

УДК 51-72:004.942:532.529:544.77

Модель самодвижущейся системы вращающихся частиц вблизи плоской стенки

Мартынов С.И.¹, Ткач Л.Ю.¹

Сургутский государственный университет¹

Аннотация: В статье предложена модель самодвижущейся системы вращающихся дипольных частиц вдоль плоской стенки. Механизм самодвижения вращающихся частиц основан на их гидродинамическом взаимодействии со стенкой и между собой. Вращение дипольных частиц создается внешним переменным однородным полем. На основе предложенной модели проведено компьютерное моделирование динамики системы частиц, расположенных в виде прямолинейной и замкнутой цепочки частиц, а также в виде трехмерного облака из случайно расположенных частиц. Вращение частиц рассматривалось как вдоль стенки, так и перпендикулярно ей. Смоделировано самодвижение системы вращающихся частиц при наличии сдвигового потока жидкости.

Ключевые слова: коллективный транспорт, численное моделирование, вязкая жидкость, гидродинамическое взаимодействие, вращающиеся частицы.

1. Актуальность исследования

Изучение механизмов управляемого транспорта системы микрочастиц вблизи стенки представляет практический интерес в связи актуальными задачами биомедицины (процессы образование тромбов в сосудах) и динамики микрочастиц в каналах микрофлюидных устройств [1]. Современные достижения в области нанотехнологий позволяют создавать синтетические наномоторы, использующие взаимодействие со стенкой для формирования направленного движения [2]. При этом сложность динамических процессов, происходящих в системах микрочастиц вблизи стенки, требует дальнейших теоретических исследований в области управляемого транспорта таких систем.

Для одиночной сферы, вращающейся в вязкой ньютоновской жидкости вблизи плоской стенки, аналитические результаты были получены в работе [3] в приближении Стокса. Было найдено, что вращающаяся сфера движется параллельно стенке в направлении, соответствующем направлению качения сферы. Сила, перпендикулярная стенке, появляется при учете инерционных слагаемых в уравнениях движения жидкости и частицы [4]. На основании имеющихся результатов по динамике одиночной частицы можно предположить, что и система вращающихся частиц также будет перемещаться вдоль стенки за счет механизма гидродинамического взаимодействия. В настоящей работе представлены результаты моделирования динамики системы вращающихся дипольных частиц и ее перемещение вдоль стенки за счет гидродинамического взаимодействия. Предполагается, что вращение дипольных частиц вызвано действием переменного внешнего поля, создающего момент силы, вращающий частицы. В работе [5] показано, что такая система формирует неравновесную динамическую структуру в результате гидродинамического взаимодействия частиц между собой. Причем, сформированные структуры вращаются в том же направлении, что и сами частицы. При этом центр масс вращающихся структур остается

неподвижным, хотя размеры структур могут изменяться за счет увеличения расстояния между частицами. Вращение же структуры при наличии плоской стенки должно приводить к перемещению центра тяжести системы. Для подтверждения этого вывода в настоящей работе смоделирована динамика системы из пяти дипольных частиц одинакового радиуса, образующих равновесную структуру в виде прямой или замкнутой цепочки, ориентированной вдоль и перпендикулярно плоскости, а также облака из четырнадцати случайно расположенных над плоскостью частиц. Кроме того, для системы в виде прямолинейной цепочки вращающихся частиц, расположенных вдоль стенки, смоделировано совместное действие вращения частиц и сдвигового течения жидкости на перемещение системы вдоль стенки.

2. Математическая модель

В полубесконечном пространстве, ограниченном плоскостью $Z = 0$, помещается несжимаемая жидкость вязкости η и система из сферических частиц радиуса a , обладающих магнитным моментом $\mathbf{m}$. Рассматривались одномерный, двухмерный и трехмерный случаи задачи. В одномерном случае система из 5 частиц в равновесном состоянии формирует структуру в виде прямолинейной цепочки с расстоянием $4a$ между частицами, расположенной вдоль оси Ox на расстоянии $4a$ от стенки. В двухмерном случае система из 5 частиц в равновесном состоянии формирует плоскую структуру в виде правильного пятиугольника в вершинах которого располагаются частицы, причем суммарный магнитный момент равен нулю. Считалось, что частицы, образующих правильный пятиугольник лежат на окружности радиуса $3a$. Рассматривался случай расположения пятиугольника в плоскости yOz , т.е. перпендикулярно стенке. Расстояние от частиц до стенки в первом случае равно $3a$, а во втором – начальное расстояние от стенки до ближайших частиц в пятиугольнике равно $2.073a$. В трехмерном случае система из 14 частиц случайно расположены в объеме, ограниченном координатами $-4a \leq X \leq 4a$, $-4a \leq Y \leq 4a$, $2a \leq Z \leq 10a$. Приложенное внешнее однородное переменное магнитное поле с напряженностью $\mathbf{H} = \{0; -H_0 \cos(\Omega t); H_0 \sin(\Omega t)\}$ приводит частицы во вращательное движение. Вращательное движение частиц, в свою очередь, приводит к возникновению течения вязкой жидкости и формированию гидродинамических сил и моментов, действующих на частицы. Моделирование динамики рассматриваемых систем частиц следует работе [5]. Система уравнений динамики рассматриваемой системы определяется уравнениями движения жидкости и каждой частицы, входящей в систему. В уравнениях движения частиц учитываются как внутренние, так и внешние силы и моменты, действующих на частицы, в том числе и со стороны жидкости. Так как рассматривается случай малых чисел Рейнольдса, это позволяет использовать следующую систему уравнений для описания динамики системы частиц:

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

Здесь $\mathbf{F}_k^{(h)}$ – силы, $\mathbf{T}_k^{(h)}$ – моменты сил со стороны жидкости, $\mathbf{F}_k^{(e)}$, $\mathbf{T}_k^{(e)}$ – силы и моменты сил со стороны внешнего поля, $\mathbf{F}_k^{(i)}$, $\mathbf{T}_k^{(i)}$ – силы и моменты диполь-дипольного взаимодействия, действующие на частицу с номером k со стороны других частиц. В настоящей работе рассматривается воздействие переменного магнитного поля с частотой, при которой силы инерции можно не учитывать (случай малых частот). Учет внутренних сил взаимодействия частиц проводится на основе парных диполь-дипольных взаимодействий.

