

УДК 532.529:541.182

Управления перемещением агрегатов частиц в вязкой жидкости внешним однородным переменным полем *

Мартынов С.И.¹, Ткач Л.Ю.¹

Югорский государственный университет¹

Аннотация: Рассмотрен механизм управления динамикой агрегатов сферических частиц в вязкой жидкости при помощи воздействия внешнего однородного переменного электрического или магнитного поля. Агрегаты рассматриваются, как система частиц, имеющих заряд или дипольный момент, причем суммарный заряд или дипольный момент системы равны нулю. Частицы в отсутствии внешнего воздействия находятся в положении минимума энергии взаимодействия. Воздействие внешнего однородного переменного поля приводит к периодическим деформациям агрегата, которые формируют в окружающей вязкой жидкости течение, создающее гидродинамическую силу, перемещающую центр тяжести агрегата в определенном направлении относительно приложенного поля. Приведены результаты численного моделирования динамики агрегатов из трех частиц. При расчетах учитывались как силы гидродинамического взаимодействия, так и электрические или магнитные силы, удерживающие частицы в агрегате, и стремящиеся вернуть их в исходное положение равновесия.

Ключевые слова: численное моделирование, вязкая жидкость, частицы, гидродинамическое взаимодействие, энергия взаимодействия, внешнее однородное поле, самодвижущиеся агрегаты частиц.

1. Введение

В последние годы активно изучаются активные коллоиды [1]. Интерес к таким системам связан, в том числе, с растущим запросом на нано технологические приложения по разработке автономно двигающихся устройств с целью доставки с их помощью, например, лекарств к пораженной клетке или элементов микроскопических аппаратов с их последующей сборкой в заданном месте. В то же время имеются известные проблемы с моделированием динамики таких систем, связанные, в первую очередь, с управлением такими системами с учетом взаимодействия частиц.

Как известно из классической механики, действие внутренних сил не меняет положение центра тяжести системы. Между тем в природе существует множество живых организмов, перемещающихся в окружающей их жидкой или газообразной среде за счет действия внутренних сил. Это происходит благодаря наличию у таких организмов специального двигательного аппарата, периодические движения которого формирует в окружающей среде течение, создающее движущую силу со стороны этой среды на организм и перемещающую его. Причем движение двигательного аппарата в одну сторону создает течение, действующее на организм с большей силой, чем при движении того же двигательного аппарата в противоположную сторону. Это достигается за счет формы плавников у рыб и ластообразных, ориентация которых относительно тела организма при отталкивании создает большую гидродинамическую силу, чем при возвращении в исходное положение. Сила гидродинами-

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-41-86002/18).

ческого взаимодействия определяет динамику агрегата в вязкой жидкости.

Для управления динамикой агрегатов в вязкой жидкости предлагается использовать два механизма взаимодействия частиц, имеющихся в системах жидкость-частицы и принципиально различающихся между собой по своей природе. Первый механизм обусловлен силами, действующими непосредственно между частицами, и связан с физическими свойствами вещества, из которого созданы частицы, а второй - гидродинамическими силами взаимодействия частиц в жидкости. В сочетании с анализом характерных течений, возникающих в окружающей вязкой жидкости при движении живых организмов, это позволяет проектировать микро аппараты для перемещения в вязкой жидкости и способы воздействия на их части, имитирующие двигательный аппарат, внешними полями или другими источниками энергии. В работе [2] на основе анализа движения плавающих организмов в природе предложен способ перемещения агрегатов за счет моментов внутренних сил, действующих на пары частиц, которые своим вращением имитируют двигательный аппарат организма, и формируют характерное вихревое течение в окружающей вязкой жидкости, создающее перемещающую агрегат гидродинамическую силу. В качестве источника энергии, приводящего в движение частицы, обладающих магнитным дипольным моментом, было предложено использование переменного внешнего магнитного поля. Как было показано, при этом вращение частиц не меняет своего направления. Ниже предлагаются модели агрегатов частиц, в которых под действием внешнего поля происходит относительное перемещение частиц, а после его выключения, частицы меняют направления своего движения и стремятся вернуться в исходное состояние минимума энергии потенциального взаимодействия частиц в агрегате. При этом из-за изменения формы агрегата, гидродинамическая сила от возникающего течения в окружающей вязкой жидкости перемещает центр тяжести системы частиц в определенном направлении относительно приложенного поля.

