УЛК 66.021.3:532.5:532.574

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ И МАССООБМЕНА В МИКРОКАНАЛАХ ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ МИКРОРЕАКТОРОВ И МИКРОЭКСТРАКТОРОВ

© 2024 г. А. А. Ягодницына^{а, *}, А. В. Ковалев^а, А. В. Бильский^а

^aИнститут теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия *e-mail: yagodnitsinaAA@gmail.com

Поступила в редакцию 15.12.2023 г. После доработки 27.06.2024 г. Принята к публикации 30.06.2024 г.

Разработка проточных однофазных и двухфазных микрореакторов и микроэкстракторов требует информации о гидродинамике течений в таких устройствах: распределениях скорости и завихренности, эффективности перемешивания, режимах двухфазного течения и их влияния на коэффициент массообмена. В работе представлены исследования локальных гидродинамических характеристик течения и процессов массообмена в микроканалах Т-типа с применением экспериментальных панорамных оптических методик. Для однофазного проточного микрореактора измерены поля скорости и поля концентрации. Показана интенсификация перемешивания при переходе в "захватывающий" режим течения. Для двухфазных микрореакторов с различным набором несмешивающихся жидкостей визуализированы режимы течения, предложен безразмерный комплекс для обобщения экспериментальных данных. Показано, что нейросетевые алгоритмы, обученные на большой выборке, позволяют с высокой точностью (до 98%) предсказывать режимы течения. Исследован снарядный режим течения с наложением внешних пульсаций давления дисперсной фазы. Показано, что поле скорости внутри снаряда меняется периодически, что может быть использовано для интенсификации массопереноса. С помощью метода лазерно-индуцированной флуоресценции с микронным разрешением (micro-LIF) проведено исследование локального массообмена в двухфазном микроэкстракторе.

Ключевые слова: проточные микрореакторы, гидродинамика, массообмен, micro-PIV, micro-PTV, micro-LIF, машинное обучение

DOI: 10.31857/S0040357124030032 EDN: BWKCFJ

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы обусловлена глобальной тенденцией к миниатюризации аппаратов в различных приложениях биомедицинских, химических и энергетических технологий, повышением их безопасности и эффективности. Микроканальные технологии с применением газожидкостных течений и течений несмешивающихся жидкостей интенсивно развиваются и являются реальной альтернативой применению традиционных технологий при производстве эмульсий, проведении химических реакций, сортировке и анализе различных биологических объектов в фармацевтических и медицинских приложениях. Использование двухфазных и двухкомпонентных течений в микроканалах обеспечивает высокие скорости тепло- и массопереноса, позволяет проводить непрерывные и безопасные

химические реакции [1]. В отличие от реакторов периодического действия, которые обеспечивают лишь ограниченный контроль условий синтеза, что приводит к плохой воспроизводимости и сложности масштабирования процесса, использование проточных микрореакторов позволяет осуществлять прецизионный контроль над условиями реакции: температурой, давлением, концентрацией реагентов, временем пребывания. При этом использование двухфазных течений для проведения проточного синтеза в микрореакторах позволяет в значительной степени интенсифицировать процессы массопереноса в связи с циркуляцией скорости внутри снарядов и перемычек за счет возникновения Тэйлоровских вихрей в снарядном режиме течения. Кроме того, в данном режиме течения удается достичь одинаковых времен пребывания для реагентов в микрореакторе.

Гидродинамика является определяющей при разработке проточных однофазных и двухфазных микрореакторов. На настоящий момент в литературе имеется большое количество экспериментальных, аналитических и численных работ, направленных на исследование гидродинамических характеристик двухфазных потоков в микроканалах и явлений тепло- и массопереноса. При проведении химических реакций выбор и контроль режимов течения являются ключевым моментом. Скорость и продукты реакции в значительной степени зависят от режима течения, а его смена или попадание в область переходных (неустойчивых) режимов, очевидно, являются нежелательными. Ряд работ посвящен установлению областей существования различных режимов течения, которые реализуются в зависимости от преобладающих в системе сил [2-4]. Как правило, выделяют два основных вида течений: параллельное/непрерывное, когда жидкости текут совместно (например, кольцевой, параллельный или ручейковый режимы), и сегментированное, когда дисперсная фаза представлена каплями или снарядами, разделенными несущей фазой. С целью обобщения и практического использования экспериментальных данных удобно использовать карты режимов, которые являются двумерным представлением областей существования режимов в размерных или безразмерных координатах (параметрах течения). Для построения карт необходимо классифицировать режимы течения и обозначить области их существования либо границы перехода. Различными авторами были предложены варианты обобщений режимных карт в случае ньютоновских сред [4, 5]. Хотя все эти карты обеспечивают определенную универсальность, для каждой из них существуют экспериментальные данные, не укладывающиеся в предсказанные границы.

Наиболее интересные для практических приложений сегментированные режимы течения, такие как снарядный, капельный и др., были детально изучены в существующей литературе. Предложены модели, описывающие размер снарядов и капель в различных режимах формирования в наиболее распространенных микроканальных геометриях — Т-образном канале и канале с фокусировкой потока [6–8]. Описана топология внутренних течений в снарядах и каплях дисперсной фазы и в перемычках несущей фазы для ньютоновских жидкостей с различными свойствами [9–11]. В работе [12] показана линейная корреляция между частотой циркуляции в перемычках при газожидкостном течении и общим

коэффициентом массообмена. Аналитическая модель Тэйлоровского течения в случае неньютоновских фаз предложена в работе [13].

Тем не менее на сегодняшний день отсутствуют точные модели многих явлений, например перехода между режимами, формирования снарядов в случае частичной смачиваемости, часто встречающейся на практике. При этом численное моделирование с высоким разрешением и vчетом смачиваемости стенок является лостаточно ресурсоемким. В то же время при разработке микрореакторов и микроэкстракторов требуется информация о режимах течения, распределениях скорости в снарядах и перемычках и их влиянии на коэффициент массообмена. Таким образом, эксперимент является не только главным инструментарием для верификации данных численного моделирования, но и в ряде случаев остается единственным способом изучения гидродинамических особенностей двухфазных течений на микромасштабах. Целью данной работы является исследование гидродинамических режимов однофазных и двухфазных течений и границ перехода между ними в микроканалах при помощи панорамных оптических экспериментальных методов измерения локальных гидродинамических величин для создания проточных микрореакторов и микроэкстракторов.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ СТЕНД И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ГИДРОДИНАМИКИ В МИКРОКАНАЛАХ

Описание экспериментального стенда. Фотография экспериментального стенда для исследования гидродинамики и массообмена в однофазных и двухфазных течениях в микроканальных



Рис. 1. Экспериментальный стенд для исследования гидродинамики и массообмена в однофазных и двухфазных течениях в микроканальных устройствах.

