

УДК 532.6; 519.6

## Моделирование течений в микромиксерах\*

В.Я. Рудяк<sup>1,2</sup>, А.В. Минаков<sup>2,3</sup>, А.А. Гаврилов<sup>2</sup>, А.А. Дектерев<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин)

<sup>2</sup>Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

<sup>3</sup>Сибирский федеральный университет, Красноярск

E-mail: valery.rudyak@mail.ru

Предложен метод моделирования течений жидкости в микроканалах. Метод тестирован на известных экспериментальных данных по изучению течений в микроканалах с помощью микро-PIV. Изучены режимы течения в микромиксерах  $Y$ - и  $T$  типа. Рассмотрены пассивные и активные миксеры. Проанализирована зависимость эффективности смешения от чисел Рейнольдса и Пекле, возможность использования гидрофобных и ультрагидрофобных покрытий. В качестве активного метода смешения предложен  $T$ -миксер, в котором расход в одном из входных каналов изменялся по гармоническому закону. Установлена зависимость эффективности смешения от частоты изменения расхода и его амплитуды.

**Ключевые слова:** пассивные и активные микромиксеры, ламинарные течения, микроканалы, гидродинамическое моделирование, эффективность смешения.

### ВВЕДЕНИЕ

Бурное изучение микротечений жидкости и газа, наблюдавшееся в последнее десятилетие, мотивировано появлением большого числа микроэлектромеханических систем (МЭМС), а позднее и нанотехнологий, в которых микротечения являются важным элементом. Эта тематика столь актуальна, что уже появились специализированные монографии (см., например, [1, 2]) и проводятся конференции [3]. Необходимость применения микротечений возникает при смешивании различных жидкостей. В макроскопических течениях перемешивание, как правило, происходит в турбулентном режиме. Однако микротечения обычно являются ламинарными и смешение их в стандартных условиях связано лишь с процессами молекулярной диффузии. Из-за чрезвычайно низких значений коэффициента молекулярной диффузии  $D$  ( $D \sim 10^{-9} \div 10^{-11}$  м<sup>2</sup>/с) такой канал смешения потоков жидкости оказывается чрезвычайно неэффективным. Чтобы повысить скорость

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 10-01-00074) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг.» (госконтракт П230).

смешения, необходимо использовать специальные устройства: микромиксеры. Эти устройства поэтому являются одними из ключевых элементов многих МЭМС. Различают пассивные и активные способы увеличения скорости смешения (см., например, [1, 4]). Первый способ предполагает варьирование геометрической формы канала, здесь используются различного рода вставки и т. п. Во втором — применяются те или иные внешние поля (акустическое, электрическое, магнитное), варьируется расход жидкости.

Несмотря на актуальность проблемы, структура и свойства течений в таких каналах пока изучены слабо. Экспериментальное исследование осложнено чрезвычайно малыми размерами каналов. Традиционные измерительные устройства могут вносить (и, как правило, вносят) сильные возмущения, сопоставимые с измеряемыми величинами. Экспериментально удастся измерить лишь интегральные свойства течения: расход жидкости при заданном градиенте давления, профиль скорости, падение давления и т. п. Однако чтобы оптимизировать процесс смешения, необходимо понимание структуры потока и механизмов смешения. В связи с этим важное место при изучении данных течений играет математическое моделирование. Существует большое число работ, в которых дизайн микромиксеров изучается методами вычислительной гидродинамики (см., например, обзоры [2, 4], материалы конференции [3], работы [5–11] и цитируемую в них литературу). Общие принципы работы микромиксеров обсуждаются в работе [1]. Вместе с тем число встречающихся и возможных микромиксеров столь велико, что необходимо, с одной стороны, их дальнейшее моделирование, а с другой — проведение оптимизационных исследований.

Цель настоящей работы состоит в разработке метода моделирования микротечений на основе решений уравнений гидродинамики и изучении эффективности смешения при использовании обоих методов смешения. Рассмотрено несколько типов миксеров. Для моделирования течений используется разработанный авторами [12, 13] пакет программ для решения уравнений Навье–Стокса. Этот пакет протестирован на известных данных, полученных с помощью *micro-PIV* (течение в микродиффузоре, микротройнике, микромиксере *Y*-типа). Рассмотрены как стационарные, так и квазистационарные течения с перестраиваемым профилем скорости. Чтобы изучить влияние на перемешивание и падение давления гидрофобных или даже ультрагидрофобных покрытий, в качестве граничных условий наряду с условиями прилипания использовались и условия скольжения.

## **1. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

### **1.1. Анализ области применимости гидродинамического описания микротечений**

Как известно, в обычных условиях течения жидкостей и не слишком разреженных газов вполне можно описывать методами механики сплошной среды. Однако в микроканалах ситуация существенно меняется. Микроканалами обычно называют каналы, в которых один из характерных размеров  $h$  (например, высота плоского канала или диаметр цилиндрического) оказывается порядка  $1 \sim 300$  мкм. В этих условиях течения жидкости и газа, как правило, следует описывать поразному. Действительно, если газ не слишком плотный (до давлений  $\sim 10\text{--}20$  атм.), то соответствующее число Кнудсена  $Kn$  таких микротечений изменяется в пределах  $10^{-2} \leq Kn \leq 10^2$ . В этом диапазоне чисел Кнудсена течение уже не описывается уравнениями гидродинамики. Точнее, на нижнем пределе диапазона все еще можно использовать уравнения Навье–Стокса, но с граничными условиями скольжения. Затем, примерно до чисел Кнудсена  $Kn \sim 10^{-1}$ , необходимо применять

нелинейные уравнения переноса (типа уравнений Барнетта или 13-моментных уравнений Греда), а потом — кинетическое уравнение Больцмана.

