

УДК 532.529:541.182

Динамика коагуляции частиц в жидкости

Мартынов С. И.

Сургутский государственный университет

Аннотация: В статье представлены результаты численного моделирования динамики коагуляции частиц в вязкой жидкости. Учтены силы парного взаимодействия, определяемые из потенциальной энергии частиц с одним минимумом, и силы гидродинамического взаимодействия. Моделирование проведено с использованием разработанного программного комплекса для численного решения уравнений гидродинамики в приближении малых чисел Рейнольдса и динамики частиц. В работе представлены результаты численного моделирования динамики структур для двух выражений потенциальной энергии взаимодействия.

Ключевые слова: гидродинамическое взаимодействие частиц, потенциальная энергия, динамика, коагуляция.

В настоящей работе моделируется динамика образования коагуляционной структуры в жидкости в результате действия сил притяжения и отталкивания между частицами и их гидродинамического взаимодействия. Структурирование в жидкости и управление этим процессом представляет собой актуальную задачу, связанную как с практикой создания и использования новых наноматериалов с управляемыми свойствами, так и с теоретическими проблемами моделирования таких процессов [1]. Механизм коагуляции частиц рассматривается, как правило, с точки зрения кинетики этого процесса. В то же время именно динамика процесса определяет, какого рода структура частиц появляется в результате коагуляции. Так в работах [2, 3] рассматривается динамика образования цепочечных структур во внешнем магнитном или электрическом поле. В настоящей работе рассматривается динамика коагуляции системы из 24 случайно расположенных частиц. Учитывались парные взаимодействия всех частиц с силами притяжения и отталкивания. В первой системе силы взаимодействия на порядок больше, чем во второй, причем силы отталкивания проявляются на расстоянии в два раза меньшем, чем для второй.

Для моделирования динамики системы частиц со стержнями записываются уравнения движения каждой частицы с учетом всех сил, действующих на нее со стороны всех других частиц, в том числе и силы гидродинамического взаимодействия, а также, в случае необходимости, уравнения вращательного движения с учетом моментов, действующих на частицы. Система уравнений имеет следующий вид:

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

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 .

При компьютерном моделировании применялся метод подобия [4]. Задавались модельные параметры: размер частиц \hat{a} , вязкость несущей жидкости $\hat{\eta}$, величина сил \hat{F} , действующих между частицами. Реальные параметры связаны с модельными соотношениями, получаемыми из условия подобия гидродинамических процессов. В первом случае сила парного взаимодействия между частицами, находящимися на расстоянии \hat{h} друг от друга, считалась равной $\frac{10(1 - 1.5\hat{a}/\hat{h})}{\hat{h}^2}$, а во втором –

$$\frac{10(1 - 3\hat{a}/\hat{h})}{\hat{h}^2}.$$

Результаты моделирования представлены на рис. 1 и рис. 2.

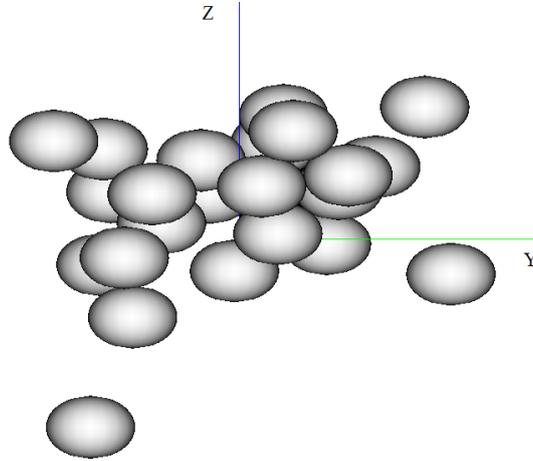


Рис. 1. Образование первой коагуляционной структуры через промежуток времени $\hat{t} = 46$ с.

На рис. 1 изображена получаемая коагуляционная структура в плоскости YZ для первого случая сил взаимодействия между частицами.

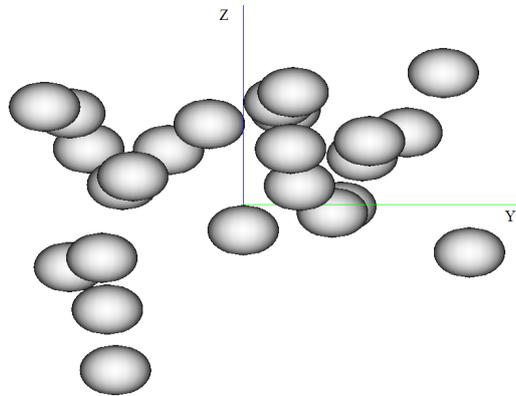


Рис. 2. Образование второй коагуляционной структуры через промежуток времени $\hat{t} = 91$ с.

На рис. 2 изображена получаемая коагуляционная структура в плоскости YZ для второго случая сил взаимодействия между частицами.

Как видно из приведенных рисунков, в рассмотренных случаях образуются разные структуры: в первом случае формируется изотропная хлопьеобразная структура, а во втором – кластер, состоящий из коротких цепочек частиц. Таким образом, результаты работы показывают, что форма структуры существенно зависит от силы взаимодействия между частицами.

Литература

1. Lima E.O., Pereira P. C. N., Löwen H., Apolinario S. W. S. Complex structures generated by competing interactions in harmonically confined colloidal suspensions

// Journal of Physics: Condensed Matter. 2018. Vol. 30, No. 32. 325101.

2. Fertig D., Boda D., Szalai I. A systematic study of the dynamics of chain formation in electrorheological fluids // AIP Advances. 2021. Vol. 11, Issue 2.
3. Manikas K., Vogiatzis G.G., Hütter M., Patrick D. Anderson P.D. Structure formation in suspensions under uniform electric or magnetic field // Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design. 2021. Vol. 4. P. 77–97.
4. Martynov S.I., Tkach L.Yu. Simulation of Particle Aggregate Dynamics in a Viscous Fluid // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2015. Vol. 55, issue 2. P. 282-290.

MSC 76D07, 76D09, 76D17

Dynamics of coagulation of particles in a fluid

S. I. Martynov

Surgut State University

Abstract: The article presents the results of numerical simulation of the dynamics of particle coagulation in a viscous liquid. The forces of pair interaction, determined from the potential energy of particles with one minimum, and the forces of hydrodynamic interaction were taken into account. The simulation was carried out using the developed software package for the numerical solution of hydrodynamic equations in the approximation of small Reynolds numbers and particle dynamics. The paper presents the results of numerical simulation of the dynamics of structures for two expressions of the potential energy of interaction.

Keywords: hydrodynamic interaction of particles, potential energy, dynamics, coagulation.

References

1. E.O. Lima , P.C.N. Pereira, H. Löwen, S.W.S. Apolinario, Complex structures generated by competing interactions in harmonically confined colloidal suspensions, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2018, Vol. 30, No. 32, 325101.
2. D. Fertig, D. Boda, I. Szalai, A systematic study of the dynamics of chain formation in electrorheological fluids, *AIP Advances*, 2021, Vol. 11, Issue 2.
3. K. Manikas, G.G. Vogiatzis, M. Hütter, D. Patrick, P.D. Anderson, Structure formation in suspensions under uniform electric or magnetic field, *Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design*, 2021, Vol. 4, P. 77–97
4. S.I. Martynov, L.Yu. Tkach, Simulation of Particle Aggregate Dynamics in a Viscous Fluid, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2015, Vol. 55, Issue 2, P. 282-290.