устройствах представлена на рис. 1. Стенд состоит из оптического инвертированного микроскопа Zeiss Axio Observer.Z1 с набором объективов различного увеличения от 5х до 63х, а также набором оптических полосовых, пороговых фильтров и дихроичных зеркал. Микрофлюидное устройство располагается на предметном столике микроскопа, положение которого управляется прецизионной системой на основе пьезоэлементов с точностью 1 мкм по трем координатам. Микроскоп оснащен галогенной лампой для работы в проходящем свете, а также ртутной лампой для работы в отраженном свете. Поток рабочих жидкостей в микрофлюидном устройстве создается двойным шприцевым насосом KDS Gemini 88 (давление до 6 бар, расход жидкости от 0.4 нл/ч до 106 мл/мин, точность задания расхода 0.35%) или двухканальным регулятором давления Elveflow OB1 (давление от -900 мбар до 6 бар) в системе обратной связи с кориолисовыми расходомерами BFS1+ (диапазон расходов от 0.1 до 200 г/час, точность измерения 2% от измеряемой величины). Перепад давления в микрофлюидном устройстве регистрируется манометрическими мембранными датчиками давления на основе пьезорезистивного эффекта Elvelfow MPS (диапазон измерения от -1 до 6.9 бар, точность 0.2% от диапазона).

Визуализация режимов двухфазных течений. В зависимости от скоростей потока, физических свойств жидкостей, свойств материала микроканала и его геометрии реализуются различные режимы течения. Для проведения скоростной визуализации режимов течения к микроскопу подключается скоростная камера рсо.1200 hs (Германия) с разрешением матрицы 1 Мпикс (1280 × 1024 пикс.), размер пикселя 12 × 12 мкм²

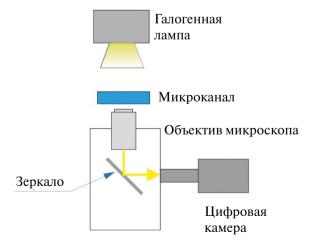


Рис. 2. Схема освещения и съемки для проведения визуализации режимов течения в микроканалах.

и частотой съемки до 1 кГц. Поток освещается галогенной лампой в проходящем свете (рис. 2), визуализация режимов течения проводится за счет разницы в показателях преломления фаз. Регистрация режимов течения проводится при вариации расходов несущей и дисперсной фаз с последующей их классификацией вручную либо с помощью нейронных сетей [14].

Методы цифровой трассерной визуализации с микронным разрешением (micro-PIV) и слежения за частицами (micro-PTV). Метод Micro-Particle Image Velocimetry (micro-PIV), впервые предложенный в работе [15], является бесконтактным методом измерения полей скорости в жидкостях и газах с микронным разрешением. В исследуемый поток добавляются трассерные частицы, которые следуют за потоком и делают его наблюдаемым. Суть метода заключается в регистрации двух или более изображений трассерных частиц и последующей их обработке для расчета смещения групп частиц, что позволяет построить векторное поле скорости. Для измерения полей скорости в потоках с высокими пространственными градиентами скорости, а также при невысокой концентрации трассеров более пригоден метод Micro Particle Tracking Velocimetry (micro-PTV). Основное отличие данного метода от метода micro-PIV заключается в расчете нерегулярного поля скорости по перемещению каждой из частиц, что позволяет получить более высокое пространственное разрешение.

Методы micro-PIV и micro-PTV реализованы на экспериментальном стенде с целью исследования гидродинамики и массообмена в однофазных и двухфазных течениях в микроканальных устройствах в составе измерительного комплекса "ПОЛИС" (разработка Института теплофизики СО РАН). Поток засеивается флуоресцентными трассерами средним диаметром от 1 до 3 мкм и освещается двойным импульсным Nd: YAG лазером с энергией в импульсе до 70 мДж и частотой повторения импульсов до 15 Гц. Свет лазера заводится в микроскоп через оптическое волокно. Для регистрации света, излученного частицами, без отраженного каналом света используется дихроичное зеркало. Кросскорреляционная цифровая камера с разрешением 2048 × 2048 пикселей регистрирует изображения, которые затем передаются в персональный компьютер для дальнейшей обработки. Синхронизация работы системы осуществляется при помощи программируемого процессора. Управление экспериментом и обработка данных осуществляется с использованием пакета программного обеспечения

ActualFlow. Данное программное обеспечение предназначено для управления измерительным комплексом и совмещает в себе функции автоматизации процесса проведения эксперимента, обработки и визуализации данных, организации управления и хранения полученных данных на физическом носителе [16].

Метод лазерно-индуцированной флуоресценции с микронным разрешением (micro-LIF). Лазерно-индуцированная флуоресценция (LIF) является методом для измерения полей концентраций или температур и основана на том, что интенсивность флуоресценции пропорциональна концентрации флуоресцентной краски или уменьшается с увеличением температуры. Для того чтобы получить количественную информацию о поле концентрации в микроканале, необходимо установить связь между интенсивностью флуоресценции и концентрацией флуорофора. Для этого пользуются калибровочной кривой, для построения которой исследуемый объем заполняют красителем в разных постоянных концентрациях с последующей регистрацией набора изображений на цифровую камеру. Такая процедура автоматически учитывает все особенности оптического тракта регистрирующей аппаратуры и возможные неоднородности возбуждающего излучения, которые невозможно учесть при построении аналитической калибровки.

Метод micro-LIF реализован на базе экспериментального стенда для исследования гидродинамики и массообмена в однофазных и двухфаз-

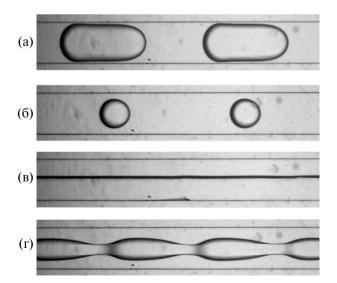


Рис. 3. Примеры характерных режимов течения ионная жидкость — вода в микроканале Т-типа: а) снарядный режим, б) капельный режим, в) параллельный режим, г) кольцевой режим с волновой границей [27].

