МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СБЛИЖЕНИЯ ДВУХ КАПЕЛЬ, НАХОДЯЩИХСЯ В ПЛАСТИЧЕСКОЙ СРЕДЕ

Ю.В.Пивоваров,

Институт гидродинамики им. М.А.Лаврентьева СО РАН, Новосибирск

MODELING OF RAPPROCHEMENT PROCESS OF TWO DROPS IN A PLASTIC MEDIUM Yu.V.Pivovarov Lavrentyev Institute of Hydrodynamics of SB RAS, Novosibirsk

In calculating the interaction force of two spherical drops, the stress tensor component normal to the drop surface is taken from the solution of the corresponding problem of the elasticity theory, while the shear component is determined by the plastic properties of the medium. The results of the calculations performed are demonstrated to be in good agreement with experimental data on the character of drop motion and on the yield point of the medium surrounding the drops.

Введение

В работе [1] было осуществлено наблюдение за поведением капель различных масел, находящихся в равноплотном спиртово-водном растворе (матрице), и обнаружено, что если две капли находятся на расстоянии порядка их размеров, то независимо от масштаба системы происходит их медленное взаимное сближение с последующим слиянием в одну каплю. Экспериментальная установка была изолирована от внешних силовых и тепловых воздействий, а эффект сближения наблюдался только при наличии у обеих капель поверхностного натяжения.

В работе [2] сделано предположение, что матрица ведет себя как упругая среда, подчиняющаяся закону Гука. Такое предположение не объясняет механизм сближения капель, так как сила, действующая на каплю со стороны матрицы, всегда равна нулю ввиду уравнений равновесия внутри капли и постоянства поверхностного натяжения на ее границе. Однако из эксперимента известно, что вода, а следовательно и спиртово-водный раствор обладают пределом текучести k_0 , значение которого находится в диапазоне $10^{-4} - 10^{-3}$ Па. Анализ, проведенный в настоящей работе, показывает, что касательные напряжения на границе покоящейся капли не могут по модулю превышать значение k_0 , в то время как ограничения на нормальные напряжения отсутствуют. Поэтому касательные напряжения необходимо скорректировать, а нормальные – оставить такими, какими они были при рассмотрении матрицы как упругой среды. Тогда если сила, обусловленная нормальными напряжениями, будет достаточно велика, чтобы преодолеть сопротивление среды, то капля начнет двигаться (в этом случае уравнения равновесия внутри капли становятся несовместными и их необходимо заменить уравнениями динамики капли, рассматриваемой как упругое твердое тело). Сила, разгоняющая каплю, будет действовать до тех пор, пока капля не пройдет некоторое расстояние порядка размеров одной молекулы воды (3 · 10⁻¹⁰ м). (Этот вывод подтверждают расчеты, сделанные в настоящей работе.) После этого молекулярные связи, за счет которых матрица приобрела свойства твердого тела, разрушатся, некоторый объем вокруг капли станет «жидким», и капля будет двигаться по инерции, тормозя под действием сопротивления среды до тех пор пока не остановится. Затем молекулярные связи в матрице снова восстановятся, что приведет к появлению силы, действующей на каплю. Далее процесс повторится.

В настоящей работе получена формула для приближенного расчета силы, действующей на каплю. Кроме того, осуществлено моделирование движения капли на основании модели Бингама без учета гидродинамического влияния другой капли и получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

1. Определение полей напряжений и перемещений в упругой среде, содержащей две капли, обладающие поверхностным натяжением

Первым шагом при вычислении силы, действующей на каплю, является решение следующей задачи: найти компоненты $T_{\alpha\beta}^k, \alpha\beta \in \{RR, R\theta, \theta\theta, \varphi\phi\}$ тензоров напряжений T^k и компоненты $u_{\alpha}^k, \alpha \in \{R, \theta\}$ векторов перемещений \vec{u}^k (значения k = 1,3 соответствуют первой и второй каплям, k = 2 – матрице), удовлетворяющие уравнениям теории упругости и следующим условиям на поверхности первой капли:

