

ПЕРМСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ В СПЛОШНЫХ СРЕДАХ

Сборник статей по материалам
Международного симпозиума

(г. Пермь, 16–18 сентября 2021 г.)



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«ПЕРМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ В СПЛОШНЫХ СРЕДАХ

Сборник статей
по материалам Международного симпозиума

(г. Пермь, 16–18 сентября 2021 г.)



Пермь 2021

УДК 532.5
ББК 22.25
Н54

Н54 **Неравновесные** процессы в сплошных средах [Электронный ресурс] : сборник статей по материалам Международного симпозиума (г. Пермь, 16–18 сентября 2021 г.) / отв. ред. Т. П. Любимова ; Пермский государственный национальный исследовательский университет. – Электронные данные. – Пермь, 2021. – 11 Мб ; 206 с. – Режим доступа: <http://www.psu.ru/files/docs/science/books/sborniki/neravnovesnye-proces-sy-v-sploshnyh-sredah.pdf> – Заглавие с экрана.

ISBN 978-5-7944-3718-8

Представлены статьи по материалам Международного симпозиума, проходившего в Перми 16–18 сентября 2021 г. В симпозиуме приняли участие ведущие и молодые ученые, аспиранты и студенты России и зарубежья.

Тематика сборника охватывает современное состояние и актуальные проблемы механики и физики сплошных сред.

Издание предназначено для научных работников, аспирантов и студентов естественно-научных специальностей вузов.

УДК 532.5
ББК 22.25

*Печатается по решению ученого совета физического факультета
Пермского государственного национального исследовательского университета*

ISBN 978-5-7944-3718-8

© ПГНИУ, 2021

Научный комитет

Председатели симпозиума

д.ф.-м.н. Т.П. Любимова, Пермь (Россия)
проф. В. Шевцова, Брюссель (Бельгия)

Члены научного комитета

акад. РАН А.А. Барях, Пермь
д.ф.-м.н. Е.А. Демехин, Краснодар
д.ф.-м.н. Е.В. Ерманюк, Новосибирск
д.ф.-м.н. М.Ю. Жуков, Ростов на Дону
д.ф.-м.н. О.А. Кабов, Новосибирск
д.ф.-м.н. В.Г. Козлов, Пермь
проф. С. Лейн, Лозанна, Швейцария
д.г.н. А.П. Лепихин, Пермь
чл.-корр. РАН И.И. Липатов, Москва
проф. К.Ш. Лю, Пекин, Китай
акад. РАН Д.М. Маркович, Новосибирск
акад. РАН В.П. Матвеев, Пермь
д.ф.-м.н. А.И. Мизев, Пермь
проф. А. Моштаби, Тулуза, Франция
проф. А. Непомнящий, Хайфа, Израиль
д.ф.-м.н. Н.В. Никитин, Москва
д.ф.-м.н. Е.Н. Пелиновский, Нижний Новгород
проф. А. Пиковский, Потсдам, Германия
д.ф.-м.н. О.А. Плехов, Пермь
чл.-корр. РАН В.В. Пухначев, Новосибирск
проф. Б. Ру, Марсель, Франция
проф. П. Саго, Марсель, Франция
д.ф.-м.н. Н.Н. Смирнов, Москва
акад. РАН Э.Е. Сон, Москва
проф. Л. Филиппов, Нанси, Франция
д.ф.-м.н. П.Г. Фрик, Пермь
проф. К. Эккерт, Дрезден, Германия

Локальный организационный комитет

Т.П. Любимова
Л.С. Клименко
М.И. Петухов
Т.В. Демина

К.А. Гаврилов
Н.А. Зубова
Я.Н. Паршакова
А.О. Иванцов

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|-----|
| Алабужев А.А., Володин И.В. Влияние вертикальных вибраций на тонкую пленку магнитной жидкости | 6 |
| Александров В.А. Возбуждение поверхностного потока жидкости в каналах капиллярными колебаниями конечной амплитуды | 15 |
| Алексеев М.С., Ганченко Г.С., Демехин Е.А. Концентрирование ионов и макромолекул около ионоселективной микрочастицы..... | 29 |
| Аль-Музайкер М.А., Колегов К.С., Иванова Н.А., Флягин В.М. Неравномерный нагрев ячейки в испарительной литографии | 40 |
| Андрюкова В.Ю., Тарасов В.Н. Устойчивость системы круговых арок, подкрепленных нерастяжимыми нитями..... | 52 |
| Ватульян А.О., Нестеров С.А. Исследование напряженно-деформированного состояния термоупругих микроструктурных материалов и тел с ультратонкими покрытиями..... | 58 |
| Вертгейм И.И., Шарифулин А.Н., Шарифулин В.А., Плотников С.А. Влияние трёхмерных возмущений на структуру и устойчивость двумерного двоякопериодического течения | 62 |
| Груздь С.А., Самсонов Д.С., Кривилев М.Д. Модель фазового поля для неизотермического смачивания вертикального металлического стержня расплавом..... | 68 |
| Денисова М.О., Костарев К.Г. Влияние конвекции Марангони на массообмен во всплывающей капле с поверхностной реакцией..... | 74 |
| Ефремов Д.В., Уваров С.В., Наймарк О.Б. Калориметрические исследования деформированных образцов из сплава АМгб..... | 77 |
| Зубова Н.А., Любимова Т.П. Нелинейные режимы конвекции трехкомпонентной смеси в двухслойной пористой среде различной конфигурации | 81 |
| Ингель Л.Х., Макоско А.А. Стратифицированные течения в неоднородном поле силы тяжести, обусловленные теплообменом..... | 90 |
| Ингель Л.Х. О динамике инерционных частиц в смерчах..... | 98 |
| Колчанова Е.А., Колчанов Н.В. Влияние закупорки пор на концентрационную конвекцию в анизотропной пористой среде с сорбцией | 108 |
| Колчанова Е.А., Колчанов Н.В. Влияние вибраций разных ориентаций на порог термоконцентрационной конвекции в жидкостно-пористом слое в поле силы тяжести | 111 |
| Костарев К.Г., Торохова С.В. Контракция водных растворов наиболее распространенных кислот, оснований, солей и спиртов..... | 115 |
| Ливашвили А.И., Криштон В.В., Виноградова П.В., Якунина М.И. Светоиндуцированная динамика наночастиц в жидкофазной среде, с учётом концентрационной зависимости коэффициента вязкости | 119 |
| Меньшиков А.И., Демин В.А., Марышев Б.С. Моделирование процесса высокотемпературного силицирования пористой среды..... | 122 |
| Никулин И.Л., Демин В.А. Влияние течения расплава на состояние поверхностной оксидной пленки при индукционной плавке..... | 129 |
| Петухов М.И., Демин В.А. О радиальном термокапиллярном растекании жидкости в цилиндрической полости | 138 |
| Пляскин А.С., Белов Н.Н., Югов Н.Т., Клопотов А.А., Потехаев А.И., Буньков В.Е. Моделирование динамического разрушения армированных углепластиком бетонных слоистых конструкций при ударном нагружении | 143 |

| | |
|--|------------|
| Пономарев Р.Р., Ганченко Г.С., Демехин Е.А. Численное моделирование поведения вязкоэластичных жидкостей около ионоселективных поверхностей... | 147 |
| Попов В.А., Ганченко Г.С., Демехин Е.А. Асимптотическое исследование течения вязкоэластичного электролита около ионоселективной поверхности | 157 |
| Прокопьев С.А., Любимова Т.П., Воробьев А.М. Моделирование в капилляре с учетом неравновесного капиллярного давления | 168 |
| Простомолотов А.И., Везуб Н.А. Гидродинамика и солевой массообмен в специальных конструкциях кристаллизатора при выращивании кристаллов из водно-солевых растворов | 172 |
| Сосунов А.В., Семенова О.Р., Прохоров Н.П. Реальная структура приповерхностного слоя кристалла ниобата лития | 175 |
| Субботин С.В., Ширяева М.А. Инерционные волны и осредненные течения во вращающемся цилиндре с наклонными торцами | 180 |
| Тонков Л.Е., Кузьмин И.М. Численное исследование вынужденных колебаний капель и слоев жидкости | 185 |
| Тюлькина И.В., Голдобин Д.С. Фазовое описание колебательной термоконцентрационной конвекции в смежных слоях пористой среды | 193 |
| Шарифулин А.Н., Плотников С.А., Любимова Т.П. Влияния направлений вибраций и гравитации на формирование вихревых структур неравномерно нагретой жидкости квадратной полости | 198 |
| Шмырова А.И., Шмыров А.В. Структура течения на поверхности пузырька газа, омываемого осесимметричными потоком жидкости | 203 |

Влияние вертикальных вибраций на тонкую пленку магнитной жидкости

А. А. Алабужев^{a,b}, И. В. Володин^a

^aПермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15
email: ivanwolodin@gmail.com

^bУрО РАН Институт механики сплошных сред, 614013, Пермь, Королева, 1
email: alabuzhev@icmm.ru

Исследована горизонтальная неограниченная тонкая пленка феррожидкости, ограниченная снизу твердой немагнитной пластиной, подвергнутой воздействию вертикального статического магнитного поля. Продольный размер намного больше вертикального размера, амплитуда внешних колебаний намного больше толщины тонкой пленки. Исходные уравнения представлены в виде суммы пульсационной и осредненной частей. Получено решение пульсационной части в аналитической форме и найдено решение для бегущей поверхностной волны.

Ключевые слова: феррожидкость; вертикальные вибрации; метод многих масштабов

The influence of vertical vibrations on a thin horizontal ferrofluid film

A. A. Alabuzhev^{a,b}, I. V. Volodin^a

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: ivanwolodin@gmail.com

^bInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Koroleva St. 1, 614013, Perm
email: alabuzhev@icmm.ru

The horizontal unbounded thin ferrofluid film bounded from below by the solid nonmagnetic plate subjected to the vertical static magnetic field is investigated. Longitudinal size is much greater than the vertical size, the amplitude of external vibrations is much greater than the thickness of a thin film. The original equations are represented as the sum of pulsation and averaged parts. The solution of the pulsation part in the analytical form is obtained and the solution is found for the traveling surface wave.

Keywords: ferrofluid; vertical vibrations; multiscale method

1. Введение

Магнитные жидкости или феррожидкости представляют собой коллоидную дисперсию однодоменных частиц в непроводящей жидкости. Большинство всех применений феррожидкости основано на поведении поверхности раздела пленок в присутствии магнитного поля [1-3].

В работе [4] была обнаружена неустойчивость горизонтальной поверхности раздела на твердой пластине в стационарном вертикальном магнитном поле. Эта неустойчивость может быть найдена теоретически, основываясь на дисперсионном

соотношении невязкой поверхностной волны. В работе [5] теоретически исследована параметрическая неустойчивость поверхностной пленки феррожидкости, подверженной вертикальным колебаниям в стационарном магнитном поле. В этом случае влияние колебаний может быть сведено к периодическому модулированному гравитационному полю, поэтому намагниченность начального состояния зависит от времени. Показано, что в слабом магнитном поле возникает параметрическая (фарадеевская) неустойчивость, а в сильном магнитном поле – неустойчивость Розенцвейга. Экспериментальные результаты можно найти в работах [6, 7]. В работе [8] было проведено сопоставимое теоретическое исследование для стационарного горизонтального магнитного поля.

С одной стороны, вязкость оказывает существенное влияние на вышеупомянутые эффекты, поэтому для высоких частот (период колебаний больше времени затухания вязкости) можно разделить поток на невязкое ядро потока и тонкий (стоксовый) вязкий слой вблизи твердой плоскости, но это приближение не подходит для тонких пленок [см. 9]. С другой стороны, при высокой частоте (Ω – частота колебаний) временную зависимость всех полей можно разделить на два временных масштаба: колебательный масштаб (который пропорционален Ω^{-1}) и диссипативный масштаб (который является пропорционален $L^2\nu^{-1}$, где L является характерным пространственным масштабом и ν является кинематической вязкостью). В соответствии с идеей метода многих масштабов в исходную систему можно ввести два времени – быстрое время и осредненное время. Поэтому можно представить все гидродинамические поля как сумму пульсационной части и осредненной части.

Устойчивость тонкой пленки жидкости на границе раздела обычно изучается в длинноволновом приближении. В работе [10] рассматривалась тонкая горизонтальная магнитная пленка в неподвижном вертикальном магнитном поле, подверженная вертикальным колебаниям. Амплитуда колебаний была сопоставима с толщиной тонкой пленки, как в [5, 8].

В настоящей статье мы исследуем поведение тонкой пленки феррожидкости при вертикальных колебаниях в вертикальном статическом магнитном поле. Предполагается, что пленка настолько тонкая, что амплитуда колебаний больше толщины пленки в соответствии с [9] и в отличие от [5, 8].

2. Постановка задачи

Рассматривается бесконечный тонкий слой феррожидкости, над которым располагается невесомый газ. Снизу феррожидкость ограничена твердой поверхностью. На систему по гармоническому закону действуют вертикальные вибрации постоянной амплитуды и частоты. Введем декартовую систему координат с базисом (i, j) так, как показано на рис. 1.

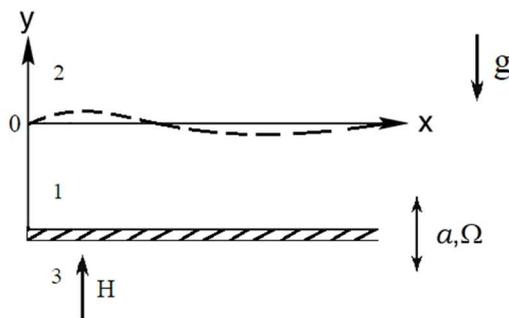


Рис. 1. Геометрия рассматриваемой задачи

Считаем, что среда вязкая и несжимаемая, в ней отсутствуют свободные электрические заряды, время релаксации магнитного поля полагаем бесконечно малым. В таком случае система уравнений для двумерной задачи, определяющая динамику движения, имеет вид [1]:

$$\begin{aligned}\nabla \mathbf{v} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{v} + \mathbf{f}, \\ \nabla \mathbf{B} &= 0, \nabla \times \mathbf{H} = 0,\end{aligned}$$

где $\mathbf{v}(u, v)$ – скорость потока, p, ν, ρ – давление, вязкость и плотность жидкости, соответственно, \mathbf{f} – внешняя сила, \mathbf{H} – напряженность магнитного поля, \mathbf{B} – индукция магнитного поля, ∇ – векторный оператор дифференцирования первого порядка, $\Delta = \nabla \nabla$ – оператор Лапласа.

Вертикальные вибрации, воздействующие на систему, позволяют перенормировать внешнюю силу \mathbf{f} , записав ее в виде $\mathbf{f} = \mu_0 M \nabla H - g \mathbf{j} + a \Omega^2 \sin(\omega t) \mathbf{j}$, где μ_0 – магнитная постоянная, M – вектор намагниченности. С физической точки зрения такая перенормировка и наличие последнего слагаемого в определении внешней силы означают изменение системы отсчета с лабораторной на неинерциальную, связанную с движущейся полостью.

В такой постановке физические процессы в системе зависят от двух характерных времен – времени вязкого затухания, за которое поверхность пленки, после единичного колебания, возвращается к своему первоначальному состоянию и пульсационному времени, определяющему частоту колебаний.

В рассматриваемой задаче движение жидкости вызывается двумя механизмами – вертикальными вибрациями и наличием магнитного поля. В настоящей статье ставится задача определить их влияние относительно друг друга на устойчивость поверхности раздела.

Уравнения $y = \xi(x, t)$ и $y = -c_0$ определяют свободную поверхность движущейся магнитной жидкости и твердую поверхность, соответственно. Граничные условия, с учетом изменения системы координат, на этих двух поверхностях будут иметь следующий вид:

на твердой границе $y = -c_0$:

$$\begin{aligned}u &= v = 0, \\ H_{1x} &= H_{3x}, \\ B_{1y} &= B_{3y},\end{aligned}$$

на свободной поверхности $y = \xi(x, t)$:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \xi = v_y,$$

$$\begin{aligned}
p - p_a = & \frac{2\rho v}{1 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2} \left\{ \frac{\partial u}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 - 1 \right] \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} \right\} - \frac{\alpha \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}}{\left[1 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 \right]^{3/2}} - \\
& - \frac{\mu_0}{2 \left[1 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 \right]} \left[M_y - M_x \frac{\partial \xi}{\partial x} \right]^2, \\
(H_{1x} - H_{2x})\tau_x + (H_{1y} - H_{2y})\tau_y = & 0, \\
(B_{1x} - B_{2x})n_x + (B_{1y} - B_{2y})n_y = & 0,
\end{aligned}$$

где p_a – атмосферное давление, α – коэффициент поверхностного натяжения, $n(n_x, n_y)$ – единичный вектор нормали к поверхности $y = \xi(x, t)$, $\tau(\tau_x, \tau_y)$ – единичный касательный вектор, M_x и M_y – x – и y – компоненты вектора намагниченности, соответственно. Численные индексы у вектора магнитной индукции и вектора напряженности магнитного поля обозначают материальную среду. Область 1 занята феррожидкостью, области 2 и 3 – немагнитные среды выше и ниже слоя феррожидкости, соответственно (см. рис. 1).

3. Метод решения

Обезразмерим исходные уравнения, полагая c_0 , $c_0^2 v^{-1}$, νc_0^{-1} , $\rho v^2 c_0^{-2}$ в качестве единиц длины, времени, скорости и давления, соответственно. Поскольку мы рассматриваем тонкую пленку, то ее продольный размер (L) много больше вертикального (c_0), $\varepsilon = c_0 / L \ll 1$, и мы можем воспользоваться мультискейлинговым методом для упрощения исходных уравнений. Перенормируем пространственные переменные и компоненты скорости следующим образом: $x = \varepsilon X$, $y = Y$, $a = \varepsilon A$, $U = \varepsilon u$ и $V = \varepsilon^2 v$, где маленькие буквы обозначают новые переменные. Выбор такого перемасштабирования обусловлен тем, что в уравнении неразрывности в главный порядок должны входить обе компоненты скорости.

Как уже было сказано, в системе присутствует два характерных времени и они отличаются по порядку, поэтому есть возможность разделить все физические поля на быстрые пульсационные ($\tau = \omega t$) и медленные осредненные ($T = \varepsilon^2 t$).

$$u = \langle u \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \tilde{u},$$

$$v = \langle v \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \tilde{v},$$

$$p = \langle p \rangle + \frac{1}{\varepsilon} \tilde{p},$$

$$\xi = \langle \xi \rangle + \varepsilon \tilde{\xi},$$

где скобки обозначают осредненную часть решения, тильда – пульсационную. Выбор такого скейлинга диктуется тем, что в главном порядке изменение пульсационной части давления должно вызываться вертикальными вибрациями.

Еще один механизм движения связан с наличием магнитного поля. Считаем, что магнитное поле оказывает существенное влияние только на осредненное течение, т.е. пульсационная часть мала. В таком случае можно представить его в виде суммы стационарной части (H_0), осредненного поля ($\langle \mathbf{h}_1 \rangle$) и пульсационного поля ($\tilde{\mathbf{h}}_1$):

$$\mathbf{H} = H_0 \mathbf{j} + \langle \mathbf{h} \rangle + \varepsilon \tilde{\mathbf{h}}$$

Бесконечно малое время релаксации магнитного поля физически означает, что при единичном колебании магнитное поле мгновенно меняет свою величину, подстраиваясь под внешние изменения.

4. Пульсационное течение

Разделение исходных уравнений на две части вместе с линеаризацией по ε приводит к следующей системе для пульсационных компонент:

$$\omega \frac{\partial u}{\partial \tau} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2},$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} + a\omega^2 \sin \tau = 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0,$$

Для корректного замыкания системы уравнений необходимо «снести» граничные условия на невозмущенную поверхность относительно быстрого времени τ . Это достигается путем раскладывания граничных условий в ряд Тейлора по малому параметру ε , при условии $y = \langle \xi(x, t) \rangle + \varepsilon \xi$. Тогда граничные условия принимают вид в главном порядке разложения по ε :

$$y = -1: u = v = 0,$$

$$y = \langle \xi(x, T) \rangle: \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad p = 0, \quad \omega \frac{\partial \xi}{\partial \tau} + u \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x} = v,$$

Знаки тильды опущены, ω – безразмерная пульсационная частота, $\frac{\partial}{\partial \tau}$ – производная по быстрому пульсационному времени. Поскольку нас интересует вклад пульсаций в среднее течение и пульсации действуют на систему по гармоническому временному закону, решение допустимо искать в виде: $u = a\omega \operatorname{Re}(A(x, y) e^{i\tau})$, $v = a\omega \operatorname{Re}(B(x, y) e^{i\tau})$, $p = a\omega \operatorname{Re}(C(x, y) e^{i\tau})$, $\xi = a\omega \operatorname{Re}(D(y) e^{i\tau})$.

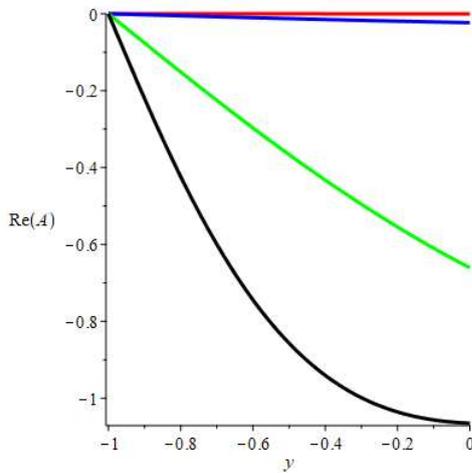
Решение для пульсационной части в таком случае будет иметь вид:

$$A = - \left(\frac{\text{ch}(\lambda(y-\xi))}{\text{ch}(\lambda(1+\xi))} - 1 \right) \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad \lambda^2 = i\omega, \quad C = i\omega(y-\xi),$$

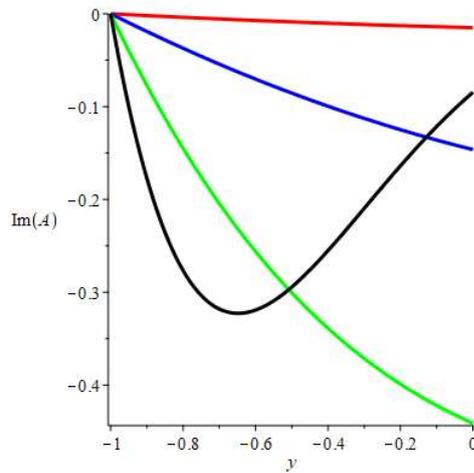
$$B = - \frac{1}{\lambda \text{ch}(\lambda(1+\xi))} \left((\text{sh}(\lambda(1+\xi)) + \text{sh}(\lambda(y-\xi))) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \lambda \frac{1 - \text{sh}(\lambda(y+1))}{\text{ch}(\lambda(1+\xi))} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 \right) + (y+1) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2},$$

$$D = - \frac{i}{\omega} \left(B - A \frac{\partial \xi}{\partial x} \right).$$

где ξ – осредненное значение положения поверхности раздела, i – мнимая единица. Примеры распределения $\text{Re}(A)$ и $\text{Im}(A)$ при различных ω поперек слоя феррожидкости приведены на рис. 2.



(a)



(b)

Рис 2. Амплитуда A продольной компоненты пульсационной скорости. Действительная (a) и мнимая (b) части.

$\omega = 0.01$ – красная линия, $\omega = 0.1$ – голубая, $\omega = 1$ – зеленая, $\omega = 10$ – черная.

Так как A пропорционально $\partial \xi / \partial x$, значение последней не влияя на качественный вид зависимости. Для более детального выяснения поведения пульсационного решения были построены функции тока (ψ) для четырех последовательных временных интервалов. Они приведены на рис. 3.

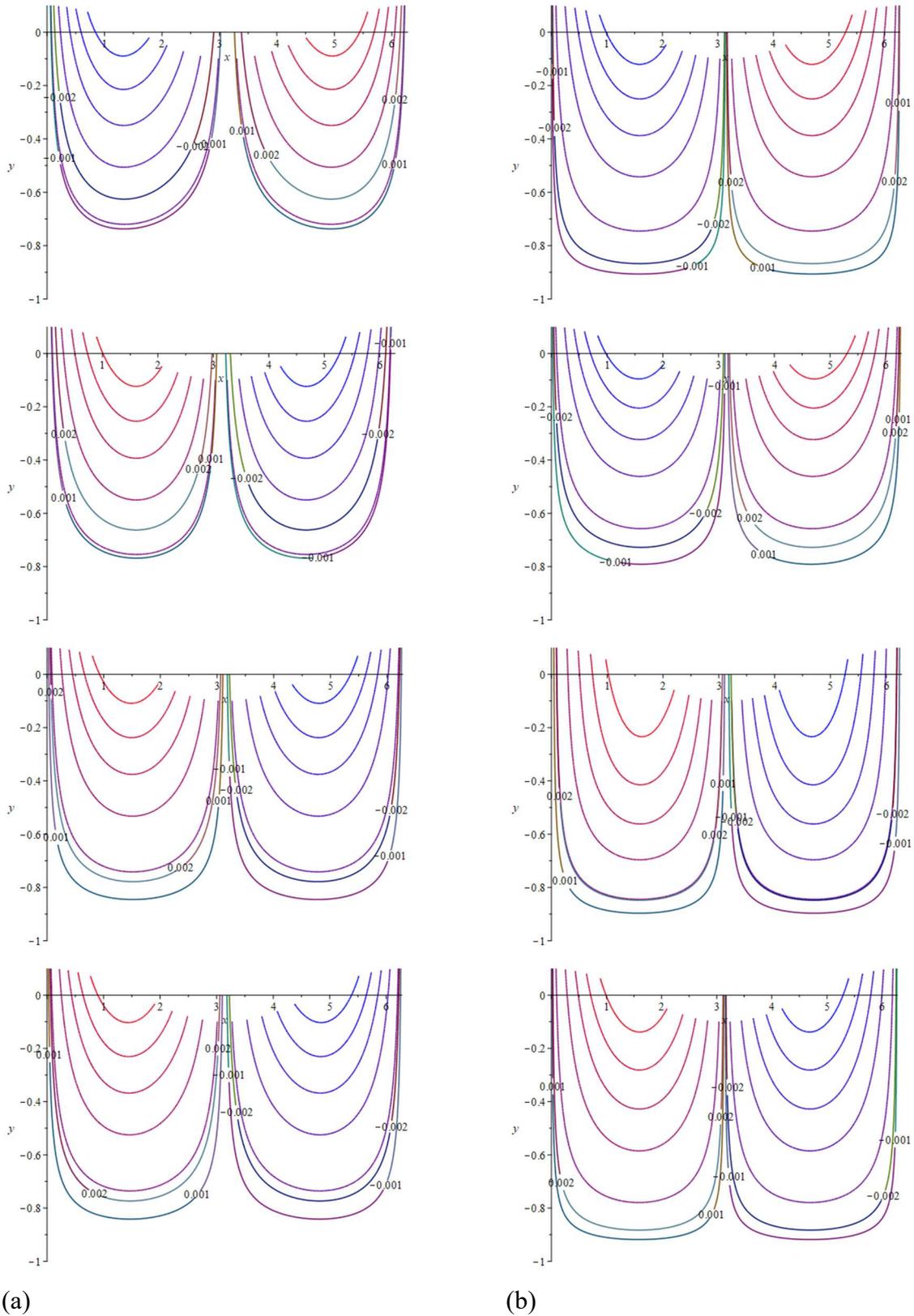


Рис 3. Функции тока Ψ для пульсационной части в последовательные моменты времени $\tau=0, 0.25\pi, 0.5\pi, 0.75\pi$ (сверху вниз). (a) $\omega = 1$, (b) $\omega = 10$.

5. Осредненное течение

Очевидно, что средние компоненты не зависят от пульсационного времени. С учетом вышеизложенного осредненная часть будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \langle u \frac{\partial u}{\partial x} \rangle + \langle v \frac{\partial u}{\partial y} \rangle &= -\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x} + \frac{\partial^2 \langle u \rangle}{\partial y^2} + Ha \frac{\partial}{\partial x} (h + \frac{1}{2} h^2), \\ -\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial y} - G + Ha \frac{\partial}{\partial x} (h + \frac{1}{2} h^2) &= 0, \\ \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial x} + \frac{\partial \langle v \rangle}{\partial y} &= 0, \end{aligned}$$

$$y = -1: \langle u \rangle = \langle v \rangle = 0,$$

$$\begin{aligned} y = \langle \xi(x, t) \rangle: \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} &= -\langle \xi \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \rangle, \quad p = -Ca \frac{\partial^2 \langle \xi \rangle}{\partial x^2} - \langle \xi \frac{\partial p}{\partial y} \rangle - \frac{1}{2} Ha (\chi_1^2 (1+h)^2 - \chi^2), \\ \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial T} &= -\langle u \rangle \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x} - \langle u \frac{\partial \xi}{\partial x} \rangle + \langle v \rangle + \langle \xi \frac{\partial v}{\partial y} \rangle, \end{aligned}$$

где $\frac{\partial}{\partial T}$ – производная по медленному среднему времени, $\chi_1(x)$ – дифференциальная магнитная восприимчивость среды, χ – магнитная восприимчивость, $G = g c_0^3 v^{-2}$ – гравитационное число, $Ca = \gamma c_0 \rho^{-1} v^{-2}$ – капиллярное число, $Ha = \mu_0 \chi \rho^{-1} v^{-2} H_0^2 c_0^2$. y – компоненту осредненной части магнитного поля h в первом приближении считаем функцией от x, T .

6. Заключение

В данной работе было начато исследование поведения ультратонкой магнитной пленки в постоянном магнитном поле при вертикальных колебаниях. Амплитуда колебаний больше, чем толщина пленки. Исходные уравнения были разделены на две части и представлены в виде суммы пульсирующего и осредненного течений относительно два разных масштабов времени. Период вибраций сравним со временем релаксации поперек плёнки. Найдено решение пульсирующей части для бегущей поверхностной волны. Задачу об устойчивости такого течения можно разделить на две для недеформируемой и деформируемой поверхности раздела. Первая сводится к задаче Стокса, вторая к неустойчивости Фарадея.

Список литературы

1. *Rosensweig R. E.* Magnetic Fluids // Annual Review of Fluid Mechanics. 1987. Vol. 19. P. 437-461. DOI: 10.1146/annurev.fl.19.010187.002253
2. *Puri I. K., Ganguly R.* Particle Transport in Therapeutic Magnetic Fields // Annual Review of Fluid Mechanics. 2014. Vol. 46. P. 407-440. DOI: 10.1146/annurev-fluid-010313-141413
3. *Huang L., Michels D. L.* Surface-only ferrofluids // ACM Transactions on Graphics. 2020. Vol. 39. N.6. P. 1-17. DOI: 10.1145/3414685.3417799

4. *Cowley M. D., Rosensweig R. E.* The interfacial stability of a ferromagnetic fluid // *Journal of Fluid mechanics.* 2006. Vol. 30. N.4. P. 671-688. DOI: 10.1017/S0022112067001697
5. *Müller H. W.* Parametrically driven surface waves on viscous ferrofluids // *Physical Review E.* 1998. Vol. 58. N.5. DOI: 10.1103/PhysRevE.58.6199
6. *Mahr T., Groisman A., Rehberg I.* Non-monotonic dispersion of surface waves in magnetic fluids // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* 1996. Vol. 159. N. 1-2. P.45-50. DOI: 10.1016/0304-8853(96)00297-1
7. *Richter R., Reimann B., Lange A., Rupp P., Rothert A.* Magnetic Liquid Patterns in Space and Time // *Advances in Solid State Physics.* 2003. Vol. 43. P. 789-799. DOI: 10.1007/978-3-540-44838-9_56
8. *Mekhonoshin V. V., Lange A.* Faraday instability on viscous ferrofluids in a horizontal magnetic field: Oblique rolls of arbitrary orientation // *Physical Review E.* 2002. Vol. 65. DOI: 10.1103/PhysRevE.65.061509
9. *Korovin V. M.* Rosenzweig instability in a thin layer of a magnetic fluid // *Technical Physics.* 2013. Vol.58 P. 1721–29. DOI: 10.1134/S1063784213120128
10. *Shklyaev S., Khenner M., Alabuzhev A. A.* Enhanced stability of a dewetting thin liquid in a single-frequency vibration field // *Physical Review E.* 2008. Vol. 77. DOI: 10.1103/PhysRevE.77.036320

Возбуждение поверхностного потока жидкости в каналах капиллярными колебаниями конечной амплитуды

В. А. Александров

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН,
426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34
email: ava@udman.ru

Экспериментально обнаружено и исследовано возбуждение поверхностного потока жидкости в каналах капиллярными колебаниями конечной амплитуды, создаваемыми осцилляторами, подведенными к поверхности жидкости напротив полости четвертьволновых резонаторов, установленных в каналах. Вибрирующие источники капиллярных волн вследствие периодической локальной деформации поверхности жидкости создают избыточную искривленную поверхность с энергией, пропорциональной поверхностному натяжению жидкости и деформации поверхности. Поток образуется из-за переноса бегущими капиллярными волнами поверхностной энергии и избыточной поверхности, плотность потока которой равна потоку деформации. Показаны движущиеся устройства с капиллярно-волновым ускорителем потока в каналах.

Ключевые слова: пьезоэлектрический преобразователь; капиллярные колебания и волны; поверхностный поток жидкости; канал; волновод; четвертьволновой резонатор.

Excitation of surface flow of a liquid in channels by capillary oscillations of finite amplitude

V. A. Aleksandrov

Udmurt Federal Research Center, T. Baramzinoy St. 34, 426067, Izhevsk
email: ava@udman.ru

The excitation of the surface flow of a liquid in the channels by capillary oscillations of finite amplitude created by oscillators brought to the surface of the liquid opposite the cavity of quarter-wave resonators installed in the channels is experimentally detected and investigated. Vibrating sources of capillary waves due to periodic local deformation of the liquid surface create an excessive curved surface with an energy proportional to the surface tension of the liquid and the deformation of the surface. The flow is formed due to the transfer of surface energy and excess surface by the traveling capillary waves, the flux density of which is equal to the deformation flux. Moving devices with a capillary-wave accelerator of the flow in channels are shown.

Keywords: piezoelectric transducer; capillary oscillations and waves; surface fluid flow; channel; waveguide; quarter-wave resonator.

1. Введение

Вибрации стержней и пластин в виде изгибных колебаний, возбуждаемых пьезоэлектрическим преобразователем, на свободной поверхности жидкости позволяют возбуждать капиллярные волны, создающие на поверхности жидкости струйные и вихревые течения [1]. Распределенные течения на поверхности воды были получены с помощью вибрирующих полимерных пластин со свободными краями, изгибные колебания которых возбуждались пьезоизлучателем [2]. Источниками распределенных капиллярных колебаний жидкости на межфазной границе являются участки краев пластины с пучностями изгибных колебаний в условиях смачивания поверхности пластины жидкостью. Двумерные капиллярные колебания с распределенной амплитудой, распространяясь по поверхности жидкости в виде волн, передают импульс частицам жидкости, создавая поверхностные течения в виде плоских струй и вихревых течений. Капиллярные колебания и течения наблюдаются также на поверхности малых объемов жидкости в виде отдельных капелек, слоя жидкости на поверхности вибрирующей пластины [3] и даже в мыльных пленках воды на отверстиях в пластине при изгибных колебаниях [4]. Возбуждение двумерных волн на поверхности жидкости вибрирующими упругими телами, в частности в виде ряби Фарадея, и образование осредненных поверхностных потоков являются пороговыми, что характерно параметрическому возбуждению нелинейных капиллярных волн конечной амплитуды [5]. При достаточно больших амплитудах колебаний источника капиллярные волны могут проявлять нелинейность, связанную с локальной деформацией свободной поверхности жидкости и изменением поверхностного натяжения жидкости вблизи источника.

Целью работы являлось исследование возбуждения потоков на поверхности жидкости в каналах с установленными в них четвертьволновым резонатором и источником капиллярных колебаний.

2. Постановка экспериментов

В экспериментах капиллярные колебания создавались на поверхности воды, налитой в чашке Петри диаметром 100 мм, расположенной на столике с подъемным механизмом. В чашке Петри устанавливались параллельно соединенные пластины, образующие канал, а также U-образный четвертьволновой резонатор капиллярных колебаний, размещенный в центре канала. Между резонатором и пластинами оставлены щели шириной, равной ширине полости резонатора. Поверхность воды, ограниченная внутренними стенками канала, для капиллярных волн представляет волновод, полностью открытый с одной стороны и частично открытый с другой стороны через щели. U-образный резонатор отражает волны, исходящие от источника, увеличивая амплитуду капиллярных колебаний на поверхности воды в канале, которые распространяются в канале в виде волн в одном направлении. Источником капиллярных колебаний служит свободный конец стержня, присоединенного к пьезоэлектрическому преобразователю, который подводится к поверхности воды в центре канала напротив полости резонатора. В качестве пьезоэлектрического преобразователя используются пьезоизлучатели с круглым латунным корпусом. При подаче переменного напряжения от усилителя сигналов генератора низкой частоты на электроды пьезоизлучателя в его корпусе возбуждаются изгибные колебания, которые в свою очередь передаются стержню и приводят его свободный конец в колебательное движение. Смоченная поверхность конца стержня при колебаниях на поверхности воды возбуждает капиллярные колебания, распространяющиеся по поверхности воды в виде капиллярных волн. Поверхность воды освещается полупроводниковым светодиодным

импульсным источником света, частота импульсов света регулируется электронным ключом, управляемым генератором прямоугольных сигналов. Интерференционная картина волн наблюдается при стробоскопическом освещении поверхности жидкости, поверхностные течения, создаваемые волнами, визуализируются частицами графита или люминофора порошка. Капиллярные волны и течения на поверхности воды фиксировались цифровым фотоаппаратом.

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 1, а показана картина волн и течений на поверхности воды в чашке Петри при возбуждении капиллярных колебаний частотой 56 Гц на участке поверхности воды, ограниченном каналом размером 28×12 мм, в котором источник капиллярных колебаний из стержня $\varnothing 0,6$ мм расположен напротив открытой полости U-образного резонатора размером 8×4 мм в центре канала. Как видно, капиллярные колебания в канале распространяются только в одном направлении в виде бегущей волны, создавая поверхностный поток воды. Траектории движения трассерных частиц указывают, что поток состоит из двух плоских течений, ускорение частиц в которых происходит на участках поверхности воды непосредственно вблизи краев резонатора капиллярных колебаний. Токи в этих течениях замыкаются за пределами конструкции канала. Кроме этого, на поверхности воды также наблюдаются вторичные вихревые течения, расположенные по двум сторонам от потока, исходящего из канала.

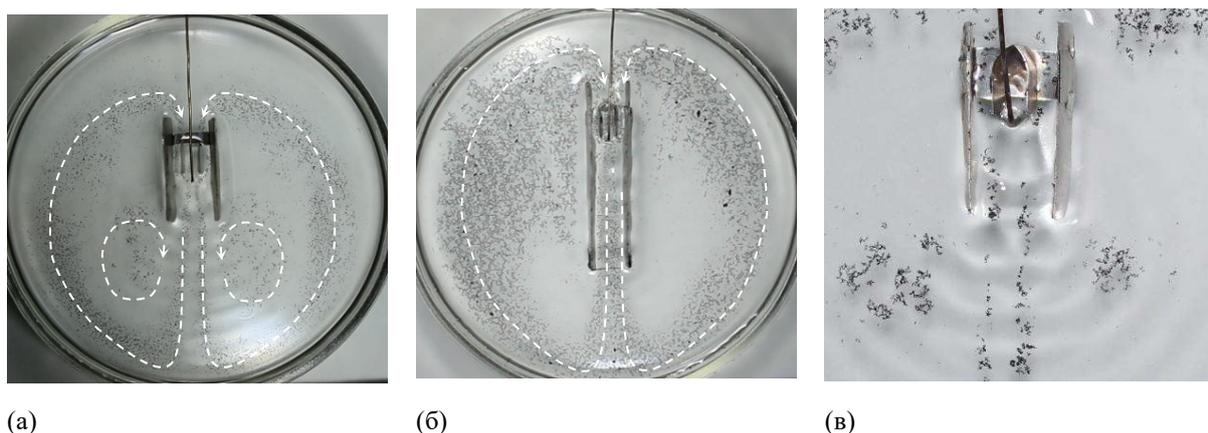


Рис. 1. Картина волн и течений, создаваемых на поверхности воды источником и резонатором, расположенными в коротком (а) и длинном (б) каналах, интерференция волн в канале (в).

В устройстве с длинным каналом 50×10 мм и резонатором с полостью $3,5 \times 8$ мм интерференционная картина волн в основном заметна на поверхности воды в самом канале, а течения проходят через весь канал и замыкаются снаружи канала (рис. 1, б). Капиллярные волны, возбуждаемые стержнем в канале напротив полости резонатора, являются полуцилиндрическими. В результате отражения волн от стенок канала на поверхности воды в канале происходит их интерференция, линии гребней в которых искажаются ускоряющимся потоком (рис. 1, в). Бегущая волна при этом оказывается распределенной и содержит поперечную составляющую в виде стоячей волны. Так как в центральной части потока скорость жидкости максимальная, линии гребней волн в центре потока заостряются.

Эксперименты с капиллярными колебаниями на поверхности воды в чашке Петри, приводящих к возбуждению поверхностных потоков, проводились также с помощью источника и четвертьволнового резонатора, установленных в круговом

канале шириной 15 мм, ограниченном цилиндрическими полимерными кольцами шириной 10 мм. Свободная поверхность воды, ограниченная кольцами, при этом представляет собой замкнутый волновод для капиллярных волн. При возбуждении капиллярных колебаний стержневым осциллятором напротив U-образной полости четвертьволнового резонатора размером 5×5 мм колебания в канале распространяются в виде волн и создают непрерывный замкнутый поток (рис.2, а). При частоте колебаний осциллятора 56 Гц скорость потока в канале составила 18 мм/с. Капиллярные колебания, создаваемые осциллятором, усиливаются резонатором и распространяются по поверхности воды в канале непосредственно вблизи источника в виде полуцилиндрической волны. После достижения стенок канала эти волны отражаются от них и интерферируют с волнами, отраженными от противоположной стенки канала. В результате на поверхности воды в канале формируется бегущая волна с поперечной составляющей в виде стоячей волны (рис. 2, б). Засеивание поверхностного потока воды в канале частицами большей концентрации (рис. 2, в) увеличивает контрастность картины потока, проявляя при этом участок поверхности воды с ускорением потока вблизи краев резонатора. Ускоряющийся поток образует вторичные вихревые поверхностные течения, в которых движение трассерных частиц происходит в противоположных направлениях (рис. 2, г). Эксперимент с круговым каналом указывает на возможность управления поверхностными потоками, возбуждаемыми локально распределенными источниками капиллярных колебаний.

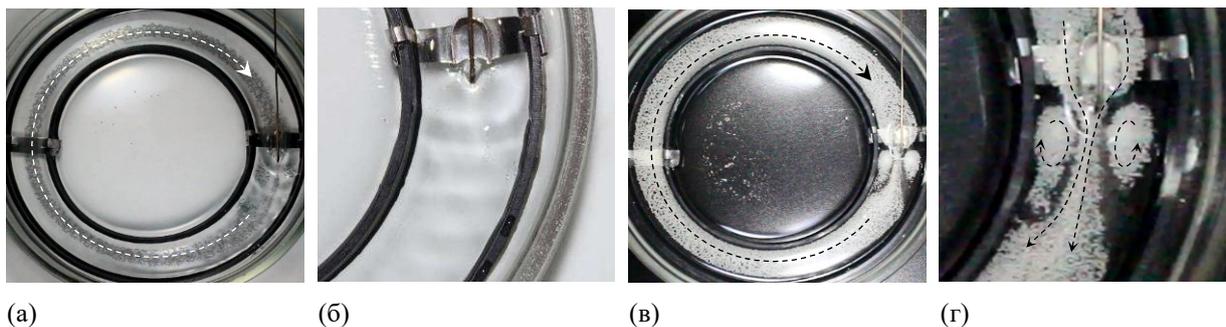
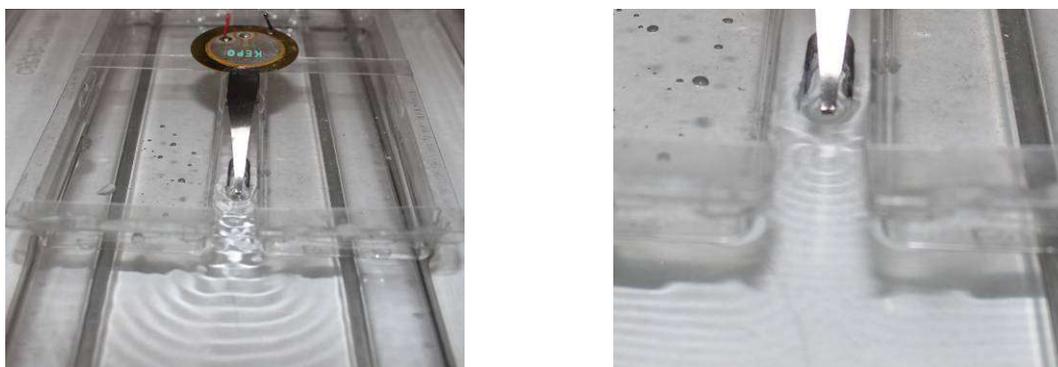


Рис. 2. Волны и поток на поверхности воды в круговом канале (а), картина волн в канале с водой вблизи резонатора (б), поток (в) и вихревые течения (г), визуализируемые частицами люминофора.

Движущийся поток частиц слоя жидкости в канале несет импульс. Соответственно, в силу законов сохранения, устройство с каналом, находящееся на поверхности жидкости, при возбуждении поверхностного потока должно получить движение в противоположном направлении к потоку.

На рис. 3, а показано устройство с корпусом из прямоугольных лотков 145×45 мм с каналом шириной 15 мм между ними на поверхности воды. Устройство весом 18×10^{-3} кг оснащено пьезопреобразователем FT-35T-2.8BL, пластинчатым волноводом длиной 45 мм, свободный торцевой край которого имеет ширину 2 мм и U-образным резонатором 10×5 мм. При подаче на электроды пьезопреобразователя переменного напряжения амплитудой 20 В и частотой 58 Гц скорость движения устройства составляет 10 мм/с, скорость поверхностного потока в канале – 30 мм/с. Установлено, что устройство может получить движение от потока, возбужденного и на других частотах вибраций источника. На рис. 3, б показана картина волн в канале устройства при подаче на электроды пьезоизлучателя напряжения частотой 645 Гц, скорость движения устройства при этом составляет около 2 мм/с. При колебаниях пьезоизлучателя частотой 2 кГц устройство движется со скоростью 10 мм/с. Разные

значения скорости устройства указывают на то, что для получения большой скорости потока в канале необходимо согласование резонансных частот пьезоизлучателя и осциллятора с шириной канала и размерами четвертьволнового резонатора в канале. Устройство с каналом и источником капиллярных колебаний, движение которого осуществляется за счет потока, возбуждаемого капиллярными волнами, представляет собой капиллярно-волновой движитель.



(а)

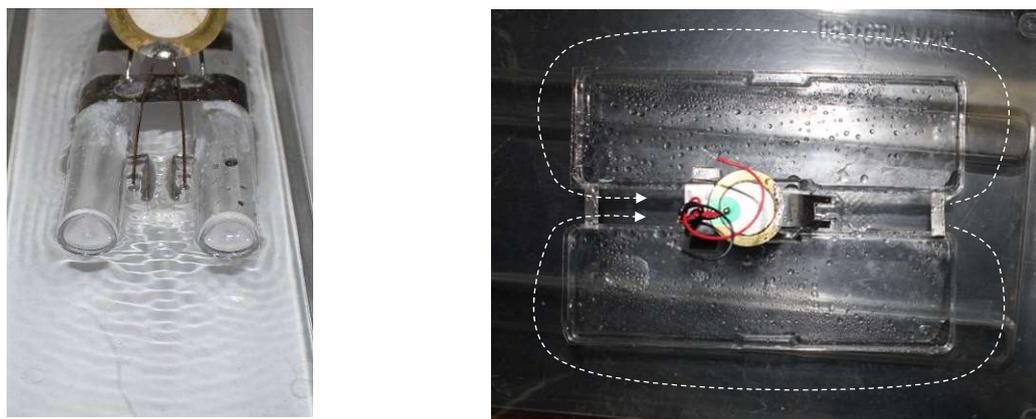
(б)

Рис. 3. Устройство с капиллярно-волновым движителем при возбуждении волн частотой 58 Гц (а) и картина волн в канале при частоте 645 Гц (б).

Увеличения скорости поверхностного потока в капиллярно-волновом движителе можно добиться установкой в канале двух резонаторов и возбуждением капиллярных колебаний напротив полости этих резонаторов двумя синфазно вибрирующими источниками. Капиллярно-волновой движитель, показанный на рисунке 4, а, содержит корпус из пустотелых полимерных цилиндров диаметром 12 мм и длиной 75 мм. Цилиндры установлены параллельно и склеены металлическими скобами с зазором шириной 15 мм между ними. К цилиндрам в зазоре симметрично приклеены загнутые пластины L-образной формы шириной 8 мм, длинные стороны пластин и обращенные к ним стороны цилиндров образуют U-образные полости размером 12×5 мм. Между пластинами оставлена щель шириной 5 мм. На корпусе устройства установлен пьезоэлектрический преобразователь FML-27T-3.9A1-100 с двумя осцилляторами из металлических стержней диаметром 0.6 мм и длиной 30 мм. Свободные концы стержней подведены в U-полости резонаторов к их открытым сторонам. При размещении устройства на поверхность воды его корпус смачивается водой, при этом зазор образует сквозной канал между цилиндрами. Загнутые пластины в зазоре ограничивают часть поверхности воды, образуя полости четвертьволновых резонаторов капиллярных волн. При этом свободные концы стержней касаются поверхности воды в полости резонаторов, обеспечивая капиллярный подъем воды. При подаче на электроды пьезопреобразователя переменного напряжения частотой 137 Гц стержни вибрируют на одной из резонансных частот капиллярных колебаний и возбуждают двумерные бегущие волны в канале, которые создают направленный поверхностный поток воды в канале. При напряжении амплитудой 20 В на электродах пьезопреобразователя устройство общим весом 8×10^{-3} кг движется со скоростью 20 мм/с. Амплитуда колебаний концов стержней в контакте с водой не превышает 0,1 мм.

На рис. 4, б показано устройство движителя с двумя короткими осцилляторами шириной 2 мм, отведенными от торцевого края пластинчатого волновода шириной 12 мм и толщиной 0,1 мм, припаянного к пьезоизлучателю. U-образные полости

четвертьволновых резонаторов имеют размеры 10×5 мм, между резонаторами в центре канала оставлена щель шириной 5 мм. Вес устройства составляет 16×10^{-3} кг.



(а)

(б)

Рис. 4. Устройства с капиллярно-волновым двигателем с двумя осцилляторами при возбуждении волн частотой 137 Гц (а) и 212 Гц (б).

При размещении двигателя на поверхность воды его корпус смачивается водой и между лотками образуется канал, свободная поверхность воды в котором для капиллярных волн представляет волновод, ограниченный шириной канала. При подключении устройства к источнику переменного тока при определенных частотах колебаний пластинчатого волновода осцилляторы возбуждают в канале бегущую капиллярную волну с распределенной амплитудой, в результате которого в канале создается направленный поток. При этом устройство движется в противоположном направлении к потоку в канале. Засеивание поверхности воды трассерными частицами показало, что поток, выходящий из канала, разделяется на два замкнутых потока, огибающих корпус устройства и входящих в канал с противоположной стороны.

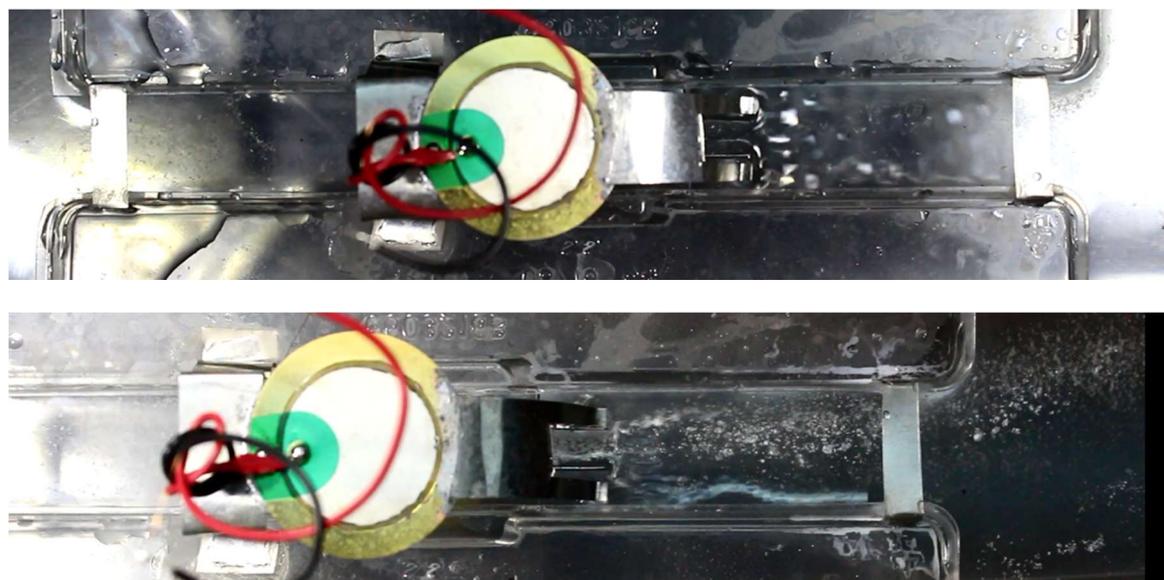


Рис. 5. Картина двумерных капиллярных волн в канале двигателя (сверху) и движение трассерных частиц в поверхностном потоке (внизу).

На рисунке 5 представлена картина двумерных капиллярных волн в канале устройства, возбуждаемых двумя источниками, совершающими синфазные колебания

частотой 76 Гц и картина движения трассерных частиц в потоке при колебаниях источников частотой 214 Гц. Направление движения поверхностного потока в канале показано стрелками, ускорение потока наблюдается непосредственно вблизи краев пластин, ограничивающих полость четвертьволнового резонатора капиллярных колебаний, где траектории движения трассерных частиц искривляются. При указанных частотах возбуждения волн средние скорости движения частиц на участке с невозмущенной свободной поверхностью воды в канале оценивались примерно в 15 мм/с и 20 мм/с, а скорости движения макета составили 2 мм/с и 3 мм/с.

Возбуждение поверхностного потока жидкости в каналах источниками капиллярных колебаний волн можно объяснить следующим.

В наблюдаемых экспериментах источниками возбуждаются капиллярные колебания конечной амплитуды, по крайней мере, на локальном участке непосредственно вблизи межфазной границы. При вибрациях источников угол смачивания воды с искривленной поверхностью на межфазной границе периодически изменяется, что приводит к изменению площади свободной поверхности воды. Если выделить элемент поверхности жидкости ΔS_0 в неподвижной относительно вибрирующей поверхности системе координат, его энергия в условиях капиллярных колебаний равна

$$\Delta W_s = \sigma(\Delta S_0 + \Delta S_v), \quad (1)$$

где ΔS_v - приращение площади поверхности жидкости. Отношение приращения площади поверхности жидкости к площади этой поверхности в неподвижной системе координат есть деформация площади поверхности в колебательном процессе

$$\delta = \Delta S_v / \Delta S_0. \quad (2)$$

Тогда выражение для энергии элемента поверхности жидкости можно записать через деформацию δ поверхности уравнением

$$\Delta W_s = \sigma \Delta S_0 (1 + \delta). \quad (3)$$

Таким образом, при возбуждении источником капиллярных колебаний поверхности воды эта поверхность приобретает избыточную энергию, плотность которой равна произведению поверхностного натяжения и ее деформации $\sigma_v = \sigma \delta$. Энергия элемента свободной поверхности воды и его площадь при капиллярных колебаниях вблизи источника изменяются с удвоенной частотой колебаний по пульсирующему закону, поэтому можно считать, что вибрирующая поверхность приобретает избыточную осредненную энергию за период колебаний по сравнению с неподвижным участком поверхности. Плотность избыточной поверхностной энергии в среднем при этом равна $\overline{\Delta w_s} = \overline{\sigma_v} = \overline{\delta} \sigma$. Эта избыточная плотность энергии имеет физический смысл эффективного вибрационного поверхностного натяжения, которое в экспериментах приводит к вибрационной конвекции Марангони. Поверхностные течения воды в направлении вибрирующей частично погруженной пластины в условиях параметрического возбуждения капиллярных колебаний описаны в [1, 2].

Чтобы установить зависимость деформации поверхности жидкости от плотности энергии, передаваемой вибрирующим источником этой поверхности, рассмотрим процесс возбуждения капиллярных колебаний и волн на свободной поверхности воды одним источником – стержнем, конец которого подведен к поверхности воды. Движение конца стержня при вибрациях передается воде и ее частицы приобретают

кинетическую энергию, плотность w_k которой пропорциональна квадрату колебательной скорости v поверхности конца стержня

$$w_k = (1/2)\rho_l v^2, \quad (4)$$

где ρ_l – плотность воды. В условиях радиальной симметрии межфазной границы контакта стержня с водой вибрации конца стержня приводят к возбуждению капиллярных колебаний на свободной поверхности воды, которые распространяются вдоль поверхности воды в виде цилиндрических капиллярных волн. Участок искривленной поверхности воды с максимальной амплитудой колебаний отстоит от центра контакта с поверхностью вибрирующего стержня на некотором расстоянии r_0 , при этом смещения частиц поверхности происходят как в поперечном, так и в продольном направлении к этой поверхности. В таком случае уравнения для поперечных и продольных смещений η и ζ в цилиндрической капиллярной волне можно записать в виде

$$\begin{aligned} \eta &= \eta_0 \sqrt{r_0/r} \cos(\omega t - kr) \\ \zeta &= \zeta_0 \sqrt{r_0/r} \sin(\omega t - kr) \end{aligned} \quad (5)$$

где η_0 и ζ_0 – амплитуды смещений частиц воды в колебаниях вблизи межфазной границы с поверхностью вибрирующего стержня, ω – частота волн, $k = \omega/c_c = 2\pi/\lambda_c$ – волновое число, в котором c_c и λ_c – соответственно, скорость и длина капиллярной волны, $r \geq r_0$ – расстояние. Частицы поверхности воды при колебаниях в цилиндрической волне движутся по эллиптическим траекториям, описываемых уравнением

$$\eta^2/\eta_0^2 + \zeta^2/\zeta_0^2 = r_0/r. \quad (6)$$

Плотность кинетической энергии частиц поверхности воды определяется через их скорости в колебательном движении

$$w_k = (1/2)\rho_l \left[(d\eta/dt)^2 + (d\zeta/dt)^2 \right]. \quad (7)$$

Подстановка в это уравнение производных с учетом тригонометрических соотношений $\sin^2 x = (1/2)(1 - \cos 2x)$ и $\cos^2 x = (1/2)(1 + \cos 2x)$ дает следующее выражение для плотности кинетической энергии:

$$w_k = (1/4)\rho_l \omega^2 (\eta_0^2 + \zeta_0^2) (r_0/r) + (1/4)\rho_l \omega^2 (\zeta_0^2 - \eta_0^2) (r_0/r) \cos 2(\omega t - kx). \quad (8)$$

Согласно этому уравнению плотность кинетической энергии частиц поверхности жидкости в капиллярной волне изменяется с удвоенной частотой волн, а ее величина в среднем за период колебаний равна

$$\bar{w}_k = (1/4)\rho_l v_0^2 (r_0/r) \quad (9)$$

где $v_0 = \omega \sqrt{\eta_0^2 + \zeta_0^2}$ – скорость смещения частиц поверхности жидкости вблизи источника на расстоянии $r = r_0$.

Реальные жидкости обладают вязкостью и коэффициент потерь энергии волн на поверхности жидкости выражается соотношением

$$\gamma^2 = \nu^2 k^4 / \omega^2 = \nu^2 k^2 / c_c^2, \quad (10)$$

где ν – кинематическая вязкость. Поэтому выражение для плотности кинетической энергии частиц поверхности жидкости в среднем в цилиндрической волне примет вид

$$\bar{w}_k = (1/4)\rho_l(1 - \gamma^2)\nu_0^2(r_0/r). \quad (11)$$

В волнах плотности потенциальной и кинетической энергии равны между собой и плотность \bar{w}_p потенциальной энергии в среднем также должна быть равной плотности кинетической энергии в среднем: $\bar{w}_p = \bar{w}_k$. При этом плотность \bar{w} энергии в среднем в волне равна удвоенной плотности кинетической энергии в среднем:

$$\bar{w} = 2\bar{w}_k = (1/2)\rho_l(1 - \gamma^2)\nu_0^2(r_0/r). \quad (12)$$

Дисперсионное уравнение для капиллярных волн

$$\omega^2 = (\sigma/\rho_l)k^3 \quad (13)$$

можно привести к выражению плотности энергии в волне

$$\rho_l c_c^2 = \sigma k. \quad (14)$$

Это выражение указывает на то, что плотность энергии в капиллярной волне по величине равна давлению под свободной поверхностью жидкости с кривизной, равной волновому числу. Уравнение для плотности энергии в капиллярной волне вблизи источника запишем в виде

$$\rho_l c_c^2 + \bar{w} = \sigma(1 + \bar{\delta})k. \quad (15)$$

Отсюда деформация поверхности жидкости при капиллярных колебаниях, возбужденных источником, равна отношению плотности энергии, передаваемой жидкости источником, к плотности энергии колебаний в капиллярной волне вдали от источника:

$$\bar{\delta} = 2\bar{w}_k / \rho_l c_c^2 = (1/2)(1 - \gamma^2)(\nu_0^2 / c_c^2)(r_0/r). \quad (16)$$

Максимальная величина деформации, равная

$$\bar{\delta}_0 = (1/2)(1 - \gamma^2)(\nu_0^2 / c_c^2), \quad (17)$$

приходится на участок поверхности непосредственно вблизи источника капиллярных колебаний, где $r = r_0$. Величина деформации, прямо пропорциональная плотности кинетической энергии жидкости вблизи источника, также прямо пропорциональна квадрату скорости частиц в волне.

