#### КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2012 Т. 4 № 4 С. 811–825

Ки&М)

УДК: 519.8

# Сравнение квазистационарной и нестационарной математических моделей течений в испаряющейся капле

К. С. Колегов<sup>1,а</sup>, А. И. Лобанов<sup>2,b</sup>

 <sup>1</sup>Астраханский филиал ФБОУ ВПО «ВГАВТ», Россия, 414000, г. Астрахань, ул. Никольская, 6/14
 <sup>1</sup>Астраханский государственный университет, Россия, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а
 <sup>2</sup>ФБОУ ВПО «МГАВТ»,
 Россия, 117105, г. Москва, Новоданиловская наб., д. 2, корп. 1
 <sup>2</sup>ФГАОУ ВПО «МФТИ (ГУ)»
 Россия, 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9
 <sup>2</sup>Астраханский государственный университет, Россия, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а
 <sup>2</sup>ФГБОУ ВПО «КБГУ»
 Россия, 360004, Кабардино-Балкарская Республика, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173

E-mail: <sup>a</sup> k\_k\_s\_87@mail.ru, <sup>b</sup> alexey.i.lobanov@gmail.com

Получено 26 октября 2012 г., после доработки 30 ноября 2012 г.

Выведены основные уравнения нестационарной математической модели одномерных (осредненных по высоте капли) течений в высыхающей капле, покоящейся на твердом основании. В результате численных расчетов показано, что процессы в капле определяются законом испарения и значением капиллярного числа. При малых значениях капиллярного числа результаты, полученные с использованием нестационарной модели, мало отличаются от полученных при квазистационарном описании явления. При больших значениях капиллярного числа необходимо пользоваться полной формой записи уравнения.

Ключевые слова: испаряющаяся капля, одномерное уравнение движения, нестационарная модель

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект 1.588.2011 «Математическое моделирование процессов самоорганизации в системах микро- и наночастиц».

© 2012 Константин Сергеевич Колегов, Алексей Иванович Лобанов

# Comparing of a quasi-steady and non-steady mathematical models of fluid flow in evaporating drop

# K. S. Kolegov<sup>1</sup>, A. I. Lobanov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Astrakhan Branch of the Volga State Academy of Water Transport, 6/14 Nikolskaya street, Astrakhan, 414000, Russia;

<sup>1</sup>Astrakhan State University, 20a Tatisheva street, Astrakhan, 414056, Russia

<sup>2</sup>Moscow State Academy of Water Transport, 2 Novodanilovskaya Naberezhnaya street, Moscow, 117105, Russia

<sup>2</sup>Moscow Physics Technical Institute (State University), 9, Instituckii pereulok, Dolgoprudnii, Moscow State, 141700, Russia

<sup>2</sup>Astrakhan State University, 20a Tatisheva street, Astrakhan, 414056, Russia

<sup>2</sup> Kabardino-Balkarian State University, 173, Chernishevskyi street, Kabardino-Balkarian republic, 360004, Russia

**Abstract.** — The work aims to study the admissibility of the quasi-steady approach application in fluid flow modeling inside of evaporating drops placed on a solid horizontal substrate. Non-steady model has been developed to compare results with a quasi-steady model. For the first time one-dimensional motion equation of fluid in a drop is proposed from a momentum conservation law. We have shown that inward flow is possible on the edge of drop in one-dimensional models. It may be explained by existence of stagnation points.

Keywords: evaporating drop, one-dimensional motion equation, non-steady-state model

Citation: Computer Research and Modeling, 2012, vol. 4, no. 4, pp. 811-825 (Russian).

[Ки&М]

### Введение

В последнее время исследование процессов в испаряющихся каплях интенсивно проводится в связи с многочисленными технологическими и биологическими приложениями. Среди технологических приложений — получение наноструктур [Helseth, Fischer, 2003; Govor et al., 2004], производство микро- и наноструктурированных поверхностей [Harris et al., 2007; Xu et al., 2006]. Среди медицинских и биологических приложений отметим тестирование новых лекарственных средств [Takhistov, Chang, 2002], методы медицинской диагностики [Шабалин, Шатохина, 2000; Шатохина, Шабалин, 2003], экспериментальное изучение механических свойств молекул ДНК [Abramchuk et al., 2001].