Для нахождения гидродинамических сил $\mathbf{F}_k^{(h)}$ и моментов $\mathbf{T}_k^{(h)}$, действующих на частицы, решается следующая система уравнений гидродинамики для скорости $\mathbf{u}$ и давления p :

$$\nabla \mathbf{u} = 0, \quad -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{u} = 0.$$

На поверхности частицы с номером k должны выполняться условия:

$$u_i = V_i^k + \Omega_{ij}^k x_j^k, \quad |\mathbf{X}^k| = a^k.$$

Здесь введены следующие обозначения: $\mathbf{V}^k$ – вектор абсолютной линейной скорости, Ω_{ij}^k – тензор угловой скорости, $\mathbf{X}^k$ – вектор положения точки жидкости относительно центра частицы с номером k и радиусом a^k .

Далеко от частиц должны выполняться условия:

$$u_i \rightarrow 0, \quad p \rightarrow p_0 \quad \text{если } |\mathbf{X}| \rightarrow \infty.$$

Здесь p_0 – невозмущенное давление в жидкости.

3. Результаты моделирования

Первоначально прямолинейная цепочка из пяти дипольных частиц, расположенной вдоль стенки, целиком перемещается по направлению вращения частиц. При этом частицы движутся с различными скоростями, не перемешиваясь между собой. Крайние частицы отстают от трех центральных. Другими словами, при движении частиц образуется выступ, который увеличивается со временем. Это согласуется с экспериментальными результатами работы [6], в которой вращающиеся частицы демонстрировали неустойчивость своей фронтальной структуры с образованием «пальчиковых» образований. При наличии сдвигового течения со скоростями $U_y = 0.1z$ и $U_y = -0.1z$ величина перемещения частиц увеличивается в 1.04 раза для течения с первой скоростью, а для течения со второй скоростью уменьшается в 1.03 раза по сравнению со случаем цепочки без дополнительного вращения частиц. Замкнутая цепочка, в которой частицы расположены в вершинах правильного многоугольника перпендикулярно стенке, перемещается вдоль стенки по направлению вращения частиц, значительно деформируя первоначальную форму. При наличии между частицами в такой цепочке потенциала взаимодействия, имеющего минимум при равновесном положении частиц, приводит к увеличению перемещения за счет вращения всей цепочки в целом. Потенциал взаимодействия стабилизирует форму цепочки в результате взаимодействия со стенкой: она деформируется меньше, чем в случае его отсутствия. Для трехмерной структуры получено перемещение центра тяжести системы на расстояние $l = 0.25a$ по направлению вращения частиц. Таким образом, результаты моделирования показывают, что система вращающихся частиц может перемещаться вдоль стенки за счет механизма гидродинамического взаимодействия.

Литература

1. Chen Y., Demir E., Gao W., Yong Y., Pak O. Wall-induced translation of a rotating particle in a shear-thinning fluid // J. Fluid Mechanics. 2021. Vol. 927. R2.
2. Elgeti J., Gompper G. Microswimmers near surfaces // Eur. Phys. J. 2016. Vol. 225. P. 2333-2352.

3. Dean W.R., O'Neill M.E. A slow motion of viscous liquid caused by the rotation of a solid sphere // *Mathematika*. 1963. Vol. 10, No. 1. P. 13-24.
4. Хаппель Дж., Бреннер Г. Гидродинамика при малых числах Рейнольдса. Москва: Мир, 1976. 630 с.
5. Мартынов С.И., Ткач Л.Ю. Гидродинамический механизм формирования динамической структуры системы вращающихся частиц // *Журнал Средневолжского математического общества*. 2024. Т. 26, № 2. С. 175-194.
6. Driscoll M., Delmotte B., Youssef M., Sacanna S., Donev A., Chaikin P. Unstable fronts and motile structures formed by microrollers // *Nature Phys.* 2017. Vol. 13. P. 375-379.

MSC 76D07, 76D09, 76D17

Model of a self-propelled system of rotating particles near a flat wall

S.I. Martynov ¹, L.Yu. Tkach ¹

Surgut State University ¹

Abstract: A model of a self-propelled system of rotating dipole particles along a flat wall is proposed. The mechanism of self-propelled particles is based on their hydrodynamic interaction with the wall and with each other. The rotation of the dipole particles is generated by an external variable uniform field. Based on the proposed model, a computer simulation of the dynamics of a system of particles arranged in the form of a rectilinear and closed chain of particles, as well as a three-dimensional cloud of randomly distributed particles, was conducted. Particle rotation was considered both along and perpendicular to the wall. The self-propelled system of rotating particles was simulated in the presence of a shear fluid flow.

Keywords: collective transport, numerical modeling, viscous fluid, hydrodynamic interaction, rotating particles.