

УДК 517.91

## **Динамика цепочки частиц в сдвиговом потоке жидкости**

Мартынов С.И., Ткач Л.Ю.

Сургутский государственный университет

*Аннотация:* Приведены результаты численного моделирования динамики цепочки частиц в сдвиговом потоке вязкой жидкости вдоль плоской стенки. Предполагается, что частицы в цепочке могут смещаться относительно друг друга так, что расстояние между двумя соседними остается постоянным. Рассматривается случай, когда первоначальная форма цепочки представляет собой клубок, а затем за счет воздействия сдвигового течения жидкости и коллективного взаимодействия между частицами деформируется, приобретая новую форму. Коллективное взаимодействие частиц в цепочке происходит за счет сил гидродинамического взаимодействия между ними. Проведены расчеты динамики деформирования цепочки с учетом воздействия потока на частицы и их коллективного взаимодействия. Результаты моделирования динамики цепочки приведены с учетом указанных выше воздействий. Найдена равновесная форма цепочки частиц в потоке жидкости.

*Ключевые слова:* численное моделирование, вязкая жидкость, коллективное взаимодействие частиц, цепочка, деформация.

### **1. Введение**

Одним из результатов взаимодействия частиц в дисперсных системах является образование структур. Например, в жидкостях с магнитными частицами могут образовываться такие структуры, как капельные агрегаты, рыхлые фрактальные кластеры, цепочки частиц. Формирование последних характерно для эмульсий с полидисперсными каплями магнитной жидкости при невысокой концентрации дисперсной фазы. Образование цепочек частиц в магнитной жидкости подтверждается множеством экспериментальных и численных исследований структуры магнитной жидкости [1, 2]. К таким исследованиям относятся: анализ полученных экспериментальных реологических, диффузионных, оптических свойств магнитной жидкости, моделирование структурообразования в магнитной жидкости на основе метода Монте-Карло и метода молекулярной динамики. Имеется достаточно много работ по динамике цепочечных агрегатов в жидкости. В пионерских работах, связанных с проблемой агрегирования в жидких дисперсных системах, цепочки частиц моделировались недеформируемыми эллипсоидами вращения, что давало возможность использовать известные результаты по гидродинамике жидкости с эллипсоидальными частицами. Примером такого рода работ могут служить работы [4, 5]. Другой подход к изучению цепочечных структур заключается в учете парных сил взаимодействия частиц друг с другом, что позволяет найти равновесную конфигурацию расположения сферических частиц относительно друг друга за счет сил диполь-дипольного взаимодействия [6]. Однако при этом не учитывается влияние гидродинамического взаимодействия цепочки с окружающей жидкостью и частиц между собой.

Еще одним направлением, в котором проявляется интерес к исследованию ди-

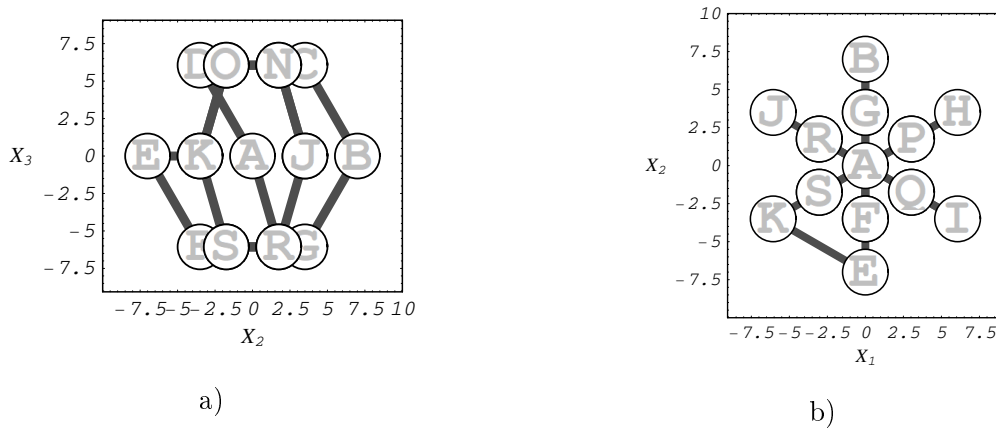
динамики цепочек частиц, является проблема теоретического построения моделей полимерных молекул. Это связано с тем, что одним из подходов при моделировании полимерных молекул является их представление в виде точечных масс или бусинок, соединенных линейно системой жестких стержней [7]. Частицы в этой цепочке представляют собой конечные участки молекулярной цепи, а стержни не оказывают гидродинамическое сопротивление. При моделировании полимерных молекул методом молекулярной динамики силы взаимодействия между частицами в цепочке определяются потенциальной энергией парных взаимодействий частиц.