Капля представляет собой открытую систему. С ее поверхности происходит непрерывное испарение растворителя, которое вызывает перераспределение масс внутри капли. Возникает течение жидкости. По мнению авторов [Deegan et al., 1997; Deegan et al., 2000] такое течение является причиной возникновения эффекта кофейных колец. Заметим, что кольцеобразные структуры в открытых системах могут формироваться и в отсутствии потоков вещества только за счет диффузии и химических реакций (кольца Лизеганга) [Chernavskii et al., 1991]. В открытых системах с переменной массой за счет сочетания действия различных механизмов могут образовываться сложные структуры в виде белковых валиков на переферии капли [Яхно, Яхно, 2009; Tarasevich et al., 2011].

Для математического моделирования процессов в испаряющейся капле применяются различные подходы. Как правило, авторы рассматривают (без детального вывода уравнений модели) те или иные следствия системы уравнений Навье–Стокса.

В [Deegan et al., 2000] предложена математическая модель осредненного по высоте капли одномерного (радиального) движения жидкости. При этом значение локальной скорости такого осредненного течения находится не путем решения уравнений движения, а из уравнения неразрывности. Авторы модели [Deegan et al., 2000] на основе результатов эксперимента положили форму капли сферическим сегментом, так как отличия в форме от сферического сегмента в ходе всего процесса были незначительны. Такое предположение модели находится в противоречии с открытым характером системы. Модель [Deegan et al., 2000] не может объяснить причину возникновения течения, так как давление постоянно по радиусу капли.

Для описания испарения в модели [Deegan et al., 2000] рассматривается диффузия молекул жидкости в газе вблизи поверхности раздела сред. Процесс предполагается стационарным и описывается уравнением Лапласа. Для определения потока вещества и решения уравнения Лапласа в области сложной формы авторами использовалась электростатическая аналогия. При решении уравнения Лапласа возникает особенность вблизи точки трехфазной границы. Плотность потока пара там обращается в бесконечность. На краю капли скорость, как следует из уравнений модели, должна обращаться в бесконечность. Расходимость скорости — следствие расходимости плотности потока пара. Данный подход, несмотря на некоторые качественные сходства с результатами эксперимента, обладает очевидными недостатками и практически неприменим для описания процессов в каплях.

Класс математических моделей испарения капли с осредненными по высоте величинами был предложен Ю. Ю. Тарасевичем с соавторами в [Tarasevich et al., 2011; Vodolazskaya, Tarasevich, 2011]. Они опираются на двумерные квазистационарные описания Фишера [Fischer, 2002]. В модели Фишера испарение с поверхности считается медленным, уравнение неразрывности определяет профиль капли. Время в искомые функции входит как параметр.

Одномерные модели [Tarasevich et al., 2011; Vodolazskaya, Tarasevich, 2011] используют систему уравнений Фишера, в которой вместо горизонтальной компоненты скорости использовано значение интегрального среднего по высоте капли. Для рассмотрения процессов испарения Фишер рассматривает три аппроксимационных формулы. Аппроксимации для плотности потока пара *J* на краю капли стремятся к нулю, так как испаряется обычно чистый растворитель. Ввиду того, что в процессе испарения массовая доля растворителя на переферии капли уменьшается, уменьшается и плотность потока пара. Модель Фишера качественно описывает эксперименты Дигана [Deegan et al., 2000].

Большой интерес вызывают границы допустимости квазистационарного подхода. В данной работе предлагается одномерная нестационарная модель капли чистого растворителя, результаты которой качественно сравниваются с результатами из модели Фишера.

#### Вывод уравнений модели

Для описания движения жидкости в системе с переменной массой выведем уравнение осредненного по высоте капли одномерного движения. Капля покоится на непроницаемой подложке. Радиус основания капли *R* постоянный. Физически это означает, что система находится в режиме пиннинга.

