

Испарение и гидродинамика лежащей капли капиллярного размера

Бараш Л.Ю., Щур Л.Н.,
Винокур В.М., Бигиони Т.П.

Phys. Rev. E, 79 (февраль 2009)

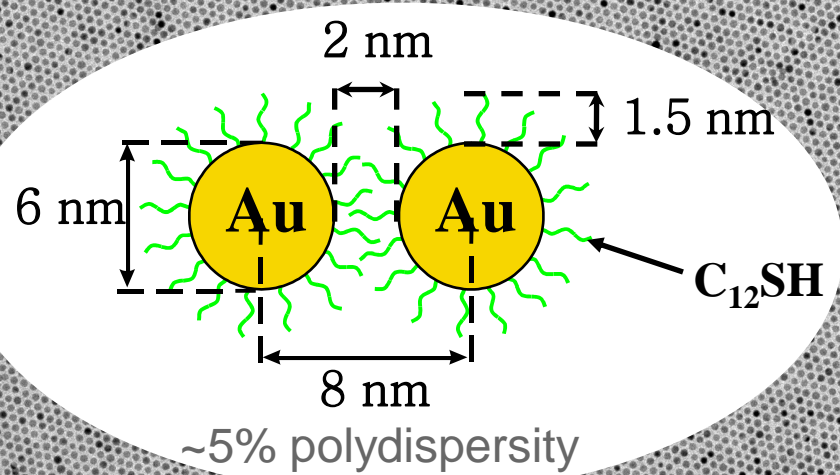
<http://arxiv.org/abs/0812.4758>

Введение

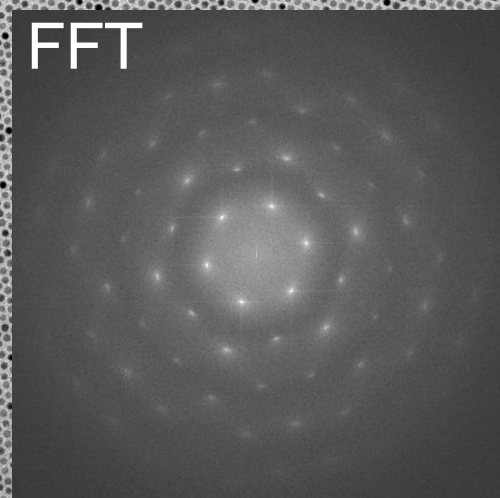
**Испарение лежащей капли –
известная задача классической физики**

Новые аспекты вопроса :

- **Существенная неоднородность локальной скорости испарения лежащей капли вдоль ее поверхности. Особенности скорости испарения вблизи контактной линии в режиме пиннинга.**
- **Наличие выраженной конвекции Марангони в испаряющейся капле. Роль сил Марангони в гидродинамике капли. Вихри в испаряющейся капле.**
- **Прогресс в экспериментальных исследованиях и прикладные аспекты задачи**



FFT



200 nm

Цель работы:

Совместное описание диффузии пара, динамики жидкости и пространственного распределения температуры в испаряющейся лежащей капле.

Учет конвективных слагаемых и нестационарности в уравнениях.

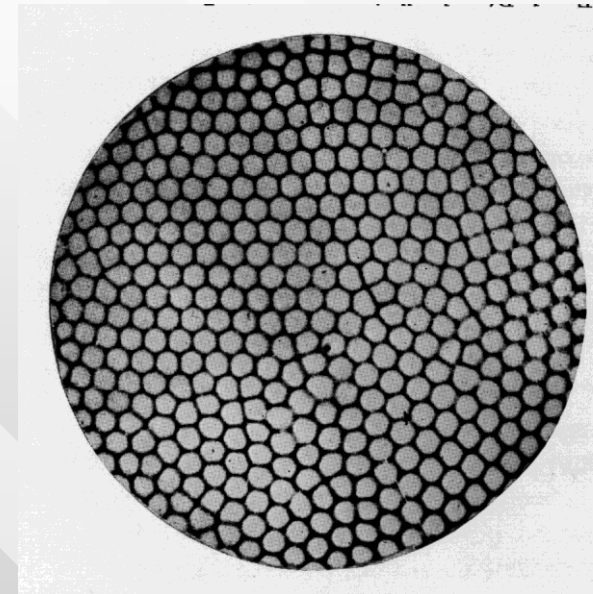
The Marangoni Convection

- Convective flows with hexagonal patterns in a flat fluid film

$$M_a = \frac{-\frac{\partial \sigma}{\partial T} (c_V \Delta T) h}{\nu k}$$

$$\lambda = \frac{2\pi h}{\sqrt{M_a/8}}$$

Pearson, J. Fluid Mech., 4 (1958) 489



Применение критерия Марангони для капли

$$Ma \approx 2800$$

$$Re \approx 62$$

Турбулентности нет, экспериментально (для капель воды)
Турбулентность возникает при $Ma > 22000$