 $T_{RR}^2 - T_{RR}^1 = 2\gamma/R_0$, $T_{R\theta}^2 - T_{R\theta}^1 = 0$, $u_R^2 - u_R^1 = 0$, $u_{\theta}^2 - u_{\theta}^1 = 0$, $\theta \in [0, \pi]$, $R = R_0$. (1) На поверхности второй капли ставятся аналогичные условия. В (1) R, θ, φ ($R \in [0, \infty)$), $\theta \in [0, \pi]$, $\varphi \in [0, 2\pi)$) – местная сферическая система координат в капле (угол θ отсчитывается от оси z, направленной от центра данной капли к центру другой капли); R_0, γ – радиус капли и ее поверхностное натяжение (значения R_0, γ для обеих капель полагаются одинаковыми). Рассматривается осесимметричный случай. Первое условие в (1) задает скачек нормальных напряжений, пропорциональный поверхностному натяжению капли, как это принято в классической гидродинамике. Второе условие определяет непрерывность касательных напряжений, третье и четвертое – непрерывность нормальных и касательных перемещений при переходе через границу двух сред.

Для нахождения тензоров T^k и векторов \vec{u}^k используется альтернирующий метод Шварца, состоящий в сведении задачи в неканонической области к бесконечной последовательности задач в канонических областях (внешней и внутренней частях сферы). Систему двух капель заменим эквивалентной системой капля – зеркальная плоскость, в которой последняя проходит через середину отрезка, соединяющего центры капель ортогонально ему. Такая замена удобна, так как позволяет рассматривать только одну каплю. Поля напряжений и перемещений, созданных другой каплей, соответствуют полям, созданным данной каплей и отраженным от зеркальной плоскости.

Алгоритм альтернирующего метода Шварца формально можно представить как вычисление сумм рядов:

$$T_{\alpha\beta}^{k} = \sum_{\nu=1}^{\infty} (T_{\alpha\beta}^{k,\nu} + T_{\alpha\beta0TP}^{k,\nu}), \ \alpha\beta \in \{RR, R\theta, \theta\theta, \varphi\varphi\}, \ u_{\alpha}^{k} = \sum_{\nu=1}^{\infty} (u_{\alpha}^{k,\nu} + u_{\alpha0TP}^{k,\nu}), \ \alpha \in \{R, \theta\}.$$
(2)

Совокупность первых слагаемых, стоящих в скобках в формулах (2) будем называть прямым решением для *v* -й итерации, совокупность вторых слагаемых – отраженным решением.

Начальное приближение, т.е. прямое решение при $\nu = 1$ построим как сферически симметричное решение задачи теории упругости с граничными условиями (1) для одной капли в безграничной среде [3]. Подставляя общее решение в (1), получим алгебраическую линейную систему двух уравнений, из которой находятся две константы, входящие в общее решение.

Пусть известно v-е прямое решение. Отражая его от зеркальной плоскости, получим v-е отраженное решение. Наконец, потребовав, чтобы сумма v-го отраженного и v+1-го прямого решений удовлетворяла однородным условиям (1), поставим задачу для вычисления v+1-го прямого решения. Эта задача решается с помощью разложения правых частей уравнений и искомого решения по полиномам Лежандра. Подставляя общее решение уравнений теории упругости в граничные условия, получим одну алгебраическую линейную систему двух уравнений и бесконечную последовательность алгебраических линейных систем четырех уравнений, из которых определяются все константы, входящие в общее решение.

В результате проведения всех описанных действий получим рекуррентный алгоритм определения каждого из членов в правых частях формул (2), то есть решение поставленной задачи.