Сначала рассмотрим баланс массы. Выделим элементарный объем  $d\Omega$  с границами 1, 2, 3 и 4 (рис. 1). За время  $\Delta t$  масса жидкости в этом объеме изменится за счет изменения самого объема, вследствие испарения

$$\Delta m = 2\pi r \,\delta r \left( h(r, t + \Delta t) - h(r, t) \right) \rho,\tag{1}$$

где h = h(r, t) — высота капли, а  $\rho$  — плотность жидкости. Изменение массы  $\Delta m$  вызвано течением жидкости через границы 2 и 4, а также испарением с границы 3. Граница 1 — подложка, она непроницаема для жидкости. Следовательно, изменение массы элементарного объема  $d\Omega$  за время  $\Delta t$  составит

$$\Delta m = 2\pi \left( (r+\delta r) h(r+\delta r,t) u(r+\delta r,t) - rh(r,t) u(r,t) - \frac{J(r,t)}{\rho} r \, dl \right) \rho \, \Delta t, \tag{2}$$

где  $dl = l \,\delta r$  — длина границы 3,  $l = \sqrt{1 + \left(\frac{\delta h}{\delta r}\right)^2}$ , J(r, t) — плотность потока пара, u(r, t) — осредненная по высоте капли скорость течения. Приравниваем друг другу (1) и (2), делим на  $2\pi r \,\delta r \,\rho \,\Delta t$ , получаем

$$\frac{h(r,t+\Delta t)-h(r,t)}{\Delta t} = -\frac{1}{r} \frac{(r+\delta r)h(r+\delta r,t)u(r+\delta r,t)-rh(r,t)u(r,t)}{\delta r} - \frac{J(r,t)l}{\rho}.$$
(3)

Предельный переход в (3) приводит к уравнению неразрывности

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rhu)}{\partial r} = -\frac{Jl}{\rho}.$$
(4)

Такой вид уравнения неразрывности без стоков массы характерен для задач гидравлики. Уравнение (4) совпадает с уравнением, использованным Фишером и Диганом с соавторами [Deegan et al., 2000; Fischer, 2002].

Рассмотрим баланс импульса в выделенном элементарном объеме  $d\Omega$  (рис. 1). За время  $\Delta t$  изменение импульса в объеме  $d\Omega = 2\pi r \,\delta r \,h(r,t)$  будет  $2\pi r \,\delta r \,\rho(h(r,t+\Delta t) \,u(r,t+\Delta t) - h(r,t) \,u(r,t))$ . При выводе уравнения импульса предполагается, что плотность раствора при испарении меняется незначительно, ее можно считать постоянной. Поток импульса через поверхность 2 будет  $2\pi r\rho \,u(r+\delta r,t) \,h(r+\delta r,t) \,u(r+\delta r,t) \,\Delta t$ . Поток импульса через 4 будет  $-2\pi r\rho \,u(r,t) \,h(r,t) \,u(r,t) \,\Delta t$  (знак учитывает направление внешней нормали). Поток импульса через границу 3 будет  $2\pi r \,dl \,u(r,t) \,J(r,t) \,\Delta t$ .

\_\_ КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ \_\_\_



Рис. 1. К выводу основных уравнений модели

Полное изменение импульса в расматриваемом элементарном объеме складывается из доли полного импульса, вмороженного в течение и переносимого конвективным потоком, из доли полного импульса, выносимого из объема за счет испарения, и работой упругих сил. Пусть  $\Phi$  – сила, действующая на единицу площади поверхности. Тогда работа этих сил составит

$$2\pi(r+\delta r)h(r+\delta r,t)\Phi(r+\delta r,t) - 2\pi r h(r,t)\Phi(r,t).$$

Общий баланс импульса запишется в виде

$$2\pi r \,\delta r \,\rho(h(r,t+\Delta t) \,u(r,t+\Delta t) - h(r,t) \,u(r,t)) = -2\pi r \,\rho \,u(r+\delta r,t) \,h(r+\delta r,t) \,u(r+\delta r,t) \,\Delta t + 2\pi r \,\rho \,u(r,t) \,h(r,t) \,u(r,t) \,\Delta t - 2\pi r \,\delta r \,dl \,J(r,t) \,u(r,t) \,\Delta t + 2\pi (r+\delta r) \,h(r+\delta r,t) \,\Phi(r+\delta r,t) \,\Delta t - 2\pi r \,h(r,t) \,\Phi(r,t) \,\Delta t.$$