Следует также иметь в виду, что в микроканалах необходимо анализировать несколько параметров подобия, как локальных, так и глобальных. Типичной является ситуация, когда число Кнудсена по ширине составляет  $Kn \leq 10^{-1}$ , по высоте —  $Kn \geq 1$ , в наноканалах —  $Kn \geq 10$ . Если газ становится более разреженным, то вообще не возникает речи о применимости механики сплошной среды. Поэтому, казалось бы, для моделирования течений можно использовать метод прямого статистического моделирования Монте–Карло (ПСММК) [14]. Однако скорости течений в микроканалах обычно невелики, а в этих условиях метод ПСММК работает неудовлетворительно. Реального продвижения можно ожидать, решая для данных задач полное уравнение Больцмана регулярными методами или применяя метод молекулярной динамики. Для использования последнего необходимо порядка  $10^5 \div 10^6$  молекул в ячейке. Это вполне приемлемо, но возможно и совместное использование методов молекулярной динамики и ПСММК.

Концепция сплошной среды для жидкостей работает, если можно выделить гидродинамический физически бесконечно малый масштаб  $r_h$ , чтобы флуктуациями внутри соответствующего объема можно было пренебречь. Для жидкости  $r_h \sim \sqrt{dh}$  [15], где  $d$  — характерный размер молекулы жидкости. Если микроканал имеет высоту  $h \sim 1$  мкм, то  $r_h \sim 2 \cdot 10^{-6}$  см, что уже вполне сопоставимо с высотой канала. Поэтому при наличии в таком течении градиентов макроскопических переменных гидродинамическое описание будет давать сбои. Трудности вызывает даже просто введение макроскопических переменных, которые по определению есть средние по физически бесконечно малому объему соответствующих динамических переменных молекулярной системы. Особые проблемы возникают вблизи стенок канала. В газах вязкость связана с переносом импульса молекулами и формируется поэтому на масштабах, больших средней длины свободного пробега молекул. В жидкостях же на масштабах порядка 1 нм имеет место ближний порядок, и вязкость формируется на  $r_l$  мезомасштабах:  $r_0 < r_l < r_h$ . Таким образом, концепция вязкой жидкости существует лишь на масштабах, начиная с десятков нанометров. Поэтому в микроканалах жидкость может иметь разную вязкость вблизи стенок и в объеме. Кроме того, процессы переноса в достаточно малых микроканалах вообще перестают быть изотропными. Так, например, диффузия молекул вдоль и поперек канала оказывается различной.

Ситуация существенно усложняется, если жидкость в канале является двухфазной. Для описания микротечений наножидкостей при низких объемных концентрациях наночастиц ( $\phi \leq 10^{-4}$ ) можно использовать обычную одножидкостную гидродинамику. Однако в этом случае необходимо вводить эффективные коэффициенты переноса и следить за эволюцией концентрации наночастиц. Кроме того, традиционные граничные условия прилипания здесь перестают быть применимыми и существенное значение приобретает структура поверхности, в частности, ее шероховатость. Следует иметь в виду также, что с ростом объемной концентрации наночастиц среда может менять реологические свойства, жидкость — становится неньютоновской. Если характерный размер дисперсных частиц становится порядка  $10^{-4} \div 10^{-5}$  см (это броуновские частицы), гидродинамическое описание в достаточно малых микроканалах вообще перестает быть применимым. Здесь следует использовать смешанное описание с помощью связанной системы кинетико-гидродинамических уравнений [16], когда несущая

среда описывается системой уравнений гидродинамики с межфазными силами, а дисперсная — кинетическим уравнением.

В настоящей работе течение в микромиксерах моделируется посредством уравнений Навье–Стокса. Оценки, приведенные выше, показывают, что такое описание адекватно для микроканалов с минимальным характерным размером порядка 100÷50 мкм. Сегодня известно немало алгоритмов, позволяющих решать такую задачу. Это и различные модификации метода Галеркина, включая спектральные методы и методы конечных элементов и конечных объемов, различные бессеточные методы (см. [2, 17, 18] и цитированную там литературу). Эти пакеты, однако, не универсальны, в них не удастся модифицировать заложенные физические модели и, как правило, не ясна точность полученного в результате решения.