2. Вычисление силы, действующей на каплю

Тензоры напряжений в капле T^1 и в матрице T^2 связаны на поверхности *S* капли граничным условием (см. (1)):

$$T^2 \cdot \vec{n} = (T^1 + (2\gamma / R_0)I) \cdot \vec{n}$$

где *I* – единичный тензор, *n* – внешняя нормаль к поверхности *S*. Сила, действующая на каплю в рамках теории упругости, равна

$$\vec{F} = \oiint_{S} T^{2} \cdot \vec{n} dS = \oiint_{S} (T^{1} + (2\gamma/R_{0})I) \cdot \vec{n} dS = \iiint_{V} (divT^{1} + (2\gamma/R_{0})divI)dV = 0,$$
(3)

так как $divT^1 = 0$ ввиду уравнений равновесия, а дивергенция единичного тензора также равна нулю. Здесь V – объем, занятый каплей. Переход от поверхностного к объемному интегралу осуществлен по формуле Гаусса-Остроградского. Проекция (3) на ось z дает:

$$F_z = F_{z1} + F_{z2} = 0$$

где

$$F_{z1} = 2\pi R_0^2 \int_0^{\pi} T_{RR}^2 \cos\theta \sin\theta d\theta, \quad F_{z2} = -2\pi R_0^2 \int_0^{\pi} T_{R\theta}^2 \sin^2\theta d\theta, \quad R = R_0.$$

Выведем приближенную формулу для вычисления F_{z1} . Для этого поставим в соответствие рядам (2) ряд

$$F_{z1} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} F_{z1n}^{\nu}$$

где индекс *n* означает номер гармоники в разложении решения по полиномам Лежандра, и вычислим старший член этого ряда. Как показал анализ, им является член $F_{z12}^2 = F_{z1}^a$, где

$$F_{z1}^{a} = \frac{48\pi R_{0}\gamma(G_{1}/G_{2}-1)(m_{2}-2)(m_{2}+1)r_{1}^{-7}L(r_{1})}{(2m_{2}-4+(K_{1}/K_{2})(m_{2}+1))((7+8G_{1}/G_{2})m_{2}-5-10G_{1}/G_{2})}$$
(4)

при $L(r_1) \equiv 1$. Здесь r_1 – отношение расстояния между центрами капель к радиусу капли, K_k , G_k , m_k – коэффициенты объемного сжатия, модули сдвига и числа Пуассона (обратные коэффициенты Пуассона) материала капли при k = 1 и матрицы при k = 2. Если теперь ввести поправочный коэффициент в соответствии с таблицей 1, то формула (4) будет точной

r_1	2	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6
$L(r_1)$	4.0195	3.5871	3.1926	2.8724	2.6191	2.4182	2.2563
r_1	2.7	2.8	2.9	3	3.1	3.2	
$L(r_1)$	2.1243	2.0152	1.9238	1.8464	1.7802	1.7231	

Таблица 1. Значения поправочного коэффициента $L(r_1)$

при $G_1/G_2 = 2$, $K_1/K_2 = 5/6$, $m_2 = 2.6$ и давать хорошее приближение для других значений параметров.

Пусть теперь среда является не упругой, а пластической, то есть обладает некоторым пределом текучести k_0 . Простейшей моделью такой среды является модель Бингама [4,5]. Каплю по прежнему будем считать упругим твердым телом. В рамках такой модели область, занятая матрицей, делится на две части: «жидкую» часть, в которой |D| > 0, где $|D|^2$ – второй инвариант тензора скоростей деформаций D, и «твердую» часть, в которой |D| = 0. Тензор напряжений имеет вид:

$$P = -pI + s,$$

где p – гидродинамическое давление, s – девиатор тензора P. Постулируется следующая связь s и D:

$$s_{ii} = (2\rho_0 v_0 + \sqrt{2k_0} / |D|)D_{ii}$$
(5)

 $(\rho_0, v_0 - плотность и кинематическая вязкость материала матрицы). Возводя равенство (5) в квадрат и проводя суммирование по индексам$ *i*,*j* $, после сокращений при <math>|D| \rightarrow 0$ получим условие текучести Мизеса, выполняющееся на границе «жидкой» зоны:

$$|s|^2 = 2k_0^2. (6)$$

В осесимметричном случае в сферических координатах условие (6) принимает вид:

$$s_{RR}^{2} + s_{\theta\theta}^{2} + s_{\varphi\varphi}^{2} + s_{R\theta}^{2} + s_{\theta R}^{2} = 2k_{0}^{2}.$$
 (7)