ных течениях в микроканальных устройствах. Для измерения полей концентраций с помощью метода micro-LIF в качестве осветителя используется ртутная лампа. Данный тип излучения постоянен во времени и позволяет избежать погрешности, связанной с нестабильностью энергии импульса, в случае применения лазера в качестве источника освещения. С помощью полосового зеленого светофильтра (максимум пропускания 546 нм, полуширина полосы пропускания 12 нм) из спектра излучения ртутной лампы пропускается зеленая длина волны для освещения потока, далее она попадает на дихроичное зеркало и, отражаясь, освещает микроканальное устройство. В качестве флуоресцентного красителя используется Родамин 6Ж. Свет, эмитированный флуоресцентным красителем, проходит через дихроичное зеркало, попадает на полосовой светофильтр и регистрируется цифровой камерой с разрешением 4 Мпикс, глубиной цвета 16 бит. Обработка полученных данных проводится в программном обеспечении ActualFlow.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ В ДВУХФАЗНЫХ ПРОТОЧНЫХ МИКРОРЕАКТОРАХ И МИКРОЭКСТРАКТОРАХ

Анализ размерностей для построения универсальной карты режимов течения. Режим течения обусловлен силами, преобладающими в системе при заданных значениях управляющих параметров. Основными режимами течения в микроканалах являются снарядный, капельный, параллельный и кольцевой (рис. 3). Для построения карт необходимо классифицировать режимы течения и обозначить области их существования либо границы перехода. Типичными параметрами построения карт режимов течения являются приведенные скорости несущей и дисперсной фаз. Однако карты режимов, построенные по приведенным скоростям фаз, подходят только для заданной системы жидкостей и геометрии каналов, используемых в конкретном эксперименте.

В общем случае для определения границ режимов и построения универсальных карт, применимых для произвольного набора жидкостей, геометрии каналов и управляющих параметров, в основном используются два подхода. Оба они имеют как преимущества, так и недостатки. Первый подход — построение полуэмпирических моделей с использованием различных упрощений и аппроксимаций в уравнениях сплошной среды.

Основным недостатком такого подхода является сложность исходных уравнений, для преодоления которой необходимо вводить упрощения физических моделей. Второй подход — использование анализа размерностей и поиск подходящих безразмерных комплексов и их степеней. Такой подход значительно облегчает проведение границ перехода между режимами течения. Однако поскольку образующиеся безразмерные комплексы не несут информации о механизме перехода, они чаще всего могут описать только те эксперименты, на основе которых были получены. Поэтому полученные безразмерные комплексы должны подвергаться тщательной проверке данными других исследований.

Для обобщения полученных экспериментальных данных был проведен анализ размерностей при течении несмешивающихся жидкостей в микроканалах [17]. Вначале определены основные параметры, влияющие на установление режима течения: плотность фаз, вязкость фаз, межфазное натяжение, гидравлический диаметр микроканала, приведенные скорости фаз. Физическими переменными, влияющими на течение, являются гидравлический диаметр микроканала D_h с шириной w и высотой h, определенный как

$$D_h = \frac{2wh}{w+h}$$
, динамическая вязкость несущей фа-

зы μ_c и дисперсной фазы μ_d , плотность несущей фазы ρ_c и дисперсной фазы ρ_d , межфазное натяжение σ и среднерасходные (приведенные) скорости фаз через сечение микроканала u_c и u_d . Их размерности следующие:

$D_{_h}$	[M]	L
μ_c	[Па·с]	$ML^{-1}T^{-1}$
μ_d	[Па·с]	$ML^{-1}T^{-1}$
ρ_c	[KГ/M ³]	ML^{-3}
$ ho_d$	[KГ/M ³]	ML^{-3}
σ	[KГ/C ²]	MT ⁻²
u_c	[M/c]	LT^{-1}
u_d	[м/с]	LT ⁻¹

Здесь L, M и T представляют длину, массу и время соответственно. Всего имеем n=8 параметров, которые выражаются k=3 размерностями. Таким образом, из них можно составить n-k=5 безразмерных комплексов. Предполагаем, что безразмерный комплекс, значение которого определяет переход от одного режима течения к другому, связан с физическими параметрами в виде степенной функции:

$$\Pi = A \cdot {\rho_d}^{\alpha} \cdot {\rho_c}^{\beta} \cdot \mu_d^{\gamma} \cdot \mu_c^{\delta} \cdot u_d^{\varepsilon} \cdot u_c^{\zeta} \cdot D_h^{\eta} \cdot \sigma^{\theta} \cdot$$

Заменив величины в приведенном выше выражении их единицами измерения, объединяя показатели степени при единицах измерения, получим следующую незамкнутую систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma + \delta + \theta = 0 \\ -3\alpha - 3\beta - \gamma - \delta + \varepsilon + \zeta + \eta = 0 \\ -\gamma - \delta - \varepsilon - \zeta - 2\theta = 0. \end{cases}$$

Выразим значения степеней δ , η , θ через свободные параметры:

$$\begin{cases} \eta = \alpha + \beta \\ \theta = \alpha + \beta - \epsilon - \zeta \\ \delta = -2\alpha - 2\beta + \epsilon + \zeta - \gamma. \end{cases}$$

Таким образом, получаем:

$$\Pi = A \cdot \left(\frac{\mu_d}{\mu_c}\right)^{2\alpha + \gamma - \epsilon} \cdot We_d^{\frac{\epsilon}{2}} \cdot Oh_d^{\epsilon - 2\alpha} \cdot We_c^{\frac{\zeta}{2}} \cdot Oh_c^{\zeta - 2\beta},$$
 где $We = \frac{\rho u^2 D_h}{\sigma}$ — число Вебера, $Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\sigma \rho D_h}}$ —

число Онезорге.

Переобозначив свободные параметры,

$$\begin{cases} \alpha_0 = 2\alpha + \gamma - \varepsilon \\ \beta_0 = \frac{\varepsilon}{2} \\ \gamma_0 = \varepsilon - 2\alpha \end{cases},$$
$$\delta_0 = \frac{\zeta}{2}$$
$$\varepsilon_0 = \zeta - 2\beta$$

получим следующий безразмерный комплекс, отвечающий за переход между режимами течения:

$$\Pi = A \cdot \left(\frac{\mu_d}{\mu_c}\right)^{\alpha_0} \cdot We_d^{\beta_0} \cdot Oh_d^{\gamma_0} \cdot We_c^{\delta_0} \cdot Oh_c^{\varepsilon_0}.$$

Анализируя экспериментальные данные о режимах течения в Т-образных микроканалах для наборов жидкость—жидкость с различными физическими свойствами, в широком диапазоне безразмерных параметров, мы установили, что значения степеней $\alpha_0=0,\ \beta_0=0.4,\ \gamma_0=0.6,\ \delta_0=-0.16,\ \epsilon_0=-0.24$ и параметра A=17.24 дают наилучшее совпадение границы перехода между сегментированными и непрерывными режимами течения для разных наборов жидкостей в случае, когда вязкость дисперсной фазы меньше вязкости несущей фазы: при $\Pi>1$ реализуется

	Несущая фаза	Дисперсная фаза
We	10^{-9} – 0.1	$10^{-9} - 0.1$
Oh	1.47—13.9	$8.10^{-3} - 8.1$
Re	10^{-6} –1	10^{-5} – 100
Ca	10-4-1	10-6-0.3

Таблица 1. Диапазон безразмерных параметров в экспериментах по визуализации течений жидкость—жидкость в микроканалах Т-типа

непрерывный режим течения, при $\Pi \le 1$ — сегментированный режим течения. Кроме того, предложенный безразмерный комплекс был протестирован на данных других авторов [2, 19], показана его применимость для микроканалов X- и Y-типа [20]. В табл. 1 представлены диапазоны чисел Вебера We и Онезорге Oh для течений, на которых был апробирован безразмерный критерий, а также числа Рейнольдса ($Re = \frac{\rho u D_h}{\mu}$) и

числа капиллярности ($Ca = \frac{\mu u}{\sigma}$), которые часто

используются для описания таких течений и характеризуют баланс сил инерции, вязкости и межфазного натяжения.

