перемешивающихся жидкостей, и, как следствие, увеличивается эффективность смешения.

При дальнейшем увеличении числа Рейнольдса наблюдается перестройка режима течения. Начиная со значения числа Рейнольдса примерно 145 (для чистых жидкостей), из-за появления неустойчивости Кельвина–Гельмгольца (Kelvin–Helmholtz) вследствие наличия сдвига между слоями жидкостей, а также развития неустойчивости Тейлора–Гёртлера (Taylor–Görtler) по причине поворота на 90° обоих потоков жидкостей, пара подковообразных вихрей разворачивается на угол $\sim 30^\circ$ к центральной продольной плоскости миксера. В результате такого

опрокидывания течения происходит постепенное затухание одной ветви подковообразного вихря и увеличение интенсивности другой (рис. 6). В итоге в канале смешения формируются два интенсивных вихря. Из-за того, что интенсивность вихрей в несимметричном режиме течения существенно возрастает, они существуют на всем протяжении канала смешения до самого выхода. Течение при этом все еще остается стационарным. Такое "опрокидывание" течения при достижении некоторого критического значения числа Рейнольдса имеет место и в однородных жидкостях [13, 16]. Изменение в структуре течения после его "опрокидывания" очень хорошо иллюстрирует рис. 4. В канале смешения вместо четырех (рис. 4, *a*) вихрей (до "опрокидывания") формируются два (рис. 4, *б*) вихря (после "опрокидывания").

На рис. 7 приведены изолинии концентрации наночастиц в режиме течения с двумя симметричными вихрями в канале смешения. Наличие закрутки потока в канале смешения приводит к образованию слоистой S-образной структуры из смешивающихся жидкостей (см. рис. 4, *б*). Поверхность контакта смешивающихся жидкостей в такой слоистой структуре очень развитая, что приводит к резкому увеличению эффективности смешения. При переходе течения от режима с двумя подковообразными вихрями к режиму течения с двумя одиночными вихрями эффективность смешения возрастает в несколько раз (рис. 8, *a*).

Анализ влияния концентрации наночастиц показал, что режим "опрокидывания" течения смещается в сторону бóльших чисел Рейнольдса при соответствующем увеличении объемной концентрации наночастиц. Это можно наблюдать, например, по поведению вихревой структуры течения на рис. 6. Видно, что при числе Рейнольдса, равном 173, для концентрации наночастиц 2.5% течение уже "опрокинулось", для концентрации наночастиц 5% наблюдается некоторое переходное положение, а для концентрации 10% в канале смешения продолжают существовать два подковообразных вихря. Еще более наглядно сдвиг режимов течения с увеличением концентрации наночастиц виден на рис. 8, *a*. Так, было установлено, что при концентрации 2.5% переход происходит при числе Рейнольдса порядка 150, для концентрации 5% — при ~173, а для 10% — при числе Рейнольдса порядка 280. Это объясняется увеличением вязкости наножидкости при увеличении в ней объемной концентрации наночастиц. Такое поведение соответствует результатам, полученным ранее в работе [16], в которой рассматривалось влияние вязкостей однородных жидкостей на эффективность смешения в T-образном микромиксере. Было показано, что с увеличением вязкости одной из жидкостей явление "опрокидывания" течения смещается в сторону бóльших

чисел Рейнольдса.

Результаты моделирования позволили установить зависимость критического числа Рейнольдса смены режимов течения от концентрации наночастиц. Эта зависимость показана на рис. 8, б. Здесь под критическим числом Рейнольдса будем понимать значение числа Рейнольдса, при котором происходит "опрокидывание" течения, т. е. переход от двух подковообразных вихрей в канале смешения к двум одиночным вихрям. С увеличением концентрации наночастиц критическое значение числа Рейнольдса монотонно увеличивается. Расчетная зависимость критического числа Рейнольдса от концентрации наночастиц хорошо описывается корреляцией вида $Re_{cr}(\varphi) = 145 + 0.25 \cdot \varphi + 1.25 \cdot \varphi^2$, где φ — объемная концентрация наночастиц в %.

С практической точки зрения обычно необходима информация о перепаде давления в миксере. Как уже было сказано выше, данные расчетов приводятся в зависимости от числа Рейнольдса, определенного по формуле (6) для воды. Из этой формулы видно, что число Рейнольдса зависит от вязкости и плотности среды, значения которых у наножидкости значительно выше, чем у воды. Таким образом, представляется целесообразным использование приведенного числа Рейнольдса

$Re_m = \frac{\rho_m U d_h}{\mu_m}$, где $\mu_m = 0.5(\mu_w + \mu_{nf})$ — среднеарифметическое значение вязкостей

воды и наножидкости, а $\rho_m = 0.5(\rho_w + \rho_{nf})$ — среднеарифметическое значение их

плотностей. Зависимость перепада давлений в канале смешения Т-образного микромиксера от полученного таким образом числа Рейнольдса приведена на рис. 9, а.

Анализируя данный график, можно увидеть, что перепад давлений увеличивается с увеличением концентрации наночастиц. Это обусловлено ростом вязкости и плотности

одной из смешиваемых жидкостей. Кривые зависимости падения давления от числа

Рейнольдса, представленные на рис. 9, а, качественно различны: первые две монотонно растут с увеличением числа Рейнольдса, тогда как последняя ($\varphi = 10\%$) имеет перегиб.