Предположим, что поле скоростей в матрице тождественно равно нулю, но на некоторой части поверхности капли выполняется условие (7). Так как в этом случае диагональные компоненты тензора *s* обращаются в нуль, а недиагональные равны между собой в силу его симметрии, выражение (7) имеет вид:

$$s_{R\theta} \models P_{R\theta} \models k_0, \quad \theta \in U, \ R = R_0,$$

где *U* – некоторое множество.

Согласно теории жидкости Бингама тензор напряжений *P* в «твердой» ее части может быть неопределенным, т.е. может являться многозначной функцией [4]. Касательная компонента тензора *P* находится в диапазоне

$$-k_0 \le P_{R\theta} \le k_0, \quad \theta \in [0,\pi], \ R = R_0.$$

Так как реологическая модель жидкости Бингама содержит упругий элемент, изображаемый на реологических схемах пружиной, то нормальные напряжения на поверхности капли в покоящейся матрице должны быть взяты из решения задачи теории упругости, рассмотренной в п. 1:

$$P_{RR} = T_{RR}^2, \quad \theta \in [0, \pi], \ R = R_0.$$

Если капля начала двигаться, то из условий прилипания и уравнения неразрывности следует, что на поверхности капли

$$D_{RR} = D_{\theta\theta} = D_{\varphi\varphi} = 0, \ D_{R\theta} = D_{\theta R} = \frac{\partial u}{\partial R},$$

где u – компонента скорости по направлению θ .

Введем функцию $\xi(z)$, означающую долю не разрушенных молекулярных связей, за счет которых матрица приобрела свойства твердого тела, и будем считать, что

$$P_{RR} = \xi(z)T_{RR}^2 - (1 - \xi(z))p, \quad \theta \in [0, \pi], \ R = R_0,$$

где *z* – расстояние, пройденное каплей,

$$\xi(z) = \begin{cases} 1 - z / \Delta z, & z < \Delta z, \\ 0, & z \ge \Delta z, \end{cases}$$

 Δz – значение пути, по прохождении каплей которого молекулярные связи вокруг нее полностью разрушаются.

Полная сила, действующая на каплю, определяется по формуле:

$$G_{z} = \xi(z)F_{z1} + (1 - \xi(z))G_{z1} + G_{z2},$$

где

$$G_{z1} = -2\pi R_0^2 \int_0^{\pi} p \cos\theta \sin\theta d\theta, \quad G_{z2} = -2\pi R_0^2 \int_0^{\pi} P_{R\theta} \sin^2\theta d\theta, \quad R = R_0$$

Если z(t) – расстояние, пройденное каплей за время t, а при $t = t_c$ капля остановилась, то средняя скорость капли в пределах одного цикла определяется по формуле $V_c = z(t_c)/t_c$.

3. Метод расчета гидродинамического течения вокруг капли

Введем преобразование координат:

$$x = \theta$$
, $y = \ln(R/R_0)$.

Пренебрегая влиянием другой капли на гидродинамику течения, получим, что область течения отобразится на прямоугольник $0 \le x \le \pi$, $0 \le y \le Y$, где $Y = \ln(R_2 / R_0)$, R_2 – ралиус сферы, внутри которой происходит движение жидкости.