Для демонстрации использования критерия с целью определения границ существования режимов на рис. 4 приведена карта режимов тече-

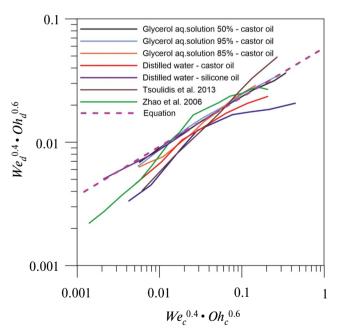


Рис. 4. Границы перехода между сегментированными (снарядный и капельный) и непрерывными (параллельный и кольцевой) режимами двухфазного течения в микроканале Т-типа для различных наборов несмешивающихся жидкостей, в том числе данные других авторов [2, 28].

ния различных пар несмешивающихся жидкостей, полученная по результатам наших экспериментов и экспериментов других авторов. Карта построена в координатах безразмерных критериев $We_c^{0.4}Oh_c^{0.6}$ для несущей (индекс c) и $We_d^{0.4}Oh_d^{0.6}$ дисперсной (индекс d) фаз. Линией на карте показана граница, разделяющая снарядный и капельный режимы с одной стороны и параллельный и кольцевой режимы с другой, т.е. $\Pi=1$. В заданных координатах линия описывается как

$$We_d^{0.4}Oh_d^{0.6} = 0.058 \cdot \left(We_c^{0.4}Oh_c^{0.6}\right)^{0.4}$$

и может использоваться для предсказания режимов течения любых пар несмешивающихся жидкостей с параметрами потока из заданного диапазона безразмерных величин We и Oh.

Применение нейронных сетей для построения карт режимов. На сегодняшний день еще не получено универсальное обобщение для переходов между непрерывными и сегментированными режимами для всех случаев микроканальных течений жидкость-жидкость. При отношении вязкостей дисперсной и несущей фаз больше единицы степени α_0 , β_0 , γ_0 , δ_0 , ϵ_0 и параметр A не определены. В последнее время большой интерес вызывает использование методов машинного обучения для построения экспертных систем или систем управления на основе обученной модели, прогнозирующей режим работы и параметры системы. Машинное обучение широко используется в научных исследованиях для решения проблем с неявной зависимостью от данных. Перспективным видится применение искусственных нейронных сетей для классификации режимов течения несмешивающихся жидкостей в прямоугольных Т-образных микроканалах в соответствии с экспериментальными параметрами.

На основе экспериментальных данных по визуализации режимов течения и данных из литературы была составлена база данных о режимах течения несмешивающихся жидкостей в Т-образных микроканалах, содержащая около 6000 записей. Все режимы течения были разделены на три класса: сегментированные, непрерыв-

ные и переходные. Для увеличения данных был применен алгоритм SMOTE [21]. Полносвязная нейронная сеть была обучена на 60% данных, а остальные 40% использовались для валидации и тестирования в равных пропорциях. Входными признаками для нейронной сети были числа Вебера и числа Онезорге непрерывной и дисперсной фаз. Предварительная обработка данных включала переход в логарифмическое пространство входных параметров. Нейронная сеть имела три скрытых слоя с 512, 256 и 16 нейронами. Выходной слой состоял из трех прогнозируемых значений, соответствующих непрерывному, сегментированному и переходному режимам течения. Прогнозируемый режим течения рассчитывался на основе максимального значения в выходном слое. Использовалась функция активации ReLU (выпрямленная линейная единица). При обучении нейронной сети в целях регуляризации применялось выпадение узлов с вероятностью 20%. На рис. 5 представлена матрица несоответствий фактических и прогнозируемых значений для тестового набора данных. Точность прогноза достигла 98%. В большинстве случаев все режимы течения были предсказаны правильно. Количество серьезных ошибок, когда сегментированный режим течения классифицируется как непрерывный и наоборот, составляет менее 5%.

Измерение распределений скорости внутри снарядов дисперсной фазы в двухфазных проточных микрореакторах и микроэкстракторах при на-

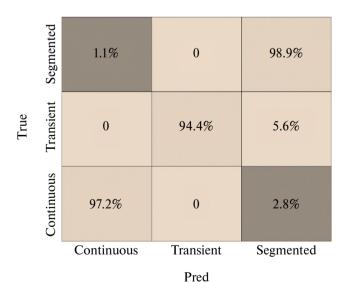


Рис. 5. Матрица несоответствий фактических и прогнозируемых значений искусственной нейронной сети для классификации режима течения несмешивающихся жидкостей в Т-образных микроканалах для тестового набора данных.

ложении внешних возмущений. Гидродинамика снарядного режима течения является определяющей при разработке двухфазных проточных микрореакторов. Циркуляция скорости внутри снарядов и перемычек за счет возникновения Тэйлоровских вихрей в значительной степени повышает интенсивность массообмена и позволяет достичь одинаковых времен пребывания для реагентов в микрореакторе, что, в свою очередь, приводит к узким распределениям свойств синтезированных продуктов. В то же время в структуре течения внутри снарядов и перемычек могут возникать застойные зоны, которые могут приводить к неравномерному перемешиванию реагентов. Также при наличии симметричных вихрей Тейлора перенос вещества через ось симметрии существенно ограничен. Таким образом, возникает необходимость в интенсификации перемешивания и разрушении симметричных вихревых структур для повышения эффективности проточных двухфазных микрореакторов и микроэкстракторов. Одним из способов интенсификации является наложение на поток внешних возмущений давления. При этом важно знать влияние входных параметров на структуру течения. Для получения достоверных данных о структуре течения в снарядах и перемычках с высоким пространственным разрешением необходимы измерения полей скорости внутри снарядов и перемычек.

Поля скорости в снарядах характеризуются областями с высокими градиентами, поэтому предпочтительным является использование метода micro-PTV, основанного на отслеживании отдельных частиц, а не групп, как в методе micro-PIV. Алгоритм расчета вектора скорости включает три основных этапа: идентификация частиц, алгоритм релаксации и коррекция результатов. Подробное описание алгоритма релаксации представлено в [22]. На заключительном этапе проводится коррекция результатов по максимуму корреляционной функции [23].