Разделив левую и правую части на  $2\pi rh \, \delta r \, \Delta t$ , переходим к пределу при  $\delta r$  и  $\Delta t \to 0$ , получаем

$$\frac{\rho}{h}\frac{\partial(hu)}{\partial t} = -\frac{\rho u}{rh}\frac{\partial(rhu)}{\partial r} + \frac{1}{rh}\frac{\partial rh\Phi}{\partial r} - \frac{u}{h}Jl.$$

Отсюда следует

$$\frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{u}{r}\frac{\partial(rhu)}{\partial r} = \frac{1}{\rho r}\frac{\partial(rh\Phi)}{\partial r} - \frac{uJl}{\rho}.$$

Это уравнение можно переписать в виде

$$u\frac{\partial h}{\partial t} + h\frac{\partial u}{\partial t} + hu\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r}\frac{\partial(rhu)}{\partial r} = \frac{1}{\rho r}\frac{\partial(rh\Phi)}{\partial r} - \frac{uJl}{\rho}.$$

С учетом (4) уравнение движения примет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{\rho rh}\frac{\partial(rh\Phi)}{\partial r}.$$

Уточним теперь вид правой части. Рассмотрим компоненты тензора вязких напряжений в цилиндрических координатах. Так как в рассматриваемом случае течение одномерно и азимутальная и вертикальная проекции скорости равны нулю, то внедиагональные элементы тензора вязких напряжений равны нулю. Таким образом имеем

$$\begin{split} \tau_{rr} &= -P + \eta \frac{\partial u_r}{\partial r} = -P + \eta \frac{\partial u}{\partial r}, \\ \tau_{\varphi\varphi} &= -P + \eta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_{\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{u_r}{r} \right) = -P + \eta \frac{u}{r}, \\ \tau_{zz} &= -P + \eta \frac{\partial u_z}{\partial z} = -P, \end{split}$$

где  $\eta$  — коэффициент динамической вязкости. С учетом вида тензора вязких напряжений уравнение импульса примет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \tau_{rr}}{\partial r} + (\tau_{rr} - \tau_{\varphi\varphi}) \frac{1}{rh} \frac{\partial (rh)}{\partial r} \right)$$

Окончательно имеем

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{v}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) - \frac{vu}{r^2} + vr\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{u}{r}\right)\frac{\partial\ln h}{\partial r},\tag{5}$$

где  $v = \frac{\eta}{\rho}$  — коэффициент кинематической вязкости. Заметим, что из (5) следуют асимптотический характер поведения скорости на переферии и в центре капли. Вблизи центра при  $r \to 0$  получаем  $u \sim r$ , а на краю при  $r \to R$  имеем  $u \sim \lim_{h\to 0} \left(\frac{\partial \ln h}{\partial r}\right)^{-1}$ .

Система уравнений (4), (5) составляет нестационарную математическую модель испарения с учетом осредненных по высоте капли величин.