В цилиндрической капиллярной волне деформация поверхности жидкости с расстоянием от источника уменьшается и ее можно представить в виде

$$\bar{\delta} = \bar{\delta}_0(r_0/r). \quad (18)$$

Тогда плотность избыточной поверхностной энергии жидкости в цилиндрической волне равна

$$\Delta\bar{w}_s = \sigma\bar{\delta}_0(r_0/r). \quad (19)$$

Плотность потока энергии, переносимой любой волной, распространяющейся со скоростью c , равна величине вектора Умова, пропорциональной плотности энергии w (для электромагнитных волн этот вектор принято называть вектором Умова-Пойнтинга):

$$\mathbf{S}_U = w c \mathbf{n}, \quad (20)$$

где \mathbf{n} – единичный вектор. Под интенсивностью I волны понимают среднюю величину вектора Умова $I = \overline{w} c$. Плотность импульса в волне в среднем при этом равна

$$\overline{p} = (\overline{w}/c^2) c = I/c^2. \quad (21)$$

Тогда плотность потока поверхностной энергии в среднем, создаваемого цилиндрической капиллярной волной, распространяющейся вдоль свободной поверхности жидкости от источника капиллярных колебаний (интенсивность цилиндрической волны), оказывается пропорциональной деформации поверхности:

$$I_s = \sigma \overline{\delta} c_c. \quad (22)$$

Поток поверхностной энергии dW_s/dt вдоль поверхности жидкости на определенном расстоянии r от источника при этом равен произведению плотности потока поверхностной энергии и длины L контура в виде окружности радиуса r : $dW_s/dt = I_s L$. Так как $I_s = \sigma \overline{\delta}_0 (r_0/r) c_c$ и $L = 2\pi r$, поток поверхностной энергии равен

$$dW_s/dt = 2\pi r_0 \sigma \overline{\delta}_0 c_c. \quad (23)$$

Поток энергии по величине равен мощности источника и не зависит от координаты. Энергию поверхности, создаваемой источником за период T его колебаний и переносимой волной за этот же период, можно найти из интеграла $dW = \int_0^T 2\pi r_0 \sigma \overline{\delta}_0 c_c dt$.

Так как $c_c T = \lambda_c$, эта энергия равна $\Delta W = 2\pi r_0 \sigma \overline{\delta}_0 c_c T$ и пропорциональна избыточной поверхности

$$\Delta S = 2\pi r_0 \overline{\delta}_0 \lambda_c, \quad (24)$$

создаваемой источником за период колебаний. В таком случае волной переносится и избыточная поверхность S_ε , поток которой с размерностью в ($\text{м}^2/\text{с}$) равен

$$dS_\varepsilon/dt = (1/\sigma) dW_s/dt = 2\pi r_0 \overline{\delta}_0 c_c. \quad (25)$$

Плотность потока избыточной поверхности при этом равна потоку s_ε деформации поверхности с размерностью в $\text{м}/\text{с}$:

$$s_\varepsilon = \overline{\delta} c_c. \quad (26)$$

Плотность потока поверхностной энергии при возбуждении капиллярных волн на свободной поверхности жидкости, таким образом, равна произведению коэффициента поверхностного натяжения и потока деформации, создаваемой волнами на поверхности жидкости: $S_{us} = \sigma s_\varepsilon = \sigma \overline{\delta} c_c$. Интенсивность потока при этом равна произведению поверхностного натяжения и потока деформации: $I_s = \sigma \overline{\delta} c_c$.

Для плотности импульса волн можно записать уравнение в виде

$$\bar{p}_s = I_s/c_c^2 = (\sigma/c_c^2)\bar{\delta}c_c = (\rho_l/k)\bar{\delta}c_c. \quad (27)$$

В этом выражении отношение плотности жидкости к волновому числу имеет физический смысл поверхностной плотности жидкости $\rho_s = \rho_l/k$ с размерностью в (кг/м²). Тогда плотность поверхностного импульса может быть записана через произведение поверхностной плотности жидкости и потока деформации

$$\bar{p}_s = \rho_s \bar{\delta}c_c = \rho_s \bar{s}_\varepsilon. \quad (28)$$

Для плотности поверхностной энергии и плотности импульса волн можно записать соотношение в виде $\Delta\bar{w}_s = c_c \bar{p}_s$. Производная по времени от плотности поверхностной энергии при этом равна $d\Delta\bar{w}_s/dt = c_c d\bar{p}_s/dt$. Эта же производная равна произведению производной плотности поверхностной энергии по координате и скорости переноса энергии волнами: $d\Delta\bar{w}_s/dt = (\partial\bar{w}_s/\partial r)dr/dt$. Так как скорость переноса энергии равна скорости волн $dr/dt = c_c$, производная по времени от плотности импульса волн оказывается равной производной плотности поверхностной энергии по координате вдоль поверхности жидкости:

$$d\bar{p}_s/dt = \partial\Delta\bar{w}_s/\partial r. \quad (29)$$

Производную от плотности поверхностной энергии по координате можно выразить через градиент деформации волнами:

$$\partial\Delta\bar{w}_s/\partial r = \sigma \text{grad} \bar{\delta}. \quad (30)$$

Соответственно, производная по времени от плотности импульса цилиндрических волн на поверхности жидкости оказывается пропорциональной градиенту деформации поверхности:

$$d\bar{p}_s/dt = \sigma \text{grad} \bar{\delta}. \quad (31)$$

Считая, что импульс волн передается частицам поверхности жидкости, можно написать следующее уравнение движения частиц поверхности жидкости

$$\rho_s du_s/dt = -\sigma \text{grad} \bar{\delta} = \sigma \bar{\delta}/r. \quad (32)$$

Отсюда ускорение единичной поверхности жидкости вследствие передачи импульса цилиндрических волн равно

$$du_s/dt = (\sigma k/\rho_l)(\bar{\delta}/r) = \bar{\delta} c_c^2/r. \quad (33)$$

При этом единичная поверхность жидкости в интервале координат $\Delta r = r_2 - r_1$ от источника приобретает скорость Δu_s , равную

$$\Delta u_s = (1/\rho_s)\Delta\bar{p}_s = [\delta(r_1) - \delta(r_2)]c_c \quad (34)$$

Если отсчет координат вдоль поверхности жидкости вести от источника волн, где $r_1 = r_0$, эта скорость составит $\Delta u_s = \delta_0(1 - r_0/r)c_c$.

Теперь рассмотрим ток в приповерхностном слое жидкости при наличии цилиндрической капиллярной волны, т.е. в объеме скин-слоя. Плотность кинетической

энергии жидкости в среднем в объеме скин-слоя определяется через деформацию поверхности волнами через выражение

$$\bar{w}_k = (1/2)\sigma k \bar{\delta}. \quad (35)$$

Разность давления при этом равна разности плотности кинетической энергии частиц жидкости $\Delta p_{v_s} = -\Delta \bar{w}_k = -(1/2)\sigma k \Delta \bar{\delta}$. Отсюда ускорение в слое жидкости, вызванное градиентом давления, равно

$$du_{v_s}/dt = -(1/\rho_l) grad p_{v_s} = c_c^2 (\partial \bar{\delta} / \partial r). \quad (36)$$

Это выражение указывает на то, что ускорение частиц поверхности жидкости, получаемое за счет передачи импульса от цилиндрических волн, и ускорение частиц жидкости в скин-слое, связанное с градиентом деформации поверхности, равны по величине и направлены в противоположных направлениях. При этом движение жидкости в скин-слое осуществляется в сторону источника волн. Ранее экспериментально обнаруженные явления движения слоя жидкости на поверхности вибрирующих стержней и пластин к участкам с пучностями колебаний, где плотность кинетической энергии в среднем частиц жидкости является максимальной, может объясняться и тем, что на этих участках деформация поверхности жидкости также является максимальной.

Чтобы применить рассмотренные процессы передачи импульса цилиндрических волн поверхности жидкости и возникновения движения в скин-слое жидкости в направлении к источнику капиллярных колебаний конечной амплитуды к экспериментально наблюдаемым явлениям возбуждения потоков в каналах надо учитывать следующее. Четвертьволновой резонатор в канале не только отражает капиллярные волны и увеличивает амплитуду капиллярных колебаний вблизи источника, увеличивая локальную деформацию поверхности жидкости, но и разделяет поверхность жидкости на участки, где поверхность возмущается волнами и где нет возмущения. В результате капиллярные колебания от источника распространяются в канале в виде полуцилиндрической волны и интерферируют с волнами, отраженными от стенок канала. В целом это приводит к увеличению избыточной площади поверхности жидкости в возмущенной волнами части поверхности жидкости в канале и, соответственно, к усилению потока энергии и избыточной поверхности. В невозмущенную часть поверхности жидкости в канале и в щели между резонатором и стенками каналов, а также в щели между резонаторами, волны не проникают из-за их отражения резонатором. Из-за этого колебания поверхности жидкости в этой части канала практически отсутствуют. Остаются участки поверхности жидкости между щелями и источником капиллярных колебаний, где имеется максимальный градиент деформации поверхности, зависящий от производных плотности кинетической энергии жидкости по координатам:

$$grad \bar{\delta} = (2/\sigma k) \left[(\partial \bar{w}_k / \partial x)^2 + (\partial \bar{w}_k / \partial y)^2 \right]^{1/2} \quad (37)$$

Так как производными от плотности кинетической энергии по координатам определяется градиент давления в жидкости

$$grad p_v = \left[(\partial \bar{w}_k / \partial x)^2 + (\partial \bar{w}_k / \partial y)^2 \right]^{1/2}, \quad (38)$$

то жидкость из невозмущенной части поверхности жидкости в канале устремляется через щели между резонаторами и щели между резонатором и стенками канала в

возмущенную часть поверхности жидкости в канале с ускорением, пропорциональным градиенту деформации:

$$du_v/dt = -(1/\rho_l)gradp_v = (1/2)c_c^2 grad\bar{\delta} \quad (39)$$

Амплитуда капиллярных колебаний, возбуждаемых источником напротив полости четвертьволнового резонатора, при определенных частотах увеличивается, что приводит к увеличению локальной деформации свободной поверхности жидкости. При этом одновременно возрастает поток жидкости через щели между резонатором и стенками канала под искривленную поверхность и интенсивность волны, исходящей от источника. В результате импульс, передаваемый волной частицам поверхности жидкости, увеличивается, что приводит к возбуждению поверхностного потока, скорость в котором больше там, где больше деформация и интенсивность волны. А как было получено выше, плотность потока избыточной поверхности равна потоку деформации.

4. Выводы

Таким образом, в возбуждении направленного поверхностного потока жидкости в каналах с резонатором и источником капиллярных колебаний действуют два механизма – это движение жидкости под искривленную свободную поверхность, локально деформированную источником капиллярных колебаний и передача импульса волн поверхности жидкости, которые происходят в одном направлении.

Таким образом, генерация однонаправленного поверхностного потока на поверхности жидкости в каналах с резонаторами при возбуждении капиллярных колебаний конечной амплитуды объясняется локальной деформацией свободной поверхности жидкости, с удвоенной частотой колебаний источника, при котором образуется искривленная избыточная поверхность и переносом этой поверхности волнами. Капиллярные волны с поперечной составляющей в виде стоячей волны, бегущие вдоль поверхности воды в канале, вместе с потоком энергии переносят избыточную поверхность, плотность потока которой равна потоку деформации в волне. В результате на поверхности воды в каналах образуется осредненный поток.

Явления возбуждения поверхностного потока жидкости в каналах капиллярными колебаниями конечной амплитуды дают наглядное представление о возможности создания направленных потоков микроволновой энергии в волноводах со встроенными в их полости резонаторами и источниками электромагнитных колебаний.

Принцип действия устройств, движущихся за счет потока, создаваемого на поверхности воды в канале с резонатором и источником капиллярных колебаний, локально деформирующим поверхность воды в канале, является аналогичным принципу работы варп-двигателя Алькубьерре [6], который должен двигаться в пространстве за счет локальной деформации ткани пространства впереди себя и расширения пространства позади двигателя. Если свободную поверхность воды рассматривать в качестве участка двумерного пространства, то устройства с капиллярно-волновым ускорителем потока представляют собой капиллярно-волновые аналоги варп-двигателя Алькубьерре. В капиллярно-волновом движителе источник капиллярных колебаний локально деформирует свободную поверхность воды, образуя избыточную искривленную поверхность, которая переносится волнами и распределяется по поверхности воды за каналом. При этом свободная поверхность воды приходит в движение.

Список литературы

1. Александров В. А., Копысов С. П., Тонков Л. Е. Возбуждение вихревых течений на свободной поверхности жидкости вибрирующей пластиной / Журнал технической физики, Т. 89, № 7, С. 998-1005, 2019. DOI:10.21883/JTF.2019.07.47787.234-18.
2. Александров В. А., Карпов А. И. Распределенные течения на поверхности жидкости вблизи вибрирующей пластины / Химическая физика и мезоскопия, Т. 21, № 3, С. 345-361, 2019. DOI: 10.15350/17270529.2019.3.3.
3. Aleksandrov V. A., Kopysov S. P., Tonkov L. E. Vortex flows in the liquid layer and droplets on a vibrating flexible plate / Microgravity Science and Technology, 2018. Vol. 30, N. 1-2, P. 85-93.
4. Александров В. А., Копысов С. П., Тонков Л. Е. Возбуждение вихревых течений в мыльной пленке на отверстиях в пластине под действием изгибных колебаний / Химическая физика и мезоскопия, Т. 19, № 4, С. 581-587, 2017.
5. Любимов Д. В., Любимова Т. П., Черепанов А. А. Динамика поверхностей раздела в вибрационных полях. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 216 с.
6. Alcubierre M. The warp drive: hyper-fast travel within general relativity // Classical and Quantum Gravity. 1994. Vol. 11, N. 5, P. 73-77. DOI: 10.1088/0264-9381/11/5/001.

Концентрирование ионов и макромолекул около ионоселективной микрочастицы

М. С. Алексеев^a, Г. С. Ганченко^a, Е. А. Демехин^{a,b}

^aЛаборатория электро- и гидродинамики микро- и наномасштабов, Финансовый университет при Правительстве РФ, 350051, Краснодар, ул. Лузана, 34
email: edemekhi@gmail.com

^bЛаборатория общей аэромеханики, Институт механики МГУ, 119192 Москва, Мичуринский проспект, д. 1

В работе представлен теоретический анализ концентрирования ионов и макромолекул в микроустройстве, представляющем собой сферическую камеру, в центре которой помещена ионоселективная микрогранула. Данное устройство встраивается в круглый канал, через который подается электролит за счет внешнего градиента давления и за счет разности электрических потенциалов. В результате такой постановки и подбора подходящей напряженности внешнего электрического поля можно добиться значительного концентрирования ионов или других взвешенных заряженный макромолекул около ионоселективной микрогранулы. Данный режим можно использовать для повышения эффективности детекторов частиц в микромасштабах за счет эффекта суперконцентрации для медицинской диагностики. Концентрированная область может уноситься конвективным потоком далеко вглубь выходного канала и тогда данное устройство можно использовать для разделения потока на концентрированный и обедненный, как это происходит при электродиализе. Эффективность данного устройства повышается с увеличением напряженности внешнего поля, однако, с некоторого критического значения напряженности, стационарный поток теряет устойчивость и образуется электроконвекция, которая мешает процессу концентрирования. Таким образом, существуют оптимальные значения параметров, при которых можно добиться максимальной эффективности.

Ключевые слова: электрофорез; ионоселективная поверхность; электролит; суперконцентрация

Ion and macromolecules concentration near ion-selective microparticle

M. S. Alekseev^a, G. S. Ganchenko^a, E. A. Demekhin^{a,b}

^aLaboratory of micro- and nanoscale electro- and hydrodynamics, Financial university under Government of Russian Federation, 350051, Krasnodar, 34 Luzana str.
email: edemekhi@gmail.com

^bLaboratory of General Aeromechanics, Institute of Mechanics, Moscow State University, 119192, Moscow

Theoretical analysis of ions and macromolecules concentration in the microdevice is presented. The microdevice is consist of a spherical chamber with an ion-selective microgranule in the middle of the chamber. The device is placed in a

round micro-channel with electrolyte. The electrolyte is moved by a pressure difference and by an external electric field. It is possible to achieve a significant concentration of ions or other charged macromolecules near the ion-selective microgranule by selecting a suitable external electric field strength. The regime of a concentration is possible to utilize for improving of a particle detector efficiency in medical diagnosis problems in microscales due to superconcentration of ions and macromolecules. Concentration region might be shifted by electrolyte flow far into the output channel. The regime might be utilized for flow splitting for depleted and enriched parts as in electrodialysis problem. The device efficiency increases with increasing electric field, but for some critical potential difference flow becomes unstable. Electroconvection appears, which interferes with the concentration process. Thus, there are optimal values of the parameters at which it is possible achieve maximum efficiency.

Keywords: electrophoresis; ion-selective surfaces; electrolyte; superconcentration

1. Введение

В сфере проектирования и создания микролабораторий, используемых в медицинских и химических целях, стоит проблема малых концентраций аналита в микропробах, которая может приводить к ложноотрицательным результатам при недостаточных объемах проб. В случае микропроб в области детектора статистически может вообще не оказаться ни одной молекулы аналита. Для решения этой проблемы необходима предварительная концентрация анализируемых частиц в области детектора. Существуют экспериментальные работы, направленные на решение этой проблемы [1], однако полного понимания данного процесса еще нет. В работе [1] была использована ионоселективная микрогранула, создающая концентрационную поляризацию, и было получено преимущество за счёт возникновения электроосмоса 2-го рода, который, обладая квадратичной зависимостью от напряжённости поля, при больших его значениях даёт эффект концентрирования ионов и макромолекул, что невозможно было наблюдать около обычной диэлектрической микросферы. Концентрационная поляризация ионов рядом с гранулой позволяет в некоторой степени контролировать локальное значение pH, что может быть использовано, например, для управления локальным химическим составом раствора, создавая тем самым микрореактор.

В данной работе будет представлено теоретическое исследование эффекта концентрирования в конфигурации, близкой к той, что была представлена в работах [1,2]. Как показал анализ, данная конфигурация может быть использована не только как локальный концентратор ионов и макромолекул, но и для генерирования концентрационной струи, что может быть полезно для решения разделения потока жидкости, как это происходит, например, при электродиализе. Поскольку такие экспериментальные устройства достаточно дорогостоящие для производства, численные и теоритические исследования являются недорогим способом разработки прототипов и исследования конфигураций новых устройств.

2. Постановка задачи

2.1. Геометрическая постановка

Предложенный далее дизайн микромиксера (рис. 1) состоит из сферической камеры с ионоселективной микрогранулой, помещённой в её центр. У камеры есть входное и выходное отверстия для протекающей жидкости. Предполагается, что входное отверстие находится на левой стороне, выходное отверстие – на правой.

Постоянное электрическое поле создаётся с помощью электродов у входа и выхода, это поле создаёт электроосмотический поток в камере. В то же время перепад давления между входом и выходом является дополнительным механизмом управления жидкостью. Задача предполагается осесимметричной. Жидкостью является раствор электролита, состоящий из двух типов ионов. На входе в устройства подается однородный, электронейтральный поток электролита. Предполагается, что ионоселективная микрогранула обладает идеальной селективностью, то есть поток ко-ионов через неё полностью отсутствует. Для определённости будем считать, что ионоселективная частица является катионнообменной.



Рис. 1. Схема устройства с обозначением основных областей около ионоселективной микрогранулы. Цветом на фоне выделена концентрация ионов

2.2. Размерная постановка

Поведение электролита описывается системой уравнений Нернста-Планка-Пуассона-Стокса, таким образом,

$$\frac{\partial \tilde{c}^{\pm}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{U} \cdot \nabla \tilde{c}^{\pm} = \frac{z^{\pm} \tilde{D}^{\pm} \tilde{F}}{\tilde{R} \tilde{T}} \nabla \cdot (\tilde{c}^{\pm} \nabla \tilde{\Phi}) + \tilde{D}^{\pm} \nabla^2 \tilde{c}^{\pm}, \quad (1)$$

$$\varepsilon \nabla^2 \tilde{\Phi} = -\tilde{F} (z^+ \tilde{c}^+ + z^- \tilde{c}^-), \quad (2)$$

$$\tilde{\nu} \nabla^2 \tilde{U} = -\tilde{F} (z^+ \tilde{c}^+ + z^- \tilde{c}^-) \nabla \tilde{\Phi}, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \tilde{U} = 0. \quad (4)$$

Неизвестными являются молярная плотность концентрации положительно и отрицательно заряженных ионов \tilde{c}^{\pm} , электрический потенциал $\tilde{\Phi}$, давление \tilde{P} и поле скорости \tilde{U} . Здесь \tilde{F} – это число Фарадея, \tilde{R} – универсальная газовая постоянная и \tilde{T} – абсолютная температура. Знак тильды (\tilde{f}) будет использоваться для размерных переменных. Для безразмерных переменных, наоборот, не будет использоваться тильда (f). Жидкость предполагается симметричной (валентность, $z^+ = -z^- = 1$), бинарный электролит предполагается с одинаковыми коэффициентами диффузии для катионов и анионов $\tilde{D}^+ = \tilde{D}^- = \tilde{D}$, динамическая вязкость, $\tilde{\mu}$, электрическая проницаемость, $\tilde{\varepsilon}$. Система уравнений решается в сферической осесимметричной постановке.

На поверхности внешней диэлектрической сферы $\tilde{r} = \tilde{r}_1$, $\theta_0 < \theta < \pi - \theta_0$, принято условие непроницаемости ионов

$$\frac{\partial \tilde{c}^{\pm}}{\partial \tilde{r}} \pm \frac{\tilde{F}}{\tilde{R} \tilde{T}} \tilde{c}^{\pm} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} = 0, \quad (5)$$

где \tilde{r} - направление вдоль радиуса с центром в середине ионоселективной микрогранулы и θ - это угол.

На поверхности внешней сферы предполагается отсутствие заряда, что позволяет установить граничное условие для электрического потенциала $\tilde{\Phi}$,

$$\tilde{\varepsilon} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} = 0, \quad (6)$$

где $\tilde{\varepsilon}$ – это проницаемость жидкости.

На внешней сфере действует условие прилипания,

$$\tilde{U} \equiv 0. \quad (7)$$

На выходе $\tilde{r} = \tilde{r}_1$, $0 < \theta < \theta_0$ (см. Рис. 1), граничные условия резервуара для молярной ионной концентрации даны вместе с граничными условиями для давления и электрического потенциала.

$$\frac{\partial \tilde{c}^{\pm}}{\partial \tilde{r}} = 0, \tilde{\Pi} = 0, \tilde{\Phi} = \Delta \tilde{V} / 2. \quad (8)$$

На входе $\tilde{r} = \tilde{r}_1$, $\pi - \theta_0 < \theta < \pi$, концентрация соли, значения давления и электрического потенциала зафиксированы,

$$\tilde{C}^+ + \tilde{C}^- = \tilde{C}_{\infty}, \tilde{C}^+ - \tilde{C}^- = 0, \tilde{\Pi} = \Delta \tilde{\Pi}, \tilde{\Phi} = -\Delta \tilde{V} / 2. \quad (9)$$

Раствор электролита считается электронейтральным. Движущая сила для перемещения жидкости через камеру создаётся давлением и разностью потенциалов между входом и выходом, $\Delta \tilde{\Pi}$ и $\Delta \tilde{V}$. На поверхности ионоселективной микрогранулы $\tilde{r} = \tilde{r}_0$ заданы следующие граничные условия,

$$\frac{\partial \tilde{c}^-}{\partial \tilde{r}} - \frac{\tilde{F}}{\tilde{R}\tilde{T}} \tilde{C}^- \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} = 0, \tilde{C}^+ = \tilde{p}, \tilde{\Phi} = 0, \tilde{U} \equiv 0. \quad (10)$$

Первое граничное условие соответствует отсутствию потока анионов через идеальную катионно-обменную мембрану. Условие того, что концентрация катионов на поверхности мембраны равна константе, показано Рубинштейном и Штильманом [3], а его достоверность проверена во многих работах (см. [4,5]). Для лучшего понимания этого условия рассмотрим структуру мембраны. Катионно обменная мембрана – это органический полимер, состоящий из матриц и пор. В матрице анионы (\tilde{C}_a) фиксированы и неподвижны, что создаёт фиксированный заряд мембраны \tilde{p} ($\tilde{C}_a = \tilde{p}$). Когда мембрана помещена в электролит без воздействия электрического поля, её поры наполняются электролитом и ионы противоположного знака (\tilde{C}^+) накапливаются в них. Более того, их число практически равно заряду мембраны ($\tilde{C}^+ = \tilde{p}$); таким образом, мембрана в целом экранирована изнутри. Если заряд мембраны достаточно велик ($\tilde{p} \gg \tilde{C}_{\infty}$), то внешним силам становится сложнее изменить число катионов внутри мембраны, то есть мы можем принять $\tilde{C}^+ = \tilde{p}$ внутри мембраны и на поверхности. Исследования плоских мембран показывают, что для предельных и сверхпредельных режимов решение практически независимо от значений p для $\tilde{p} \gg \tilde{C}_{\infty}$. Для сферической ионоселективной гранулы при достаточно сильном внешнем электрическом поле решение не зависит от \tilde{p} [6,7]. Третье условие означает, что мембрана – проводник и потенциал на мембране является константой. Без потери общности, эта константа может быть принята равной нулю. Последнее условие указывает, что компоненты скорости на твёрдой поверхности равны нулю.

2.3. Безразмерная постановка

Чтобы отобразить уравнения (1)–(10) в безразмерном виде, использованы следующие характерные величины:

| | |
|--|---|
| \tilde{r}_0 : | Радиус ионоселективной частицы принят в качестве характерного размера; |
| \tilde{r}_0^2/\tilde{D} : | Характерное время; |
| \tilde{D}/\tilde{r}_0 : | Характерная скорость; |
| $\tilde{\mu}$: | Вязкость жидкости принята в качестве характерного динамического значения; |
| $\tilde{\mu}\tilde{D}/\tilde{r}_0^2$: | Характерное давление; |
| $\tilde{\Phi}_0 = \tilde{R}\tilde{T}/\tilde{F}$: | Термический потенциал взят в качестве характерного напряжения; |
| \tilde{C}_∞ : | Концентрация ионов в резервуаре снаружи входного отверстия; |
| $\tilde{D}\tilde{F}\tilde{C}_\infty/\tilde{r}_0$: | Характерный электрический ток. |

Приведённые выше уравнения в безразмерном виде и в полярных сферических координатах имеют вид:

Ур. (1) для транспорта ионов становится

$$\frac{\partial c^+}{\partial t} + U \frac{1}{r} \frac{\partial c^+}{\partial \theta} + V \frac{\partial c^+}{\partial r} = \left[\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta C^+ \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 C^+ \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) \right] + \left[\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial c^+}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c^+}{\partial r} \right) \right], \quad (11)$$

$$\frac{\partial c^-}{\partial t} + U \frac{1}{r} \frac{\partial c^-}{\partial \theta} + V \frac{\partial c^-}{\partial r} = - \left[\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta c^- \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 c^- \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) \right] + \left[\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial c^-}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c^-}{\partial r} \right) \right], \quad (12)$$

уравнение Пуассона (2) принимает вид данного уравнения

$$\frac{v^2}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) \right] = C^- - C^+ \equiv -\rho; \quad (13)$$

и уравнение Стокса (3)-(4) для ползучего течения принимает вид

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial \Pi}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} + \frac{\cot \theta}{r^2} \frac{\partial U}{\partial \theta} - \frac{U}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial V}{\partial \theta} = \rho \frac{1}{r} \frac{\kappa}{v^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta}; \quad (14)$$

$$-\frac{\partial \Pi}{\partial r} + \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V}{\partial \theta^2} - \frac{2V}{r^2} + \frac{\cot \theta}{r^2} \frac{\partial V}{\partial \theta} - \frac{2U}{r^2} \cot \theta - \frac{2}{r^2} \frac{\partial U}{\partial \theta} = \rho \frac{1}{r} \frac{\kappa}{v^2} \frac{\partial \Phi}{\partial r}. \quad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta r U) + \frac{\partial}{\partial r} (\sin \theta r^2 V) = 0. \quad (16)$$

Здесь (U, V) являются компонентами скорости. Безразмерный параметр v - это число Дебая, которое является отношением длины Дебая $\tilde{\lambda}_D$ к радиусу микрогранулы \tilde{a} , ($v \ll 1$ это малый параметр задачи, так как в нашем случае мы рассматриваем тонкий двойной электрический слой),

$$v = \frac{\tilde{\lambda}_D}{\tilde{r}_0}, \quad \tilde{\lambda}_D = \left(\frac{\varepsilon \tilde{\Phi}_0}{\tilde{F} \tilde{C}_\infty} \right)^{\frac{1}{2}},$$

и κ коэффициент сцепления между гидродинамикой и электростатикой,

$$\kappa = \frac{\tilde{\varepsilon}\tilde{\Phi}_0^2}{\tilde{\mu}\tilde{D}}.$$

Эта величина характеризует физические свойства электролита и зафиксирована для данной жидкости и электролита. Величина числа ν зависит от двух главных факторов. Первый – \tilde{r}_0 , ν уменьшается с увеличением характерной длины \tilde{r}_0 . Второй – \tilde{C}_∞ , ν уменьшается при увеличении характерной концентрации \tilde{C}_∞ . Это означает, что ν различно для сильноразбавленных и среднеразбавленных электролитов. Оба случая будут рассмотрены далее.

Условия на границе внешней диэлектрической сферы, $r = R = \tilde{r}_1/\tilde{r}_0$, $\theta_0 < \theta < \pi - \theta_0$, ур. (5)-(7), принимают вид

$$\frac{\partial C^\pm}{\partial \tilde{r}} \pm C^\pm \frac{\partial \Phi}{\partial r} = 0. \quad (17)$$

$$\nu \frac{\partial \Phi}{\partial r} = 0, \quad (18)$$

$$\bar{U} \equiv 0. \quad (19)$$

Условия на выходе $r = R$, $0 < \theta < \theta_0$ (8) представлены в их безразмерной форме

$$\frac{\partial C^\pm}{\partial r} = 0, \Pi = 0, \Phi = -\Delta V/2, \quad (20)$$

где $\Delta V/2$ безразмерный потенциал на выходе.

На входе $r = R$, $\pi - \theta_0 < \theta < \pi$ распределение концентрации соли, условие электронейтральности, давление и электрический потенциал заданы в данном виде,

$$C^+ + C^- = 2, C^+ - C^- = 0, \Pi = \Delta \Pi, \Phi = \Delta V/2. \quad (21)$$

Напряжение $\Delta V = \Delta \tilde{V}/\tilde{\Phi}_0$ и градиент давления $\Delta \Pi = \Delta \tilde{\Pi} \tilde{r}_0^2 / \tilde{\mu} \tilde{D}$ могут иметь различные знаки, они могут быть со- или противонаправлены и вызывают электроосмотический или вызванный давлением поток, соответственно. На поверхности ионоселективной частицы при $r = 1$ граничные условия (10) имеют свой безразмерный аналог,

$$\frac{\partial C^-}{\partial r} - C^- \frac{\partial \Phi}{\partial r} = 0, C^+ = p, \Phi = 0, U = 0, V = 0. \quad (22)$$

Таким образом, система имеет два геометрических безразмерных параметра, $R = \tilde{r}_1/\tilde{r}_0$ и θ_0 . Первый параметр характеризует ширину канала, а второй – размер входного и выходного отверстий.

Характерный радиус микрогранулы \tilde{r}_0 принимает значения от 100 нанометров до 10 микрометров, коэффициент диффузии для NaCl и KCl примерно равен $\tilde{D} \sim 10^{-9}$ м²/с, характерная плотность концентрации ионов изменяется в диапазоне от $\tilde{C}_\infty = 0.1$ моль/м³ до $\tilde{C}_\infty = 100$ моль/м³, термический потенциал при $\tilde{T} = 300$ К примерно $\tilde{\Phi}_0 = 25$ мВ. Мы рассматриваем водные растворы слабых электролитов, поэтому параметры динамической вязкости и диэлектрической проницаемости выбраны как для воды, $\tilde{\mu} = 9 \times 10^{-4}$ Па*с, $\tilde{\varepsilon} = 7 \times 10^{-10}$ Кл/В*м.

Размерная напряжённость варьируется от 0 до $\Delta\tilde{V} = 6.25$ В и градиент давления до $\Delta\tilde{P} = 7$ Па; соответствующие безразмерные границы для этих параметров $0 < \Delta V \leq 600$ и $-700 \leq \Delta P \leq 300$. Радиус внешней сферы и углы входного отверстия зафиксированы $R = 3$ и $\theta_0 = 30^\circ$. Параметр κ зафиксирован, $\kappa = 0.2$ и соответствует раствору хлорида натрия.

2.4. Численный метод

Система уравнений (11)–(22) имеет малый параметр, число Дебая около старших производных. В результате чего у поверхности образуется тонкая область пространственного заряда с быстрым изменением неизвестных. Это значительно осложняет численное решение проблемы. Эти трудности усугубляются сложностью хаотического режима, когда поток содержит большой диапазон различных масштабов. Существует два подхода, чтобы преодолеть эти трудности. Первый – полуаналитический, когда решение в дебаевском слое находится аналитически как внутреннее решение, но в области диффузии – численно, где оно рассматривается как внешнее решение при правильном соответствии между внутренним и внешним решениями. Этот метод систематически используется для заряженных диэлектрических частиц группой Ярива (см. [8]) и для ионоселективных гранул [6]. Второй подход решает всю систему уравнений Нернста-Планка-Пуассона-Стокса численно без каких-либо упрощений.

Поставленная задача была решена численно, используя метод конечных разностей на неоднородной сетке для дискретизации по пространственным переменным r и θ . Интегрирование по времени проводилось полуявным методом. Детали численного метода решения могут быть найдены в работах [6,7]. Единственное отличие заключается в том, что для данной задачи нам не нужно использовать баланс сил для получения скорости гранулы, потому что гранула зафиксирована в пространстве и её скорость равна 0.

3. Результаты

Для оценки работы устройства были выбраны два критерия:

1. Максимальное значение концентрации в электролите K_{max} . В силу специфики поведения электролита около ионоселективной микрогранулы, данное максимальное значение достигается на краю частицы около выходного канала $r = 1, \theta = 0$. Этот критерий отражает максимально возможное локальное концентрирование ионов.

2. Среднеквадратическое отклонение профиля концентрации на выходном отверстии от среднего значения, с учетом сферической геометрии

$$\sigma^2 = \frac{1}{1 - \cos \theta_1} \int_0^{\theta_1} (K - \bar{K})^2 \sin \theta d\theta,$$

при $r = R$, где $\bar{K} = \frac{1}{1 - \cos \theta_1} \int_0^{\theta_1} K \sin \theta d\theta$. Этот критерий отражает степень расслоенности потока на выходе и отражает интенсивность сформированной концентрационной струи на выходе.

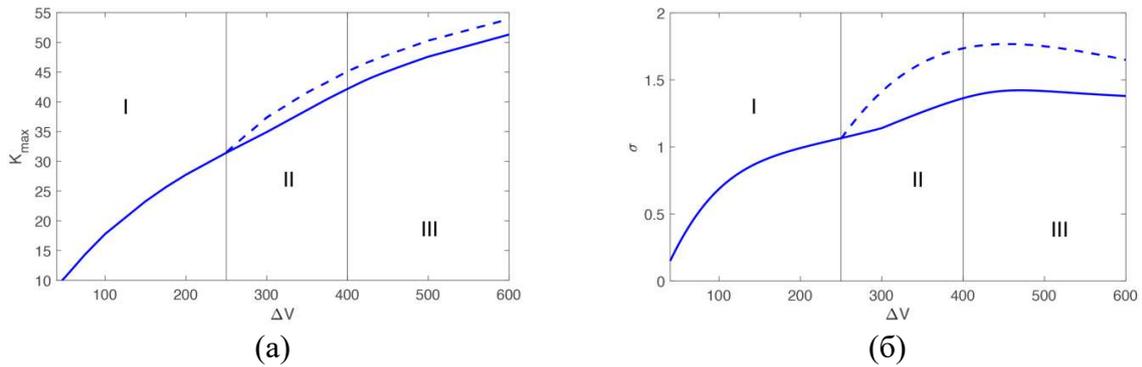


Рис. 2. Зависимости максимального концентрирования (а) и среднеквадратического отклонения профиля концентрации на выходе от разности электрических потенциалов. Сплошная линия – стационарное значение и усредненное по времени, пунктирная линия – максимальное значение во времени

3.1. Случай $\Delta P = 0$

Сначала будет рассмотрен случай отсутствия внешнего градиента давления. В этом случае поток жидкости создается за счет электроосмоса около ионоселективной микрогранулы. При малых значениях напряженности электрического поля скорость электроосмоса линейно зависит от ΔV (электроосмос первого рода), а при увеличении напряженности может достигать квадратичной зависимости (электроосмос второго рода). На рис. 2 представлены зависимости исследуемых критериев от разности электрических потенциалов. Максимальное значение концентрации монотонно растет с увеличением ΔV , однако у этой зависимости есть особенности, которые позволяют выделить три области. I – область наличия стационарного режима, максимальные значения критериев которых достигаются в стационарном случае, II – область наличия стационарного решения, но соответствующие максимальные значения критериев достигаются не при стационарном режиме (пунктирная линия) и III – область нестационарного режима.

В области I переходный режим от начального распределения к стационарному осуществляется монотонно (кривая 1 на рис. 3) во времени. Данное поведение свидетельствует о том, что электростатические явления развиваются медленнее гидродинамических и электроконвективная неустойчивость не успевает развиваться, так как подавляется вязкостью жидкости. В области II режим характеризуется тем, что электростатические явления проявляются быстрее, чем гидродинамические, что приводит к кратковременному возникновению максимальных значений критериев больше стационарных, однако со временем возникшие возмущения все же затухают и возникает стационарный режим (кривая 2 на рис. 3). В области III возмущения переходного режима уже не гаснут, так как электроконвективная неустойчивость преобладает над вязкими силами и возникает нестационарный режим течения. Для небольших закритических значениях ΔV этот режим периодический (кривая 3 на рис. 3), но для достаточно закритических он становится стохастическим.

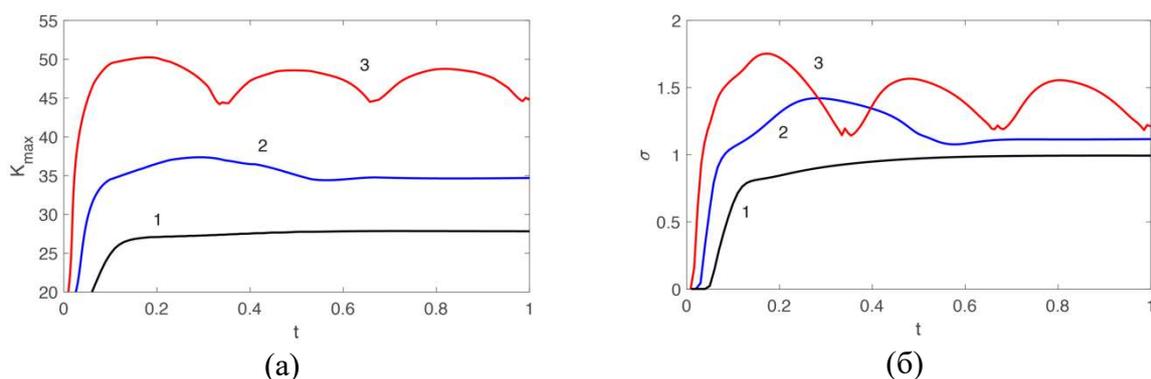


Рис. 3. Зависимости максимального концентрирования (а) и среднеквадратического отклонения профиля концентрации на выходе от времени для $\Delta V = 200$ (1), $\Delta V = 300$ (2) и $\Delta V = 500$ (3)

Режим III плохо сказывается на процессе концентрирования. Для максимального значения концентрации заметно замедление роста при увеличении ΔV (рис. 2(а)), а для среднеквадратического отклонения и вовсе наблюдается не монотонность (рис. 2(б)). Это явление связано с тем, что наличие электроконвективной неустойчивости приводит к излишнему вихреобразованию и дополнительному перемешиванию концентрационного следа за частицей. Таким образом, можно судить о том, что для работы моделируемого устройства есть оптимальный диапазон ΔV в котором для заданного типа электролита и взвешенных макромолекул можно добиться наилучшего концентрирования.

3.2. Случай наличия внешнего градиента давления $\Delta P \neq 0$

Добавление внешнего градиента давления к системе приводит к некоторым изменениям в течениях. Если дополнительный поток оказывается сонаправленным с электросмотическим ($\Delta P > 0$), то это приводит к стабилизации течения, а увеличение расхода жидкости снижает показатели максимальной концентрации и среднеквадратического отклонения, так как приводят к более интенсивному уносу ионов из зоны концентрирования в выходное отверстие.

Случай $\Delta P < 0$ оказывается более интересным, так как в этом случае градиент внешнего давления тормозит электроосмотический поток и дестабилизирует течение. Важно отметить, что за счет увеличения $|\Delta P|$ не удастся полностью остановить электроосмотический поток и добиться стационарного режима с нулевым расходом, так как электроосмос возникает за счет поверхностных сил около частицы, а поток за счет давления имеет объемный характер, поэтому в разных местах расчетной области преобладает свой механизм движения жидкости, а возникающее вихреобразование приводит к неустойчивости основного потока. В таком случае с уменьшением ΔP наблюдается смещение областей II и III к меньшим значениям ΔV . На рис. 4 представлены данные для $\Delta V = 200$. На графике видно, что уже для незначительного уменьшения ΔP проявляются особенности области II, когда максимум критериев достигается в переходное время. Замедление основного потока приводит к увеличению как максимальной концентрации, так и среднеквадратического отклонения. Однако чрезмерное уменьшение ΔP приводит к обратному эффекту. Это происходит из-за того, что образующиеся конвективные вихри, вызванные конкуренцией двух механизмов движения жидкости, разрушают электрокинетические области обессоливания и концентрирования и перемешивают их внутри камеры.

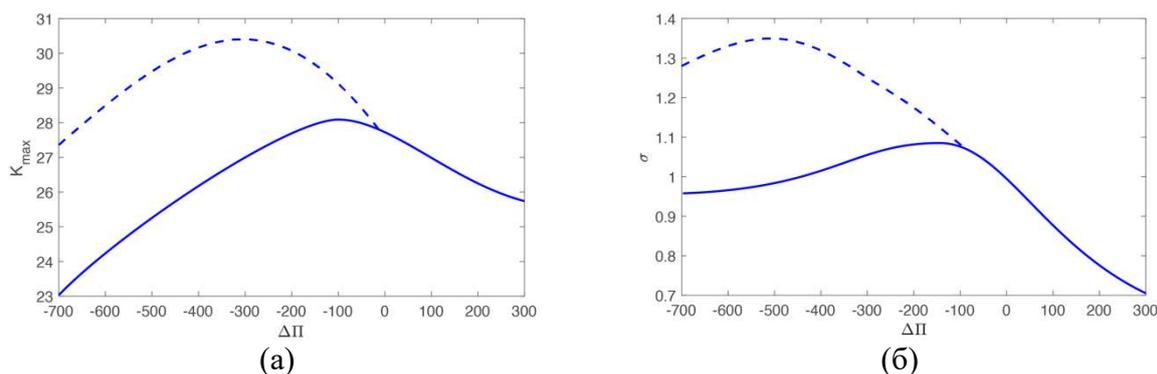


Рис. 4. Зависимости максимального концентрирования (а) и среднеквадратического отклонения профиля концентрации (б) на выходе от разности внешних давлений. Сплошная линия – стационарное значение, пунктирная линия – максимальное значение во времени

Таким образом, можно сделать вывод, что за счет градиента давления можно дополнительно управлять процессом концентрирования. За счет двухпараметрической оптимизации параметрам $\Delta\Pi$ и ΔV одновременно можно добиться еще лучшего концентрирования или разделения, чем в случае $\Delta\Pi = 0$.

4. Заключение

В работе было представлено теоретическое исследование концентрирования ионов и макромолекул в электролите около ионоселективной микрочастицы под действием внешнего электрического поля. Проведено численное моделирование устройства концентрирования, геометрическая конфигурация которого ранее была представлена в экспериментальной работе других авторов. Устройство представляет из себя сферическую полость, которая встраивается в круглый микроканал. В середине полости находится ионоселективная микрочастица. За счет внешнего электрического поля происходит концентрирование ионов со стороны выходного канала, формируется концентрационная струя, которая уходит в выходной канал. Расчеты показали, что с увеличением напряженности внешнего электрического поля происходит увеличение концентрирования ионов и макромолекул, однако, начиная с некоторого критического значения разности электрических потенциалов, происходит потеря устойчивости течения, что приводит к вихреобразованию и ухудшению концентрирования. Добавление в систему дополнительного механизма в виде градиента давления позволяет дополнительно управлять степенью концентрирования. Было показано, что за счет двухпараметрической оптимизации по разности электрических потенциалов и разности давлений можно добиться лучшего концентрирования для заданных электролитов и взвешенных частиц.

5. Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, № 20-79-00044.

Список литературы

1. Wang S.-C., Wei H.-H., Chen H.-P., Tsai M.-H., Yu C.-C., Chang H.-C. Dynamic superconcentration at critical-point double-layer gates of conducting nanoporous granules due to asymmetric tangential fluxes // *Biomicrofluidics*. 2008. № 1 (2). С. 14102.

2. Wang S.-C., Wei H.-H., Chen H.-P., Tsai M.-H., Yu C.-C., Chang H.-C. Microfluidic Mixing by dc and ac Nonlinear Electrokinetic Vortex Flows // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2004. № 12 (43). C. 2902–2911.
3. Rubinstein I., Shtilman L. Voltage against current curves of cation exchange membranes // *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 1979, 75, 231.
4. Rubinstein I., Zaltzman B. Electro-osmotically induced convection at a permselective membrane // *Phys. Rev. E* 2000, 62, 2238.
5. Shelistov V.S., Nikitin N.V., Ganchenko G.S., Demekhin E.A. Numerical modeling of electrokinetic instability in semipermeable membranes // *Dokl. Phys.* 2011, 56, 538.
6. Ganchenko G.S., Frants E.A., Shelistov V.S., Nikitin N.V., Amiroudine S., Demekhin E.A. Extreme nonequilibrium electrophoresis of an ion-selective microgranule // *Phys Rev Fluids*. 2019, 4, 043703.
7. Ganchenko G.S., Frants E.A., Amiroudine S., Demekhin E.A. Instabilities, bifurcations, and transition to chaos in electrophoresis of charge-selective microparticle // *Phys Fluids*. 2020, 32, 054103.
8. Schnitzer O., Yariv E. Dielectric-solid polarization at strong fields: Break-down of Smoluchowski's electrophoresis formula // *Phys. Fluids* 2012 24, 082005.

Неравномерный нагрев ячейки в испарительной литографии

М. А. Аль-Музейкер^a, К. С. Колегов^{b,c,d}, Н. А. Иванова^a, В. М. Флягин^a

^aТюменский государственный университет, 625003, Тюмень, Ленина, 25

^bАстраханский государственный университет, 414056, Астрахань, Татищева, 20a
email: konstantin.kolegov@asu.edu.ru

^cВолжский государственный университет водного транспорта, Каспийский институт морского и речного транспорта им. генерал-адмирала Ф.М. Апраксина – филиал ФГБОУ ВО «ВГУВТ», 414000, Астрахань, Никольская, 6

^dИнститут теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, 142432, Черноголовка, проспект академика Семенова, 1-А

Исследуется метод сборки частиц, относящийся к испарительной литографии. В экспериментах происходило неравномерное испарение пленки, содержащей частицы, в открытой ячейке. Неоднородность плотности потока пара возникала из-за градиента температуры. В центр дна ячейки вмонтирован нагреватель. Термокапиллярный поток, возникающий из-за градиента поверхностного натяжения вследствие перепада температуры, переносит частицы, которые изначально покоились вдоль дна ячейки. Экспериментально изучено влияние начальной толщины жидкого слоя на высоту и площадь кластера, формирующегося в центральной области ячейки. С помощью велосиметрии измерена скорость движения частиц. Разработана модель, описывающая процесс на начальной стадии. Численные результаты показали, что пленка постепенно становится тоньше в центральной области, так как поверхностное натяжение уменьшается с повышением температуры. Поток жидкости направлен к нагревателю вблизи подложки. Он переносит частицы в центр ячейки. Объемная доля частиц возрастает с течением времени в этой области. Тепловой поток влияет на геометрию кластера по двум причинам. Во-первых, скорость потока Марангони зависит от градиента температуры. Во-вторых, от температуры зависит просадка толщины пленки около нагревателя.

Ключевые слова: испарительная литография; кластер частиц; течение Марангони.

Nonuniform heating of a cell in evaporative lithography

M. A. Al-Muzaiqer^{a,b}, K. S. Kolegov^{c,d,e}, N. A. Ivanova^{a,b}, V. M. Fliagin^{a,b}

^aUniversity of Tyumen, Photonics and Microfluidics Lab., X-BIO Institute, Russia

^bUniversity of Tyumen, Microfiltration Processes Lab., Russia

^cAstrakhan State University, Mathematical Modeling Lab., Russia

e-mail: konstantin.kolegov@asu.edu.ru

^dVolga State University of Water Transport, Caspian Institute of Maritime and River Transport, Astrakhan, Russia

^eLandau Institute for Theoretical Physics RAS, Chernogolovka, Russia

The particle assembly method related to evaporative lithography is investigated. In the experiments, uneven evaporation of the film containing the particles occurred in an open cell. The inhomogeneity of the vapor flux density was due to the temperature gradient. A heater is mounted in the center of the bottom of the cell. The thermocapillary flow resulting from the surface tension gradient transfers the particles that were originally at rest along the bottom of the cell. The effect of the initial thickness of the liquid layer on the height and area of the cluster formed in the central region of the cell is experimentally studied. The particle velocity was measured using velocimetry. A model describing the process at the initial stage has been developed. Numerical results showed that the film gradually becomes thinner in the central region, as the surface tension decreases with increasing temperature. The liquid flow is directed to the heater near the substrate. It transfers the particles to the center of the cell. The volume fraction of the particles increases over time in this region. The heat flow affects the cluster geometry for two reasons. First, the Marangoni flow rate depends on the temperature gradient. Secondly, the temperature depends on the drawdown of the film thickness near the heater.

Keywords: evaporative lithography, particle cluster, Marangoni flow.

1. Введение

Зачастую при испарении капель и пленок жидкости на твердой поверхности формируются структурированные осадки коллоидных частиц в результате процессов, происходящих естественным образом. Существует широкая группа методов, основанная на таких процессах, которая известна как испарительная самосборка. Если на испарение оказывать какое-то внешнее воздействие дополнительно, то можно добиться большей гибкости управления процессом. Это относится к более узкому направлению, которое получило название испарительная литография. Формирование структурированных осадков и рельефных покрытий важно для приложений из медицины, микро- и оптоэлектроники, нанотехнологий и других направлений. Более подробная информация представлена в недавнем обзоре [1].

В текущей работе исследуется возможность управления сборкой частиц при испарении жидкости с помощью локального нагревателя, вмонтированного в центральную часть дна открытой ячейки.

2. Методы

2.1. Эксперимент

2.1.1. Технические детали

Ячейка для жидкости состоит из подложки из сварочного стекла с приклеенным к ней фотополимерным кольцом (высота 4 мм и внутренний диаметр 20 мм). В центре подложки просверлено отверстие, в которое герметично встроен медный стержень радиусом $R_h \approx 0.9$ мм, соединенный с нагреваемой стороной элемента Пельтье (NEC1 - 00703, 10x10x4.9 мм). В качестве рабочих материалов использовались полистирольные микросферы и летучий изопропиловый спирт (изопропанол). Эксперименты проводились по следующей методике: сухие микрочастицы (15 мг) помещали на подложку экспериментальной ячейки и наливали изопропанол. Частицы перемешивались кончиком пипетки до тех пор, пока распределение частиц в слое не

становилось однородным. Анализ оптического изображения такого начального распределения показал, что частицы достаточно плотно покрывают подложку.

После начала нагрева процесс образования кластеров регистрировали с помощью микроскопа Axio Zoom.V16 с линзами Zeissapoz 1.5x/0.37 FWD 30 мм, оборудованный CCD-камерой Zeiss AxioCam 506 color. После того, как частицы образовали кластер, изопропанол продолжал испаряться до полного исчезновения. Далее эксперимент повторялся еще раз после того, как в ячейку, содержащую сухие частицы, был добавлен необходимый объем спирта. Эксперименты проводились для двух случаев толщины пленки жидкости ($h_0 \approx 400$ и 700 мкм) при постоянном напряжении (+2 В), приложенном к модулю Пельтье. Для контроля воспроизводимости эксперименты повторялись пять раз для каждой толщины слоя. Затем полученные изображения анализировались и измерялась площадь образующегося на подложке при нагревании кластера частиц $S(t)$ для двух значений h_0 . Профиль кластера $\delta(r)$ измерялся с помощью системы контурного анализа (OCA 15, DataPhysics Instruments). Эволюция и радиальное распределение температуры измерялись с помощью ИК-камеры (Flir A655sc, спектральный диапазон 7.5–14 мкм, $\pm 2^\circ\text{C}$).

2.1.2. Оценка площади кластера

Во время нагрева площадь скопления частиц измерялась с помощью последовательности кадров. Граница кластера была определена как переход от высокой к низкой интенсивности пикселей. Берется центральная точка растущего кластера. От этой точки рисуются линии во всех направлениях с шагом 0.25° . Такой небольшой угол позволяет детально измерить границу кластера на изображении с разрешением 1920×1200 пикселей. Длина линии определяется положением самой удаленной частицы от центра кластера. Внешняя граница кластера линейно интерполировалась на основе полученных дискретных значений, и затем вычислялась площадь, ограниченная этим.

2.1.3. Анализ погрешности

Погрешность определения площади кластера – это сумма погрешности расчета пикселей изображения, входящих в расчетную площадь, и статистической погрешности, возникающей при проведении набора экспериментов по заданным параметрам с последующим усреднением. Первый тип ошибки при измерении площади связан с неточностью в определении границы сборки и завышением площади кластера из-за частиц, движущихся к центру. Было обнаружено, что отдельные частицы образуют на изображениях пятно диаметром 4 ± 1 пиксель (масштаб изображения составляет 17 мкм/ пиксель). Это означает, что погрешность определения положения границы кластера можно оценить, как ± 0.5 пикселя. Для оценки погрешности измерения площади периметр кластера измерялся в три момента времени после начала нагрева: 20, 30 и 45 с. Позже этот набор временных периодов был использован для анализа других компонентов ошибки. Периметр вычислялся как количество пикселей на границе кластера. Поэтому с учетом погрешности определения положения границы погрешность измерения площади составляет до половины площади пикселей, расположенных по периметру. Оценки для рассматриваемых моментов времени показали, что максимальное значение относительной погрешности измерения площади находится на уровне $\pm 1.4\%$. Завышение площади кластера возникает, если частица, переносимая потоком над неподвижными частицами, пересекает границу кластера. В текущем кадре площадь таких частиц добавляется к общей площади кластера, но в следующих кадрах они могут перемещаться над кластером и, как следствие, не

увеличивать результирующую площадь кластера. Эта ошибка вносит заметный вклад на ранних стадиях из-за малого размера образующегося кластера и высокой интенсивности конвективных потоков на более поздних стадиях. Можно оценить наибольшее значение этой ошибки, умножив периметр кластера на радиус частицы. Это значение соответствует случаю, когда кластер окружен такими частицами, но некоторые из них только приближаются к границе кластера, а другие пересекают границу кластера. В действительности между движущимися частицами существует зазор, соответствующий их размеру и более. Поэтому оценка была скорректирована путем деления периметра пополам. Максимальное значение относительной погрешности в этом случае составляет $\pm 5.6\%$. Конечные значения погрешности измерения площади не превышают $\pm 5.8\%$.

2.1.4. Измерение скорости частиц

Процесс сборки кластера осуществляется путем перемещения микрочастиц к нагревателю. Видеозапись этого движения может быть проанализирована с помощью технологии велосиметрии изображений частиц, которая позволяет определить поле скорости частиц. Однако, эта технология применяется к небольшому числу частиц-трейсеров, а в наших экспериментах относительно большое количество частиц. Это увеличивает вероятность неправильного определения их положения и, как следствие, их скоростей. Кроме того, отдельные частицы обнаруживаются только вне кластера, в то время как частицы, движущиеся над ним, не обнаруживаются на фоне неподвижных частиц в кластере. Следует также отметить, что с развитием термокапиллярного вихря и увеличением скорости потока возрастает количество частиц, увлекаемых термокапиллярным потоком вдоль свободной поверхности к стенке ячейки. Таким образом, поле скорости содержит векторы, направленные как к нагревателю, так и от него, что усложняет обработку. По этой причине достоверные результаты можно получить только на начальной стадии процесса сборки частиц (в течение 30 с с начала нагрева). Для определения поля скорости видео было разбито на кадры с частотой 10 Гц и проанализировано с помощью программного пакета с открытым исходным кодом (OpenPIV). Затем поля скорости, полученные в каждый момент времени, обрабатывались путем усреднения величины скорости по радиусу относительно центра нагревателя с шагом 0.1 мм. Полученные пространственно-временные значения скорости потока были сохранены в двумерном массиве для дальнейшей визуализации.

2.2. Моделирование

Разработана математическая модель, описывающая процесс на начальной стадии. Для моделирования распределения температуры в жидкости и ячейке использовались уравнения теплопереноса и теплопроводности. Поток жидкости описывался приближением смазки. Перераспределение частиц моделировалось с помощью уравнения конвекции-диффузии. Плотность потока испарения вычислялась с помощью уравнения Герца-Кнудсена. Зависимость вязкости жидкости от концентрации частиц описывалась формулой Муни. Более подробное описание модели представлено в [2].

Задача решалась методом конечных разностей. Производные по пространству аппроксимировались центральными разностями. Использовался постоянный шаг по времени $\Delta t = 0.5$ с и пространству $\delta r = 10^{-4}$ м. Выполнена проверка сходимости задачи по сетке. Неявная разностная схема с первым и вторым порядком аппроксимации по времени и пространству, соответственно, решалась методом Ньютона. Работа выполнена с помощью математического пакета Maple 2019. К сожалению, численная реализация позволила нам смоделировать процесс лишь на начальной стадии. Нам

удалось выполнить расчет вплоть до времени $t = 25$ с. Далее по времени возникает численная неустойчивость. Скорее всего, это связано со слишком маленьким значением коэффициента диффузии D и, как следствием, большим градиентом концентрации ϕ .

3. Результаты и обсуждение

3.1. Результаты эксперимента

На рис. 1а показана эволюция площади кластера в слоях толщиной 400 и 700 мкм. Площадь кластера меньше в случае толстого слоя по сравнению с тонким слоем, что согласуется с тенденцией, обнаруженной в нашем предыдущем исследовании для небольшого числа частиц [3]. На рис. 1б показано изменение высоты кластера вдоль радиальной координаты для обоих слоев. Профили поверхности были получены путем создания контура изображений кластера с бокового обзора. Кластер выше в случае слоя 700 мкм. Следовательно, в относительно толстых слоях образуются многослойные сборки. Причина этого в том, что частица поднимается на кластер под действием восходящих потоков на границе «жидкость–кластер» [3]. Примечательно, что время образования кластера, то есть время сборки всех частиц в области нагрева, одинаково для обеих толщин слоя.

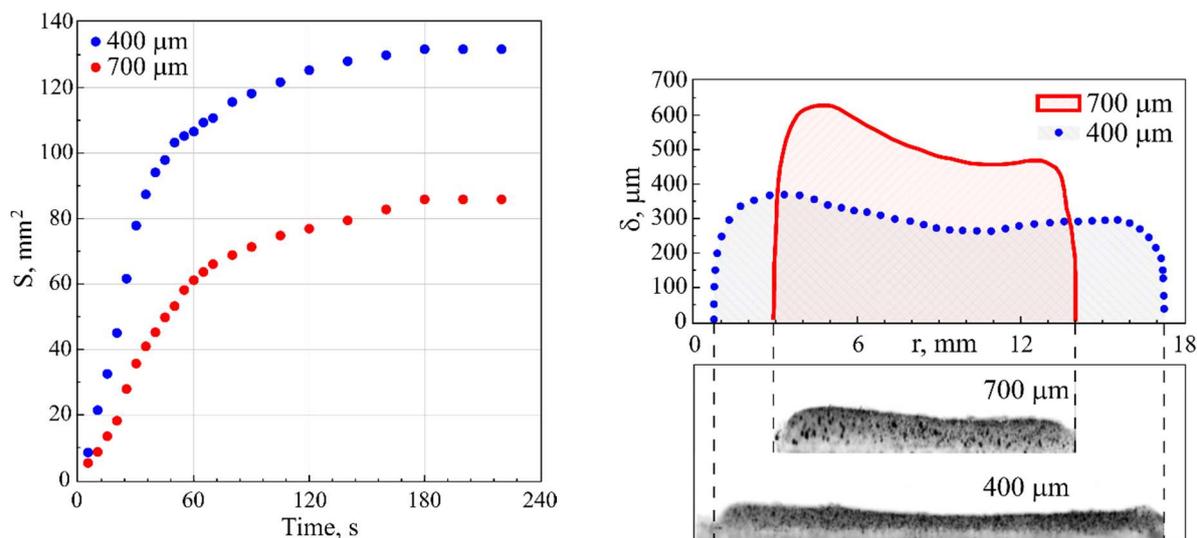


Рис. 1. (а) Зависимость площади кластера от времени нагрева при толщинах слоев 400 и 700 мкм. (б) Сверху: высота кластера по сравнению с его диаметром (реальный масштаб). Снизу: изображения кластера для обеих толщин слоев (вид сбоку); вертикальный масштаб изображений увеличен в два раза по отношению к исходным изображениям

На рис. 2 показана скорость частиц, увлекаемых обратным донным потоком жидкости в сторону нагревателя. Направление от центра нагревателя к стенке ячейки бралось за положительное направление оси r . Максимальные значения скорости достигаются вблизи границы растущего кластера. Это, очевидно, связано с увеличением градиента температуры вблизи границы по сравнению с периферией и, как следствие, увеличением скорости потока.