Во всех указанных выше случаях, при моделировании динамики цепочек и их деформации необходимо учитывать гидродинамическое взаимодействие как формы цепочки с жидкостью, так и всех частиц в цепочке между собой. Авторы предложили подход, учитывающий эти взаимодействия [8]. На основе этого подхода в работе [9] моделировалась динамика различных цепочечных структур с учетом гидродинамического взаимодействия. В частности, была рассмотрена динамика цепочки из 125 частиц, уложенных в виде прямоугольного параллелепипеда, состоящего из 5 слоев по 25 частиц в каждом слое, в сдвиговом потоке. Укладка частиц в слоях представляла собой спираль. Результаты моделирования показали, что в сдвиговом потоке слои вытягиваются вдоль потока в виде петель. Конечная форма такой цепочки не была рассчитана. Между тем, конечная форма цепочки в сдвиговом потоке оказывает существенное влияние на эффективную вязкость системы. Поскольку для расчета конечной формы цепочки из 125 частиц требуется достаточно большие вычисления, в настоящей работе предлагается провести такой расчет для цепочки с меньшим количеством частиц.

## 2. Постановка задачи

Рассматривается цепочка из 19 твердых сферических частиц радиуса  $a$ , помещенных в несжимаемую жидкость плотности  $\rho$  и вязкости  $\eta$ . Жидкость ограничена плоской поверхностью  $X_3 = -15$ , вдоль которой происходит сдвиговое течение со скоростью  $U_2 = 0.5x_3 + 7.5$ . Предполагается, что частицы удерживаются в цепочке внутренними силами или связаны между собой тонкими нерастяжимыми стержнями, гидродинамическим сопротивлением которых в жидкости можно пренебречь по сравнению с сопротивлением частиц. Предполагается, что стержневые соединения позволяют частицам совершать поступательное и вращательное движение. Фактически такого рода стержни – вариант потенциальных сил взаимодействия между соседними частицами, не позволяющим менять расстояние между ними. Считается, что в начальный момент цепочка представляла собой форму, представленную на рис. 1.

Структура представляет собой три слоя частиц, симметрично расположенных относительно оси  $X_3$  параллельно плоскости  $X_1X_2$ . В слое, находящемся в плоскости  $X_3 = 6.0622$ , симметрично расположены частицы  $DONCML$  имеющие следующие координаты  $D = (0, -3.5, 6.0622)$ ,  $C = (0, 3.5, 6.0622)$ ,  $O = (3.0311, -1.75, 6.0622)$ ,  $N = (3.0311, 1.75, 6.0622)$ ,  $L = (-3.0311, -1.75, 6.0622)$ ,  $M = (-3.0311, 1.75, 6.0622)$ . В среднем слое, находящемся в плоскости  $X_3 = 0$ , расположены частицы  $ABEHIJK$ , имеющие следующие координаты  $A = (0, 0, 0)$ ,  $B = (0, 7, 0)$ ,  $E = (0, -7, 0)$ ,  $K = (-6.0622, -3.5, 0)$ ,  $J = (-6.0622, 3.5, 0)$ ,  $H = (6.0622, 3.5, 0)$ ,  $I = (6.0622, -3.5, 0)$ . Частицы  $FSRGPQ$  находятся в плоскости  $X_3 = -6.0622$  и имеют расположение, симметричное частицам  $DONCML$  относительно плоскости  $X_3 = 0$  соответственно указанному порядку перечисления. Соединение стержнями частиц в цепочке происходит