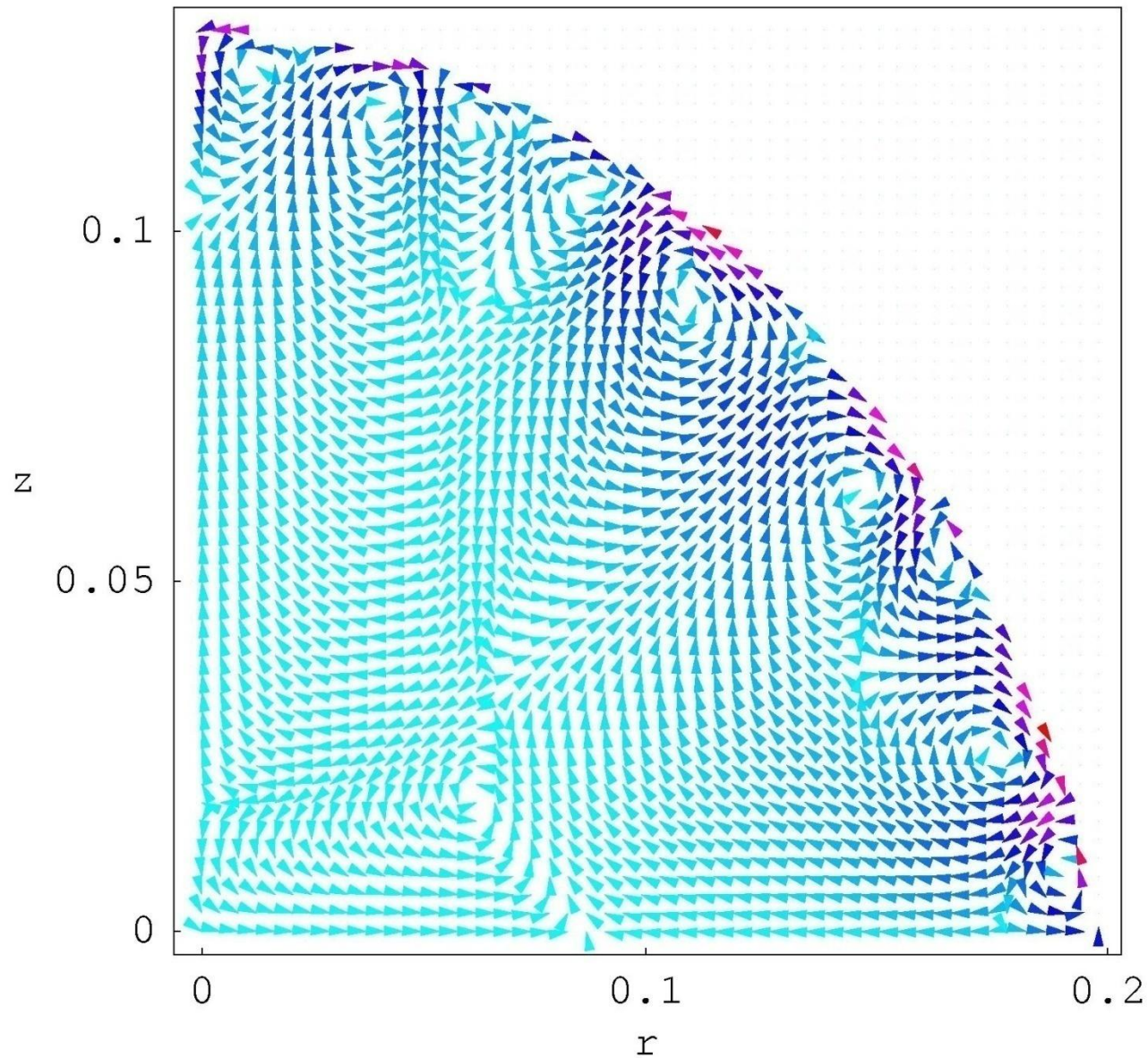
$$\lambda \sim 0.03 \text{ см}$$

Конкуренция конвекций за счет плавучести и сил Марангони:

$$B = \rho g h^2 \beta / (7.14 \partial \sigma / \partial T) \approx 0.02 \ll 1 \quad [\text{Pearson, 1958}]$$

β - коэффициент теплового расширения,

Street of near-surface vortices. $t=0.16$ s



Sessile drop shape

The Laplace equation:

$$k\sigma + \rho g z = \text{const}$$

$$k + \frac{2f}{a^2} = \text{const}$$

Capillary constant
for toluene:

$$a = \sqrt{\frac{2\sigma}{\rho g}} \approx 0.26 \text{ cm}$$

For drop with rotational symmetry, we have:

$$z = f(x, y) \Rightarrow z = f(r)$$

$$k = -\text{Tr}(G^{-1}Q) = \quad (1)$$

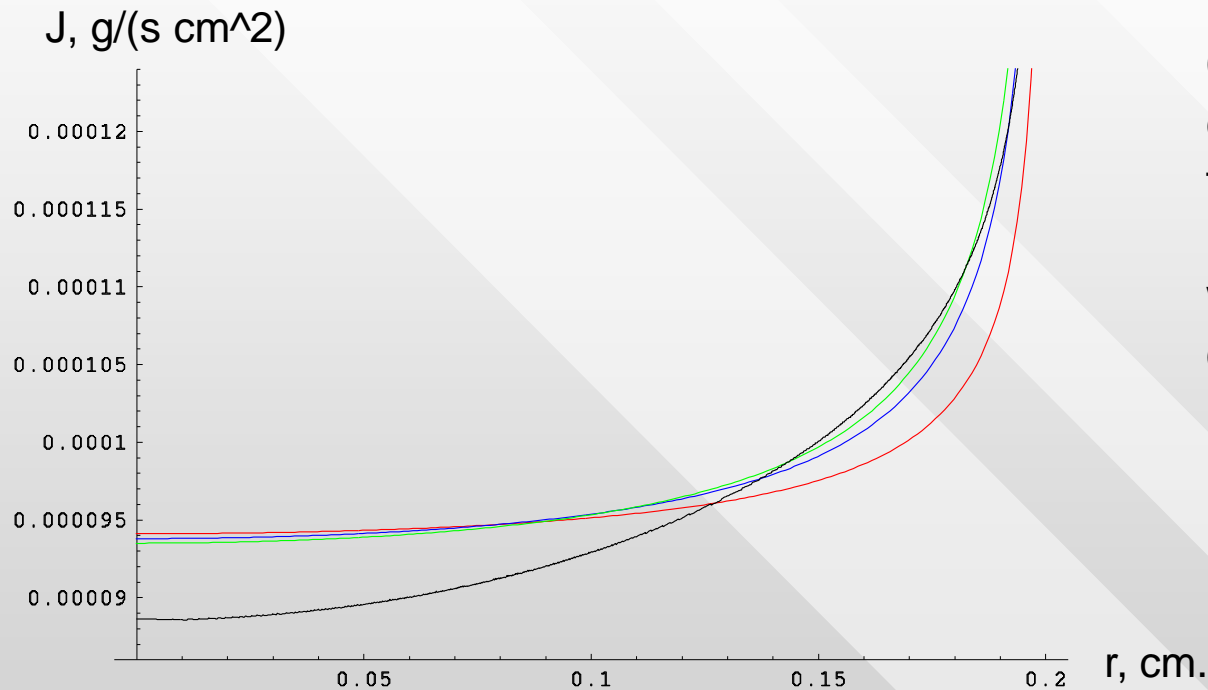
$$= \frac{2f_x f_y f_{xy} - f_{xx}(1 + f_y^2) - f_{yy}(1 + f_x^2)}{(1 + f_x^2 + f_y^2)^{3/2}} = \quad (2)$$

$$= \frac{f''}{(1 + f'^2)^{3/2}} + \frac{f'}{r(1 + f'^2)^{1/2}} \quad (3)$$

G, F – matrixes of first and second quadratic forms of the surface.

Effects of gravitational force

$$B_o = \frac{\rho g h r_0}{2\sigma \sin \theta} \approx 0.4$$



Contrary to the total evaporation rate, the local evaporation rate is not described well with the spherical cap approximation.

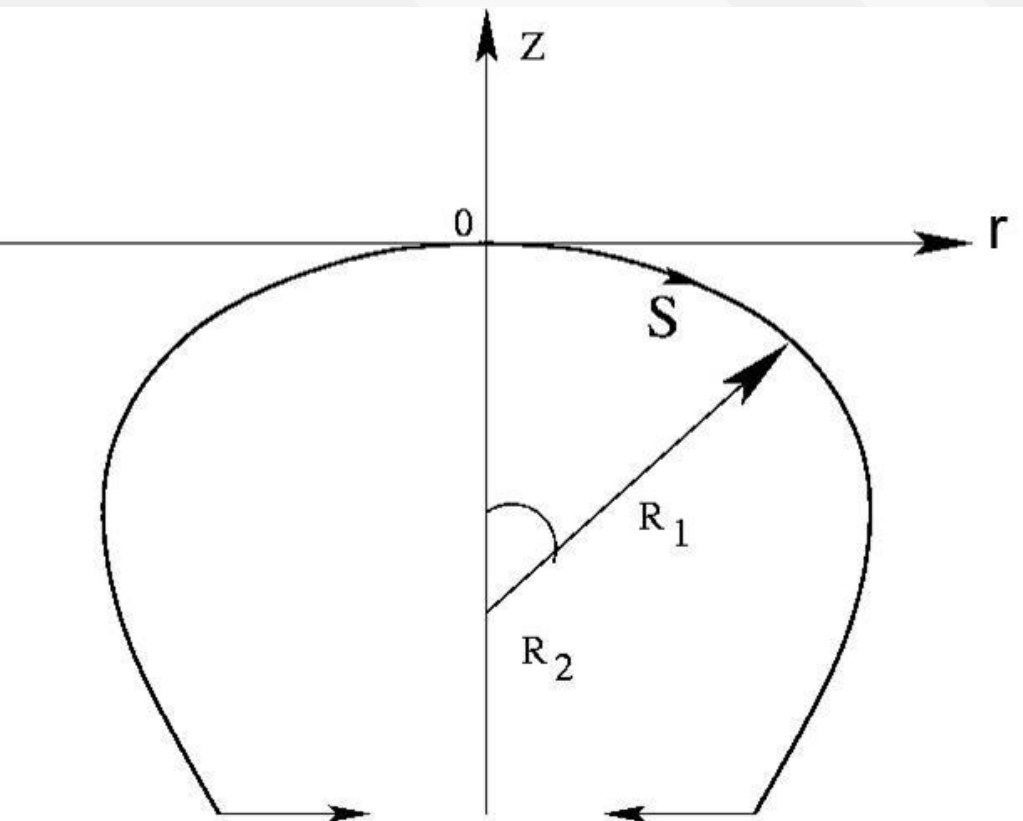
The curvature of the sessile drop varies along the surface in about 1.5 times

$$R_2 = r / \sin \varphi$$

$$\sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{\sin \varphi}{r} \right) = \frac{2\sigma}{R_0} - \rho g z$$