2. Постановка задачи

Рассмотрим два агрегата, состоящих из 3 частиц. Первый агрегат представляет собой заряженные частицы, лежащие на одной прямой: 2 частицы радиуса a и одна - радиуса $2a$. Считаем, что две крайние частицы заряжены отрицательным зарядом q каждая, а центральная частица - положительным $2q$. Помимо сил Кулона, между частицами действуют силы неэлектрической природы. Суммарное взаимодействие частиц такое, что имеется их положение равновесия на прямой с координатами: $-6; 0; 6$. Вдоль этой прямой приложено внешнее однородное переменное электрическое поле напряженности E . Вторым агрегатом представляет собой частицы одного радиуса a , обладающих одинаковыми дипольными моментами m . Положение равновесия такой структуры соответствует положению частиц в вершинах правильного треугольника, а направление дипольных моментов такое, что их суммарный момент равен нулю [3].

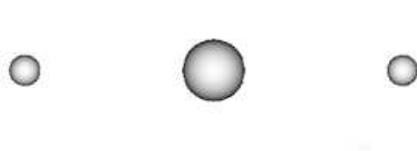


Рис. 1. Структура агрегата из заряженных частицы.

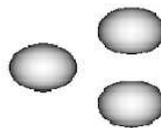


Рис. 2. Структура агрегата из дипольных частицы.

Для расчета течения жидкости вокруг рассматриваемых структур записываются уравне-

ния движения жидкости и каждой частицы с учетом всех сил и моментов, связанных с гидродинамическим взаимодействием всех частиц и силами непосредственно действующими между частицами. Рассматривается случай малых чисел Рейнольдса. Система уравнений для скорости $\vec{u}(\vec{x})$ и давления $p(\vec{x})$ в жидкости в этом случае имеет вид

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad \eta \nabla^2 \vec{u} = \nabla p \quad (1)$$

На поверхности частиц граничные условия записываются в виде

$$\left| \vec{x}^k \right| = a : \quad \vec{u} = \vec{V}^k + \vec{\Omega}^k \times \vec{x}^k$$

Здесь $\vec{V}^k, \vec{\Omega}^k$ - векторы линейной и угловой скоростей частицы с номером k соответственно.

Возмущения скорости и давления, возникающие при движении частиц, должны удовлетворять условию:

$$|\vec{x}| \rightarrow \infty : \quad \vec{u}^k \rightarrow 0, \quad p(\vec{x}) \rightarrow 0$$

Система уравнений движения частиц имеет вид

$$\vec{F}^k + \vec{R}^k = 0, \quad \vec{T}^k + \vec{M}^k = 0$$

Здесь векторами \vec{F}^k, \vec{R}^k обозначены, соответственно, внешние и внутренние силы, а векторами \vec{T}^k, \vec{M}^k моменты внешних и внутренних сил, действующих на частицу с номером k .

3. Метод решения

Для решения системы уравнений используются полученные ранее результаты работ [4, 5]. Из решения системы уравнений динамики жидкости находим распределение скорости и давления в жидкости вокруг агрегата и по полученным результатам — силы и моменты сил, действующие на каждую частицу агрегата со стороны жидкости. В общей сложности необходимо найти решение 18 уравнений. Для численного решения системы уравнений использовался специальный программный комплекс для персонального компьютера, который в качестве исходных данных получает только желаемую точность вычислений, координаты и радиусы частиц, скорость внешнего потока и приложенные силы и моменты. Программа сама составляет и находит численное решение системы уравнений, а результат выводит в уже обработанном виде. Аналогичная программа использовалась в работе [7].

Для решения системы уравнений использовалась специальная программа для персонального компьютера [4, 5], которая в качестве исходных данных получает только желаемую точность вычислений, координаты и радиусы частиц, скорость внешнего потока и приложенные внешние силы и моменты. Программа сама составляет и находит численное решение системы уравнений, а результат выводит в уже обработанном виде. Для получения корректных вычислительных результатов учитывались слагаемые с тензорными коэффициентами шестого порядка, что дало погрешность вычислений в десятые доли процента. Такая погрешность получена при компьютерном моделировании, когда вместо реальных параметров задачи используются модельные. Это связано с тем, что для реальных течений Стокса размеры частиц должны быть достаточно малыми, что затрудняет нахождения численного решения системы уравнений и визуализацию результатов. Поэтому применялся метод подобия и модельные параметры. При компьютерном моделировании задаются размер частицы \hat{a} , вязкость несущей жидкости $\hat{\eta}$, величина внешней силы \hat{F} , действующей на