## 1.2. Алгоритм решения уравнений Навье–Стокса и его тестирование

В настоящей работе микротечения жидкостей описываются системой уравнений Навье–Стокса:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T}, \quad (1.2)$$

где  $\rho$  — плотность жидкости,  $p$  — давление,  $\mathbf{v}$  — ее скорость, а  $\mathbf{T}$  — тензор вязких напряжений. Плотность смеси выражается через массовые концентрации  $f_i$  компонентов потока и парциальные плотности  $\rho_i$  следующим образом:

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

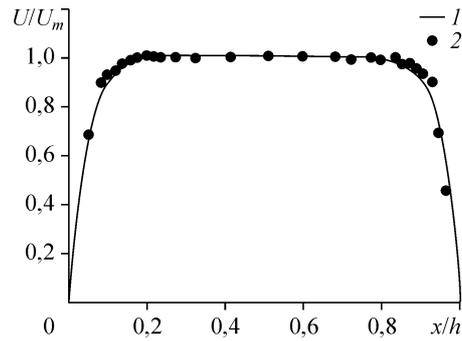
причем эволюция массовых концентраций определяется уравнением

$$\frac{\partial \rho f_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho f_i \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla f_i), \quad (1.3)$$

где  $D_i$  — коэффициент диффузии  $i$ -го компонента. В качестве граничных условий для данной системы уравнений используются условия прилипания или скольжения.

Разностный аналог конвективно-диффузионных уравнений (1.1)–(1.3) находится с помощью метода конечного объема [19] для структурированных многоблочных сеток. В этом случае полученная схема оказывается автоматически 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 (1.2) и (1.3) осуществляется соответственно с помощью противопоточных схем второго порядка QUICK [20] и TVD [21] 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 (1.1), реализуется при помощи SIMPLEC процедуры на

Рис. 1. Сопоставление расчетных данных (1) с экспериментальными [23] (2) для профиля скорости в микродиффузоре. Число Рейнольдса на входе  $Re = 1$ .

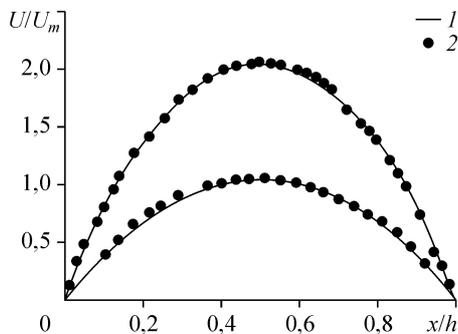


совмещенных сетках [22]. Для устранения осцилляций поля давления используется подход Рхи–Чоу, заключающийся во введении монотонизатора в уравнения для поправки давления [22]. Полученные в результате дискретизации исходной системы дифференциальных уравнений разностные уравнения решаются итерационным способом с применением алгебраического многосеточного решателя.

Разработанный алгоритм применялся при решении широкого круга задач внешнего и внутреннего обтекания [15, 16]. Вместе с тем его применимость для описания микротечений требовала специального тестирования. Три примера такого тестирования и приведены в настоящем разделе.

Рассмотрим течение ньютоновской жидкости в микродиффузоре [23]. Высота канала равна  $h = 100$  мкм, ширина его узкой части составляет  $w = 150$  мкм, а широкой —  $W = 750$  мкм. Жидкость движется из узкой части канала в широкую. На твердых стенках заданы условия прилипания. На входе фиксирован расход жидкости, соответствующий значению числа Рейнольдса  $Re = 1$ . Сопоставление рассчитанного с помощью разработанного авторами алгоритма решения уравнений Навье–Стокса для безразмерного профиля скорости  $U/U_m$  ( $U_m$  — максимальное значение скорости течения в данном сечении) с экспериментальными данными [23] представлено на рис. 1. Экспериментальные данные 2 получены с помощью микро-PIV в широкой части диффузора. Расчетные данные 1 хорошо согласуются с экспериментальными.

Следующий тестовый пример взят также из работы [23]. Рассматривается микротройник, состоящий из подводящего канала с симметричным прямоугольным разветвлением. Высота и ширина всех трех каналов одинакова и равна 100 мкм. На твердых стенках заданы условия прилипания. Число Рейнольдса, построенное по расходу на входе в канал, равно  $Re = 1$ . На рис. 2 представлено сопоставление рассчитанных 1 и измеренных 2 безразмерных профилей скорости. Безразмерный профиль скорости получен нормированием на скорость  $U_Q$ , определяемую расходом  $Q$  на входе:  $U_Q = Q/\rho S$ , где  $\rho$  — плотность жидкости, а



$S$  — площадь поперечного сечения микроканала. Измерения и расчет проводились в двух сечениях: в середине подводящего канала (кривая 1) и в середине его симметричной части (кривая 2). Здесь также наблюдается хорошее согласование расчетных и измеренных данных.

Рис. 2. Сопоставление расчетных (1) и экспериментальных [23] (2) нормированных значений продольной скорости течения в микротройнике.  $Re = 1$ .

Кривая 1 соответствует данным в середине подводящего канала, кривая 2 — в середине симметричной части тройника.

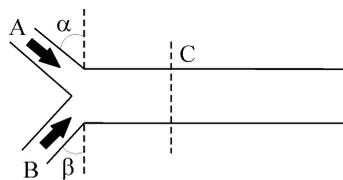


Рис. 3. Схема микромиксера Y-типа.