Для обезразмеривания уравнений за основные величины с независимой размерностью выберем радиус основания капли  $R_c$ , плотность жидкости  $\rho$ , характерное значение скорости  $V_c = \frac{\eta}{\rho R_c}$  (вязкая скорость). С учетом выбранных масштабов введем характерный масштаб времени  $T_c = \frac{R_c}{V_c} = \frac{\rho R_c^2}{\eta}$ . Выразим через основные размерные величины давление  $P = \rho V_c^2 \tilde{P}$ , плотность потока пара  $J = J_c \tilde{J} = \frac{k\Delta T}{Lh_c} \tilde{J}$ , где k — теплопроводность жидкости,  $\Delta T$  — разность между температурой основания и температурой насыщения пара, L — теплота парообразования. Входящие в уравнения размерные величины тогда будут представлены в виде  $u = \tilde{u}V_c$ , текущий радиус  $r = \tilde{r}R_c$ , высота капли  $h = \tilde{h}R_c$ , время  $t = T_c\tilde{t}$  (знаком  $\tilde{t}$  обозначены безразмерные величины). С учетом выбранных характерных параметров уравнение неразрывности примет безразмерный вид

$$\frac{\partial \dot{h}}{\partial \tilde{t}} + \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial (\tilde{r}h\tilde{u})}{\partial \tilde{r}} = -E\tilde{J}l,\tag{6}$$

где E — безразмерный параметр, равный  $\frac{J_c \rho R_c}{\eta}$ . При том же выборе масштабов уравнение движения (5) запишется в виде

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{r}} + \left(\frac{1}{\tilde{r}}\frac{\partial}{\partial \tilde{r}}\left(\tilde{r}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}}\right) - \frac{\tilde{u}}{\tilde{r}^2} + \tilde{r}\frac{\partial}{\partial \tilde{r}}\left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{r}}\right)\frac{\partial\ln\tilde{h}}{\partial\tilde{r}}\right).$$
(7)

Для описания движения в испаряющейся капле получена система (6), (7). Для ее замыкания необходимо задать уравнение состояния, то есть зависимость P от искомых функций. В случае чистого растворителя давление может зависеть только от высоты капли, то есть P = P(h).

компьютерные исследования и моделирование \_

Дальнейший анализ свойств модели должен опираться на рассмотрение системы с конкретным уравнением состояния.

В простейшем случае считаем, что форма капли слабо отличается от сферического сегмента и выражение для давления может быть получено из уравнения Юнга–Лапласа при известном постоянном коэффициенте поверхностного натяжения. Радиус кривизны капли в этом случае легко вычисляется, и в качестве уравнения состояния используем выражение

$$\tilde{P} = -\frac{1}{\operatorname{Ca}} \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial \tilde{r}} \right)$$

где Ca =  $\frac{\eta^2}{\sigma \rho R_c}$  — капиллярное число, а  $\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения. С учетом выбранного способа замыкания модели для расчетов используется следствие (7)

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} = \frac{1}{\operatorname{Ca}}\frac{\partial}{\partial \tilde{r}}\left(\frac{1}{\tilde{r}}\frac{\partial}{\partial \tilde{r}}\left(\tilde{r}\frac{\partial \tilde{h}}{\partial \tilde{r}}\right)\right) + \frac{1}{\tilde{r}}\frac{\partial}{\partial \tilde{r}}\left(\tilde{r}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}}\right) - \frac{\tilde{u}}{\tilde{r}^2} + \tilde{r}\frac{\partial}{\partial \tilde{r}}\left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{r}}\right)\frac{\partial\ln\tilde{h}}{\partial \tilde{r}}$$

Далее знак ~ опускаем, используются только безразмерные уравнения.

# Результаты расчетов

В случае малого капиллярного числа (С $a \ll 1$ ) для скорости имеем укороченное уравнение, в котором можно пренебречь вязким слагаемым

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{\operatorname{Ca}}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial h}{\partial r}\right)\right).$$
(8)

В [Fischer, 2002] получено выражение для радиальной скорости в предположении, что  $l \approx 1$ . При использовании результатов [Fischer, 2002] можно выписать явное выражение для интегрального среднего

$$u = \frac{1}{\operatorname{Ca}} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial h}{\partial r} \right) \right) \frac{h^2}{3},\tag{9}$$

профиль капли h определяется из уравнения неразрывности (6).