каждую частицу, и ее направление, а также промежуток времени \hat{t} . Детально такой метод моделирования и связь между реальными и модельными параметрами представлены в работах [4, 5]

Для учета гидродинамического взаимодействия частиц в жидкости при определении сил и моментов использовался метод, предложенный в работах [6, 7]. Метод основан на представлении решения уравнений Стокса в виде мультипольного разложения с тензорными коэффициентами и позволяет учитывать гидродинамическое взаимодействие большого числа частиц в вязкой жидкости. Для получения корректных вычислительных результатов учитывались слагаемые с тензорными коэффициентами шестого порядка, что дало погрешность вычислений в десятые доли процента. Такая погрешность получена при компьютерном моделировании, когда вместо реальных параметров задачи используются модельные. Это связано с тем, что для реальных течений Стокса размеры частиц должны быть достаточно малыми, что затрудняет нахождение численного решения системы уравнений и визуализацию результатов. Поэтому применялся метод подобия и модельные параметры. При компьютерном моделировании задаются размер частицы, вязкость несущей жидкости, величина внешней силы, действующей на каждую частицу, и ее направление, а также промежуток времени. Детально такой метод моделирования и связь между реальными и модельными параметрами представлены в работах [4, 5].

4. Результаты моделирования

Моделирование проводилось при следующих значениях модельных параметров первого агрегата: радиус частиц 0,5 см и 1,0 см, соответственно, время воздействия поля 3 сек., время релаксации – 2 сек., суммарное время счета – 15 сек., сила, действующая со стороны электрического поля $Eq = 1$ г см/сек², вязкость жидкости 1 г/(см сек). Сила взаимодействия частиц определялась выражением: $1.5(h - 6)$, здесь h – расстояние между частицами. Расчеты дают следующее перемещение центра тяжести агрегата в направлении действия поля – 0,09 см при погрешности вычислений 0,00017708.

Необходимо также отметить, что поскольку за период релаксации система полностью не восстанавливает своего первоначального состояния, то через определенный промежуток времени агрегат может разрушиться на отдельные частицы под действием приложенного поля. Если в жидкости таких агрегатов много, то в силу того, что система из отдельных положительно и отрицательно заряженных частиц неустойчива, можно предполагать новую сборку агрегата из частиц, ранее принадлежащих разным агрегатам. Поскольку положительно и отрицательно заряженные частицы во внешнем поле двигаются в противоположных направлениях, то наиболее вероятное место новой сборки находится между двумя распавшимися агрегатами по направлению вектора приложенного поля. Распад и последующая сборка нового агрегата, но в новом месте, может рассматриваться как "фазовое" перемещение агрегата.

При моделировании динамики второго агрегата радиусы частиц брались равными $a = 1$, модельная вязкость $\eta = 1$ г/(см·сек). Диполи имеют следующую ориентацию: $\vec{m}_1 = (0, 0, m)$, $\vec{m}_2 = (0, -m\sqrt{3}/2, -m/2)$, $\vec{m}_3 = (0, m\sqrt{3}/2, -m/2)$. Для простоты вычислений внешнее поле \vec{H} направлено вдоль диполя первой частицы. Поскольку суммарный момент равен нулю, то внешнее однородное поле приводит в противоположное вращение с угловой скоростью два других диполя, создавая вихревое течение в вязкой жидкости, благодаря которому они перемещаются вдоль оси, перпендикулярной вектору поля. Внешнее поле действует промежуток времени 4 сек. После выключения внешнего поля система стремится вернуться в исходное состояние, поскольку это состояние устойчивого равновесия. Через время 4 сек. вновь включается внешнее магнитное поле и агрегат вновь перемещается в направлении, перпендикулярном приложенному полю. Поскольку за время действия при-

ложенного поля угол поворота частиц не большой, то для упрощения вычислений моменты, действующие на частицы, считались постоянными: $|\vec{m} \times \vec{H}| = 0.5$. Суммарное перемещение центра тяжести системы равно 0,0183039 см. за промежуток времени 24 сек., погрешность вычислений равна $1.5711 \cdot 10^{-6}$.