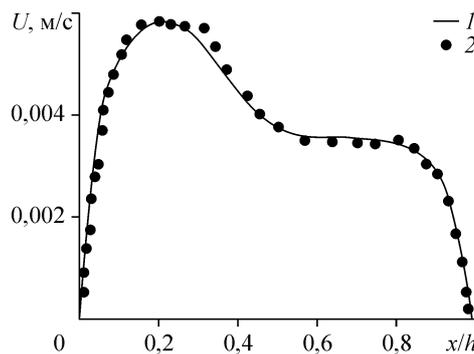


Рис. 4. Сопоставление расчетных (1) и экспериментальных значений [24] (2) продольной скорости течения в микромиксере Y-типа в сечении C (см. рис. 3) при смешении воды с 20 % раствора глицерола.

Наконец приведем еще один тестовый пример, в котором изучалось течение в микромиксере Y-типа, представленном на рис. 3. В работе [24] изучалось смешение воды (вход В) и раствора глицерола (вход А). Ширина подводящих каналов А и В равна 150 мкм, а ширина миксера — 300 мкм. Высота всех каналов одинакова и равна 50 мкм. В эксперименте углы  $\alpha$  и  $\beta$  были равны. В работе [24] изучено смешение с водой 20-, 50- и 60-процентных растворов глицерола, у которых последовательно увеличиваются плотность и коэффициент вязкости. Во всех случаях расчет хорошо описывает экспериментальные данные. На рис. 4 приводится сопоставление профиля продольной скорости течения в сечении С для 20 % раствора глицерола. Здесь, как и раньше, расчетным данным соответствует 1, а экспериментальным — 2.

## 2. СМЕШЕНИЕ ДВУХ ЖИДКОСТЕЙ В МИКСЕРЕ Y-ТИПА

Микромиксер Y-типа — один из простейших. Смешение в таком микромиксере интенсивно изучалось в течение последнего десятилетия. Тем не менее до сих пор отсутствуют систематические данные о влиянии на смешение ряда параметров течения. По этой причине мы и начинаем изучение микромиксеров с рассмотрения устройств именно этого типа.

Итак, рассмотрим смешение двух одинаковых жидкостей в микромиксере, представленном на рис. 3. Пусть для определенности в канал А поступает синяя жидкость, а в канал В — красная. Если расход в обоих входных каналах одинаков, то числа Рейнольдса течения в каналах А и В одинаковы и равны  $Re = \rho U_Q w / \mu$ . Время смешения будет определяться лишь коэффициентом диффузии жидкости  $D$ , и оно составляет  $\sim \tau_m \sim w^2 / D$ . Если канал миксера имеет длину  $L$ , то время, за которое жидкая частица проходит его, равняется  $\sim \tau_L \sim L / U_Q \sim (\rho L w h) / Q$ . Эффективность смешения в канале будет определяться соотношением этих двух времен, которое равно

$$\frac{\tau_m}{\tau_L} \sim \frac{w^2 U_Q}{DL} \sim \frac{w}{L} Re \frac{\nu}{D}, \quad (2.1)$$

где  $\nu = \mu / \rho$  — кинематический коэффициент вязкости. Поэтому для заданного канала и определенных жидкостей время смешения растет с увеличением числа Рейнольдса. Если в качестве смешивающихся жидкостей взять воду, то в соответст-

вии с (2.1) смешение в канале длиной  $L = 1$  см будет эффективным, если  $\tau_m \ll 10 \text{Re} \tau_L$ , что выполняется лишь при очень малых числах Рейнольдса. Отсюда, в частности, следует, что, начиная с некоторых значений чисел Рейнольдса, эффективность смешения практически не будет меняться. Это подтверждает и непосредственное моделирование. Действительно, эффективность смешения при числах Рейнольдса в диапазоне от 10 до 0,01 практически не изменяется.

Из уравнения (2.1) легко получается еще одна оценка

$$\frac{\tau_m}{\tau_L} \sim \frac{w}{L} \text{Pe}, \quad (2.2)$$

где введено диффузионное число Пекле  $\text{Pe} = wU_Q/D$ . И при заданном числе Пекле длина смешения  $L_m \sim U_Q \tau_m \sim w \text{Pe}$  тем меньше, чем меньше ширина канала. И эта длина растет с увеличением числа Пекле. Стоит, однако, подчеркнуть, что зависимость эффективности смешения от числа Пекле оказывается нелинейной. Она приведена на рис. 5. Здесь эффективность смешения  $M$  определялась по формуле

$$M = \left[ 1 - \frac{2}{W} \int_0^H (C - 0,5) dy \right] \cdot 100 \%, \quad (2.3)$$

где  $H = 300$  мкм — ширина канала, в котором происходит смешение (см. рис. 3), а  $C$  — концентрация краски в сечении, отстоящем на расстоянии 4000 мкм от места слияния потоков. Эта зависимость неплохо описывается формулой

$$M = \frac{113,2}{1 + 0,037 \text{Pe}^{0,7}},$$

ей соответствует непрерывная кривая на рис. 5, а расчету — точки. Эта зависимость, конечно, достаточно условна, поскольку связана, в частности, с определением эффективности смешения.