Интересно также, что значение максимальной скорости частиц увеличивается с увеличением времени нагрева и площади кластера. Этот эффект вызван двумя механизмами: увеличением разности температур между краем кластера и стенкой (рис. 3а), что приводит к увеличению скорости, и образованием небольшой

кольцеобразной зоны вблизи границы кластера, которая в конечном итоге становится относительно свободной от частиц (рис. 3b), позволяя частицам свободно перемещаться в потоке без столкновений или замедления. Увеличение ширины усредненного профиля скорости для каждого момента времени в слое 700 мкм (рис. 1b) объясняется тем, что граница кластера в этом случае имеет асимметричную форму по сравнению со слоем 400 мкм.

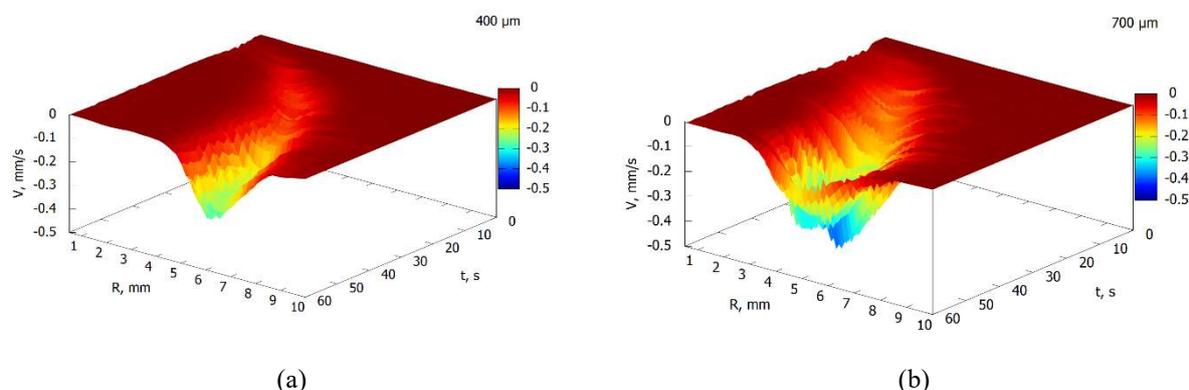


Рис. 2. Результаты измерения скорости движения частиц в двух слоях методом PIV: (a) 400 мкм и (b) 700 мкм

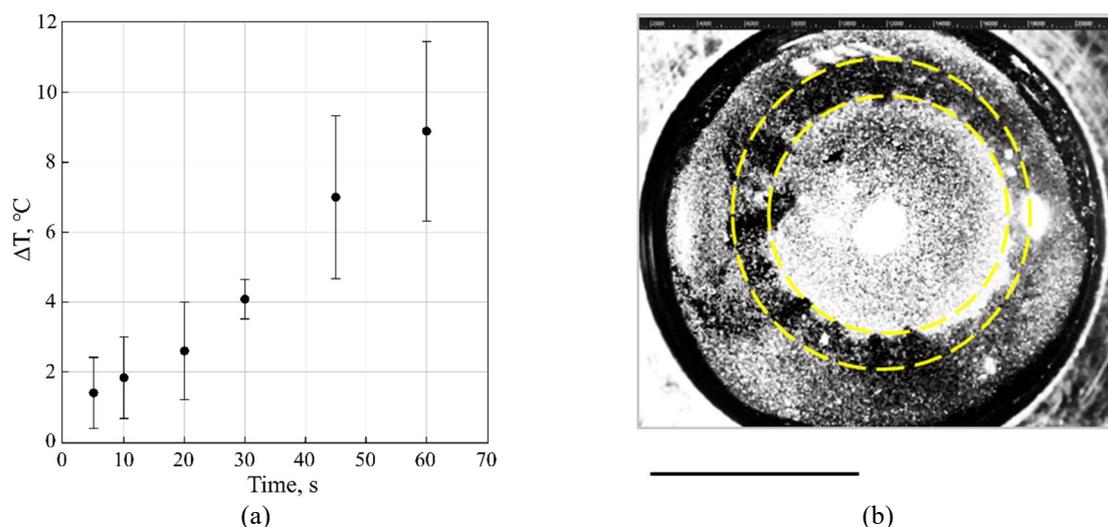


Рис. 3. (a) Эволюция разности температур между краем кластера и стенкой. (b) Снимок процесса сборки кластера в момент времени $t = 24$ с для слоя толщиной 400 мкм. Область, ограниченная двумя кольцами, отмечена пунктирными линиями (масштабный отрезок 5 мм)

3.2. Результаты моделирования

В начальный момент времени свободная поверхность жидкости плоская, но далее по времени она начинает искривляться. Пленка прогибается вниз в центральной области ячейки и немного приподнимается вблизи стенки (рис. 4а). Это происходит по двум причинам. Во-первых, в центральной области из-за нагрева поверхностное натяжение жидкости уменьшается. Во-вторых, с ростом температуры интенсивность испарения увеличивается. Это предшествует термокапиллярному разрыву пленки,

который должен произойти позже по времени. Толщина пленки h уменьшается примерно на 13% в центральной области ячейки за время нагрева $t = 25$ с.

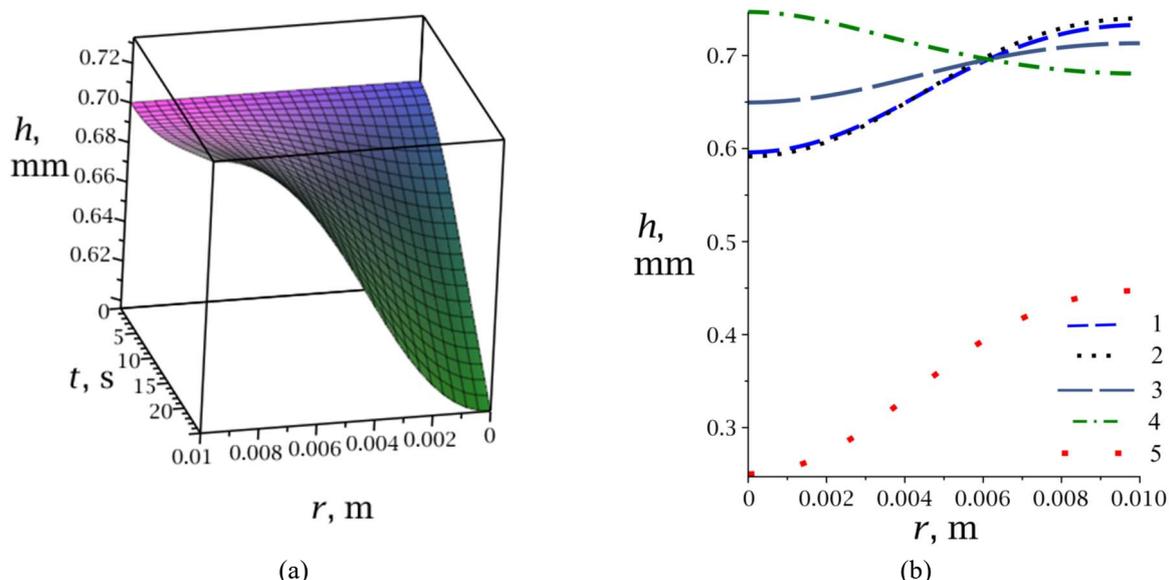


Рис. 4. Результаты моделирования (а) пространственно-временной динамики толщины пленки и (б) формы свободной поверхности жидкости в момент времени $t=25$ с при разных значениях параметров: 1) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м²; 2) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м², $\alpha_e = 0$; 3) $h_0 = 700$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 4) $h_0 = 700$ мкм, $q = -0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 5) $h_0 = 400$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²

Моделирование позволяет понять, как влияют ключевые параметры на поведение системы. Рассмотрим влияние плотности теплового потока q , начальной толщины пленки h_0 и наличия или отсутствия (коэффициент испарения $\alpha_e = 0$) испарения. При уменьшении нагрева в два раза толщина пленки в центральной части ячейки становится примерно на 0.05 мм выше в момент времени $t = 25$ с (рис. 4b). При этом значение h вблизи стенки ячейки наоборот уменьшается примерно на 0.025 мм. Таким образом, уменьшение q приводит к уменьшению кривизны поверхности. Термокапиллярное утоньшение жидкой пленки становится менее выраженным из-за меньшего градиента температуры жидкости. При отрицательном значении q (режим охлаждения) поверхность пленки становится выпуклой из-за того, что градиент температуры жидкости меняет направление. Наличие или отсутствие испарения не приводят к значительным отличиям в форме поверхности пленки. Но даже незначительное отличие в кривизне поверхности пленки может заметно влиять на градиент давления Лапласа, от которого зависит капиллярный поток. При меньшем значении начальной толщины пленки модель предсказывает более глубокое центральное истончение пленки (увеличивается кривизна поверхности при уменьшении h_0), так как в этом случае жидкость прогревается быстрее и градиент температуры жидкости выше. Это приводит к увеличению градиента поверхностного натяжения, влияющего на форму мениска.

Уменьшение объема жидкости в районе нагревателя и перенос потоком приводит к росту объемной доли частиц ϕ . За относительно короткий промежуток времени значение ϕ выросло почти на порядок по сравнению с ϕ_0 в центральной области ячейки (рис. 5а). Число Пекле $Pe_\phi = U_{\max} R_{\text{in}} / D \approx 3 \cdot 10^9$, где характерная скорость $U_{\max} \approx 1$ мм/с согласно экспериментальным измерениям (максимальная скорость U_ω) и внутренний радиус ячейки $R_{\text{in}} \approx 10$ мм. При таком значении концентрационного числа Пекле

$Re_\phi \gg 1$ конвективный перенос масс преобладает над диффузией. Диффузионное слагаемое учитывается исключительно из соображений вычислительной устойчивости.

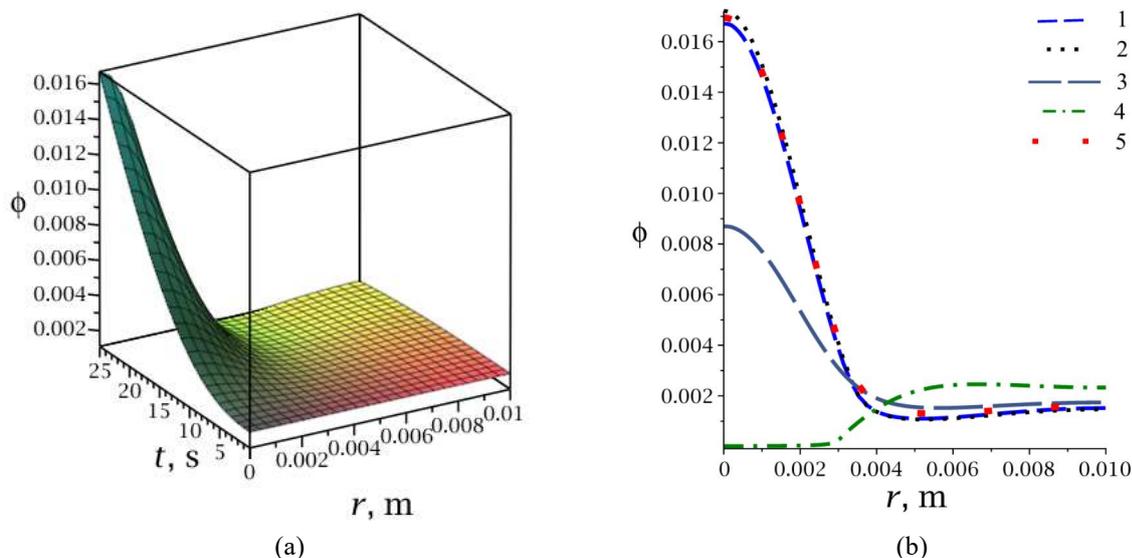


Рис. 5. Результаты моделирования (а) пространственно-временной динамики объемной доли частиц и (б) пространственной зависимости ϕ в момент времени $t = 25$ с при разных значениях параметров: 1) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м²; 2) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м², $\alpha_e = 0$; 3) $h_0 = 700$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 4) $h_0 = 700$ мкм, $q = -0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 5) $h_0 = 400$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²

При отсутствии испарения объемная доля частиц в центре ячейки в момент времени $t = 25$ с примерно на 3% выше (рис. 5б). Это может быть связано с тем, что испарение противодействует выносу твердого вещества в сторону нагревателя, оказывая влияние на поток жидкости. Уменьшение плотности теплового потока приводит к уменьшению ϕ в районе $r=0$, так как от q зависит скорость потока жидкости. В режиме охлаждения ($q < 0$) объемная доля частиц в районе медного стержня уменьшается, потому что поток жидкости меняет направление. Модель предсказывает, что для пленки толщиной $h_0 = 700$ мкм в режиме охлаждения при заданном значении q происходит перенос частиц к стенке ячейки, что качественно согласуется с результатом предыдущего эксперимента для $h_0 \approx 400$ мкм при меньшем значении q [3]. Уменьшение начальной толщины пленки с 700 до 400 мкм при постоянном q приводит к увеличению ϕ примерно в два раза за счет усиления потока жидкости.

Температура жидкости и подложки растет с течением времени, особенно интенсивно это происходит в центральной части ячейки (рис. 6а, 7а). На рассмотренном временном интервале температура подложки T_s в районе нагревательного элемента выросла на 12 К. В то время как вблизи стенки ячейки температура T_s практически не изменилась. Это связано с продолжительным временем релаксации тепла в подложке $t_{rs} = \pi R_{in}^2 / \chi_s \approx 819$ с, где χ_s – коэффициент температуропроводности. Кроме того, происходит постоянная отдача тепла от дна ячейки (подложки) к жидкости, так как $T_s > T_l$ для любого значения r при $t > 0$. Тепловое число Пекле $Re_T = u_{max} R_{in} / \chi_l \approx 1.6$, где χ_l – коэффициент температуропроводности. Максимальное значение усредненной скорости взято из результатов наших расчетов $u_{max} \approx 10^{-5}$ м/с. Такое значение числа Пекле Re_T свидетельствует о том, что термодиффузия и конвекция в равной значимости влияют на распределение тепла. За время нагрева $t = 25$ с температура жидкости T_l в центральной

части ячейки вырастает примерно на 1.7 К. Вблизи стенки T_l понижается примерно на 0.7 К, что связано с испарением, так как с поверхности жидкости отрываются молекулы с наибольшей кинетической энергией и переходят в фазу пара. За такой промежуток времени конвекция и термодиффузия еще не успевают компенсировать это охлаждение. Перепад температуры на противоположных границах расчетной области $\Delta T_l \approx 2.4$ К. Таким образом, на возникновение потока влияет не только отклонение свободной поверхности пленки от равновесной формы, но и градиент поверхностного натяжения, возникающий из-за неравномерной температуры T_l .

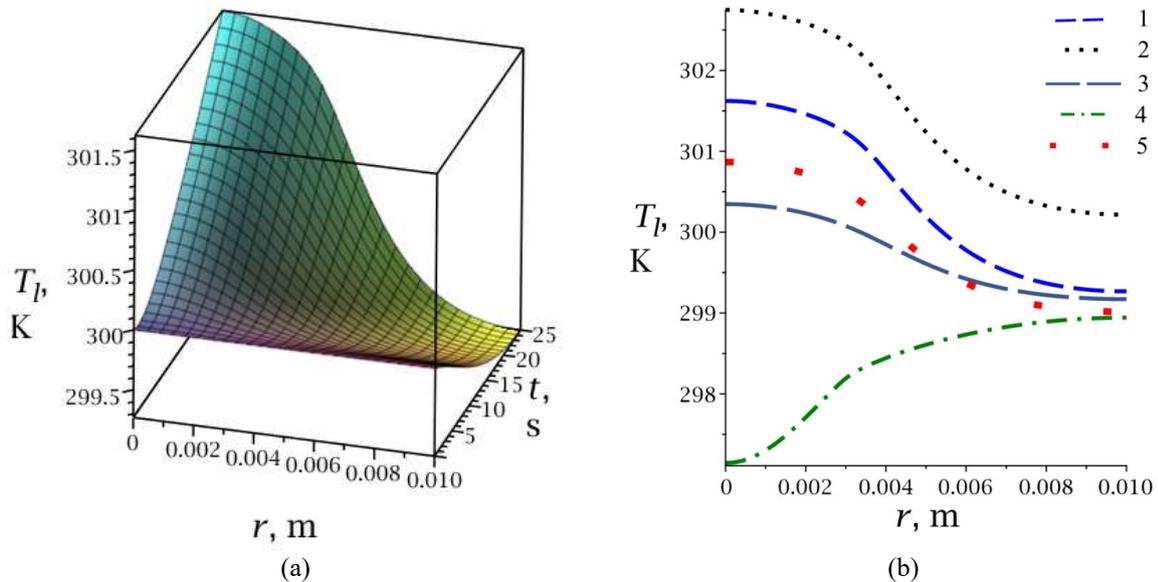


Рис. 6. Результаты моделирования (a) пространственно-временной динамики температуры жидкости и (b) пространственной зависимости T_l в момент времени $t = 25$ с при разных значениях параметров: 1) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м²; 2) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м², $\alpha_e = 0$; 3) $h_0 = 700$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 4) $h_0 = 700$ мкм, $q = -0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 5) $h_0 = 400$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²

Модель предсказывает, что испарение приводит к снижению температуры жидкости примерно на 1 К (рис. 6b), но не оказывает заметного влияния на температуру подложки (рис. 7b). Уменьшение значения q приводит к понижению температуры подложки и жидкости. Отрицательное значение плотности теплового потока меняет направление градиента температуры T_s и T_l . Толщина пленки h_0 влияет на усредненную по толщине жидкого слоя температуру T_l . Чем тоньше слой жидкости, тем сильнее и быстрее он прогревается (рис. 6b). Модель предсказывает, что температура T_s от параметра h_0 не зависит (рис. 7b).

Усредненная по толщине жидкого слоя радиальная скорость потока u на рассмотренном временном промежутке возрастает с 0 до 10^{-5} м/с. Положительный знак скорости свидетельствует о том, что перенос жидкости происходит от центра к стенке ячейки. Это связано с действием капиллярных сил и изменением равновесной формы пленки при возникновении градиента поверхностного натяжения. Из-за повышения температуры значение σ уменьшается в центральной части ячейки. Таким образом, термокапиллярный поток жидкости вдоль свободной поверхности будет направлен от центра к стенке ячейки, в область более высокого значения поверхностного натяжения. Вблизи подложки поток жидкости направлен в центральную область ($U_\omega < 0$), куда и переносит частицы. Наибольшие значения u и U_ω на графиках (рис. 8a, 9a) наблюдаются в районе $r \approx 4$ мм, где начинается относительно резкий спад температуры

T_l по направлению к стенке. Пик скорости $U_\omega \approx -0.4$ мм/с, что по порядку величины соответствует экспериментальным результатам. Противоположные знаки значений U_ω и u свидетельствуют о том, что поток вблизи свободной поверхности более стремительный, чем вблизи подложки.

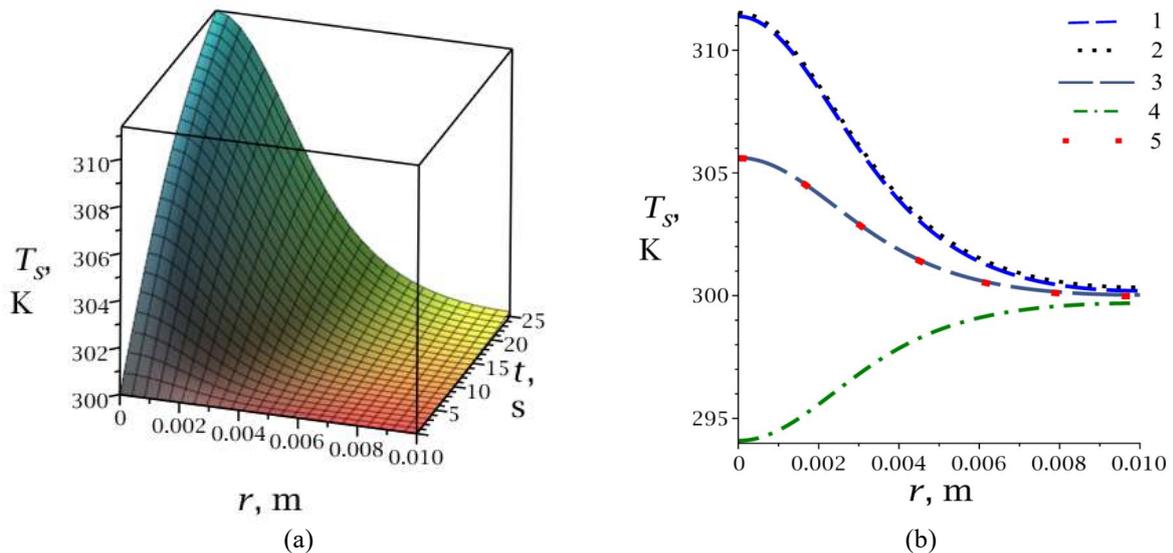


Рис. 7. Результаты моделирования (а) пространственно-временной динамики температуры подложки и (б) пространственной зависимости T_s в момент времени $t=25$ с при разных значениях параметров: 1) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м²; 2) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м², $\alpha_e = 0$; 3) $h_0 = 700$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 4) $h_0 = 700$ мкм, $q = -0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 5) $h_0 = 400$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²

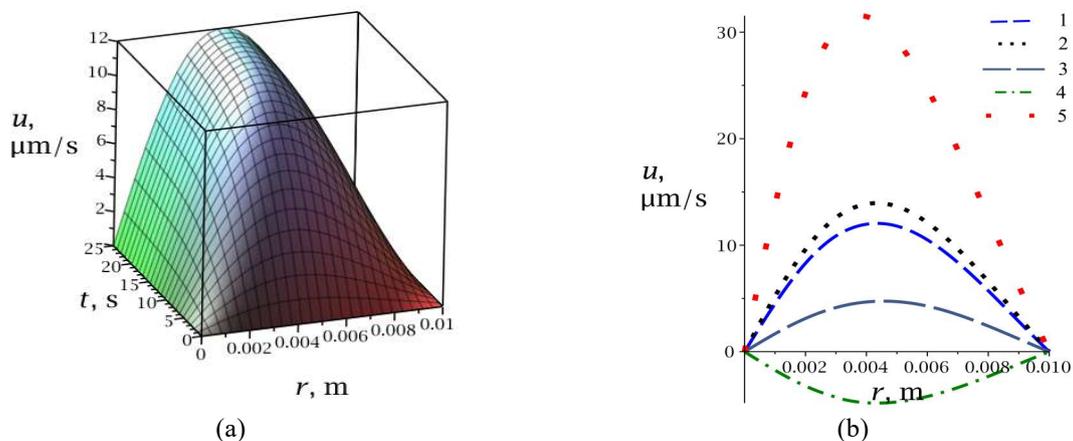


Рис. 8. Результаты моделирования (а) пространственно-временной динамики усредненной скорости потока жидкости и (б) пространственной зависимости u в момент времени $t=25$ с при разных значениях параметров: 1) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м²; 2) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м², $\alpha_e = 0$; 3) $h_0 = 700$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 4) $h_0 = 700$ мкм, $q = -0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 5) $h_0 = 400$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²

Уменьшение плотности теплового потока приводит к снижению модуля скорости потока жидкости (рис. 8б, 9б). Направление потока инвертируется при смене знака q . Уменьшение h_0 при постоянном q приводит к увеличению модуля скорости потока из-за ускорения прогрева жидкого слоя. Испарение способствует уменьшению $|u|$ и U_ω примерно на 14% и 9% соответственно. Скорее всего, испарение усиливает

капиллярный поток, который противодействует потоку Марангони. Но при этом термокапиллярный поток преобладает над компенсационным. Тем не менее испарение оказывает влияние на систему, поэтому этот управляемый метод сборки частиц в кластер можно считать одним из гибридных методов испарительной литографии [1]. В отсутствие испарения этот метод будет относиться к термокапиллярной сборке частиц. Полученные численные результаты качественно согласуются с результатами проведенных экспериментов.

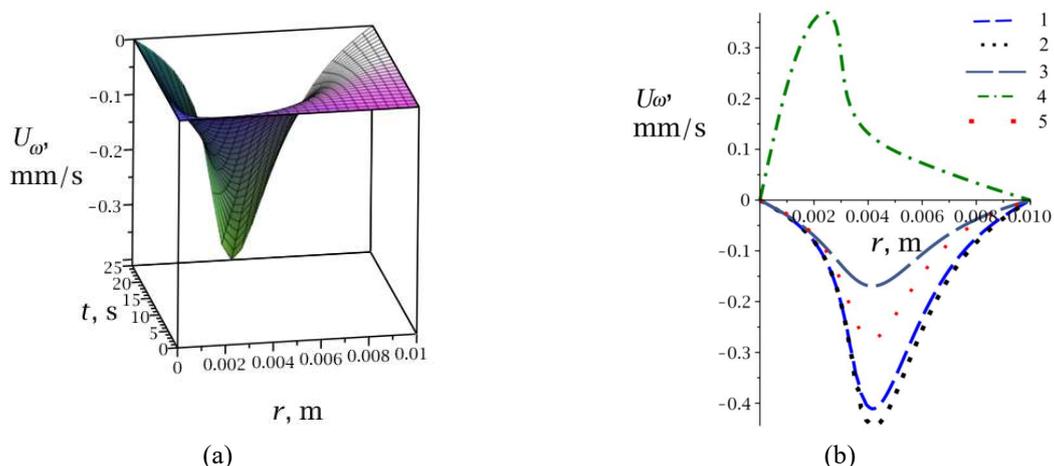


Рис. 9. Результаты моделирования (а) пространственно-временной динамики скорости потока жидкости вблизи подложки и (б) пространственной зависимости U_ω в момент времени $t = 25$ с при разных значениях параметров: 1) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м²; 2) $h_0 = 700$ мкм, $q = 10^4$ Вт/м², $\alpha_e = 0$; 3) $h_0 = 700$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 4) $h_0 = 700$ мкм, $q = -0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²; 5) $h_0 = 400$ мкм, $q = 0.5 \cdot 10^4$ Вт/м²

4. Заключение

Испарительная литография является перспективным направлением, которое полезно для микроэлектроники, нанотехнологий, медицины и так далее. Управление осаждением частиц и формированием структур с требуемой геометрией и морфологией на твердых подложках является одной из ключевых задач в технологиях создания материалов и покрытий с различными функциональными свойствами. В данной работе исследован процесс формирования кластера полистирольных микрочастиц, распределенных на подложке под слоем испаряющейся жидкости (изопропанол), управляемый с помощью точечного нагревателя, вмонтированного в центре подложки. Локальное тепловое воздействие создает в слое жидкости термокапиллярный поток, который направлен вдоль свободной поверхности от нагревателя к стеке ячейки (из области низкого в область высокого поверхностного натяжения). Возвратное течение вблизи подложки за счет вязкого трения жидкости создает силу, действующую на частицы, которая приводит к переносу частиц в область нагревателя. В результате неравномерного испарения частицы оказываются собранными в кластер в центре ячейки. Эксперименты показали, что размеры кластера при постоянной мощности теплового источника зависят от толщины слоя жидкости. Чем толще слой, тем меньше площадь, занимаемая на подложке, и больше высота кластера. Последнее свидетельствует о том, что в толстом слое формируется многослойный осадок частиц. Таким образом, можно управлять не только площадью кластера, но и количеством слоев частиц. С помощью велосиметрии установлено, что максимальные значения скорости частиц достигаются вблизи границы растущего кластера и увеличиваются с

ростом градиента температуры. Разработана математическая модель на основе приближения смазки. Модель позволяет описать пространственно-временные изменения толщины слоя жидкости, концентрации частиц, температуры жидкости и подложки, а также скорости потока вблизи подложки. Полученные численные результаты находятся в качественном согласии с результатами экспериментов. Модель предсказывает, что испарение замедляет термокапиллярный поток, переносящий частицы в сторону нагревателя вдоль подложки. Возможно, это связано с конкуренцией капиллярного потока и течения Марангони. Проведенная работа позволила сформулировать вывод о том, что тепловой поток от нагревателя влияет на геометрию кластера по двум причинам. Во-первых, скорость потока Марангони зависит от градиента температуры. Во-вторых, от температуры зависит просадка толщины жидкой пленки в районе нагревателя.

5. Благодарности

Часть работы, связанная с математическим моделированием, выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-71-10061 (К.С. Колегов). Экспериментальная часть исследования выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы исследовательских центров мирового уровня «Передовые цифровые технологии», контракт 075-15-2020-935 (Н.А. Иванова, М. Аль-Музаикер, В.М. Флягин).

Список литературы

1. Kolegov K.S., Barash L.Yu. Applying droplets and films in evaporative lithography // *Advances in Colloid and Interface Science*. 2020. Vol. 285. P. 102271. DOI 10.1016/j.cis.2020.102271
2. Al-Muzaiqer M.A. et al. Nonuniform heating of a substrate in evaporative lithography. 2021. arXiv:2105.05511. <https://arxiv.org/pdf/2105.05511.pdf>
3. Al-Muzaiqer M.A., Ivanova N.A., Fliagin V.M., Lebedev-Stepanov P.V. Transport and assembling microparticles via Marangoni flows in heating and cooling modes // *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 2021. Vol. 621. P. 126550. DOI 10.1016/j.colsurfa.2021.126550

Устойчивость системы круговых арок, подкреплённых нерастяжимыми нитями

В. Ю. Андрюкова, В. Н. Тарасов

Физико-математический институт ФИЦ Коми научный центр УрО РАН
167982, Сыктывкар, ул. Коммунистическая, 24
email: veran@list.ru, vntarasov@dm.komisc.ru

В работе рассматриваются проблемы устойчивости системы круговых арок, на перемещения которых наложены дополнительные связи: соседние арки соединены нерастяжимыми нитями, так что расстояние между точками прикрепления нитей не может увеличиваться. Данная задача сводится к отысканию параметра нагрузки, при которой некоторая вариационная проблема при наличии ограничений на искомые функции в виде неравенств имеет нетривиальное решение. Последняя эквивалентна задаче изопериметрического типа с дополнительными связями в виде неравенств. Для конечномерной аппроксимации применяются ряды Фурье, после чего возникает проблема нахождения точек бифуркации задачи нелинейного программирования. Для их нахождения применяется метод последовательных приближений, сводящийся к решению последовательности задач квадратичного программирования. Численные эксперименты показали, что наличие дополнительных связей в виде нерастяжимых нитей существенно увеличивает критическую нагрузку.

Ключевые слова: устойчивость, критическая сила, арка, кольцо, вариационная задача, нелинейное программирование, односторонние ограничения, бифуркация, квадратичная форма, собственные значения, нерастяжимые нити

Stability of a system of circular arches, supported by inextensible threads

V. Yu. Andryukova^a, V. N. Tarasov^a

^aInstitute of Physics and Mathematics,
Federal Research Centre Komi Science Centre, Ural Branch, RAS
Kommunisticheskaya St., 24, 167982, Syktyvkar
email: veran@list.ru, vntarasov@dm.komisc.ru

The paper deals with the stability problems of a system of circular arches, on the displacement of which additional ties can be imposed: adjacent arches are connected by inextensible threads, so that the distance between the attachment points of the threads cannot increase. This problem is reduced to finding the load parameter at which some variational problem in the presence of restrictions on the sought functions in the form of inequalities has a nontrivial solution. The latter is equivalent to the problem of isoperimetric type with additional connections in the form of inequalities. For finite-dimensional approximation, Fourier series are used, after which the problem arises finding the bifurcation points of a nonlinear programming problem. To find them, use method of successive approximations,

which reduces to solving a sequence of problems of a quadratic programming. Numerical experiments have shown that the presence of additional bonds in the form non-extensible filaments significantly increase the critical load.

Keywords: stability, critical force, arch, ring, variational problem, nonlinear programming, one-sided constraints, bifurcation, quadratic form, eigenvalues, inextensible filaments

1. Введение

Изучению контактных задач тонкостенных элементов конструкции в последнее время уделяется большое внимание. Общая теория тонких задач и методы их решения имеются в монографиях [1, 2].

Проблемы устойчивости тонкостенных элементов конструкции являются классическими и достаточно хорошо исследованы. В частности, задачи устойчивости арок рассмотрены в монографиях [3, 4].

В работе рассматривается задача устойчивости системы круговых арок, перемещения которых связаны между собой. Тонкие арочные системы могут быть использованы при сооружении куполов, и расчет их на устойчивость является актуальной задачей [5, 6]. Особенно интересной является задача устойчивости системы арок, связанных между собой нерастяжимыми нитями, так что расстояние между концами нитей в результате деформации не может увеличиваться. Это приводит к необходимости отыскания и исследования точек бифуркации решений некоторых вариационных задач при наличии ограничений на искомые функции в виде неравенств, а при конечномерной аппроксимации нахождению и исследованию точек бифуркации задач нелинейного программирования.

Влияние односторонних связей на устойчивость упругих систем изучалось в работах [7, 8]. Некоторые аналитические решения задач устойчивости упругих систем при односторонних ограничениях на перемещения приведены в [9].

2. Постановка задачи

Рассмотрим систему, состоящую из m круговых арок, координаты которых в недеформированном состоянии описываются уравнениями

$$\begin{cases} x_i^0 = R \sin \theta \cos \varphi_i, \\ y_i^0 = R \sin \theta \sin \varphi_i, \quad i \in 1:m, \quad \varphi_i \in \frac{\pi(i-1)}{m}, \quad \theta \in [-\alpha, \alpha]. \\ z_i^0 = R \cos \theta, \end{cases} \quad (1)$$

Предположим, что арки соединены нерастяжимыми нитями, которые не выдерживают сжимающих усилий, т.е. расстояние между точками прикрепления нити не может увеличиваться.

Введём обозначения: $n_i = (-\sin \theta \cos \varphi_i, -\sin \theta \sin \varphi_i, -\cos \theta)$ - вектор единичной нормали к кривой, определяемой уравнениями (1), $\tau_i = (-\cos \theta \cos \varphi_i, \cos \theta \sin \varphi_i, -\cos \theta)$ - касательный вектор, $b_i = \tau_i \times n_i = (-\sin \varphi_i, \cos \varphi_i, 0)$ - бинормаль, $u_i(\theta), w_i(\theta), v_i(\theta), i \in 1:m$ - перемещения арок в результате деформации. Предположим, что каждая арка нагружена давлением P , которое остается направленным к центру кривизны (к центру сферической поверхности).

В результате деформации упругая энергия системы может быть [1] вычислена по формуле

$$U = \sum_{i=1}^m U_i = \frac{1}{2} \int_{-\alpha}^{\alpha} (A_i \delta p_i^2 + B_i \delta q_i^2 + C_i \delta r_i^2) d\theta, \quad (2)$$

где A_i, B_i – жёсткости стержней на изгиб, C_i – жёсткость при кручении.

$\delta p_i = -\frac{1}{R^2} v_i'' + \frac{1}{R} \gamma_i$, $\delta q_i = \frac{1}{R^2} (u_i'' + u_i)$, $\delta r_i = \frac{1}{R} \gamma_i' + \frac{1}{R^2} v_i'$. Углы поворота определяются формулами $\alpha_i = -\frac{1}{R} v_i'$, $\beta_i = \frac{1}{R} u_i' + w_i$, и выполнено условие несжимаемости $u_i = w_i'$.

В случае центральной нагрузки с учётом условия несжимаемости работа внешних сил определяется формулой

$$W_i = \frac{1}{2} \int_{-\alpha}^{\alpha} (u_i'^2 - 2w_i^2 + v_i'^2 - v_i^2) d\theta, \quad W = \sum_{i=1}^m W_i. \quad (3)$$

Полная энергия системы арок имеет вид

$$J = \sum_{i=1}^m J_i = \sum_{i=1}^m (U_i - \frac{P}{2} \cdot W_i) d\theta. \quad (4)$$

Система уравнений Эйлера функционалов J_i распадается на две независимые подсистемы

$$\frac{B_i}{R^3} (u_i^{(4)} + 2u_i'' + u_i) + P(u_i'' + 2u_i) = 0 \quad (5)$$

и

$$\begin{aligned} \frac{A_i}{R^3} v_i^{(4)} + \frac{C_i}{R^3} v_i'' + \frac{C_i + A_i}{R^2} \gamma_i'' - P(v_i'' - v_i) &= 0, \\ \frac{A_i + C_i}{R} v_i'' + C_i \gamma_i'' - A_i \gamma_i &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

которые по отдельности описывают плоскую и пространственную деформации арок.

Предположим, что на перемещение арок наложены дополнительные связи: при $\theta = \varepsilon$ соседние арки соединены нерастяжимыми нитями, так что расстояние между точками прикрепления концов нити не может увеличиваться. Обозначим через $\xi_i^0(\theta) = (x_i^0, y_i^0, z_i^0)$ – вектор, определяемый формулами (1), $\xi_i(\theta) = \xi_i^0 + u_i n_i + w_i \tau_i + v_i b_i$ – координаты точек i -той арки после деформации. Расстояние между векторами вычисляется: $\rho_i(t) = \rho_i(t, u_1, u_2, w_1, w_2, v_1, v_2) = \|\xi_i(t) - \xi_{i+1}(t)\|$.

Ограничения, накладываемые на перемещения, имеют вид

$$\rho_i(t) - \rho_{0i} \leq 0, \quad (7)$$

где ρ_0 – первоначальное расстояние между точками прикрепления нити.

Выписывать последнее ограничение нет никакой необходимости. Предположим, что угол между плоскостями арок $\pi/3$, то есть система состоит из 3 арок, (см. рисунок). Таким образом, имеется всего шесть неравенств вида (7). Положим $u_i = u_i(\varepsilon)$, $v_i = v_i(\varepsilon)$, $w_i = w_i(\varepsilon)$, все частные производные вычисляются при $u_i = 0$,

$v_i = 0$, $w_i = 0$, т.е

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial u_i} = \frac{\partial \rho_i(\varepsilon, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}{\partial u_i} \text{ и т.д.}$$

Линеаризуя (7) получаем неравенства (угол ε показан на рисунке):

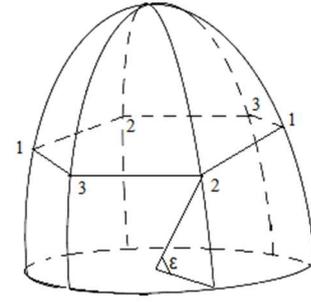


Рис. Арочная система, подкрепленная нитями

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial u_i} u_i + \frac{\partial \rho_i}{\partial u_{i+1}} u_{i+1} + \frac{\partial \rho_i}{\partial v_i} v_i + \frac{\partial \rho_i}{\partial v_{i+1}} v_{i+1} + \frac{\partial \rho_i}{\partial w_i} w_i + \frac{\partial \rho_i}{\partial w_{i+1}} w_{i+1} \leq 0, \quad (8)$$

Наконец предположим, что арки могут быть скреплены друг с другом при $\theta = 0$ (в северном полюсе), т.е. перемещения всех трех арок при $\theta = 0$ совпадают. Это приводит к уравнениям:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} w_2 - \frac{\sqrt{3}}{2} v_2 = w_1, \quad \frac{\sqrt{3}}{2} w_2 + \frac{1}{2} v_2 = v_1, \quad u_1 = u_2, \\ -\frac{1}{2} w_3 - \frac{\sqrt{3}}{2} v_3 = w_1, \quad \frac{\sqrt{3}}{2} w_3 - \frac{1}{2} v_3 = v_1, \quad u_3 = u_1. \end{aligned} \quad (9)$$

Все перемещения вычисляются при $\alpha = 0$.

Для определенности предположим, что выполнены граничные условия жёсткой заделки:

$$\begin{aligned} w_i(\alpha) = w_i(-\alpha) = 0, \quad u_i(\alpha) = u_i(-\alpha) = 0, \quad u_i'(\alpha) = u_i'(-\alpha) = 0, \\ v_i(\alpha) = v_i(-\alpha) = 0, \quad v_i'(\alpha) = v_i'(-\alpha) = 0, \quad i \in 1 \dots 3. \end{aligned} \quad (10)$$

Таким образом, задача устойчивости такой системы арок сводится к определению минимальной силы P , при которой вариационная проблема

$$J = U - W \rightarrow \min \quad (11)$$

при наличии ограничений (8), имеет нетривиальное решение. Нетрудно увидеть, что последняя проблема эквивалентна задаче изопериметрического типа:

$$U \rightarrow \min \quad (12)$$

при ограничениях

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m W_i = 1 \quad (13)$$

и неравенств (8) и уравнений (9).

Перемещения будем искать в виде рядов Фурье. Подставив u, w, v в (12, 13) получим задачу вида

$$f(z) = \frac{1}{2}(Gz, z) \rightarrow \min_z, \quad (14)$$

$$g(z) = \frac{1}{2}(Qz, z) = 1, \quad z \in R^N, \quad (15)$$

$$(\xi_j, z) = 0, \quad j \in 1:m, \quad (16)$$

$$(\xi_j, z) \leq 0, \quad j \in 1:m+1, \quad (17)$$

где z – вектор коэффициентов рядов Фурье, матрицы G и Q определяются подстановкой рядов Фурье в (12) и (13), N – число всех коэффициентов в (10).

3. Результаты вычислений

Предположим, что имеется три арки, у которых жёсткости на изгиб равны:

$$A_1 = A_2 = A_3 = A = \frac{Eh_1^3 h_2}{12}, \quad B_i = B = \frac{Eh_2^3 h_1}{12}.$$

Поперечное сечение арки – прямоугольник, длина стороны которого равна h_1 и перпендикулярна плоскости арки, ширина прямоугольника $h_2 < h_1$. Тогда с достаточной степенью точности можно положить

$$\delta = \frac{h_2}{h_1}.$$

Положим $h_1 = 10, h_2 = 2.5, R = 5, \nu = 0.3, \varepsilon = \frac{\alpha}{2}$. Можно считать, что модуль Юнга $E = 1$. Результаты вычислений представлены в таблице.

Таблица. Значения критического параметра с учётом односторонних ограничений и без них

| α | $P_{кр}$ | | | P теор. без огранич. |
|----------|--------------|-----------------|-----------------------|---------------------------|
| | без огранич. | с ограничен.(9) | с ограничен.(8) и (9) | |
| $\pi/2$ | 1.11 | 2.17 | 5.31 | 1.10 |
| $\pi/3$ | 2.19 | 4.80 | 7.72 | 2.09 |

Учёт дополнительных связей существенно увеличивает устойчивость арочных систем. Метод, предложенный авторами, может оказаться полезным для оценки несущей способности подобных конструкций при проектировании.

Список литературы

1. Панагиотопулос П. Неравенства в механике и их приложения. Выпуклые и невыпуклые функции энергии. – М.: Мир, 1989. 494 с.
2. Г. Дюво, Ж.-Л. Лионс. Неравенства в механике и физике. – М. Наука, 1980. 384 с.

3. *Николаи Е.Л.* Труды по механике. – М.: Изд-во технико-теоретической литературы, 1955. 584 с.
4. *Динник А.Н.* Устойчивость арок. М., 1946. 128 с.
5. *Перельмутер А.В., Сливкер В.И.* Устойчивость равновесия конструкций и родственные проблемы. Т. 2. М.: Издательство СКАД СОФТ, 2010. 672 с.
6. *Дмитриев А.Н., Семенов А.А., Лалин В.В.* Устойчивость равновесия упругих арок с учетом искривления оси // СУЗИС. 2018. № 4(67). С. 19–73.
7. *Алфутов Н.А., Еремичев А.Н.* Влияние односторонних связей на устойчивость цилиндрических оболочек при осевом сжатии // Расчеты на прочность. М.: Машиностроение. 1989. 179–188.
8. *Тарасов В.Н.* Об устойчивости подкрепленных арок // Вычислительная механика сплошных сред. 2019. Т. 12. № 2. С. 202–214.9
9. *Андрюкова В.Ю.* Некоторые конструктивно-нелинейные задачи устойчивости упругих систем при односторонних ограничениях на перемещения // Вычислительная механика сплошных сред // 2014. Т. 7. № 4. С.412–422.

Исследование напряженно-деформированного состояния термоупругих микроструктурных материалов и тел с ультратонкими покрытиями

А. О. Ватульян^{a,b}, С. А. Нестеров^b

^aИнститут математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича Южного федерального университета, 344090, Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а
email: aovatulyan@sfnedu.ru

^bЮжный математический институт – филиал Владикавказского научного центра Российской академии наук, 362027, Владикавказ, ул. Ватутина, 53
email: 1079@list.ru

На основе однопараметрической градиентной модели термоупругости приведена постановка задачи о нахождении напряженно-деформированного состояния слоистого микро-цилиндра. Решение задачи представлено в виде суммы решений задачи в классической постановке и дополнительных пограничных слагаемых. Выявлено отличие радиального распределения перемещений и полных напряжений, рассчитанных по классической теории и по градиентной теории термоупругости. Найдено, что увеличение градиентного параметра уменьшает величину перемещений и полных окружных напряжений.

Ключевые слова: полый микро-цилиндр; тонкослойное покрытие; градиентная термоупругость; моментные напряжения; полные напряжения

Investigation of stress-strain state of thermoelastic microstructural materials and bodies with ultra-thin coatings

A. O. Vatulyan^{a,b}, S. A. Nesterov^b

^aInstitute of Mathematics, Mechanics and Computer Sciences after I.I. Vorovich Southern Federal University, 344090, Rostov-on-Don, str. Milchakov, 8a
email: aovatulyan@sfnedu.ru

^bSouthern Mathematical Institute – the Affiliate of Vladikavkaz Scientific Center of Russian Academy of Sciences, 362027, Vladikavkaz, st. Vatutin, 53
email: 1079@list.ru

On the basis of a one-parameter gradient model of thermoelasticity, the task of finding a stress-strain state of a layered micro-cylinder is set. The solution of the problem is presented in the form of the sum of solutions to the problem in the classical setting and additional boundary layer terms. The difference between the radial distribution of displacements and full stresses, calculated according to classical theory and the gradient theory of thermoelasticity, is shown. It was found

that increasing the dimensionless gradient parameter reduces the values of displacements and full circumferential stresses.

Keywords: hollow micro-cylinder; thin layer coating; gradient thermoelasticity; moment stresses; full stresses

1. Введение

В настоящее время для уточнения НДС микроструктурных материалов в случае тонкослойного покрытия применяется градиентная теория упругости, которая в определяющие уравнения включает параметры размерности длины. Градиентная теория упругости получила свое развитие в работах Миндлина [1]. Однако практическое использование модели Миндлина наталкивается на вопрос об идентификации дополнительных градиентных модулей. В целях упрощения определяющих уравнений были предложены прикладные однопараметрические градиентные модели Айфантиса [2] и Лурье [3]. В рамках модели Лурье получены аналитические решения задачи, позволяющие уточнить НДС слоистых термоупругих тел при наличии масштабных эффектов [3]. В рамках модели Айфантиса получены аналитические решения задачи о нахождении НДС FGM полого цилиндра со степенным законом неоднородности при термомеханическом нагружении [4]. В [5] в рамках модели Айфантиса исследована задача градиентной термоупругости для составного стержня. Для нахождения напряжений Коши применяется асимптотический подход Вишика-Люстерника. Исследована зависимость скачка напряжений Коши от соотношения физических характеристик стержней и градиентного параметра.

2. Постановка и решение задачи градиентной термоупругости

В рамках однопараметрической градиентной модели термоупругости [4] рассмотрим равновесие полого термоупругого двухслойного микро-цилиндра, на внутренней боковой поверхности которого $r = a$ поддерживается нулевая температура и действует давление p_0 . Внешняя поверхность $r = b$ свободна от напряжений и поддерживается при температуре T_0 . Для упрощения расчетов примем градиентный параметр l одинаковым для покрытия и цилиндра. Согласно [4, 5] были заданы дополнительные граничные условия и условия сопряжения на поверхности сопряжения $r = r_0$ для моментных напряжений $m_{rr} = l^2 \frac{d\tau_{rr}}{dr}$. Постановка краевой задачи имеет вид:

$$\frac{d\sigma_{rr}}{dr} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\varphi\varphi}}{r} = 0, \quad r \in [a, b], \quad (1)$$

$$\sigma_{rr} = \tau_{rr} - l^2 \left(\frac{d^2\tau_{rr}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\tau_{rr}}{dr} - 2 \frac{(\tau_{rr} - \tau_{\varphi\varphi})}{r^2} \right), \quad (2)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \tau_{\varphi\varphi} - l^2 \left(\frac{d^2\tau_{\varphi\varphi}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\tau_{\varphi\varphi}}{dr} - 2 \frac{(\tau_{\varphi\varphi} - \tau_{rr})}{r^2} \right), \quad (3)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (rk(r) \frac{dT}{dr}) = 0, \quad r \in [a, b], \quad (4)$$

$$T^{(s)}(a) = 0, T^{(c)}(b) = T_0, T^{(s)}(r_0) = T^{(c)}(r_0), k_s \frac{\partial T^{(s)}}{\partial r}(r_0) = k_c \frac{\partial T^{(c)}}{\partial r}(r_0), \quad (5)$$

$$m_{rrr}(a) = 0, m_{rrr}(b) = 0, \quad (6)$$

$$\rho_r(a) = 0, \rho_r(b) = p_0, \quad (7)$$

$$u^{(s)}(r_0) = u^{(c)}(r_0), \frac{du^{(s)}}{dr}(r_0) = \frac{du^{(c)}}{dr}(r_0), m_{rrr}^{(s)}(r_0) = m_{rrr}^{(c)}(r_0), \rho_r^{(s)}(r_0) = \rho_r^{(c)}(r_0). \quad (8)$$

В формулах (1)-(8) индексы «s» относят к цилиндру, индекс «c» к покрытию, σ_{rr} , $\sigma_{\varphi\varphi}$ – полные радиальные и окружные напряжения, τ_{rr} , $\tau_{\varphi\varphi}$ – напряжения Коши, $\rho_r = \tau_{rr} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr}(rm_{rrr}) + \frac{1}{r}(m_{\varphi\varphi r} + m_{r\varphi\varphi} + m_{r\varphi\varphi})$ – компонента вектора заданных сил на поверхности, m_{rrr} , $m_{\varphi\varphi r}$, $m_{r\varphi\varphi}$, $m_{r\varphi\varphi}$ – ненулевые компоненты тензора моментных напряжений в полярной системе координат.

Аналитическое решение задачи (1)-(8) представлено в виде суммы решений задачи в классической постановке при $l=0$ и погранслойных частей. Добавочные погранслойные слагаемые для радиальных перемещений получены на основе асимптотического метода ВКБ [6] и имеют вид:

$$u_{grad}^{(s)}(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} \left(C_1 e^{\frac{r}{l}} + C_2 e^{-\frac{r}{l}} \right), u_{grad}^{(c)}(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} \left(C_3 e^{\frac{r}{l}} + C_4 e^{-\frac{r}{l}} \right). \quad (9)$$

В формуле (9) константы C_1 , C_2 , C_3 , C_4 находят путем удовлетворения граничных условий (6), (8).

Для конкретных микро-размерных материалов проведены вычисления радиальных перемещений, напряжений Коши, моментных напряжений и полных напряжений в случае, как теплового, так и механического нагружения слоистого цилиндра. Выяснено, что напряжения Коши испытывают скачок на границе цилиндра и покрытия, что связано с непрерывностью перемещений и их производных на границе раздела; моментные напряжения пропорциональны квадрату градиентного параметра и при малых значениях градиентного параметра намного меньше полных напряжений; увеличение масштабного параметра снижает значения радиальных перемещений и полных окружных напряжений.

Работа выполнена при поддержке Южного математического института – филиала ВЦ РАН, Владикавказ.

Список литературы

1. Mindlin R. D. Micro-structure in linear elasticity // Arch. Rational Mech. Anal. 1964. Vol. 16. P. 51–78. DOI:10.1007/BF00248490.
2. Altan B. S., Aifantis E. C. On some aspects in the special theory of gradient elasticity // J. Mech. Behav. Mater. 1997. Vol. 8, N. 3. P. 231–282. DOI:10.1515/JMBM.1997.8.3.231.
3. Лурье С. А., Фам Тьюнг, Соляев Ю. О. Градиентная модель термоупругости и ее приложения к моделированию тонкослойных композитных структур // Механика композиционных материалов и конструкций. 2012. Т. 18. N. 3. С. 440–449.
4. Hosseini M., Dini A., Eftekhari M. Strain gradient effects on the thermoelastic analysis of a functionally graded micro-rotating cylinder using generalized differential quadrature method // Acta Mech. 2017. Vol. 228(5). P. 1563–1580. DOI: 10.1007/s00707-016-1780-5.

5. *Vatulyan A.O., Nesterov S.A.* On the deformation of a composite rod in the framework of gradient thermoelasticity // *Materials Physics Mechanics*. 2020. Vol. 46. P. 27–41. DOI: 10.18149/MPM.4612020_3.
6. *Маслов В.П.* Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. М.: Наука, 1977. 384 с.

Влияние трёхмерных возмущений на структуру и устойчивость двумерного двоякопериодического течения

**И. И. Вертгейм^a, А. Н. Шарифулин^b, В. А. Шарифулин^b,
С. А. Плотников^b**

^aИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, ул. Акад. Королёва, 1
email: wertg@icmm.ru

^bПермский национальный исследовательский политехнический университет
614990, Пермь, Комсомольский пр., 29
email: sharifulin@bk.ru

Проведено численное исследование плоского двоякопериодического течения, вызванного внешней силой и прокачкой. Для известного точного решения при изменении параметров происходит ряд структурных перестроек от течения с прямыми линиями тока и постоянной скоростью до решётки вихрей и обтекающего их глобального осреднённого течения. Реализуется нетривиальная лагранжева динамика частиц-индикаторов с фрактальными спектрами мощности и ослаблением временных корреляций. Линейный анализ показал устойчивость основного состояния к двумерным возмущениям при росте амплитуды силы в квадратной ячейке периодичности, и неустойчивость, в основном колебательную, в вытянутых ячейках с длинами сторон, кратным периодам силы. Возникновение временной зависимости влияет на спектральные и транспортные свойства лагранжевой динамики примеси.

Представлен анализ устойчивости описываемого течения к трёхмерным возмущениям. Преобразование Сквайра, известное для одномерных плоскопараллельных течений, сводящее задачу для трёхмерных возмущений к соответствующей двумерной задаче с изменёнными параметрами, в общем случае отсутствует для двумерного течения. Свойства устойчивости существенно отличаются от найденных для двумерных возмущений, анализируются соответствующие изменения границ устойчивости и поведение неустойчивых мод.

Ключевые слова: плоское двоякопериодическое течение; трёхмерные возмущения; анализ устойчивости

Influence of three-dimensional disturbances on structure and stability of two-dimensional doubly periodic flow

I. I. Wertgeim^a, A. N. Sharifulin^b, V. A. Sharifulin^b, S. A. Plotnikov^b

^aInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Acad. Korolyov St. 1, 614013
email: wertg@icmm.ru

^bPerm National Research Polytechnic University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: sharifulin@bk.ru

A numerical study of a plane double-periodic flow caused by an external doubly periodic force and pumping is performed. For a known exact solution, when the parameters change, a number of structural rearrangements occur from a flow with constant velocity to a lattice of vortices and a global flow around them, with a nontrivial Lagrangian dynamics of tracer particles with fractal power spectra and weakening of temporal correlations. Restricting the consideration to only two-dimensional perturbations, the flow in a square cell of periodicity is stable. Instability, mainly oscillatory, occurs in elongated cells. The appearance of the time dependence affects the spectral and transport properties of the Lagrangian dynamics.

Stability analysis to three-dimensional perturbations is presented. The Squire transform, known for one-dimensional plane-parallel flows, reducing the problem to the two-dimensional with changed parameters, is generally absent for a two-dimensional flow. The changes in the stability boundaries and unstable modes are analyzed.

Keywords: plane doubly periodic flow; three-dimensional disturbances; stability analysis

1. Введение

Рассматривается семейство двумерных течений вязкой несжимаемой жидкости, вызванных постоянной по времени пространственно-периодической силой при наличии прокачки вдоль перпендикулярных направлений. Эти течения являются двумерными обобщениями известного пространственно-периодического течения Колмогорова [1], предложенного им в 1959 году, как модель каскадного переноса энергии в турбулентном потоке. В ряде последующих теоретических работ были найдены границы монотонной устойчивости, установлен её длинноволновый характер и исследованы вторичные пространственно-периодические течения вблизи порога [2-4]. Похожие структуры реализованы и в экспериментах [5,6] с магнитогидродинамическими течениями слабопроводящей жидкости, подтвердив неустойчивость основного течения и переход к вторичным режимам с периодичностью по двум координатам.

Для некоторых конфигураций внешней силы известны решения уравнений Навье-Стокса, в которых поле скорости также двоякопериодично, а её пространственные периоды l_x, l_y кратны пространственному периоду силы; в частности, двухвихревое с прокачкой в двух направлениях [7] и одновихревое типа «кошачьи глаза» [8]. Лагранжева динамика частиц пассивной примеси в таких течениях необычна, её свойства являются промежуточными между ламинарными и турбулентными: обнаружены фрактальный спектр скорости, аномальные характеристики транспорта и т.п. Эти исследования показали необходимость дальнейшего изучения устойчивости известных решений, развития вторичных режимов и возможных изменений обнаруженных особенностей лагранжевой динамики переносимых частиц.

Далее будет рассматриваться семейство течений с вынуждающей силой вида $\vec{F}(x, y) = (\lambda_1 \sin(y), \lambda_2 \sin(x))$, и заданными значениями расходов жидкости в x - и y -направлениях, характеризующимся безразмерными параметрами Re_x и Re_y .

Частными случаями описанного семейства являются течение Колмогорова (далее K59) ($\lambda_2 = Re_x = Re_y = 0$) [1] и течение с двухкомпонентной вынуждающей силой (далее ZPK96) ($\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$) [7]. В первом случае решение с функцией тока $\Psi_0(x, y) = \lambda_1 \cos(y)$ устойчиво при $l_x < 2\pi$ [2]. Длинноволновая монотонная неустойчивость K59 ($l_x \rightarrow \infty$)

получена при $\lambda_{lcr} = \sqrt{2}$ [4]. Для ячеек конечной длины $l_x > 2\pi$ в модификации K59 с $Re_y \neq 0$ и его двумерных обобщениях реализуется колебательная неустойчивость [9].

В [10] была исследована устойчивость основного течения описанного семейства (ZPK96) к двумерным возмущениям и проведен анализ возможных изменений в лагранжевой динамике переноса частиц жидкости, связанный с появлением растущих колебательных возмущений для случая вытянутой ячейки периодичности. Для квадратной ячейки периодичности анализ устойчивости и нелинейные расчёты показывают устойчивость течения к двумерным периодическим возмущениям для достаточно большого интервала определяющих параметров.

В данной работе рассмотрена возможность появления трёхмерных возмущений двумерного двоякопериодического течения (конкретно, варианта ZPK96) и проанализированы линейная устойчивость по отношению к таким возмущениям и развитие неустойчивых трёхмерных мод.

2. Постановка задачи. Уравнения и граничные условия

Рассматривается течение вязкой несжимаемой жидкости в прямоугольной ячейке горизонтального слоя с условиями периодичности по координатам x и y (2D top), вызванное постоянной по времени дважды-периодической по пространству силой $\vec{F}(x, y) = (\lambda_1 \sin(y), \lambda_2 \sin(x))$. Предполагается также однородная прокачка с постоянными компонентами скорости $(U_x, U_y, 0)$.

В общем случае допускается, что течение под действием этих факторов может быть трёхмерным и иметь три компоненты скорости, зависящие от двух координат, как и вынуждающая сила и прокачка. Далее эти координаты x, y будем называть горизонтальными, а третью координату z - вертикальной. Мы ограничимся анализом устойчивости основного состояния, зависящего от горизонтальных координат к трёхмерным возмущениям.