Его появление связано с ламинарно-турбулентным переходом, который в наножидкостях наблюдается при меньших числах Рейнольдса, чем в базовой жидкости,

и это различие тем больше, чем выше концентрация частиц [40]. Это ясно видно и из сопоставления зависимостей коэффициентов гидродинамического сопротивления

$\lambda = \frac{2d_h \Delta P}{\rho U^2 L}$ от числа Рейнольдса. Здесь L — длина измерительного участка (канала

смешения), а U — среднерасходная скорость в канале смешения, определенная выше.

Выразив среднюю скорость U через приведенное число Рейнольдса и подставив в

формулу для определения коэффициента гидродинамического сопротивления, получим зависимость последнего от приведенного числа Рейнольдса, которая для $\varphi = 10\%$ показана на рис. 9, б. Штриховой линией здесь представлена зависимость коэффициента гидродинамического сопротивления $\lambda = \text{Po} \text{Re}$, где Po — число Пуазейля (Poiseuille), которое в полностью развитом ламинарном режиме для прямых прямоугольных каналов равно $\text{Po}_{\text{fd}} = 96 \cdot \left(1 - \frac{1.3553}{\alpha} + \frac{1.9467}{\alpha^2} - \frac{1.7012}{\alpha^3} + \frac{0.9564}{\alpha^4} - \frac{0.2537}{\alpha^5} \right)$, α — отношение ширины к высоте канала. Однако в большинстве случаев микроканалы имеют недостаточную длину для того, чтобы ламинарное течение стало полностью развитым. В этом случае используется выражение для числа Пуазейля, включающего в себя как область с развивающимся потоком, так и область развитого течения:

$$\text{Po} = \left[\left(\frac{3.2}{(x^+)^{0.57}} \right)^2 + \text{Po}_{\text{fd}}^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \text{ где } x^+ = \frac{L}{\text{Re} \cdot d_h} \text{ — длина начального участка стабилизации.}$$

С использованием именно этой формулы получено значение гидродинамического сопротивления, приведенное штриховой линией на рис. 9, б.

Исследование влияния размеров наночастиц. Поскольку вязкость наножидкости помимо концентрации частиц существенно зависит и от размера частиц (табл. 1), то необходимо проанализировать влияние размера частиц на режимы течения и смешения. Качественно ожидаемый результат вполне предсказуем, так как вязкость наножидкости растет с уменьшением размера частиц, то снижение размера частиц будет приводить к тому же эффекту, что и увеличение их концентрации. Однако существует и еще один важный аспект, а именно, при уменьшении размера наночастиц существенно увеличивается коэффициент диффузии Эйнштейна–Смолуховского (Einstein–Smoluchowski) (5). При уменьшении размера частиц со 150 нм до 50 нм коэффициент диффузии увеличивается в 2.7 раза.

Для изучения влияния размера наночастиц на режимы течения и перемешивание жидкостей в микромиксере была проведена серия расчетов, в которых рассматривалось смешение воды с двумя разными наножидкостями. Объемная концентрация частиц в них была одинакова и равнялась $\varphi = 10\%$, а их размер варьировался от 50 до 150 нм. Анализ результатов моделирования показал, что в целом для наножидкости с меньшим размером наночастиц наблюдаются те же режимы, что и описанные выше. Основное же отличие заключается в существенном различии коэффициентов диффузии частиц в рассматриваемых наножидкостях. Из-за этого толщина слоя смешения у наножидкости

с меньшим размером наночастиц фактически в разы больше, чем для наножидкости с более крупными частицами. Это хорошо видно на рис. 10.

Еще одной существенной особенностью течения наножидкости со средним размером наночастиц 50 нм является то, что режим с двумя вихрями наступает при больших значениях чисел Рейнольдса. Это наиболее наглядно видно по поведению эффективности смешения, показанной на рис. 11. Как уже было отмечено, переход к двухвихревой структуре течения сопровождается резким ростом эффективности смешения. Из рис. 11 видно, что для более мелких частиц этот переход наступает при более высоких числах Рейнольдса. Этот сдвиг обусловлен повышением вязкости наножидкости при уменьшении размера частиц. Результаты моделирования позволили установить, что с увеличением среднего размера наночастиц критическое значение числа Рейнольдса монотонно уменьшается. На рис. 12 приведены зависимости перепада давления, а также коэффициента гидродинамического сопротивления от приведенного числа Рейнольдса. Показано, что с уменьшением размера наночастиц перепад давления при прокачивании наножидкости возрастает, что обусловлено возрастанием вязкости при уменьшении размера наночастиц.

Заключение. В данной работе впервые изучено смешение жидкости и наножидкости в Т-образном микромиксере. Как показано в работе [5], при решении задач об изотермическом течении наножидкостей практически всегда можно использовать обычные одножидкостные уравнения гидродинамики с эффективными коэффициентами переноса. Связано это с тем, что наночастица в метрике несущей жидкости является материальной точкой. Поэтому макроскопические течения наножидкостей и их микротечения в каналах с характерными размерами порядка сотен микрометров можно моделировать, используя уравнения переноса (1), но с эффективным коэффициентом вязкости. Важно подчеркнуть, что вязкость наножидкости не описывается классическими соотношениями, и для ее описания нельзя использовать известные формулы Эйнштейна, Бетчелора, Бринкмана (Brinkman) и т. п. Поэтому для моделирования течений наножидкости необходимо использовать реальные экспериментальные данные или построенные по ним корреляции. Именно такой подход был использован в настоящей работе.

Второе важное обстоятельство связано с диффузией наночастиц и силой, действующей на нее со стороны жидкости. Как показано в работах [30, 40, 41], эта сила для малых наночастиц является нестационарной и коэффициент диффузии не описывается формулой (5). Однако, начиная с размеров частиц больше 10–15 нм

формула (5) вполне применима для описания диффузии наночастиц.