Далее изучалось влияние на эффективность смешения углов  $\alpha$  и  $\beta$ . Оба угла варьировались от 0 до  $90^\circ$  (см. рис. 3). Было установлено, что степень раскрытия каналов А и В слабо влияет на эффективность смешения. Для миксера, в котором смешивались две одинаковые жидкости, это различие составляло около 7 %. В случае, когда оба угла были одинаковы (симметричный миксер), максимальная эффективность достигалась при  $\alpha = \beta = 90^\circ$ . С уменьшением угла до нуля эффективность монотонно менялась от 18,2 до 17,6 %. Эффективность смешения несимметричного миксера ниже, чем у симметричного. Так, для миксера, у которого  $\alpha = 60^\circ$ ,  $\beta = 10^\circ$ , эффективность смешения составила 17,4 %, что ниже минимального значения эффективности для симметричного миксера. Указанные различия оказываются

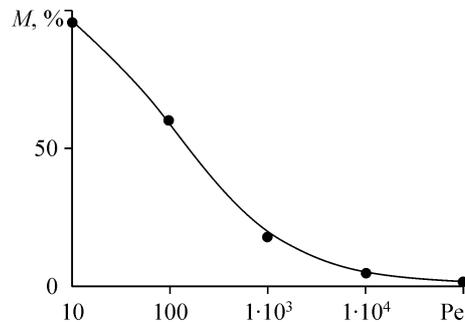


Рис. 5. Зависимость эффективности смешения в миксере Y-типа от числа Пекле.

несколько выше, если смешиваются две различные жидкости. Однако во всех случаях симметричный миксер более эффективен с минимальным углом раствора входных каналов. Указанные результаты вполне предсказуемы и связаны с изменением локальных значений числа Пекле.

Поскольку в микроканалах важнейшим фактором процесса смешения является диффузия, то для организации перемешивания течения необходима достаточно большая длина канала. Естественно, это приводит к существенному падению давления из-за трения на стенках канала. С другой стороны, очевидно, что такие потери будут меньше, если на стенках канала реализуется скольжение потока, а не условия прилипания. На макроскопическом уровне описания в качестве граничных условий всегда используют условия прилипания. Граничные условия скольжения применяются только для описания течений достаточно разреженного газа. Связано это с тем, что в газе характерная длина скольжения на стенке  $b$  порядка числа Кнудена  $b \sim Kn$ , а в газе оно может быть не малым (здесь длина скольжения на стенке определяется условием:  $v = b(\partial v / \partial x)$ , где течение происходит вдоль оси  $x$ , а  $v$  — скорость течения в этом направлении). В макроскопических течениях жидкости в обычных условиях длина скольжения изменяется от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров. Таким скольжением вполне можно пренебречь. Однако в микротечениях такое скольжение уже может оказаться значимым. Кроме того, в микротечениях длина скольжения может достигать сотен нанометров. Связано это с изменением ближнего порядка жидкости около поверхности, возможностью газовой выделения на стенках канала и т. п. Наличие скольжения на стенках приводит к существенному уменьшению сопротивления трения на стенках канала и, следовательно, к уменьшению падения давления. Чтобы увеличить длину скольжения, используют различные гидрофобные или даже ультрагидрофобные покрытия (см., например, [25, 26]). При этом длина скольжения может достигать десятков микрон.

В настоящей работе для изучения влияния скольжения проводились систематические расчеты течения в микромиксере Y-типа. Длина скольжения варьировалась от 10 нм до 20 мкм, соответствующие данные представлены в табл. 1. Увеличение длины скольжения до 5 мкм снижает потерю давления почти вдвое. При этом следует подчеркнуть, что эффективность смешения при наличии скольжения на стенках не меняется при малых длинах скольжения, а при больших даже несколько увеличивается.

До сих пор обсуждалось смешение одной и той же жидкости. Практический же интерес представляет смешение разных жидкостей. Естественно, разработанный алгоритм позволяет анализировать и такие ситуации. В качестве примера ниже приводятся данные по смешению в микромиксере Y-типа воды и другой жидкости (см. табл. 2). Вода вводится через канал А. Поскольку физические характеристики рассмотренных жидкостей весьма различны, эффективность их

**Таблица 1**  
**Влияние скольжения на стенках канала**  
**на перепад давления и эффективность**  
**смешения**

$b$	$\Delta p$ , Па	$M$ , %
0	293,3	17,6
0,01	293,1	17,6
0,05	291,7	17,6
0,1	290,1	17,6
1	263,0	17,7
5	184,5	17,9
20	87,6	18,4

Таблица 2

Параметры смешивающихся жидкостей

	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup> [27]	$\mu$ , Па·с [27]	$D \times 10^{-9}$ , м <sup>2</sup> /с [28]
Ацетон	800	0,00029	4,56
Глицерол	1260	1,48	0,0083
Этанол	790	0,0012	1,24
Изопил алкоголь	786	0,0029	0,38

смешения с водой также оказывается разной. В частности, параметр  $M$  для ацетона, глицерина, этилового спирта и изопропилового спирта соответственно равен 36,8, 3,1, 18,2 и 9,4 процентам. В этом случае падение давления во входных каналах А и В различны и изменяются от 239,5 кПа для глицерина до 165 Па для ацетона.