Unknowns: $r = r(s)$, $z = z(s)$

$$\dot{\varphi} = \frac{2}{R_0} - \frac{2z}{a^2} - \frac{\sin \varphi}{r}$$



$$\ddot{x} = \dot{z} \left(\frac{2}{R_0} - \frac{2z}{a^2} + \frac{\dot{z}}{r} \right)$$

$$\ddot{z} = -\dot{x} \left(\frac{2}{R_0} - \frac{2z}{a^2} + \frac{\dot{z}}{r} \right)$$

$$z(0) = 0, \quad \dot{z}(0) = 0,$$

$$r(0) = 0, \quad \dot{r}(0) = 1,$$

$$(\dot{z}/r)_{s=0} = -1/R_0.$$

Граничные условия на поверхности капли

Уравнение Лапласа на поверхности капли в общем случае

$$\left(P - p_v - \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \right) n_i = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) n_k - \frac{\partial \sigma}{\partial x_i}. \quad (1)$$

Здесь p_v -- атмосферное давление, P -- полное гидродинамическое давление на поверхности капли.

Проекции (1) на тангенциальное и нормальное направление к поверхности соответственно:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{ds} &= \eta \left(\frac{\partial v_\tau}{\partial n} - v_\tau \frac{d\phi}{ds} \right), \\ P - p_v &= \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) + 2\eta \frac{\partial v_n}{\partial n}. \end{aligned}$$

Проекция уравнения Навье-Стокса на тангенциальное направление к поверхности:

$$\frac{\partial p}{\partial \tau} = -\rho \left(\frac{\partial v_\tau}{\partial t} + v_\tau \frac{\partial v_\tau}{\partial \tau} + v_n \left(\frac{\partial v_n}{\partial \tau} + \gamma \right) \right) + \eta \left[\frac{\partial \gamma}{\partial n} + \frac{\sin \varphi}{r} \gamma \right].$$

Здесь

$$\gamma = \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r} = \frac{\partial v_\tau}{\partial n} - \frac{\partial v_n}{\partial \tau} + v_\tau \frac{d\varphi}{d\tau}, \quad \text{rot } \mathbf{v} = \gamma(r, z) \mathbf{i}_\varphi.$$

Граничным условием для завихренности является

$$\gamma = \frac{1}{\eta} \frac{d\sigma}{ds} + 2v_\tau \frac{d\phi}{ds}.$$

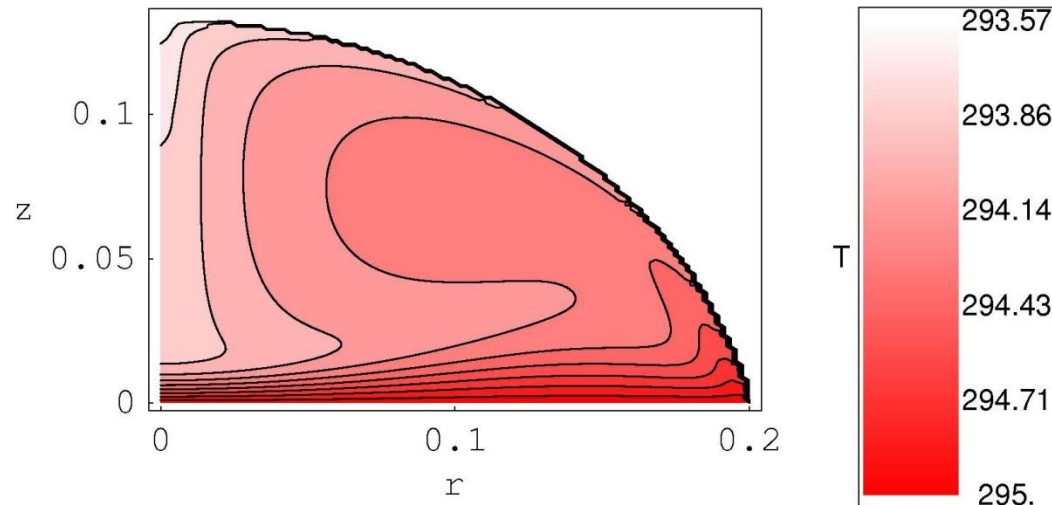
Где поверхностное натяжение σ зависит от положения на поверхности капли вместе с температурой.

Поверхностное натяжение и температура

$$\sigma(T) = \sigma_0 - \sigma'(T - T_0)$$

$$\sigma_0 = \sigma(T_0) = 28.3049 \text{ g/sec}^2$$

$$\sigma' = 0.11867 \text{ g/sec}^2$$

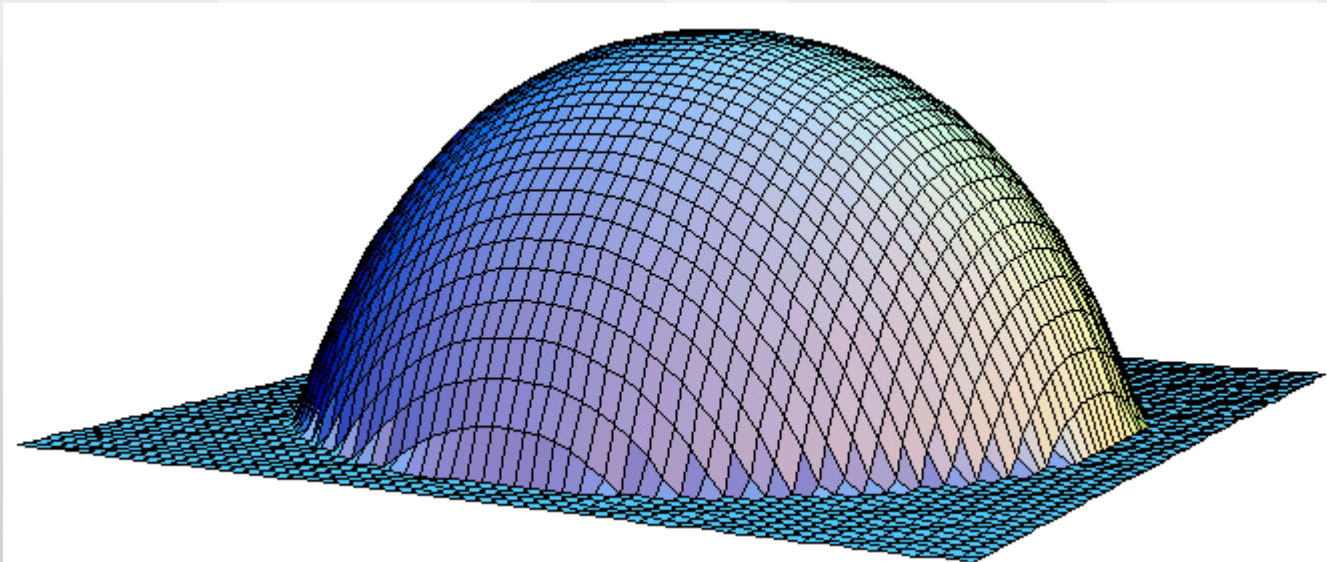


The mass and surface area:

$$M = \pi \rho \int_0^{s_{max}} z(s) x^2(s) ds$$

$$S = \int_0^{s_{max}} 2\pi x(s) ds$$

Evaporation:

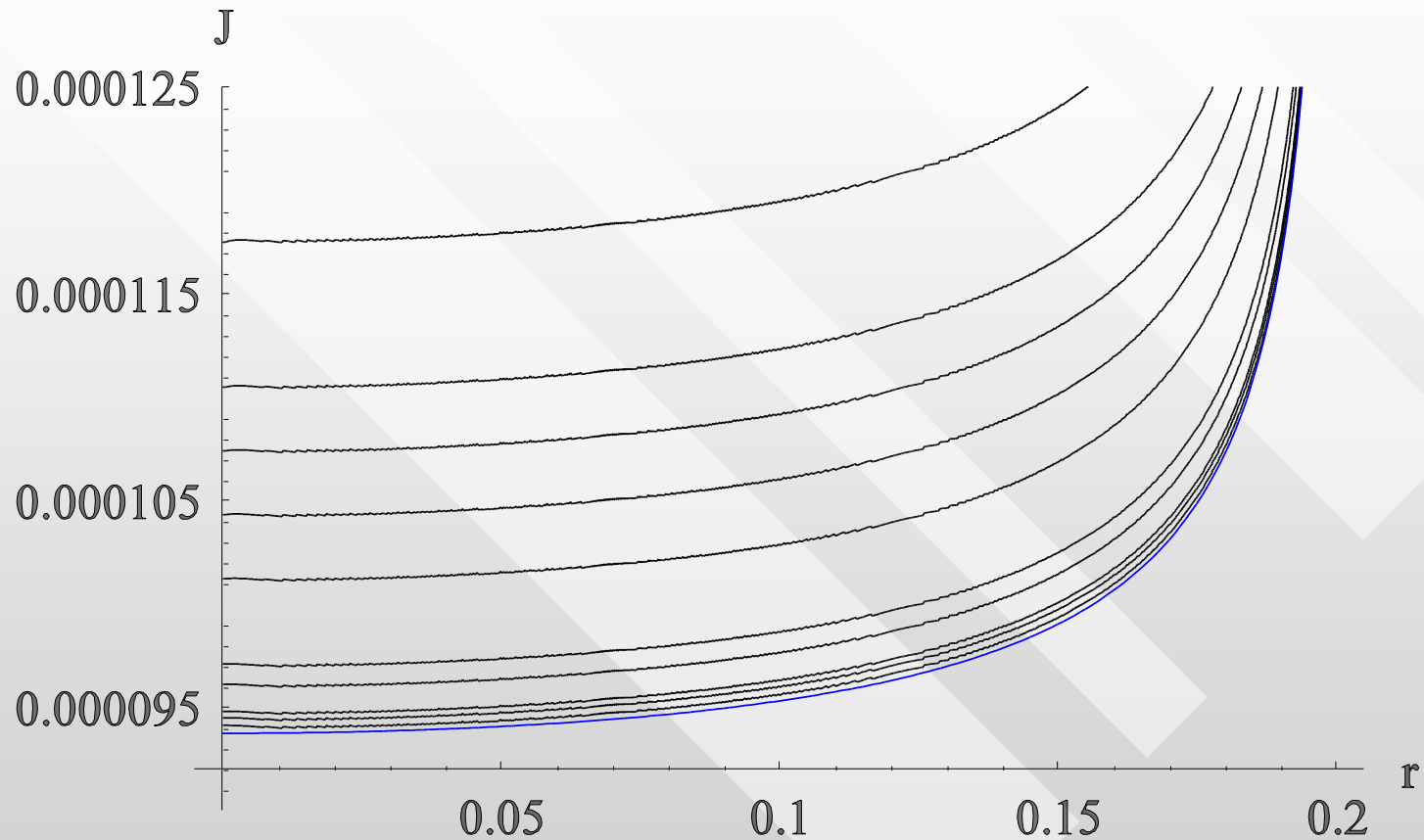


Моделирование испарения капли

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \Delta u$$

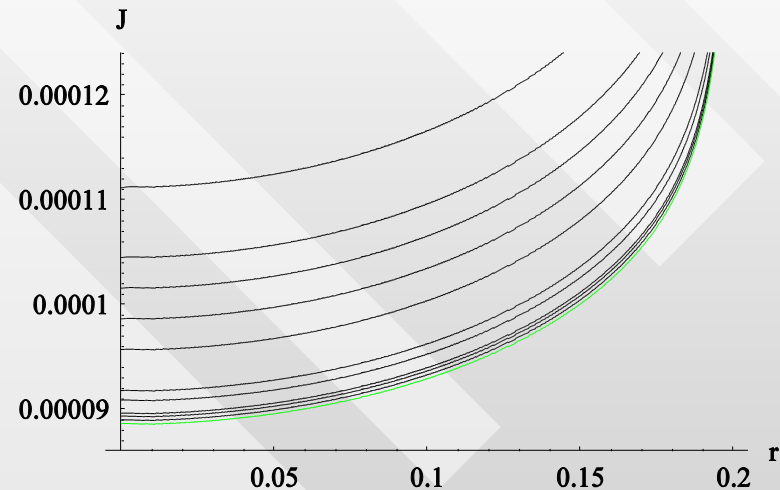
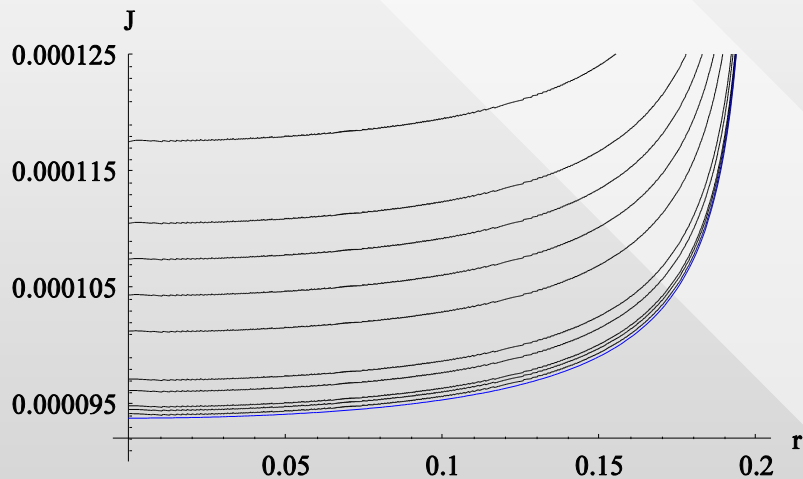
Часто используют приближение $\Delta u = 0$, мотивируя тем, что $t = R^2/D \ll t_{evap}$. На самом деле релаксация к равновесию происходит очень медленно ($\propto 1/\sqrt{t}$), отклонения от стационарности оказываются заметны и даже в конце процесса испарения превышают 1%.

$$J(r, t) = J(r, \infty) \left(1 + \frac{Ar_0}{2\sqrt{Dt}} \right)$$



$t=1, 2, 3, 5, 10, 50, 100, 500, 1000, 4000$ sec.