**Рис. 1.** Начальная форма цепочки

последовательно в следующем порядке: *HMOKSPFDCBGFEILNJRQ*. Соединение стержнями выбрано таким образом, чтобы начальная форма цепочки частиц напоминала свернутую в клубок нить. В литературе такая форма считается равновесной для полимерной цепи в отсутствии течения жидкости. Цель работы - определить равновесную форму цепочки при сдвиговом течении жидкости. Для расчета динамики цепочки частиц и ее деформирования записываются уравнения поступательного движения каждой частицы учетом действующих на нее сил реакции стержней и сил гидродинамического взаимодействия, а также уравнений вращательного движения, с учетом моментов, действующих на частицы. Система уравнений имеет вид:

$$\mathbf{F}_k^i + \mathbf{F}_k^e + \mathbf{F}_k^h = 0, \quad \mathbf{T}_k^i + \mathbf{T}_k^e + \mathbf{T}_k^h = 0 \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{F}_k^h$  – силы,  $\mathbf{T}_k^h$  – моменты сил со стороны жидкости,  $\mathbf{F}_k^i$ ,  $\mathbf{T}_k^i$  – внутренние,  $\mathbf{F}_k^e$ ,  $\mathbf{T}_k^e$  – внешние силы и моменты сил, действующие на частицу с номером  $k$ .

Наличие стержней диктует дополнительные условия, накладываемые на положения частиц в цепочке. Условие заключается в неизменности расстояния между частицами, соединенными стержнями. Аналитически это записывается в виде:

$$\mathbf{r}_{ij} \frac{\partial \mathbf{r}_{ij}}{\partial t} = 0 \quad (2)$$

Здесь  $\mathbf{r}_{ij}$  – радиус-вектор, соединяющий центры частиц  $i$  и  $j$ , соединенных между собой стержнями. Условие (2) означает, что относительная скорость этих частиц вдоль радиус-вектора равна нулю. При этом составляющая относительной скорости частиц в плоскости перпендикулярной вектору  $\mathbf{r}_{ij}$  может отличаться от нуля. Используя условие (2), из уравнений (1) можно определить величины усилий в стержнях. Выражения для  $\mathbf{F}_k^h$ ,  $\mathbf{T}_k^h$ , учитывающие гидродинамическое взаимодействие частиц в жидкости, получены в работах [8, 10] в приближении Стокса. Разработанный в этих статьях метод позволяет учитывать взаимодействие большого числа частиц, в том числе и при течении вблизи плоской стенки.

### 3. Метод решения

Система (1) содержит 114 алгебраических уравнений. Для численного решения системы уравнений (1) использовалась специальная программа, которая результаты вычислений выводит в виде визуализации динамики системы частиц. Кроме того, при

компьютерном моделировании динамики цепочки частиц применялся метод подобия, разработанный в работе [8]. Метод дает хорошее согласие результатов моделирования с экспериментом. При использовании этого метода при расчетах используются модельные параметры, которые связаны с реальными условиями гидродинамического подобия реального и модельного процессов. Переход к модельным параметрам связан с точностью вычислений. Например, вычисления ведутся с точностью до шести значащих цифр после запятой. Если модельный размер частиц имеет порядок 1 см, то при модельной вязкости 1 г/(см·с) и плотности жидкости 1 г/см<sup>3</sup> скорость частиц имеет порядок не более 10<sup>-1</sup> см/с (для того, чтобы число Рейнольдса было меньше единицы). Для модельного интервала времени 10<sup>-1</sup> с перемещение частицы имеет порядок менее 10<sup>-2</sup> см, что составляет не более одного процента от радиуса частицы. При реальных параметрах: размере частицы порядка 10<sup>-4</sup> см, вязкости порядка 10<sup>-2</sup> г/(см·с), плотности 1 г/см<sup>3</sup> скорость частицы должна быть не более 10 см/с (число Рейнольдса должно быть одинаковым для модельных параметров и реальных). Используя результаты работы [8], получим реальный интервал времени, за который вычисляется перемещение, равен 10<sup>-7</sup> с и само перемещение частицы составляет менее 10<sup>-6</sup> см, что тоже не превышает один процент от радиуса частицы, но уже превышает число значащих цифр, принятых для расчета. Таким образом, применение модельных параметров приводит к повышению точности вычислений и упрощает их.

#### **4. Результаты моделирования**

Результаты моделирования представлены на рис. 2.