Для основного состояния горизонтальные компоненты полной скорости $\vec{V}'(x, y) = \{V'_x(x, y), V'_y(x, y), V'_z(x, y)\}$ состоят из постоянной, обусловленной прокачкой, и двоякопериодической частей: $V'_x = U_x + V_x^0$; $V'_y = U_y + V_y^0$, а вертикальная компонента $V'_z(x, y)$ имеет только двоякопериодическую часть. Пространственно-периодические компоненты рассматриваемого поля скорости основного решения запишем для общего трёхмерного случая в виде [11]:

$$\vec{V}^0(x, y) = \left(\frac{\partial \Psi^0}{\partial y}, -\frac{\partial \Psi^0}{\partial x}, V'_z \right) \quad (2.1)$$

Здесь $\Psi^0(x, y)$ имеет смысл пространственно-периодической компоненты функции тока для горизонтальных компонент скорости, удовлетворяющих, как и течение в целом, условию несжимаемости, в силу независимости от вертикальной координаты z . Для вертикальной компоненты скорости в общем случае возможна произвольная пространственно-периодическая зависимость этой компоненты от горизонтальных координат. Далее будет рассмотрен случай плоского основного течения с $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$, $l_x = l_y = 2\pi$ (ZPK96 [7]), для которого можно записать (после обезразмеривания, единицы измерения и безразмерные параметры будут приведены далее):

$$\begin{aligned}
U_x &= Re_x; U_y = Re_y; \\
\Psi^0(x, y) &= \lambda \frac{\sin(x + \phi_x)}{\sqrt{Re_x^2 + 1}} - \lambda \frac{\sin(y + \phi_y)}{\sqrt{Re_y^2 + 1}}; \\
V_x^0(y) &= -\lambda \frac{\cos(y + \phi_y)}{\sqrt{Re_y^2 + 1}}; V_y^0(x) = -\lambda \frac{\cos(x + \phi_x)}{\sqrt{Re_x^2 + 1}}; \\
V_z^0(x, y) &= V_z'(x, y) = 0; \\
p^0(x, y) &= \lambda^2 \frac{\sin(x + \phi_x) \cdot \sin(y + \phi_y)}{\sqrt{(Re_x^2 + 1)(Re_y^2 + 1)}}; \\
\phi_x &= \arctg(1/Re_x); \phi_y = \arctg(1/Re_y).
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Результаты численного исследования спектральным и конечно-разностным методами устойчивости точного решения (2.2) к двумерным возмущениям [10] показали, что для стандартного варианта геометрии, когда возмущения рассматриваются в квадратной ячейке $l_x = l_y = 2\pi$, соответствующей пространственным периодам вынуждающей силы, основное состояние устойчиво даже при больших значениях амплитуд вынуждающей силы, неустойчивость возможна только для вытянутых прямоугольных ячеек периодичности, в сторонах которых укладывается несколько периодов силы. В случае неустойчивости рост возмущений как правило колебательный, но имеются и области монотонных возмущений. Далее будет рассмотрено поведение возмущений течения (2.2) в полной трёхмерной постановке. В этом случае будем рассматривать решение полной трёхмерной системы уравнений Навье-Стокса для $\vec{V}(x, y, z) = \{V_x, V_y, V_z\}$, совместно с условиями периодичности и задания расходов жидкости в трёх перпендикулярных направлениях. Течение (2.2) является одним из решений этой системы. После обезразмеривания эти уравнения и условия в естественных переменных (для компонент скорости и давления) записываются следующим образом:

$$\begin{aligned}
\partial_t \vec{V} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} &= -\nabla p + \Delta \vec{V} + \vec{F}; \operatorname{div} \vec{V} = 0. \\
\vec{F}(x, y) &= (\lambda \sin(y), \lambda \sin(x), 0); 0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y; 0 \leq z \leq l_z; \\
\vec{V}(x, y, z) &= \vec{U} + \vec{V}^0(x, y) + \delta \vec{V}(x, y, z); p = p^0(x, y) + \delta p(x, y, z); \vec{U} = (Re_x, Re_y, 0); \\
\delta \vec{V}(x + l_x, y, z) &= \delta \vec{V}(x, y, z); \delta \vec{V}(x, y + l_y, z) = \delta \vec{V}(x, y, z); \delta \vec{V}(x, y, z + l_z) = \delta \vec{V}(x, y, z); \\
\delta p(x + l_x, y, z) &= \delta p(x, y, z); \delta p(x, y + l_y, z) = \delta p(x, y, z); \delta p(x, y, z + l_z) = \delta p(x, y, z).
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Решение (2.2) и задачу (2.3) характеризуют следующие безразмерные параметры: числа Рейнольдса $Re_x = \alpha/\nu$; $Re_y = \beta/\nu$; внешняя сила $\lambda = fL^3/\nu^2$; размеры ячейки: $l_x = L_x/L$; $l_y = L_y/L$; $l_z = L_z/L$. Здесь ν – коэффициент кинематической вязкости; L_x, L_y, L_z – размерные длина и ширина ячейки периодичности в направлениях x, y, z ; f – размерная амплитуда внешней силы, α, β – размерные расходы по направлениям x и y .

3. Устойчивость к трёхмерным возмущениям

Поскольку основное решение (2.2) не зависит от вертикальной координаты z , его малые возмущения скорости и давления можно представить в виде

$\delta\vec{V}(x, y, z) = \delta\vec{V}'(x, y) \exp(\sigma t + ik_z z)$; $\delta p(x, y, z) = \delta p'(x, y) \exp(\sigma t + ik_z z)$, где $k_z = 2\pi/l_z$ – волновое число возмущения в направлении z .

Выделяя для амплитуды возмущений скорости горизонтальные и вертикальную составляющие, после подстановки в (2.3) и линеаризации получим спектральную задачу:

$$\begin{aligned} \delta\vec{V}'(x, y) &= \{\delta\vec{V}'_H(x, y), \delta V'_z(x, y)\} \\ \sigma\delta\vec{V}'_H(x, y) &= \hat{\mathbf{L}}_H \delta\vec{V}'_H(x, y) - \nabla \delta p'(x, y) + \vec{M}_H(x, y) - k_z^2 \delta\vec{V}'_H(x, y); \\ \sigma\delta V'_z(x, y) &= \hat{\mathbf{L}}_z \delta V'_z(x, y) - ik_z \delta p'(x, y) - k_z^2 \delta V'_z(x, y). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь использованы обозначения для линейных операторов, действующих на трёхмерное векторное поле (предполагается зависимость всех величин только от горизонтальных координат x, y):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}_H \vec{A}_H &\equiv -(\vec{V}'_H \nabla) \vec{A}_H - (\vec{A}_H \nabla) \vec{V}'_H + \Delta \vec{A}_H; \vec{M}_H \equiv -(\vec{V}'_H \nabla) \vec{V}'_H + \Delta \vec{V}'_H + \vec{F}; \\ \hat{\mathbf{L}}_z A_z &\equiv -\vec{V}'_H \cdot \nabla A_z; \vec{A} = (\vec{A}_H, A_z) \equiv \delta\vec{V}'. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Если в (3.1,3.2) положить $k_z = 0$ (длинноволновые по вертикальной координате возмущения), для горизонтальных компонент возмущения скорости получим ту же спектральную задачу, что и для двумерных возмущений течения ZPK96 [10], для которых показана устойчивость основного решения (2.2) в квадратной ячейке $l_x = l_y = 2\pi$ неустойчивость для вытянутых ячеек периодичности [10]. При конечных значениях k_z из (3.1) вытекает возможность неустойчивости и в квадратной ячейке, и изменение типов и областей устойчивости в пространстве параметров для вытянутых ячеек.

Для определения зависимости возмущений от горизонтальных координат, как и в двумерном варианте, следует рассматривать их в виде функций типа Флоке, с дискретизацией задачи на основе спектральных и конечноразностных методов. В силу предполагаемого отсутствия для зависящего от двух координат основного течения преобразования Сквайра [12], сводящего задачу устойчивости для трёхмерных возмущений к задаче для двумерных с другими параметрами, свойства устойчивости (3.1) будут отличаться от найденных ранее для течения ZPK96 [10].

Рассмотрение полной нелинейной задачи для трёхмерных возмущений (2.3) потребует применения численных методов, учитывающих зависимость переменных от всех трёх координат, с использованием конечноразностного представления на трёхмерной сетке или разложения по соответствующим базисным функциям.

4. Благодарности

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 20-51-12010 ННИО_а).

Список литературы

1. Обухов А. М. Течение Колмогорова и его лабораторное моделирование // Успехи математических наук. 1983. Т. 38. Вып. 4(232). С.101–111.
2. Мешалкин Л. Д., Синай Я. Г. Исследование устойчивости стационарного решения одной системы уравнений плоского движения вязкой жидкости // Прикладная математика и механика. 1961. Т. 25. № 6. С. 1700-1705.

3. Юдович В.И. В сб.: Численные методы решения задач математической физики. М.: Наука, 1966. С. 242-249.
4. Непомнящий А.А. Об устойчивости вторичных течений вязкой жидкости в неограниченном пространстве //Прикладная математика и механика. 1976. Т. 40. С. 836-841.
5. Гледзер Е.Б., Должанский Ф.В., Обухов А.М. Системы гидродинамического типа и их применение. М.: Наука, 1981. 368 с.
6. Cardoso O., Marteau D., and Tabeling P. Quantitative experimental study of the free decay of quasi-two-dimensional turbulence //Phys. Rev. E. 1994. Vol. 49. P. 454-461.
7. Zaks M., Pikovsky A., Kurths J. Steady viscous flow with fractal power spectrum//Phys. Rev. Lett. 1996. Vol.77. P. 4338-4341.
8. Pöschke P., Sokolov I., Zaks M., Nepomnyashchy A. Transport on intermediate time scales in flows with cat's eye patterns. Phys. Rev. E. 2017. Vol.96 (6), 062128.
9. Мелехов А., Ревина С. Возникновение автоколебаний при потере устойчивости пространственно-периодических двумерных течений вязкой жидкости относительно длинноволновых возмущений //Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2008. №2. С. 41-56.
10. Wertgeim I.I., Zaks M.A., Sagitov R.V., Sharifulin A.N. Stability and nonlinear secondary modes of double-periodic flows with pumping//Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1675, 012002. DOI:10.1088/1742-6596/1675/1/012002.
11. Вертгейм И.И., Закс М.А. Трёхмерные двоякопериодические течения с прокачкой. // Пермские гидродинамические научные чтения: материалы всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти профессоров Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкого и Д. В. Любимова / Электронные данные. Пермь: Пермский государственный национальный исследовательский университет, 2020. С. 98-105.
12. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.

Модель фазового поля для неизотермического смачивания вертикального металлического стержня расплавом

С. А. Груздь^{a,b}, Д. С. Самсонов^c, М. Д. Кривилев^a

^aУдмуртский государственный университет, 426034, Ижевск, ул. Университетская, 1

^bИжевский государственный технический университет имени М.Т. Калашникова, 426069, Ижевск, ул. Студенческая, 7

email: lilyna@mail.ru

^cЦентральный научно-исследовательский институт машиностроения, 141070, Королев, ул. Пионерская, 4

Рассматривается задача движения контактной точки в двухфазной системе в неизотермической постановке. Цилиндрический стержень смачивается расплавом, который в начальный момент времени находится в твердом состоянии и за счет нагрева меняет свое фазовое состояние. Нагрев системы происходит за счет поддержания высокой температуры на внешних боковых границах. При постепенном плавлении припоя наблюдается явление смачивания контактной стенки. В точках контакта трех сред (расплава, стенки и воздушной среды) ставятся граничные условия на динамичный контактный угол. В результате моделирования получено изменение фазового поля в течении времени. Изменения температур среды и расплава представлены в виде термограмм.

Ключевые слова: контактный угол; смачиваемая стенка; многофазная система

Phase-field model for nonisothermal wetting of the vertical metal pin by melt

S. A. Gruzd^{a,b}, D. S. Samsonov^c, M. D. Krivilyov^a

^aUdmurt State University, Universitetskaya St. 1, 426034, Izhevsk

^bKalashnikov Izhevsk State Technical University, Studensheskaya St. 7, 426069, Izhevsk
email: lilyna@mail.ru

^cCentral Research Institute for Machine Building, Pionerskaya St. 4., 141070, Korolev

The problem of the motion of a contact point in a two-phase system in a non-isothermal formulation is considered. The cylindrical rod is wetted by the melt, which at the initial moment of time is in a solid state and due to heating changes its phase state. The system is heated by maintaining of a high temperature at the external side boundaries. With the gradual melting of the solder, the phenomenon of wetting of the contact wall is observed. At the contact points of three media (melt, contact wall and air), boundary conditions are set for the dynamic contact angle. As a result of the simulation, a change in the phase field over time is obtained. Changes in the temperature of the medium and the melt are presented in the form of thermograms.

Keywords: contact angle; wetted wall; multiphase system

1. Введение

Метод смачивания стенки жидким металлом – перспективный метод для устранения мелких сколов и трещин при ремонте обшивки важных конструкционных изделий авиационной и космической отрасли. Грамотный подбор параметров припоя для конкретных поверхностей и условий процесса смачивания является одной из основных проблем применения данного метода при пайке. Возможность проведения численных экспериментов данной задачи облегчает ее исследование для условий отсутствия гравитации [1]. Ввиду этого актуально построение математической модели, описывающей процесс плавления припоя и дальнейшее смачивание им стенки. Ряд численных экспериментов способствует устранению проблемы подбора корректных граничных условий по температурным полям, а также позволяет точно определить время протекания процессов плавки припоя и дальнейшего смачивания стенки.

2. Постановка задачи

2.1. Описание задачи

Рассматривается задача смачивания и формирования мениска в месте стыка вертикального металлического стержня диаметром 3,12 мм и подложки из оксида алюминия (Рис. 1).

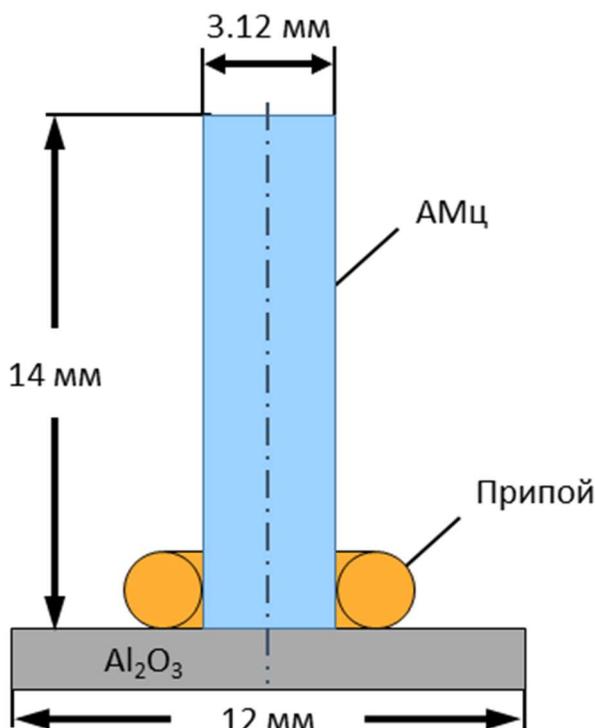


Рис. 1. Геометрия модели

Вертикальный металлический стержень из сплава АМц с содержанием марганца 1.5% находится на подложке из оксида алюминия. В нижней части конструкции на подложке фиксируется металлическое кольцо твердого припоя, огибающее стержень. Поперечное сечение припоя составляет 1.1 мм, и он выполнен из алюминиевого сплава с добавлением кремния 10%. Параметры материала припоя в состоянии расплава и твердого состояния представлены в таблице 1. Температура ликвидуса составляет 600°C. Внешняя среда представляет собой азот при нормальных условиях.

Таблица 1. Параметры материала припоя в зависимости от фазового состояния

| Фазовое состояние | Плотность, кг/м ³ | Динамическая вязкость, Па·с | Изобарная теплоемкость, Дж/(кг·К) | Теплопроводность, Вт/(м·К) |
|-------------------|------------------------------|-----------------------------|-----------------------------------|----------------------------|
| Жидкое | 2600 | 0.001 | 1200 | 160 |
| Твердое | 2800* | 10 ^{12**} | 920 | 210 |

*Изменение плотности учитывается при переходе фазового состояния припоя, при этом уравнение сохранения импульса рассматривается для несжимаемой жидкости

**Величина носит условное значение, применяется в уравнении сохранения импульса для учета отсутствия движения массы в твердом состоянии

2.2. Математическая модель

Математическая модель реализована в программном комплексе ComsolMultiphysics в осесимметричной постановке. Включает в себя уравнения Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости [2]:

$$\rho(\varphi) \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mu(\varphi) \nabla \vec{u} + \rho(\varphi) \vec{g} + M \nabla \varphi, \quad (1)$$

$$\rho \nabla \cdot \vec{u} = 0,$$

где $\rho(\varphi)$ – плотность среды, t – время, \vec{u} – скорость, p – давление, \vec{g} – ускорение свободного падения, $\mu(\varphi)$ – динамическая вязкость материала, φ – параметр порядка, определяющий величину воздушной фазы и фазы припоя, изменяется в диапазоне от -1 до 1 , т.е. $\varphi = -1$ – воздушная среда, 1 – фаза припоя. В методе фазового поля для отслеживания перемещения межфазной границы воздух-припой используется уравнение Кана-Хилларда с конвективным слагаемым [3, 4]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla \varphi) = \nabla \cdot (B \nabla M), \quad (2)$$

где B – мобильность фазового поля. В уравнениях (1) и (2) M – химический потенциал, определяется из соотношения:

$$M = \varphi(\varphi^2 - 1) - \kappa \nabla^2 \varphi,$$

где κ – коэффициент связывающий энергию поверхностного натяжения расплава с шириной границы раздела фаз (диффузная граница).

Уравнение баланса внутренней энергии:

$$\rho(\varphi) c_p(T) \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla T \right) + \nabla \cdot (-k \nabla T) = Q,$$

где T – температура, $c_p(T)$ – теплоемкость материала при постоянном давлении, k – коэффициент теплопроводности, Q – источник внешнего теплового потока.

В начальный момент ($t = 0$) все скорости равны нулю $\vec{u} = 0$, температура $T(t = 0) = T_0$. Припой находится в твердом состоянии, его расположение задается функцией $\varphi = f(r, z)$, которая графически представлена на изображении (Рис. 2).

На всех границах задано условие прилипания $\vec{u} = 0$. Для температурного поля условие термоизоляции $\frac{dT}{dn} = 0$ для границ Γ_2, Γ_3 и Γ_4 . На границе Γ_1 граничное условие первого рода, $\frac{dT}{dt} = U_{ht}$, где U_{ht} – скорость нагрева, равная 5 градусам в минуту,

соответствует условиям постепенного нагрева системы в печи. На границах Γ_2 и Γ_3 применяется условие смачиваемой стенки для уравнения фазового поля [5]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -b \left(\gamma'_{\varphi} - \kappa \vec{n} \cdot \nabla \varphi \right),$$

где b – переменная, характеризующая скорость перемещения контактной точки, является функцией динамической вязкости и поверхностного натяжения жидкого припоя, γ'_{φ} – производная функции поверхностного натяжения, описывающая форму фазовой границы в области контактной точки и принятая в виде функции от удельной доли фазы расплава Ψ :

$$\gamma_{\varphi} = 10\Psi^3 - 15\Psi^4 + 6\Psi^5,$$

где $\Psi \in [0; 1]$ и рассчитывается как функция от φ .

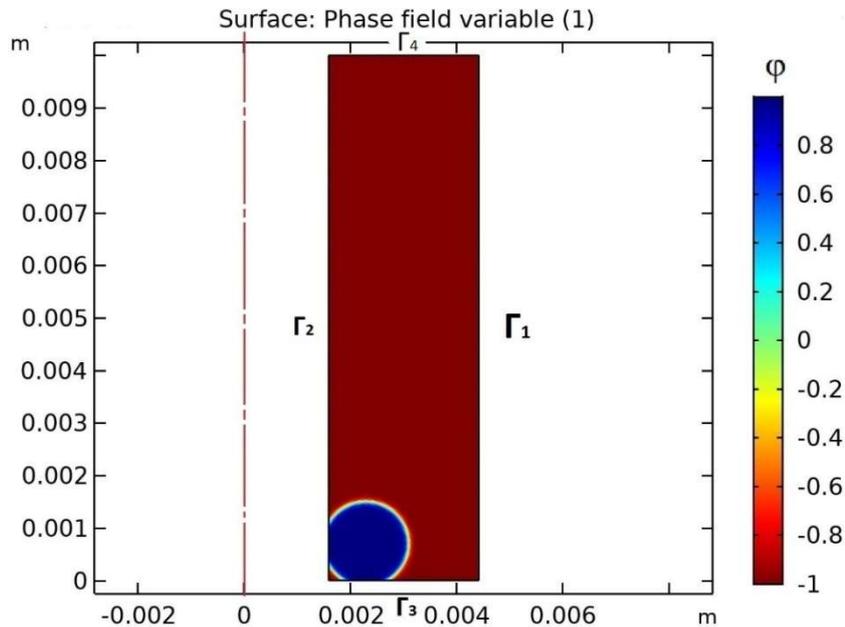


Рис. 2. Схема расчетной области со значением функции параметра порядка в начальный момент времени, где синим цветом указана фаза припоя, красным – воздушная фаза

Величина контактного угла в месте тройной контактной точки «расплав – воздушная среда – подложка» определяется из закона Юнга:

$$\cos \theta = \frac{\gamma_{SG} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LG}},$$

где γ – силы поверхностного натяжения, которые возникают в контактной точке при смачивании расплавом поверхности: γ_{SL} – поверхностное натяжение «расплав – подложка», γ_{SG} – поверхностное натяжение «подложка – воздушная среда», γ_{LG} – поверхностное натяжение «расплав – воздушная фаза». На границе Γ_3 имеется подложка из оксида алюминия с плохой смачиваемостью, поэтому контактный угол принимает значение больше 90° , на границе Γ_4 – острый контактный угол принят в размере 40° . Поверхностное натяжение для припоя $\text{Al-Si} \gamma_{LG} = 0.85 \text{ Н/м}$.

Для корректной связки фазового поля с полем температуры и скорости все параметры модели являются функциями температуры и фазы. Теплофизические константы расплава, являясь функциями температуры, учитывают фазовый переход от твердой фазы к жидкой при достижении температуры ликвидуса. Теплота,

затрачиваемая на смену фазы припоем, учитывается в функции изобарной теплоемкости.

Все уравнения, составляющие модель, согласуются с интерфейсами Laminarflow, PhaseField, а также Heattransferand fluid программы Comsol [6]. Для решения контактной задачи смачивания модификация модели была произведена через пользовательские функции. Граничные условия, накладываемые на смачиваемые стенки изменены под условия, описываемые в статье Жакмена [5].

3. Результаты численного моделирования

В результате численного моделирования получены графики изменения фазового поля с заданными граничными условиями (Рис. 3). На графики наложены изотермы, из которых можно отметить, что образец нагревается с 823 до 873 К за 630 секунд. Достигая температур ликвидуса, припой начинает плавиться. Нижняя поверхность имеет плохую смачиваемость, что приводит к тому, что припой начинает скользить по ней, образуя тупой контактный угол смачивания. Правая вертикальная граница, которая, согласно модели, является металлическим стержнем, обладает высокой смачиваемостью. Это приводит к тому, что жидкий припой растекается по ней, двигаясь вверх, несмотря на действие сил гравитации. Форма припоя после окончательного установления положения равновесия соответствует реальному физическому представлению аналогичных процессов [2-4], наблюдаемых экспериментально.

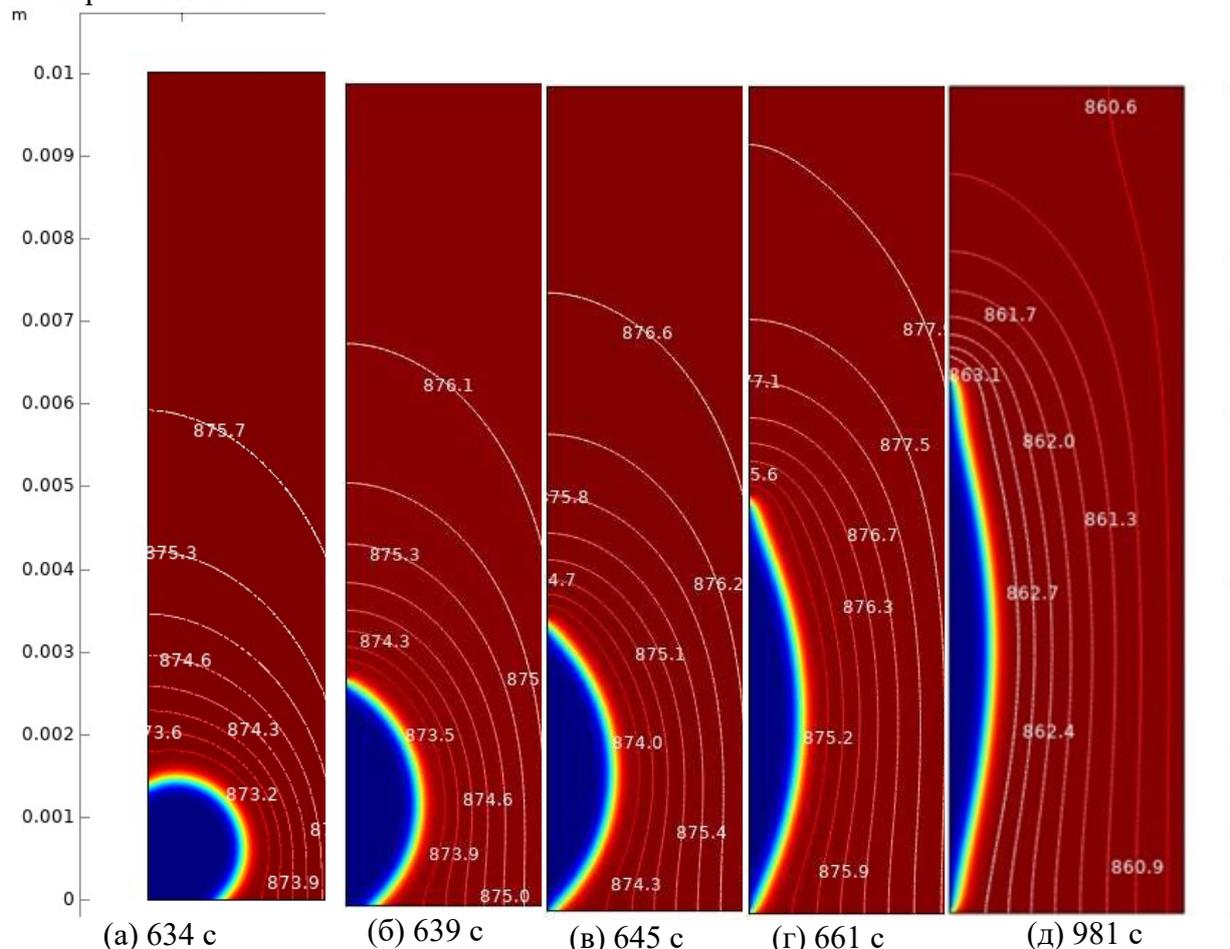


Рис. 3. Фазовое поле в различных моменты времени. Белые линии – наложенные изотермы в градусах Кельвина

Перемещение верхней контактной точки из первоначального положения составило 5 мм. Также стоит отметить, что в момент начала плавления припоя наблюдается кратковременная задержка в увеличении температуры около образца (Рис. 3а-3в). Данный факт объясняется тем, что часть энергии затрачивается на фазовый переход. Среднее время, за которое припой при плавлении смачивает стержень, составляет 47 секунд. Температура всей системы начинает падать до достижения равновесного положения расплава вдоль стенки, однако к моменту ее падения до значений температуры кристаллизации смачивание успевает завершиться. Мениск принимает стационарную форму.

4. Выводы

Выбранная математическая модель описывает процесс смачивания припоем металлического стержня. Модель позволила учесть плавление припоя, а также учесть изменения параметров системы в процессе нагревания. Ввиду согласованности расчётных моделей с результатами аналогичных расчетных задач [2-4], представляется возможным дальнейшее применение предложенной модели для расчетов процессов смачивания в условиях невесомости, т.е. без учета силы тяжести. Проведение такого рода реальных экспериментов является экономически затратной процедурой, получение результатов путем численным экспериментов значительно упрощает и удешевляет получение результатов по качественному подбору как тепловых режимов процесса смачивания, так и по подбору материалов для ремонта обшивки космических аппаратов от мелких сколов и трещин.

Список литературы

1. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Численный расчет двумерных течений двухфазной жидкости с учетом смачиваемости с помощью квазигидродинамических уравнений // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. №131. С. 1-18.
2. Anderson, D. M., McFadden, G. B. & Wheeler, A. A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics // Ann. Rev. Fluid Mech. 1998. Vol. 30. P. 139-165.
3. Fu H., Dehsara M., Krivilyov M., Mesarovic S. D., and Sekulic D. P., Kinetics of the molten Al-Si triple line movement during a brazed joint formation // Journal of Materials Science. 2016. Vol. 51. N 4. P. 1798-1812.
4. Yu. C.-N., Lazaridis K., Wu. Y., Voroshilov. E., Krivilyov. M.D., Mesarovic. S.D., Sekulic, D.P. Filling a hole by capillary flow of liquid metal - equilibria and instabilities // Physics of Fluids. 2021. Vol. 33. N. 3. DOI: 10.1063/5.0039718.
5. Jacqmin D. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface // Journal of Fluid Mechanics. 2000. Vol. 402. P. 57-88.
6. COMSOL Multiphysics Reference Manual. Version: COMSOL 5.4. 2018.

Влияние конвекции Марангони на массообмен во всплывающей капле с поверхностной реакцией

М. О. Денисова, К. Г. Костарев

УрО РАН Институт механики сплошных сред, 614013, Пермь, Королева, 1
email: mod@icmm.ru

Диспергирование среды, из которой извлекается необходимый компонент, до сих пор остается одним из основных подходов жидкостной экстракции. Однако, несмотря на высокую эффективность, этот подход сохраняет эмпирический характер, т.к. выбор основных параметров – среднего диаметра капель и времени пребывания капли в окружающей жидкости (экстрагенте) – в зависимости от исходной концентрации извлекаемого вещества (реагента) определяется опытным путем. Ситуация еще больше осложняется, если извлекаемый компонент является поверхностно-активным веществом или химически активным по отношению к экстрагенту. В докладе представлены результаты экспериментального изучения структуры и эволюции течений и распределения реагента (уксусной кислоты), диффундирующего из всплывающей капли цилиндрической формы в химически активную среду (водный раствор гидроксида натрия). Движение капли сопровождается развитием конвекции Марангони и реакции нейтрализации на поверхности капли.

Ключевые слова: капля; диффузия; массоперенос; реакция нейтрализации; конвекция Марангони.

The effect of Marangoni convection on mass transfer in a rising droplet with surface reaction

M. O. Denisova, K. G. Kostarev

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Koroleva St. 1, 614013, Perm
email: mod@icmm.ru

Dispersing of the medium from which the desired component is extracted is still one of the main approaches to liquid extraction. However, despite its high efficiency, this approach is still of empirical nature, since the choice of the main parameters - the average drop diameter and the residence time of the drop in the surrounding liquid (the extractant) - is determined by experiment in relation to the initial concentration of the extracted substance (reagent). The main difficulty with a full-scale theoretical treatment and numerical simulation is a three-dimensional shape of the droplet and, accordingly, the lack of experimental data on the real structure of convective flows and the dynamics of reagent concentration fields in the moving droplet. These data are required for verification of theoretical models of mass transfer between the droplet and the surrounding medium. The situation

can get worse when the extracted component is a surfactant or reactive against the extractant.

The paper presents the results of an experimental study of the structure and evolution of flows and distribution of a reagent (acetic acid) diffusing from a rising cylindrical droplet with an insoluble base component into a chemically active medium (aqueous sodium hydroxide solution). The motion of the droplet is accompanied by the development of Marangoni convection and neutralization reaction on the droplet surface.

Keywords: droplet; diffusion; mass transfer; neutralization reaction; Marangoni convection.

Одним из направлений развития современного химического производства является использование проточных реакторов непрерывного действия. Во многих случаях такие реакторы одновременно сочетают несколько функций, например, жидкостную экстракцию реагента, проведение химической реакции с его участием и пофракционное разделение за счет разницы плотностей смеси, «обедненной» реагентом, отработанным экстрагентом и продуктом реакции. Единичным элементом рабочей среды такого реактора является капля, находящаяся в объеме химически активной жидкости. Ясно, что повышение эффективности работы подобного реактора напрямую связано с описанием массообмена между каплей и окружающей средой в условиях изменения их плотности за счет диффузии реагента и синтеза продуктов реакции, а также неизотермичности этого процесса. Дополнительными осложняющими факторами являются, движение капли и проявление реагентом поверхностно-активных свойств.

Изучение массообмена в описанных выше условиях выполнено экспериментально путем визуализации полей концентрации и структуры течений, возникающих при диффузии уксусной кислоты в водный раствор гидроксида натрия NaOH из нерастворимой капли на основе смеси бензола и хлорбензола. При контакте молекул кислоты и основания происходила реакция нейтрализации с образованием воды и водорастворимой соли (в данном случае ацетата натрия). Вода и растворы нерастворимы в капле, поэтому реакция развивалась на внешней поверхности капли. Капля всплывала в тонкой вертикальной ячейке Хеле-Шоу и, имея достаточно большой начальный объем, приобретала в ячейке форму короткого горизонтального цилиндра с параллельными торцами, что позволяло использовать оптические методы, в частности интерференционный. Отметим, что переход от одной интерференционной полосы к другой соответствовал изменению концентрации кислоты в смеси бензолов на 0.019 моль/л. Спецификой задачи являлось исходное выравнивание плотности смеси бензолов в капле по плотности уксусной кислоты. Благодаря этому, скорость всплывания капли задавалась не перепадом плотности, возникшим в процессе диффузии, а слабым тепловыделением в ходе реакции, пропорциональным начальной концентрации кислоты C_0 в капле.

Ранее авторами был рассмотрен случай малых C_0 , когда диффузия кислоты и последующее развитие реакции происходило без возникновения капиллярного движения из-за порогового характера конвекции Марангони [1]. Сейчас исследован вариант с высоким значением C_0 . Соответствующие серии интерферограмм представлены на рис. 1. В обоих случаях восходящие факелы для капли формировались продуктами реакции, нисходящие – ацетатом натрия, успевшем раствориться в растворе гидроксида натрия. Также общим являлось формирование в верхней части капли неустойчивой стратификации плотности смеси с пониженной концентрацией кислоты вследствие ее диффузии в окружающую среду. В дальнейшем наблюдалось падение концентрационных «пальцев» (рис. 1 б,г), число которых, равно

как продолжительность этой стадии, резко возросло с возникновением конвекции Марангони. Несмотря на

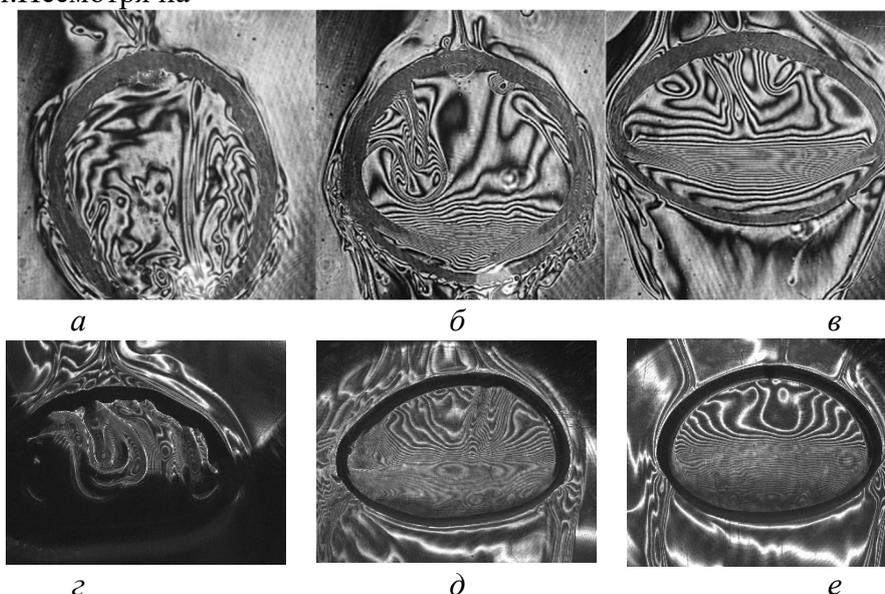


Рис. 1. Эволюция поля концентрации уксусной кислоты при ее диффузии из всплывающей капли: (а–в) с $C_0 = 0.82$ моль/л в раствор NaOH $C_{01} = 0.89$ моль/л, $D_0 = 11.5$ мм (г–е) с $C_0 = 5.0$ моль/л в раствор NaOH $C_{01} = 1.0$ моль/л, $D_0 = 7.5$ мм. Время с момента формирования капли t , с: а – 2; б – 26; в – 83; г – 63; д – 194; е – 294

развитие капиллярного движения, сохранился линейный вид изменения концентрации кислоты в центре капли со временем (в период наиболее интенсивного массообмена между каплей и окружающей средой) (рис. 2). В тоже время исчезла зона с малым перепадом концентрации в нижней части капли (рис. 1 в), возникавшая за счет ускоренного сноса обедненной смеси благодаря движению межфазной границы.

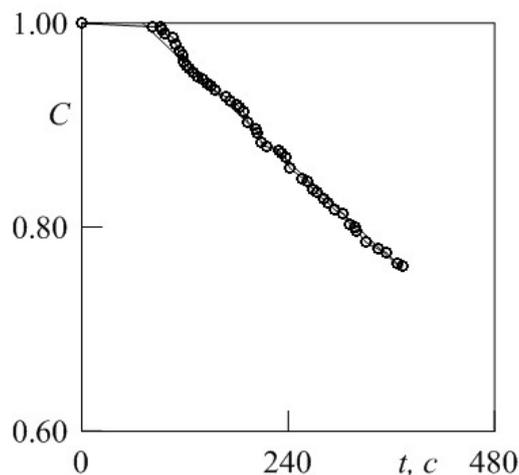


Рис. 2. Изменение концентрации уксусной кислоты в центре всплывающей капли с высоким начальным содержанием кислоты ($C_0 = 5$ моль/л) со временем

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ № 19-11-00133.

Список литературы

1. Денисова М.О., Костарев К.Г. Диффузия реагента из медленно всплывающей капли с поверхностной химической реакцией. // Труды VII-й Всеросс. конф. «Пермские гидродинамические научные чтения», ПГНИУ, Пермь, с.165-167.

Калориметрические исследования деформированных образцов из сплава АМгб

Д. В. Ефремов^а, С. В. Уваров^б, О. Б. Наймарк^б

^аПермский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 614990, Пермь, ул. Ленина, 13а

email: efremov.d@icmm.ru

^бИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, ул. Академика Королёва, 1

Установлена связь калориметрических эффектов со сменой сценариев развития пластической деформации, характерных для неравновесных критических систем. Проведённый анализ статистических распределений интервалов следования флуктуаций напряжений пластического течения установил существование двух критических точек, переходы через которые сопровождается качественной сменой механизмов локализации пластической деформации. Термодинамические закономерности развития пластического течения изучаются методом дифференциальной сканирующей калориметрии с последующим вычислением запасённой энергии для образцов с разной степенью деформации.

Ключевые слова: прерывистая текучесть, критические точки, дифференциально сканирующая калориметрия.

Calorimetric studies of deformed samples from AMg6 alloy

D. V. Efremov^a, S. V. Uvarov^b, O. B. Naimark^b

^aPerm Federal Research Center UB RAS, Lenina St. 13a, 614990, Perm

email: efremov.d@icmm.ru

^bInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Academica Koroleva St. 1, 614013, Perm

The connection of calorimetric effects with the change of scenarios of the development of plastic deformation was established. Statistical distributions of the intervals between the plastic flow stress fluctuations were analyzed, and two critical points were found that indicate a change in the mechanisms of plastic deformation. The thermodynamic laws of the development of plastic flow are studied by differential scanning calorimetry followed by calculation of the stored energy for samples with different degrees of deformation.

Key words: discontinuous fluidity, critical points, differential scanning calorimetry.

Ранее в работах [1-2] исследована локализация пластической деформации, обусловленная коллективным поведением дефектов. В [4-5] установлено, что пластическая деформация твёрдых тел на протяжении всего процесса пластического течения имеет локализованный на макроскопическом масштабном уровне характер. При этом деформирование реализуется в форме лавиноподобных сдвигов, размеры

которых подчиняются степенной статистике. Данные закономерности соответствуют результатам в опубликованном [5], где исследованы статистические закономерности формирования поверхностного профиля пластически деформированных поликристаллических образцов меди. В работе [4] выделены стадии процесса деформирования при сопоставлении с данными о распределении зон локализации пластического течения, что позволило установить универсальный сценарий коррелированного поведения многомасштабных зон локализации пластической деформации, практически не зависящий от конкретных деталей механизма деформации и структуры деформируемого материала.

Эксперимент на квазистатическое одноосное нагружение (с постоянной скоростью деформации $0.4 - 1.7 \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-1}$) был проведён для цилиндрических образцов из алюминиевого сплава АМгб при комнатной температуре (диаметр 15 мм, высота 22.5 мм и наклоненных на 2° от вертикали). На рис. 1 представлена деформационная диаграмма алюминиевого сплава, иллюстрирующая множественные флуктуации напряжения течения, обнаруживающие качественно отличную динамику на разных участках деформационной кривой. Временная последовательность флуктуаций между событиями представлена рис. 3 и демонстрирует резкое увеличение характерных времен «релаксации» (интервалов следования импульсов) в окрестностях двух значений макроскопической деформации.

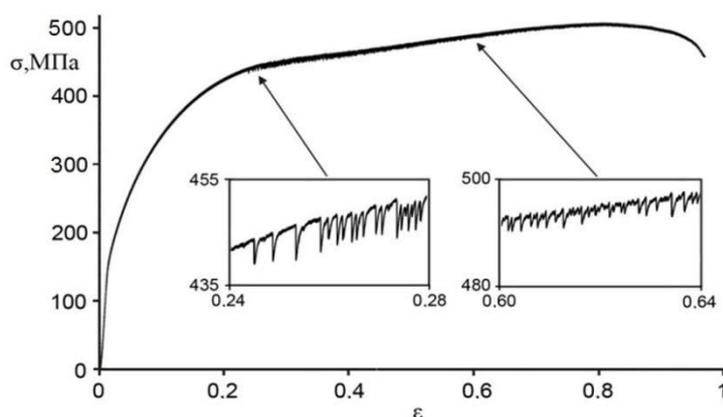


Рис. 1. Деформационная диаграмма алюминиевого сплава АМгб

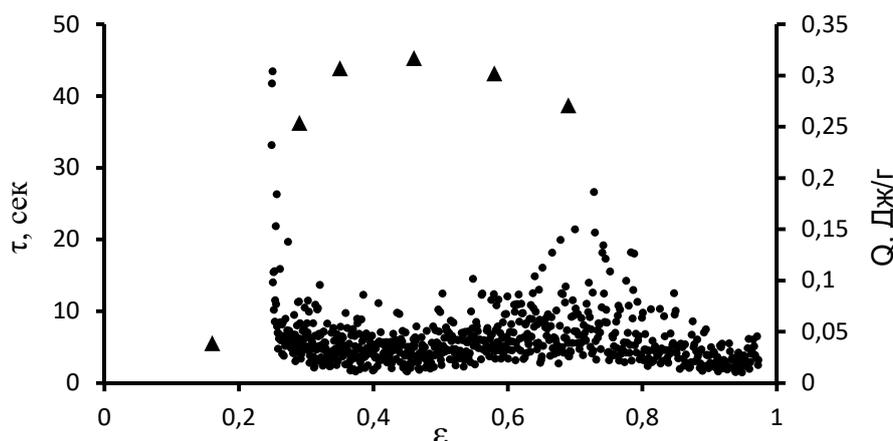


Рис. 2. Зависимость интервалов времени между конечно-амплитудными флуктуациями напряжения течения (отмечена точками) и доля запасенной энергии в зависимости от степени деформации образца (отмечена треугольниками)

Для исследования методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) [6] была проведена серия дополнительных испытаний по осадке наклоненных цилиндрических образцов из сплава АМг6. Сжатие производилось до заданной степени деформации с постоянной скоростью $0.8 \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-1}$, после чего эксперимент останавливался и образец извлекался из испытательной машины и подвергался ДСК анализу с помощью прибора STA «Jupiter» 449. ДСК кривые деформированных образцов из сплава АМг6 представлены на рисунке 3. На ДСК кривых, соответствующих деформированным образцам, в области температур 300 °С наблюдается экзотермический эффект, который наиболее ярко выражается на образце с деформацией 0.35. Величина запасённой энергии, полученная вычислением площади под пиком, в зависимости от степени деформации образца представлена на рис. 2.

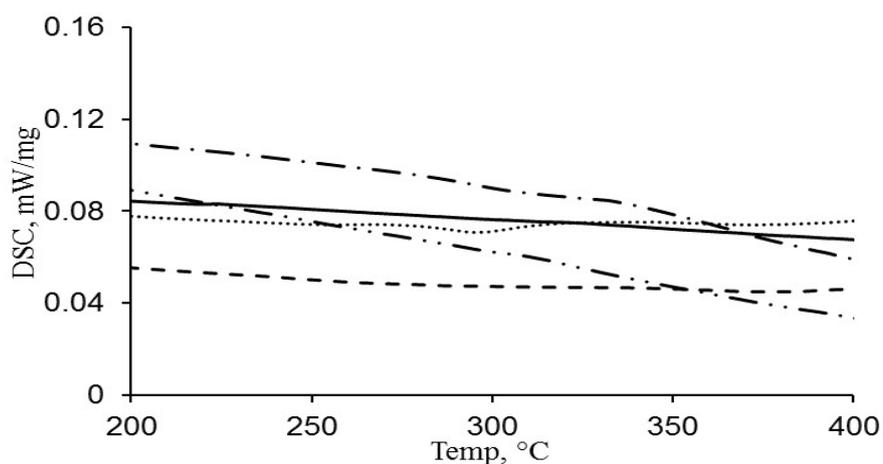


Рис. 3. ДСК кривые для образцов из сплава АМг6 различной степени деформации: — — — 0; — — — — — 0.16; · · · · · 0.35; — · — · — 0.69; — — — — — 0.69 (повторное снятие ДСК кривой)

В результате проведённых калориметрических исследований было установлено, переход через первую критическую точку соответствует формированию множественных областей локализованной пластичности. На стадии развитой пластической текучести наблюдается максимальный уровень запасённой энергии в ходе деформации. Переход через вторую критическую точку связан с формированием очагов макроскопического разрушения, на образование поверхности субмикротрещин расходуется часть запасённой энергии деформирования, поэтому при последующем нагреве уменьшается величина соответствующих калориметрических эффектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Пермского края в рамках научного проекта № 19-48-590016

Список литературы

1. Gianfranco D., Franco N. Critical Dynamics of Burst Instabilities in the Portevin-Le Châtelier Effect // Physical Review Letters. 2000. Vol. 85. N. 19. P. 4096–4099.
2. Третьякова Т.В., Вильдеман В.Э. Закономерности и схематизация процессов локализации пластического течения при испытании плоских образцов алюминий-магниевого сплава // Физическая мезомеханика. 2017. Т. 20. Вып. 2. С. 71–77.
3. Зуев Л.Б., Данилов В.И., Баранникова С.А. Физика макролокализации пластического течения. Новосибирск: Наука, 2008. 327 с.
4. Зуев Л.Б. Автоволновая модель пластического течения// Физическая мезомеханика. — 2011. — Т.14, № 3. — С. 85–94.

5. *Zaiser M., Grasset F.M., Koutsos V., Aifantis E.C.* Self-Affine surface morphology of plastically deformed metals// *Physical review letters*. 2004. Vol. 93. N. 19. P. 195507-1-195507-4. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.195507
6. *Luigi N.J., Valera M., Rodriguez J.P., Prin J.* Experimental Study of the Interaction between Recrystallization and Precipitation Processes of an AA8011 Commercial Alloy// *Journal of Metallurgy*. 2014. Vol. 2014. P. 1-17.

Нелинейные режимы конвекции трехкомпонентной смеси в двухслойной пористой среде различной конфигурации

Н. А. Зубова^а, Т. П. Любимова^{а,б}

^аИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1
email: zubova.n@icmm.ru

^бПермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,
Пермь, ул. Букирева, 15
email: lubimova@psu.ru

В работе представлены результаты моделирования конвекции в слоистой пористой среде, моделирующей месторождения углеводородов. Рассмотрена вытянутая в горизонтальном направлении прямоугольная полость пористой среды, состоящей из двух слоев с равным значением пористостью и разными постоянными значениями проницаемости. Полость заполнена однородной трехкомпонентной углеводородной смесью и нагревается снизу. Задача решается в рамках модели Дарси-Буссинеска, с учетом эффекта термодиффузии. Получены данные о конвективных режимах и распределении компонент смеси в случаях, когда отношение проницаемостей нижнего и верхнего слоев больше или меньше единицы.

Ключевые слова: конвекция; диффузия; термодиффузия; углеводородные смеси; пористая среда

Nonlinear regimes of convection of a ternary mixture in a two-layer porous medium of various configurations

N. A. Zubova^а, T. P. Lyubimova^{а,б}

^аInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, 614000, Perm, Koroleva St., 1
email: zubova.n@icmm.ru

^бPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: lubimova@psu.ru

The paper presents the results of modeling convection in a layered structure that simulates hydrocarbon deposits. A horizontally elongated rectangular cavity of a porous medium, consisting of two layers with equal porosity and different constant permeabilities, is considered. The cavity is filled with a homogeneous three-component hydrocarbon mixture and is heated from below. The problem is solved within the Darcy-Boussinesq model, taking into account thermal diffusion. Data were obtained on convective regimes and the distribution of mixture components in cases where the ratio of the permeabilities of the lower and upper layers is greater or less than unity.

Keywords: convection; diffusion; thermal diffusion; hydrocarbon mixtures; porous medium

1. Введение

Конвективные процессы, происходящие в естественных подземных резервуарах, чаще всего проходят в условиях чередования насыщенных пористых слоев, обладающих разной пористостью и проницаемостью. Это, а также сложный состав жидкости, заполняющей пористую среду, например, смеси углеводородов, является одним из осложняющих факторов моделирования. В [1-5] неоднородная пористая среда моделируется как область, состоящая из слоев горных пород, имеющих различные значения пористости и проницаемости, причем свойства каждого слоя однородны. Такие задачи, часто использующие топографические сведения и данные о степени проницаемости разных видов пород, решаются в отсутствие тепловой конвекции или в предположении однокомпонентной или однофазной насыщающей их жидкости [1, 4, 6, 7]. Однако анализ данных разведки нефти и газа показывает наличие тепловых аномалий, которые объясняются наличием тепловой конвекцией [8-11]. Большое число работ посвящено разделению смесей в термогравитационной колонне, заполненной пористой средой [12, 13-15]. Из результатов этих исследований следует, что конвекция существенно влияет на распределение компонентов смеси.

В настоящей работе рассматривается модель углеводородного месторождения, представляющая собой пористую среду, состоящую из двух горизонтальных слоев разной проницаемости и равной пористости. Полость заполнена углеводородной смесью, компоненты которой входят в основную группу химических соединений в составе вмещающих пород нефтегазовых месторождений.

2. Постановка задачи

Рассмотрим термоконцентрационную конвекцию трехкомпонентной смеси в вытянутой в горизонтальном направлении прямоугольной области пористой среды со сторонами L и H ($L=5H$), насыщенной однородной трехкомпонентной смесью. Область разбита на два горизонтальных слоя с разными значениями проницаемости, но одинаковыми прочими свойствами среды.

Для описания состава смеси будем использовать вектор концентраций (массовых долей) $C=(C_1, C_2)$, где C_1 и C_2 – концентрации первого и второго компонентов смеси (примесей), а $C_3=1-C_1-C_2$ – концентрация третьего компонента (растворителя). Считаем, что плотность смеси линейно зависит от температуры T и концентраций составляющих ее компонентов C :

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_T(T - T_0) - I \cdot \mathbf{V}(C - C_0)). \quad (1)$$

Здесь: $\beta_T = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_C$ – коэффициент теплового расширения; $\mathbf{V} = \text{diag}\{\beta_{C_1}, \beta_{C_2}\}$ –

диагональная матрица коэффициентов концентрационного расширения (такая, что

$\beta_{C_i} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial C_i} \Big|_{T, C_j, j=1, 2, j \neq i}$ ($i = 1, 2$)); $I = (1, 1)$; ρ_0 , $C_0 = (C_{10}, C_{20})$ и T_0 – средние значения

плотности, вектора концентраций и температуры смеси.

Моделирование осуществлялось в рамках нестационарных нелинейных уравнений Дарси-Буссинеска [16] с учетом эффекта термодиффузии, записанных в терминах функции тока, температуры и концентрации компонент смеси:

– для верхнего слоя

$$\nabla^2\Psi = \text{Ra} \left(\frac{\partial T}{\partial x} + \psi \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} = \nabla^2 T, \quad (3)$$

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} = \text{Le}^{-1} (\nabla^2 C - \text{IV}^2 T); \quad (4)$$

– для нижнего слоя:

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{\gamma} \text{Ra} \left(\frac{\partial T}{\partial x} + \psi \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} = \nabla^2 T, \quad (6)$$

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} = \text{Le}^{-1} (\nabla^2 C - \text{IV}^2 T). \quad (7)$$

Здесь Ψ – функция тока, определенная через компоненты вектора скорости как $V_x = \partial\Psi/\partial y$, $V_y = -\partial\Psi/\partial x$; t – время; $\gamma = K_1/K_2$ – отношение проницаемостей верхнего и нижнего слоев соответственно; $\varepsilon = \varepsilon^*(\rho c)_f/(\rho c)^*$ – нормализованная пористость, ε^* – пористость среды, $(\rho c)^*$ – эффективная теплоемкость пористой среды, $(\rho c)_f$ – теплоемкость жидкости. В качестве единиц измерения выбраны высота области H для длины; эффективная температуропроводность $a = \lambda^*/(\rho c)_f$ (λ^* – эффективная теплопроводность пористой среды;) для функции тока; $H^2(\rho c)^*/\lambda^*$ (для времени; ΔT для отклонения температуры от равновесного значения и $C_0(C_0 - 1)\Delta T D_T(\mathbf{D})^{-1}$ (\mathbf{D} – матрица коэффициентов молекулярной диффузии смеси; D_T – вектор коэффициентов термодиффузии) для отклонения концентрации от равновесного значения.

К исходным уравнениям свободной термоконцентрационной конвекции смеси в пористой среде в рамках модели Дарси-Буссинеска применена процедура диагонализации матрицы коэффициентов молекулярной диффузии. Благодаря этой процедуре можно исключить перекрестные диффузионные эффекты, что позволяет уменьшить число определяющих параметров задачи [17-18]. После приведения уравнений к безразмерному виду и диагонализации возникают следующие безразмерные параметры: $\text{Ra} = K_1 g \beta_T H \Delta T / (a \nu)$ – аналог числа Релея для пористой среды, который в дальнейшем для краткости будем называть «число Релея»; ν – кинематическая вязкость; \mathbf{g} – вектор ускорения свободного падения; $\psi = -C_0(\mathbf{I} - C_0)\beta_T^{-1}\mathbf{B}(\mathbf{D})^{-1}D_T$ – вектор отношений разделения, который характеризует термодиффузионные свойства смеси; $\text{Le} = a(\mathbf{D})^{-1}$ – диагональная матрица чисел Льюиса такая, что $Le_{11} = a/D_{11}$, $Le_{22} = a/D_{22}$.

На всех внешних границах ставятся условия непроницаемости и отсутствия диффузионного потока вещества; на внешних горизонтальных границах задается

температура, содействующая нагреву снизу, на вертикальных – отсутствие потока тепла; на границе между слоями (на высоте b) – равенство x -компонент скорости:

$$x = 0, 5: \quad \Psi = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0; \quad (8)$$

$$y = 0: \quad \Psi = 0, \quad T = 1, \quad \frac{\partial C}{\partial y} - I \frac{\partial T}{\partial y} = 0; \quad (9)$$

$$y = 1: \quad \Psi = 0, \quad T = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} - I \frac{\partial T}{\partial y} = 0; \quad (10)$$

$$y = b: \quad \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} = \gamma \frac{\partial \Psi_2}{\partial y}. \quad (11)$$

Температура в начальный момент времени предполагалась линейно зависящей от вертикальной координаты (подогрев снизу, соответствующий существующему в условиях реальных углеводородных залежей геотермальному градиенту), а концентрация компонент – однородной. Для решения был реализован алгоритм с помощью явной конечно-разностной схемы с постоянным временным шагом. Пространственные производные аппроксимировались центральными разностями. Размер расчетной сетки – 40×200 ячеек, размер шага по времени – $h^2/16$, где h – шаг по пространству. Эти величины выбирались таким образом, чтобы добиться устойчивости численной схемы. Уравнение Пуассона для функции тока решалось методом последовательной верхней релаксации.

Вертикальный размер расчетной области составлял 100 м. Рассмотрены ситуации, когда соотношения высот слоев в полости приняты равными 1:2 и 1:3. В обоих пористых слоях значения пористости были одинаковыми и принимались равными $\varepsilon = 0,2$. Разность температур между верхней и нижней границами расчетной области соответствовала среднему значению геотермального градиента $3 \cdot 10^{-2}$ К/м. Тепловые и физические свойства смеси метана, этана и бутана (при $T_0 = 315$ К, $p = 7.0 \times 10^6$ Па) представлены в таблице [19, 30].

Таблица. Физические свойства смеси метана, этана и бутана (при $T_0 = 315$ К, $p = 7.0 \times 10^6$ Па)

| | | | |
|-----------------------------|------------------------|---|-------|
| $\rho_0, \text{ кг/м}^3$ | 450.35 | $D_{11} \times 10^9, \text{ м}^2/\text{с}$ | 3.14 |
| $\beta_T, \text{ К}^{-1}$ | -0.52×10^{-2} | $D_{12} \times 10^9, \text{ м}^2/\text{с}$ | -0.77 |
| β_{C_1} | -1.25 | $D_{21} \times 10^9, \text{ м}^2/\text{с}$ | -0.32 |
| β_{C_2} | -0.72 | $D_{22} \times 10^9, \text{ м}^2/\text{с}$ | 4.68 |
| $\nu, \text{ м}^2/\text{с}$ | 4.44×10^{-7} | $D_1^T \times 10^{12}, \text{ м}^2/(\text{с} \cdot \text{К})$ | -5.13 |
| $a, \text{ м}^2/\text{с}$ | 10^{-7} | $D_2^T \times 10^{12}, \text{ м}^2/(\text{с} \cdot \text{К})$ | -1.35 |

3. Численные результаты

Для рассматриваемой в настоящей работе трехкомпонентной смеси метана, этана и бутана преобразованные после процедуры диагонализации значения безразмерных параметров принимают вид $\psi_1 = 2.4 \cdot 10^{-3}$, $\psi_2 = 0,427$, $Le_{11} = 20.7$, $Le_{22} = 33.4$. Отношения разделения компонент смеси ψ_1 и ψ_2 положительны, поэтому при подогреве снизу более легкие компоненты смеси метан и этан под действием

термодиффузии накапливаются возле нагретой нижней границы полости, а тяжелая компонента смеси бутан – вблизи холодной верхней границы. При этом возникает неустойчивая стратификация по плотности, т.е. к тепловому механизму возникновения конвекции подключается термодиффузионный механизм. Предварительные вычисления показали, что конвекция в прямоугольной области при нагреве снизу для смеси метана, этана и бутана возникает пороговым образом при $Ra = 1.3$. Поэтому в дальнейших расчетах в одном из слоев значение проницаемости было фиксированным и равным $2.9e-15 \text{ м}^2$. ($Ra = 1$), что ниже порога, а в другом было выше до 50 раз. При этом были рассмотрены ситуации, когда отношение проницаемостей было как меньше, так и больше 1.

а. Случай равной высота слоев

Для рассмотренных значений проницаемостей пористых слоев в прямоугольной полости наблюдается установление стационарного режима. На Рис. 1 показана временная эволюция максимального значения функции тока в полости (Рис.1а) и разности концентраций первой и второй (Рис.1(б, в) соответственно) компонент смеси между центрами верхней и нижней границ для отношения проницаемостей слоев, равного 5. На начальном этапе развития неустойчивости наблюдается бесконвективный период (функция тока близка к нулю, Рис. 1а), в течение которого происходит чисто диффузионное разделение смеси (Рис. 1(б, в)). После возникновения конвекции, которое сопровождается резким скачком интенсивности течения, а также скачком разности концентраций между центрами верхней и нижней границ полости, наблюдается перестройка течения и установление стационарного режима.

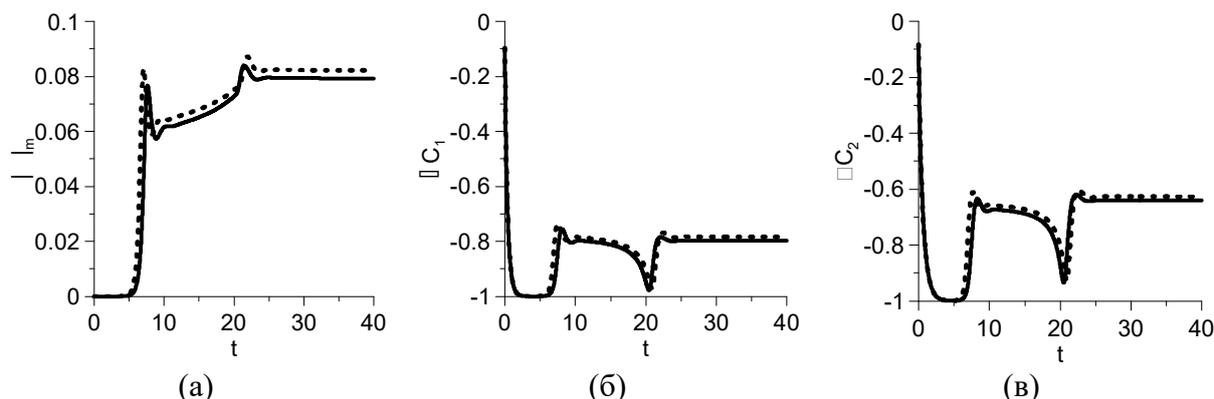


Рис. 1. Временная эволюция максимального значения функции тока в полости (а) и разности концентраций первой (б) и второй (в) компонент смеси между центрами верхней и нижней границ. Сплошные кривые соответствуют случаю $\gamma = 1 / 5$, штриховые кривые – $\gamma = 5$

В случае $\gamma < 1$ течение возникает незначительно позже, чем при $\gamma > 1$, а интенсивность стационарного течения незначительно ниже. Поскольку течение способствует перемешиванию смеси, то при $\gamma < 1$ разделение смеси в стационарном режиме незначительно больше, чем для $\gamma > 1$. Аналогично возникновение неустойчивости происходит для больших значений отношения проницаемостей слоев среды. При этом с ростом проницаемости неустойчивость возникает раньше, интенсивность течения растет, а разделение смеси уменьшается.