Nonstationary evaporation for fixed surface for sessile and spherical surfaces



Аналитическое решение

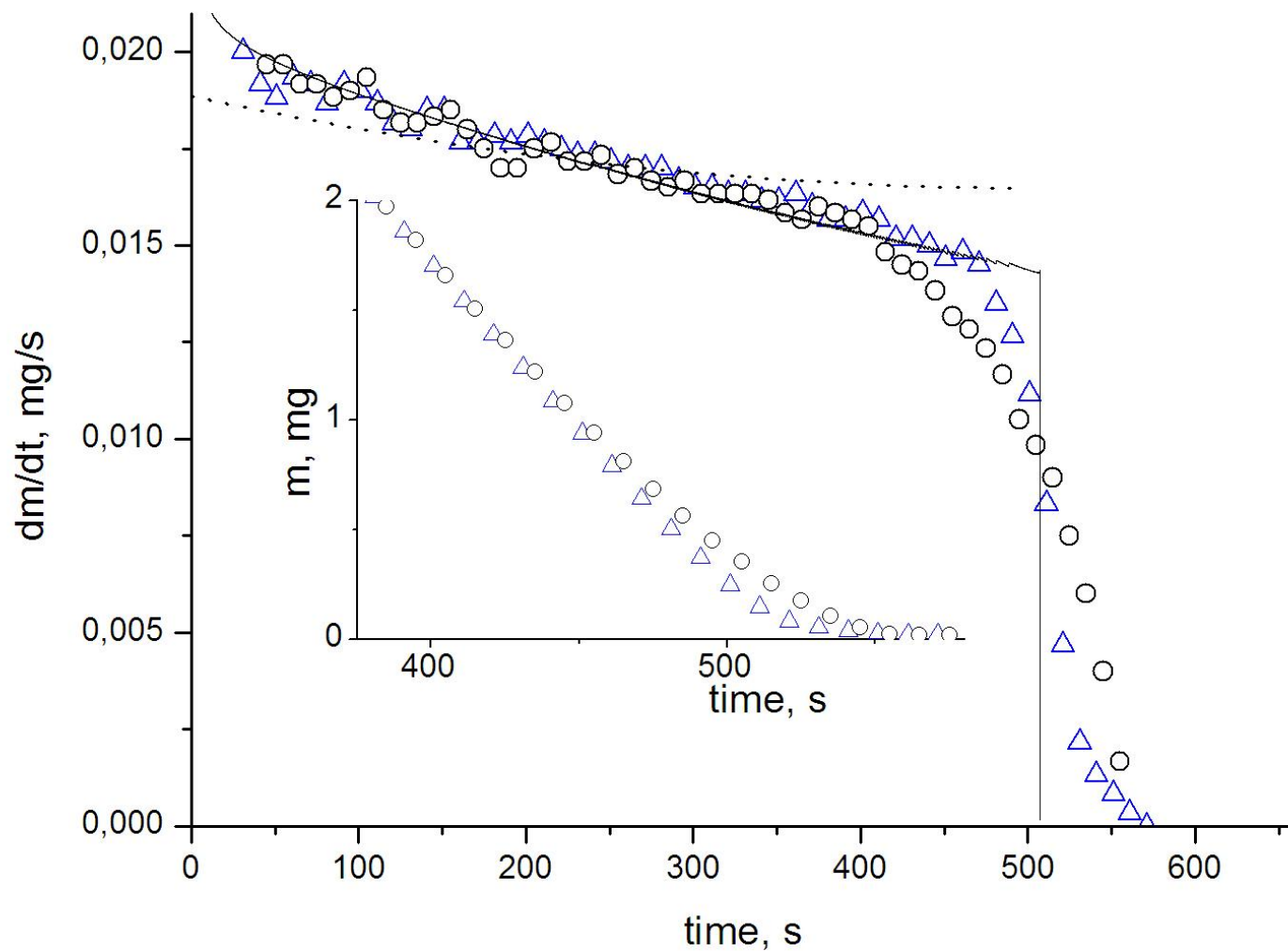
Используя приближение $\Delta u = 0$, а также приближение поверхности капли, близкой к поверхности сферы, пользуясь формулами Deegan et. al. (Phys.Rev.E 62 (2000), 756) Lebedev N.N. (Special Functions and their applications, NJ, 1965) можно найти

$$u(\alpha, \beta) = u_{\infty} + (u_s - u_{\infty}) \sqrt{2(\operatorname{ch} \alpha - \cos \beta)} \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{ch} \theta \tau}{\operatorname{ch} \pi \tau} \frac{\operatorname{ch} \beta \tau}{\operatorname{ch}(\pi - \theta) \tau} P_{-1/2+i\tau}(\operatorname{ch} \alpha) d\tau.$$

$$r = \frac{R \sinh \alpha}{\cosh \alpha - \cos \beta}, \quad z = \frac{R \sin \beta}{\cosh \alpha - \cos \beta}.$$