Полученные данные моделирования показали, что при смешении обычной жидкости и наножидкости наблюдаются качественно такие же режимы течения, что и при смешении двух обычных жидкостей, а именно: стационарное безвихревое; стационарное вихревое течение с двумя подковообразными вихрями; скачкообразное изменение структуры течения (опрокидывание); стационарное течение с двумя вихрями в канале смешения. Было показано, что при переходе течения от режима с двумя подковообразными вихрями к режиму течения с двумя одиночными вихрями эффективность смешения возрастает в несколько раз. Однако переход от одного режима к другому предсказать не так просто, поскольку в наножидкостях существенно возрастает вязкость и выше плотность. Помимо этого, вязкость зависит от размера частиц, и с уменьшением размера она растет. С другой стороны, коэффициент диффузии сложным образом зависит от размера частиц — согласно (5), он обратно пропорционален диаметру частиц и коэффициенту вязкости, который в свою очередь зависит от размера частиц. В результате анализа расчетов установлена зависимость критического значения числа Рейнольдса смены режимов течения от концентрации наночастиц. Было показано, что с увеличением концентрации наночастиц критическое значение числа Рейнольдса увеличивается. Определена зависимость критического значения числа Рейнольдса от размера наночастиц. Было установлено, что с увеличением среднего размера наночастиц критическое значение числа Рейнольдса уменьшается. Таким образом, существует возможность управления режимами течения и перемешивания в микромиксере с помощью варьирования концентрации и размера наночастиц.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства Образования и Науки Российской Федерации Сибирскому федеральному университету в 2017 году (проект № 16.8368.2017/БЧ), а также при частичной финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации (проект РФ НШ-8788.2016.1) и Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности в рамках научного проекта №16-41-243034.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

a , b — первый и второй коэффициенты в модели вязкости наножидкости;

D — коэффициент диффузии, $\text{м}^2/\text{с}$;

d — диаметр, м ;

f — массовая доля компонентов смеси;

H — высота канала, м ;

k_B — постоянная Больцмана;

L — длина канала смешения, м ;

M — эффективность смешения, %;

P — давление, Па ;

Ro — число Пуазейля;

Q — расход жидкости, $\text{кг}/\text{с}$;

Re — число Рейнольдса;

S — тензор скоростей деформации, $1/\text{с}$;

T — тензор вязких напряжений, Па ;

T — температура, К ;

t — время, с ;

U — среднерасходная скорость в канале смешения, $\text{м}/\text{с}$;

u — компонента вектора скоростей, $\text{м}/\text{с}$;

V — объем жидкости, м^3 ;

\mathbf{v} — вектор скорости, $\text{м}/\text{с}$;

x^+ — длина начального участка стабилизации, м ;

α — отношение ширины к высоте канала;

λ — коэффициент гидродинамического сопротивления;

λ_2 — второе собственное число суммы квадратов тензоров скоростей деформации и завихренности, с^{-2} ;

μ — вязкость смеси, $\text{Па}\cdot\text{с}$;

ρ — плотность, $\text{кг}/\text{м}^3$;

σ — среднеквадратичное отклонение концентрации компонента от его среднего значения;

φ — объемная концентрация наночастиц, %;

Ω — тензор завихренности, 1/с.

Индексы:

cr — критический;

fd — полностью развитое;

h — гидравлический или эквивалентный;

i — номер компонента;

in — значение на входе в канал;

nf — наножидкость;

m — приведенный;

p — наночастица;

w — вода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Labeling P.** *Introduction to Microfluidics*, Oxford: Oxford University Press, 2005.
2. **Karnidakis G., Beskok A., Aluru N.** Microflows and nanoflows. *Interdisciplinary Applied Math. Springer Science+Business Media Inc.* 2005. Vol. 29.
3. **Karnik R.** Microfluidic mixing. *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics* / Ed. D. Li USA: Springer, 2008. Pp. 1177–1186.
4. **Рудяк В. Я., Минаков А. В.** *Современные проблемы микро- и нанофлюидики.* Новосибирск: Наука, 2016.
5. **Raj K., Moskowicz R.** Commercial applications of ferrofluids. *J. Magnetism Magnetic Materials.* 1990. Vol. 85. Pp. 233–245.
6. **Shinkai M., Ito A.** Functional magnetic particles for medical application. *J. Bioscience and Bioeng.* 2004. Vol. 94. Pp. 606–613.
7. **Le T. N., Suh Y. K., Kang S.** Efficient mixing in microchannel by using magnetic nanoparticles. *Int. J. Math. Models and Methods in Applied Sciences.* 2009. Vol. 3, Issue 1. Pp. 58–67.
8. **Akbarinia A., Abdolzadeh M., Laur R.** Critical investigation of heat transfer enhancement using nanofluids in microchannels with slip and non-slip flow regimes. *App. Therm. Eng.* 2010. Vol. 4, Issue 31. Pp. 556–588.
9. **Sheikhzadeh G. A., Ebrahim Q. M., Hajjaligol N., Fattahi A.** Laminar mixed convection of Al_2O_3 -water nanofluid in a three-dimensional microchannel. *J. Nanostructures.* 2012. Vol. 2. Pp. 61–68.
10. **Kalteha M., Abbassi A., Saffar-Avval M., Frijns A., Darhuber A., Harting J.** Experimental and numerical investigation of nanofluid forced convection inside a wide microchannel heat sink. *App. Therm. Eng.* 2012. Vol. 36. Pp. 260–268.
11. **Kumar N., Singh P., Redhewal A. K., Bhandari P.** A review of nanofluids applications for heat transfer in microchannels. *Procedia Eng.* 2015. Vol. 127. Pp. 1197–1202.
12. **Рудяк В. Я., Минаков А. В., Гаврилов А. А., Дектерев А. А.** Моделирование течений в микромиксерах. *Теплофизика и аэромеханика.* 2010. Т. 17, № 4. С. 601–612.
13. **Минаков А. В., Рудяк В. Я., Гаврилов А. А., Дектерев А. А.** Смешение в микромиксере Т-типа при умеренных числах Рейнольдса. *Теплофизика и аэромеханика.* 2012. Т. 19, № 5. С. 577–587.