На Рис. 2 представлены установившиеся изолинии функции тока (Рис.2а) и распределение концентрации компонент смеси (Рис. 2(б, в)) для в случае отношения проницаемостей слоев среды, равного 5. Как видно, в полости устанавливается четырехвихревое течение. Центры вихрей смещены в область, где число Релея отлично

от 1, т.е. выше порогового значения. При увеличении отношения проницаемостей наблюдается сплющивание вихрей в горизонтальном направлении, а также большая степень деформации изолиний концентрации компонент из-за увеличения интенсивности течения.

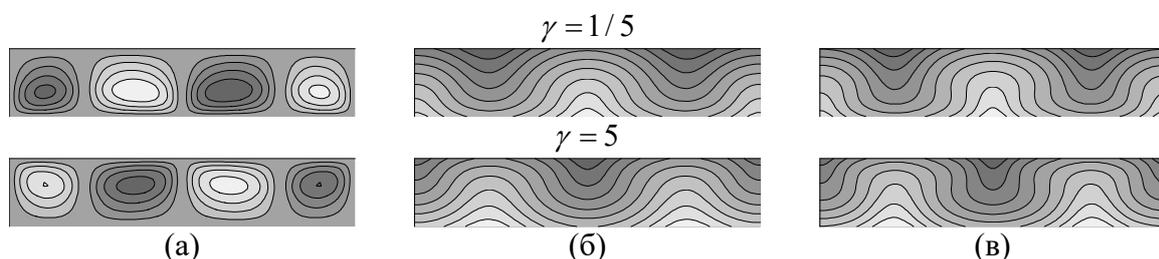


Рис. 2. Установившиеся изолинии функции тока (а) и распределение концентрации первой (б) и второй (в) компонент смеси

На начальных этапах возникновения и развития конвекции течение зарождается возле боковых границ полости, постепенно проникая в центральную часть полости. В случае, когда проницаемости слоев отличаются слабо, течение возникает сразу во всех слоях. При значительной разности проницаемостей на малых временах наблюдается локальное возникновение конвекции в слое с большим значением проницаемости. Аналогичное поведение наблюдалось для однокомпонентной жидкости [16, 20, 21]. Возникающее течение имеет многовихревую форму, его пространственный масштаб растет с увеличением отношения проницаемостей слоев. Переход к стационарному четырехвихревому течению происходит через ряд перестроек течения с постепенным уменьшением числа вихрей.

б. Случай разной высоты слоев

В этом разделе рассмотрены результаты, полученные при соотношении высот слоев как 1:3. В случае $\gamma < 1$ в рассматриваемом диапазоне параметров развитие конвекции происходит таким же образом, как и в случае слоев равной высоты, т.е. с выходом на четырехвихревую стационарный режим (Рис. 3). Еще в течение бесконвективного периода возле боковых границ области начинают образовываться конвективные вихри, слабое течение проникает в верхний слой, обладающий меньшей проницаемостью: в это время можно наблюдать «локальное» возникновение конвекции. С развитием неустойчивости число вихрей растет, течение переходит и в верхний слой: конвекция становится «крупномасштабной». Через ряд перестроек течения постепенно число вихрей сокращается до четырех.

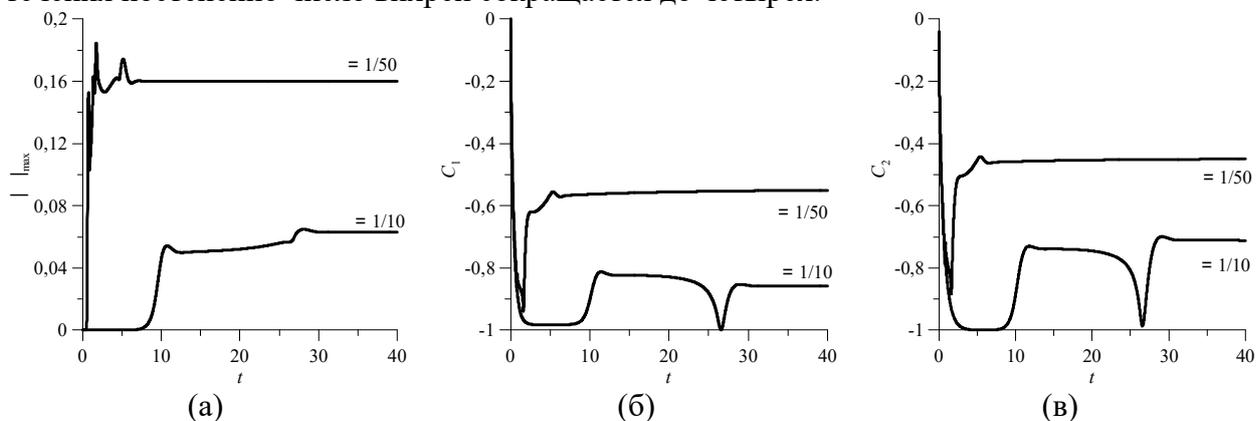


Рис. 3. Временная эволюция максимального значения модуля функции тока в области (а) и разности концентраций первого (б) и второго (в) компонентов смеси между центрами верхней и нижней границ. $\gamma < 1$

Более ярко «локальная» конвекция продемонстрирована на рисунке 4 для случая $\gamma = 1/50$. В момент времени $t=1$ в слое с большей проницаемостью имеет место многовихревое движение, которое почти не проявляется в остальной части области (Рис. 4а). Изолинии концентрации сильно деформированы также только в этом слое, как это показано на Рис.4б на примере первого компонента смеси. Со временем движение проникает и в верхнюю часть области.



Рис. 4. Изолинии функции тока (а) и распределение концентрации первого компонента смеси (б) в момент времени $t=1$ при $\gamma = 1/50$

В случае $\gamma > 1$ конвекция появляется в верхнем слое с большим значением проницаемости и постепенно захватывает нижний слой. Как видно из рисунка 5, на малых временах здесь так же, как и в предыдущих случаях, присутствует бесконвективный период (Рис. 5а), в течение которого происходит близкое к чисто диффузионному разделению компонентов смеси (Рис. 5(б, в)). В определенный момент времени образуется конвекция, сопровождающаяся сильным скачком интенсивности движения, затем наблюдается колебательный выход на стационарный режим. Время возникновения конвекции значительно короче, а ее интенсивность значительно выше при $\gamma > 1$, то есть при возникновении конвекции в более высоком верхнем слое. Установившееся течение при $\gamma > 1$ имеет многовихревую форму, причем пространственный масштаб вихрей уменьшается с ростом проницаемости верхнего слоя.

4. Заключение

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования термоконцентрационной конвекции трехкомпонентной смеси в пористой среде, состоящей из двух слоев равной пористости и разной проницаемости, под действием геотермального градиента. Рассмотрены случаи, когда отношения проницаемостей слоев больше или меньше единицы. Трехкомпонентная смесь составлена из газовой смеси углеводородов метана, этана и бутана, взятых в пропорции 0.3–0.3–0.35. Таким образом, представленная конфигурация задачи представляет собой модель углеводородного месторождения.

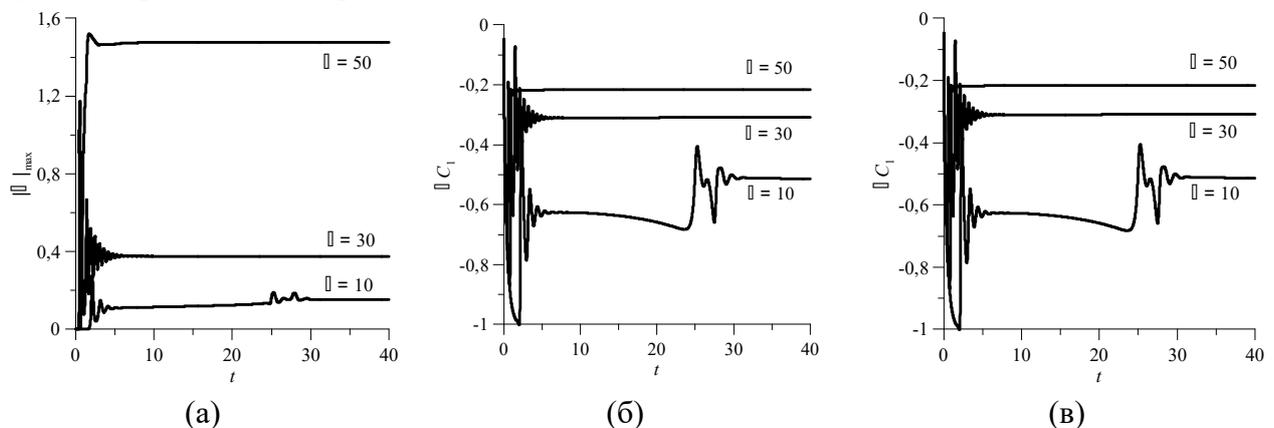


Рис. 5. Временная эволюция максимального значения модуля функции тока в области (а) и разности концентраций первого (б) и второго (в) компонентов смеси между центрами верхней и нижней границ, $\gamma > 1$

Результаты численного моделирования показывают, что во всем рассмотренном диапазоне параметров наблюдается формирование стационарного течения. Структура установившегося течения четырехвихревая в случае равных высот слоев и меняется при неравных высотах слоев и разных отношениях проницаемостей. Показано, что в случае, когда проницаемость верхнего слоя ниже проницаемости второго слоя, интенсивность течения незначительно меньше. Все формирующееся течение в целом сдвинуто в область слоя с большей проницаемостью. Более легкие компоненты смеси метан и этан вследствие эффекта термодиффузии накапливаются возле горячей нижней границы.

Показан «локальный» характер возникновения конвекции в исследуемой двухслойной конфигурации. Наиболее ярко этот эффект наблюдается, когда более проницаемым является тонкий нижний слой. В процессе развития конвекции течение начинает проникать в менее проницаемый верхний слой, однако центры формирующихся вихрей заметно сдвигаются в сторону более проницаемого слоя. Аналогичное смещение вихрей происходит и при более проницаемом толстом верхнем слое. Однако в этом случае возникновение конвекции носит «крупномасштабный» характер.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-71-00147).

Список литературы

1. *Soboleva E.* Density-driven convection in an inhomogeneous geothermal reservoir // *Int. J. Heat Mass Tran.* 2018. Vol. 127. P. 784-798. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.08.019>.
2. *Soboleva E.* Numerical investigations of haline-convective flows of saline groundwater // *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series.* 2017. Vol. 891. 012104. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/891/1/012104>.
3. *Soboleva E.* Numerical simulation of haline-convection in geothermal reservoirs // *J. Phys. Conf. Ser.* 2017. Vol. 891. 012105. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/891/1/012105>.
4. *Zech A., Zehner B., Kolditz O., Attinger S.* Impact of heterogeneous permeability distribution on the groundwater flow systems of a small sedimentary basin // *J. Hydrol.* 2016. Vol. 532. P. 90-101. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.11.030>.
5. *Salibindla A.K.R., Subedi R., Shen V.C., Masuk A.U.M., Ni R.* Dissolution-driven convection in a heterogeneous porous medium // *J. Fluid Mech.* 2018. Vol. 857. P. 61-79. <https://doi.org/10.1017/jfm.2018.732>.
6. *Barvier E.* Geothermal energy technology and current status: an overview // *Renew. Sustain. Energ. Rev.* 2002. Vol. 6. P. 3-65. [https://doi.org/10.1016/S1364-0321\(02\)00002-3](https://doi.org/10.1016/S1364-0321(02)00002-3).
7. *Kocberber S., Collins R.E.* Impact of reservoir heterogeneity on initial distributions of hydrocarbons // *SPE Annual Technical Conference and Exhibition.* New Orleans, Louisiana, September 23-26, 1990. P. 175-201. <https://doi.org/10.2118/20547-MS>.
8. *Bonté D., Van Wees J.-D., Verweij J.M.* Subsurface temperature of the onshore Netherlands: new temperature dataset and modelling // *Geol. Mijnbouw.* 2012. Vol. 91. P. 491-515. <https://doi.org/10.1017/S0016774600000354>.
9. *Pasquale V., Chiozzi P., Verdoya M.* Evidence for thermal convection in the deep carbonate aquifer of the eastern sector of the Po Plain, Italy // *Tectonophysics.* 2013. Vol. 594. P. 1-12. <https://doi.org/10.1016/j.tecto.2013.03.011>.
10. *Guillou-Frottier L., Carré C., Bourguin B., Bouchot V., Genter A.* Structure of hydrothermal convection in the Upper Rhine Graben as inferred from corrected

- temperature data and basin-scale numerical models // *J. Volcanol. Geoth. Res.* 2013. Vol. 256. P. 29-49. <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2013.02.008>.
11. *Lipsey L., Pluymaekers M., Goldberg T., van Oversteeg K., Ghazaryan L., Cloetingh S., van Wees J.-D.* Numerical modelling of thermal convection in the Luttelgeest carbonate platform, the Netherlands // *Geothermics.* 2016. Vol. 64. P. 135-151. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2016.05.002>.
 12. *Benano-Melly L.B., Caltagirone J.-P., Faissat B., Montel F., Costeseque P.* Modeling Soret coefficient measurement experiments in porous media considering thermal and solutal convection // *Int. J. Heat Mass Tran.* 2001. Vol. 44. P. 1285-1297. [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(00\)00183-6](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(00)00183-6).
 13. *Nasrabadi H., Hoteit H., Firoozabadi A.* An analysis of species separation in thermogravitational column filled with porous media // *Transp. Porous. Med.* 2007. Vol. 67. P. 473-486. <https://doi.org/10.1007/s11242-006-9037-8>.
 14. *Larabi M.A., Mutschler D., Mojtabi A.* Thermal gravitational separation of ternary mixture n-dodecane/isobutylbenzene/tetralin components in a porous medium // *J. Chem. Phys.* 2016. Vol. 144. 244902. <https://doi.org/10.1063/1.4954244>.
 15. *Abahri O., Sadaoui D., Mansouri K., Mojtabi A., Mojtabi M.C.* Thermogravitational separation in horizontal annular porous cell // *Mechanics & Industry.* 2017. Vol. 18. 106. <https://doi.org/10.1051/meca/2015115>.
 16. *Nield D.A., Bejan A.* Convection in porous media. Springer, 2013. 778 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-5541-7>.
 17. *Рыжков И.И.* Термодиффузия в смесях: уравнения, симметрии, решения и их устойчивость. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2013. 215 с.
 18. *Lyubimova T., Zubova N.* Onset and nonlinear regimes of ternary mixture convection in a square cavity // *Eur. Phys. J. E.* 2015. Vol. 38. 19. <https://doi.org/10.1140/epje/i2015-15019-2>.
 19. *Ghorayeb K., Firoozabadi A.* Modeling multicomponent diffusions and convection in porous media // *SPE J.* 2000. Vol. 5. P. 158-171. <https://doi.org/10.2118/62168-PA>.
 20. *De Paoli M., Zonta F., Soldati A.* Dissolution in anisotropic porous media: Modelling convection regimes from onset to shutdown // *Phys. Fluid.* 2017. Vol. 29. 026601. <https://doi.org/10.1063/1.4975393>.
 21. *Nield D.A., Kuznetsov A.V.* The onset of convection in an anisotropic heterogeneous porous medium: A new hydrodynamic boundary condition // *Transp. Porous Med.* 2019. Vol. 127. P. 549-558. <https://doi.org/10.1007/s11242-018-1210-3>.

Стратифицированные течения в неоднородном поле силы тяжести, обусловленные теплообменом

Л. Х. Ингель^{a,b}, А. А. Макоско^b

^aФГБУ «НПО «Тайфун», 249038, г. Обнинск Калужской обл., ул. Победы, 4
email: lev.ingel@gmail.com

^bИнститут физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН, 119017, Москва,
Пыжевский пер., 3

Идеальная жидкая (газообразная) среда в неоднородном поле силы тяжести может, как известно, находиться в статическом состоянии, в котором изоповерхности плотности и давления совпадают с эквипотенциальными поверхностями. Поэтому распространено мнение, что неоднородности силы тяжести не приводят к возникновению течений в атмосфере. В работе теоретически показано, что вертикальный теплообмен в слое среды, находящемся в неоднородном поле силы тяжести, может нарушать состояние гидростатического равновесия и приводить к генерации вихревых течений. На основе линейной стационарной гидродинамической модели, учитывающей планетарное вращение, сделаны оценки амплитуды возмущений скорости. Величина вихревой составляющей скорости может достигать значений порядка произведения частоты плавучести и амплитуды отклонений геоида. Получены аналитические выражения для профилей температурных возмущений и амплитуд отклонений вертикальных потоков тепла на поверхности. В высокоаномальных регионах амплитуды отклонений потоков тепла, согласно полученным оценкам, могут достигать и превышать 1 Вт/м^2 , что дает основания к учету неоднородностей поля силы тяжести в климатических расчетах и численных моделях атмосферы.

Ключевые слова: неоднородности поля силы тяжести; диссипативные факторы; линейные возмущения; аналитическая модель; течения; теплообмен; атмосфера; климат

Stratified flows in an inhomogeneous gravity field due to heat exchange

L. Kh. Ingel^{a,b}, A. A. Makosko^b

^aResearch and Production Association «Typhoon», Pobedy St. 4, 249038 Obninsk, Kaluga Reg.

email: lev.ingel@gmail.com

^bObukhov Institute of Atmospheric Physics, Russian Academy of Sciences,
Pyzhevskii per. 3, 119017, Moscow

An ideal liquid (gaseous) medium in an inhomogeneous gravity field can, as is known, be in a static state, in which the isosurfaces of density and pressure coincide with equipotential surfaces. Therefore, it is widely believed that inhomogeneities in the force of gravity do not lead to the occurrence of flows in the atmosphere. It is theoretically shown in the work that vertical heat transfer in a

medium layer located in an inhomogeneous gravity field can violate the state of hydrostatic equilibrium and lead to the generation of vortex flows. On the basis of a linear stationary hydrodynamic model that takes into account planetary rotation, estimates of the amplitude of velocity perturbations are made. The value of the vortex component of the velocity can reach values of the order of the product of the buoyancy frequency and the amplitude of the geoid deviations. Analytical expressions are obtained for the profiles of temperature perturbations and amplitudes of deviations of vertical heat fluxes on the surface.

Keywords: inhomogeneities of the gravity field; dissipative factors; linear perturbations; analytical model; currents; heat exchange; atmosphere; climate

1. Введение

В современных моделях геофизической гидродинамики гравитационное поле обычно считается однородным и описывается одним параметром g . Но, как известно, на среднее гравитационное поле у поверхности Земли накладывается широкий спектр неоднородностей (аномалий) гравитационного поля. Это связано, прежде всего, с неоднородностями распределения массы в земной коре. Амплитуды вариаций гравитационного поля, конечно, очень малы по сравнению со средним значением g . Но существенно, что при наличии таких неоднородностей появляется составляющая силы тяжести, тангенциальная по отношению к общему земному эллипсоиду. В плоских мезомасштабных моделях, в которых используются декартовы координаты, это означает необходимость учета дополнительных объемных неоднородных сил с горизонтальной составляющей. К таким составляющим динамика атмосферы и водоемов весьма чувствительна. В высокоаномальных регионах тангенциальные («горизонтальные») составляющие силы тяжести на масштабах порядка 100 км могут превышать значения 100 мГал. Тем самым, в уравнениях динамики атмосферы они могут быть сравнимыми по порядку величины, например, с горизонтальными силами градиента давления в циклонах умеренных широт и другими слагаемыми, необходимость учета которых не вызывает сомнений. По меньшей мере, начиная с 1970-х годов, предположения о возможности существенного влияния неоднородностей гравитационного поля на динамику тех или иных атмосферных процессов периодически обсуждались в геофизической литературе.

Но известна теорема, согласно которой в жидкой (газообразной) среде в состоянии покоя изобары и изопикны (поверхности равной плотности) должны совпадать с эквипотенциальными поверхностями. Если изобары совпадают с поверхностями равного потенциала силы тяжести, то это означает, что сила градиента давления в каждой точке и в каждом направлении компенсирует силу тяжести. Поэтому существует статическое решение. В этой связи распространено мнение, что неоднородности поля силы тяжести (НПСТ) лишь несколько «деформируют», «искривляют» состояние гидростатического равновесия, но не влияют на поле движения.

Авторы обратили внимание на то, что упомянутое гидростатическое равновесие может заметно нарушаться при учете неидеальности среды. Прежде всего, вследствие теплообмена, вблизи нижней границы (подстилающей поверхности) изотермы, изопикны и изобары будут испытывать влияние этой границы и, вообще говоря, не будут совпадать с поверхностями равного потенциала. Тем самым, нарушается баланс между силой тяжести и силой барического градиента и возникают течения, которые в линейном приближении теоретически исследованы в работе. Кроме того, наличие неоднородностей поля силы тяжести, вообще говоря, влияет на вертикальные

градиенты температуры и диффузионные потоки тепла у нижней границы стратифицированной среды. В заключительной части статьи обсуждаются возможные климатические эффекты этих вариаций теплообмена атмосферы с подстилающей поверхностью.

2. Постановка задачи

Математическая задача в ряде отношений аналогична известным исследованиям течений, возникающих в стратифицированной среде над неоднородно нагретой горизонтальной поверхностью (см., например, [1] и библиографию в этой книге). Но в последних возмущения в среде связаны с неоднородными краевыми условиями на нижней границе, а в настоящем случае эти условия могут быть однородными, но неоднородна система уравнений гидротермодинамики – в ней присутствуют дополнительные горизонтально-неоднородные силы, связанные с пространственной неоднородностью поля силы тяжести.

Ограничиваемся рассмотрением двумерной стационарной задачи, аналогичной работам [2, 3], в которых, однако, анализируются только динамические возмущения. Для обобщения стандартных уравнений динамики с учетом неоднородностей поля силы тяжести, введем в эти уравнения дополнительные силы (ускорения) $g_x(x,z)$, $g_z(x,z)$ – горизонтальную и вертикальную составляющие отклонений силы тяжести (помимо обычно рассматриваемой постоянной силы тяжести, обозначаемой через g) [2, 3]. Из свойств гравитационного потенциала следует соотношение $\partial g_x / \partial z = \partial g_z / \partial x$. Соответствующая линеаризованная система уравнений гидротермодинамики для двумерной стационарной задачи в приближении Буссинеска имеет вид [2, 3]:

$$0 = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x} + f\mathbf{v} + \nu \Delta_2 u + g_x, \quad 0 = -fu + \nu \Delta_2 v, \quad \rho' = -\bar{\rho} \alpha \theta, \quad (1)$$

$$0 = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial z} + \nu \Delta_2 w - g \frac{\rho'}{\bar{\rho}} + g_z, \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad \gamma w = \kappa \Delta_2 \theta. \quad (2)$$

Здесь u, v, w – составляющие возмущения поля скорости вдоль горизонтальных осей x, y и вертикальной оси z соответственно; p', ρ' – возмущения давления и плотности соответственно; f – параметр Кориолиса; Δ_2 – символ двумерного лапласиана; θ – возмущение потенциальной температуры; $\gamma > 0$ – фоновый вертикальный градиент потенциальной температуры (предполагается устойчивая фоновая стратификация плотности); α – коэффициент теплового расширения; коэффициенты обмена κ и ν предполагаются постоянными.

На нижней горизонтальной границе (подстилающей поверхности) предполагается выполнение условий непротекания и прилипания, а также фиксированной температуры (отсутствия температурных возмущений):

$$u = v = w = 0, \quad \theta = 0 \quad \text{при} \quad z = 0 \quad (3)$$

Вдали от поверхности предполагается выход на статический режим, существующий, согласно [4], при отсутствии теплообмена, т.е., без учета влияния подстилающей поверхности (горизонтальный теплообмен в рассматриваемой геометрии задачи незначителен). Последнее означает, что изобары, изопикны и изотермы вдали от нижней границы совпадают с эквипотенциальными поверхностями, а возмущения скорости затухают. Обозначим через Φ и η соответственно отклонения потенциала силы тяжести и вертикальные отклонения эквипотенциальных

поверхностей, связанные с неоднородностями поля силы тяжести. По определению, $\eta = -\Phi/g = \int g_x dx/g$, где нижний предел интегрирования – «отсчетная» точка, в которой упомянутые отклонения отсутствуют. Соответственно, верхнее граничное условие для температурного возмущения имеет вид:

$$\theta \rightarrow -\gamma\eta = -\gamma \int g_x dx/g \quad \text{при} \quad z \rightarrow 0. \quad (4)$$

3. Решение

Исключая из системы уравнений все неизвестные кроме W , получаем уравнение

$$\Delta_2^3 w + \frac{N^2}{\kappa\nu} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \left(\frac{f}{\nu}\right)^2 \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = 0, \quad (5)$$

где $N = (\alpha g \gamma)^{1/2}$ – частота плавучести (частота Брента-Вяйсяля).

Удобно анализировать модель с гармонической зависимостью неоднородностей поля силы тяжести от горизонтальной координаты:

$$g_x = G \exp(-kz) \cos kx, \quad g_z = -G \exp(-kz) \sin kx, \quad (6)$$

где G – амплитуда, k^{-1} – пространственный масштаб неоднородности соответственно. В этом случае решение также ищем в виде горизонтальной гармоники:

$$u(x, z) = U(z) \cos kx, \quad w(x, z) = W(z) \sin kx, \quad \text{и т. д.} \quad (7)$$

Уравнение (5) принимает вид

$$\left(\frac{d^2}{dZ^2} - 1\right)^3 W = -\text{Ta} \frac{d^2}{dZ^2} W + RW, \quad R = \frac{N^2}{\kappa\nu k^4}, \quad \text{Ta} = \frac{f^2}{\nu^2 k^4}. \quad (8)$$

Здесь введены безразмерная переменная $Z = kz$ и безразмерные параметры R , Ta , являющиеся некоторыми аналогами чисел Рэлея и Тейлора.

Решение последнего уравнения стандартным образом ищем в виде линейной комбинации экспонент типа $\exp(\sigma kz)$. Характеристическое уравнение имеет вид

$$(\sigma^2 - 1)^3 + \text{Ta}\sigma^2 - R = 0. \quad (9)$$

Решение для вертикальной скорости представляет собой линейную комбинацию трёх экспонент

$$w(x, z) = \sum_{j=1}^3 C_j \exp(k\sigma_j z) \sin kx, \quad u(x, z) = -\sum_{j=1}^3 C_j \sigma_j \exp(k\sigma_j z) \sin kx, \quad (10)$$

где C_j – постоянные интегрирования; с учётом затухания при $z \rightarrow \infty$, из шести корней σ_j отобраны три с отрицательными действительными частями (здесь предполагается, что эти корни различны); во втором равенстве учтено уравнение неразрывности.

В выражениях для возмущений температуры, давления и вихревой составляющей горизонтальной скорости, как нетрудно убедиться, могут присутствовать также слагаемые с четвертой экспонентой $\exp(-kz)$. В частности, выражение для температурного возмущения можно представить в виде

$$\theta(x, z) = \left[C_4 \exp(-kz) + \frac{\gamma}{\kappa k^2} \sum_{j=1}^3 \frac{C_j}{\sigma_j^2 - 1} \exp(k\sigma_j z) \right] \sin kx. \quad (11)$$

В общем случае решение весьма громоздко. Но полезно иметь в виду, что значения параметров R , Ta в рассматриваемых условиях обычно весьма велики, так что имеет смысл проанализировать некоторые относительно простые предельные случаи. Например, если $\kappa = \nu = 10 \text{ м}^2/\text{с}$ (эффективные коэффициенты турбулентного обмена), $k = 5 \cdot 10^{-6} \text{ м}^{-1}$ (что соответствует длине горизонтальной полуволны около 600 км), $\gamma = 6 \cdot 10^{-3} \text{ К/м}$, $f = 7 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$, то $N \approx 1.4 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$, $R \approx 3 \cdot 10^{15}$, $Ta \approx 10^{11}$. Корни характеристического уравнения σ_j в таких ситуациях велики по абсолютной величине по сравнению с единицей, так что в формулах (9) и (11) можно пренебрегать единицей по сравнению с квадратами этих корней (это соответствует пренебрежимо малой роли горизонтального обмена). Согласно приведенной оценке, ограничимся значениями рассматриваемых параметров, для которых выполняются неравенства

$$1 \ll R^{2/3} \ll Ta \ll R. \quad (12)$$

Три корня характеристического уравнения, фигурирующие в (10), (11), выражаются в этом случае следующим образом:

$$\sigma_1 \approx -\left(\frac{R}{Ta}\right)^{1/2} = -\left(\frac{\nu}{\kappa}\right)^{1/2} \frac{N}{f}, \quad \sigma_{2,3} \approx -(1 \pm i) \left(\frac{Ta}{4}\right)^{1/4}, \quad (13)$$

причем

$$|\sigma_{2,3}| = Ta^{1/4} \gg |\sigma_1| \gg 1. \quad (14)$$

В выражении (11) первая из экспонент убывает очень медленно по сравнению с остальными тремя. С учетом этого, из краевого условия (4), в сочетании с (7), следует

$$C_4 \approx -\frac{\gamma G}{\kappa g}. \quad (15)$$

Остальные коэффициенты C_j находятся из системы трех уравнений, вытекающих из краевых условий (3):

$$\sum_{j=1}^3 C_j = 0, \quad \sum_{j=1}^3 \sigma_j C_j = 0, \quad \sum_{j=1}^3 C_j / \sigma_j^2 \approx \frac{\kappa k G}{g}.$$

Решение имеет вид

$$C_1 \approx \kappa k \frac{G}{g} \sigma_1^2 \approx \kappa k \frac{G}{g} \frac{R}{Ta} = \nu k \frac{G}{g} \left(\frac{N}{f}\right)^2,$$

$$C_{2,3} \approx -\kappa k \frac{G}{g} \frac{\sigma_1^2 \sigma_{3,2}}{\sigma_{3,2} - \sigma_{2,3}} = -\nu k \frac{G}{g} \left(\frac{N}{f}\right)^2 \frac{\sigma_{3,2}}{\sigma_{3,2} - \sigma_{2,3}}.$$

Отсюда получаем приближенное решение для w , u , θ :

$$w \approx \nu k \frac{G}{g} \left(\frac{N}{f}\right)^2 \left[\exp\left(-\frac{z}{h_B}\right) - 2^{1/2} \exp\left(-\frac{z}{h_E}\right) \cos\left(\frac{z}{h_E} - \frac{\pi}{4}\right) \right] \sin kx,$$

$$\begin{aligned}
u &\approx \nu k \left(\frac{\nu}{\kappa} \right)^{1/2} \frac{G}{g} \left(\frac{N}{f} \right)^3 \times \\
&\times \left[-\exp\left(-\frac{z}{h_B}\right) + \left(4 \frac{\text{Ta}^3}{R^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{z}{h_E}\right) \sin\left(\frac{z}{h_E}\right) \right] \cos kx, \\
\theta &\approx -\frac{\gamma G}{kg} \left[\exp(-kz) - \exp\left(-\frac{z}{h_B}\right) \right] \sin kx.
\end{aligned} \tag{16}$$

Здесь введены масштабы длины

$$h_B = (k\sigma_1)^{-1} = \frac{1}{k} \left(\frac{\text{Ta}}{R} \right)^{1/2} = \left(\frac{\kappa}{\nu} \right)^{1/2} \frac{f}{kN}, \quad h_E = \frac{1}{k} \left(\frac{\text{Ta}}{4} \right)^{-1/4} = \left(\frac{2\nu}{f} \right)^{1/2}. \tag{17}$$

Первый из них – толщина слоя, в котором число Бургера [5] порядка единицы (следовательно, степень влияния вращения и стратификации примерно одинаковы), второй – экмановский масштаб [5, 6].

Характерная особенность настоящей задачи, учитывающей эффекты планетарного вращения – возникновение вихревых возмущений под влиянием НПСТ. Приближенное решение для вихревой составляющей скорости имеет вид

$$v \approx \left(\frac{\kappa}{\nu} \right)^{1/2} \Xi \left[(1 - \delta) \exp(-kz) - \exp\left(-\frac{z}{h_B}\right) + \delta \exp\left(-\frac{z}{h_E}\right) \cos\left(\frac{z}{h_E}\right) \right] \cos kx,$$

где введены безразмерный параметр δ и масштаб скорости Ξ :

$$\delta = \frac{(2R)^{1/2}}{\text{Ta}^{3/4}} = \frac{N\nu k}{(\kappa f^3 / 2)^{1/2}} \ll 1, \quad \Xi = \frac{N}{k} \frac{G}{g} \sim N\eta.$$

4. Анализ решения

Возмущения поля скорости подробно проанализированы в [3]. Как нетрудно убедиться, амплитуда возмущений горизонтальных составляющих может по порядку величины достигать произведения амплитуды отклонения геоида и частоты плавучести. Ниже остановимся на температурных возмущениях и отклонениях вертикального потока тепла.

При рассмотренных выше значениях параметров, вторая экспонента в (16) убывает с высотой примерно в 200 раз быстрее, чем первая. При $z \gg h_B$ существенна лишь первая экспонента – температурные возмущения на достаточно высоких уровнях определяются лишь деформациями изотерм, которые следуют поверхностям равного потенциала. Но ниже имеется относительно тонкий переходный слой, где сказывается температурное влияние подстилающей поверхности. Амплитуда обусловленного НПСТ возмущения потока тепла у этой поверхности:

$$\left| c_p \bar{\rho} \kappa \frac{d\theta}{dz} \right|_{z=0} \approx c_p \bar{\rho} \kappa \gamma \frac{G}{g} \left(\frac{R}{\text{Ta}} \right)^{1/2} = c_p \bar{\rho} (\nu \kappa)^{1/2} \gamma \frac{GN}{gf}, \tag{18}$$

где c_p – теплоемкость воздуха. Помимо амплитуды неоднородности поля силы тяжести, последнее выражение особенно сильно зависит от фоновой температурной

стратификации (от γ зависит и N). Это и понятно, поскольку связанное с НСПТ вертикальное смещение изотерм особенно сильно сказывается при интенсивной стратификации. При $G/g = 10^{-4}$ для приведенных выше значений остальных параметров выражение (18) превышает 1 Вт/м^2 . Это значение может быть еще больше, с учетом того, что в приземном и пограничном слоях фоновый градиент температуры γ может быть значительно больше, чем в приведенной выше оценке.

5. Особый случай низких широт

Низким широтам отвечают относительно малые значения числа Тэйлора, так что некоторые из неравенств (12) могут не выполняться. Поэтому представляет интерес аналогичная задача без учета кориолисовых сил. Можно показать, что в этом случае приближенное решение для температурного возмущения имеет вид

$$\theta(x, z) \approx \frac{\gamma G}{kg} \left\{ -\exp(-kz) + \frac{1}{2} \left[\exp(-R^{1/6} kz) + \left(\cos\left(\frac{3^{1/2}}{2} R^{1/6} kz\right) + \frac{1}{3^{1/2}} \sin\left(\frac{3^{1/2}}{2} R^{1/6} kz\right) \right) \exp\left(-\frac{1}{2} R^{1/6} kz\right) \right] \right\} \sin kx. \quad (19)$$

Если в предыдущем решении толщина возникающего у поверхности пограничного слоя была порядка h_B , то в данном случае она порядка $R^{-1/6} k^{-1}$. Это означает существование у поверхности дополнительных потоков тепла амплитудой порядка

$$\left| c_p \bar{\rho} \kappa \frac{d\theta}{dz} \right|_{z=0} \sim c_p \bar{\rho} \kappa k R^{1/6} \theta \sim c_p \bar{\rho} \kappa \frac{\gamma G}{g} R^{1/6} = c_p \bar{\rho} \frac{G}{g} \left(\frac{\alpha g \kappa^5 \gamma^7}{\nu k^4} \right)^{1/6}.$$

Если $N = 10^{-2} \text{ с}^{-1}$, $\kappa = \nu = 3 \text{ м}^2/\text{с}$, $k = 2 \cdot 10^{-5} \text{ м}^{-1}$ (что соответствует длине горизонтальной полуволны около 150 км), то $R^{1/6} \approx 200$. Толщина возникающего пограничного слоя $R^{-1/6} k^{-1}$ порядка первых сотен метров. При $G/g = 10^{-4}$ амплитуда дополнительных потоков тепла может достигать и превышать 1 Вт/м^2 .

6. Заключение

Рассмотренная модель прозрачно демонстрирует, что неоднородности поля силы тяжести, деформируя поля давления, плотности и температуры воздуха, влияют как на поле движения, так и на температурный режим пограничного слоя атмосферы, на теплообмен с подстилающей поверхностью. Полученные амплитуды возмущений потоков тепла могут иметь определенное значение при анализе факторов, влияющих на климат. Если учесть, что рассматриваемые здесь эффекты НПСТ действуют постоянно и на больших территориях, а также то обстоятельство, что в используемых ИРСС (Межправительственная группа экспертов по изменению климата) базовых климатических сценариях величины дополнительного потока тепла (радиационного форсинга) составляют от 2.6 до 8.5 Вт/м² [7], возникает основание к учету неоднородностей поля силы тяжести в климатических расчетах и численных моделях атмосферы.

Рассмотренная выше теоретическая схема содержит ряд допущений, которые могут ограничивать пределы применимости результатов. В частности, предполагались постоянные значения коэффициентов турбулентного обмена. Отказ от приближения Буссинеска, скорее всего, не изменит порядков амплитуд, как и рассмотрение трехмерных возмущений. Температура поверхности предполагалась фиксированной. Не представляет принципиальной трудности рассмотрение задачи с более общими краевыми условиями 3-го рода. Представляется, что в любом случае рассмотренная аналитическая модель является необходимым шагом для понимания механизмов влияния упомянутых неоднородностей на гидротермодинамику атмосферы и оценки амплитуд

Список литературы

1. *Lin Y.-L.* Mesoscale Dynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. 646 p.
2. *Ingel L.Kh., Makosko A.A.* On one mechanism of gravity field inhomogeneities influence on atmosphere dynamics // *Tech. Physics*. 2017. V. 62. N 9. P. 1322–1326. DOI: 10.1134/S1063784217090092.
3. *Ingel L.Kh., Makosko A.A.* Generation of the vortex movement in the atmosphere due to gravity inhomogeneities // *Izv. Atmos. Ocean Phys*. 2018. V. 54. N 6. P. 536–541. DOI: 10.1134/S0001433818060087.
4. *Кочин Н. Е.* Изменение температуры и давления с высотой в свободной атмосфере. Собр. соч. Т. 1. М.-Л.: Изд. АН СССР, 1949. С. 530-591.
5. *Педлоски Дж.* Геофизическая гидродинамика.- М.: Мир, 1984. Т. 1. 398 с.
6. *Гилл А. Е.* Динамика атмосферы и океана. Т. 1. - М.: Мир, 1986. 397 с.
7. О новых сценариях анализа выбросов, изменения климата, воздействий и стратегий реагирования. Техническое резюме. Доклад совещания экспертов МГЭИК 19-21 сентября 2007 года. Нордвейкерхаут, Нидерланды.
<https://archive.ipcc.ch/pdf/supporting-material/expert-meeting-ts-scenarios-ru.pdf>.

О динамике инерционных частиц в смерчах

Л. Х. Ингель^{a,b}

^aФГБУ «НПО «Тайфун», 249038, г. Обнинск Калужской обл., ул. Победы, 4
email: lev.ingel@gmail.com

^bИнститут физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН, 119017, Москва,
Пыжевский пер., 3

Аналитически исследуется движение инерционных частиц в интенсивных вихрях с вертикальной осью в поле силы тяжести. В этой задаче существен нелинейный характер гидродинамического сопротивления – его зависимость от модуля скорости движения частицы относительно среды. Разные составляющие движения взаимодействуют между собой, поскольку каждая из них влияет на коэффициент сопротивления. Найден эффективный способ приближенного аналитического решения задачи. Установлен ряд общих закономерностей динамики частиц. Сравнение результатов с имеющимися в литературе отдельными численными расчетами подтверждает адекватность модели при значениях чисел Рейнольдса до порядка 10^3 . В некоторых отношениях, удовлетворительное согласие можно констатировать и для более массивных частиц. Оценена дальность переноса тяжелых частиц за пределы области интенсивных ветров. Адекватное описание движения частиц может иметь значение для правильной интерпретации результатов радарного зондирования смерчей, для оценки связанных с ними опасностей и, возможно, для моделирования динамики самих смерчей.

Ключевые слова: интенсивные атмосферные вихри; массивные частицы; перенос; центрифугирование; нелинейное сопротивление; аналитическая модель

On the dynamics of inertial particles in tornadoes

L. Kh. Ingel^{a,b}

^aResearch and Production Association «Typhoon», Pobedy St. 4, 249038 Obninsk, Kaluga Reg.

email: lev.ingel@gmail.com

^bObukhov Institute of Atmospheric Physics, Russian Academy of Sciences,
Pyzhevskii per. 3, 119017, Moscow

The movement of inertial particles in intense vortices with a vertical axis in a gravity field is analyzed analytically. In this problem, the nonlinear nature of the hydrodynamic resistance is essential, i.e. its dependence on the modulus of the particle velocity relative to the medium. The different components of the movement interact with each other, since each of them affects the coefficient of resistance. An effective way of approximate analytical solution of the problem is found. A number of general regularities of particle dynamics have been established. Comparison of the results with individual numerical calculations available in the literature confirms the adequacy of the model for Reynolds numbers up to about 10^3 . In some respects, satisfactory agreement can be stated

for more massive particles as well. The range of transport of heavy particles outside the region of intense winds has been estimated. An adequate description of the motion of particles can be important for the correct interpretation of the results of radar sounding of tornadoes, for assessing the associated dangers, and, possibly, for modeling the dynamics of the tornadoes themselves.

Keywords: intense atmospheric vortices; massive particles; transfer; centrifuging; nonlinear resistance; analytical model

1. Введение

В литературе по интенсивным атмосферным вихрям (торнадо, «пыльным дьяволам», «водяным смерчам») в последние годы все больше внимания уделяется движению в них тяжелых частиц (гидрометеоры, брызги, поднятые в воздух частицы почвы, обломки, связанные с разрушениями – в англоязычной литературе в этой связи широко используется термин «debris»). Это связано с рядом важных приложений.

В работе [1] обращается внимание на то, что доплеровские радары фактически регистрируют не движение воздуха, а движение тяжелых частиц, которое, вообще говоря, отличается от движений воздуха. Поэтому приобретает значение вопрос о движении тяжелых частиц в смерче в условиях сильного «центрифугирования» (англ. centrifuging). Этот вопрос важен и для ряда других приложений. Утверждается, что наличие некоторого количества тяжелых частиц в смерче может заметно влиять на его динамику [2-4]. Согласно опубликованным оценкам, масса поднятой и переносимой торнадо тяжелой примеси в некоторых случаях может достигать и превышать 107 кг [2, 3]. Наличие в воздухе тяжелых частиц/предметов – фактор, усиливающий ветровой напор на сооружения и другие опасности, связанные со смерчами [5, 6]. Движение частиц и их пространственное распределение несут много информации и в оптическом диапазоне. Это используется в частности при изучении «пыльных дьяволов» [7, 8].

Видимо, впервые возможные проявления механизма центрифугирования частиц в интенсивных атмосферных вихрях начали обсуждаться в работе [9]. Речь шла, прежде всего, о наблюдаемых полых структурах водяных смерчей (англ. waterspouts), но упоминалась также и возможность подобных проявлений и в более интенсивных торнадо. Эта работа в большой степени опиралась на лабораторные эксперименты.

В зарубежной литературе нередко цитируется работа [7], в которой выполнены весьма обстоятельные расчеты, относящиеся, прежде всего, к центрифугированию пыли в «пыльных дьяволах». Автор поясняет, что прежде чем рассматривать движение тяжелой примеси в торнадо, целесообразно выполнить расчеты для более простого случая пыльных вихрей, поскольку в торнадо придется принимать во внимание фазовые переходы и ряд других обстоятельств. Но в [7], как и в [9] рассмотрение ограничивается достаточно малыми частицами, сопротивление движению которых описывается линейным законом Стокса – коэффициент сопротивления не зависит от скорости движения относительно среды. Весьма содержательная теоретическая работа [10] также ограничивается динамикой концентрации «стоксовых» частиц с размерами не более первых десятков микрон. Помимо этих упрощений, упомянутые теоретические работы ограничиваются рассмотрением простейших модельных осесимметричных вихрей, не зависящих от вертикальной координаты z . Более сложные задачи обычно требуют уже численных расчетов [1, 11, 12], правда, в нашей недавней работе [13] удалось аналитическими методами продвинуться в более сложной задаче о движении частиц больших размеров.

Но большинство публикаций пока относятся к анализу натуральных данных, результатов радиолокационного зондирования торнадо. Весьма подробные обзоры содержатся в [14, 15]. Эта область исследований активно развивается – облака

переносимых смерчами частиц несут много информации, которую все в большей степени удастся использовать. Появились даже аббревиатура TDS (Tornado Debris Signature) и термин «debris ball».

В [13] предложен метод приближенного аналитического решения задачи о движении частиц при нелинейном законе сопротивления до значений числа Рейнольдса порядка 10^3 (для капель воды размерами до порядка 1 мм). В период выполнения [13] автору не было известно о работе [1], в которой численно исследовалась аналогичная задача для значительно более широкого диапазона чисел Рейнольдса и с более точными уравнениями и законом сопротивления, но лишь для некоторых конкретных значений параметров и двух типов модельных вихрей. В этой ситуации имеет смысл сравнить результаты двух упомянутых подходов. Удовлетворительное согласие позволило бы объединить достоинства этих подходов: указать общие закономерности динамики частиц для широкого класса вихревых движений, не ограничиваясь представленными в [1] отдельными конкретными расчетами. Этому и посвящена настоящая работа. Кроме того, сделаны оценки дальности переноса тяжелых частиц за пределы области интенсивных ветров (за счет инерции). Это также представляется актуальным в связи с отмеченными в литературе фактами выпадения переносимых частиц вне упомянутой области.

2. Аналитическая модель

Три проекции уравнения вязкого движения частицы в полярной системе координат можно записать в виде [13]:

$$\frac{du}{dt} = \frac{v^2}{r} - cu, \quad (1)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{uv}{r} - c[v - V(r)], \quad (2)$$

$$\frac{dw}{dt} = -g - cw. \quad (3)$$

Здесь t – время, g – ускорение свободного падения; u , v , w – радиальная, тангенциальная и вертикальная составляющие скорости частицы (вертикальная ось направлена против силы тяжести); c – коэффициент сопротивления; расстояние r от оси можно рассматривать как лагранжеву радиальную координату частицы:

$$u = \frac{dr}{dt}. \quad (4)$$

Распределение тангенциальной скорости в вихре $V(r)$, как уже упоминалось, считаем заданным (для определенности ограничиваемся случаями, когда значения V и v не отрицательны).

Аналогично [13], предполагаем, что коэффициент сопротивления c пропорционален модулю скорости частицы относительно среды $|\mathbf{v}| = [u^2 + (v - V)^2 + w^2]^{1/2}$. Но принятый в [13] (заимствованный из некоторых публикаций) коэффициент пропорциональности, как показали дальнейшие оценки, приводит к довольно большим численным погрешностям. К более точным оценкам приводит модель [1], которой ниже будем пользоваться:

$$c = |\mathbf{v}|/l, \quad l = W^2/g, \quad (5)$$

где W – установившаяся скорость оседания рассматриваемой частицы (предполагается известной).

Если рассматривать случай относительно небольших частиц, для которых локальные ускорения малы по сравнению с силами сопротивления, тяжести и центробежной силой, то производными по времени в уравнениях (1), (3) можно пренебречь. Эти уравнения становятся алгебраическими, и задача существенно упрощается. Аналогично [13], нетрудно получить приближенное решение:

$$u \approx W \frac{\chi^{1/2}(r)}{(1 + \chi(r))^{1/4}}, \quad v \approx V(r), \quad w \approx -W \frac{1}{(1 + \chi(r))^{1/4}}. \quad (5)$$

$$c \approx \frac{g}{W} (1 + \chi(r))^{1/4}, \quad \chi(r) \equiv \left[\frac{V^2(r)}{gr} \right]^2, \quad (6)$$

причем

$$|v - V| \ll |u| \ll |V|. \quad (7)$$

Условие применимости этого приближения – малость времени вязкой релаксации движения частицы c^{-1} по сравнению со временем оборота вихря. Если, например, характерный радиус вихря порядка 40 м, максимальная скорость вихревого движения 50 м/с, то должно выполняться условие $W \ll 5$ м/с. Это означает, что приближение справедливо для гидрометеоров, размер которых не превышает по порядку величины 1 мм.

3. Сравнение с численными расчетами

Представляет интерес сравнить аналитические результаты с численными решениями для поля скорости частиц, полученными в [1] без использования ряда принятых в настоящей работе упрощений.

В [1] рассчитаны примеры движения различных категорий частиц для двух моделей идеализированных вихрей. Одна из них – вихрь Рэнкина (Rankine vortex):

$$V(r) = \begin{cases} V_* r / R, & r \leq R; \\ V_* R / r & r \geq R. \end{cases}$$

Другая модель – вихрь Фидлера (Fiedler vortex):

$$V(r) = \frac{2V_* R r}{R^2 + r^2}.$$

Здесь R – радиус максимальной скорости, V_* – ее значение. На рис. 1 представлены радиальные профили скорости $V(r)$ для численных примеров, наиболее подробно проанализированных в [1].

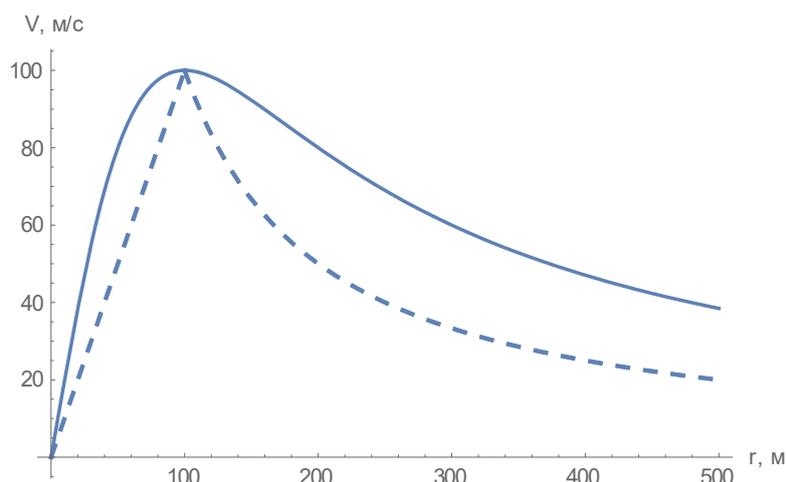


Рис. 1. Примеры радиальных профилей скорости для вихрей Фидлера и Рэнкина (сплошная и штриховая линии соответственно)

В расчетах [1] рассматривается движение в таких вихрях нескольких разных категорий частиц («объектов»). Сюда относятся, в частности:

- 1) небольшие капли дождя (диаметр порядка 0.5 мм) со скоростью оседания $W = 2$ м/с;
- 2) большие капли дождя (диаметр порядка 5 мм) или мелкий град, $W = 10$ м/с;
- 3) большие градины (диаметр порядка 5 см), а также листья фанеры, $W = 20$ м/с;
- 4) большие осколки, сравнимые по порядку величины с размерами кирпичей, $W = 40$ м/с.

В расчетах [1] предполагалось, что в начальный момент времени $t = 0$ рассматриваемые объекты движутся с той же горизонтальной скоростью, что и воздух в вихре, и что они оседают с установившейся скоростью падения. Время вязкой релаксации для рассмотренных категорий частиц, согласно [1], находится в интервале от 0.2 до 4.1 секунд. Отсюда в упомянутой работе сделан вывод, что через несколько десятков секунд движения частиц определяются действующими силами, а не начальными условиями.

На рис. 2 приведены примеры рассчитанных в рамках настоящей модели профилей радиальной и вертикальной составляющих скорости частицы, движущейся в вихрях, представленных на рис. 1 (тангенциальные составляющие скорости частицы, согласно настоящей модели, совпадают с профилями рис. 2). Как нетрудно убедиться, эти кривые очень близки к результатам соответствующих численных расчетов [1]. Видно, что уже относительно небольшие частицы (капли воды радиусом около 0.25 мм) заметно «центрифугируются». Связанное с этим увеличение модуля скорости относительно среды, как отмечалось еще в [1], приводит к возрастанию коэффициента сопротивления и существенному замедлению оседания частиц. Иными словами, разные составляющие движения частиц заметно влияют друг на друга.

В таблице приведены некоторые результаты расчетов в сравнении с [1]. Как и следовало ожидать, для более массивных частиц, параметры которых выходят за рамки принятых в настоящей модели допущений, результаты, вообще говоря, могут сильно отличаться от численной модели [1], свободной от ряда упрощений. Но некоторые результаты удовлетворительно согласуются даже для весьма массивных частиц, на адекватное описание динамики которых, настоящая модель, строго говоря, не могла претендовать. Это, прежде всего, относится к расчетам тангенциального движения, которое представляется особенно важным для регистрации доплеровскими радарными и

в контексте опасностей, связанных со смерчами. Например, для последних двух модельных вихрей таблицы 1 отличие от [1] в расчете максимального значения тангенциальной скорости частицы находится примерно в пределах 20% даже для массивных частиц со скоростью оседания 20 м/с, т. е на порядок больше принятых в настоящей модели ограничений относительно этого параметра. Тем более, удовлетворительное согласие можно нередко констатировать для частиц со скоростью оседания 10 м/с. Следует иметь в виду, что максимумы рассматриваемых радиальных профилей составляющих скорости частиц бывают весьма размытыми (особенно $w(r)$ – кривые бывают близки к «плато»). В таких случаях кривые могут практически мало различаться, несмотря на большие формальные различия положений их максимумов.

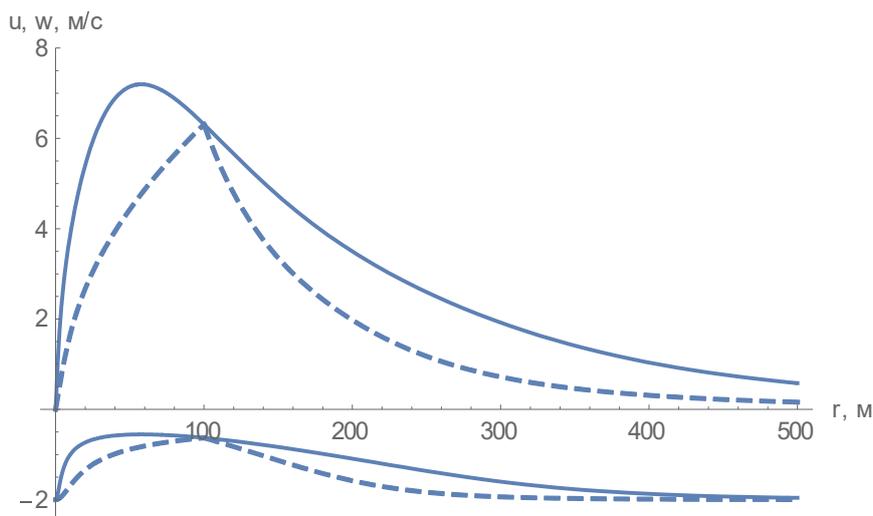


Рис. 2. Радиальные (две верхние кривые) и вертикальные (две нижние кривые) составляющие скорости частиц при $W = 2$ м/с

4. Оценка дальности радиального переноса тяжелых частиц

В литературе отмечается, что выпадение переносимых торнадо тяжелых частиц/предметов бывает заметно и на некотором удалении от области интенсивных ветров [1, 16]. Частицы могут выбрасываться из вихря с достаточно большими радиальными скоростями. Такой перенос, видимо, является дополнительным фактором опасности, который полезно учитывать; кроме того, натурные данные о выпадении переносимого вихрем вещества на его периферии, в принципе, могут содержать дополнительную информацию о его динамике и структуре.

Для оценки дальности такого переноса имеет смысл рассмотреть задачу о движении частицы с заданной начальной скоростью, которая в простейшем случае имеет составляющие только в радиальном и вертикальном направлениях. Вдали от области интенсивных ветров вращение может не играть принципиальной роли, поэтому в рамках грубой модели можно ограничиться двумерной задачей.

Система уравнений, учитывающая нелинейное сопротивление, в этом упрощенном случае имеет вид

Таблица. Максимальные значения трех составляющих скорости переноса различных объектов (частиц) для шести вариантов профиля ветра, соответствующих различным модельным вихрям. В скобках указаны радиусы максимумов скорости. Для сравнения приведены результаты численных расчетов [1] (помечены индексом «[1]»)

| Профиль Ветра | W , м/с | u_{\max} , м/с | $u_{[1]}$, м/с | V_{\max} , м/с | $V_{[1]}$, м/с | W_{\max} , м/с | $W_{[1]}$, м/с |
|---|-----------|------------------|-----------------|------------------|-----------------|------------------|-----------------|
| Fiedler, $R=100$ м, $V_*=100$ м/с | 2 | 7.2 (58 м) | 7.2 (60 м) | 100 (100 м) | 99.6 (100 м) | -0.6 (60 м) | -0.6 (70 м) |
| | 10 | 36.0 (60 м) | 28.3 (90 м) | 100 (100 м) | 91.2 (120 м) | -2.8 (60 м) | -3.2 (80 м) |
| | 20 | 72.0 (60 м) | 38.7 (130 м) | 100 (100 м) | 74.9 (140 м) | -5.5 (60 м) | -8.5 (120 м) |
| Rankine, $R=100$ м, $V_*=100$ м/с | 2 | 6.3 (100 м) | 6.3 (100 м) | 100 (100 м) | 99.3 (100 м) | -0.6 (100 м) | -0.6 (100 м) |
| | 10 | 31.5 (100 м) | 25.8 (110 м) | 100 (100 м) | 86.8 (110 м) | -3.15 (100 м) | -3.7 (110 м) |
| | 20 | 63.0 (100 м) | 35.2 (130 м) | 100 (100 м) | 68.1 (110 м) | -6.3 (100 м) | -10.0 (120 м) |
| Fiedler, $R=100$ м, $V_*=50$ м/с | 2 | 3.5 (60 м) | 3.5 (50 м) | 50 (100 м) | 49.8 (100 м) | -1.1 (60 м) | -1.1 (60 м) |
| | 10 | 17.6 (60 м) | 13.8 (90 м) | 50 (100 м) | 45.9 (120 м) | -5.4 (60 м) | -6.1 (80 м) |
| | 20 | 35.2 (60 м) | 18.9 (120 м) | 50 (100 м) | 38.8 (140 м) | -10.8 (60 м) | -14.7 (100 м) |
| Rankine, $R=100$ м, $V_*=50$ м/с | 2 | 3.05 (100 м) | 3.1 (100 м) | 50 (100 м) | 49.7 (100 м) | -1.2 (100 м) | -1.2 (100 м) |
| | 10 | 15.2 (100 м) | 12.4 (110 м) | 50 (100 м) | 44.0 (110 м) | -6.1 (100 м) | -6.8 (100 м) |
| | 20 | 30.45 (100 м) | 16.9 (120 м) | 50 (100 м) | 35.8 (110 м) | -12.2 (100 м) | -15.9 (110 м) |
| Fiedler, $R=200$ м, $V_*=100$ м/с | 2 | 5.1 (115 м) | 5.1 (120 м) | 100 (200 м) | 99.8 (200 м) | -0.8 (115 м) | -0.8 (130 м) |
| | 10 | 25.3 (115 м) | 22.1 (150 м) | 100 (200 м) | 95.4 (220 м) | -3.9 (115 м) | -4.3 (180 м) |
| | 20 | 50.7 (120 м) | 34.0 (210 м) | 100 (200 м) | 84.8 (260 м) | -7.8 (120 м) | -9.9 (190 м) |
| | 40 | 101.35 (120 м) | 40.9 (300 м) | 100 (200 м) | 65.1 (320 м) | -15.6 (120 м) | -27.1 (260 м) |
| Rankine, $R=200$ м, $V_*=100$ м/с | 2 | 4.5 (200 м) | 4.5 (200 м) | 100 (200 м) | 99.7 (200 м) | -0.9 (200 м) | -0.9 (190 м) |
| | 10 | 22 (200 м) | 19.9 (210 м) | 100 (200 м) | 92.7 (210 м) | -4.4 (200 м) | -4.7 (200 м) |
| | 20 | 44.3 (200 м) | 30.9 (240 м) | 100 (200 м) | 79.0 (220 м) | -8.85 (200 м) | -11.4 (220 м) |
| | 40 | 88.5 (200 м) | 36.4 (290 м) | 100 (200 м) | 58.8 (240 м) | -17.7 (200 м) | -30.0 (230 м) |

$$\frac{du}{dt} = -\frac{g}{W^2} u(u^2 + w^2)^{1/2}, \quad \frac{dw}{dt} = -g - \frac{g}{W^2} w(u^2 + w^2)^{1/2}. \quad (8)$$

Перейдем к безразмерным переменным U , \tilde{W} , $\tilde{\tau}$, нормируя составляющие скорости и время на W и W/g соответственно. Пространственный масштаб перемещения частицы при этом составляет W^2/g . Система уравнений приобретает вид

$$\frac{dU}{d\tilde{\tau}} = -U(U^2 + \tilde{W}^2)^{1/2}, \quad \frac{d\tilde{W}}{d\tilde{\tau}} = -1 - \tilde{W}(U^2 + \tilde{W}^2)^{1/2}. \quad (9)$$

Представляет интерес, прежде всего, предельный случай, когда в начальный момент радиальная скорость частицы много больше вертикальной. В этом случае, в первых уравнениях (8), (9) можно пренебречь вертикальной скоростью, так что

$$dU/d\tilde{\tau} \approx -U^2. \quad (10)$$

Для радиальной скорости и пройденного частицей горизонтального расстояния легко получить приближенное аналитическое решение:

$$u \approx \frac{u_0}{1 + (u_0 g / W^2)t}, \quad \Delta r \approx \frac{W^2}{g} \ln \left[1 + (u_0 g / W^2)t \right]. \quad (11)$$

Может показаться странным, что пройденный путь слабо (лишь логарифмически) зависит от начальной скорости. Это объясняется тем, что с ростом начальной скорости возрастает и сопротивление, так что скорость быстро убывает со временем, и на временах, превышающих W^2 / gu_0 , из (11) следует не зависящее от u_0 выражение $u \approx W^2 / gt$. Поэтому на стадии быстрого торможения (пока радиальная скорость остается много больше вертикальной) пройденный путь не успевает превысить по порядку величины масштаб W^2 / g . Затем сопротивление даже относительно усиливается по сравнению с (10), поскольку в правой части первого уравнения (9) становится заметным и вклад вертикальной скорости в коэффициент сопротивления. После переходного периода, когда обе составляющие скорости вносят в сопротивление заметный вклад, оседание выходит на стационарный режим с $|\tilde{W}| \approx 1$, и решение для радиальной скорости имеет вид:

$$u \approx W \frac{2U_0}{E(\tilde{\tau}) - U_0^2 / E(\tilde{\tau})}, \quad E(\tilde{\tau}) \equiv \left[1 + (1 + U_0^2)^{1/2} \right] \exp(\tilde{\tau}).$$

На этой стадии скорость убывает со временем даже быстрее, чем в (11) – экспоненциально. Таким образом, остается в силе вывод, что пройденный в радиальном направлении путь не может превышать по порядку величины масштаб W^2 / g (даже если радиальное удаление частицы происходит на достаточной высоте и не будет быстро прервано выпадением на подстилающую поверхность).