Укороченная система (6),(8) решались численно со значениями параметров Ca = 0.01, 1 и 10, E = 0.01 с тремя модельными законами испарения:

$$J = \frac{1 - \exp(-A(r-1)^2)}{K+h},$$
(10)

$$J = \frac{1 - \text{th}(A(r - r_0))}{4h(0, t)},$$
(11)

$$J = \frac{2\exp(-Ar^2)}{h(0,t)}.$$
 (12)

Значения параметров *K*, *A* и  $r_0$  берутся такие же как в [Fischer, 2002]. Также для сравнения решалось уравнение (6) с замыкающим соотношением (9). Для численного решения уравнений использовался пакет Maple. Выбраны следующие граничные условия для системы: из условия осевой симметрии  $\frac{\partial h(0,t)}{\partial r} = 0$ , скорость в центре и на краю капли u(0,t) = u(1,t) = 0, высота капли на краю h(1,t) = 0. Начальный условия: профиль капли  $h(r,0) = (1 - r^2)h(0,0)$ , начальная скорость u(r,0) = 0.

Результаты расчетов показывают, что процессы внутри капли определяются законом испарения и значением капиллярного числа. При малых значениях капиллярного числа (Ca << 1)



Рис. 2. Результаты расчетов динамики испарения при модельном законе (10) в шесть последовательных моментов времени. Параметры расчета: K = 1, A = 250, Ca = 0.01, E = 0.01. На рисунке приведены: (а) профиль капли h(r, t)/h(0, 0) (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (б) плотность потока пара (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (в) осредненная по высоте капли радиальная скорость (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (в) осредненная по высоте капли радиальная скорость (нестационарная модель — пунктир), (г) осредненная по высоте капли радиальная скорость на переферии (врезка к в), (д) осредненное по высоте капли ускорение в нестационарной модели

компьютерные исследования и моделирование

при различных законах испарения результаты, полученные с использованием квазистационарной модели, основанной на результатах Фишера и на основе нестационарной модели с отброшенным вязким слагаемым, заметно различаются только на конечных этапах процесса (рис. 2–4). При этом максимальные различия получаются для определения скорости, форма капли определяется только законом испарения.

На рис. 2 приведены результаты при использовании модельного закона (10), параметры расчета приведены в подрисуночной подписи. На графиках скорости видно, что на периферии капли существует зона противотока (отрицательной скорости), эта зона немного увеличивается со временем. Наличие в течении точек стагнации (то есть точек, в которых скорость течения обращается в ноль) экспериментально было показано в [Deegan et al., 2000]. Результаты расчета находятся в качественном согласии с экспериментальными данными [Нататоt et al., 2011].

В [Тарасевич и др., 2010] зоны стагнации численно не воспроизводились ввиду того, что на переферии капли использовалось асимптотическое приближение для средней по высоте капли радиальной скорости. Сравнение приведенных на рис. 2–5 результатов показывает, что наличие и размеры зоны противотока определяются законом испарения. Точки стагнации получены в результате расчетов в [Barash et al., 2009] с учетом термоконвекции, приводящей к появлению течения Марангони. Учет термоконвекции вызывает необходимость дополнять математическую модель уравнением энергии.

Размеры зоны противотока со временем остаются примерно постоянными, что видно из приведенного графика скорости.

На рис. 3 приведены результаты с модельным законом равномерного испарения капли в зависимости от радиуса, за исключением ее переферии. При таком законе испарения размер зоны противотока практически не меняется, хотя значительно возрастает его скорость. При модельном законе испарения (12) максимальное значение потока пара в центре. Это соответствует экспериментам по испарению капли, закрытой колпаком [Deegan et al., 2000] с отверстием в центре. В этом случае конвективный поток направлен в центр капли (рис. 4). Поток компенсирует потерю массы вещества при испарении.

Рассмотрим теперь умеренные значения капиллярного числа. В случае Ca = 1 (рис. 5) квазистационарная и укороченная нестационарная модели дают существенные различия. Хотя в этом случае вязкие члены не играют заметной роли, существенным становится конвективное слагаемое в (7). Поэтому появляется отличие и в распределении скорости, и в форме капли. Модели начинают демонстрировать качественно разное поведение — если в квазистационарной модели она остается примерно постоянной. Размер этой зоны в нестационарной модели заметно меньше, чем в квазистационарной.