14. **Minakov A., Rudyak V., Dekterev A., Gavrilov A.** Investigation of slip boundary conditions in the T-shaped microchannel. *Int. J. of Heat and Fluid Flow*. 2013. Vol. 43. Pp. 161–169.
15. **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.
16. **Лобасов А. С., Минаков А. В., Рудяк В. Я.** Влияние вязкости на режимы течения в микромиксере Т-типа. *Известия РАН. Механика жидкости и газа*. 2016. № 3. С. 94–103.
17. **Galletti C., Roudgar M., Brunazzi E., Mauri R.** Effect of inlet conditions on the engulfment pattern in a T-shaped micro-mixer. *Chem. Eng. J.* 2012. Vol. 185. Pp. 300–313.
18. **Fani A., Camarri S., Salvetti M.V.** Investigation of the steady engulfment regime in a three-dimensional T-mixer. *Phys. Fluids*. 2013. Vol. 25. 064102.
19. **Fani A., Camarri S., Salvetti M.V.** Unsteady asymmetric engulfment regime in a T-mixer. *Physics of Fluids*. 2014. Vol. 26. 074–101.
20. **Andreussi T., Galletti C., Mauri R., Camarri S., Salvetti M.V.** Flow regimes in T-shaped micro-mixers. *Comp. and Chem. Eng.* 2015. Vol. 76. Pp. 150–159.
21. **Gavrilov A. A., Minakov A. V., Dekterev A. A., Rudyak V. Ya.** A numerical algorithm for modeling laminar flows in an annular channel with eccentricity. *J. of App. and Ind. Math.* 2011. Vol. 5, No. 4. Pp. 559–568.
22. **Патанкар С.** Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. Москва: Энергоатомиздат, 1984.
23. **Быстров Ю. А., Исаев С. А., Кудрявцев Н. А., Леонтьев А. И.** Численное моделирование вихревой интенсификации теплообмена в пакетах труб. Санкт-Петербург: Судостроение, 2005.
24. **Ferziger J. H., Peric M.** *Computational methods for fluid dynamics*. Berlin: Springer Science+Business Media Inc., 2002.
25. **Leonard B. P.** A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comp. Math. Appl. Mech. Eng.* 1979. Vol. 19. Pp.59–98.
26. **Рхи С. М., Чоу У. Л.** Численный расчет турбулентного обтекания профиля с отрывом у задней кромки. Пер. с англ. *Аэрокосмическая техника*. 1984. Т. 2, № 7. С. 33–43.
27. **Trottenberg U., Oosterlee C. W., Schüller A.** *Multigrid*. USA: Academic Press, 2001.

28. **Chen H., Ding Y., He Y., Tan C.** Rheological behavior of ethylene glycol based titania nanofluids. *Chemical Physics Letters*. 2007. Vol. 444. Pp. 333–337.
29. **Garg J., Poudel B., Chiesa M., Gordon J. B., Ma J. J., Wang J. B., Ren Z. F., Kang Y. T., Ohtani H., Nanda J., McKinley G. H., Chen G.** Enhanced thermal conductivity and viscosity of copper nanoparticles in ethylene glycol nanofluid. *J. Applied Phys.* 2008. Vol. 103. Pp. 074301–074308.
30. **Rudyak V. Ya., Belkin A. A., Tomilina E. A., Egorov V. V.** Nanoparticle friction force and effective viscosity of nanofluids. *Defect and Diffusion Forum*. 2008. Vols. 273–276. Pp. 566–571.
31. **Timofeeva E. V., Smith D. S., Yu W., France D. M., Singh D., Routbort J. L.** Particle size and interfacial effects on thermo-physical and heat transfer characteristics of water-based α -SiC nanofluids. *Nanotechnology*. 2010. Vol. 21, No. 21. 215703.
32. **Рудяк В. Я.** Современное состояние исследований вязкости наножидкостей. *Вестник НГУ. Серия: Физика*. 2015. Т. 10, вып. 1. С. 5–22.
33. **Рудяк В. Я., Димов С. В., Кузнецов В. В.** О зависимости коэффициента вязкости наножидкости от размера частиц и температуры. *Письма в ЖТФ*. 2013. Т. 39, вып. 17. С. 53–60.
34. **Рудяк В. Я., Димов С. В., Кузнецов В. В., Бардаханов С. П.** Измерение коэффициента вязкости наножидкости на основе этиленгликоля с частицами двуокиси кремния. *Доклады Академии наук*. 2013. Т. 450, № 1. С. 43–46.
35. **Рудяк В. Я., Краснолуцкий С. Л.** Моделирование коэффициента вязкости наножидкости методом молекулярной динамики. *ЖТФ*. 2015. Т. 85, вып. 6. С. 9–16.
36. **Rudyak V. Ya., Krasnolutski S. L.** Dependence of the viscosity of nanofluids on nanoparticle size and material. *Phys. Lett. A*. 2014. Vol. 378. Pp. 1845–1849.
37. **Рудяк В. Я., Минаков А. В., Сметанина М. С., Пряжников М. И.** Экспериментальные данные о зависимости вязкости наножидкостей на основе воды и этиленгликоля от размера и материала частиц. *Доклады Академии наук*. 2016. Т. 467, вып. 3. С. 289–291.
38. **Рудяк В. Я., Минаков А. В., Пряжников М. И.** Теплофизические свойства наножидкостей и критерии подобия. *Письма в ЖТФ*. 2016. Т. 42, вып. 24. С. 9–16.
39. **Pryazhnikov M., Minakov A., Rudyak V., Guzei D.** Thermal conductivity measurements of nanofluids. *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2017. Vol. 104. Pp. 1275–1282.

