

Численное моделирование химического реагирования в микроканалах при высоких числах Рейнольдса

А.В. МИНАКОВ

Сибирский федеральный университет, Красноярск
e-mail: tov-andrey@yandex.ru

А.А. ГАВРИЛОВ

Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск

А.А. ДЕКТЕРЕВ

Сибирский федеральный университет, Красноярск

В.Я. РУДЯК

Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск

Бурное развитие изучения микротечений жидкости и газа, наблюдающееся в последнее двадцатилетие, мотивировано появлением большого числа микроэлектромеханических систем (МЭМС), а позднее и нанотехнологий, в которых микротечения являются важным элементом. Одним из важнейших процессов использующихся в микрофлюидных устройствах является химическое реагирование микроскопических количеств жидкости, которое имеет очень важное практическое значение во многих приложениях: химические микрореакторы, анализаторы химических и биологических веществ, системы доставки лекарств и многие другие. Поскольку характерное значение диффузионного числа Пекле для микроканалов обычно превышает 1000, то скорость перемешивания веществ в них определяется в основном молекулярной диффузией, которая в отсутствие турбулентности является очень медленным процессом.

Для повышения эффективности смешения и как следствие химического превращения жидкостей в микроканалах применяют специальные устройства – микромиксеры. По принципу действия выделяют пассивные и активные миксеры. Применение пассивных и активных миксеров для улучшения смешения, а также примеры их оптимизации показаны в работах [1-2]. Благодаря применению численного моделирования и ряда новых способов управления потоком удалось добиться существенного увеличения эффективности смешения в наиболее распространенных на сегодняшний день Y, T и S-микромиксерах. При этом число Рейнольдса варьировалось в типичном для микроканалов диапазоне от 0,01 до 10.

В представленной работе были исследованы режимы течения и химического реагирования жидкостей в T - образном микроканале при более высоких числах Рейнольдса – до 1000. Такие высокие значения чисел Рейнольдса не являются типичными для микроканалов, тем не менее, в настоящее время появилось множество приложений в которых такие режимы достигаются см. например [3-5]. Кроме того, как показывают результаты данной работы, при относительно высоких значениях числа Рейнольдса в микроканалах происходит ряд новых интересных явлений требующих изучения, как с фундаментальной точки зрения, так и для практических целей.

1. Постановка задачи

В работе рассматриваются несжимаемые течения многокомпонентных ньютоновских жидкостей, для описания которых используется гидродинамический подход, основанный на решении уравнений Навье-Стокса. В настоящее время в многочисленных экспериментах установлено, что для жидкостей такое описание хорошо работает вплоть до размеров каналов равных 1мкм. В качестве граничных условий на стенках каналов для вектора скорости используются условия прилипания. Применимость такого типа граничных условий для каналов размером порядка 100мкм показана в работах [1-2].

Для решения описанной выше системы уравнений использовался программный комплекс для задач вычислительной гидродинамики **σFlow**. Применимость данной программы для описания микротечений требовала специального тестирования. Примеры такого тестирования приведены в работах [1-2].

Численное моделирование течения и смешения было проведено для микроканала Т-типа. Ширина узкой части канала 100 мкм, ширина широкой части 200 мкм, толщина канала 100 мкм, длина канала смешения 1500 мкм. На твердых стенках заданы условия прилипания. Задача рассматривается в пространственной и в общем случае в нестационарной постановке. Через левый вход канала окислитель с расходом Q . Через правый вход канала подается реагент с тем же самым расходом. Плотность обеих жидкостей равна 1000 кг/м^3 , вязкость $0,001 \text{ Па}\cdot\text{с}$, коэффициент диффузии краски в воде $D = 2,63 \times 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$, константа скорости реакции $k = 10^6 \text{ м}^3/(\text{моль}\cdot\text{с})$. Химическая реакция протекает в одну стадию с образованием одного продукта реакции по кинетическому механизму.

В качестве граничных условий на входе в каналы задавался установившийся профиль скорости. На выходе из канала смешения задавались условия Неймана, означающие равенство нулю нормальной к поверхности выхода производной от всех скалярных величин.

Для расчета использовалась двухблочная сетка, состоящая из 9 млн. узлов (140 узлов по ширине канала смешения, 70 по высоте, 1000 по длине).

Моделирование было проведено для различных значений числа Рейнольдса, которое определялось следующим образом:

$Re = \frac{\rho U d_h}{\mu}$, где $U = Q/(2\rho H^2)$ – среднерасходная скорость в канале смешения, $H = 100\text{мкм}$ – высота канала, $d_h = 133\text{мкм}$ – гидравлический диаметр.

Для количественной характеристики эффективности смешения был использован следующий параметр M .