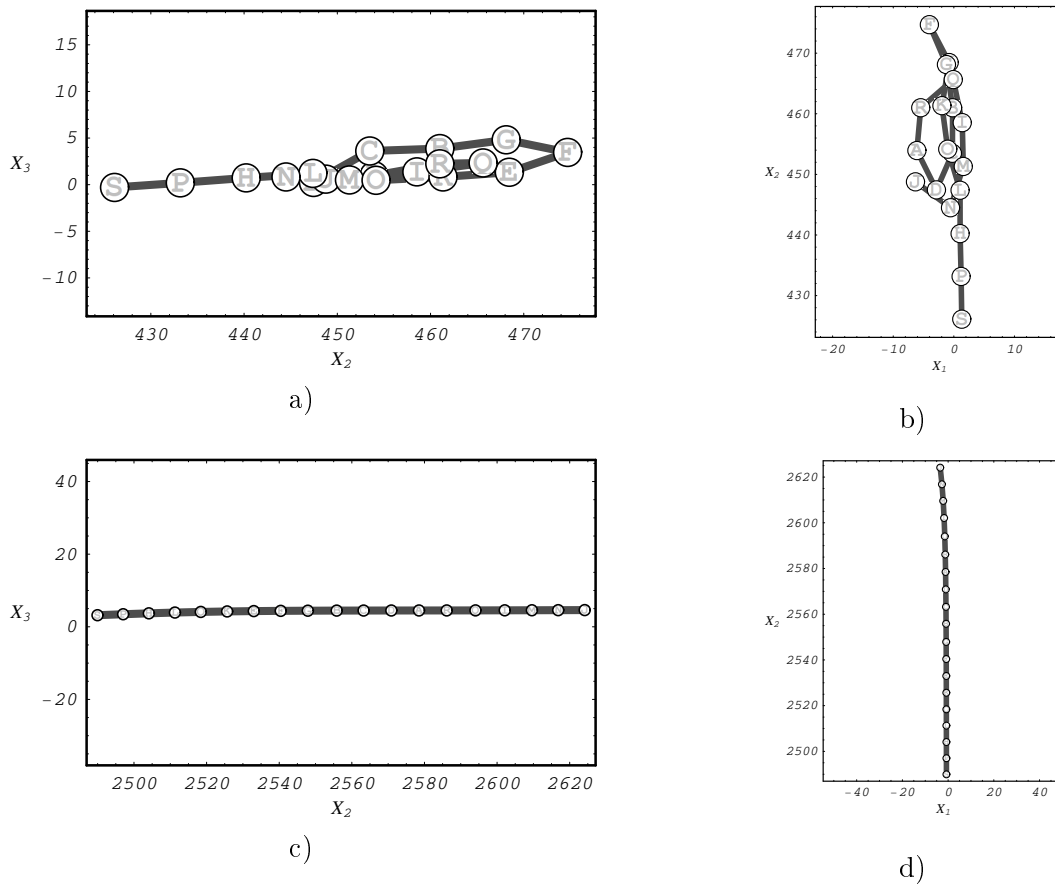
Как видно из представленных результатов моделирования динамики цепочки частиц, начальная деформация цепочки качественно совпадает с результатами работы [9]. А именно: сначала цепочка частиц деформируется с появлением петель. Дальнейшая деформация цепочки частиц связано с постепенным разворачиванием образовавшихся петель и вытягиванием цепочки вдоль потока жидкости. Проведенное моделирование динамики деформации цепочки частиц дает ответ на вопрос о равновесной форме цепочки частиц в сдвиговом потоке жидкости. Вычисления показывают, что такой формой является вытянутая на всю длину цепочка частиц по направлению потока жидкости и параллельная плоскости, вдоль которой происходит течение.

#### **5. Заключение**

Проведено моделирование динамики деформации цепочки частиц в сдвиговом потоке жидкости вдоль плоскости. Учтено гидродинамическое взаимодействие частиц в цепочке между собой в потоке жидкости. Результаты моделирования позволили определить равновесную форму цепочки частиц при воздействии потока жидкости. Показано, что такой формой является цепочка, вытянутая вдоль потока жидкости параллельно плоскости течения.