40. Рудяк В. Я., Минаков А. В., Гузей Д. В., Жигарев В. А., Пряжников М. И. О ламинарно-турбулентном переходе в течениях наножидкостей. *Теплофизика и аэромеханика*. 2016. Т. 23, № 5. С. 807–810.
41. Рудяк В. Я., Белкин А. А., Томилина Е. А. Сила, действующая на наночастицу в жидкости. *Письма в ЖТФ*. 2008. Т. 34, № 2. С. 69–74.

Таблица 1. Коэффициенты вязкости и плотность смешивающихся жидкостей

φ, %	0	2.5	5	10
$\mu \cdot 10^{-6}$, Па·с, $d_p = 150$ нм	1000	1195	1480	2320
$\mu \cdot 10^{-6}$, Па·с, $d_p = 50$ нм	1000	1315	1630	2555
ρ , кг/м ³	1000	1073	1146	1292

Рис. 1. Геометрия задачи, размеры даны в мкм

Рис. 2. Изолинии концентрации наночастиц в поперечных сечениях канала при $Re = 50$:
 a — $\varphi = 2.5\%$; b — 5 ; c — 10

Рис. 3. Изоповерхности λ_2 при $Re = 140$: a — $\varphi = 2.5\%$; b — 5 ; c — 10

Рис. 4. Изолинии концентрации наночастиц и поле скоростей в поперечном сечении миксера на расстоянии 300 мкм от входа для $\varphi = 2.5\%$: a — $Re = 140$; b — 250

Рис. 5. - Изолинии концентрации наночастиц в поперечных сечениях канала при $Re = 140$: a — $\varphi = 2.5\%$; b — 5 ; c — 10 .

Рис. 6. Изоповерхности λ_2 при $Re = 173$: a — $\varphi = 2.5\%$; b — 5 ; c — 10

Рис. 7. Изолинии концентрации наночастиц в поперечных сечениях канала при $\varphi = 2.5\%$ (a); $\varphi = 5\%$ (b); $\varphi = 10\%$ (c)

Рис. 8. Зависимости: (a) эффективности смешения от числа Рейнольдса при $d_p = 150$ нм — $\varphi = 2.5\%$ (1); $5(2)$; $10(3)$; (b) критического числа Рейнольдса от объемной концентрации наночастиц — расчет (1); корреляция (2)

Рис. 9. Зависимости от приведенного числа Рейнольдса: (a) перепада давлений при $\varphi = 2.5\%$ (1); $5(2)$; $10(3)$; (b) коэффициента гидродинамического сопротивления

Рис. 10. Изолинии концентраций наночастиц в поперечном сечении канала при $\varphi = 10\%$, $Re = 100$: $d_p = 50$ нм (a); 150 (b)

Рис. 11. Зависимость эффективности смешения от числа Рейнольдса при $\varphi = 10\%$: 1 — $d_p = 150$ нм; 2 — 50

Рис. 12. Зависимости от приведенного числа Рейнольдса: (a) перепада давлений; (b) коэффициента гидродинамического сопротивления при $\varphi = 10\%$ — $d_p = 150$ нм (1); $50(2)$