### 3. СМЕШЕНИЕ В МИКСЕРЕ Т-ТИПА СО ВСТАВКАМИ

Соотношения (2.1), (2.2) дают оценку времени и длины смешения и тем самым эффективность микромиксеров. Из общих соображений ясно, что время смешения можно существенно сократить, если смешивающий поток многократно расщепить. На этом принципе устроены микромиксеры с расслоением (lamination mixers) (см., например, [4]). Близкая идея связана с введением в смешивающийся поток ряда препятствий, которые меняют структуру течения, ускоряя тем самым смешение. Хорошо понятно, что при ламинарном течении симметричное расположение препятствий будет мало эффективным. Кроме того, характерный размер препятствий должен быть сопоставим с размерами канала. Более того, по этому параметру миксер легко оптимизировать. Серии таких расчетов для миксеров различного типа были проведены в настоящей работе.

В качестве примера на рис. 6 представлено смешение двух жидкостей в миксере с несимметрично расположенными тремя и семью прямоугольными вставками. Ширина канала, в котором происходит смешение, равна 100 мкм, а входных каналов — 50 мкм, высота миксера составляет 50 мкм. Число Рейнольдса равно  $Re = 2$ , а число Пекле —  $Pe = 5 \cdot 10^3$ . Поскольку при увеличении количества вставок длина канала также увеличивается, то целесообразнее анализировать приведенные к длине канала характеристики смешения и падения давления, которые и представлены в табл. 3. Здесь в первом столбце указано число вставок, размер всех вставок за исключением последней строки одинаков, их сечения равны 50 мкм×20 мкм, а высота составила 50 мкм. Эффективность смешения с ростом числа вставок растет, однако увеличивается и потеря давления. Ее можно уменьшить, используя гидрофобные покрытия. Так, при длине скольжения  $b = 1$  мкм падение давления удастся снизить на 10 %. Вставки на рис. 6, *b*, *c* расположены в шахматном порядке на некотором расстоянии от стенок канала. Эффективность смешения можно существенно повысить, если вставки несколько удлинить и соединить со стенками канала. На рис. 6, *d* приведена соответствующая иллюстрация такого миксера с семью вставками сечения 70 мкм×20 мкм. Эффективность смешения в нем дана в последней строке табл. 3.

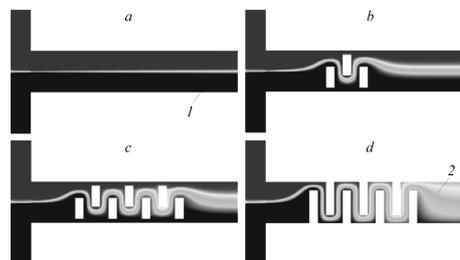


Рис. 6. Сопоставление смешения двух жидкостей синей (1) и красной (2) в миксере Т-типа с прямоугольными вставками.

$$Re = 2, Pe = 5 \cdot 10^3.$$

Таблица 3

Удельная (на единицу длины) эффективная смешения и удельная потеря давления в миксере с прямоугольными вставками

$N$	$M, \%/мкм$	$\Delta p, Па/мкм$
0	0,0094	0,37
3	0,026	0,92
5	0,035	1,44
$7_1$	0,045	1,92
$7_2$	0,085	7,38

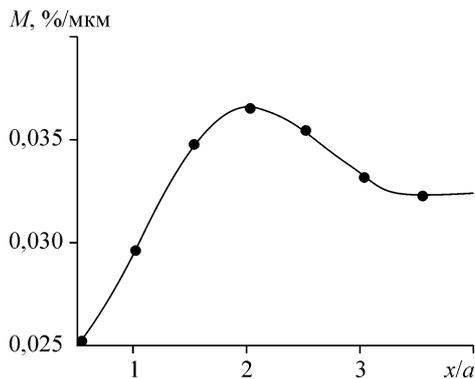


Рис. 7. Зависимость приведенной эффективности смешения в миксере с пятью прямоугольными вставками от безразмерного расстояния между ними.

Конечно, топология течения будет существенно зависеть от геометрии канала, в частности, от расстояния между вставками. Варьируя его, эффективность смешения можно повышать. В качестве примера на рис. 7 приведена зависимость эффективности смешения в канале с пятью прямоугольными вставками от безразмерной ширины вставки  $a$ , которая равнялась 20 мкм. Поперечное сечение вставок снова равнялось 50 мкм×20 мкм, а характеристики течения те же, что и на рис. 6. Данный миксер оптимально работает, когда расстояние между вставками составляет  $2a$ . Увеличивая расстояние между вставками, мы монотонно снижаем падение давления. Так, с увеличением расстояния между вставками от  $a$  до  $2a$  падение давления удастся снизить на двадцать пять процентов. С другой стороны, скольжение на стенках миксера в этом случае, в отличие от гладкого канала, значительно слабее сказывается на падении давления.

Наконец следует отметить, что оптимизация параметров смешения микромиксера в общем случае будет, конечно, зависеть и от чисел Рейнольдса и Пекле. Однако, как уже говорилось, в широком диапазоне чисел Рейнольдса (при  $Re \leq 1$ ) эффективность смешения от него практически не зависит и только при  $Re > 1$  она начинает расти. Эффективность смешения слабо зависит от числа Пекле, начиная со значений  $Pe \sim 10^3$ . С другой стороны, при изменении числа Пекле от 10 до  $10^3$  эффективность смешения изменяется примерно на порядок.