Для отработки фазово-осредненного метода micro-PTV и исследования влияния внешних возмущений на двухфазные потоки было проведено измерение полей скорости внутри снарядов дисперсной фазы при наложении синусоидальных пульсаций давления на снарядное течение несмешивающихся жидкостей в микроканале Т-типа. Характерные размеры микроканала были такими же, как и в случае измерений в однофазном потоке: размеры подводящих каналов 200 х 200 мкм и выходного 200 х 400 мкм. В качестве рабочих жидкостей использовали

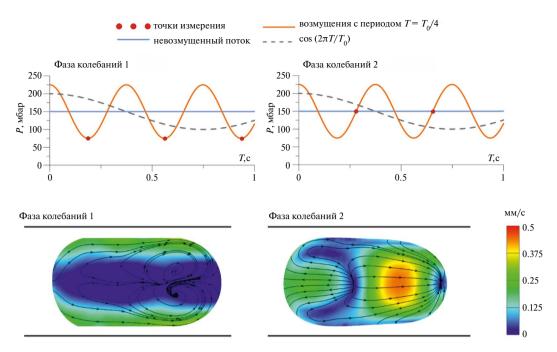


Рис. 6. Поля скорости и линии тока внутри снарядов дисперсной фазы при наложении внешних возмущений на поток. Измерения выполнены в различные фазы колебаний сигнала возмущения.

касторовое масло с вязкостью $\mu_{_{\rm KM}} = 0.65~{\rm \Pi a\cdot c}$ (несущая фаза) и воду (дисперсная фаза). Такой набор жидкостей характеризуется относительно низким отношением вязкостей дисперсной жидкости к несущей ($\mu_{_{\rm B}}/\mu_{_{\rm KM}}\approx 0.0014$) при межфазном натяжении $\sigma=16.5\,{\rm MH/m}$. На рис. 6 показаны поля скорости и линии тока, соответствующие различным фазам колебаний сигнала возмущения. Частота сигнала возмущения была в четыре раза выше собственной частоты отрыва снарядов, а амплитуда колебаний давления при этом составляла $A = P_{\text{max}} - P_{\text{min}} = 150$ мбар, что равно среднему давлению в рассматриваемом режиме $A = P_{\text{avg}}$. Ранее было показано, что на частотах меньше собственной длина снарядов зависит от амплитуды и частоты возмущающего сигнала [24]. В то время как на частотах больше собственной длина снарядов определяется геометрией канала и средними значениями расходов, как в невозмущенном потоке. Поэтому частота возмущений была выбрана больше собственной частоты отрыва снарядов для изменения структуры потока внутри них без существенного влияния на размер и длину. Измерения полей скорости были синхронизированы с фазами сигнала возмущения. Видно, что структура потока значительно меняется при изменении фазы колебаний. Такое воздействие на линии тока, приводящее к их значительному перераспределению, может использоваться для интенсификации массообмена и перемешива-

ния внутри снарядов при проектировании микрореакторов и микроэкстракторов.

Измерение локального коэффициента массообмена и эффективности экстракции в микроэкстракторах с помощью метода micro-LIF. Проведение экстракции в снарядном режиме течения несмешивающихся жидкостей является эффективным способом интенсификации массопереноса за счет циркуляции жидкости внутри снарядов и перемычек. Разработана методика локальной оценки эффективности экстракции и объемного коэффициента массообмена при снарядном режиме течения несмешивающихся жидкостей в микроканалах на основе метода micro-LIF. В качестве флуоресцентного красителя — экстрагируемого вещества использовался Родамин 6Ж. Объемный коэффициент массообмена и эффективность экстракции вычислялись по следующим формулам:

$$k_L a = \frac{1}{\tau} \ln \left(\frac{C_c^{in} - C_c^*}{C_c^{out} - C_c^*} \right),$$

$$E = \frac{C_c^{out}}{C_c^*},$$

где C_c^{in} и C_c^{out} — измеренная концентрация экстрагируемого вещества в экстрагенте (несущей фазе) на входе и выходе исследуемого участка микроканала, C_c^* — равновесная концентрация, τ — время пребывания. Для расчета объемного коэффициента массообмена необходимы значе-

ния коэффициента распределения экстрагируемого вещества для исследуемых наборов несмешивающихся жилкостей:

$$K = \frac{C_c^*}{C_d^*},$$

где C_c^* и C_d^* — равновесные концентрации в несущей и дисперсной фазе соответственно.

В то время как в ряде работ по исследованию массообмена принимается, что коэффициент распределения велик и остаточной концентрацией экстрагируемого вещества в дисперсной фазе можно пренебречь, данный подход вносит большую неопределенность в вычисление объемного коэффициента массообмена. Для определения коэффициента распределения использовались смеси рафината с экстрагируемым веществом в различных концентрациях. Экстрагент и рафинат приводились в состояние равновесия посредством перемешивания в лабораторном стакане с магнитной мешалкой в течение 48 ч. разлеление фаз проводилось в течение нескольких дней. Остаточная концентрация экстрагируемого вещества в рафинате определялась с помощью метода лазерно-индуцированной флуоресценции в микроканале. Полученные после разделения фаз растворы экстрагента с экстрагирующим веществом в известных концентрациях были использованы для построения калибровочной кривой зависимости интенсивности свечения от концентрации вещества для дальнейших экспериментов по определению коэффициентов массообмена. Калибровочная кривая зависимости зарегистрированной интенсивности свечения флуорофора от концентрации строилась в каждой точке измерительной области (попиксельная калибровка), для того чтобы учесть пространственную неравномерность освещения (рис. 7).

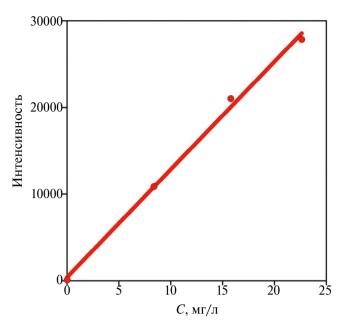


Рис. 7. Калибровочная кривая зависимости интенсивности флуоресценции от концентрации красителя в экстрагенте.