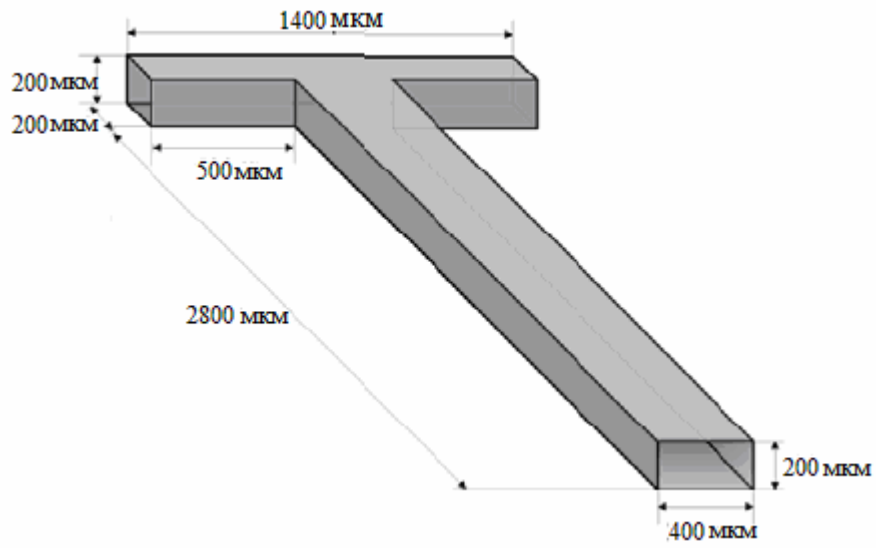


Рисунок 1

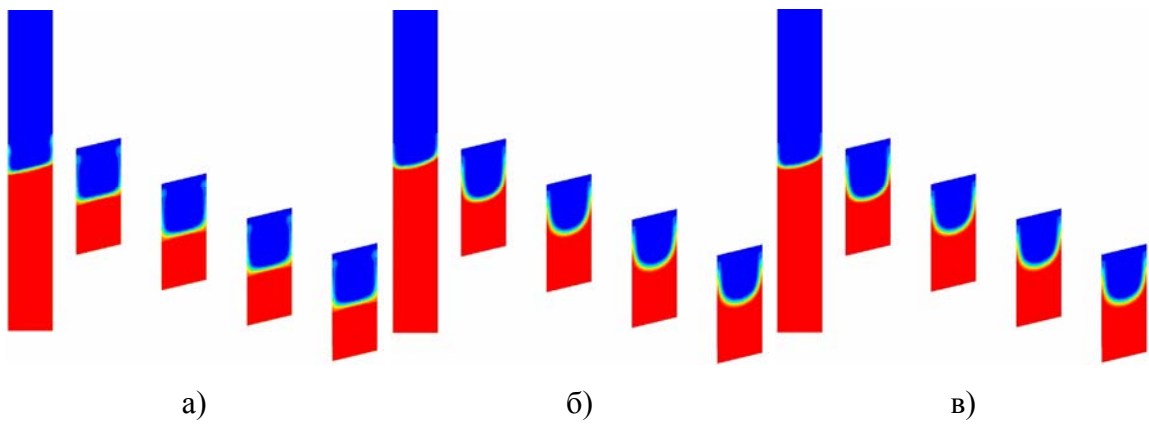


Рисунок 2

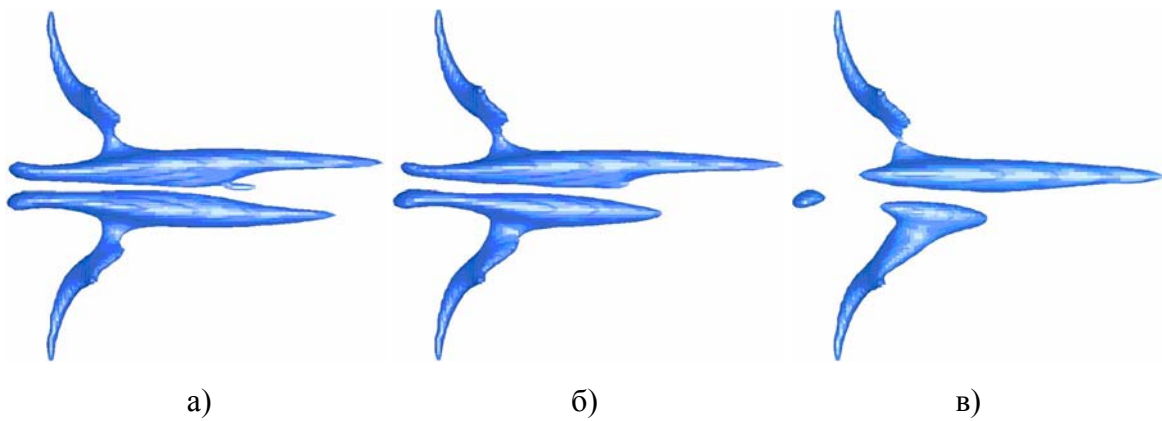
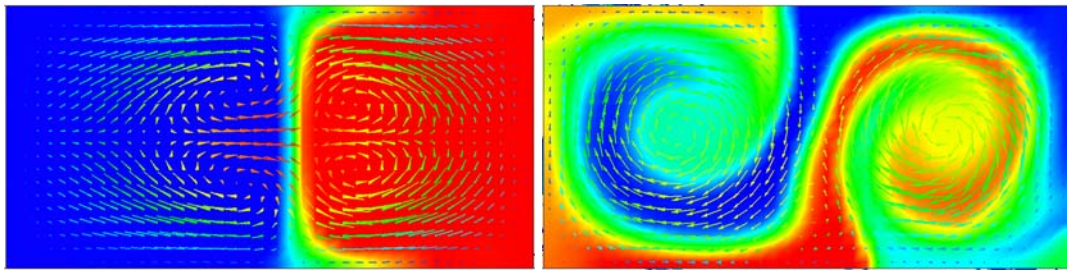


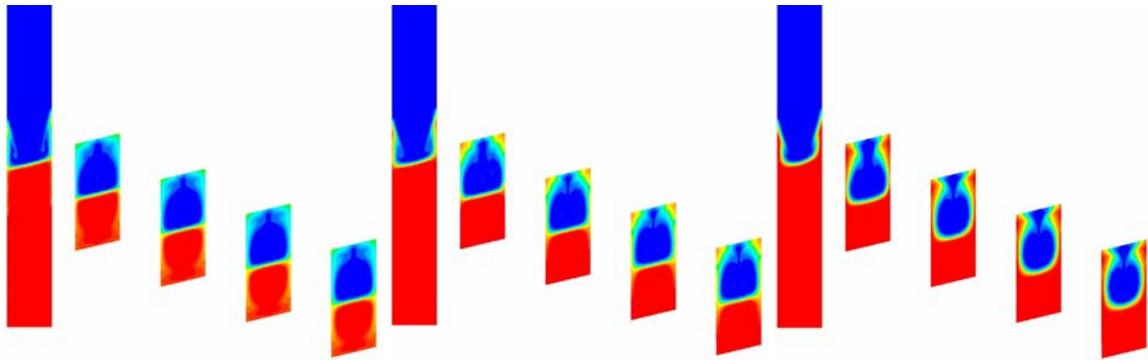
Рисунок 3



а)