#### 4. АКТИВНЫЙ МЕТОД СМЕШЕНИЯ

Одним из наиболее простых методов активного смешения в миксерах  $Y$ - и  $T$ -типа является метод с периодическим изменением расхода на одном из входов. В настоящей работе варьировалась скорость  $U_Q$ . Она задавалась соотношением

$$U_Q = U_0 + V \sin 2\pi ft. \quad (4.1)$$

Параметры, входящие в выражение (4.1), в общем случае определяются характерными размерами канала, в котором происходит смешение, и характеристиками течения (числами Рейнольдса и Пекле). Ясно, что если характерное время смешения будет много меньше периода изменения расхода  $\tau_m \ll (2\pi f)^{-1} = T_f$ , то это практически не изменит эффективности смешения по сравнению со стационарным смешением. Поэтому наиболее предпочтительной является ситуация, когда  $\tau_m \gg T_f$ . С другой стороны, период изменения расхода должен быть меньше, чем характерное время течения  $T_f < \tau_L$ . Конечно, создать в микроканалах слишком высокую частоту технологически достаточно сложно.

Рис. 8. Зависимость эффективности смешения в  $T$ -миксере от частоты  $f$  и амплитуды  $V$ , подаваемого на один из входов расхода.

Амплитуда:  $V = 1$  (1),  $5$  (2),  $10$  (3) мм/с.

Поэтому наиболее рациональной будет ситуация, когда  $\tau_m \geq (2\pi f)^{-1}$ . Оптимальную амплитуду колебаний легко оценить, рассмотрев объем смешиваемой жидкости за период  $T_f$ .

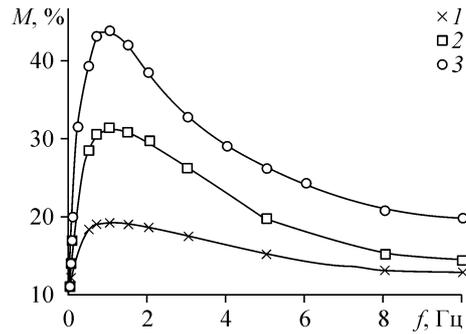
Эти качественные соображения подтверждаются и непосредственными расчетами. В качестве примера рассматривается смешение двух жидкостей в микромиксере  $T$ -типа. Его ширина  $200$  мкм, высота —  $120$  мкм, длина —  $2000$  мкм,  $U_0 = 10^{-3}$  м/с. Анализировалось смешение жидкости с коэффициентом вязкости  $\mu = 6,67 \cdot 10^{-4}$  Па·с и коэффициентом диффузии  $D = 7 \cdot 10^{-11}$  м<sup>2</sup>/с, что соответствует числам  $Re = 0,3$  и  $Pe = 3000$ . Для данных параметров  $\tau_m \sim 560$  с и  $\tau_L \sim 2$  с. Поэтому оптимальная частота должна удовлетворять условиям  $T_f < 2$  с и  $\tau_m \geq T_f$ . Соответствующая частота определяется следующим условием:  $f_{op} > 0,08$  Гц. Эта оценка дает следующую частоту:  $f_{op} \sim 1$  Гц. На рис. 8 приведена зависимость эффективности смешения в данном миксере от частоты  $f$  и амплитуды  $V$ . Действительно, оптимальное смешение достигается при частоте порядка  $1$  Гц.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя итог, следует отметить, что адаптированный для описания микротечений алгоритм [12, 13] хорошо описывает существующие экспериментальные данные и пригоден для моделирования широкого класса микротечений, в частности, микромиксеров. Предложенная модель учитывает нестационарность и трехмерность процесса движения жидкости в микроканалах, хорошо адаптируется к любой реальной геометрии. Для моделирования микромиксеров последнее особенно актуально. В предложенном варианте данный алгоритм нуждается, однако, в дальнейшей доработке, поскольку на практике приходится изучать смешение многофазных жидкостей, теплопередачу, неизотермические течения, влияние термодиффузии на процессы смешения и т. д.

Проведенное систематическое изучение процессов смешения жидкостей в пассивных микромиксерах  $Y$ - и  $T$ -типа показало, что оптимизация формы каналов принципиальна. Эффективность смешения в ряде случаев удается повысить на десятки процентов. Важно также то, что сравнительно простые качественные соображения позволяют предсказать оптимальную форму микромиксеров. Возможно и дальнейшее улучшение изученных микромиксеров. Так, например, эффективность микромиксеров указанных типов можно увеличить, если вставки сделать наклонными, а не под прямым углом к стенке, как это было в изученных примерах (см. рис. 7). Использование вставок является эффективным способом увеличения смешения потоков, однако при этом существенно увеличивается падение давления в каналах. В настоящей работе показано, что с этим можно бороться, используя гидрофобные покрытия стенок канала.