#### **Литература**

1. Hayes Ch.F. Observation of association in ferromagnetic colloid // J. Colloid. Interface Sci. 1975. Vol. 52. No.2. P.239-242.



**Рис. 2.** Численные расчеты динамики цепочки частиц

2. Krueger D.A. Review of agglomeration in ferrofluids. // IEEE Trans. Mag. 1980. Vol. 16. No.2. P. 251-253.
3. Мартынов С.И. Агрегирование частиц и вязкость суспензии // Инж.-физ. ж. 1998. Т.71. № 4. С.691-697.
4. Lin C.J., Lee K.J., Sather N.F. Slow motion of two spheres in a shear field // J. Fluid Mech. 1970. Vol.43. P.35-47.
5. Wakiya S. Slow motion in Shear Flow of a Doublet of Two Spheres in Contact // Journal of Phys. Soc. of Japan. 1971. Vol.31, No.5. P.1581-1587.
6. Ivanov A.O., Kantorovich S.S. Formation of chains in magnetic fluids: an influence of polydispersity // J. Magn. Magn. Mater. 2002. Vol. 252. P. 244-246.
7. Флори П. Статистическая физика цепных молекул. М.: Мир, 1971. 440 с.
8. Мартынов С.И., Ткач Л.Ю. Моделирование динамики агрегатов частиц в вязкой жидкости // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2015. Т.55. № 2. С. 285-294.
9. 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. 840-855.

10. Мартынов С.И. Гидродинамическое взаимодействие частиц // Известия РАН, Механика жидкости и газа. 1998. № 2. С. 112-119.

MSC 76D07 76D09 76D17

## Particle Chain Dynamics in a Shear Fluid Flow

S.I. Martynov, L.Yu. Tkach

Surgut State University

*Abstract:* The results of numerical simulation of the dynamics of a chain of particles in a shear flow of a viscous fluid along a flat wall are presented. It is assumed that the particles in the chain can be displaced relative to each other so that the distance between two neighboring particles remains constant. The case is considered when the initial shape of the chain is a coil, and then, due to the influence of the shear flow of the liquid and the collective interaction between the particles, it is deformed, acquiring a new shape. The collective interaction of particles in a chain occurs due to the forces of hydrodynamic interaction between them. The dynamics of chain deformation is calculated taking into account the impact of the flow on particles and their collective interaction. The results of the simulation of the chain dynamics are given taking into account the above effects. The equilibrium shape of a chain of particles in a liquid flow is found.

*Keywords:* numerical simulation, viscous liquid, collective interaction of particles, chain, deformation.

### References

1. Hayes Ch.F. Observation of association in ferromagnetic colloid // J. Colloid. Interface Sci. 1975. Vol.52. No.2. P. 239-242.
2. Krueger D.A. Review of agglomeration in ferrofluids // IEEE Trans. Mag. 1980. Vol.16. No.2. P. 251-253.
3. Martynov S.I. Particle aggregation and suspension viscosity // Inzh.-Fiz. zhurn. 1998. Vol.71. No.4. P. 691-697.
4. Lin C.J., Lee K.J., Sather N.F. Slow motion of two spheres in a shear field // J. Fluid Mech. 1970. Vol.43. P. 35-47.
5. Wakiya S. Slow motion in Shear Flow of a Doublet of Two Spheres in Contact // Journal of Phys. Soc. of Japan. 1971. Vol.31, No.5. P. 1581-1587.
6. Ivanov A.O., Kantorovich S.S. Formation of chains in magnetic fluids: an influence of polydispersity // J. Magn. Magn. Mater. 2002. Vol.252. P. 244-246.
7. Flory P. Statistical mechanics of chain molecules. New York-London-Sydney-Toronto: Interscience publishers. 1969.
8. Martynov S.I., Tkach L.Yu. Simulation of Particle Aggregate Dynamics in a Viscous Fluid // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2015. Vol.55. No.2. P. 282-290.
9. Martynov S.I., Tkach L.Yu. Dynamics of Chain Particle Aggregates in Viscous Flow // Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2016. Vol.56. No.5. P. 826-840.

10. Martynov S.I. Hydrodynamic interaction of particles // Proceedings of the Russian Academy of Sciences. Mechanics of fluid and gas. 1998. No.2. P. 112–119.