На рис. 8 представлены поля концентрации в перемычках несущей фазы для различных расходов дисперсной и несущей фаз на расстояниях 5, 7.5, 10 и 15 мм от входа в Т-образный микроканал. Шкала концентрации красителя нормирована на равновесную концентрацию, рассчитанную для заданных отношений расходов фаз с учетом коэффициента распределения. Установлено, что при отношениях расходов несущей и дисперсной фаз, близких к единице, на этапе формирования снарядов возникает существенная неравномерность распределения экстрагируемого вещества, которая сохраняется вниз по потоку на расстояние вплоть до 80 калибров. Эффективность экстракции достигала 30% на расстоянии 5 мм от входа в микрока-

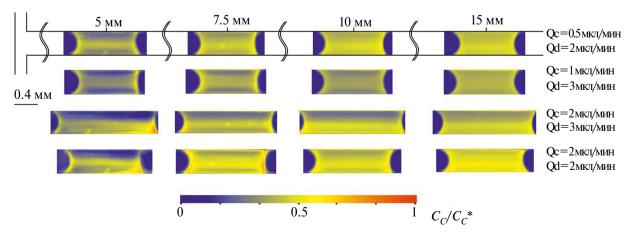


Рис. 8. Поля концентрации в перемычках несущей фазы на различных расстояниях от входа в Т-образный микроканал при вариации расходов несущей и дисперсной фаз.

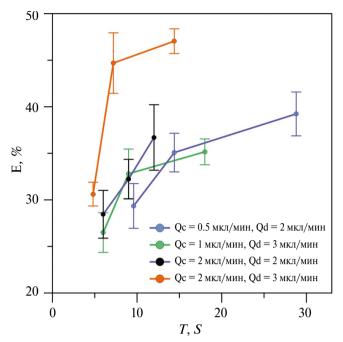


Рис. 9. Эффективность экстракции в снарядном режиме течения в зависимости от времени пребывания.

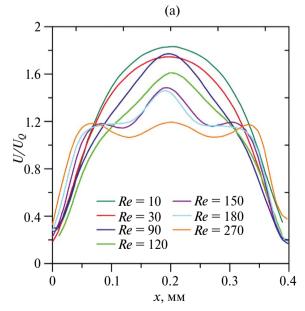
нал. На рис. 9 представлена зависимость эффективности экстракции от времени пребывания для различных расходов несущей и дисперсной фаз. Время пребывания рассчитывалось из приближения скорости снаряда суммарной среднерасходной скоростью фаз. Видно, что увеличение суммарного расхода фаз приводит к интенсификации массооб-

мена, что связано с повышением циркуляции скорости внутри снарядов и перемычек.

Преимущество разработанного подхода заключается в его бесконтактности и локальности, что позволяет строить корреляционные зависимости между структурой потока и эффективностью массопередачи, кроме того, данная методика позволяет визуализировать линии тока и эффективность межосевого переноса в снарядах и перемычках.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ В ОДНОФАЗНОМ МИКРОРЕАКТОРЕ Т-ТИПА

Измерение полей скорости в однофазном проточном микрореакторе. Проведены измерения полей скорости в микромиксере Т-типа с помощью метода micro-PIV. В качестве рабочего участка использовался микромиксер Т-типа с поперечным сечением входных каналов 200 х 200 мкм и поперечным сечением выходного канала 200 х 400 мкм. Длина входных и выходного канала 5 мм. В качестве рабочей жидкости использовали дистиллированными воду. Жидкость засеивали маркированными Родамином Б флуоресцентными микротрассерами средним диаметром 2 мкм, плотностью 1.05 г/см³. Объемная плотность засева потока равнялась 0.06%. Поток жидкости создавался



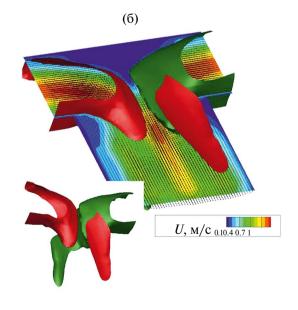


Рис. 10. а) нормированные на среднерасходную скорость профили скорости в центральном сечении Т-микромиксера при различных числах Рейнольдса. Расстояние от торца канала $1 = 3.5 \ D_h$; б) среднее поле скорости в центральном сечении Т-канала и изоповерхности средней поперечной скорости, построенные по полям скорости, измеренным в пяти сечениях микроканала при числе Рейнольдса 186.

с помощью шприцевого насоса с одинаковыми расходами в каждом из входных каналов. Измерения проводили в трех различных областях выходного канала, таким образом, были проведены измерения на расстоянии 7 калибров от торца микромиксера. Измерения проводили в центральном сечении микромиксера, а также на расстоянии ±33 мкм от центрального сечения и на расстоянии ±66 мкм от центрального сечения. Число Рейнольдса в экспериментах варьировалось от 10 до 300. Для каждой серии измерений было заснято 500 пар изображений. Время между кадрами варьировалось от 5 мкс до 150 мкс.

На рис. 10а представлены нормированные на среднерасходную скорость профили скорости в центральном сечении микроканала на расстоянии 3.5 калибра от его торца. При малых числах Рейнольдса наблюдается безвихревое ламинарное течение жидкостей, профиль скорости в центральном сечении канала близок к профилю Пуазейля. Увеличение числа Рейнольдса до 90 приводит к увеличению числа Дина, что способствует формированию вторичных течений в канале - возникает пара вихрей, однако плоскость симметрии в канале не нарушается. Об этом свидетельствует изменение профиля скорости, происходит его "поджатие" за счет возникновения нормальной к плоскости измерения скорости. При Re ≥ 150 на профиле скорости появляются перегибы (вторая производная равна нулю), связанные с возникновением S-образной структуры в течении — течение из вихревого переходит в "захватывающий" режим, при этом теряя симметричность относительно центральной оси микроканала. На рис. 10б показано среднее поле скорости в центральном сечении микроканала и изоповерхности средней поперечной скорости, полученные по полям скорости в пяти сечениях микроканала, равноудаленных симметрично вверх и вниз от центральной плоскости канала. Изоповерхности постоянной поперечной скорости обозначены красным (V = 0.4 Q/S) и зеленым цветом (V = -0.4 Q/S). Несимметричность изоповерхностей поперечной скорости также свидетельствует о возникновении S-образной структуры.

Измерение полей концентрации в однофазном проточном микрореакторе, определение эффективности перемешивания. Проведено исследование смешения жидкостей в микромиксере Т-типа с помощью метода micro-LIF. При измерении полей концентраций в один из входных каналов Т-канала подавалась дистиллированная вода,

в другой входной канал подавался водный раствор Родамина 6Ж в концентрации 60 мг/л. Число Шмидта $Sc = \frac{V}{D}$, где v — кинематическая вязкость, D — коэффициент диффузии красителя, равнялось 2156. В эксперименте исследовались режимы течения при Re от 10 до 300 с шагом 30. Для каждого режима было снято 500 изображений. Затем изображения усреднялись, из среднего вычитался шум камеры. На рис. 11а представлены поля концентрации в микроканале для чисел Рейнольдса 10, 150 и 300.