На практике наряду с микромиксерами  $Y$ - и  $T$ -типа широко применяется и так называемые миксеры  $S$ -типа. С их помощью удастся на сравнительно малой



площади существенно увеличить длину смешения. Поэтому такие микромиксеры с успехом используются в различных МЭМС и других микроустройствах (типа лаборатории на чипе и т. п.). Однако проведенное нами сопоставление эффективности миксеров *S*-типа показало, что последние менее эффективны по сравнению с микромиксерами *Y*- и *T*-типов со вставками.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Tableting P.** Introduction to microfluidics. Oxford: Oxford University Press, 2005. 301 p.
2. **Karnidakis G., Beskok A., Aluru N.** Microflows and nanoflows. Interdisciplinary Applied Math. Vol. 29. Springer Science+Business Media, Inc., 2005. 817 p.
3. **Microfluidics 2008** // Book of Abstracts of 1st European Conference on Microfluidics / Eds. Colin S. and Marini G.L. SHF, 2008. 207 p.
4. **Karnik R.** Microfluidic mixing // Encyclopedia of microfluidics and nanofluidics / Ed. Li D. Springer, 2008. P. 1177–1186.
5. **Stroock A.D., Dertinger S.K., Whitesides G.M., Ajdari A.** Patterning flows using grooved surfaces // Anal. Chem. 2002. Vol. 74, No. 20. P. 5306–5312.
6. **Vanka S.P., Luo G., Winkler C.M.** Numerical study of scalar mixing in curved channels at low Reynolds number // AIChE J. 2004. Vol. 50. P. 2359–2368.
7. **Hong C.C., Choi J.W., Ahn C.H.** A novel in-plane passive microfluidics mixer with modified Tesla structures // Lab. on a Chip. 2004. Vol. 4. P. 109–113.
8. **Jiménez J.** The growth of a mixing layer in laminar channel // J. Fluid Mech. 2005. Vol. 535. P. 245–254.
9. **Aubina J., Fletcher D.F., Xuereb C.** Design of micromixers using CFD modeling // Chem. Engng. Sci. 2005. Vol. 60. P. 2503–2516.
10. **Lin Y.C., Chung Y.C., Wu C.Y.** Mixing enhancement of the passive microfluidic mixer with J-shaped baffles in the tee channel // Biomed. Microdevices. 2007. Vol. 9. P. 215–221.
11. **Cao J., Cheng P., Hong F.J.** A numerical study of an electrothermal vortex enhanced micromixer // Microfluidics and Nanofluidics. 2008. Vol. 5. P. 13–21.
12. **Рудяк В.Я., Минаков А.В., Гаврилов А.А., Дектерев А.А.** Применение нового численного алгоритма решения уравнений Навье–Стокса для моделирования работы вискозиметра типа физического маятника // Теплофизика и аэромеханика. 2008. Т. 15, № 2. С. 353–365.
13. **Минаков А.В., Гаврилов А.А., Дектерев А.А.** Численный алгоритм решения пространственных задач гидродинамики с подвижными твердыми телами и свободной поверхностью // СибЖИМ. 2008. Т. 11, № 4(36). P. 94–104.
14. **Берд Г.** Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с.
15. **Рудяк В.Я.** Нелокальное решение уравнения Больцмана // ЖТФ. 1995. Т. 65, № 11. С. 29–40.
16. **Рудяк В.Я.** Смешанный кинетико-гидродинамический уровень описания дисперсных жидкостей // Письма ЖТФ. 1999. Т. 25, № 22. С. 35–38.
17. **Shapiro E., Drikakis D.** Artificial compressibility, characteristics-based schemes for variable density, incompressible, multi-species flows. Part I, Part II // J. Comp. Phys. 2005. Vol. 210. P. 584–607. – P. 608–631.
18. **Kalweit M., Drikakis D.** Multiscale methods for micro/Nano flows and materials // J. Comp. & Theoretical Nanoscience. 2008. Vol. 5. P. 1923–1938.
19. **Ferziger J.H., Peric M.** Computational methods for fluid dynamics. Berlin: Springer Verlag, 2002. 362 p.
20. **Leonard, B.P.** A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation // Comp. Meth. Appl. Mech. Engng. 1979. Vol. 19. P. 59–98.
21. **Lien, F. S., Leschziner M. A.** Upstream monotonic interpolation for scalar transport with application to complex turbulent flows // Inter. J. Num. Math. Fluids. 1994. Vol. 19. P. 527–534.
22. **Patankar S.V.** Numerical heat transfer and fluid flow. Washington: DC, Hemisphere, 1980. 541 p.
23. **Wing T.L., Rajan K.M.** Flow measurements in microchannels using MicroPIV system // Proc. of the 15th Australasian Fluid Mech. Conf. (CD-ROM) / Ed. M. Behnia, W. Lin, and G. D. McBain. The University of Sydney, 2004. Paper AFMC00150.
24. **Kim B.J., Liu Y.Z., Sung H.J.** Micro PIV Measurement of two-fluid flow with different refraction indices // Measurement Science & Technology. 2004. Vol. 15, No. 6. P. 1097–1103.
25. **Ou J., Perot B., Rothstein P.** Laminar drag reduction in microchannels using ultrahydrophobic surfaces // Phys. Fluids. 2004. Vol. 16. P. 4635–4643.
26. **Lauga E., Brenner M.P., Stone H.A.** Microfluidics: the no-slip boundary condition // In Handbook of Experimental Fluid Dynamics / Eds. Foss J., Tropea C., Yarin A. Ch. 15. 2005. P. 1–25.
27. **Физические величины.** / Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
28. **Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.** Свойства газов и жидкостей, Л.: Химия, 1982. 592 с.

*Статья поступила в редакцию 2 февраля 2010 г.*