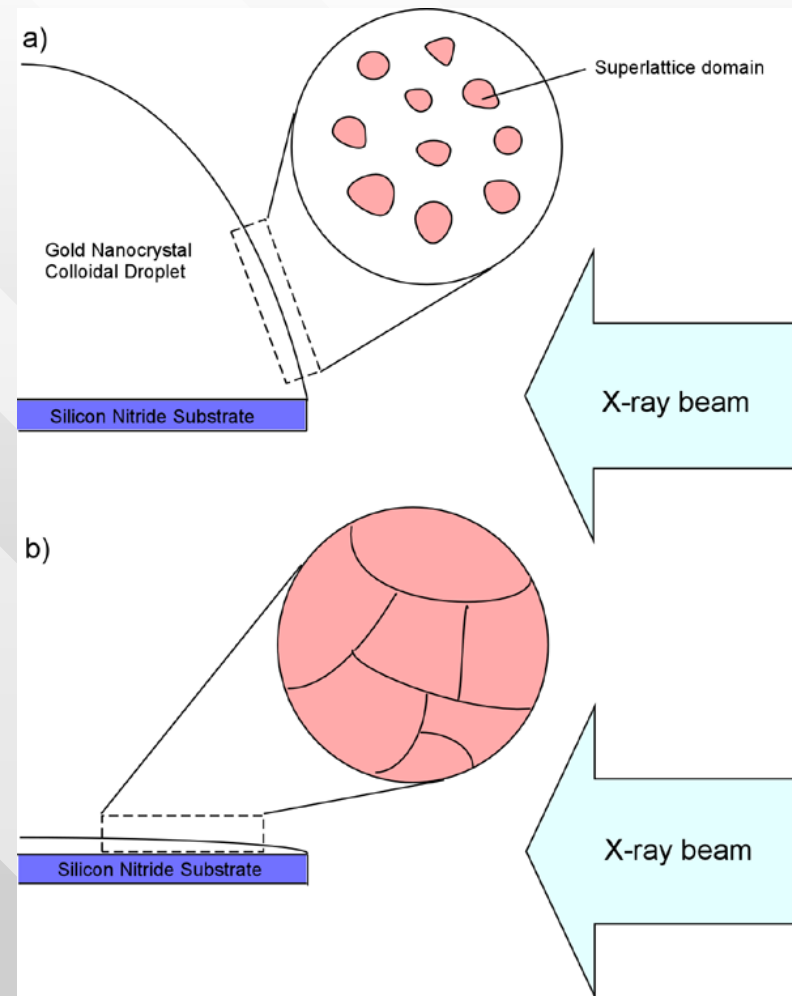
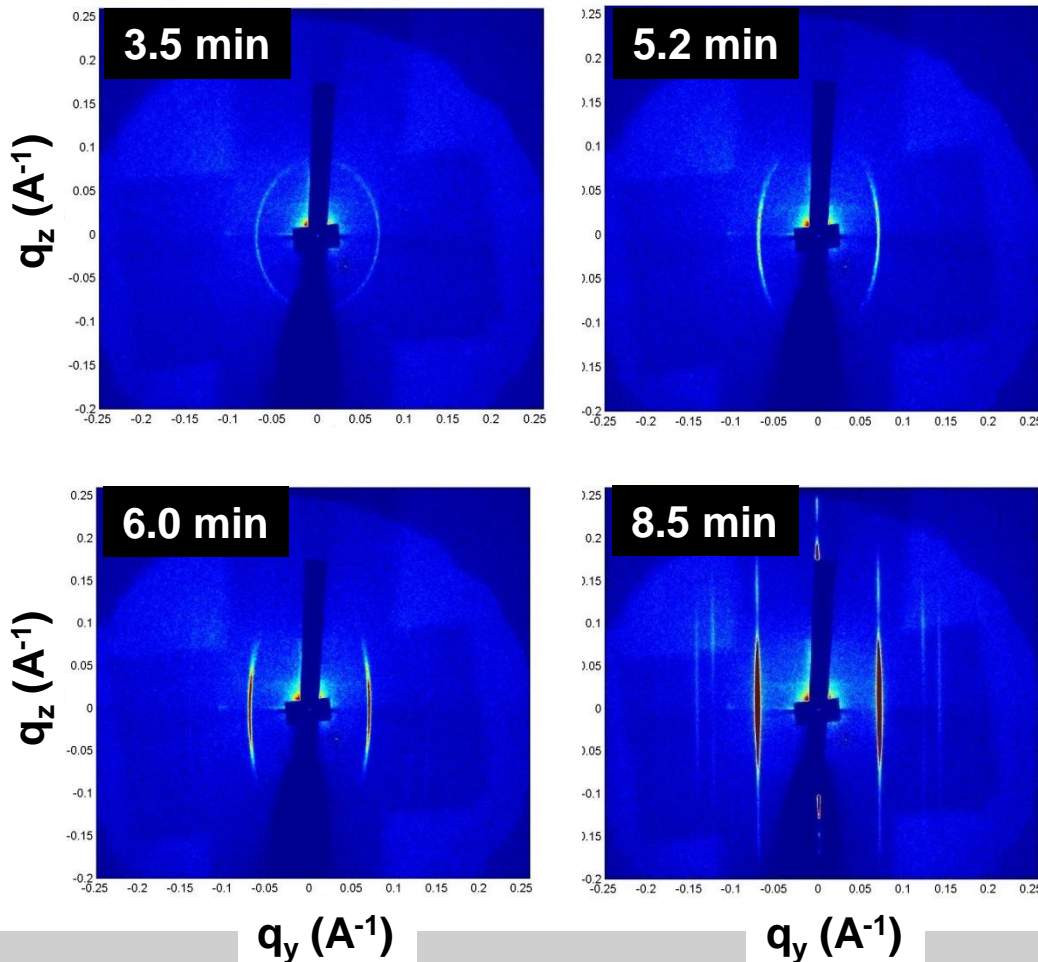
$$J(\xi, \theta) = |D \nabla u| = \frac{Du_s}{R} \left(\frac{\sin \theta}{2} + \sqrt{2}(x(\xi, \theta) + \cos \theta)^{3/2} \times \right. \\ \left. \times \int_0^{\infty} \frac{\cosh \theta \tau}{\cosh \pi \tau} \tau \tanh(\pi - \theta) \tau P_{-1/2+i\tau}(x(\xi, \theta)) d\tau \right). \\ m = \frac{\rho \pi R^3}{6} \tan \frac{\theta}{2} \left(3 + \tan^2 \frac{\theta}{2} \right), \quad \left| \frac{dm}{dt} \right| = 2\pi R^2 \int_0^1 \frac{\xi J(\xi, \theta) d\xi}{\sqrt{1 - \xi^2 \sin^2 \theta}}.$$

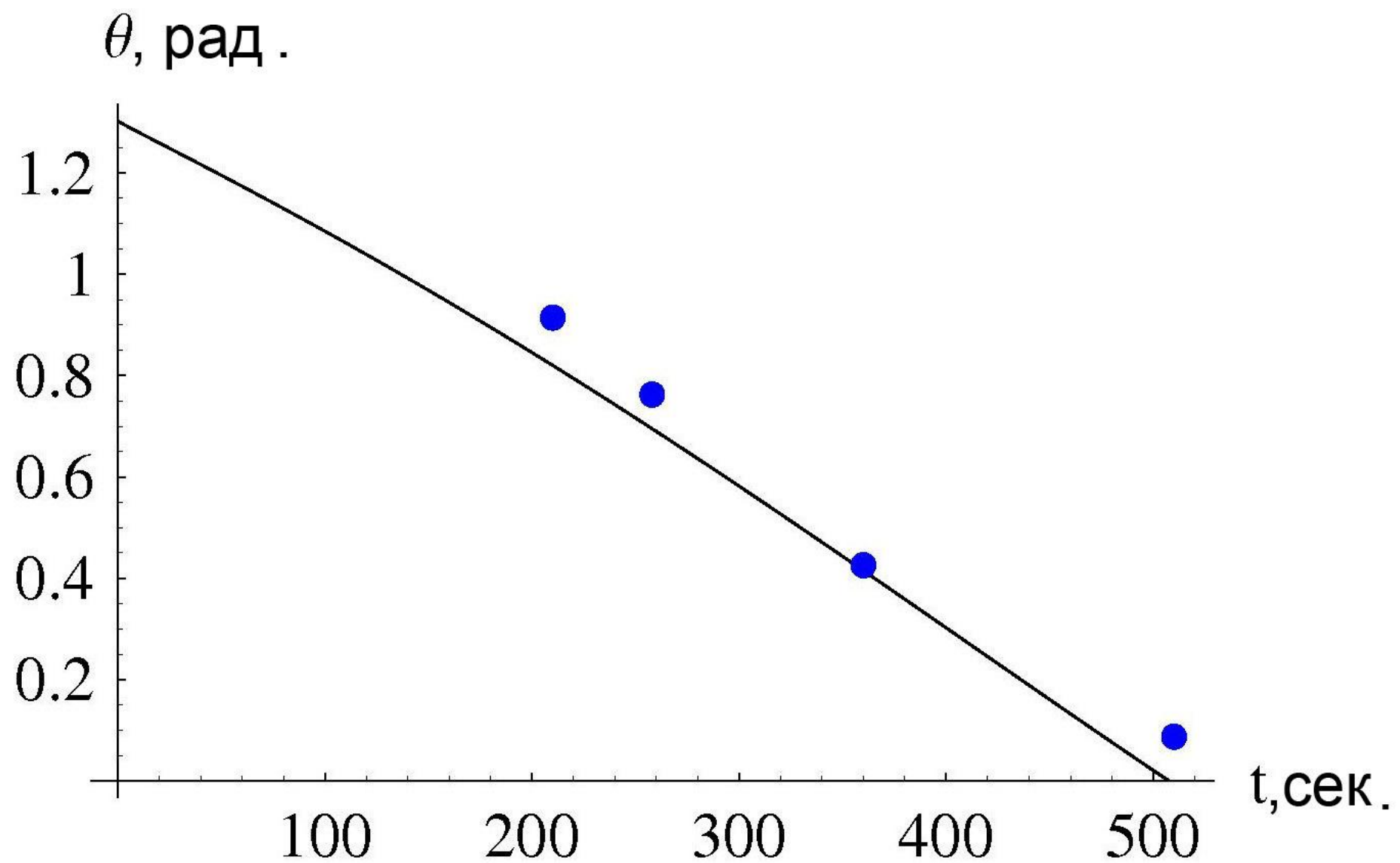
Сравнение с экспериментом



Xiao-Min Lin et al. использовали рассеяние пучка рентгеновских частиц на малые углы, чтобы показать, что нанокристаллы образуются на верхней поверхности капли

Narayanan, Wang, Lin, *PRL* 93, 135503 (2004).