Измерения полей концентрации в микромиксерах и мирореакторах проводятся с целью оценки эффективности перемешивания, полученного в данных устройствах. Для расчета эффективности перемешивания по экспериментальным данным (измеренным полям концентраций) использовалась интенсивность сегрегации, определяемая как:

$$I=\frac{\sigma^2}{\sigma_0^2},$$
 где $\sigma^2=\frac{1}{|V|}\int\limits_V \left(C-\bar{C}\right)^2 dV$ — среднеквадратичное

отклонение концентрации вещества от среднего значения концентрации \overline{C} в объеме, $\sigma_0^2 = \overline{C} \left(C_{max} - \overline{C} \right)$ — максимально возможное

среднеквадратичное отклонение для смешения жидкостей с концентрациями 0 и C_{max} .

Для оценки эффективности перемешивания $I_{\scriptscriptstyle M}$ используется формула:

$$I_{\scriptscriptstyle M} = 1 - \sqrt{I} \ .$$

Так, если I_M равно 1, то жидкость полностью перемешанная, если I_M равно 0, жидкость является полностью сегрегированной.

На рис. 11в представлены графики зависимости эффективности перемешивания в Т-канале от расстояния от входа в смешивающий канал при числах Рейнольдса 10, 120, 150 и 300. При малых числах Рейнольдса течение ламинарное безвихревое, и поперечный оси канала перенос примеси происходит только за счет диффузии. При увеличении числа Рейнольдса возникают вихри Дина с сохранением симметрии течения, которые приводят лишь к небольшому увеличению эффективности перемешивания (см. зависимости для Re = 10 и Re = 120). При достижении *Re* = 150 происходит переход в "захватывающий" режим, структура течения теряет симметрию, эффективность перемешивания в канале резко возрастает, что связано с возникновением S-образной слоистой структу-

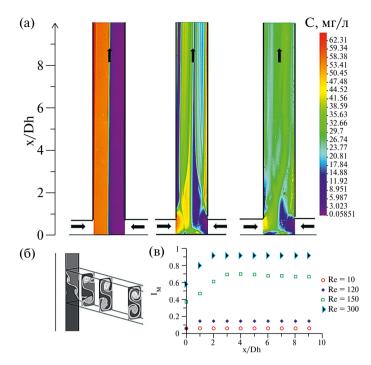


Рис. 11. а) Поля концентрации в выходном канале Т-миксера. Слева: Re = 10, в центре: Re = 150, справа: Re = 300; б) изолинии концентрации красителя в четырех поперечных сечениях микроканала, Re = 186, данные численного моделирования [25]; в) эффективность перемешивания в зависимости от расстояния от входа в микроканал при различных числах Рейнольдса.

ры в микроканале, визуализация которой представлена на рис. 11б по данным численного моделирования [26]. При $R_e = 300$ эффективность перемешивания на 9 калибрах канала достигает 0.9. Стоит отметить, что использование метода micro-LIF дает завышенные значения эффективности перемешивания при $R_e > 150$, так как он позволяет проводить регистрацию только осредненных по глубине канала полей концентраций.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе приведены результаты применения современных экспериментальных методов исследования гидродинамики и массообмена в микроканалах для построения фундаментальных основ эффективных микрореакторов и микроэкстракторов.

Проведена визуализация режимов течения для наборов несмешивающихся жидкостей с различными физическими свойствами в Т-образных микроканалах. Все режимы течения разделены на два класса: непрерывный (параллельный, кольцевой) и сегментированный (снарядный, капельный). Для предсказания класса режима течения несмешивающихся жидкостей для произвольного набора управляющих параметров (физических свойств рабочих жидкостей,

геометрии микрореактора и расходов фаз) применен анализ размерностей и построение универсальных режимных карт. Показано, что комбинация чисел Вебера и Онезорге дисперсной и несущей фаз позволяет для разных микроканалов и наборов жидкостей устанавливать границу между сегментированными и непрерывными классами режимов течения в широком диапазоне параметров при отношении вязкости дисперсной и несущей фаз меньше 1.

Применение нейросетевых алгоритмов для большого объема экспериментальных данных является альтернативным подходом для предсказания режимов течения. В этом случае на вход нейронной сети подается набор управляющих параметров (в нашем случае это расходы фаз в микрореакторе, физические свойства фаз и гидравлический диаметр микрореактора), а на выходе нейронной сети мы получаем режим течения. Нами показано, что точность предсказаний класса режима течения может составлять до 98%.

С применением метода micro-PIV исследован снарядный режим течения несмешивающихся с наложением внешних пульсаций давления дисперсной фазы. Показано, что в условиях периодических пульсаций поле скорости внутри снаряда также меняется периодически и конфигурация линий тока зависит от фазы колебаний, что мож-

но использовать для интенсификации массопереноса в проточных микрореакторах с двухфазными потоками. С помощью метода micro-LIF для двухфазного микроэкстрактора в снарядном режиме течения показано, что несмотря на близкие значения эффективности экстракции коэффициенты массообмена при высоких суммарных расходах фаз значительно увеличиваются в связи с малым временем пребывания.

С использованием методов micro-PIV и micro-LIF для однофазного потока в микромиксере Т-типа было продемонстрировано несколько режимов течения в диапазоне чисел Рейнольдса 10 < Re < 300. Показано, что в диапазоне чисел Рейнольдса $120 < Re \le 150$ возникает неустойчивость в зоне смешения, приводящая к развитию двух ламинарных вихрей, направленных вдоль потока, при этом эффективность перемешивания резко увеличивается.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Экспериментальные методики разработаны в рамках государственного задания ИТ СО РАН. Применение искусственных нейронных сетей для прогнозирования режима течения и метода micro-PTV для исследования влияния внешних возмущений на структуру течения внутри снарядов выполнено в рамках гранта РНФ 21-79-10307.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

D_{h}	гидравлический диаметр микроканала, м
μ	динамическая вязкость жидкостей, Па·с
ρ	плотность жидкостей, $\kappa \Gamma/M^3$
σ	межфазное натяжение, Н/м
и	приведенная скорость фазы, м/с
We	число Вебера
Oh	число Онезорге

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Abdollahi A., Sharma R.N., Vatani A.* Fluid flow and heat transfer of liquid-liquid two phase flow in microchannels: A review // Int. Commun. Heat Mass Transf. 2017. V. 84. P. 66–74.
 - https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2017.03.010
- Zhao Y., Chen G., Yuan Q. Liquid-Liquid Two-Phase Flow Patterns in a Rectangular Microchannel // AIChE J. 2006. V. 52. P. 4052–4060.
- 3. *Foroughi H., Kawaji M.* Viscous oil-water flows in a microchannel initially saturated with oil: Flow patterns and pressure drop characteristics // Int. J. Multiph.