На рис. 3 приведены примеры результатов численного решения системы (9).

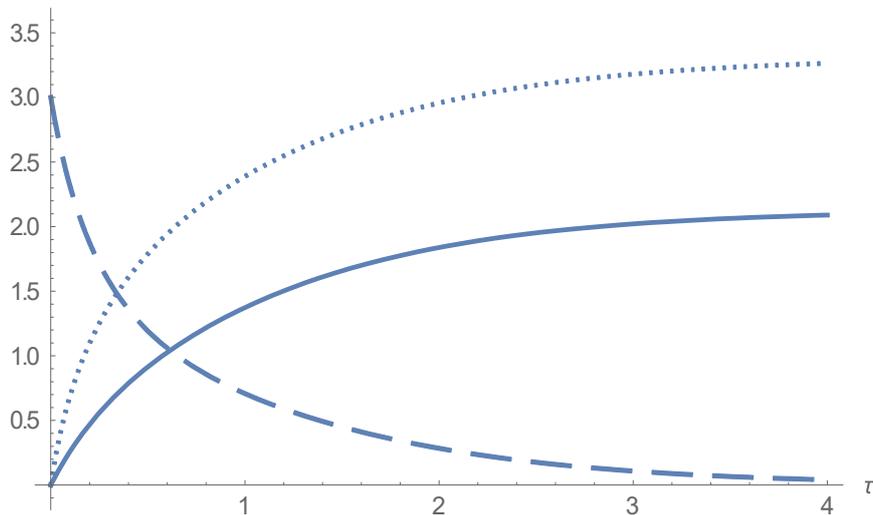


Рис. 3. Безразмерные зависимости от времени радиальной скорости частицы (штриховая линия) и радиального перемещения (сплошная линия) при $|u_0 / W| = 3$. Пунктирная линия – путь, пройденный в радиальном направлении при $|u_0 / W| = 10$

Видно, что радиальное удаление частиц действительно финитно (даже без учета их выпадения) и слабо зависит от начальной радиальной скорости. Даже при ее десятикратном превышении над скоростью стационарного оседания частицы, радиальный перенос лишь примерно в три раза превышает масштаб W^2/g . Например, для больших обломков со скоростью оседания $W = 30$ м/с при $u_0 = 90$ м/с их радиальный перенос, согласно рис. 3, может достигать около $2W^2/g \approx 200$ м.

5. Заключение

Рассмотренная упрощенная аналитическая модель хорошо согласуется с численными расчетами [1] при значениях числа Рейнольдса для частиц до порядка 10^3 (капли воды размерами до порядка миллиметра). Некоторые особенности движения удовлетворительно воспроизводятся и для значительно более массивных частиц. Наличие адекватной аналитической модели способствует пониманию динамики рассматриваемых процессов и позволяет существенно обобщить результаты, содержащиеся в нескольких разрозненных примерах, численно рассчитанных в [1]. Например, в упомянутой работе констатируется, что в вихрях с максимальной скоростью ветра 50 м/с тангенциальные и радиальные скорости движения частиц примерно вдвое меньше, чем в вихрях с максимальной скоростью ветра 100 м/с. В настоящей работе это непосредственно вытекает из полученных аналитических выражений, справедливых не только для рассмотренных в [1] простейших модельных вихрей Рэнкина и Фидлера. Аналогичным образом, аналитическое решение объясняет и обобщает те результаты [1], согласно которым радиальные скорости частиц уменьшаются с увеличением радиусов вихрей. Согласно результатам [1], для вихрей Рэнкина и Фидлера максимумы радиальной скорости частиц находятся по разные стороны от радиуса максимальных ветров, что также описывается настоящей моделью (например, рис. 2).

Модель прозрачно демонстрирует эффекты нелинейного взаимодействия разных составляющих движения частицы, поскольку коэффициент сопротивления зависит от всех составляющих движения относительно среды. Адекватное описание движения частиц может иметь значение для правильной интерпретации результатов радарного зондирования, для оценки опасностей, связанных со смерчами и, возможно, для моделирования динамики самих смерчей.

Список литературы

1. *Dowell D. C., Alexander C. R., Wurman J. M., Wicker L. J.* Centrifuging of hydrometeors and debris in tornadoes: Radar-reflectivity patterns and wind-measurement errors // *Mon. Wea. Rev.* 2005. V. 133. N 6. P. 1501–1524.
2. *Lewellen D. C., Gong B., Lewellen W. S.* Effects of fine scale debris on near surface tornado dynamics // *J. Atmos. Sci.* 2008. V. 65. P. 3247–3262.
3. *Bodine D. J., Maruyama T., Palmer R. D., Fulton C. J., Bluestein H. B., Lewellen D. C.* Sensitivity of tornado dynamics to debris loading // *J. Atmos. Sci.* 2016. V. 73. N 7. P. 2783–2801.
4. *Stenz R.* The impacts of hydrometeor centrifuging on tornado dynamics [Электронный ресурс]. 2017. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=44rtkbfAx0Y> (дата обращения 17.11.2020).
5. *Baker C. J., Sterling M.* Modelling wind fields and debris flight in tornadoes // *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics.* 2017. V. 168. P. 312–321.

6. *Baker C. J., Sterling M.* A conceptual model for wind and debris impact loading of structures due to tornadoes // *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics*. 2018. V. 175. P. 283–291.
7. *Snow J. T.* On the formation of particle sheaths in columnar vortices // *J. Atmos. Sci.* 1984. V. 41. P. 2477–2491.
8. *Zhao Y. Z., Gu Z. L., Yu Y. Z., Ge Y., Li Y., Feng X.* Mechanism and large eddy simulation of dust devils // *Atmosphere-Ocean*. 2004. V. 42. N 1. P. 61–84.
9. *Kangieser P. C.* A physical explanation of the hollow structure of waterspout tubes // *Mon. Wea. Rev.* 1954. V. 82. N 6. P. 147–152.
10. *Островский Л. А.* Динамика концентрации тяжелых и легких частиц в вихревых потоках // *Изв. АН. СССР. Физика атмосферы и океана*. –1990. Т. 26. № 12. С. 1307–1314.
11. *Плешанов А. С.* К теории гидродинамической устойчивости смерчей (торнадо). – М.: Информэнерго, 1993. 63 с.
12. *Лебедева Н. А., Осипцов А. Н.* Структура зон аккумуляции инерционной примеси в течении типа торнадо // *Изв. РАН. МЖГ*. 2009. № 1. С. 83–96.
13. *Ингель Л. Х.* О нелинейной динамике массивных частиц в смерчах // *Журнал технической физики*. 2020. Т. 90. № 6. С. 900–904.
14. *Bluestein H. B.* *Severe Convective Storms and Tornadoes. Observations and Dynamics*. Heidelberg et al: Springer, 2013. 456 p.
15. *Bodine D. J., Kurdzo J. M.* *Ground-Based Radar Technologies for Tornado Observations Remote Sensing of Clouds and Precipitation* Ed. C. Andronache. Springer International Publishing, 2018. 282 p.
16. *Marshall T. P.* Tornado damage survey at Moore, Oklahoma. // *Wea. Forecasting*. 2002. V. 17. P. 582–598.

Влияние закупорки пор на концентрационную конвекцию в анизотропной пористой среде с сорбцией

Е. А. Колчанова^{a,b}, Н. В. Колчанов^{a,b}

^aИнститут механики сплошных сред УрО РАН
614013, Пермь, ул. Академика Королёва, 1

^bПермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15
email: kolchanovaea@gmail.com

Проводится линейный анализ устойчивости механического равновесия бинарной смеси в анизотропной пористой среде, способной адсорбировать примесь при наличии эффекта закупорки пор. Пористая среда представляет собой горизонтальный слой, разделенный на два субслоя с разными проницаемостями. Бинарная смесь состоит из легкой несущей жидкости и активной тяжелой примеси, которая может взаимодействовать с пористой матрицей (например, наночастицы, тяжелые металлы, бактерии и др.). Транспорт жидкости в пористой среде описывается с помощью МММ модели, когда примесь делится на мобильную и немобильную фазы. Распределение концентрации примеси между этими двумя фазами подчиняется уравнению Ленгмюра. Конвекция бинарной жидкости в пористой среде задается уравнениями в приближении Буссинеска, которые решаются численно методом стрельбы. Показано, что поскольку скачок средних проницаемостей субслоев уменьшается, равновесие жидкости стабилизируется с усилением закупорки пор. При этом процессе зафиксированы переходы от локальной к крупномасштабной конвекции в двухслойной системе с верхним тонким высокопроницаемым субслоем и, наоборот, – от крупномасштабной к локальной конвекции в противоположном случае системы с нижним тонким высокопроницаемым субслоем.

Ключевые слова: анизотропная пористая среда; адсорбция; десорбция; закупорка пор; концентрационная конвекция; локальные и крупномасштабные конвективные валы

Clogging effect on solutal convection in anisotropic sorbing porous medium

E. A. Kolchanova^{a,b}, N. V. Kolchanov^{a,b}

^aInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Academ. Koroleva St. 1, 614013, Perm
^bPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: kolchanovaea@gmail.com

We perform a linear stability analysis for the mechanical equilibrium state of binary mixture in an anisotropic porous medium capable of adsorbing impurity in the presence of clogging effect. The porous medium is a horizontal layer divided into two sublayers with different permeabilities. The binary mixture consists of a

light carrier fluid and an active heavy solute that can interact with porous matrix (e.g., nanoparticles, heavy metals, bacteria, etc.). Mixture transport in porous medium is described by the MIM model where the solute is divided into mobile and immobile phases. The distribution of solute concentration between these two phases obeys the Langmuir equation. Convection of binary mixture in porous medium is specified by equations within the Boussinesq approximation. They are solved numerically by the shooting method. It is shown that the enhancement of pore-clogging effect stabilizes the equilibrium state due to decreasing difference between average permeabilities of the sublayers. In this process, one records the transitions from local to large-scale convection in a layered system with the upper thin highly permeable sublayer and, conversely, from large-scale to local convection in the opposite case of a layered system with the lower thin highly permeable sublayer.

Keywords: anisotropic porous medium; adsorption; desorption; clogging effect; solutal convection; local and large-scale convective rolls

1. Модель и методы решения

В работе изучается влияние закупорки пор на порог возникновения концентрационной конвекции бинарной смеси в анизотропной пористой среде в гравитационном поле. Смесь состоит из легкой несущей жидкости и активной тяжелой примеси, которая может прилипать к пористой матрице и оставаться некоторое время неподвижной до тех пор, пока не вернется обратно в жидкость (например, тяжелые металлы, частицы наноразмера, бактерии и др.). Пористая среда без засорения представляет собой два сопряженных горизонтальных субслоя одинаковой исходной пористости, но разной проницаемости. Поперек субслоев задается перепад концентраций примеси. Причем концентрация максимальна вблизи верхней границы двухслойной системы и равна нулю вблизи ее нижней границы так, что создаются необходимые условия для порогового возбуждения конвекции.

Течение смеси в пористой среде описывается в рамках модели Mobile-Immobile Media, когда примесь делится на две фазы: мобильную, перемещающуюся вместе с потоком несущей жидкости, и немобильную, способную прилипать к скелету пористой среды. Распределение концентрации примеси между этими двумя фазами подчиняется кинетическому уравнению Ленгмюра [1, 2]. Оно учитывает предельное максимальное количество немобильных частиц в объеме среды, которые могут прилипнуть к пористой матрице. Эта величина, отнесенная к объему исходного порового пространства, определяет коэффициент засорения субслоев. Течение жидкости в каждом из них описывается уравнениями конвекции в приближении Буссинеска [3, 4]. Уравнения решаются численно методом стрельбы. Находится порог возникновения концентрационной конвекции в гравитационном поле.

2. Результаты

В ходе решения конвективной задачи определяется пороговое концентрационное число Рэлея Дарси R_m^* и критическое волновое число k^* конвективных валов, возникающих сразу после потери устойчивости механического равновесия смеси. Варьируются значения коэффициента засорения ζ и параметра сорбции ω . Последний пропорционален отношению скоростей адсорбции и десорбции примеси и содержит концентрацию мобильной фазы вблизи верхней границы двухслойной системы. Рассмотрено два вида противоположных друг другу систем: система с верхним тонким высокопроницаемым субслоем и система с нижним тонким высокопроницаемым

субслоем. Показано, что для обоих видов систем порог конвекции повышается с ростом коэффициента засорения и параметра сорбции (рис. 1 а). Это объясняется тем, что в среднем проницаемость субслоев меньше при наличии закупорки, чем в ее отсутствие. Для примера на рис. 1 (а) и (б) представлены критические параметры конвективных течений вблизи порога для первой системы с отношением проницаемостей верхнего и нижнего незагрязненных субслоев $K_r = 40$ и координатой их границы раздела $\delta = 0.8$, нормированной на полную толщину системы. При слабой закупорке исходный скачок K_r сглаживается и распределение проницаемостей в каждом из субслоев становится линейной функцией вертикальной координаты. В этом случае, уменьшение скачка средних проницаемостей с ростом коэффициента засорения приводит к переходам от локальной конвекции к крупномасштабной в первой слоистой системе (рис. 1 б) и, наоборот, от крупномасштабной конвекции к локальной в противоположном случае второй системы.

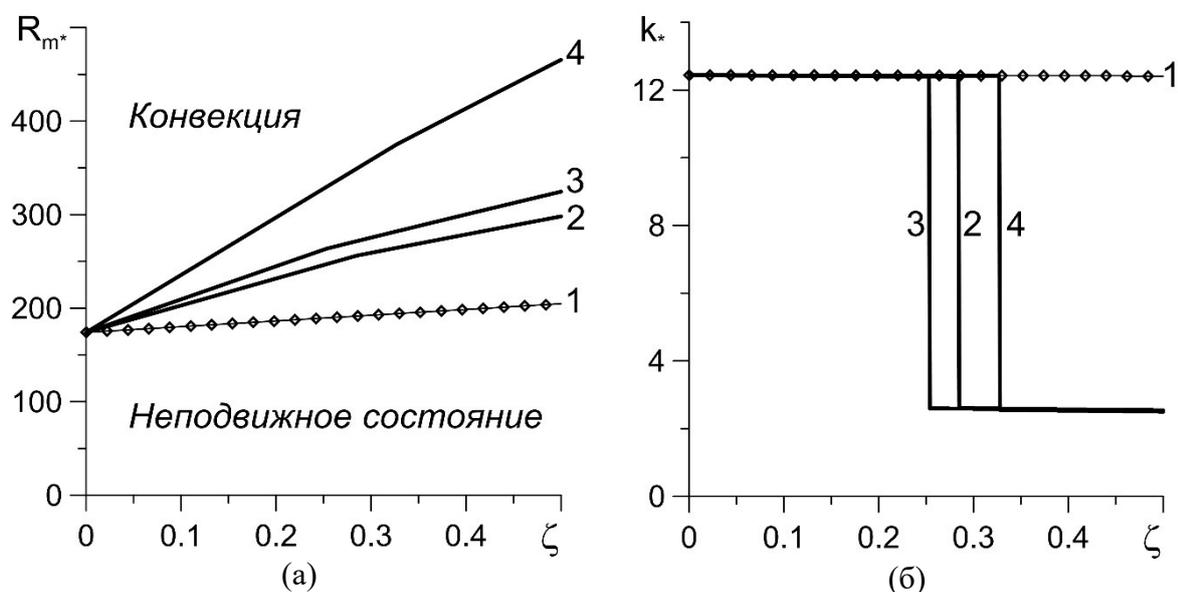


Рис. 1. (а) Пороговое число Рэля-Дарси и (б) волновое число пороговых валов в системе с $K_r = 40$, $\delta = 0.8$ при разных значениях параметра сорбции ω : 0.1 (ромбы 1), 0.7 (линии 2), 1 (линии 3), 5 (линии 4)

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-11-20125).

Список литературы

1. *Selim H. M., Amacher M. C.* Reactivity and transport of heavy metals in soils. Boca Raton: CRC, 1997. 240 p.
2. *Zhou L., Selim H. M.* Solute transport in layered soils: nonlinear and kinetic reactivity // Soil Science Society of America Journal. 2001. Vol. 65. P. 1056–1064.
3. *Maryshev B. S.* The linear stability of vertical mixture seepage into the close porous filter with clogging // Fluid Dynamics Research. 2017. Vol. 49, 015501.
4. *Nield D. A., Bejan A.* Convection in Porous Media. Switzerland: Springer International Publishing, 5th edition, 2017. 988 p.

Влияние вибраций разных ориентаций на порог термоконцентрационной конвекции в жидкостно-пористом слое в поле силы тяжести

Е. А. Колчанова^а, Н. В. Колчанов^а

^аПермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15
email: kolchanovaea@gmail.com

В работе исследуется устойчивость квазиравновесия бинарного раствора в системе двух горизонтальных субслоев, находящихся в гравитационном поле. Верхний субслоем заполняется только бинарным раствором, а нижний, кроме бинарного раствора, содержит пористую среду. Линейный анализ устойчивости проводится с учётом влияния на систему высокочастотных малоамплитудных вибраций вдоль некоторой оси, произвольно ориентированной относительно горизонта. Расчёты показывают, что в подогреваемой снизу двухслойной системе поперечные вибрации приводят к повышению порога устойчивости квазиравновесия. Рост интенсивности вибраций сопровождается резким переходом от конвективных течений, локализованных в пределах верхнего субслоя, к крупномасштабной конвекции, охватывающей всю систему. В свою очередь, продольные вибрации приводят к возникновению длинноволновых валов с упорядоченной по вертикали системой вихрей разной закрутки или «суперкоротковолновых» валов вблизи границы раздела субслоев. Порог устойчивости с ростом интенсивности вибраций сначала повышается, а затем понижается, на смену гравитационному механизму генерации конвекции приходит вибрационный. Стратифицированный по плотности раствор в двухслойной системе становится наиболее чувствительным к вибрациям, если тепловой и концентрационный градиенты плотности усиливают друг друга.

Ключевые слова: термоконцентрационная конвекция; конвекция с двойной диффузией; высокочастотные малоамплитудные вибрации; разная ориентация оси вибраций; поле силы тяжести; система жидкостного и пористого субслоев; бинарный раствор; порог возбуждения конвекции; подавление конвекции при поперечных вибрациях и ее усиление при продольных вибрациях; подогрев снизу или сверху; положительные отношения плавучестей

The effect of vibrations with different directions on thermosolutal convection onset in a fluid-porous layer under gravity

E. A. Kolchanova^a, N. V. Kolchanov^a

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: kolchanovaea@gmail.com

The paper studies the stability of a binary-solution quasi-equilibrium state in a system of two horizontal sublayers placed in the gravitational field. The upper sublayer is filled with binary solution only, while the lower one contains a porous medium in addition to the binary solution. A linear stability analysis is carried out taking into account the high-frequency low-amplitude vibrations, which affect the system and are oriented arbitrarily along some axis relative to the horizon. Calculations show that transverse vibrations delay the convection onset in a two-layer system heated from below. The growth of vibration intensity is accompanied by a sharp transition from the convective rolls localized within the upper sublayer to the large-scale convection covering both sublayers. In the opposite case, longitudinal vibrations causes either large-scale long-wave rolls in the form of vertically ordered vortices with different twists or the small-sized "super-short-wave" rolls appearing near the interface between sublayers. With increasing the value of oscillatory forcing the stability threshold rises at first and then reduces because the vibrational mechanism of convection generation replaces gravitational one. A density-stratified solution in the two-layer system becomes most sensitive to vibrations when thermal and solutal density gradients reinforce each other.

Keywords: thermosolutal convection; double-diffusive convection; high-frequency low-amplitude vibrations; different orientation of vibration axis; gravitational field; a superposed fluid-porous layer; binary solution; the onset of convection; convection suppression under transverse vibrations and its enhancement under longitudinal vibrations; heating from below or above; positive buoyancy ratios

1. Модель и методы решения

Исследуется устойчивость квазиравновесия бинарного раствора в системе, состоящей из двух горизонтальных субслоёв (верхнего и нижнего) и находящейся в гравитационном поле. Верхний субслоем заполняется только бинарным раствором, а нижний, кроме бинарного раствора, содержит пористую среду. Верхняя и нижняя его границы твердые и теплопроводные. Выведены уравнения термоконтрационной вибрационной конвекции в приближении Буссинеска в системе отсчета, связанной с полостью. Они допускают квазиравновесное решение [1-2], а представленный алгоритм решения уравнений позволяет рассчитать порог конвекции. Линейный анализ устойчивости проводится с учётом влияния на систему высокочастотных малоамплитудных вибраций вдоль некоторой оси, произвольно ориентированной относительно горизонта в присутствии заданных перепадов концентрации и температуры поперёк субслоев системы. Находятся значения критериев подобия, при которых в субслоях возникает осредненная конвекция в виде валов различной длины волны при наличии вибрационного воздействия разной интенсивности.

При решении краевой задачи используется численный метод стрельбы [3] для двухслойной системы «водный раствор хлорида аммония – стеклянные шары». Шары закреплены и колеблются вместе с полостью. Проницаемость системы плотно упакованных шаров определяется по формуле Кармана-Козени:

$$K = \frac{D^2 \phi^3}{180(1-\phi)^2}, \quad (1)$$

где пористость $\phi = 0.4$, а диаметр шаров D , в 10 раз меньше толщины пористого субслоя.

2. Результаты

Расчёты показывают, что в подогреваемой снизу двухслойной системе поперечные вибрации приводят к повышению порога устойчивости квазиравновесия. Рост интенсивности вибраций сопровождается резким переходом от конвективных течений, локализованных в пределах верхнего субслоя, к крупномасштабной конвекции, охватывающей всю систему. При подогреве сверху поперечные вибрации не приводят к каким-либо изменениям, т.е., если в отсутствие таких вибраций конвекция не возникает, то она будет невозможна и при их наличии.

В свою очередь, продольные вибрации приводят к возникновению крупномасштабных длинноволновых валов с упорядоченной по вертикали системой вихрей разной закрутки, проникающих в оба субслоя, и «суперкоротковолновых» валов малого размера, расположенных вблизи границы раздела субслоев. Оба типа валов имеют чисто вибрационную природу и не наблюдаются в отсутствие вибрационного воздействия.

Порог устойчивости квазиравновесия бинарного раствора с ростом интенсивности вибраций сначала повышается, а затем понижается и на смену гравитационному конвективному механизму приходит вибрационный механизм генерации конвекции. Стратифицированный по плотности бинарный раствор в двухслойной системе становится более чувствительным к действию вибраций, если тепловой и концентрационный градиенты плотности усиливают друг друга. В исследовании оба градиента плотности входят в следующий параметр – отношение плавучестей:

$$N = \frac{\beta_c \Delta C_p}{\beta_T \Delta T_p}, \quad (2)$$

где β_T и β_C – коэффициенты, определяющие изменение плотности раствора соответственно с изменением температуры и концентрации; ΔC_p и ΔT_p – соответственно перепады концентрации и температуры на пористом субслое системы.

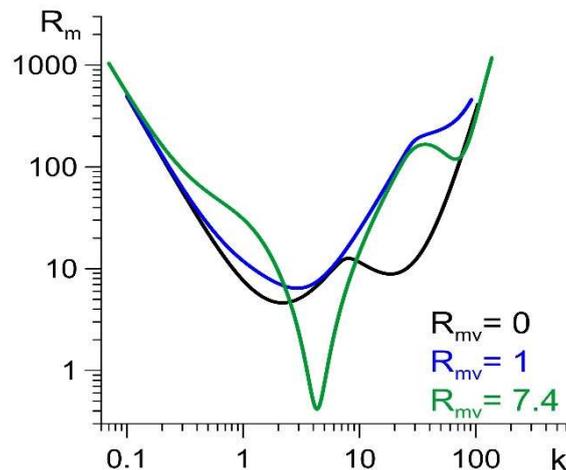


Рис. 1. Нейтральные кривые устойчивости квазиравновесия бинарного раствора в двухслойной системе при продольных вибрациях, подогреве снизу и $N = 0.01$

Когда тепловой и концентрационный градиенты плотности сонаправлены, отношение плавучестей $N > 0$. На рис.1 представлены нейтральные кривые устойчивости квазиравновесия бинарного раствора в двухслойной системе при продольных вибрациях, подогреве снизу и $N = 0.01$. Три нейтральные кривые получены

при разных значениях вибрационного числа Рэлея-Дарси (R_{mv}): 0 (черная линия); 1 (синяя линия); 7.4 (зелёная линия). Видно, что поначалу с ростом R_{mv} пороговое значение теплового числа Рэлея-Дарси R_m^* увеличивается, а затем начинает уменьшаться. При $R_{mv} = 7.4$ оно становится равным 0.4, что в 10 раз меньше значения R_m^* в отсутствие вибраций. В итоге можно сделать вывод, что наличие даже небольшого перепада концентрации на границах системы приводит к существенному уменьшению порогового числа Рэлея-Дарси, что позволяет эффективно производить тепло- и массоперенос в субслоях при относительно небольших перепадах температур на границах системы и вибрационных ускорениях.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-71-00067).

Список литературы

1. *Gershun G., Lyubimov D.* Thermal Vibrational Convection. New York: Wiley, 1998. 358 p.
2. *Jounet A., Bardan G.* Onset of thermohaline convection in a rectangular porous cavity in the presence of vertical vibration // *Physics of Fluids*. 2001. Vol. 13. P. 3234–3246. DOI: 10.1063/1.1403337.
3. *Лобов Н. И., Любимов Д. В., Любимова Т. П.* Численные методы решения задач теории гидродинамической устойчивости: учеб. пособие. Пермь: Изд-во ПГУ, 2004. 101 с.
4. *Kolchanova E. A., Kolchanov N. V.* The Interaction of Thermal Vibrational and Thermal Gravitational Mechanisms of Convection Onset in a Fluid-Porous Layer // *Microgravity Science and Technology*. 2021. Vol. 33. P. 44.

Контракция водных растворов наиболее распространенных кислот, оснований, солей и спиртов

К. Г. Костарев, С.В. Торохова

Институт механики сплошных сред УрО РАН, 614068, Пермь, Королева, 1
e-mail: torokhova.s@icmm.ru

Одним из направлений лабораторного моделирования массопереноса в условиях микрогравитации является использование неоднородных по составу систем жидкостей с одинаковой исходной плотностью. Однако реализации этого подхода в большинстве случаев препятствует эффект контракции, который представляет собой неаддитивное изменение объема (и, соответственно, плотности) смеси при изменении концентрации одной из ее компонент. Причиной контракции служит образование соединений на основе ионов/молекул растворенного вещества и молекул растворителя благодаря электростатическому взаимодействию и возникновению водородных связей. К сожалению, прогнозирование действия контракции осложнено отсутствием информации о ней для большинства жидких систем. Для устранения этого недостатка определена контракция наиболее известных водных растворов. Полученные данные систематизированы и проанализированы, для ряда случаев установлена корреляция контракции и других физико-химических свойств растворов.

Ключевые слова: водные растворы; контракция; гидраты

Contraction of aqueous solutions of the most common acids, bases, salts and alcohols

K. G. Kostarev, S. V. Torokhova

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Koroleva St. 1, 614068, Perm
e-mail: torokhova.s@icmm.ru

One of the directions in laboratory modeling of mass transfer in microgravity is the use of heterogeneous fluid systems with the same initial density. However, in most cases the application of this approach is prevented by the contraction effect, which is a non-additive variation of the mixture volume (and, accordingly, mixture density) due to a change in the concentration of one of its components. The cause of the contraction is the appearance of compounds made up of the solute molecules / ions and solvent molecules due to the formation of hydrogen bonds and electrostatic interaction. Unfortunately, the prediction of the contraction effect is complicated by the lack of the relevant information for most liquid systems. To eliminate this drawback, the contraction of the most well-known aqueous solutions was determined. The obtained data are systematized and analyzed, and for a number of solutions a correlation between their contraction and other physicochemical properties has been established.

Keywords: aqueous solutions; contraction; hydrates

1. Введение

Несмотря на более чем пятидесятилетнюю историю, лабораторное моделирование теплообмена в условиях микрогравитации остается одним из приоритетных направлений современной гидродинамики. Наиболее простым является моделирование путем снижения интенсивности конвективного движения до значений, характерных для орбитального полета. С этой целью соответствующие числа Грасгофа $Gr = g_0 \Delta \rho h^3 / \nu^2$, где g_0 — ускорение свободного падения, $\Delta \rho$ — перепад плотности в жидкости, h — вертикальный размер жидкого объема, ν — кинематическая вязкость, должны быть уменьшены в $10^3 - 10^5$ раз. В лабораторном эксперименте такое снижение достигается, в основном, за счет уменьшения вертикального размера кюветы.

В задачах по изучению массообмена также можно использовать предварительное выравнивание плотностей жидкостей системы по плотности диффундирующей компоненты. Теоретически диффузия в подобных условиях не должна влиять на плотность контактирующих жидкостей, однако такому развитию событий в полярных и диссоциирующих на ионы при растворении жидкостях препятствует эффект контракции. Контракция представляет собой неаддитивное изменение объема (и, соответственно, плотности) смеси при изменении концентрации одной из ее компонент. Причиной контракции служит образование соединений на основе ионов / молекул растворенного вещества и молекул растворителя благодаря электростатическому взаимодействию и возникновению водородных связей. Эти соединения, получившие названия сольватов или гидратов (в случае, если растворителем является вода), по ряду признаков напоминают классические химические соединения, основанные на ковалентной связи, однако, в отличие от последних, они легко распадаются с повышением температуры.

В химической термодинамике контракция известна как избыточный молярный объем. Подобные свойства определяются как разница между значением свойства реальной смеси и значением, которое могло бы существовать в идеальном растворе при тех же условиях. Объем идеального раствора равен сумме исходных объемов его компонент; соответственно, его избыточный молярный объем равен нулю. Отметим, что хотя термин «Контракция» применяется в химической термодинамике для обозначения избыточного объема, далее будем использовать его для обозначения разности плотностей $\Delta \rho$ между реальным и идеальным растворами равной концентрации.

В качестве примера рассмотрим процесс определения контракции водного раствора серной кислоты H_2SO_4 (рис. 1). На рис. 1а кривая 1 представляет собой зависимость плотности водного раствора H_2SO_4 от ее мольной концентрации (наряду с мольной концентрацией вещества в скобках будем указывать ее массовую концентрацию). Кривая 2 соответствует плотности идеального водного раствора серной кислоты в зависимости от ее концентрации (такой вид имела бы зависимость плотности раствора без образования гидратов). Кривые 1 и 2 совпадают по определению в двух точках — при нулевом содержании кислоты в воде $C_{\min} = 0$ моль/л (0%) и при достижении максимального содержания кислоты в растворе (в случае с серной кислотой, обладающей неограниченной растворимостью в воде, $C_{\max} = 18.67$ моль/л (100%)). Отметим, что для водного раствора соляной кислоты HCl $C_{\max} = 13.14$ моль/л (40%), что обусловлено предельной растворимостью газообразного хлористого водорода в воде при 20°C. Зависимость контракции водного раствора H_2SO_4 от ее концентрации представлена на рис. 1б. Достаточно сложное поведение кривой контракции объясняется с тем, что

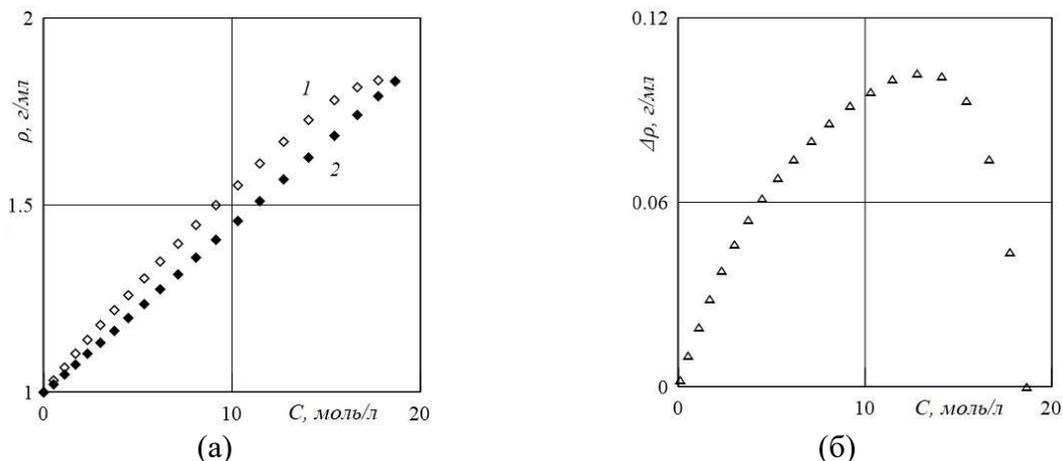


Рис. 1. (а) зависимость плотности водного раствора серной кислоты от концентрации при 20°C: 1 – табличные значения; 2 – расчетные значения при аддитивном смешивании (идеальный раствор); (б) зависимость контракции раствора серной кислоты от концентрации

кислота с водой образуют пять видов гидратов, различающихся по числу присоединенных молекул воды – от 150 при $C \rightarrow 0$ до смеси с преобладанием отдельных ионов и недиссоциированных молекул кислоты и гидрата с одной молекулой воды при $C > 85\%$. Таким образом, рост концентрации кислоты ведет не только к увеличению плотности раствора, но и к изменению его структуры, что находит отражение в нелинейном изменении контракции и других физико-химических свойств (в частности, динамической вязкости). Укажем еще на одну на характерную черту контракции – положение ее максимума существенно не совпадает с положением максимума плотности (соответствующие значения $C_1 = 12.77$ моль/л (75%) и $C_2 = 17.76$ моль/л (96%)).

2. Анализ данных

Сравним контракцию неорганических (сильных) и органических (слабых) кислот. Первые при растворении в воде практически полностью диссоциируют на ионы, вторые диссоциируют лишь частично. Соответственно, для первых в образовании гидратов преобладающим механизмом является электростатический, для вторых – образование водородных связей. Как видно из рис. 1 и 2, серная (рис.1б) и азотная HNO_3 (кривая 1 на рис. 2а), кислоты обладают значительно большей (~ в 3 раза) максимальной контракцией $\Delta\rho_{\max}$, чем уксусная кислота CH_3COOH , которая имеет наибольшую контракцию из карбоновых (органических) кислот. Справедливости ради отметим, что максимальная контракция соляной кислоты меньше, чем у уксусной, в связи с предельной растворимостью (как правило, чем меньше предельная растворимость вещества, тем ниже максимальная контракция его раствора).

На рис. 2 также представлены зависимости контракции водных растворов гидроксидов калия KOH (кривая 3 на рис.2а) и натрия NaOH (кривая 2 на рис. 2б). Сравнение показывает, что их максимальная контракция несколько выше либо сопоставима с $\Delta\rho_{\max}$ карбоновых кислот. Взаимодействие кислот и гидроксидов приводит к развитию реакции нейтрализации с образованием соли. На рис. 2 представлены зависимости для водных растворов соответствующих солей (кривые 4 и 5 на рис. 2а и 3 на рис. 2б). Очень малые – по сравнению исходными кислотами и основаниями – предельная растворимость и контракция позволяют сделать вывод об интенсивном взаимодействии катионов и анионов соли, препятствующем образованию большого числа гидратов.

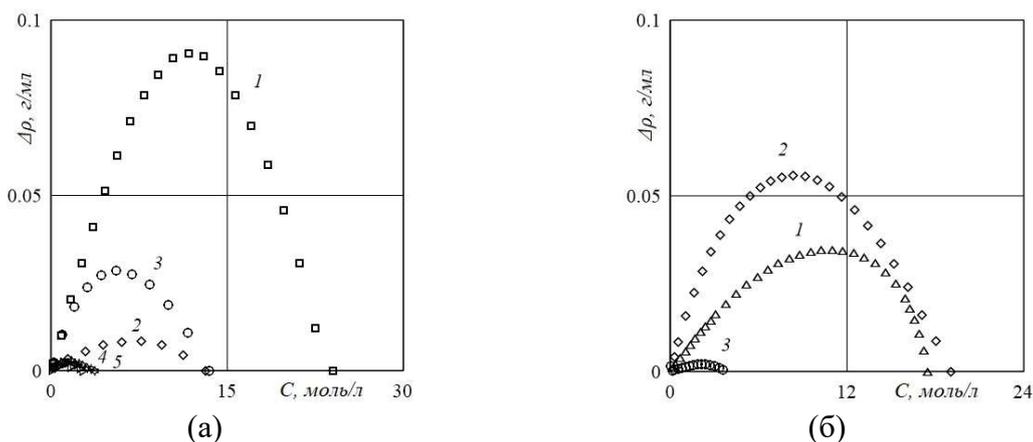


Рис. 2. Зависимость контракции водных растворов от концентрации для:
 (а) сильных кислот, сильного основания и их солей: 1 – азотная кислота, 2 – соляная кислота, 3 – гидроксид калия, 4 – азотнокислый калий KNO_3 , 5 – хлористый калий KCl ;
 (б) слабой кислоты, сильного основания и их соли: 1 – уксусная кислота; 2 – гидроксид натрия; 3 – ацетат натрия CH_3COONa

Отметим, что у ацетата натрия контракция в действительности отрицательная, соответственно, на графике представлен ее модуль.

На рис. 3 приведена зависимость контракции еще для одной группы веществ – одно- и многоатомных спиртов. Из рис. 3а видно, что отрицательной контракцией также обладает водный раствор глицерина. Для молекул одноатомных спиртов и карбоновых кислот характерно наличие от одной и более групп CH_2 , определяющих изменение их физико-химических свойств. Данная зависимость представлена рис. 3б.

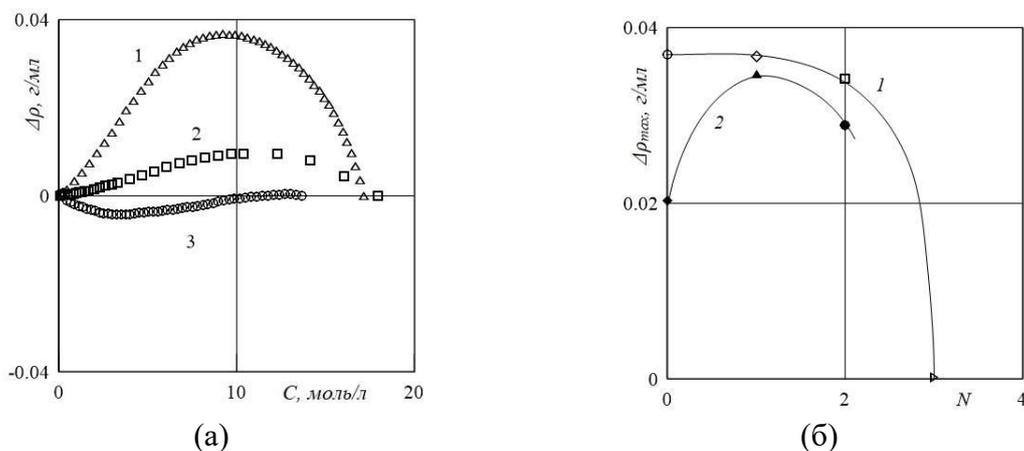


Рис. 3. (а) Зависимость контракции растворов одно- и многоатомных спиртов от их концентрации: 1 – этиловый спирт C_2H_5OH (одноатомный); 2 – этиленгликоль $C_2H_6O_2$ (двухатомный); 3 – глицерин $C_3H_8O_3$ (трехатомный);
 (б) зависимость $\Delta\rho_{max}$ одноатомных спиртов и карбоновых кислот от числа групп CH_2 в молекуле

Анализ результатов позволяет сделать вывод, что для моделирования поведения систем жидкостей в микрогравитации перспективно использовать неполярные жидкости, а из полярных – водные растворы солей и жидкостей с отрицательной контракцией.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ № 19-41-590009.

Светоиндуцированная динамика наночастиц в жидкофазной среде с учётом концентрационной зависимости коэффициента вязкости

А. И. Ливашвили^а, В. В. Криштоп^{б,с}, П. В. Виноградова^а, М. И. Якунина^а

^аДальневосточный государственный университет путей сообщения, 680021, Хабаровск, Серышева, 47

email: livbru@mail.ru

^бПермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990, Пермь, Комсомольский проспект, д. 29

^сПермская научно-производственная приборостроительная компания, 614990, Пермь, 25 Октября, д. 106

email: krishtop@pnppk.ru

Получено и исследовано нелинейное уравнение типа Бюргера, описывающего динамику наночастиц в наножидкости с учетом концентрационной конвекции, концентрационной зависимости коэффициента вязкости и сил светового давления. С помощью преобразования Коула-Хопфа получено точное решение типа бегущей волны с профилем одиночного перепада.

Ключевые слова: Наножидкость, концентрационная конвекция, бегущая волна, электрострикция

Light-induced dynamics of nanoparticles in a liquid-phase medium, taking into account the concentration dependence of the viscosity coefficient

A. I. Livashvili^a, V. V. Krishtop^b, P. V. Vinogradova^a, M. I. Yakunina^a

^aFar Eastern State Transport University, 47, Seryshev St., 680021 Khabarovsk

email: root@festu.khv.ru

^bNational Research Polytechnic University, 29, Komsomolsky Prospekt, 614990 Perm, Russia

^cPNPPK "Perm Scientific-Industrial Instrument Making Company, 106, 25th October St, Perm 614990, Russia

email: krishtop@pnppk.ru

A nonlinear Burgers-type equation is obtained and investigated, which describes the dynamics of nanoparticles in a nanofluid taking into account the concentration convection, the concentration dependence of the viscosity coefficient, and the forces of light pressure. Using the Cole-Hopf transform, an exact solution of the traveling wave type with a single drop profile is obtained.

Keywords: nanofluid, concentration convection, traveling wave, electrostriction

Коллоидные суспензии (наножидкости) характеризуются особыми свойствами переноса. В отличие от крупных дисперсных частиц, наночастицы практически не седиментируют, они не подвергают эрозии каналы, по которым движутся. В частности, их успешно используют для доставки лекарственных препаратов (оптические пинцеты) [1–4]. Несмотря на достаточно большое число публикаций и накопленный фактический материал как экспериментальный, так и теоретический [1–3], здесь все еще отсутствуют систематические данные, а результаты экспериментов часто противоречивы. Это, в свою очередь, требует более глубокого понимания механизмов переноса и физического смысла наблюдаемых эффектов. Мы полагаем, что точные аналитические решения могут быть полезными при тестировании численных результатов.

Нашей целью будет изучение динамики концентрации наночастиц в наножидкости, которая подвергается воздействию светового поля с равномерным профилем интенсивности. При этом мы учитываем концентрационный, конвективный потоки и поток, обусловленный действием силы светового давления $F_s = f(I_0)$, где I_0 – интенсивность излучения [5]. Заметим, что эта сила направлена вдоль распространения волны.

Запишем балансное уравнение, описывающее нестационарный перенос частиц в наножидкости без учёта термодиффузии:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V(C) \frac{\partial c}{\partial x} - U(C) \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1)$$

Заметим, что если мы представим это уравнение в дивергентной форме, то увидим, что первое слагаемое в правой части выражает поток частиц, обусловленный диффузией, второе – концентрационной конвекцией, а третье – электрострикционный, возникающий в результате действия на частицы сил со стороны электрического поля излучения.

В уравнении (1) приняты следующие обозначения: D – коэффициент диффузии наночастиц; $V(C)$ – скорость концентрационной конвекции, которую принимаем равной

$$V(C) = \eta(C)/l\rho(C). \quad (2)$$

где $\eta(C)$ – динамическая вязкость, а l – характерное расстояние. Заметим, что при получении уравнения (2), мы учли факт несжимаемости наножидкости: $\text{div}V(C) = 0$.

В ряде экспериментальных и теоретических работ [3, 4, 6] показано, что вязкость пропорциональна концентрации коллоидной суспензии. В дальнейшем мы примем, что $\eta(C) = \eta_0(1 + pC)$, где $p > 0$. Зависимость от плотности будем считать несущественной: $\rho(C) \approx \rho_0$. Далее используем равенство $U(C) = \mu \cdot F_s$ [7], где μ – подвижность частицы. Учитывая вышесказанное, проводя параметризацию и переходя к переменной бегущей волны, $z = ky - \lambda\tau$, получим уравнение типа Бюргера:

$$k^2 \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} + (\lambda - mk) \frac{\partial W}{\partial z} + nkW \frac{\partial W}{\partial z} = 0. \quad (3)$$

Решение которого можно найти, используя подстановку Коула-Хопфа [8] ($C(y, \tau) = W(z)$). Найденное точное решение уравнения (3) можно записать в виде

$$W(z) = C(z) = \frac{2(\lambda - mk)k}{n} \cdot \frac{1}{C_1 + e^{-\frac{\lambda - mk}{k^2}z}}.$$

На рис.1 представлены графики решения уравнения (3) при различных значениях параметров. Видно, что профили полученных решений, описывая стационарную волну

в форме одиночного перепада, перемещаются вправо по мере возрастания времени вдоль оси OZ .

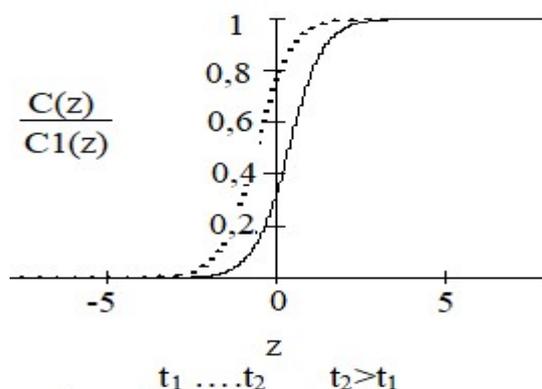


Рис. 1. Профили решений уравнения (2), при различных значениях параметров

В порядке заключения заметим, что, считая коэффициент вязкости постоянным, мы получим решение, описывающее затухающие процессы. Таким образом, нелинейный характер уравнения (2) обуславливает самоподдерживающийся волновой процесс. Заметим, что, хотя физический смысл параметров λ и k ясен, но не установлена их связь с теплофизическими, гидродинамическими и оптическими параметрами системы. Решению этой задачи могло бы способствовать изучение поведения рассматриваемой системы на фазовой плоскости, что и будет целью нашего дальнейшего исследования.

Список литературы

1. Черепанов И. Н., Попов В. А. Экспериментальное исследование влияния концентрации на параметры наножидкости. // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2017. Вып. 2. (36). С. 26–31.
2. Smorodin V. L., Cherepanov L. N., Myznikova B. I., Shliomis M. I. Traveling-wave convection in colloids stratified by gravity. // Physical Review E. 2011. Vol. 84, 026305.
3. Рудяк В. Я. Современные проблемы микро и нанофлюидики. / В. Я. Рудяк, А. В. Минаков. – Новосибирск: Наука, 2016. – 296 с.
4. Рудяк В. Я., Краснолуцкий С. Л. Моделирование коэффициента вязкости наножидкости методом молекулярной динамики. // СПб.: Журнал техн. физики, 2015. Т. 85. № 6. – С. 9–16.
5. Борен К., Хафман Д., Поглощение и рассеяние света малыми частицами. - Мир, 1986.-674 с.
6. Venerus D., Buongiorno J., Christianson R., et al. (33 more authors) Viscosity measurements on colloidal dispersions (nanofluids) for heat transfer applications. Applied Rheology, 2010. Vol. FED.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. – М. Наука. 1986. -736с.
8. Cole J. D. On a quasilinear parabolic equation occurring in aerodynamics. // Quart. Appl. Math. 1951. Vol. 9. P. 225–236.

Моделирование процесса высокотемпературного силицирования пористой среды

А. И. Меньшиков, В. А. Демин, Б. С. Марышев

Пермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15
email: aimenshikov@yandex.ru

Проведено численное моделирование процесса силицирования в углерод-углеродной пористой среде. Теоретическое описание основано на МИМ модели и законе Дарси, которые были дополнены уравнением переноса тепла с учетом тепловыделения в ходе конденсации газообразного кремния в порах заготовки. Расчет закупорки производился согласно механизму Козени – Кармана. Предложены феноменологические формулы для коэффициентов конденсации и испарения, описывающие эти процессы в зависимости от температурных условий. Численное моделирование было проведено в двух постановках: в первом случае основным механизмом пропитки являлась диффузия, во втором произведен учет градиента давления и влияния распределения температуры. Показано, что с учетом давления и тепловыделения наблюдается конкуренция между конвективным переносом и диффузией, что приводит к незначительной асимметрии концентрационных профилей.

Ключевые слова: пористая среда; силицирование; МИМ модель

Modeling of a high-temperature porous medium siliconizing

A. I. Menshikov, V. A. Demin, B. S. Maryshev

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: aimenshikov@yandex.ru

The results of numerical simulation of the siliconizing process in a carbon-carbon porous matrix are analyzed. Theoretical description is based on the MIM model and Darcy's law. Thermal conductivity equation is derived that takes into account the heat of condensation during the deposition of silicon in the pores of carbon-carbon sample. The pore blockage is accounted according to the Kozeny-Karman mechanism. Phenomenological formulas for the condensation and evaporation coefficients are obtained. Numerical simulation is performed for two problem statements. The first case did not take into account the heat of condensation and the external pressure gradient. Thus, the main mechanism of the sample saturation is diffusion. In the second situation, all these mechanisms are taken into account. It is shown that, the presence of a pressure gradient and calorification leads to the competition between the convective and diffusion mechanisms that give to an asymmetry of the concentration profiles.

Keywords: porous medium; siliconizing; MIM model

1. Введение

Силицирование – это процесс специфической обработки пористого материала, заключающийся в насыщении объема кремнием при высокой температуре. Заполнение углерод-углеродных композитных матриц кремниевым наполнителем до состояния полной закупорки пор является актуальной проблемой современного материаловедения [1, 2]. В настоящее время среди освоенных технологий существует немного эффективных методов заполнения порового пространства связующим материалом, одним из которых является паро-жидкофазный метод. Многолетние попытки научиться полностью контролировать этот процесс привели лишь к отдельным успехам, которые были достигнуты по большей части опытным путем. Как оказалось, эмпирический подход не дает стопроцентной воспроизводимости требуемого качества силицирования, особенно при переходе к новым по форме крупногабаритным изделиям. Технология силицирования паро-жидкофазным методом по причине своей нестабильности является весьма дорогим процессом с точки зрения энергозатрат. Таким образом, возникает задача построения физико-математической модели, предназначенной для описания труднореализуемого механизма высокотемпературной пропитки углерод-углеродного композитного материала.

2. Постановка задачи

Рассмотрим плоский слой пористого материала высотой H и толщиной L в декартовой системе координат, как показано на Рис. 1. Пропитка происходит с обеих сторон образца, за счет диффузионного механизма. При силицировании возможно существование градиента давления вдоль оси x , задающей направление пропитки. Вдоль боковых граней поддерживается постоянное значение температуры. Пусть по условию задачи $T_2 > T_1$. Действием силы тяжести в данной постановке можно пренебречь, так как основное влияние на заполнение пор оказывает именно диффузия.

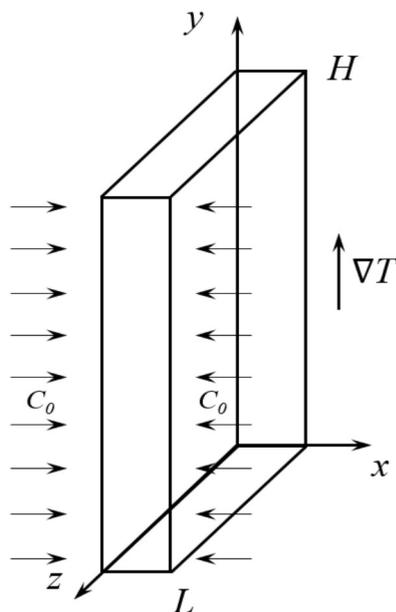


Рис. 1. Постановка задачи и система координат

3. Система уравнений

Произведем строгий вывод базовых уравнений, следуя [3]. Пусть V_m, V_i – объемы, занимаемые частицами в мобильном и иммобильном состояниях соответственно. В дополнение введем обозначения, соответственно V_f и V_p для объемов несущей жидкости в материале и всего порового пространства. Таким образом, имеем два важных равенства:

$$V_p = V_m + V_i + V_f, \quad V = V_m + V_i + V_f + V_s, \quad (3.1)$$

где V_s – объем твердого скелета. Далее поделим первое равенство на V :

$$\frac{V_p}{V} = \frac{V_m}{V} + \frac{V_i}{V} + \frac{V_f}{V}. \quad (3.2)$$

Слева по определению возникает начальная пористость среды ϕ_0 . В правой части равенства первое и третье слагаемое дают значение пористости ϕ в данный момент времени при условии, что часть объема пор теперь занята иммобильным компонентом. Оставшийся член можно интерпретировать как концентрацию примеси φ_i в иммобильном состоянии:

$$\phi = (V_m + V_f)/V, \quad \varphi_i = V_i/V. \quad (3.3)$$

В результате приходим к первому уравнению, связывающему пористость и концентрацию иммобильного компонента в каждый момент времени $\phi = \phi_0 - \varphi_i$.

Концентрацию частиц в мобильном состоянии логично определить через объем, занимаемый несущей жидкостью. Это позволит оперировать одной и той же концентрацией как на входе, так и в объеме пористой среды:

$$c_m = V_m / (V_m + V_f). \quad (3.4)$$

Таким образом мы определили основные характеристики, соответствующие МММ модели [4, 5], в рамках которой поток можно разделить на две составляющие: мобильную, дрейфующую в потоке, и иммобильную, осевшую в порах материала, которые обозначаются как c_m и φ_i , соответственно. Определим основные уравнения, необходимые для описания фильтрационного процесса. Воспользуемся далее законом сохранения массы для атомов кремния, распределенных в некоторой несущей среде. Соответствующее уравнение непрерывности записывается следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi c_m) = -(\bar{v}\nabla)c_m - \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + D \operatorname{div}(\phi \nabla c_m). \quad (3.5)$$

Для поля скорости фильтрации имеет место условие несжимаемости. Кинетическое уравнение, определяющее изменение объема, занимаемого иммобильным компонентом, определяется природой сорбционных или конденсационных процессов. За основу возьмем так называемую изотерму Ленгмюра, расширив ее дополнительным слагаемым, учитывающим обратный процесс испарения

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \alpha [c_m (q_0 - \varphi_i) - K_d (q_0 - \varphi_i) \varphi_i]. \quad (3.6)$$

где α и K_d – соответственно, параметр межфазного обмена и коэффициент распределения примеси, q_0 – концентрация насыщения. Так как в текущей постановке задачи значительную роль играет температура, то для коэффициентов конденсации и

испарения появляется определенная зависимость от нее. Определим эти зависимости следующим образом:

$$a \equiv \alpha = A\sqrt{T_c - T} \quad (T_c > T), \quad b \equiv \alpha K_d = B\sqrt{T - T_c} \quad (T_c < T). \quad (3.7)$$

Амплитуды A и B могут отличаться друг от друга, т.к. отвечают за скорость нарастания процессов конденсации и испарения по мере удаления от критической температуры T_c .

При заполнении пор частицами проницаемость меняется, иными словами, проницаемость является функцией пористости. Для сред с регулярной последовательностью пор и простейшей конфигурацией подобная зависимость вычисляется аналитически. Одной из таких формул является так называемая зависимость Козени – Кармана [6]:

$$\kappa = \frac{\kappa_0 \phi^3}{(1 - \phi)^2}. \quad (3.8)$$

где κ_0 – константа Козени – Кармана.

Замыкает законы сохранения формула Дарси, которая связывает скорость фильтрации с градиентом давления

$$\vec{v} = -\frac{\kappa}{\eta} \nabla p. \quad (3.9)$$

Здесь η – динамическая вязкость, κ – проницаемость среды, p – поле давления.

Дополним систему уравнений (3.5), (3.6), (3.9) уравнением переноса тепла. Как показывает практика по производству высокотемпературных композиционных материалов, при пропитке изделия в ходе конденсационных процессов выделяется определенное количество теплоты, которое приводит к разогреву изделия и значительному изменению температурного поля внутри пористого скелета. С учетом локального тепловыделения уравнение переноса тепла имеет вид [7,8]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) T = \chi \Delta T + \frac{Q}{\rho_m c_p}, \quad Q = \lambda \rho_i \frac{\partial \phi_i}{\partial t}. \quad (3.10)$$

Здесь Q – количество теплоты, выделяемое внутренними источниками в единице объема за единицу времени, χ – температуропроводность пористого материала, ρ_m – его эффективная плотность, c_p – теплоемкость при постоянном давлении, λ – удельная теплота конденсации (парообразования), ρ_i – плотность иммобильного компонента.

Для замыкания полученной системы уравнений дополним ее граничными условиями в размерной форме:

$$c_m|_{x=0,L} = C_0, \quad \partial_y c_m|_{y=0,H} = 0, \quad T|_{y=0} = T_1, \quad T|_{y=H} = T_2, \quad (3.11)$$

$$P|_{x=0} = P_1, \quad P|_{x=L} = P_2, \quad \partial_y P|_{y=0,H} = 0, \quad (3.12)$$

при этом вдоль левой и правой вертикальных границ материала сохраняется постоянное линейное распределение температуры.

4. Алгоритм решения

Система уравнений (3.5), (3.6), (3.9), (3.10) совместно с граничными условиями (3.11), (3.12) решалась методом конечных разностей [9] на постоянной по пространству

сетке с использованием явной схемы. Предварительно, уравнение (3.9) с учетом несжимаемости несущей среды перерабатывались в уравнение Пуассона для давления, которое имеет следующий вид:

$$\frac{3-\phi}{1-\phi} \nabla \phi \cdot \nabla P + \phi \Delta P = 0 \quad (4.1)$$

При дискретизации временных и пространственных производных использовались односторонние и центральные разности соответственно. Стоит отметить, что численная схема будет устойчивой, если временной шаг подобран согласно критерию Куранта – Фридрихса – Леви. Для решения уравнения Пуассона был выбран метод последовательных приближений, а также использовалась процедура установления.

Опишем алгоритм решения задачи. Согласно численной процедуре сначала решается уравнение (3.6). С его помощью по предыдущим значениям полей температуры и концентраций мобильного и иммобильного компонентов находится распределение концентрации иммобильного компонента на новом шаге по времени. Затем, используя связь ϕ и ϕ_i , вычисляется текущее значение пористости. На основе данных о пористости, находится давление P согласно (4.1), после чего определяются компоненты скорости (3.9) и решается уравнение (3.10) для распределения температуры на новом шаге по времени. Последним рассматривается уравнение (3.5), посредством которого производится расчет поля мобильного компонента. После этого последовательность операций закрывается. Авторский компьютерный код был реализован на языке программирования FORTRAN-90.