Гидродинамика и теплопередача

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \cdot \text{grad } p = \nu \cdot \Delta \mathbf{u} \quad (1)$$

$$\text{div } \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla T = \kappa \Delta T \quad (3)$$

Применяя оператор rot к (1), получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nu \Delta \mathbf{u}.$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \gamma(r, z) + (\mathbf{u} \nabla) \gamma(r, z) = \nu \left(\Delta \gamma(r, z) - \frac{\gamma(r, z)}{r^2} \right),$$

where $\gamma(r, z) = \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial r};$

Вводится функция тока ψ такая что

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial z} &= r u_r \\ \frac{\partial \psi}{\partial r} &= -r u_z\end{aligned}$$

Тогда автоматически выполняется условие $u_r/r + \partial u_r/\partial r + \partial u_z/\partial z = 0$

$$\Delta \psi = r\gamma - 2u_z.$$

$$\tilde{\Delta} \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = r \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) = r\gamma.$$

Разностные формулы:

$$\begin{aligned}u_{x,i,j+1/2} &= \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{ih_x h_y} \\ u_{x,i+1,j+1/2} &= \frac{\psi_{i+1,j+1} - \psi_{i+1,j}}{(i+1)h_x h_y} \\ u_{y,i+1/2,j} &= \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j}}{(i+1/2)h_x^2} \\ u_{y,i+1/2,j+1} &= \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i+1,j+1}}{(i+1/2)h_x^2}\end{aligned}$$

1. Диффузия пара в пространстве вне капли

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \Delta u \quad (1)$$

Граничные условия: на поверхности капли $u = u_s$, вдали от капли $u = 0$, на осях $r = 0$ и $z = 0$ имеем $\partial u / \partial r = 0$ и $\partial u / \partial z = 0$ соответственно.

Сеточный метод: Неявная схема, неравномерная решетка, изменяемый шаг по времени, интерполяция величин на границе капли.

5. Вычисление массы испарившегося за малый промежуток времени пара и обновление кривой поверхности капли

2. Вычисление ψ и скоростей u внутри капли

$$\tilde{\Delta}\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = r\gamma(r, z) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = ru_r \quad (2)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = -ru_z \quad (3)$$

Граничные условия: $\psi = 0$ на всех границах: на поверхности капли и на осях $r = 0$ и $z = 0$.

Сеточный метод: Неявная схема, равномерная решетка, граничная интерполяция на поверхности.

3. Вычисление γ внутри капли

$$\frac{\partial}{\partial t}\gamma + (\mathbf{u}\nabla)\gamma = \nu \left(\Delta\gamma - \frac{\gamma}{r^2} \right) \quad (1)$$

Граничные условия: $\gamma = 0$ при $r = 0$; $\gamma = \partial u_r / \partial z$ при $z = 0$; $\gamma = \partial\sigma / (\eta\partial\tau) + 2u_\tau(\partial\phi) / (\partial\tau)$ на поверхности капли, где $\partial\sigma / \partial\tau = -\sigma'\partial T / \partial\tau$ – производная поверхностного натяжения вдоль поверхности капли; поверхностное натяжение σ на поверхности капли связано с температурой T по экспериментальной формуле $\sigma(T) = \sigma_0 - \sigma'(T - T_0)$; для толуола $\sigma_0 = \sigma(T_0) = 28.3049 \text{ g/sec}^2$, $\sigma' = 0.11867 \text{ g/sec}^2$.

Сеточный метод: Явная схема, равномерная решетка, граничная интерполяция на поверхности.

4. Вычисление T внутри капли

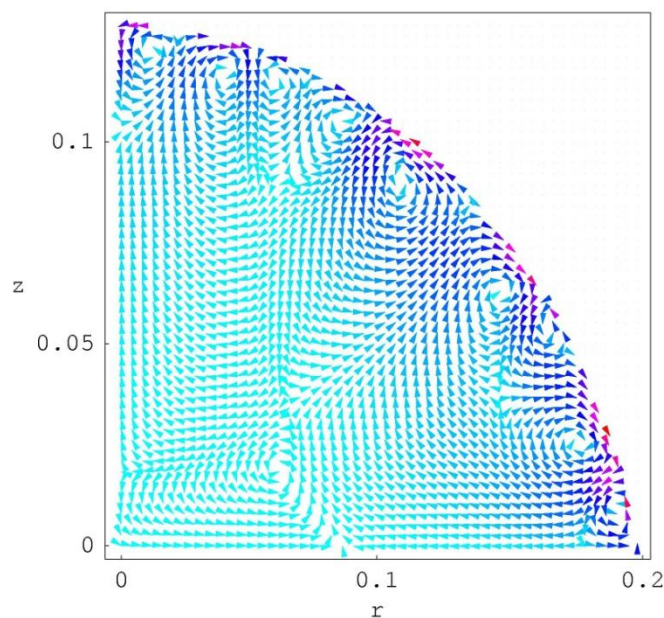
$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla T = \kappa \Delta T \quad (1)$$

Граничные условия: $\partial T / \partial r = 0$ при $r = 0$; $T = T_0$ при $z = 0$; $\partial T / \partial n = -Q_0(r)/k = -LJ(r)/k$ на поверхности капли, где $Q_0(r)$ – скорость потери тепла с единичной площади поверхности капли, которая найдена при моделировании испарения, \vec{n} – нормаль к поверхности капли.

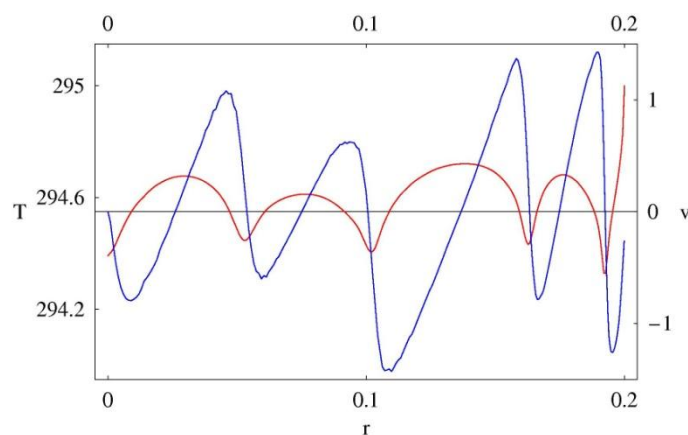
Сеточный метод: Явная схема, равномерная решетка, граничная интерполяция на поверхности.