- Flow. 2011. V. 37. P. 1147—1155. https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.06.004
- 4. *Waelchli S., Rudolf von Rohr P.* Two-phase flow characteristics in gas—liquid microreactors // Int. J. Multiph. Flow. 2006. V. 32. P. 791—806.
 - https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2006.02.014
- Kashid M., Kiwi-Minsker L. Quantitative prediction of flow patterns in liquid-liquid flow in micro-capillaries // Chem. Eng. Process Process Intensif. 2011. V. 50. P. 972–978.
 - https://doi.org/10.1016/j.cep.2011.07.003
- Garstecki P., Fuerstman M.J., Stone H.A., Whitesides G.M. Formation of droplets and bubbles in a microfluidic T-junction - Scaling and mechanism of break-up // Lab Chip. 2006. V. 6. P. 437—446. https://doi.org/10.1039/b510841a
- 7. De Menech M., Garstecki P., Jousse F., Stone H.A. Transition from squeezing to dripping in a microfluidic T-shaped junction // J. Fluid Mech. 2008. V. 595. P. 141–161.
 - https://doi.org/10.1017/S002211200700910X
- 8. *Xu J.H.*, *Li S.W.*, *Tan J.*, *Luo G.S.* Correlations of droplet formation in T-junction microfluidic devices: From squeezing to dripping // Microfluid Nanofluidics. 2008. V. 5. P. 711–717.
 - https://doi.org/10.1007/s10404-008-0306-4
- 9. *Dore V., Tsaoulidis D., Angeli P.* Mixing patterns in water plugs during water / ionic liquid segmented flow in microchannels // Chem. Eng. Sci. 2012. V. 80. P. 334—341. https://doi.org/10.1016/j.ces.2012.06.030
- Anna S.L., Bontoux N., Stone H.A. Formation of dispersions using "flow focusing" in microchannels // Appl. Phys. Lett. 2003. V. 82. P. 364–366. https://doi.org/10.1063/1.1537519
- 11. *Ma S., Sherwood J.M., Huck W.T.S., Balabani S.* On the flow topology inside droplets moving in rectangular microchannels // Lab Chip. 2014. V. 14. P. 3611–3620. https://doi.org/10.1039/C4LC00671B
- Abiev R.S., Butler C., Cid E. et al. Mass transfer characteristics and concentration field evolution for gas-liquid Taylor flow in milli channels // Chem. Eng. Sci. 2019. V. 207. P. 1331–1340.
 - https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.07.046
- Abiev R.S. Mathematical model of two-phase Taylor flow hydrodynamics for four combinations of non-Newtonian and Newtonian fluids in microchannels // Chem. Eng. Sci. 2022. V. 247. P. 116930. https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.116930
- 14. Ягодницына А. Создание системы онлайн-мониторинга режима течения несмешивающихся жидкостей в микроканалах. In: XXXVIII Сибирский теплофизический семинар, посвященный 65-летию Института теплофизики им. С.С.Кутателадзе СО РАН. Всероссийская конференция с элементами научной школы для молодых ученых. Труды кон-

- ференции. Новосибирск, 2022. С. 329-332.
- 15. Santiago J.G., Wereley S.T., Meinhart C.D. et al. A particle image velocimetry system for microfluidics // Exp. Fluids. 1998. V. 25. P. 316—319. https://doi.org/10.1007/s003480050235
- 16. Ахметбеков Е.К., Бильский А.В., Ложкин Ю.А. и др. Система управления экспериментом и обработки данных, полученных методами цифровой трассерной визуализации (ActualFlow) // Вычислительные методы и программирование. 2006. № 7. С. 79—85.
- 17. *Yagodnitsyna A.A.*, *Kovalev A.V.*, *Bilsky A.V.* Flow patterns of immiscible liquid-liquid flow in a rectangular microchannel with T-junction // Chem. Eng. J. 2016. V. 303. P. 547—554. https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.06.023
- Kovalev A.V., Yagodnitsyna A.A., Bilsky A.V. Determination of the transition boundary between segmented and continuous flow patterns in microfluidic liquid-liquid flows using dimensional analysis // Thermophys. Aeromechanics. 2021. V. 28. P. 827–833. https://doi.org/10.1134/S086986432106007X
- 19. *Tsaoulidis D., Dore V., Angeli P. et al.* Flow patterns and pressure drop of ionic liquid-water two-phase flows in microchannels // Int. J. Multiph. Flow. 2013. V. 54. P. 1–10.
- Darekar M., Singh K.K., Mukhopadhyay S., Shenoy K.T. Liquid-liquid two-phase flow patterns in Y-junction microchannels // Ind. Eng. Chem. Res. 2017. V. 56.

https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.02.002

https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b03164

P. 12215-12226.

 Chawla N.V., Bowyer K.W., Hall L.O., Kegelmeyer W.P. SMOTE: synthetic minority over-sampling technique // J. Artif. Intell. Res. 2011. V. 16. P. 321–357.

- https://doi.org/10.1613/jair.953
- 22. *Theunissen R., Stitou A., Riethmuller M.L.* A novel approach to improve the accuracy of PTV methods. 12th Int Symp Appl Laser Tech to Fluid Mech Lisbon, Port 12–15, 2004.
- 23. *Akhmetbekov Y.K.*, *Markovich D.M.*, *Tokarev M.P.* Study of the PTV method with individual particle correlation correction // Comput. Technol. 2010. V. 15. P. 57–72.
- 24. *Ковалев А.В., Ягодницына А.А., Бильский А.В.* Влияние синусоидальных пульсаций расхода дисперсной фазы на характеристики течений вязких несмешивающихся жидкостей в микроканале Т-типа // Прикладная механика и техническая физика. 2023. Т. 64. № 3. С. 20—31. https://doi.org/10.15372/pmtf202215175
- Danckwerts P.V. The definition and measurement of some characteristics of mixtures // Appl. Sci. Res. Sect. A. 1952. V. 3. P. 279–296. https://doi.org/10.1007/BF03184936
- Minakov A., Yagodnitsyna A., Lobasov A. et al. Study of fluid flow in micromixer with symmetrical and asymmetrical inlet conditions // La Houille Blanche. 2013. P. 12–21. https://doi.org/10.1051/lhb/2013038
- 27. Yagodnitsyna A.A., Kovalev A.V., Bilsky A.V. Ionic liquid-water flow in T-shaped microchannels with different aspect ratios // Chem. Eng. Res. Des. 2020. V. 153. P. 391–400.
 - https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.11.008
- 28. *Tsaoulidis D., Dore V., Angeli P. et al.* Flow patterns and pressure drop of ionic liquid-water two-phase flows in microchannels // Int. J. Multiph. Flow. 2013. V. 54. P. 1–10.
 - https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.02.002