б)

Рисунок 4

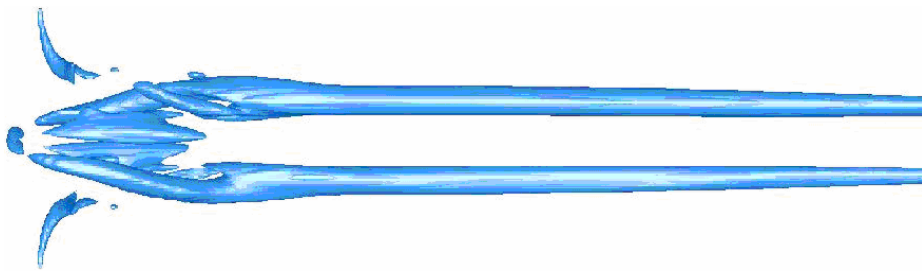


а)

б)

в)

Рисунок 5



а)



б)

в)

Рисунок 6

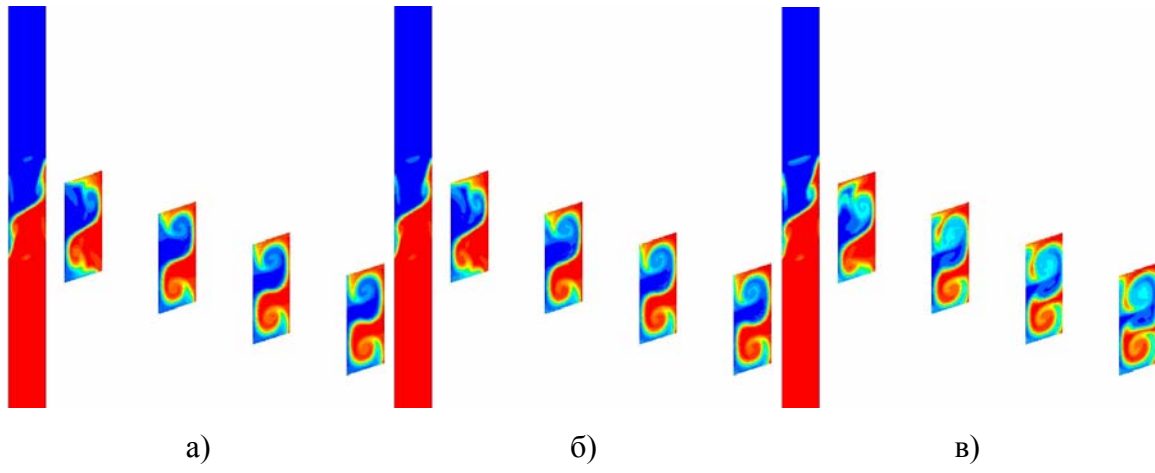


Рисунок 7

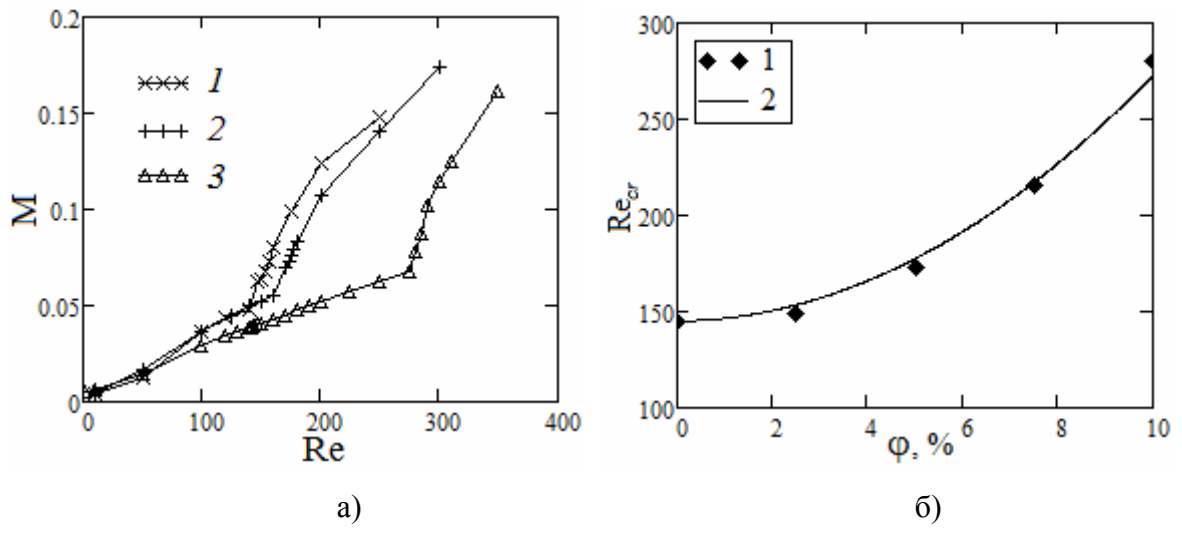


Рисунок 8