Так как сумма внешних сил, действующих на частицы в агрегате со стороны электрического или магнитного поля, равна нулю, а внутренние силы не могут изменить положение центра тяжести системы частиц, то перемещение агрегатов обусловлено действием гидродинамических сил. В результате взаимодействия частиц формируется течение в окружающей агрегат вязкой жидкости, создающей силу, перемещающую агрегат в определенном направлении относительно приложенного поля. Меняя направление поля, можно управлять движением агрегатов частиц. Аналогичный подход может быть применен для расчета перемещения других структур агрегатов заряженных или дипольных частиц с нулевым суммарным зарядом или магнитным моментом в однородном внешнем электрическом или магнитном поле.

По модельным значениям так же, как и в работах [4,5] определяются значения реальных параметров системы жидкость-частицы.

Литература

1. Арансон И.С. Активные коллоиды // Успехи физических наук, 2013. Т. 183, № 1. С. 87-102.
2. Мартынов С. И., Ткач Л.Ю. Об одной модели динамики самодвижущихся агрегатов частиц в вязкой жидкости // Нелинейная динамика. 2016. Т. 12, № 4. С. 605-618.
3. Шутый А.М. Равновесные значения и динамика суммарного магнитного момента систем магнитных диполей // ЖЭТФ. 2010. Т.137, Вып. 2. С. 277-286.
4. Мартынов С.И., Ткач Л.Ю. Моделирование динамики агрегатов частиц в вязкой жидкости // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2015. Т. 55, № 2. С. 109-118.
5. Мартынов С. И., Ткач Л.Ю. Динамика цепочечных агрегатов частиц в потоке вязкой жидкости // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Т. 56, № 5. С. 133-148.
6. Мартынов С. И. Гидродинамическое взаимодействие частиц // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 1998. № 2. С. 112-119.
7. Баранов В. Е., Мартынов С. И. Влияние гидродинамического взаимодействия на скорость осаждения большого числа частиц в вязкой жидкости // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2004. № 1. С. 152-164.

MSC2010 76D07, 76D09, 76D17

Control of the movement of aggregates of particles in a viscous fluid by an external uniform alternating field

S.I. Martynov¹, L.Yu. Tkach ¹

Yugra State University, Khanty-Mansiysk, Russian Federation ¹

Abstract: The mechanism for controlling the dynamics of aggregates of spherical particles in a viscous fluid using an external uniform alternating electric or magnetic field is considered. Aggregates are considered as a system of particles having a charge or dipole moment, and the total charge or dipole moment of the system is zero. Particles in the absence of external influence are in the position of a minimum of the interaction energy. The impact of an external homogeneous alternating field leads to periodic deformations of the aggregate, which form a flow in the surrounding viscous fluid, creating a hydrodynamic force that moves the center of gravity of the aggregate in a certain direction relative to the applied field. The results of numerical modeling of the dynamics of aggregates of three particles are given. The calculations took into account both the forces of hydrodynamic interaction, and the electric or magnetic forces holding the particles in the aggregate, and seeking to return them to their original equilibrium position.

Keywords: numerical simulation, viscous fluid, particles, hydrodynamic interaction, interaction energy, external uniform field, self-moving aggregates of particles.

References

1. Aranson I.S. Active colloids. Successes of physical sciences, 2013. V. 183. Issue 1. P. 87-102.
2. Martynov S.I., Tkach L.Yu. On one model of the dynamics of self-moving aggregates of particles in a viscous fluid. Nonlinear dynamics. 2016. V. 12. Issue 4. P. 605-618.
3. Shuty A.M. Equilibrium Values and Dynamics of the Total Magnetic Moment of Magnetic Dipole Systems. ZhETF. 2010. V. 137. Issue 2. P. 277-286.
4. Martynov S.I., Tkach L. Yu. Simulation of particle aggregate dynamics in a viscous fluid. Comput. Math. Math. Phys. 2015. V. 55. Issue 2. P. 282-290.
5. Martynov S.I., Tkach L. Yu. Dynamics of chain particle aggregates in viscous flow. Comput. Math. Math. Phys. 2016. V. 56. Issue 5. P. 826-840.
6. Martynov S.I. Hydrodynamic interaction of particles. Fluid Dyn. 1998. V. 33. P. 245-251.
7. Baranov V. E., Martynov S.I. Effect of the hydrodynamic interaction of a large number of particles on their sedimentation rate in a viscous fluid. Fluid Dyn. 2004. V. 39. P. 136-147.