В [6] был предложен способ регуляризации модели жидкости Бингама, основанный на замене кинематической вязкости v_0 в модели Навье-Стокса на переменную вязкость v(|D|), имеющую в безразмерных переменных следующий вид:

$$\nu(|D|) = \begin{cases} \alpha + 1/(\sqrt{2} |D|), & |D| > 3\delta/2, \\ f(|D|), & \delta/2 \le |D| \le 3\delta/2, \\ \alpha + 1/(\sqrt{2}\delta), & |D| < \delta/2, \end{cases}$$

где f(|D|) – полином пятой степени, осуществляющий склейку значений функции v(|D|), ее первых и вторых производных в точках $|D| = \delta/2$ и $|D| = 3\delta/2$, $\alpha = v_0/v_1$, $v_1 = k_0 R_0/(\rho_0 V_0)$, V_0 – характерная скорость капли. Задачу предлагается решать в переменных вихрь ω – функция тока Ψ . Метод решения этой задачи с переменной вязкостью изложен в работе [7]. Существенным упрощением залачи является отсутствие в ней нелинейных конвективных членов ввиду малости параметра $\text{Re}' = V_0 R_0/v_1 < 10^{-5}$. В то же время в задаче присутствует член $\partial \omega/\partial t$ ввиду того, что число Рейнольдса $\text{Re} = R_0^2/(v_1 t_0)$ не является малым (t_0 – характерное время процесса).

4. Результаты расчетов

Ввиду малости параметров $V_0 = 10^{-6}$ м/с, $t_0 = 10^{-2}$ с не имеет смысла рассматривать все циклы движения капли, а удовольствоваться только 11 значениями средней скорости в точках $r_{1k} = 3 - 0.1k$, $k = \overline{0,10}$, где r_{1k} – значения безразмерного расстояния между центрами капель. Рассчитав или взяв из эксперимента значения $V_c(r_{1k})$, для времени t_k , за которое капля прошла расстояние $(3 - r_{1k})/2$ (если капля стартует при $r_1 = 3$), получим:

$$t_{k} = \frac{1}{2} \int_{r_{1k}}^{3} dr_{1} / V_{c}(r_{1})$$

Для устойчивого счета при $\delta = 0.1$ регуляризуем задачу, положив $\alpha = 0.1$.



Рис. 1. Экспериментальная (сплошная линия) и теоретическая (пунктир) зависимости расстояния между центрами капель от времени

Опишем результаты расчетов для $R_0 = 0.005$ м. После анализа 125 вариантов исходных данных (отношение G_1/G_2 , от которого зависит величина F_{z1} ; значения k_0 и Δz) были получены следующие оптимальные значения параметров: $G_1/G_2 = 4$, $k_0 = 10^{-4}$ Па, $\Delta z = 4 \cdot 10^{-10}$ м. На рис. 1 приведены экспериментальная (сплошная линия) и теоретическая (пунктир) кривые $r_1(t)$ при оптимальных значениях параметров. Видно, что отличия имеются только на заключительном этапе сближения капель, что можно объяснить не учетом гидродинамического взаимодействия капель.

Заключение

Разработан метод расчета процесса сближения двух капель в пластической среде, включающий определение силы взаимодействия капель по приближенной формуле и расчет гидродинамического течения вокруг капли без учета влияния другой капли. Получено хорошее согласие результатов расчета с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы 14.3 Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН.

Список литературы

1. Стебновский С.В. Термодинамическая неустойчивость дисперсных сред, изолированных от внешних воздействий. ПМТФ. Т. 40. 1999. № 3. С. 53–58.

2. Стебновский С.В. О механизме коагуляции дисперсных элементов в средах, изолированных от внешних воздействий. ПМТФ. Т. 40. 1999. № 4. С. 156–161.

3. Лурье А.И. Пространственные задачи теории упругости. М.: Гостехтеоретиздат. 1955.

4. Мосолов П.П., Мясников В.П. Механика жесткопластических сред. М.: Наука. 1981.

5. Шелухин В.В. Модель жидкости Бингама в переменных напряжение–скорость. Докл. АН. Т. 377. 2001. № 4. С. 455–458.

6. Malek J., Ruzicka M., Shelukhin V.V. Herschel-Bulkley fluids: existence and regularity of steady flows. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences. Vol. 15. 2005. № 12. P. 1845–1861.

7. Пивоваров Ю.В. Расчет движения жидкости с переменной вязкостью в области с криволинейной границей. Вычисл. технологии. Т. 10. 2005. № 3. С. 87–107.