В случае больших значений капиллярного числа (Ca = 10) нельзя пренебречь вязкими слагаемыми в (7), необходимо решать полную систему уравнений. Квазистационарная модель показывает более значительные отличия от нестационарной (рис. 6). Как и в предыдущих случаях для решения нестационарной модели использовалась укороченная система (6), (8). По-видимому, обе применяемые модели, хотя и демонстрируют качественное согласие с экспериментальными данными, не будут давать количественного описания явления из-за отсутствия в укороченном уравнении (8) вязких слагаемых. В этом случае необходимо пользоваться полной формой (7).

# Заключение

Для математической модели высыхающей капли на основе законов сохранения выведены уравнения движения. Уравнение неразрывности носит довольно очевидный характер и совпадает с уравнениями, применяемыми другими авторами. Уравнение движения учитывает специфику задачи и отличается от рассматриваемых в [Fischer, 2002] формой записи вязких слагаемых.



Рис. 3. Результаты расчетов динамики испарения при модельном законе (11) в пять последовательных моментов времени. Параметры расчета: A = 100,  $r_0 = 0.95$ , Ca = 0.01, E = 0.01. На рисунке приведены: (а) профиль капли h(r, t)/h(0, 0) (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (б) плотность потока пара в нестационарной модели, (в) осредненная по высоте капли радиальная скорость (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (г) осредненная по высоте капли радиальная скорость на переферии (врезка к в), (д) осредненное по высоте капли ускорение в нестационарной модели



Рис. 4. Результаты расчетов динамики испарения при модельном законе (12) в пять последовательных моментов времени. Параметры расчета: A = 10, Ca = 0.01, E = 0.01. На рисунке приведены: (а) профиль капли h(r, t)/h(0, 0) (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (б) плотность потока пара в нестационарной модели, (в) осредненная по высоте капли радиальная скорость (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (г) осредненное по высоте капли ускорение в нестационарной модели



Рис. 5. Результаты расчетов динамики испарения при модельном законе (10) в пять последовательных моментов времени. Параметры расчета: K = 1, A = 250, Ca = 1, E = 0.01. На рисунке приведены: (a) профиль капли h(r, t)/h(0, 0) (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (б) плотность потока пара (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (в) осредненная по высоте капли радиальная скорость (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (в) осредненная по высоте капли радиальная скорость (нестационарная корость на переферии (врезка к в), (д) осредненное по высоте капли ускорение в нестационарной модели



Рис. 6. Результаты расчетов динамики испарения при модельном законе (12) в четыре последовательных момента времени. Параметры расчета: A = 10, Ca = 10, E = 0.01. На рисунке приведены: (a) профиль капли h(r, t)/h(0, 0) (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (б) плотность потока пара (усредненное значение для двух моделей), (в) осредненная по высоте капли радиальная скорость (нестационарная модель — сплошная линия, квазистационарная модель — пунктир), (г) осредненное по высоте капли ускорение в нестационарной модели

На основе численных расчетов показано, что динамика процессов в высыхающей капле в рамках рассматриваемого подхода определяется законом испарения (правой частью (6)) и значением единственного безразмерного параметра — капиллярного числа при фиксированной правой части (6). При малых значениях числа Са несущественна роль вязких и капиллярных слагаемых в уравнении движения и все свойства течений определяются давлением Лапласа. В этом случае квазистационарный подход [Fischer, 2002] имеет значительные преимущества перед другими подходами ввиду своей простоты. При умеренных капиллярных числах (~ 1) вязкими эффектами можно пренебречь, но существенны конвективные слагаемые. При капиллярных числах много больших единицы необходимо использовать полное уравнение (7).

#### Благодарности

Авторы выражают искреннюю благодарность д. ф.-м. н., проф. Тарасевичу Ю. Ю. за плодотворные обсуждения различных деталей задачи, практические советы по реализации идей и критическое чтение рукописи, к. ф.-м. н. Бондаренко (Исаковой) О. П. за предоставление литературы по исследуемой тематике, к. ф.-м. н. Водолазской И. В. за ценное обсуждение некоторых деталей работы.