В качестве начальных условий выступали невозмущенные поля давления, скорости, а значения концентраций внутри заготовки предполагались равными нулю. На левой и правой границах устанавливалось значение концентрации, так как пропитка происходит с обеих сторон заготовки. Управляющие параметры имеют значения: $L = 0.01$ м, $C_0 = 4.7 \cdot 10^{-9}$, $D = 0.7$ м²/с, $A = 4500$ с⁻¹К^{-1/2}, $B = 310$ с⁻¹К^{-1/2}, $T_c = 1750$ К, $\chi = 4 \cdot 10^{-6}$ м²/с, $C_p = 750$ Дж/кг·К, $\rho_m = 1510$ м³/кг, $\rho_i = 2445$ м³/кг, $P_0 = 120$ Па, $P_1 = 100$ Па, $\lambda = 1.37 \cdot 10^7$ Дж/кг, $\eta = 1.75 \cdot 10^{-4}$ Па·с, $\kappa_0 = 10^{-10}$. В расчетах по координатам x и y использовалась рабочая сетка с числом узлов $25 \div 405$, а соотношение сторон $H/L = 30$.

5. Результаты численного моделирования

Представим результаты численного моделирования для приведенных выше параметров. Данные значения максимально приближены к параметрам, при которых проходят реальные эксперименты. Наиболее трудными для определения являются константы A и B , поэтому их значение подбиралось таким образом, чтобы результаты реперных экспериментов согласовались с численными данными. Критическая температура подобрана таким образом, что она разделяет расчетную область на две одинаковые по размерам части. Таким образом, в верхней части слоя не протекает никаких конденсационных процессов, так как температурные условия соответствуют только испарению, а первоначально заготовка предполагается чистой. Конденсационные процессы происходят лишь в нижней половине заготовки.

Первоначально решалась задача о диффузионной пропитке, которая включает в себя уравнения (3.5), (3.6), скорость конвективного переноса предполагается равной нулю. Коэффициент диффузии в этом случае является постоянным. Наиболее важными для анализа являются значения концентраций. На Рис. 2 приведены распределения концентраций мобильной и иммобильной фаз вдоль осей x и z соответственно в момент

времени $t = 120$ сек. Как и ожидалось, наблюдается параболический симметричный профиль, соответствующий пропитке с обеих сторон.

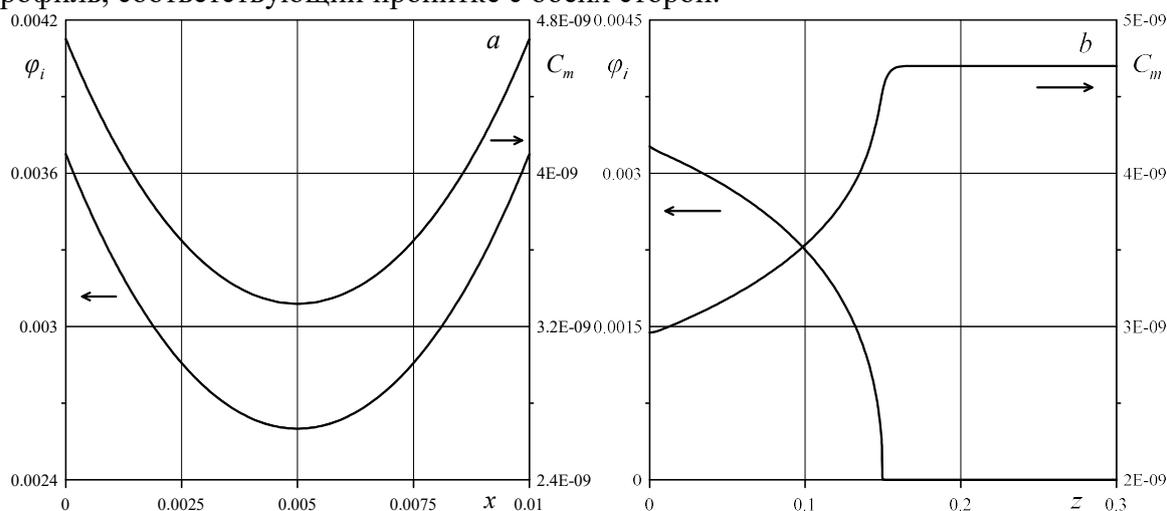


Рис. 2. а) Распределение концентрации мобильной и иммобильной фаз вдоль оси x в момент времени $t = 120$ секна высоте $1/4$ от общей высоты образца без учета тепловыделения и градиента давления; б) Продольное распределение концентрации мобильной и иммобильной фаз вдоль оси z в этот же момент времени

За это время максимальное изменение пористости составляет порядка 2% от начального значения. Таким образом, на полное закупоривание свободных пор должно потребоваться порядка 2 часов.

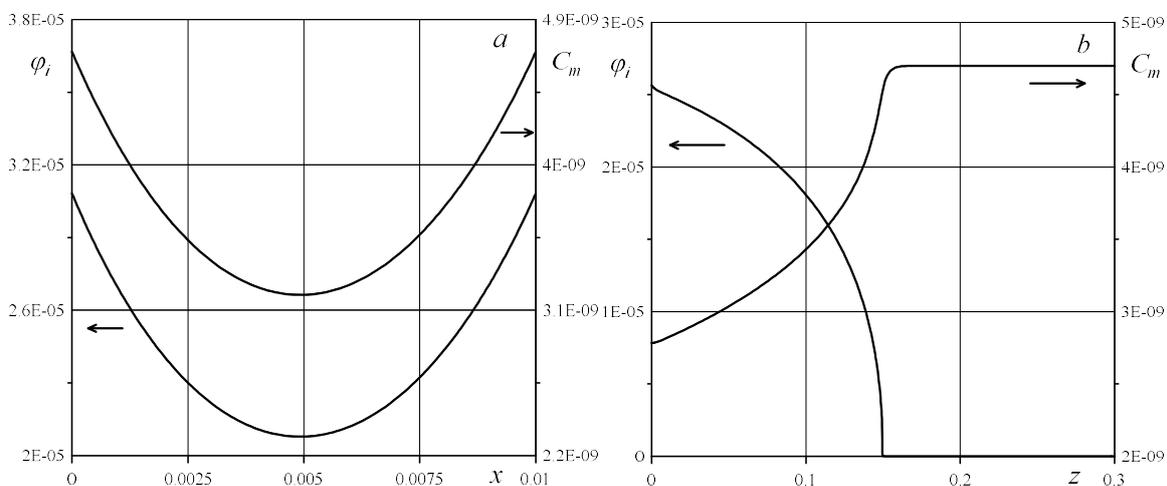


Рис. 3. а) Распределение концентрации мобильной и иммобильной фаз вдоль оси x в момент времени $t = 1$ секна высоте $1/4$ от общей высоты образца с учетом тепловыделения и градиента давления; б) Распределение концентрации мобильной и иммобильной фаз вдоль оси z в тот же момент времени вдоль оси симметрии

Масса осевших частиц, вычисленная из полученного значения концентрации иммобильной фазы, составляет для крупногабаритного изделия порядка 6 кг, что соответствует массе кремния, полученной во время взвешивания после удачного эксперимента.

Аналогичное поведение наблюдается и во время решения полной задачи с учетом (3.9) – (3.10), включающей в себя тепловыделение, а также градиент давления поперек заготовки (Рис. 3). Выделившееся во время конденсации тепло приводит к разогреву образца, что в свою очередь означает тот факт, что коэффициент диффузии со временем будет меняться в зависимости от локального значения температуры. Градиент давления с левой стороны заготовки помогает прокачке, однако, будет препятствовать диффузионной пропитке с противоположной стороны. Таким образом, в процессе силицирования наблюдается конкуренция между конвективным и диффузионным механизмом. Коэффициент диффузии, помимо температуры, также зависит от давления. В совокупности это приводит к нарушению симметрии концентрационного профиля.

6. Выводы

Построена физико-механическая модель, предназначенная для обобщенного теоретического описания пароконденсатного механизма пропитки углерод-углеродного композитного материала. Проведены предварительные расчеты в нескольких постановках: без учета теплоты конденсации и возможного градиента давления, с учетом данных механизмов, а также с переменным коэффициентом диффузии. Результаты численного моделирования при правильно подобранных данных дают количественное согласие с экспериментальными данными.

Список литературы

1. Костиков В.И., Кошелев Ю.И., Понкратова Р.Н. Влияние вида углеродных материалов на характер взаимодействия с жидким кремнием // Разработка и исследование конструкционных углеродных материалов. М.: Металлургия, 1998. С. 64–72.
2. Чупраев Н.В. Физикохимия процессов массопереноса в пористых телах. М.: Химия. 1990. 272 с.
3. Herzog J.P., Leclerc D.M., Le Goff P. Flow of suspensions through porous media – application to deep filtration // Industrial and Engineering Chemistry. 1970. Vol. 62, N. 5. P. 8–35.
4. van Genuchten M.Th., Wierenga P.J. Mass transfer studies in sorbing porous media. I. Analytical solutions // Soil Science Society of America Journal. 1976. Vol. 40, N. 4. P. 473-480.
5. Deans H.A. A mathematical model for dispersion in the direction of flow in porous media // Society of Petroleum Engineers Journal. 1963. Vol. 3, P. 49–52.
6. Kozeny J. Ueber kapillare Leitung des Wassers im Boden // Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften. 1927. Vol. 136, P. 271-309.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики, Т. 6. Гидродинамика. М.: Физматлит, 2001. 736 с.
8. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
9. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. 616 с.

Влияние течения расплава на состояние поверхностной оксидной плёнки при индукционной плавке

И. Л. Никулин^a, В. А. Демин^{a,b}

^aПермский национальный исследовательский политехнический университет
614990, Пермь, Комсомольский пр., 29,
email: nil@pstu.ru

^bПермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15,
email: demin@psu.ru

В осесимметричной постановке численно решается задача о механических напряжениях и деформации тонкой диэлектрической плёнки на плоской поверхности расплава в цилиндрическом тигле. Уравнения движения расплава и граничные условия учитывают тепловую конвекцию, объемное действие силы Лоренца, конвекцию Марангони на свободной от плёнки поверхности расплава. Уравнения для конвективного теплообмена описывают действие джоулевых источников и излучение на поверхности. Уравнение механического равновесия для пленки выведено с учетом объемных сил, возникающих при движении расплава под пленкой, и записано в терминах смещений. В диапазоне параметра диффузии магнитного поля $1 \leq D_H \leq 120$ и фиксированном числе Гартмана исследованы напряженно-деформированные состояния плёнок дискообразной формы в центре поверхности. Показано влияние структуры течений на деформацию плёнки. Определены диапазоны D_H и размеры плёнок, при которых плёнки будут наиболее стабильны. Показано, что возможны режимы течений и соответствующие напряженно-деформированные состояния плёнки, где плёнка не меняет своего размера по сравнению с ненагруженной.

Ключевые слова: индукционная плавка; оксидная плёнка, вязкое трение, упругая деформация.

The influence of the melt flow on the state of surface oxide film during an induction melting

Nikulin I. L.^a, Demin V. A.^{a,b},

^aPerm National Research Polytechnic University, 614990, Perm, Russia,
email: nil@pstu.ru

^bPerm State University, 614990, Perm, Russia,
email: demin@psu.ru

The problem of mechanical stress and deformation of a thin dielectric film on the flat surface of a melt in a cylindrical crucible is solved numerically in the axisymmetric formulation. The equations of motion and boundary conditions take into account thermal convection, the Lorentz volume force and Marangoni convection on the film-free melt surface. The equations of convective heat

transfer describe the action of joule sources and radiation at the surface. The mechanical equilibrium equation for the film is derived considering the volume forces which arise as the melt moves under the film and is written in displacement terms. In the range of magnetic diffusion parameter $1 \leq D_H \leq 120$ and fixed Hartmann number the stress-strain states of the disc-shaped film at the center of the surface are investigated. The effect of current structure on the film deformation is shown. Ranges of D_H and size of films, at which the films are most stable, are determined. It is shown that modes of flow and corresponding stress-strain state of the film are possible, where the film does not change its size compared to unloaded film.

Keywords: induction melting; oxide film, viscous friction, elastic deformation.

1. Введение

Технология индукционной плавки применяется при производстве деталей газовых турбин, например, в ПАО «Протон-Пермские моторы», Пермь, Россия. Суть индукционной плавки заключается в том, что металлы в тигле нагреваются за счет вихревых токов, возбуждаемых переменным магнитным полем (ПМП), которое создается индуктором. Кроме того, ПМП взаимодействуя с вихревыми токами, возбуждает в расплаве силу Лоренца, которая перемешивает его. Несмотря на то, что технический процесс происходит в техническом вакууме (давление $p < 10^{-3}$ мм рт. ст.), на поверхности металлического расплава при температуре более 1773 К могут образовываться тонкие (до 0.5 мкм) оксидные пленки, которые могут привести к негативным металлургическим эффектам, например, попадание пленки в отливку приводит к браку. Кроме того, оксидная пленка имеет более высокую излучательную способность, чем чистый металл, и её наличие искажает показания яркостного пирометра. Наиболее часто образование оксидной пленки наблюдается для сплавов на основе никеля с добавлением алюминия или хрома, а доля дефектов, связанных с оксидными пленками, для некоторых изделий достигает 10%.

Таким образом, исследование условий формирования и стабильности оксидных пленок на поверхности расплава при индукционной плавке является актуальной задачей. Поскольку индукционная плавка происходит в закрытой вакуумной камере при температуре свыше 1773 К, а формирование оксидной пленки имеет вероятностный характер, оптимальным средством исследования этого процесса является математическое моделирование.

Целями данной работы являются

- 1) формулировка математической модели, описывающей напряженно-деформированное состояние тонкой пленки на поверхности расплава в ПМП,
- 2) моделирование взаимодействия расплава, перемешиваемого ПМП, и упругой пленки на его поверхности,
- 3) выявление влияния параметров ПМП на напряженно-деформированное состояние пленки.

2. Математическая модель

При построении модели сделаны следующие допущения.

- 1) Осевая симметрия.
- 2) Анализируются только стационарные состояния. Поток расплава стационарен, пленка не движется, и ее разрыв не рассматривается.
- 3) Течение расплава не влияет на магнитное поле. Движение расплава корректно описывается без учета влияния на магнитное поле электрических токов, связанных с

потоками проводящей жидкости, если магнитное число Рейнольдса $Re_m = \mu\mu_0\zeta R_c u \ll 1$ (здесь μ – магнитная проницаемость, μ_0 – магнитная постоянная (Гн/м), ζ – удельная электропроводность (См/м), R_c – характерный размер (радиус тигля)(м), u – скорость (м/с)).

4) Поверхность расплава предполагается плоской и недеформируемой. Магнитное поле недостаточно сильное для образования выпуклого мениска, как в технологии плавки в холодном тигле [1]. Кроме того, пренебрегаются возможные волновые процессы на поверхности, эффекты генерации волн и их влияние на потоки описаны в работах [2]. При этих условиях вертикальные скорости везде под поверхностью расплава одинаково равны нулю и не влияют на деформацию поверхности и механическое равновесие пленки, покрывающей расплав.

5) Оксидная пленка, покрывающая поверхность расплава, представляет собой сплошную однородную упругую среду.

6) Толщина пленки везде одинакова.

7) Механические напряжения равномерны по всей толщине пленки. В силу малости толщины пленки сдвиговыми деформациями пренебрегаем.

Задача о взаимодействии упругой пленки и расплава, перемешиваемого ПМП, может решаться путем последовательного решения следующих подзадач: магнитостатической, электродинамической, гидродинамической и упругой[3].

Магнитостатическая подзадача заключается в нахождении пространственного распределения магнитного поля индуктора \mathbf{H}_0 и подробно описана в работе [4].

Электродинамическая подзадача заключается в определении амплитуд магнитных полей вихревых токов \mathbf{H}_1 и \mathbf{H}_2 . Если представить поле индуктора изменяющимся по гармоническому закону $\mathbf{H}_0 \cos \omega t$, то поле индукционных токов можно представить суммой гармоник $\mathbf{H}_1 \cos \omega t + \mathbf{H}_2 \sin \omega t$, которые находятся из системы уравнений

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{H}_1 = D_H (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_0), \\ \nabla^2 \mathbf{H}_2 = -D_H \mathbf{H}_1, \end{cases} \quad (1)$$

$$r = 0: H_{1,2(r)} = \frac{\partial H_{1,2(z)}}{\partial r} = 0, \quad r, z \rightarrow \infty: \mathbf{H}_{1,2} = 0,$$

где

$$D_H = \mu\mu_0\zeta R_c^2 \omega \quad (2)$$

безразмерный параметр диффузии магнитного поля, ω – циклическая частота поля индуктора (рад/с), ∇^2 – оператор Лапласа. Подробный описание граничных условий можно найти в работе [5].

Параметр диффузии магнитного поля D_H (2) является наиболее важным при нахождении полей вихревых токов, который вместе с распределением внешнего поля \mathbf{H}_0 определяют пространственную структуру полей индукции \mathbf{H}_1 , \mathbf{H}_2 , а также объемную силу Лоренца F и объемную мощность джоулевых источников тепла J^2

$$F = \nabla \times \frac{1}{2} ((\mathbf{H}_1 \cdot \nabla) \mathbf{H}_1 + (\mathbf{H}_2 \cdot \nabla) \mathbf{H}_2),$$

$$J^2 = \frac{1}{2} ((\nabla \times \mathbf{H}_1)^2 + (\nabla \times \mathbf{H}_2)^2). \quad (3)$$

Гидродинамическая подзадача заключается в нахождении скоростей и температур в жидком металле при известных распределениях силы Лоренца и объемной мощности

тепловыделения (3). Безразмерные уравнения нестационарного массопереноса в объеме расплава, записанные в терминах функции тока ψ и вихря скорости φ , имеют вид

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r\varphi)}{\partial r} - u\varphi \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} - v\varphi \right) + \text{Gr} \frac{\partial T}{\partial r} + Hm^2 F, \quad (4)$$

$$\varphi = \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial z}, \quad u = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad v = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -r\varphi,$$

где t – время, u и v – радиальная и аксиальная компоненты скорости,

$$\text{Gr} = \frac{g\beta q_c R_c^4}{\lambda \nu^2}, \quad Hm = \sqrt{\frac{\mu\mu_0 H_c^2 R_c^2}{\rho \nu^2}}, \quad (5)$$

число Грасгофа и модифицированное число Гартмана, g – ускорение свободного падения (м/с^2), β – коэффициент объёмного расширения ($1/\text{К}$), λ – коэффициент теплопроводности ($\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$), ν – кинематическая вязкость ($\text{м}^2/\text{с}$), ρ – плотность ($\text{кг}/\text{м}^3$), q_c и H_c – характерные плотность теплового потока и напряжённость магнитного поля.

На твёрдых границах (дно и стенки тигля, под плёнкой) задано условие полного прилипания $u = v = 0$, на оси симметрии $\varphi = 0$, на свободной границе учитывается вклад конвекции Марангони

$$\varphi = -Ma \frac{\partial T}{\partial r}, \quad Ma = \frac{\alpha_T q_c R_c^2}{\lambda \nu^2 \rho}. \quad (6)$$

где Ma – число Марангони, α_T – температурный коэффициент поверхностного натяжения ($\text{Н}/(\text{м}\cdot\text{К})$).

При индукционной плавке тигель с металлом сбоку и снизу окружен теплоизолятором, поэтому тепловыми потоками в этих направлениях пренебрегают, радиационный теплообмен происходит только между поверхностью расплава с плёнкой и камерой. Безразмерное уравнение теплопередачи и граничные условия определяются следующими уравнениями

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{\text{Pr}} \frac{\partial T}{\partial r} - urT \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\text{Pr}} \frac{\partial T}{\partial z} - vT \right) + \frac{Q}{\text{Pr}} J^2,$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \text{Bi} (T^4 - T_{cam}^4), \quad (7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0,$$

где

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{a}, \quad Q = \frac{H_c^2}{\zeta q_c R_c}, \quad \text{Bi} = \frac{C q_c^3 R_c^4}{\lambda^3}, \quad (8)$$

число Прандтля, параметр тепловыделения и число Био для радиационного теплообмена соответственно, a – коэффициент температуропроводности ($\text{м}^2/\text{с}$), C – коэффициент излучения (подробнее в работе [6]), n – нормаль.

Упругая подзадача решается при найденном распределении скоростей и температур в расплаве. Закон Гука в случае осевой симметрии и отсутствии сдвиговых деформаций в терминах смещения χ имеет вид

$$r^2 \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + r \frac{\partial \chi}{\partial r} - \chi = r^2 L \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right), \quad (9)$$

где

$$L = \frac{1 - \gamma^2}{e} \cdot \frac{\rho v^2}{R_c} \quad (10)$$

параметр, характеризующий отношение вязких сил, действующих на плёнку со стороны движущегося под ней расплава, к упругим силам, возникающим в плёнке, γ – коэффициент Пуассона, $e = \Upsilon h$ – эластичность плёнки, Υ – модуль Юнга (Па), h – толщина плёнки (м). Правая часть формулы (10) пропорциональна объёмной силе, возникающей в плёнке при движении расплава с известным градиентом скорости у границы.

В настоящей работе принято, что плёнка – диск радиуса R , расположенный в центре поверхности расплава, при этом плёнка находится в напряжённо-деформированном равновесии, т.е. её центр неподвижен, а на краю радиальные напряжения равны нулю. Отсюда граничные условия для уравнения (10)

$$\begin{aligned} \chi &= 0, \quad \text{в центре,} \\ \frac{\partial \chi}{\partial r} + \frac{\chi}{R} &= 0, \quad \text{на краю плёнки.} \end{aligned} \quad (11)$$

Для анализа напряжённо-деформированного состояния введены локальные в радиальном r и азимутальном θ направлениях деформации

$$\xi_r = \frac{\partial \chi}{\partial r}, \quad \xi_\theta = \frac{\chi}{r}, \quad (12)$$

и интегральная характеристика – изменение размера (радиуса) плёнки в целом

$$\Delta R = R - R_0, \quad (13)$$

где R_0 – исходный размер плёнки, который можно рассчитать при заданном радиусе плёнки R и найденных из решения подзадачи (9 – 11) деформациях (12)

$$R_0 = R - \int_0^R \xi_r dr. \quad (14)$$

3. Результаты и обсуждение

Для моделирования использованы следующие технологические параметры: радиус внутреннего тигля (характерный радиус) $R_c = 0.1$ м, высота расплава – 0.2 м, радиус катушки индуктора – 0.15 м, высота индуктора – 0.35 м, расстояние между поверхностью расплава и корпусом вакуумной камеры – 0.5 м, ток индуктора – 250 А, количество витков индуктора – 10, температура расплава (опорное значение) – 1773 К, температура корпуса вакуумной камеры – 323 К. Физические свойства расплава [7–9]: температуропроводность $a = 1,92 \cdot 10^{-6}$ м²/с, термический коэффициент объёмного расширения $\beta = 38,5 \cdot 10^{-6}$ 1/К, удельная электропроводность $\zeta = 0,85 \cdot 10^6$ См/м, теплопроводность $\lambda = 10$ Вт/(м·К), кинематическая вязкость $\nu = 5,28 \cdot 10^{-7}$ м²/с, плотность $\rho = 7800$ кг/м³.

Расчетные значения: коэффициент излучения $C = 3,37 \cdot 10^{-10}$ Вт/(м²·К⁴), характерная напряженность магнитного поля $H_c = 2000$ А/м, характерный тепловой поток поверхностная плотность 3328 Вт/м².

Управляющие критерии: число Био $Bi = 1,24 \cdot 10^{-7}$, число Грасгофа $Gr = 4,13 \cdot 10^7$, модифицированное число Хартмана $Hm = 4581$, число Марангони $Ma = 2,31 \cdot 10^5$, число Прандтля $Pr = 0,269$, параметр тепловыделения $Q = 0,014$.

Характеристики плёнки[9–11]: упругость $e = 100$ мН/м, коэффициент Пуассона = 0,24, параметр, показывающий соотношение между вязкими и упругими силами (10) $L = 2,57 \cdot 10^{-7}$.

На рис. 1 показаны примеры полей температуры и скорости, рассчитанных для трех значений параметра $D_H = 40$, пленка имела форму диска с радиусом $R = 0,5$. Подробности о других возможных режимах и критериях, определяющих их, можно посмотреть в [6], причины таких перестроек течений заключаются в изменении структуры индукционных магнитных полей, наглядное объяснение дано в [12]. Температурное поле выглядит неоднородным, но абсолютная разность температур не превышает 1 К, что объясняется интенсивной вынужденной конвекцией.

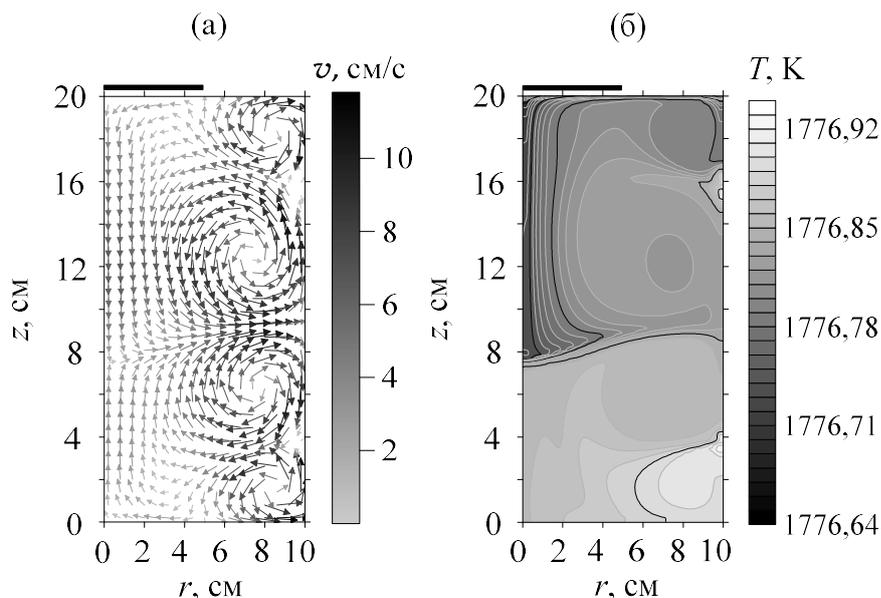


Рис. 1. Распределения скорости (а) и температуры (б) при индукционной плавке, $D_H = 40$, $R = 0,5$. Положение плёнки на поверхности показано чёрной линией

Согласно представленной модели, смещения и деформации вызываются вязкой силой вблизи поверхности, пропорциональной градиенту скорости (9, 10). Зависимость результирующих смещений и деформаций от скорости показана на рис. 2. Поток вблизи поверхности расплава, судя по профилю скорости на рисунке 2 (а), делится на две области: при $r < 5$ см поток направлен к центру и $u < 0$, при $r > 0,5$ – от центра, $u > 0$. Объемные силы, действующие в пленке в этих областях, направлены так же, как и скорости, т.е. сжимающие силы действуют на пленку при $r < 0,5$, а растягивающие – при $r > 0,5$. Смещения и деформации, рассчитанные для пленок различного радиуса R , показаны на рисунке 2 (б, в). Видно, что при $R < 0,6$ смещения отрицательны и пленка сжимается (б), деформации $\xi_r < 0$ наблюдаются только до $R \leq 0,4$ (в). Для дискообразных пленок с большими радиусами смещения и деформации больше, чем для пленки, закрепленной с обоих концов (граничные условия $\chi(0) = \chi(1) = 0$).

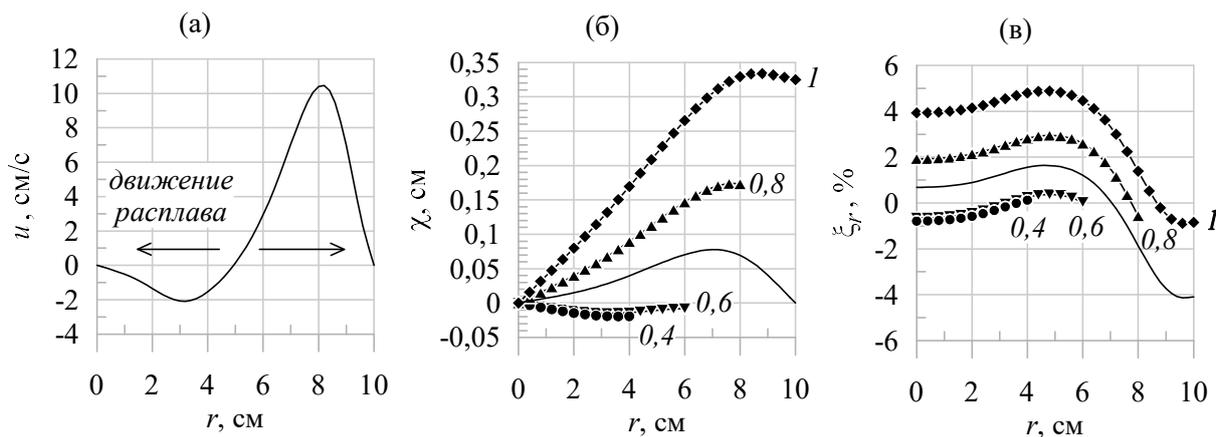


Рис. 2. Профиль скорости около поверхности (а), смещения (б) и деформации в плёнке (в) при индукционной плавке, $D_H = 40$. Цифры около кривой соответствуют радиусу плёнки. Линии без символов построены для плёнки, полностью покрывающей поверхность расплава и закреплённой на стенке тигля

На рис. 3 показаны рассчитанные начальные радиусы плёнки R_0 и изменение радиуса пленки ΔR . Из рис. 6 (а) видно, что когда скорость на поверхности меняет знак, реализуются области со сжимающими и растягивающими силами. В этом случае возможно, что пленка, испытывающая сжимающую силу в одной части ($r < 0,5$) и растягивающую силу в другой части ($r > 0,5$), в целом не изменяет своего радиуса ($\Delta R = 0$). Уменьшение ΔR при $R > 0,9$ можно объяснить тем, что пленка препятствует течению расплава вблизи поверхности, скорости у поверхности уменьшаются и снижаются вязкие силы, растягивающие плёнку.

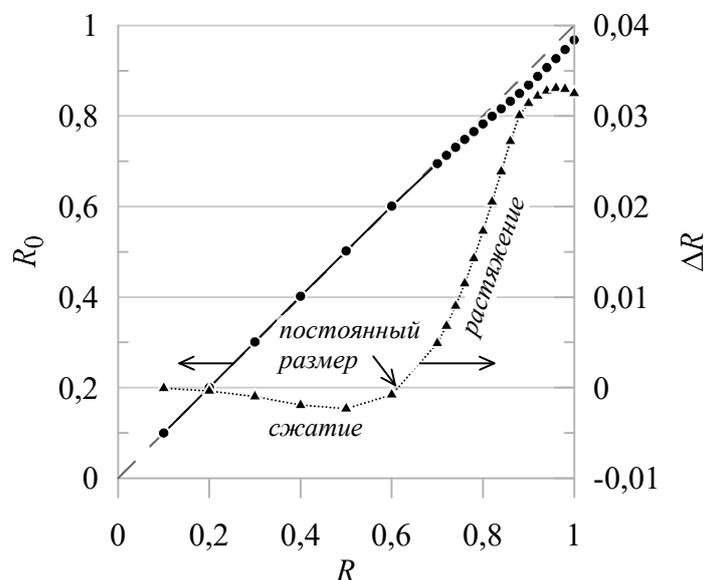


Рис. 3. Зависимости начального радиуса пленки R_0 и интегрального изменения размера ΔR от финального радиуса R , $D_H = 40$. В плёнке происходит как сжатие, так и растяжение, и реализуется особое напряженно-деформированное состояние, в котором деформации таковы, что общий размер пленки не изменяется по сравнению с ненагруженной пленкой

Варьируя радиус плёнки R и параметр D_H , обобщая зависимости, аналогичные рис. 3, можно построить карту изменения радиуса пленки ΔR на плоскости указанных параметров, пример такой карты приведён на рис. 4. Из рисунка видна область параметров, где $\Delta R = 0$, т.е. пленка под нагрузкой не изменяет свой размер по сравнению с ненагруженной. Область параметров R и D_H . Следует отметить, что интервал D_H , соответствующий нулевой изолинии ΔR , совпадает и с «зоной стабильности пленки», рассчитанной в предположении, что пленка состоит из большого числа мелких отдельных кусочков [13,14]. Наибольшие ΔR наблюдаются при больших радиусах пленки R и $D_H = 7$, где скорости в расплаве максимальны.

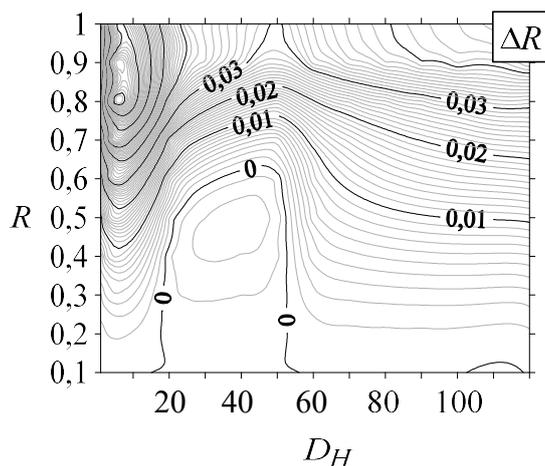


Рис. 4. Карта интегрального изменения размера ΔR на плоскости параметров R и D_H . Нулевая изолиния показывает диапазон D_H в котором плёнка радиуса R не меняет свой размер

4. Заключение

Разработана математическая модель, связывающая упруго-напряженное состояние тонкой оксидной пленки с течением расплавленного металла, которое в значительной степени определяется параметрами магнитного поля: параметр диффузии магнитного поля D_H (2) и модифицированное число Гартмана Hm (5).

В численно рассчитаны поля температуры и скорости в металле при варьировании радиуса плёнки и параметра D_H . Показано, как наличие плёнки изменяет поток на поверхности и как эти потоки деформируют плёнку, наименьшие напряжения наблюдаются в пленке в форме диска при режимах с $17 \leq D_H \leq 52$.

Выявлено, что для режимов $17 \leq D_H \leq 52$ возможны такие радиусы дискообразных пленок, при которых пленка в напряженно-деформированном состоянии не изменяет своих размеров в целом $\Delta R = 0$, размер таких пленок может быть до 0.6 радиуса тигля, причем в дискообразных пленках радиусом до 0.3 при любых значениях D_H деформация не превышает 1.5%, следовательно, пленки не будут разрушены токами, а для режимов с $17 \leq D_H \leq 52$ этот радиус достигает 0.8.

Список литературы

1. Liu C. et al. Numerical simulation of magnetic field in electromagnetic cold crucible for melting and solidifying glass // Tezhong Zhuzao Ji Youse Hejin/Special Cast. Nonferrous Alloy. 2016. Vol. 36, № 6.
2. Parfenyev V.M., Vergeles S.S., Lebedev V. V. Effects of thin film and Stokes drift on the generation of vorticity by surface waves // Phys. Rev. E. 2016. Vol. 94, № 5.

3. *Nikulin I.L., Perminov A. V., Tsaplin A.I.* Mathematical model of conducting fluid convection in a non-uniform alternating magnetic field // *Magnetohydrodynamics*. 2013. Vol. 49, № 1–2. P. 203–209.
4. *Perminov A.V., Nikulin I.L.* Mathematical Model of the Processes of Heat and Mass Transfer and Diffusion of the Magnetic Field in an Induction Furnace // *J. Eng. Phys. Thermophys.* 2016. Vol. 89, № 2.
5. *Нукулин И.Л., Перминов А.В.* Математическая модель процессов теплопереноса и диффузии магнитного поля в индукционной печи // *ИФЖ*. 2016. Vol. 89, № 2.
6. *Nikulin I.L., Perminov A. V.* Simulation of the Averaged Flow of a Metal Melt in an Alternating Magnetic Field with Variable Amplitude and Frequency // *J. Eng. Phys. Thermophys.* 2020. Vol. 93, № 3. P. 556–566.
7. Свойства элементов. Справочник под ред. Дрица М.Е 1985 672с.pdf. Москва: Металлургия, 1985. P. 672.
8. *Brooks R.F., Dinsdale A.T., Quedsted P.N.* The measurement of viscosity of alloys - A review of methods, data and models // *Meas. Sci. Technol.* 2005. Vol. 16, № 2. P. 354–362.
9. *Qiu G. et al.* Physical modelling of slag-foaming phenomenon resulted from inside-origin gas formation reaction Physical modelling of slag-foaming phenomenon resulted from inside-origin gas formation reaction // *Ironmak. Steelmak.* 2017. Vol. 44, № 4. P. 246–254.
10. *Lexis M., Willenbacher N.* Relating foam and interfacial rheological properties of beta-lactoglobulin solutions // *Soft Matter*. Royal Society of Chemistry, 2014. Vol. 10, № 48. P. 9626–9636.
11. *Nexhip C. et al.* Physicochemical properties of foaming slags Physicochemical properties of foaming slags // *Int. Mater. Rev.* 2014. Vol. 49, № 5. P. 286–298.
12. *Cramer A., Galindo V., Zennaro M.* Frequency dependence of an alternating magnetic field driven flow // *Magnetohydrodynamics*. 2015. Vol. 51, № 1. P. 133–147.
13. *Nikulin I.L.* Mathematical modelling of amf geometry and frequency impacts on volume and surface melt flows at induction melting // *Magnetohydrodynamics*. 2016. Vol. 52, № 4. P. 513–526.
14. *Nikulin I.L.* Analysis of possibilities of melt surface cleaning by controlling AMF frequency and distribution // *Magnetohydrodynamics*. 2017. Vol. 53, № 3. P. 537–546.

О радиальном термокапиллярном растекании жидкости в цилиндрической полости

М. И. Петухов, В. А. Демин

Пермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15
email: geniusmaxp@yandex.ru

Работа посвящена численному исследованию возникновения азимутальной составляющей у поля скорости при радиально-симметричном растекании жидкости в цилиндрической полости от локального источника тепла, расположенного на поверхности. Верхняя граница рабочей жидкости частично закрывалась пленкой неподвижного нерастворимого сурфактанта. Результаты численного моделирования показали, что после подтекания жидкости под пленку развивается неустойчивость, приводящая к появлению азимутальной компоненты скорости и последующего образования стационарных вихрей с закруткой в горизонтальной плоскости. Число вихрей определяется площадью пленки. Также показано, что увеличение скорости натекания жидкости на пленку приводит к увеличению их угла наклона.

Ключевые слова: термокапиллярный эффект; трехмерное течение; цилиндрическая полость

On a radial thermocapillary spreading of the fluid in cylindrical cavity

M. I. Petukhov, V. A. Demin

PermStateUniversity, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: geniusmaxp@yandex.ru

The work is devoted to the numerical study of the convective regimes of radially symmetric flow from a local heat source located on the surface of a liquid in a cylindrical cavity. The upper boundary of the working liquid was partially covered with a film of an immovable insoluble surfactant. The results of numerical simulations demonstrate that after the fluid leakage under the film there is an instability leading to the appearance of an azimuthal component of velocity and the subsequent formation of stationary vortices with rotation in the horizontal plane. The number of vortices is determined by the area of the film. It is also shown that increase of liquid velocity leads to the increase of their inclination.

Keywords: thermocapillary effect; 3D flow; cylindrical cavity

1. Введение

Течения, вызванные термокапиллярным эффектом, уже долгое время исследуются как теоретически, так и экспериментально. Сложный характер этого явления и

многочисленные практические применения приводят к росту интереса в этой области. Межфазные эффекты неразрывно связаны с возможным присутствием поверхностно-активных веществ на свободной поверхности жидкости. Это приводит к значительному изменению поверхностного натяжения и, как следствие, возникновению определенного отклика физической системы. Актуальной проблемой является описание и анализ взаимодействия термокапиллярного течения с ПАВ [1-5].

В настоящей статье речь пойдет о наблюдаемой в эксперименте перестройке изначально радиально-симметричного течения в цилиндрической кювете в сложные трехмерные структуры из-за присутствия на поверхности пленки нерастворимого сурфактанта [6].

2. Постановка задачи

Рассмотрим сегмент цилиндрической полости радиусом R и высотой h , заполненный водой со свободной верхней границей (Рис. 1). В работе [4] было показано, что в отличие от свободной поверхности течение вблизи пленки нерастворимого сурфактанта является медленным: скорость термокапиллярного течения уменьшается на 3-4 порядка. Поэтому в рамках грубого приближения можно утверждать, что пленку сурфактанта, с которой взаимодействует течение, можно рассматривать в виде твердой пластины, закрывающей часть поверхности. Площадь закрытия свободной поверхности жидкости будет определяться радиусом R^* . Для простоты стенки сегмента также являются твердыми. Течение в рассматриваемой гидродинамической системе генерируется за счет нагрева центральной части межфазной поверхности.

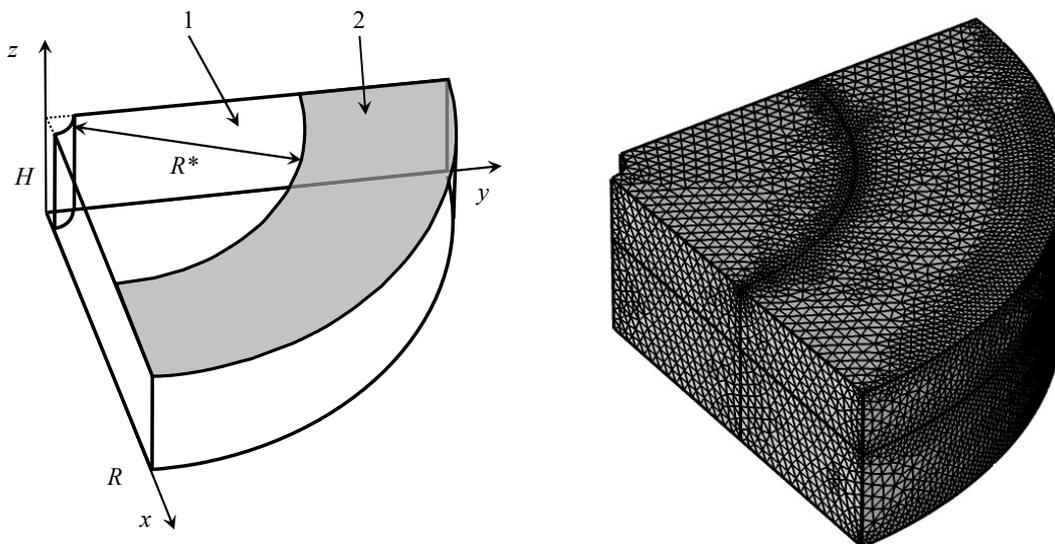


Рис. 1. Геометрия задачи и система координат (слева) и расчетная сетка (справа). 1 – свободная поверхность, 2 – неподвижная пленка

Тепло- и массоперенос в объеме будем описывать с помощью системы уравнений межфазной конвекции в приближении Буссинеска:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{v} + g \beta T \gamma, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T &= \chi \Delta T, \\ \operatorname{div} \mathbf{v} &= 0, \end{aligned}$$

где v , p , T – размерные поля скорости, давления и температуры, ν , χ – коэффициенты кинематической вязкости и температуропроводности, ρ – плотность жидкости, β – коэффициент теплового расширения, g – величина ускорения свободного падения, γ – единичный, направленный вертикально вверх. В отличие от работ [4,5], в которых дополнительно решалось уравнение поверхностной концентрации, т.е. рассматривалась полная постановка задачи о межфазной конвекции с подвижной пленкой сурфактанта, текущая постановка подразумевает то, что данная пленка неподвижна и представляет собой твердую «пластину», закрывающую свободную поверхность жидкости. Другими словами, в рамках поставленной задачи нет необходимости вводить дополнительное уравнение для поверхностной концентрации.

Значения температуры и скорости на твердых границах определялись при помощи следующих условий:

$$r = R: T = 0, v = 0, \quad z = 0, h: T = 0, v = 0,$$

где r – радиальная координата. На боковых стенках рабочей области ($x = 0$ и $y = 0$) ставились условия, отвечающие симметрии течения:

$$v_n = 0, \quad \frac{\partial v_r}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v_z}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0.$$

Нагрев межфазной поверхности задавался при помощи следующего граничного условия на теплоток:

$$z = h, 0 < r < R^*: \quad \kappa \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{A}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{r^2}{k_1 R^2} \right) \right) \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{t - t_0}{k_2} \right) \right),$$

из которого определялось значение температуры на поверхности. A и κ – характерные значения теплового потока через межфазную границу и теплопроводности жидкости. Параметры k_1 , k_2 и t_0 задают радиус области нагрева и время, за которое устанавливается максимальное значение теплового потока.

Поверхностное натяжение жидкости задавалось стандартным образом в виде линейной зависимости от температуры:

$$\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T.$$

Баланс касательных напряжений, определяющий значение касательных компонент скорости на свободной поверхности, представлялся в виде

$$z = h, 0 < r < R^*: \quad \eta \frac{\partial v_x}{\partial z} = \frac{\partial \sigma}{\partial x} = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \eta \frac{\partial v_y}{\partial z} = \frac{\partial \sigma}{\partial y} = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial y},$$

где η – динамическая вязкость.

Указанная система уравнений решалась численно с использованием математического пакета «Comsol Multiphysics» на вычислительном кластере «Тритон» Института механики сплошных сред УрО РАН. Для расчетов генерировалась неоднородная тетраэдрическая сетка со сгущением узлов вблизи границы твердой пленки (Рис. 1).

Радиус полости был равен $R = 0.05$ м, а высота $h = 0.02$ м. Параметры рабочей жидкости были близки к воде: $\nu = 10^{-6}$ м²/с, $\chi = 10^{-8}$ м²/с, $\sigma_T = 10^{-4}$ Н/мК, $\beta = 10^{-4}$ 1/К, $\kappa = 0.6$ Вт/мК, $\rho = 10^3$ кг/м³. В процессе численного моделирования условия нагрева определялись следующими значениями параметров в граничном условии на теплоток: $k_1 = 0.04$, $k_2 = 180$ с, $t_0 = 300$ с.

3. Результаты моделирования

Наиболее естественным течением для исследуемой гидродинамической системы является радиальное растекание, как вызванное неоднородным нагревом свободной части поверхности, так и в случае, когда пленка сурфактанта полностью закрывает поверхность жидкости. Течение в закрытой полости имеет практически симметричную форму в полоидальном сечении. В свою очередь, термокапиллярное течение, установившееся на свободной поверхности, смещает центры вихрей в сторону границы твердой стенки полости и пленки (Рис. 2).

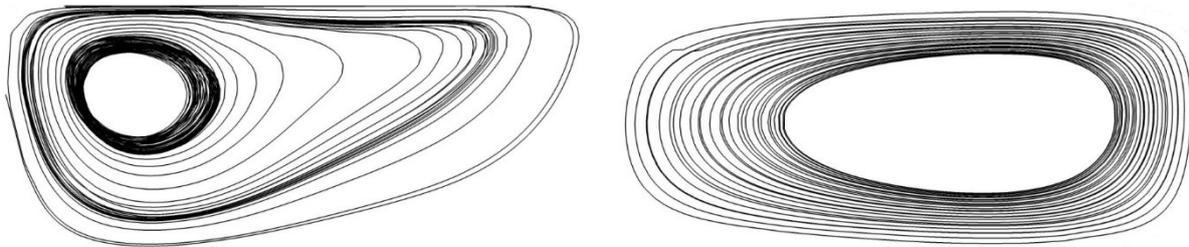


Рис. 2. Проекция линий тока для свободной поверхности: $R^* = R$, $A = 5 \cdot 10^{-4} \text{ Вт/м}^2$ (слева); и закрытой поверхности $R^* = 0$, $A = 10 \cdot 10^{-4} \text{ Вт/м}^2$ (справа). Вид сбоку

Если неподвижное поверхностно-активное вещество частично покрывает поверхность, так что $0 < R^* < R$, то первоначальное радиальное растекание может изменить свою форму после подтекания под пленку. При этом, естественно, должен удовлетворяться закон сохранения массы для несжимаемой жидкости.

Можно провести аналогию, согласно которой трансформация такого течения, а именно, его переориентация в азимутальную плоскость, связана с неустойчивостью в диффузоре, которая выражается в появлении азимутальной составляющей скорости. Только под пленкой в нашем случае частицы жидкости получают соответствующие горизонтальные возвратные составляющие скорости и преобразуют вихри в азимутальную плоскость (Рис. 3).

Стоит заметить, что азимутально-ориентированные вихри, возникающие под пленкой, имеют вторичную природу. Основное течение по-прежнему возникает вследствие термокапиллярного растекания от центра полости к периферии и формирует радиально-симметричные траектории движения жидкости. После смещения застойной зоны, роль которой играет граница жесткой пленки, возникают вихри с определенным значением волнового числа. Большему радиусу открытой поверхности соответствует меньшее число вихрей.

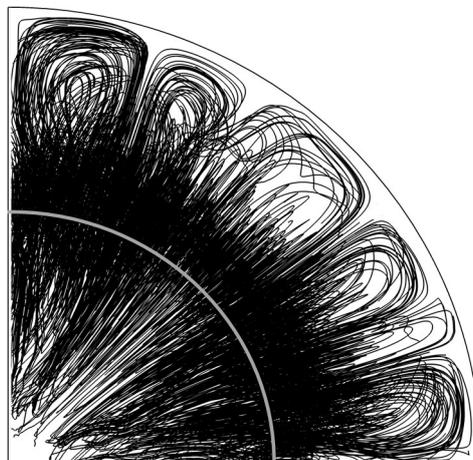


Рис. 3. Линии тока частично закрытой полости: $R^* = R/2$, $A = 250 \cdot 10^{-4} \text{ Вт/м}^2$. Вид сверху. Серая линия соответствует краю пленки

Численное моделирование показало, что такая перестройка потока возникает только при относительно большой интенсивности нагрева. При слабом нагреве вихри будут тороидальными, несмотря на наличие жесткой пластины. Это означает, что при увеличении интенсивности нагрева должен происходить непрерывный переход вихрей под пленкой от вертикально-ориентированных к горизонтально-ориентированным. Видно, что увеличение площади, занимаемой ПАВ, приводит к тому, что течение в азимутальной плоскости формируется при более слабом нагреве.

4. Заключение

Проведенные расчеты показывают, что натекание изначально радиально-симметричного течения на неподвижную пленку нерастворимого сурфактанта может привести к развитию неустойчивости и перестройке указанного течения в вихри с закруткой в азимутальном направлении. При этом площадь закрытия свободного участка поверхности пленкой определяет волновое число вихрей и пороговую интенсивность нагрева, при которой наклон вихрей становится явно выраженным.

5. Благодарности

Авторы выражают благодарность Шмыровой А.И. за предоставленные экспериментальные данные и плодотворное обсуждение результатов.

Список литературы

1. *Birikh R.V., Briskman V.A., Velarde M. and Legros J.-C.* // *Liquid Interfacial Systems: Oscillations and Instability* (CRC Press) 392 p., 2003.
2. *Slavtchev S, Hennenberg M, Legros J-C and Lebon G* Stationary solutal Marangoni instability in a two-layer system // *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 203, pp. 354–368, 1998.
3. *Братухин Ю.К., Макаров С.О.* // *Межфазная конвекция* (Пермь, Издательство Пермского университета), 328 с., 1994.
4. *Shmyrov A.V., Mizev A.I., Demin V.A., Petukhov M.I., Bratsun D.A.* Phase transitions on partially contaminated surface under the influence of thermocapillary flow // *J. Fluid Mech.*, Vol. 877, pp. 495–533, 2019.
5. *Demin V.A., Petukhov M.I., Shmyrov A.V., Shmyrova A.I.* Nonlinear dynamics of the film of an insoluble surfactant during the relaxation to equilibrium // *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*, 8(3), pp. 261-271, 2020.
6. *Shmyrova A., Shmyrov A.* Instability of a homogeneous flow from a lumped source in the presence of special boundary conditions on a free surface // *EPJ Web of Conferences* Vol. 213, 02074, 2019.

Моделирование динамического разрушения армированных углепластиком бетонных слоистых конструкций при ударном нагружении

А. С. Пляскин^а, Н. Н. Белов^б, Н. Т. Югов^с, А. А. Клопотов^д, А. И. Потехаев^с,
В. Е. Буньков^д

^аТомский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, Томск, пл. Соляная, 2

email: plyaskinandrei@mail.ru

^бТомский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, Томск, пл. Соляная, 2

email: n.n.belov@mail.ru

^сТомский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, 634050, Томск, пр. Ленина, 40

email: n.t.yugov@mail.ru

^дТомский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, Томск, пл. Соляная, 2

email: klopotovaa@tsuab.ru

^еНациональный исследовательский Томский государственный университет, 634056, Томск, пр. Ленина, 36

email: potekaev@spti.tsu.ru

В данной работе представлены результаты сравнительного численного эксперимента ударно-волнового нагружения стальным ударником сферической формы бетонной плитки двух конфигураций, с внешним армированием листами углеродного волокнистого полимера и без него. На основе полученных результатов взаимодействия композиционных материалов слоистой конструкции со стальным индентором было установлено, что на пробитие преграды из мелкозернистого бетона, усиленной углепластиком с лицевой и тыльной поверхностями необходимо затратить энергии более чем на 120% по сравнению с пробитием индентором исходной неармированной плитки.

Ключевые слова: бетон, углекомпозит, высокоскоростной удар

Simulation of dynamic destruction of multilayered concrete structures reinforced with carbon plastic under impact loading

A. S. Plyaskin^a, N. N. Belov^b, N. T. Yugov^c, A. A. Klopotov^d, A. I. Potekaev^c,
V. E. Bunkov^e

^aTomsk State University of Architecture and Building, 634003, Tomsk, pl. Solyanaya, 2
email: plyaskinandrei@mail.ru

^bTomsk State University of Architecture and Building, 634003, Tomsk, pl. Solyanaya, 2
email: n.n.belov@mail.ru

^cTomsk State University of Control Systems and Radio Electronics, 634050, Tomsk, 40 Lenin Ave

email: n.t.yugov@mail.ru

^dTomsk State University of Architecture and Building, 634003, Tomsk, pl. Solyanaya, 2

email: klopotovaa@tsuab.ru

^eNational Research Tomsk State University, 634056, Tomsk, 36 Lenin Ave

email: potekaev@spti.tsu.ru

This paper presents the results of a comparative numerical experiment of shock-wave loading of a concrete slab with a steel impactor in two versions: in the initial state and with subsequent external reinforcement with carbon fiber polymer sheets. On the basis of the obtained results of the interaction of composite materials of a layered structure with a steel indenter, it was found that it was necessary to spend more than 120% energy to break through an obstacle made of fine-grained concrete, a plate reinforced with CFRP from the front and back surfaces, compared to the penetration of the original unreinforced tile by the indenter.

Keywords: concrete, carbon composite, high-speed impact

Композитные материалы относятся к классу материалов с высоким комплексом физико-механических свойств. К одним из важных характеристик композиционных материалов является их эффективная способность к поглощению энергии интенсивных импульсных нагрузок. При ударном нагружении преград из композиционных материалов в них одновременно могут реализоваться разные виды разрушения: откол, кратерообразование, выбивание «пробки», образование «лепестков» и другие. С одной стороны, в настоящее время нет полного понимания механизмов деформирования, разрушения при динамическом воздействии на композиционный материал из углепластика и мелкозернистого бетона. С другой стороны накоплен значительный объем информации о физико-механических свойствах и поведении при различных видах нагружения и деформации эпоксидных углепластиков, конструкций с армированием углепластиковыми, а также о ресурсе и сроке их эксплуатации в различных изделиях [1, 2]. Экспериментально определены ударно-волновые характеристики углепластиков на основе однонаправленных волокон. В диапазоне давлений ударного сжатия до 3 ГПа экспериментально измерены ударные адиабаты и определены критические разрезающие напряжения в условиях откола при скорости деформирования $\sim 10^4 \text{ c}^{-1}$ [3].

Откольные напряжения в материалах, подвергнутых растяжению в направлении перпендикулярном к плоскости армирования, определяются в основном прочностью полимерного связующего к растягивающим напряжениям и его адгезией с углеродным волокном [4]. В работе [5] получена экспериментальная адиабата эпоксидной смолы и измерены значения откольной прочности. Обнаружена их зависимость от скорости деформации образца при импульсном растяжении. Данное состояние в этом научном направлении способствует проведению работ по моделированию процессов разрушения композиционных материалов при различных высокоэнергетических воздействиях.

Целью данной работы являются теоретические исследования деформирования, разрушения и сквозного пробития однослойной и комбинированной многослойной преград при высокоскоростном воздействии ударников шарообразной формы.

Решение данной задачи проводили при помощи математической модели, созданной на основе феноменологического подхода при динамическом разрушении

слоистой преграды из углепластика и мелкозернистого бетона при ударно-волновом нагружении [1].

В рамках разработанной модели были проведены исследования динамической прочности слоистой преграды из мелкозернистого бетона, армированной с лицевой и тыльной поверхностей слоем углепластика при высокоскоростном ударе стальным индентором.

При создании нашей модели опирались на математическую модель поведения сплошной структуры с учетом ударно-волнового нагружения сред.

Удельный объем пористой среды v представляется в виде суммы удельных объемов материала матрицы v_m и пор v_p и удельного объема v_i , образующегося при раскрытии трещин, т.е. $v = v_m + v_p + v_i$. Пористость материала характеризуется относительным объемом пустот $\zeta = \zeta_p + \zeta_i$, и параметром $\alpha = v/v_m$, который определяется зависимостью $\alpha = 1/(1-\zeta)$. Здесь $\zeta_p = v_p/v$, $\zeta_i = v_i/v$ – относительные объемы пор и трещин соответственно.

В рамках используемой модели были записаны системы уравнений, описывающих движение пористой упругопластической среды, как это описано в [6].

При расчетах использовали приближение, что бетон и углепластик при динамическом нагружении до выполнения критерия прочности описываются моделью линейно-упругого тела.

В качестве условия прочности используется критерий, предложенный для бетона:

$$3J_2 = [AI_1 + B] \left\{ 1 - (1 - C) \left[1 - \frac{J_3}{2} \left(\frac{J_2}{3} \right)^{-\frac{3}{2}} \right] \right\}, \quad (1)$$

где I_1, J_2, J_3 – первый инвариант тензора напряжений, второй и третий инварианты девиатора тензора напряжений соответственно;

$$A = R_c - R_p; B = R_c R_p; C = \frac{3T_c^2}{R_c R_p};$$

где R_c, R_p, T_c – пределы прочности при одноосном сжатии, растяжении и чистом сдвиге соответственно.

Поверхность (1) для изотропных материалов должна отвечать условию выпуклости (в соответствии с постулатами Друккера и Хилла), которое накладывает следующие ограничения на расчетные параметры

$$0,530 \leq \frac{T_c}{\sqrt{R_c R_p}} \leq 0,577$$

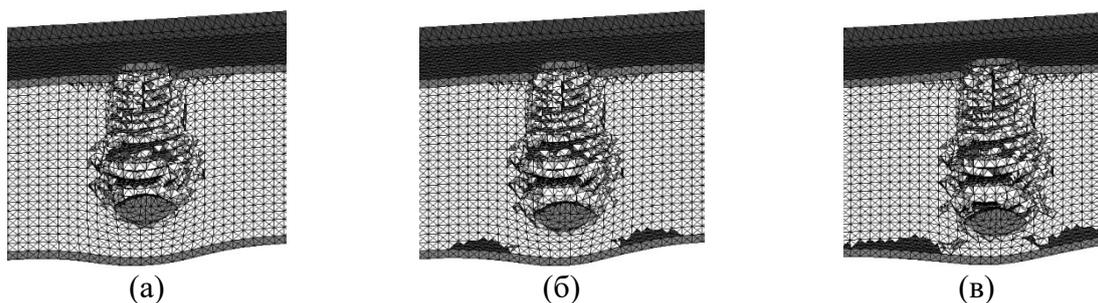
Численные значения A, B, C определяются через пределы прочности бетона и углепластика при растяжении, сжатии и чистом сдвиге, полученные при динамическом нагружении. После выполнения критерия прочности считается, что материал поврежден трещинами.

Процесс фрагментирования поврежденного трещинами материала и поведение разрушенного материала описывается в рамках модели пористой среды.

В рамках предложенной модели был проведен сравнительный численный эксперимент по ударному взаимодействию ударника с мишенью в двух вариантах: с армированием и без. Для расчетов было принято, что первая мишень – бетонная плитка толщиной 20 мм, вторая – бетонная плитка аналогичной толщины, усиленная системой внешнего армирования с лицевой и тыльной сторон слоем углепластика толщиной 1 мм.

В диапазоне скоростей встречи 1000÷1500 м/с был произведен расчет ударного взаимодействия стального сферического индентора диаметром 5.9 мм и массой 0.8 г с двумя вышеописанными типами мишеней из мелкозернистого бетона.

В качестве примера на рисунке представлена хронограмма пробития стальным шариком массой 0.8 г со скоростью удара 1250 м/с плитки из мелкозернистого бетона толщиной 20 мм, защищенной углепластиком. Видно, что при начальной скорости ударника 1250 м/с происходит пробой лицевого слоя углепластика и внедрение ударника в бетонное тело мишени. Отметим, что ударник внедрился в мишень на глубину 20.87 мм, т.е. проник на всю глубину мишени. На момент остановки в теле бетонной плитки ($t = 76$ мкс) его масса составила 0.57 г при первоначальной массе 0.8 г. От сквозного пробития слоистой мишени предохранил наклеенный на ее тыльную поверхность слой углекомпозита.



Хронограмма ударного взаимодействия сферического ударника с бетонной плиткой защищенной углепластиком, со скоростью 1250 м/с: а) $t_1=50$ мкс, б) $t_2=60$ мкс, в) $t_3=76$ мкс

На основе полученных результатов моделирования взаимодействия композиционных материалов слоистой конструкции со стальным индентором была проведена оценка диссипации механической энергии. В результате было установлено, что на пробитие преграды из мелкозернистого бетона, усиленной углепластиком пластинки с лицевой и тыльной поверхностей необходимо затратить энергии более чем на 120 % по сравнению с пробитием индентором исходной неармированной преграды.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FEMN-2020-0004).