Дорожка приповерхностных вихрей на ранней стадии испарения.

z



скорости

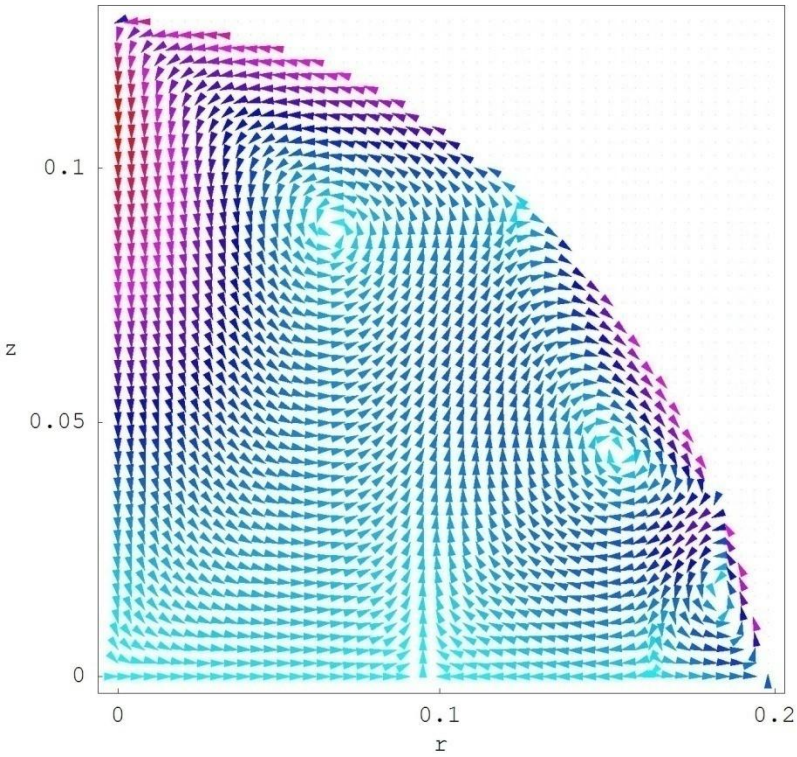


температура
вдоль
поверхности
и скорости

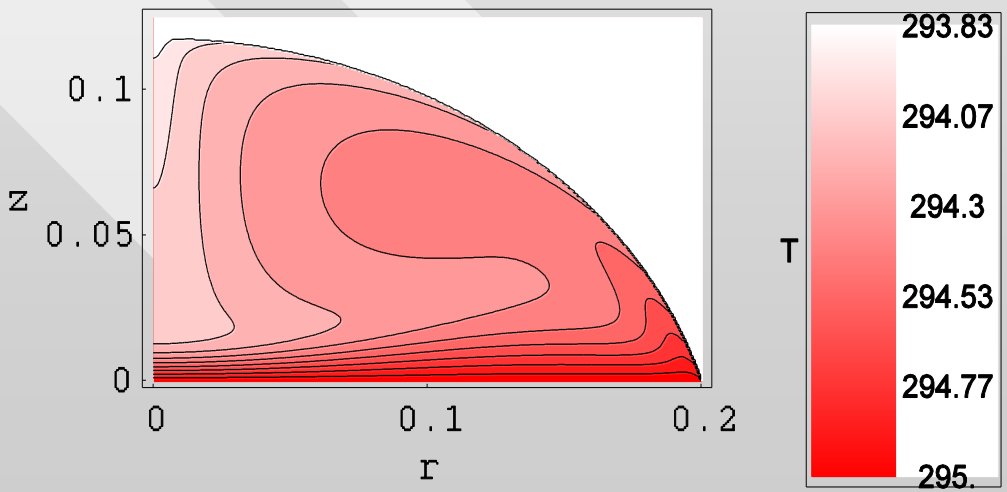
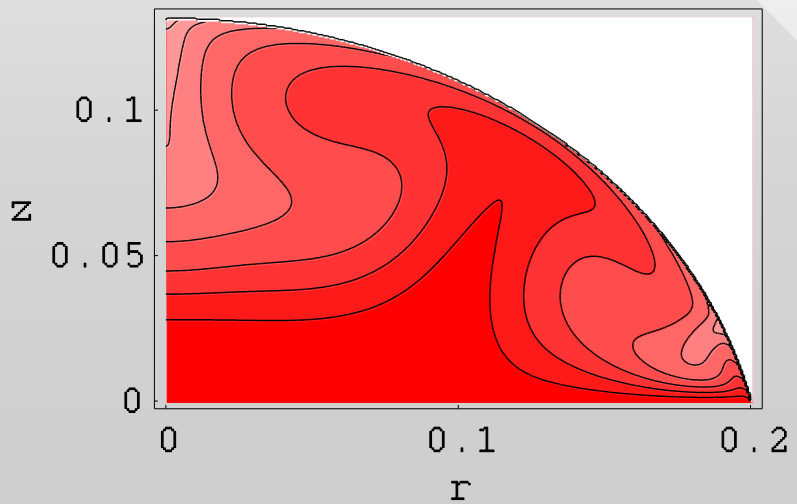
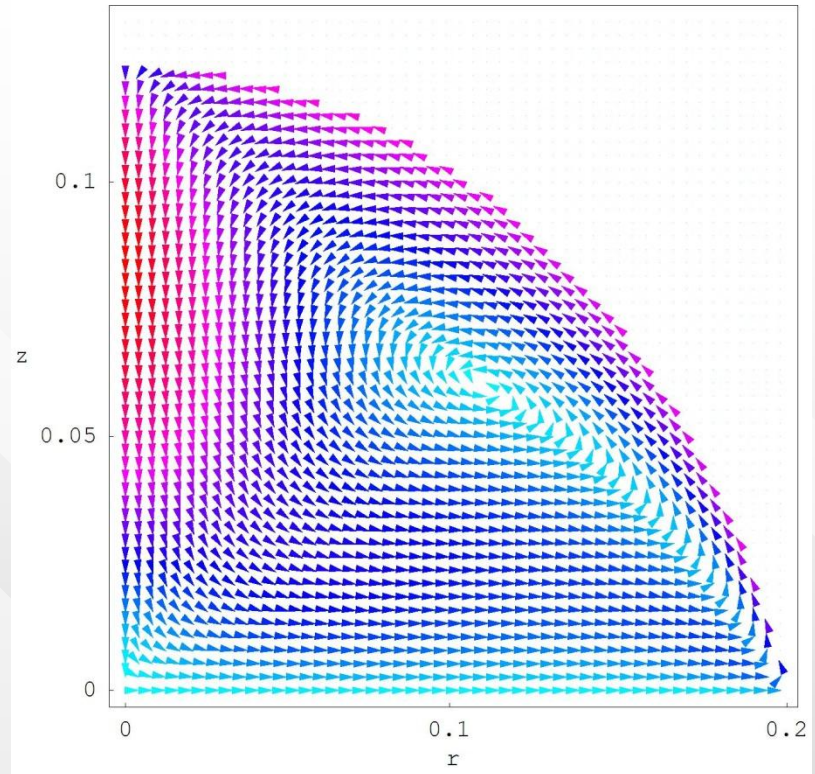
r

Распределения при $t=0.5$ с, $t=30$ с.

time = 0.5 sec.



time = 30. sec.



Conclusions:

- An approach to study the evaporation and fluid dynamics of a sessile drop of capillary size is developed, based on joint solution of diffusion equation for vapor, thermal conduction and Navier-Stokes equations. Both convective terms and explicit time dependence were taken into account in the equations.
- The dynamics of Marangoni convection in the drop is obtained and studied in detail. Several dynamical stages of the convection characterized by different number of vortices in the drop, are found.
- A street of near-surface vortices on the early stage of the Marangoni convection is obtained. Stability of dynamics with respect to perturbations of initial conditions is identified.
- The experimental and simulation results for the time dependent drop evaporation rate agree well. The calculated evolution of the contact angle agrees with the results of [4].
- The time-dependent corrections to the stationary local evaporation rates decay as $1/\sqrt{t}$ with time and can be noticeable
- Effects of deviations of the drop shape from a spherical cap are analyzed