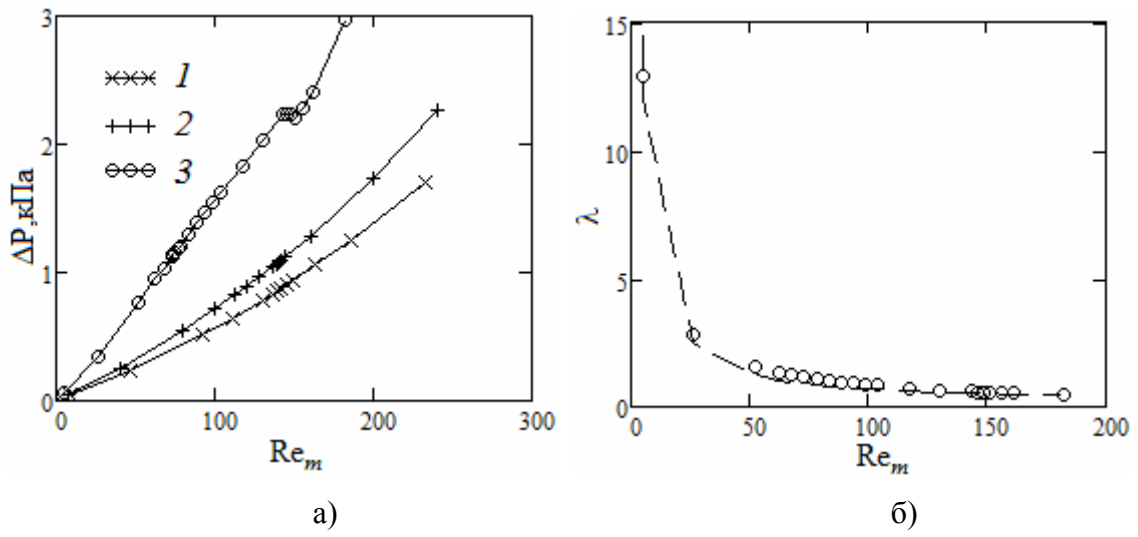


Рисунок 9

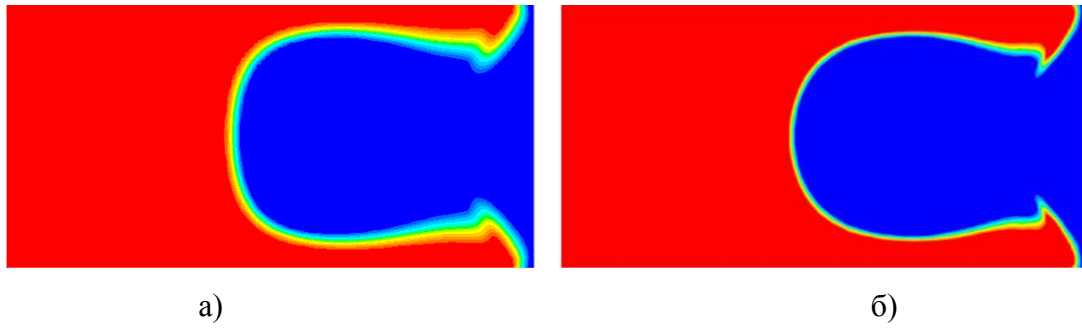


Рисунок 10

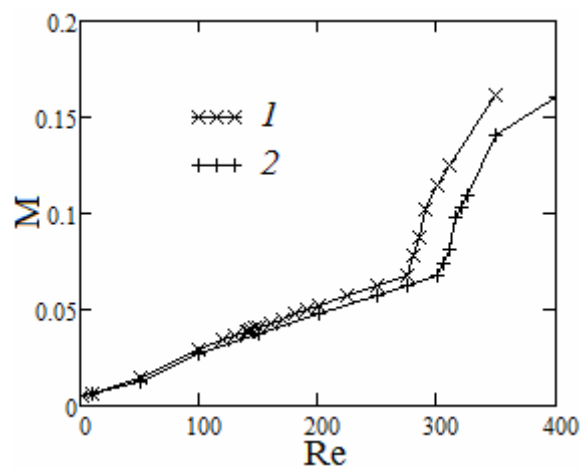
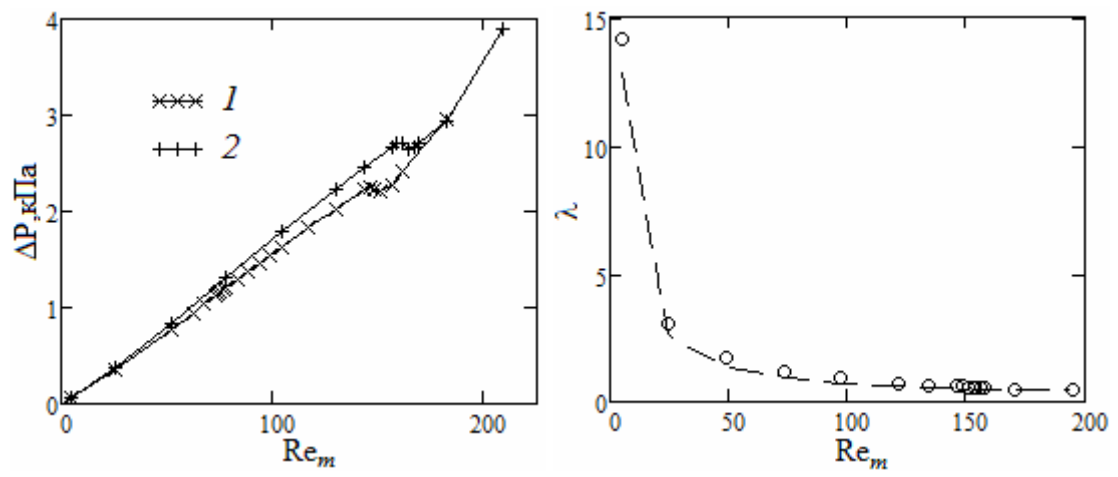


Рисунок 11



a)

б)

Рисунок 12