# Список литературы

- *Тарасевич Ю. Ю., Исакова О. П., Кондухов В. В., Авдеева А. В.* Влияние режима испарения на пространственное перераспределение компонентов в испаряющейся капле жидкости на твердой горизонтальной подложке // *ЖТФ.* – 2010. – Т. 80, № 5. – С. 45–53.
- Шабалин В. Н., Шатохина С. Н. Принципы аутоволновой самоорганизации биологических жидкостей // Вестник РАМН. 2000. Т. 3. С. 45–49.
- Шатохина С. Н., Шабалин В. Н. Морфология биологических жидкостей новое направление в клинической медицине // Альманах клинической медицины. — 2003. — № 6. — С. 404–422.
- Яхно Т. А., Яхно В. Г. Основы структурной эволюции высыхающих капель биологических жидкостей // Журнал технической физики. — 2009. — Т. 79, № 8. — С. 133–141.
- Abramchuk S. S., Khokhlov A. R., Iwataki T. et al. Direct observation of DNA molecules in a convection flow of a drying droplet // Europhysics Letters. 2001. Vol. 55, no. 2. Pp. 294–300.
- Barash L. Y., Bigioni T. P., Vinokur V. M., Shchur L. N. Evaporation and fluid dynamics of a sessile drop of capillary size // Physical Review E. 2009. Apr. Vol. 79, no. 4. P. 046301.
- Chernavskii D. S., Polezhaev A. A., Muller S. C. A model of pattern formation by precipitation // Physica D. - 1991. - Vol. 54. - Pp. 160-170.
- Deegan R. D., Bakajin O., Dupont T. F. et al. Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops // Nature. 1997. October. Vol. 389, no. 6653. Pp. 827-829.
- Deegan R. D., Bakajin O., Dupont T. F. et al. Contact line deposits in an evaporating drop // Physical Review E. 2000. Jul. Vol. 62, no. 1. Pp. 756-765.
- *Fischer B. J.* Particle Convection in an Evaporating Colloidal Droplet // *Langmuir.* 2002. Vol. 18, no. 1. Pp. 60–67.
- Govor L. V., Reiter G., Parisi J., Bauer G. H. Self-assembled nanoparticle deposits formed at the contact line of evaporating micrometer-size droplets // Physical Review E. 2004. Jun. Vol. 69, no. 6. P. 061609.
- Hamamoto Y., Christy J. R. E., Sefiane K. Order-of-magnitude increase in flow velocity driven by mass conservation during the evaporation of sessile drops // Phys. Rev. E. - 2011. - May. - Vol. 83. -P. 051602.

825

- Harris D. J., Hu H., Conrad J. C., Lewis J. A. Patterning Colloidal Films via Evaporative Lithography // Physical Review Letters. 2007. Apr. Vol. 98, no. 14. P. 148301.
- Helseth L. E., Fischer T. M. Particle interactions near the contact line in liquid drops // Physical Review E. - 2003. - Oct. - Vol. 68, no. 4. - P. 042601.
- Takhistov P., Chang H. C. Complex Stain Morphologies // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2002. Vol. 41, no. 25. Pp. 6256–6269.
- *Tarasevich Y., Vodolazskaya I., Isakova O.* Desiccating colloidal sessile drop: dynamics of shape and concentration // *Colloid and Polymer Science.* 2011. Vol. 289, no. 9. Pp. 1015–1023.
- *Vodolazskaya I. V., Tarasevich Y. Y.* The model of drying sessile drop of colloidal solution // *Mod. Phys. Lett. B.* – 2011. – Vol. 25, no. 15. – Pp. 1303–1310.
- Xu J., Xia J., Hong S. W. et al. Self-Assembly of Gradient Concentric Rings via Solvent Evaporation from a Capillary Bridge // Physical Review Letters. 2006. Feb. Vol. 96, no. 6. P. 066104.