$M = 1 - \sqrt{\frac{\sigma}{\sigma_0}}$ – (эффективность смешения), где $\sigma = \frac{1}{V} \cdot \int_V (f - \bar{f})^2 dV$ – среднеквадратичное по объему миксера V отклонение концентрации компонента f от его среднего значения \bar{f} , $\sigma_0 = \bar{f}(1 - \bar{f})$ – максимальное среднеквадратичное отклонение.

Для количественной характеристики степени химического реагирования использовалось отношение расхода продукта реакции Q_c к расходу всей смеси Q на выходе из реактора (массовая доля).

2. Результаты моделирования

В расчетах варьировалось значение числа Рейнольдса в диапазоне от 1 до 1000. В качестве интегральных количественных параметров рассчитывались перепад давления

между одним из входов и выходом из миксера, а также эффективность смешения и выход продукта реакции.

Структуру течения в микромиреакторе можно охарактеризовать следующим образом. Для значений числа Рейнольдса порядка 1 наблюдается ползущее безвихревое течение с достаточно слабым перемешиванием реагентов (см. рис.3а) и как следствие низким выходом продуктов реакции (см. рис.3а). Далее с увеличением числа Рейнольдса в миксере формируется пара симметричных подковообразных вихрей, которые образуются у левой торцевой стенки миксера и распространяются в канал смешения. Подковообразные вихри появляются из-за развития вторичных течений, обусловленных действием центробежной силы, связанной с поворотом потока. Такие вихри принято называть вихрями Дина. Каждая вихревая подкова, находясь в пределах одной жидкости, не пересекает границы раздела смешивающихся сред, поэтому граница раздела сред остается практически плоской. И поскольку диффузионное число Пекле с ростом числа Рейнольдса возрастает, то эффективность смешения при этом уменьшается (см. рис.3а). Для значения числа Рейнольдса 120 эффективность смешения понижается до очень малой величины – $M=0.8\%$. Как видно выход продуктов реакции также значительно уменьшается.

Если продолжать увеличивать число Рейнольдса, то можно наблюдать очень интересную перестройку режима течения. Начиная со значения числа Рейнольдса примерно 150, из-за развития неустойчивости Кельвина – Гельмгольца пара подковообразных вихрей скачкообразно разворачивается на угол 30 градусов к центральной продольной плоскости миксера. Неустойчивость Кельвина – Гельмгольца приводит к формированию диагонального сдвигового течения в поперечном сечении канала. Центром симметрии течения становится центральная продольная линия, проходящая по каналу смешения. Из-за такого “опрокидывания” течения происходит постепенное затухание одной ветви подковообразного вихря, и увеличение интенсивности другой ветви. В итоге уже на расстоянии порядка 400 мкм от входа в канал смешения в поперечном сечении мы имеем вместо четырех вихрей, как это было в случае симметричного режима течения ($Re < 150$), два интенсивных вихря с одинаковым направлением завихренности. Течение имеет S-образную вихревую структуру. Удивительно, что при этом оно остается стационарным! Наличие закрутки потока в канале смешения приводит к образованию слоистой структуры из смешивающихся жидкостей (см. рис.1). Поверхность контакта смешивающихся жидкостей в такой слоистой структуре очень развитая, что приводит к резкому увеличению эффективности смешения ($M=19,8\%$)! Благодаря очень хорошему перемешиванию компонентов реакции, выход продукта реакции также значительно возрастает. Это обстоятельство дает возможность использовать данный режим течения для крайне эффективного перемешивания жидкостей и повышения скорости химического реагирования.

На рисунках 1-2 приведено качественное сопоставление результатов расчета данного режима течения и реагирования для $Re=186$ с экспериментом [4-5]. Эксперимент выполнен для аналогичного по форме и размерам микроканала при помощи лазерно-индуцированной флюоресценции μLIF . Верхние рисунки – распределение концентрации смешивающихся компонент в поперечном сечении на входе в канал смешения, средние – на расстоянии 1000 мкм от входа и нижние на выходе из миксера.

Не претерпевая существенных изменений, описанная выше вихревая структура течения в стационарном состоянии существует в диапазоне чисел Рейнольдса от 140 до 240. Начиная со значения числа Рейнольдса примерно равного 240, течение переста-

ет быть стационарным. В диапазоне ($240 < Re < 400$) течение можно рассматривать как периодическое. При переходе к нестационарному течению эффективность смешения и доля продукта реакции увеличиваются (см. рис.3).

Начиная со значения числа Рейнольдса порядка 450, строгая периодичность колебаний потока теряется. Течение становится сначала квазипериодическим ($450 < Re < 600$), а затем полностью хаотическим ($Re > 600$). При переходе к турбулентности S-образная вихревая структура, которая образовалась в канале смешения при $Re > 150$ и существовала в нестационарном режиме, разрушается. Течение распадается на множество достаточно крупных вихрей. Из-за этого уменьшается площадь контакта смешивающихся жидкостей. И вследствие этого при переходе к турбулентности смешение ухудшается ($M=26\%$ для $Re=600$)! Это отражается на выходе продукта реакции (рис.3б), который снижается. Естественно, что при дальнейшем увеличении числа Рейнольдса появляются множество мелкомасштабных вихрей, которые очень хорошо перемешивают течение. И эффективность смешения в развитом турбулентном течений будет намного превышать ламинарное значение.

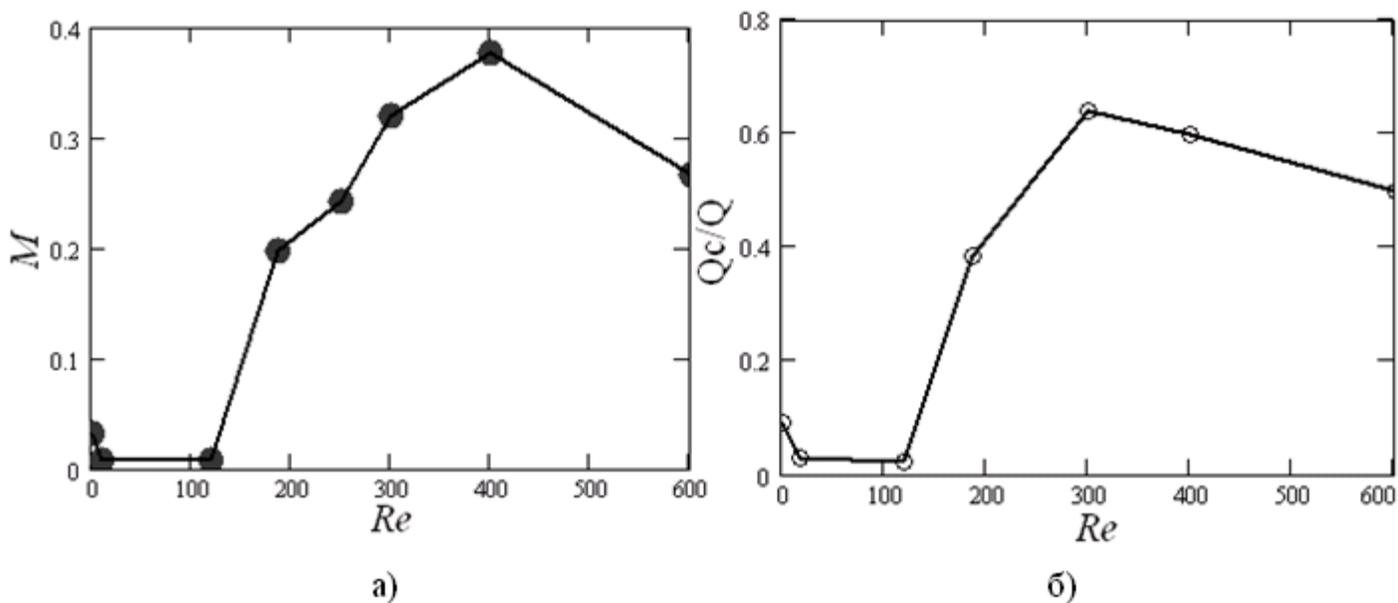


Рис. 3. Зависимость эффективности смешения (а) и массовой доли продукта реакции на выходе из миксера (б) от числа Рейнольдса.

Список литературы

- [1] MINAKOV A.V., RUDYAK V.YA., GAVRILOV A.A., DEKTEREV A.A. On Optimization of Mixing Process of Liquids in Microchannels // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. 3(2) (2010) 146–156.
- [2] Рудяк В.Я., Минаков А.В., Гаврилов А.А., Дектерев А.А. Моделирование течений в микромиксерах // Теплофизика и аэромеханика. 4(17) (2010) 601–612.
- [3] MANSUR E.A., MINGXING YE, YUNDONG W., YOUYUAN D. A State-of-the-Art Review of Mixing in Microfluidic Mixers // Chinese Journal of Chemical Engineering 16(4) (2008) 503–516.

- [4] MARKO HOFFMANN, MICHAEL SCHLUTER, NORBERT RUBIGER Experimental investigation of liquid–liquid mixing in T-shaped micro-mixers using μ -LIF and μ -PIV //Chemical Engineering Science 61 (2006) 2968–2976.
- [5] CARSTEN STEMICH Theoretische und numerische Untersuchung des Struomungsmischens in einem T-formigen Mikromischer //Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades Doktor der Naturwissenschaften. Universitat Paderborn. (2006).