Список литературы

1. Li P., Xu S., Lu Z., Li J. Experimental study on the performance of CFRP-strengthened masonry structures under debris flow impacts // Structures. 2021. №31 P. 602–612.
2. Yazdani S., Asadollahi S., Shoaee P., Dehestani M. Failure stages in post-tensioned reinforced self-consolidating concrete slab strengthened with CFRP layers // Engineering Failure Analysis. 2021. Vol. 122, 105219.
3. Безручко Г.С., Оситник А.В., Разорёнов С.В. Экспериментальное определение ударно-волновых характеристик углепластиков на основе однонаправленных волокон // Конструкции из композитных материалов. – 2013. – №1. – С. 49-56.
4. Мочалова В.М., Уткин А.В., Павленко А.В. и др. Импульсное сжатие и растяжение эпоксидной смолы при ударно-волновом воздействии // Журнал технической физики. 2019. Т.89. Вып. 1. С. 126-131.
5. Nordendale N.A., Heard W.F. and et. al. Cementitious material models for simulating projectile impact effects // Computational Materials Science. 2013. Vol. 79 P. 745–758.
6. Белов Н.Н., Кабанцев О.В., Копаница Д.Г., Югов Н.Т. Расчетно-экспериментальный метод анализа динамической прочности элементов железобетонных конструкций. Томск: СТТ., 2004. 466 с.

Численное моделирование поведения вязкоэластичных жидкостей около ионоселективных поверхностей

Р. Р. Пономарев^а, Г. С. Ганченко^б, Е. А. Демехин^{б,с}

^аЮжный федеральный университет, ИММиКН им. И. И. Воровича, 344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а.

^бКраснодарский филиал финансового университета, лаборатория электро- и гидродинамики микро- и наномасштабов, 350051, г. Краснодар, ул. Лузана, 34.
email: ganchenko.ru@gmail.com

^сЛаборатория общей аэромеханики, Институт механики МГУ, 119192 Москва, Мичуринский проспект, д. 1
email: edemekhi@gmail.com

Численно исследована электрокинетическая неустойчивость в электролите с добавками полимера (рассмотрены модели FENE-CR и Oldroyd-B). Результаты изучены с точки зрения гидродинамической устойчивости и теории бифуркаций. При небольшом числе Вайсенберга, неустойчивость состояния равновесия наступает при меньших разностях потенциалов между мембранами, чем без добавок полимера. Обнаружена конечно-амплитудная докритическая неустойчивость, приводящая к гистерезису перехода к сверхпредельному току. Учет эффектов запаздывания приводит к сильному уменьшению электроосмотической скорости скольжения и, как следствие, приводит к уменьшению сверхпредельного тока. Наличие полимера приводит к подавлению крупных вихрей, имеющих размер порядка ширины канала, но усиливает мелкие вихри. Релаксация полимера вблизи поверхности дестабилизирует структуры потока и сокращает продолжительность сильноточных потоков. При достаточно больших разностях потенциалов после цикла бифуркаций обнаружен переход к хаотическому движению.

Ключевые слова: вязкоэластичная жидкость; ионоселективная поверхность; электролит; электрокинетическая неустойчивость

Numerical investigation of viscoelastic liquids behavior near ion-selective surface

R. R. Ponomarev^а, G. S. Ganchenko^б, E. A. Demekhin^{б,с}

^аSouthern Federal University, Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Sciences, 344090, Rostov-on-Don, Mil'chakova, 8a.

^бLaboratory of micro- and nanoscale electro- and hydrodynamics, Financial university under Government of Russian Federation, 350051, Krasnodar, 34 Luzana str.
email: edemekhi@gmail.com

^сLaboratory of General Aeromechanics, Institute of Mechanics, Moscow State University, 119192, Moscow.

The electrokinetic instability in an electrolyte with polymer additives is numerically investigated (the FENE-CR and Oldroyd-B models are considered). The results are studied from the point of view of hydrodynamic stability and bifurcation theory. With a small Weissenberg number, the instability of the equilibrium state occurs at smaller potential differences between the membranes than without polymer additives. A finite-amplitude subcritical instability is detected, which leads to the hysteresis of the transition to the overlimiting current. Taking into account the effects of delay leads to a strong decrease in the electroosmotic slip velocity and, as a result, leads to a decrease in the overlimiting current. The presence of the polymer leads to the suppression of large vortices having a size of the order of the channel width, but increases the small vortices. Relaxation of the polymer near the surface destabilizes the flow structures and shortens the duration of high-current flows. At sufficiently large potential differences after the bifurcation cycle, a transition to chaotic motion is detected.

Keywords: viscoelastic liquid; ion-selective surfaces; electrolyte; electrokinetic instability

1. Введение

Задачи и проблемы электрокинетики в последнее время привлекают большое внимание в связи с быстрым развитием микро, нано- и биотехнологий.

Среди многочисленных современных приложений электрокинетики – микронасосы, опреснение, топливные элементы, электрополировка моно- и поликристаллического алюминия, а также рост слоев оксида алюминия для создания микро- и наноразмерных регулярных структур. С точки зрения классической гидродинамики интерес к проблеме связан с новым типом электрогидродинамической неустойчивости – электрокинетической неустойчивости.

Исследование объемного заряда в двойном электрическом ионном слое в растворе электролита вблизи заряженной селективной поверхности (ионообменной мембраны, электрода или системы микроканалов) под действием разности потенциалов является фундаментальной проблемой физики, берущей свое начало с исследований Гельмгольца. Ранние исследования [1] показали, что за пределами небольшой окрестности ионоселективной поверхности, сразу после двойного электрического слоя, существует равновесный диффузионный слой, удовлетворяющий условию электронейтральности. При небольшой разности потенциалов вольт-амперная кривая подчиняется линейной зависимости тока от разности потенциалов, а при увеличении его, ток перестает зависеть от разности потенциалов и выходит на плато. Рубинштейн и Штильман [2] пришли к выводу о неравновесной природе двойного электрического слоя и обнаружили зону пространственного заряда, которая намного толще, чем двойной электрический слой.

При дальнейшем увеличении разности потенциалов между мембранами возникает режим сверхпредельного тока, который опять характеризуется линейной зависимостью тока от разности потенциалов. В работах Рубинштейна и Зальцмана [3, 4] было теоретически показано, что ответственность за переход к сверхпредельному режиму несет особый тип электрогидродинамической неустойчивости, электрокинетическая неустойчивость. Экспериментальное обоснование этого факта может быть найдено в работах [5-9]. Численное исследование электрокинетической неустойчивости было проведено в работах [10-15].

Явление электрокинетической неустойчивости оказалось весьма чувствительно к изменению шероховатости поверхности, ее гидрофобности или гидрофильности, теплоизолированности, активным внешним воздействиям, полимерным добавкам [16-

21]. Целью настоящей работы является исследование электрокинетической неустойчивости электролита около ионоселективной поверхности, в случае полимерных добавок. Рассмотрены две модели полимера, Oldroyd-B и FENE-CR.

2. Постановка задачи

Рассматривается поведение раствора электролита с добавками полимера между двумя ионоселективными поверхностями (мембранами) с расстоянием h между ними, под действием разности потенциалов электрического поля ΔV . Для однозначности, мембраны берутся катион-обменными, то есть не пропускающие ионы. Раствор электролита предполагается бинарным одновалентным. Коэффициенты диффузии катионов и анионов предполагаются равными, т.е. $D^+ = D^- = D$.

Мы используем модель FENE-CR Чилкотта и Рэллсона [22] для определения тензора напряжений

$$\mathbf{T} = \mu_e(\nabla U + \nabla U^T) + Gf(R)(\mathbf{A} - \mathbf{I}). \quad (1)$$

Здесь $\tilde{\mu}_e$ – вязкость растворителя (воды), G – модуль упругости полимера. Пружинная сила задается в виде, где

$$f(R) = \frac{1}{1 - R^2/L^2}, \quad (2)$$

Где $R^2 = \text{tr}(\mathbf{A})$, \mathbf{A} – тензор конформации, L – равновесная предельная величина растяжения. В соответствии с принятой моделью величина неньютоновских напряжений задается параметром $c = G\tau / \mu_e$, а полная вязкость системы определяется соотношением $\mu = \mu_e + G\tau$, то есть $\mu / \mu_e = 1 + c$

Схема течения показана на рис.1.

Для перехода к безразмерной постановке были использованы следующие характерные величины: в качестве характерной длины бралось расстояние между мембранами h , в качестве характерного времени – h^2 / D , в качестве характерного напряжения – $D\mu / h^2$, термический потенциал $R_0 T_0 / F$ взят как характерный. Здесь μ – динамическая вязкость жидкости, D – коэффициент диффузии ионов, R_0 – универсальная газовая постоянная, T_0 – абсолютная температура, F – константа Фарадея.

Характерные величины, делающие систему безразмерной, следующие:

h – характерная длина, расстояние между мембранами;

h^2 / D – характерное время;

$U_0 = D / h$ – характерная скорость;

μ – динамическая вязкость;

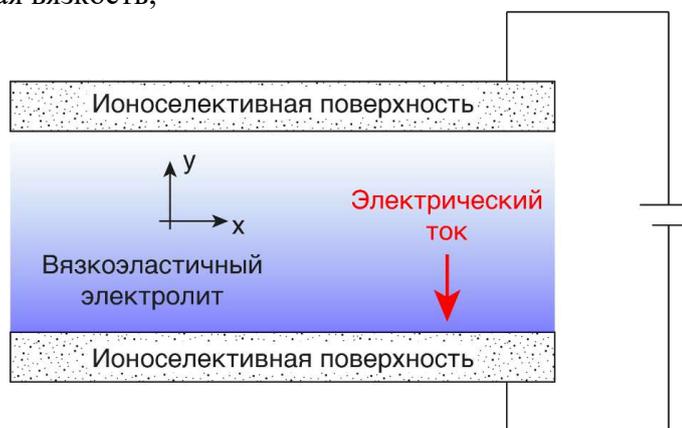


Рис. 1. Схематический рисунок: электролит с добавкой полимера помещен между электродами, являющимися ионоселективными поверхностями

c_0 – характерная концентрация ионов, принимается концентрация электронейтрального раствора в начальный момент времени;

Поведение электролита описывается системой Навье-Стокса относительно поля скоростей $\mathbf{U} = (U, V)$. В силу малости масштаба и, как следствие, малости числа Рейнольдса, для описания движения жидкости используется приближение Стокса ползущего течения,

$$-\frac{\partial \Pi}{\partial x} + \frac{\partial T_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{xy}}{\partial y} = -\kappa \frac{\partial \Phi}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \right) \quad (3)$$

$$-\frac{\partial \Pi}{\partial y} + \frac{\partial T_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yy}}{\partial y} = -\kappa \frac{\partial \Phi}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \right) \quad (4)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} = 0 \quad (5)$$

Здесь Φ – электрический потенциал, κ – безразмерный коэффициент сцепления между гидродинамикой и электростатикой,

$$\kappa = \frac{\varepsilon \Phi_0^2}{\mu D}$$

Он характеризует физические свойства раствора электролита и фиксируется для данной жидкости и электролита. Этот коэффициент имеет порядок единицы, см. [13]. Компоненты тензора напряжений (1) в безразмерном виде запишутся следующим образом,

$$T_{xx} = 2S \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1-S}{We} f(R)(A_{11} - 1) \quad (6)$$

$$T_{xy} = S \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{1-S}{We} f(R) A_{12} \quad (7)$$

$$T_{yy} = 2S \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{1-S}{We} f(R)(A_{22} - 1), \quad (8)$$

Где S – это число запаздывания $S = 1 / (1 + c)$, число Вайсенберга We характеризует эластичность полимеров, связанную со временем релаксации τ , $We = \tau U_0 / h = \tau D / h^2$. Неравенства $We \gg 1$ и $We \ll 1$, соответственно, характеризуют вязкий и упругий пределы поведения. Типичное время запаздывания τ меняется в интервалах 1 с – 10 с (см. [22], [23]), коэффициент диффузии D имеет порядок 10^{-9} м²/с, расстояние h меняется от 1 мм до 1 см, то есть $We = 10^{-2} - 10$. Число запаздывания S , с другой стороны, связано с отношением времени запаздывания из-за неньютоновского напряжения к времени релаксации τ . Это число ограничено нулем (неньютоновский предел) и единицей (упругий предел), $0 < S < 1$. Степень растяжимости L , с другой стороны, может варьироваться от $O(1)$ до $O(We)$, в зависимости от молекулярной массы, причем, при $L \rightarrow \infty$ модель FENE-CR переходит в более простую модель Oldroyd-B (см. [22]).

Тензор конформации \mathbf{A} задается уравнением,

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{A} - \frac{f(R)}{We} (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \quad (9)$$

Поведение электролита описывается системой уравнений Нернста-Планка, относительно концентрации ионов c^\pm и уравнением Пуассона относительно электрического потенциала Φ ,

$$\frac{\partial c^\pm}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla c^\pm = \pm \nabla \cdot (c^\pm \nabla \Phi) + \nabla^2 c^\pm, \quad \nu^2 \nabla^2 \Phi = c^- - c^+ \quad (10)$$

Здесь безразмерная длина Дебая или число Дебая ν определяется следующими соотношениями

$$\nu = \frac{\lambda_D}{h}, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon \Phi_0}{F c_0}}$$

Где наноразмерная длина Дебая λ_D относится к макроразмерной ширине канала h и это соотношение является малым параметром. Так как ν появляется перед старшей производной, это делает задачу сингулярной.

На поверхности мембран задаются следующие краевые условия: плотность заряда равна σ , поток положительных и отрицательных ионов равен нулю, компоненты скорости удовлетворяют условиям непроницаемости и непроскальзывания:

$$y = 0: c^+ = p, \quad -c^- \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \frac{\partial c^-}{\partial y} = 0, \quad \Phi = 0, \quad U = V = 0, \quad A_{11} = A_{22} = 1, \quad A_{12} = 0, \quad (11)$$

$$y = 1: c^+ = p, \quad -c^- \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \frac{\partial c^-}{\partial y} = 0, \quad \Phi = \Delta V, \quad U = V = 0 \quad (12)$$

Первое граничное условие, определяющее концентрацию катионов поверхности мембраны, равную концентрации фиксированных зарядов внутри мембраны, асимптотически справедливо при больших p и впервые была введена Рубинштейном и Штильманом [2], а затем успешно использовалось в работах [4, 10–19]. Второе граничное условие означает запрет для анионов проникать внутрь мембраны, третье условие - задание разности потенциалов ΔV , четвертое условие является условием прилипания жидкости на твердой поверхности. Условие для компонент тензора конформации \mathbf{A} означает отсутствие упругого растяжения на поверхности мембраны, и в силу гиперболичности уравнений (9), должно задаваться только на одной из граничных поверхностей, см. [22].

Предполагается, что пространственная область не ограничена в направлении x , тогда в качестве краевых условий по x берется ограниченность решения при $x \rightarrow \pm\infty$.

Добавление начальных условий для катионов и анионов замыкает сложную систему (1)-(12): в начальный момент времени разность потенциалов отсутствует, следовательно, распределение ионов однородное и электронейтральное, а так как гидродинамическое движение отсутствует, то во всей пространственной области отсутствует упругое растяжение:

$$t = 0: c^+ = c^- = 1, \quad A_{11} = A_{22} = 1, \quad A_{12} = 0 \quad (13)$$

На начальное распределение (13) должно быть наложено малое случайное возмущение, которое реализует появление неустойчивости.

Важной причиной, характеризующей задачу, является электрический ток на поверхности мембраны,

$$y = 0: \quad j = \frac{1}{4} \left(c^+ \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \frac{\partial c^+}{\partial y} \right) \quad (14)$$

Этот ток определяется только потоком катионов и отнесен к предельному току $j_{lim} = 4$.

3. Результаты численного моделирования.

Задача характеризуется тремя безразмерными электродинамическими параметрами: разностью потенциалов ΔV , числом Дебая ν и параметром сцепления гидродинамики и электродинамики κ . Число запаздывания Si число Вайсенберга We являются двумя параметрами, характеризующими упругие эффекты. Результаты задачи слабо зависят от концентрации p на поверхности мембраны (см. [2, 4]). Во всех расчетах принималось $p = 5$. Таким образом общее число независимых параметров равно пяти. В проведенном численном решении значение параметра κ фиксировалось, $\kappa = 0.1$, таким образом, задача описывалась оставшимися четырьмя параметрами.

Модель Пуассона–Нернста–Планка, будучи более общей, также демонстрирует более высокую числовую жесткость. В настоящей работе мы используем модель Пуассона–Больцмана, упрощенную модель Пуассона–Нернста–Планка, из-за справедливости основных предположений в настоящем исследовании и для уменьшения числовой жесткости. Для решения нестационарной задачи (1)-(14) использовался метод прямого численного моделирования, основанный на конечно-разностном подходе, адаптированный из работы [12].

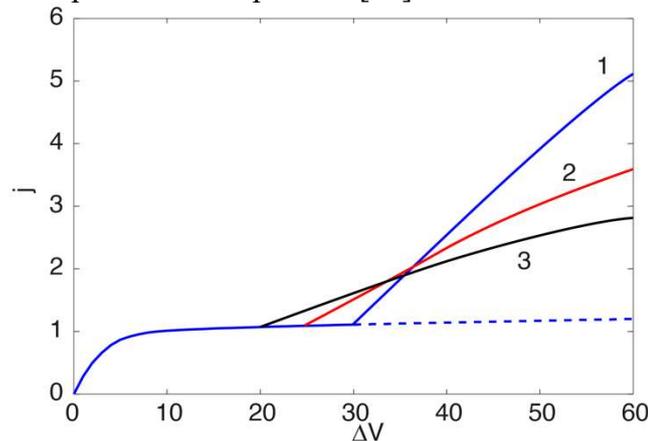


Рис. 2. Вольт-амперная характеристика для $\nu=10^{-3}$ и нескольких значений We : 1 - $We=10$ (практически ньютоновская жидкость), 2 - $We=0.1$, 3 - $We=0.01$. Пунктирная линия соответствует одномерному решению

Интегрирование по времени производится полуявным методом Рунге–Кутты третьего порядка точности. Искались установившиеся решения при больших временах. Для проведения массовых расчетов и обнаружения новых феноменов задача распараллеливалась на суперкомпьютере «Ломоносов».

Вычисления показывают, что при достаточно малых значениях напряжения $\Delta V < \Delta V^*$ реализуются одномерные стационарные решения $U = V = 0$, для которых $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} = 0$. При отсутствии поля скоростей отсутствует и упругое растяжение, то есть $A_{11} = A_{22} = 1$, $A_{12} = 0$. Решение задачи полностью повторяет результаты [12]. На рис. 2 сплошной линией показана вольт-амперная характеристика для допредельных и предельных токов, когда расчеты для разных параметров совпадают. При достаточно больших ΔV одномерное решение теряет устойчивость: для больших чисел Вайсенберга $We = 1$ влиянием сил упругости можно пренебречь и точка потери устойчивости

совпадает с посчитанным результатом в [12], для случая ньютоновской жидкости. При уменьшении We и, следовательно, увеличении роли упругих сил, точка потери устойчивости смещается влево: потеря устойчивости происходит при меньших разностях потенциалов. При малой закритичности образуется регулярная система стационарных микровихрей, при дальнейшем увеличении ΔV , микровихрь теряет стационарность и происходят его периодические колебания во времени. При достаточно больших ΔV колебания теряют регулярность, а режим переходит в стохастический.

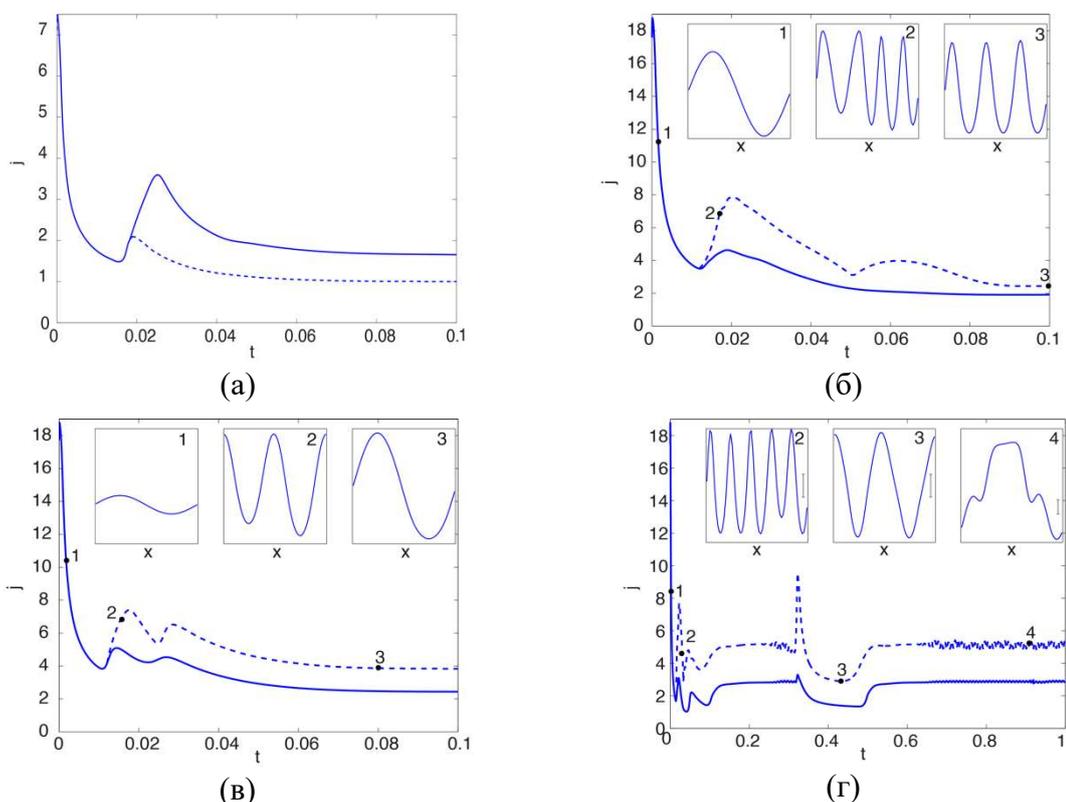


Рис. 3. Эволюция тока от времени для разных ΔV : (а) - $\Delta V = 30$, (б) - $\Delta V = 40$, (в) - $\Delta V = 50$, (г) - $\Delta V = 60$. Сплошная линия соответствует $We=10$ (почти ньютоновская жидкость), пунктирная линия соответствует $We=0.01$. На вставках схематическое распределение функций по x в разные моменты времени

При малых числах Вейсенберга эти бифуркации имеют свою специфику. На рис. 3 показана эволюция тока, определяемого соотношением (14), от времени для случая почти ньютоновской $We = 10$ и вязко-эластичной жидкостей $We = 0.01$. Интересно, что несмотря на то, что увеличение эффектов упругости приводит к смещению порога неустойчивости в сторону меньших значений разности потенциалов ΔV , то есть дестабилизирует течение, то упругость уменьшает значение сверхпредельного тока. Такое явление наблюдалось при всех расчетных параметрах, как для регулярных вихрей, так и для стохастического режима. Для того, чтобы понять физическую природу этого явления, рассмотрим более подробно эволюцию тока во времени для стохастического режима, см. рис. 4 для ньютоновской $We = 10$ и сильно неньютоновской жидкостей.

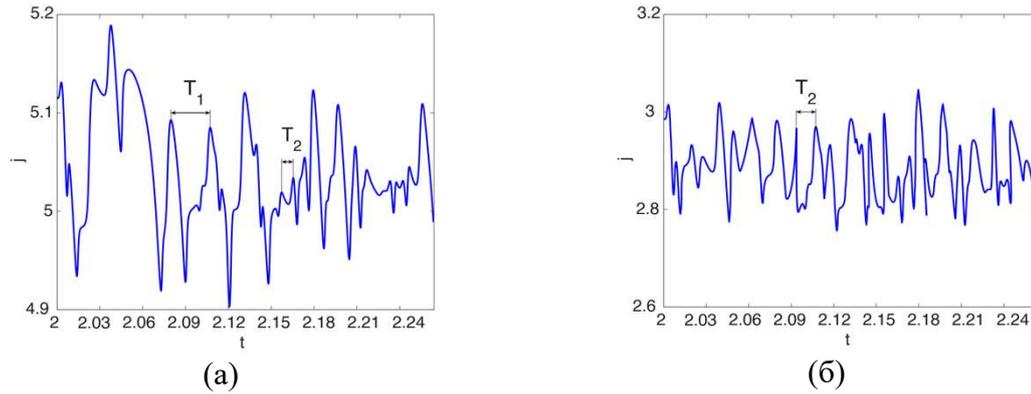


Рис. 4. Зависимость характерной амплитуды тока от времени для случая ньютоновской $We = 10$ (а) и $We = 0.01$ (б) жидкостей, $S = 0.3$, $\Delta V = 60$

На зависимости для ньютоновской жидкости можно увидеть два характерных частот вихрей, связанных с временами на рисунках T_1 , T_2 . Один из этих вихрей, более крупный и медленный, соответствующий времени T_1 , имеет характерный размер порядка ширины канала. Более мелкий и более быстрый вихрь имеет масштаб намного меньше ширины канала. Для малого числа Вайсенберга We крупные вихри подавляются и исчезают, в то время как мелкие остаются. Таким образом, конвекция, связанная с крупномасштабным движением, исчезает, что в свою очередь приводит к уменьшению сверхпредельного тока. На рис. 6 показан спектр зависимости от частоты, который ясно показывает наличие двух локальных максимумов для ньютоновских жидкостей и выглаживание крупных образований для сильно неньютоновского случая. Для $We = 0.01$ в спектре остается только один максимум. Подчеркнем, что малые вихри при этом усиливаются, что видно из рис. 5.

Интересным феноменом, обнаруженным в работах [10, 12], является образование когерентных структур в пристенной зоне отошедшего заряда. Эти структуры имеют конусообразную форму, отделяющие их от квазинейтральной диффузионной зоны, и имеют заостренные концы. Их угол раскрытия для ньютоновских жидкостей вне зависимости от режима течения имеет порядок 120° , более того, подобные структуры можно возбуждать не неустойчивостью, а волнистой поверхностью мембраны, при этом их угол раскрытия не изменится. В работе [24] была показана автомодельность этого решения, само решение было построено аналитически, и было показано, что угол раскрытия конуса равен 110.23° , что отлично соответствует численному эксперименту для ньютоновских жидкостей. Наши вычисления показали, что угол раскрытия практически не зависит от числа Вайсенберга We и числа замедления S и примерно равен 120° . Объяснение этому пока не найдено.

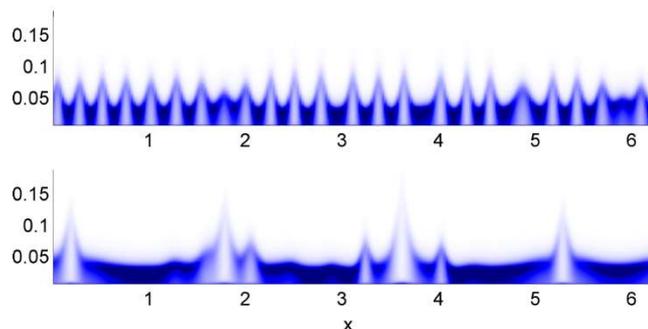


Рис. 5. Распределение плотности заряда для $\Delta V=60$ и двух значений We : $We = 0.01$ сверху, $We = 10$ внизу

Обнаружена конечно-амплитудная докритическая неустойчивость, приводящая к гистерезису перехода к сверхпредельному току. Для обнаружения конечно-амплитудной докритической неустойчивости система (1)-(14) последовательно решалась, начиная с некоторого докритического ΔV . В качестве начальных условий бралось предыдущее стационарное решение и после нахождения нового стационарного решения при большем ΔV опять решалась до нахождения стационарного решения при этом значении ΔV . Так достигалось критическое значение $\Delta V = \Delta V^*$ и решение задачи продолжалось при увеличении ΔV . В режиме сверхпредельного тока мы поворачивали назад, начиная теперь уменьшать ΔV . При подходе к точке линейной неустойчивости слева было обнаружено, что в точке $\Delta V = \Delta V^*$ наблюдается конечно-амплитудная неустойчивость. Так мы находили новую точку, где происходил переход к одномерному решению $\Delta V = \Delta V^{**}$, $\Delta V^* > \Delta V^{**}$. Разница между ΔV^* и ΔV^{**} увеличивалась при уменьшении числа Вайсенберга We и слабо зависела от числа запаздывания S .

4. Заключение

Численно исследована электрокинетическая неустойчивость в электролите с добавками полимера (рассмотрены модели FENE-CR и Oldroyd-B). Результаты изучены с точки зрения гидродинамической устойчивости и теории бифуркаций. При небольшом числе Вайсенберга, неустойчивость состояния равновесия наступает при меньших разностях потенциала между мембранами, чем без добавок полимера. Обнаружена конечно-амплитудная докритическая неустойчивость, приводящая к гистерезису перехода к сверхпредельному току. Учет эффектов запаздывания приводит к сильному уменьшению электроосмотической скорости скольжения и, как следствие, приводит к уменьшению сверхпредельного тока. Наличие полимера приводит к подавлению крупных вихрей, имеющих размер порядка ширины канала, но усиливает мелкие вихри. Релаксация полимера вблизи поверхности дестабилизирует структуры потока и сокращает продолжительность сильноточных потоков. При достаточно больших разностях потенциалов после цикла бифуркаций обнаружен переход к хаотическому движению.

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации, грант для молодых кандидатов наук МК-259.2021.1.1. Исследования были выполнены на оборудовании вычислительных ресурсов высокопроизводительных вычислений МГУ им. М.В. Ломоносова.

Список литературы

1. *Levich L. G.* Physicochemical Hydrodynamics // Prentice-Hall, New York, 1962
2. *Rubinstein I., Shtilman L.* Voltage against current curves of cation exchange membranes // J. Chem. Soc. Faraday Trans. II. 1979. No 75. P. 231-246.
3. *Rubinstein I., Zaltzman B.* Electro-osmotically induced convection at a permselective membrane // Physical Review E. 2000. Vol. 62, 2238.
4. *Zaltzman B., Rubinstein I. J.* Electro-osmotic slip and electroconvective instability // Journal of Fluid Mechanics. 2007. Vol. 579, 173.
5. *Belasova E. D., Melnik N. A., Pismenskaya N. D., Shevtsova K. A., Nebavsky A. V., Lebedev K. A., Nikonenko V. V.* Overlimiting mass transfer through cation-exchange membranes modified by Nafion film and carbon nanotubes // Electrochimica Acta. 2012. Vol. 59, 412.

6. *Pismenskaya N. D., Nikonenko V. V., Belova E. I., Lopatkova G. Yu, Sistat Ph., Pourcelly G., Larchet K* Coupled convection of solution near the surface of ion exchange membranes in intensive current regimes // *Russian Journal of Electrochemistry*. 2007. Vol. 43, 307.
7. *Yossifon G., Chang H. - C.* Selection of nonequilibrium overlimiting currents: Universal depletion layer formation dynamics and vortex instability // *Physical Review Letters*. 2008. Vol. 101, 254501
8. *Rubinstein S. M., Manukyan G., Staicu A., Rubinstein I., Zaltzman B., Lammertink R. G. H., Mugele F., Wessling M.* Direct observation of nonequilibrium electroosmotic instability // *Physical Review Letters*. 2008. Vol. 101, 236101.
9. *Kim S. J., Wang Y. - C., Lee J. H., Jang H., Han J.* Concentration polarization and nonlinear electrokinetic flow near a nanofluidic channel // *Physical Review Letters*. 2007. Vol. 99, 044501.
10. *Demekhin E. A., Shelistov V. S., Polyanskikh S. V.* Linear and nonlinear evolution and diffusion layer selection in electrokinetic instability // *Physical Review E*. 2011, Vol. 84. 036318.
11. *Pham V. S., Li Z., Lim K. M., White J. K., Han J.* Direct numerical simulation of electroconvective instability and hysteretic current-voltage response of a permselective membrane // *Physical Review E*. 2012. Vol. 86, 046310.
12. *Demekhin E. A., Nikitin N. V., Shelistov V. S.* Direct numerical simulation of electrokinetic instability and transition to chaotic motion // *Phys. Fluids*. 2013. Vol. 25, 122001.
13. *Demekhin E. A., Nikitin N. V., Shelistov V. S.* Three-dimensional coherent structures of electrokinetic instability // *Physical Review E*. 2014. Vol. 90, 013031.
14. *Druzgalski C. L., Andersen M. B., Mani A.* Direct numerical simulation of electroconvective instability and hydrodynamic chaos near an ion-selective surface // *Phys. Fluids*. 2013. Vol. 25, 110804
15. *Karatay E., Druzgalski C. L., Mani A.* Simulation of chaotic electrokinetic transport: Performance of commercial software versus custom-built direct numerical simulation codes // *Journal of Colloid and Interface Science*. 2015. Vol. 446, 67-76.
16. *Schiffbauer J., Demekhin E. A., Ganchenko G. S.* Electrokinetic instability in microchannels // *Physical Review E*. 2012. Vol. 85, 055302(R).
17. *Chang H. - C., Demekhin E. A., Shelistov V. S.* Competition between Dukhin's and Rubinstein's electrokinetic modes // *Physical Review E*. 2012. Vol. 86, 046319.
18. *Demekhin E. A., Shelistov V. S., Ganchenko G. S.* Electrokinetic Instability near Charge Selective Hydrophobic Surfaces // *Physical Review E*. 2012. Vol. 85, 055302(R).
19. *Demekhin E. A., Amiroudine S., Ganchenko G. S., Khasmatulina N. Yu.* Thermo-electroconvection near charge-selective surfaces // *Physical Review E*. 2015. Vol. 91, 063006.
20. *Tikekar M. D., Li G., Archer L. A., Koch D. L.* Electroconvection and Morphological Instabilities in Potentiostatic Electrodeposition across Liquid Electrolytes with Polymer Additives // *Journal of the Electrochemical Society*. 2018. Vol. 165, A3697.
21. *Tikekar M. D., Li G., Archer L. A., Koch D. L.* Electroconvection in a Viscoelastic Electrolyte // *Physical Review Letters*. 2019. Vol. 122, 124501.
22. *Chilcott M. D., Rallison J. M.* Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres J. Non-Newtonian // *Fluid Mechanics*. 1988. Vol. 29, 381.
23. *Bird R. B., Armstrong R. A., Hassager O.* Dynamics of Polymeric Fluids // John Wiley & Sons, 1997, New York).
24. *Шелустов В. С., Демёхин Е. А., Ганченко Г. С.* Автомодельное решение задачи об электрической неустойчивости в полупроницаемых мембранах // в сб.: Вестник Московского университета // Математика и механика 5, серия 1, 2014. С. 3-6.

Асимптотическое исследование течения вязкоэластичного электролита около ионоселективной поверхности

В. А. Попов^a, Г. С. Ганченко^b, Е. А. Демехин^{b,c}

^aЮжный федеральный университет, ИММиКН им. И. И. Воровича, 344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а.

^bКраснодарский филиал финансового университета, лаборатория электро- и гидродинамики микро- и наномасштабов, 350051, г. Краснодар, ул. Лузана, 34.
email: ganchenko.ru@gmail.com

^cЛаборатория общей аэромеханики, Институт механики МГУ, 119192 Москва, Мичуринский проспект, д. 1
email: edemekhi@gmail.com

Влияние добавок полимера на электроосмотическое скольжение второго рода и электрокинетическую неустойчивость вблизи заряжено-селективных поверхностей (проницаемых мембран, электродов или систем микро- и наноканалов) теоретически исследовано с помощью простой асимптотической модели для малых чисел Вайсенберга и Дебая. Во внешней квазинейтральной области получена простая аналитическая модель для оценки параметров неустойчивости и порога неустойчивости из-за влияния сил упругости. При небольшом числе Вайсенберга, неустойчивость состояния равновесия наступает при меньших разностях потенциала между мембранами, чем без добавок полимера. Работа дополнена численными исследованиями линейной неустойчивости для модели FENE-CR вязкоупругой жидкости. Теория предсказывает уменьшение потока ионов к поверхности и показывает хорошее количественное согласие с точной численной моделью.

Ключевые слова: вязкоэластичная жидкость; ионоселективная поверхность; электролит; электрокинетическая неустойчивость

Asymptotic investigation of viscoelastic electrolyte flow near ion-selective surface

V. A. Popov^a, G.S. Ganchenko^b, E.A. Demekhin^{b,c}

^aSouthern Federal University, Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Sciences, 344090, Rostov-on-Don, Mil'chakova, 8a.

^bLaboratory of micro- and nanoscale electro- and hydrodynamics, Financial university under Government of Russian Federation, 350051, Krasnodar, 34 Luzana str.
email: edemekhi@gmail.com

^cLaboratory of General Aeromechanics, Institute of Mechanics, Moscow State University, 119192, Moscow;

The effect of polymer additives on second kind electroosmotic slip and electrokinetic instability near charge-selective surfaces (permeable membranes,

electrodes, or micro - and nanochannel systems) is theoretically investigated using a simple asymptotic model for small Weissenberg and Debye numbers. In the external quasineutral region, a simple analytical model is obtained for estimating the instability parameters and the instability threshold due to the influence of elastic forces. With a small Weissenberg number, the instability of the equilibrium state occurs at smaller potential differences between the membranes than without polymer additives. The work is supplemented by numerical studies of linear instability for the FENE-CR model of a viscoelastic fluid. The theory predicts a decrease in the ion flux to the surface and shows good quantitative agreement with the exact numerical model.

Keywords: viscoelastic liquid; ion-selective surfaces; electrolyte; electrokinetic instability

1. Введение

Течение и неустойчивости в вязкоупругих жидкостях давно исследовались в чисто гидродинамических системах, где отсутствовали электростатические силы [1–3]. Неустойчивости вязкоупругих жидкостей наблюдались во многих случаях течения жидкости в микромасштабе, таких как в конфузорно-диффузорных микроканалах, щелевых устройствах, микроустройствах фокусировки потока, тройниках различных устройств, в резких изгибах микроканалов и даже в плоских каналах. Такая неустойчивость вызывается большими растягивающими напряжениями из-за вызванных течением изменений молекулярной структуры полимеров в областях с сильными искривлениями линий тока. Большая часть исследований вязкоупругой неустойчивости относится к течениям без кулоновой силы, несмотря на широкое использование электрических полей для переноса жидкостей в микро- и наномасштабах. В настоящее время отсутствуют исследования течения вязкоупругих жидкостей, вызванного электрическими силами. Данное исследование проведено, чтобы восполнить этот недостаток, причем, течения электролитов рассмотрены вблизи ионоселективных поверхностей, пропускающих только один тип ионов. Таким образом, работа находится на стыке нескольких научных направлений.

Задачи и проблемы электрокинетики в последнее время привлекают большое внимание в связи с быстрым развитием микро-, нано- и биотехнологий. Среди многочисленных современных приложений электрокинетики - микронасосы, опреснение, топливные элементы, электрополировка моно- и поликристаллического алюминия, а также рост слоев оксида алюминия для создания микро- и наноразмерных регулярных структур. С точки зрения классической гидромеханики интерес к проблеме связан с новым типом электрогидродинамической неустойчивости - электрокинетической неустойчивости, наблюдающейся вблизи ионоселективных поверхностей (см. ставшие классическими работы Рубинштейна и Зальцмана [4, 5]). Экспериментальное обоснование наличия электрокинетической неустойчивости дано в работах [6–10]. Численное исследование электрокинетической неустойчивости было проведено в работах [11–16].

Во всех работах по электрокинетической неустойчивости в качестве рабочей жидкости служила вода, которая является ньютоновской жидкостью. Целью настоящей работы является исследование электрокинетической неустойчивости электролита около ионоселективной поверхности, в случае полимерных добавок. Рассмотрена модель полимера FENE-CR, частным случаем которой является модель Oldroyd-B.

Изучение вязкоупругих неустойчивостей важно не только для фундаментальной науки, но также находит применение в инженерных приложениях. Например, условия хаотического потока, развивающиеся в режиме упругой турбулентности, могут

улучшить тепломассоперенос в микро-течениях, когда реализуется ползущее течение и число Рейнольдса практически равно нулю.

2. Постановка задачи

Рассматривается поведение раствора электролита с добавками полимера между двумя ионоселективными поверхностями (мембранами) с расстоянием h между ними, под действием разности потенциалов электрического поля ΔV . Для однозначности мембраны берутся катионообменными, то есть не пропускающие отрицательные ионы. Раствор электролита предполагается бинарным одновалентным. Коэффициенты диффузии катионов и анионов предполагаются равными, т.е. $D^+ = D^- = D$.

Мы используем модель FENE-CR Чилкотта и Рэллсона [2] для определения тензора напряжений T , $T = \tilde{\mu}_e(\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T) + Gf(R)(\mathbf{A} - \mathbf{I})$, здесь μ_e - вязкость растворителя (воды), G - модуль упругости полимера, \mathbf{A} – тензор конформации. В соответствии с принятой моделью величина неньютоновских напряжений задается параметром $c = G_\tau/\mu_e$, а полная вязкость системы определяется соотношением $\mu = \mu_e + G_\tau$, то есть $\mu/\mu_e = 1 + c$. Так называемая пружинная сила задается в виде, $f(R) = 1/(1 - R^2/L^2)$, где R^2 равен сумме диагональных элементов тензора \mathbf{A} , $R^2 = \text{tr}(\mathbf{A})$, L - равновесная предельная величина растяжения. Схема течения показана на рис. 1.

Для перехода к безразмерной постановке были использованы следующие характерные величины: в качестве характерной длины бралось расстояние между мембранами h , в качестве характерного времени - h^2/D , в качестве характерной скорости бралось $U_0 = D/h$, в качестве характерного электрического напряжения $D\mu/h^2$, термический потенциал R_0T_0/F взят как характерный. В качестве характерной концентрации принимается концентрация электро-нейтрального невозмущенного раствора в начальный момент времени. Здесь R_0 – универсальная газовая постоянная, T_0 – абсолютная температура, F – постоянная Фарадея.

Поведение электролита описывается системой Навье-Стокса относительно поля скоростей $\mathbf{U} = (U, V)$. В силу малости масштаба и, как следствие, малости числа Рейнольдса, для описания движения жидкости используется приближение Стокса ползущего течения.

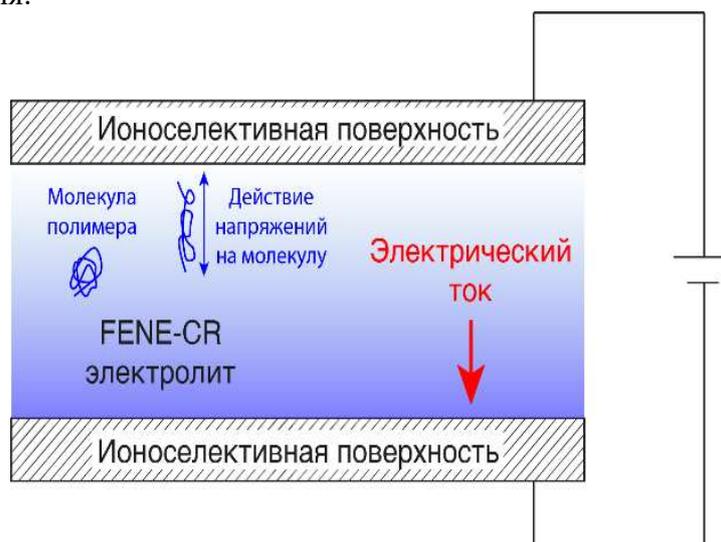


Рис. 1. Схема геометрической постановки задачи

$$-\frac{\partial \Pi}{\partial x} + S \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) + \frac{(S-1)}{We} \left(\frac{\partial}{\partial x} (fA_{11}) + \frac{\partial}{\partial y} (fA_{12}) \right) = -\kappa \frac{\partial \Phi}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \right), \quad (1)$$

$$-\frac{\partial \Pi}{\partial x} + S \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right) + \frac{(S-1)}{We} \left(\frac{\partial}{\partial x} (fA_{12}) + \frac{\partial}{\partial y} (fA_{22}) \right) = -\kappa \frac{\partial \Phi}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} = 0. \quad (3)$$

Компоненты симметричного тензор конформации \mathbf{A} описываются уравнениями,

$$\frac{\partial A_{11}}{\partial t} + U \frac{\partial A_{11}}{\partial x} + V \frac{\partial A_{11}}{\partial y} = 2A_{11} \frac{\partial U}{\partial x} + 2A_{12} \frac{\partial U}{\partial y} - \frac{f(R)}{We} (A_{11} - 1), \quad (4)$$

$$\frac{\partial A_{12}}{\partial t} + U \frac{\partial A_{12}}{\partial x} + V \frac{\partial A_{12}}{\partial y} = A_{11} \frac{\partial V}{\partial x} + A_{22} \frac{\partial U}{\partial y} - \frac{f(R)}{We} A_{12}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial A_{22}}{\partial t} + U \frac{\partial A_{22}}{\partial x} + V \frac{\partial A_{22}}{\partial y} = 2A_{12} \frac{\partial V}{\partial x} + 2A_{22} \frac{\partial V}{\partial y} - \frac{f(R)}{We} (A_{22} - 1). \quad (6)$$

Поведение электролита описывается системой уравнений Нернста-Планка, относительно концентраций ионов c^\pm и уравнением Пуассона относительно электрического потенциала Φ ,

$$\frac{\partial c^+}{\partial t} + U \frac{\partial c^+}{\partial x} + V \frac{\partial c^+}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(c^+ \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(c^+ \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 c^+}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c^+}{\partial y^2}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial c^-}{\partial t} + U \frac{\partial c^-}{\partial x} + V \frac{\partial c^-}{\partial y} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(c^- \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(c^- \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 c^-}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c^-}{\partial y^2}, \quad (8)$$

$$v^2 \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \right) = c^- - c^+. \quad (9)$$

Здесь $S = 1/(1 + c)$ это число запаздывания, We – число Вайсенберга. Число Вайсенберга — это безразмерное время релаксации жидкости и характерная скорость деформации, это безразмерное число, обычно используемое для количественной оценки относительной важности упругих и вязких напряжений. Критическое значение We для возникновения упругих неустойчивостей зависит от нескольких факторов, и поведение потока после потери устойчивости также зависит от этих факторов. We характеризует эластичность полимеров, связанную со временем релаксации τ , $We = \tau U_0/h = \tau D/h^2$, κ – безразмерный коэффициент сцепления между гидродинамикой и электростатикой, $\kappa = \varepsilon \Phi_0^2/(\mu D)$. Он характеризует физические свойства раствора электролита и фиксируется для данной жидкости и электролит. Этот коэффициент имеет порядок единицы, см. [14].

В данной работе мы рассмотрим случай малого числа Вайсенберга, $We \ll 1$, что характеризует упругий пределы поведения; число Дебая считается малым, $v \ll 1$, но их отношение конечно, $We/v = O(1)$. Число запаздывания S , ограничено нулем и единицей, $0 < S < 1$. Число растяжимости L , имеем порядок $1/We$, то есть $L \rightarrow \infty$. Здесь безразмерная длина Дебая или число Дебая v определяется следующими соотношениями

$$v = \frac{\lambda_D}{h}, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon \Phi_0}{F c_0}}$$

где нано-размерная длина Дебая λ_D относится к макроразмерной ширине канала h и это отношение является малым параметром. Так как v появляется перед старшей производной, это делает задачу сингулярной.

Первое граничное условие, определяющее концентрацию катионов на поверхности мембраны, равную концентрации фиксированных зарядов внутри мембраны, условие асимптотически справедливо при больших p и впервые была введена Рубинштейном и Штильманом, а затем успешно использовалось в работах [5, 11–20]. Второе граничное условие означает запрет для анионов проникать внутрь мембраны, третье условие - задание разности потенциалов ΔV , четвертое условие является условием прилипания жидкости на твердой поверхности. Условие для компонент тензора конформации A означают отсутствие упругого растяжения на поверхности мембраны, в силу гиперболичности уравнений (4) должно задаваться только на одной из граничных поверхностей, см. [2].

Предполагается, что пространственная область не ограничена в направлении x , тогда в качестве краевых условий по x , берётся ограниченность решения при $x \rightarrow \pm\infty$. Важной величиной, характеризующей задачу, является электрический ток на поверхности мембраны,

$$y = 0: \quad j = \frac{1}{4} \left(c^+ \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \frac{\partial c^+}{\partial y} \right). \quad (10)$$

этот ток определяется только потоком катионов и отнесен к предельному току $j_{lim} = 4$. Задача характеризуется тремя безразмерными электродинамическими параметрами: разностью потенциалов ΔV , числом Дебая ν и параметром сцепления гидродинамики и электродинамики k . Число запаздывания S и число Вайсенберга We являются двумя параметрами, характеризующими упругие эффекты. Результаты задачи слабо зависят от концентрации p на поверхности мембраны (см. [5]). Во всех расчетах принималось $p = 5$. Таким образом общее число независимых параметров равно пяти. В проведенном решении значение параметра k фиксировалось $k = 0.1$, таким образом задача описывалась оставшимися четырьмя параметрами.

3. Результаты асимптотического анализа

а. Скорость электроосмотического скольжения

Заметим, что задача имеет одномерное стационарное решение, для которого $\partial/\partial t = 0, \partial/\partial x = 0$, гидродинамическое движение отсутствует, а значит отсутствует и упругое растяжение. Решение для концентраций ионов, компонент скорости и компонент тензора конформации, описываются соотношениями,

$$c^+ = c^- = 1, \quad U = V = 0, \quad A_{11} = A_{22} = 1, \quad A_{12} = 0, \quad (11)$$

а решения для потенциала описывается нелинейным обыкновенным уравнением второго порядка,

$$\nu^2 \frac{d^2 E}{dy^2} + \left[j(y_m - y) - \frac{\nu^2}{2} E^2 \right] E + j = 0. \quad (12)$$

здесь $E \equiv \partial\Phi/\partial y$ и y_m – длина области пространственного заряда (ОПЗ). В этом решении не участвует гидродинамическое движение, поскольку нет тангенциальной составляющей электрического поля, $\partial\Phi/\partial x = 0$. При $\nu \rightarrow 0$ и $E = O(1/\nu)$, $\partial/\partial y = O(1)$, решение уравнения (12) в ОПЗ, $0 < y < y_m$, есть

$$\nu E = \nu \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \sqrt{2j(y_m - y)}, \quad \nu \Phi = \frac{2\sqrt{2}}{3j} (jy_m)^{3/2} - \frac{(2jy_m - 2jy)^{3/2}}{3j} \quad (13)$$

Из этих соотношений мы можем найти длину y_m ОПЗ,

$$y_m = \frac{9^{1/3} \nu^{3/2} \Delta V_1^{2/3}}{2j^{1/3}}, \quad (14)$$

где ΔV_1 разность потенциалов в ОПЗ.

Предположим, что независимые переменные системы в ОПЗ не постоянны по отношению к x , а представляют собой медленно меняющиеся функции: $\partial/\partial x \ll \partial/\partial y$, $V \ll U$. Тогда уравнения (4)–(6) переходят в следующую алгебраическую систему относительно компонент тензора конформации:

$$2A_{12} \frac{\partial U}{\partial y} = \frac{f}{We} (A_{11} - 1), \quad \frac{\partial U}{\partial y} = \frac{f}{We} A_{12}, \quad \frac{f}{We} (A_{22} - 1) = 0, \quad f = \frac{1}{1-(1+A_{11})/L^2}, \quad (15)$$

которое имеет решение

$$A_{12} = \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{8}{L^2} \left(1 - \frac{2}{L^2}\right) We^2 \left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)^2}}{\frac{4}{L^2} We \frac{\partial U}{\partial y}}, \quad A_{11} = 1 + 2A_{12}^2, \quad A_{22} = 1, \quad (16)$$

второе решение приводит к отрицательному A_{12} и не имеет физического смысла.

В случае большого значения $L \gg 1$, решение в первом приближении по малому $1/L^2$ принимает вид:

$$A_{12} = We \frac{\partial U}{\partial y} \left(1 - \frac{4}{L^2} \left(2 + We^2 \left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)^2\right)\right), \quad A_{11} = 1 + 2A_{12}^2, \quad A_{22} = 1. \quad (17)$$

Уравнения Стокса (1) и (2) в принятом приближении переходят в следующие,

$$\frac{\partial U}{\partial y} + \tau_{xy} = \frac{\partial}{\partial x} \int \Pi dy - \kappa \int \frac{\partial E}{\partial y} \frac{\partial \Phi}{\partial x} dy, \quad \Pi = \frac{\kappa}{2} E^2, \quad \text{где } E = \frac{\partial \Phi}{\partial y}, \quad (18)$$

граничными условиями

$$y = 0: \quad U = 0, \quad y = y_m: \quad \frac{\partial U}{\partial y} = 0 \quad (19)$$

Здесь τ_{xy} - единственная компонента тензора упругих напряжений, которая вносит вклад в решение для приближения $\partial/\partial x \ll \partial/\partial y$, $V \ll U$ и выражающаяся через A_{12} следующим образом,

$$\tau_{xy} = \frac{1-s}{We} f \cdot A_{12}, \quad f = \frac{1}{1-(1+A_{11})/L^2}. \quad (20)$$

В уравнении (18) электростатический потенциал Φ определяется соотношениями (13) и (14), а A_{12} описывается решением (16). Таким образом система (18) и (19) фактически является нелинейным дифференциальным уравнением первого порядка сложного типа относительно неизвестного $U(y)$. Найти скорость скольжения U_m можно численно для конкретных значений параметров.

Пренебрегая что падением потенциала в части электронейтральной диффузии, $\Delta V = \Delta V_1$, и предполагая, что все падение потенциала происходит в области объемного заряда, можно найти упрощенную скорости электроосмотического скольжения, которая и будет использована далее.

в. Диффузионная область и критические точки

В квазиэлектронейтральной диффузионной области, $y_m < y < 1$, уравнения влиянием упругой части напряжений можно пренебречь. Кроме того, пренебрегаем в этой области остаточным зарядом, тогда, вводя функцию тока Ψ

$$U = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad V = -\frac{\partial \Psi}{\partial x},$$

уравнения (1)–(3) вместе с краевыми условиями переходят в следующие уравнения,

$$\frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \Psi}{\partial y^4} = 0, \quad (21)$$

$$y = y_m: \Psi = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = U_m, \quad y = 1: \Psi = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = 0. \quad (22)$$

$$\frac{\partial K}{\partial t} + U \frac{\partial K}{\partial x} + V \frac{\partial K}{\partial y} = \frac{\partial^2 K}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K}{\partial y^2}, \quad (23)$$

$$y = y_m: K = a \left(v \frac{\partial K}{\partial y} \right)^{2/3}, \quad y = 1: \int_{y_m}^1 K dy = 2. \quad (24)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) = 0, \quad (25)$$

$$y = y_m: \Phi = \Delta V_1, \quad y = 1: \Phi = \Delta V. \quad (26)$$

Здесь, $K = c^+ + c^-$ это концентрация соли и $a \approx 0.966$.

Для одномерного стационарного решения, $\partial/\partial t = \partial/\partial x = 0$, решением системы (21)–(26) является

$$y_m = \left(1 - \frac{2}{\sqrt{j}} \right) + \frac{av^{2/3}}{j^{1/3}}, \quad (27)$$

$$K = v^{2/3} j^{2/3} + \frac{y-y_m}{1-y_m} \left(-2av^{2/3} j^{2/3} + \frac{4}{1-y_m} \right), \quad (28)$$

$$\Phi = \ln \left[1 + \frac{j^{1/3}}{av^{2/3}} (y - y_m) \right] + \frac{(2jy_m)^{2/3}}{3jv}. \quad (29)$$

Членами $O(v^{4/3})$ пренебрегалось. Подстановка $\Phi = \Delta V$ при $y = 1$ в (29) дает выражения для вольтамперной характеристики.

Для исследования линейной устойчивости найденного решения наложим на него малые синусоидальные возмущения вида $f = f_0(y) + \hat{f}(y) \exp(ikx + \lambda t)$, $\hat{f} \rightarrow 0$. Линеаризуя (21)–(26) относительно возмущений превращает систему в систему линейных ОДУ, которую легко решить аналитически. Рассматривается только случай нейтральной устойчивости, $\lambda = 0$.

Критические параметры порога неустойчивости определяются условием

$$\frac{\partial \Delta V}{\partial k} \Big|_{k=k_*} = \infty. \quad (30)$$

4. Численное решение и сравнение его с асимптотическим решением

Эти аналитические результаты теперь будут проверены и дополнены численными расчетами линейной устойчивости.

а. Линейная устойчивость

Рассмотрим синусоидальные возмущения с волновым числом k , наложенным на одномерное стационарное решение:

$$c^\pm = c_0^\pm + \hat{c}^\pm \exp(ikx + \lambda t),$$

$$\Phi = \Phi_0 + \hat{\Phi} \exp(ikx - \lambda t), \quad U = \hat{U} \exp(ikx - \lambda t), \quad V = \hat{V} \exp(ikx - \lambda t).$$

$$A_{11} = 1 + \hat{A}_{11} \exp(ikx - \lambda t),$$

$$A_{22} = 1 + \hat{A}_{22} \exp(ikx - \lambda t), \quad A_{12} = \hat{A}_{12} \exp(ikx - \lambda t).$$

Нижний индекс 0 относится к основному решению; шляпка, к возмущениям. После подстановки этих выражений в основные уравнения, линейризации относительно возмущений и опускания индекса 0 в основном решении, получим

$$\lambda \hat{c}^+ + \frac{dc^+}{dy} \hat{V} = \frac{d}{dy} \left(c^+ \frac{d\hat{\Phi}}{dy} + \frac{d\Phi}{dy} \hat{c}^+ + \frac{d\hat{c}^+}{dy} \right) - k^2 c^+ \hat{\Phi} - k^2 \hat{c}^+, \quad (31)$$

$$\lambda \hat{c}^- + \frac{dc^-}{dy} \hat{V} = \frac{d}{dy} \left(-c^- \frac{d\hat{\Phi}}{dy} - \frac{d\Phi}{dy} \hat{c}^- + \frac{d\hat{c}^-}{dy} \right) - k^2 c^- \hat{\Phi} - k^2 \hat{c}^-, \quad (32)$$

$$v^2 \left(\frac{d^2 \hat{\Phi}}{dy^2} - k^2 \hat{\Phi} \right) = \hat{c}^- - \hat{c}^+, \quad (33)$$

$$-ik\hat{\Pi} + S \left(\frac{d^2 \hat{U}}{dy^2} - k^2 \hat{U} \right) + \frac{S-1}{We} \left(\frac{ik \hat{c}_{11}}{1+\frac{2}{L^2}} + \frac{ik(\hat{A}_{11} + \hat{A}_{22})}{L^2(1+\frac{2}{L^2})^2} + \frac{1}{1+\frac{2}{L^2}} \frac{d\hat{A}_{12}}{dy} \right) = ikk \frac{d^2 \Phi}{dy^2} \hat{\Phi}, \quad (34)$$

$$\begin{aligned} -\frac{d\hat{\Pi}}{dy} + S \left(\frac{d^2 \hat{V}}{dy^2} - k^2 \hat{V} \right) + \frac{S-1}{We} \left(\frac{ik \hat{c}_{12}}{1+\frac{2}{L^2}} + \frac{1}{L^2(1+\frac{2}{L^2})^2} \left(\frac{d\hat{A}_{11}}{dy} + \frac{d\hat{A}_{22}}{dy} \right) + \frac{1}{1+\frac{2}{L^2}} \frac{d\hat{A}_{22}}{dy} \right) = \\ = \kappa \left(\frac{d\Phi}{dy} \frac{d^2 \hat{\Phi}}{dy^2} + \frac{d^2 \Phi}{dy^2} \frac{d\hat{\Phi}}{dy} \right), \end{aligned} \quad (35)$$

$$ik\hat{U} + \frac{d\hat{V}}{dy} = 0, \quad (36)$$

$$\lambda \hat{A}_{11} = 2ik\hat{U} - \frac{1}{We} \frac{\hat{A}_{11}}{(1+2/L^2)},$$

$$\lambda \hat{A}_{12} = 2ik\hat{V} + \frac{d\hat{U}}{dy} - \frac{1}{We} \frac{\hat{A}_{12}}{(1+2/L^2)}, \quad \lambda \hat{A}_{22} = 2 \frac{d\hat{V}}{dy} - \frac{1}{We} \frac{\hat{A}_{22}}{(1+2/L^2)}, \quad (37)$$

$$y = 0: \quad \hat{\Phi} = 0, \quad \hat{U} = \hat{V} = 0, \quad \hat{A}_{11} = \hat{A}_{12} = \hat{A}_{22} = 0,$$

$$c^- \frac{d\hat{\Phi}}{dy} + \frac{d\Phi}{dy} \hat{c}^- - \frac{d\hat{c}^-}{dy} = 0, \quad \hat{c}^+ = 0, \quad (38)$$

$$y = 1: \quad \hat{\Phi} = 0, \quad \hat{U} = \hat{V} = 0, \quad c^- \frac{d\hat{\Phi}}{dy} + \frac{d\Phi}{dy} \hat{c}^- - \frac{d\hat{c}^-}{dy} = 0, \quad \hat{c}^+ = 0. \quad (39)$$

Псевдоспектральный метод Галеркина с полиномами Чебышева, взятыми в качестве основных функций [23], был использован для дискретизации нелинейного уравнения (12) и решения проблемы собственных значений (31) - (39). Затем система нелинейных алгебраических уравнений, происходящая из (12), была решена методом Ньютона, а обобщенная проблема собственных значений матрицы решалась с помощью QR-алгоритма.

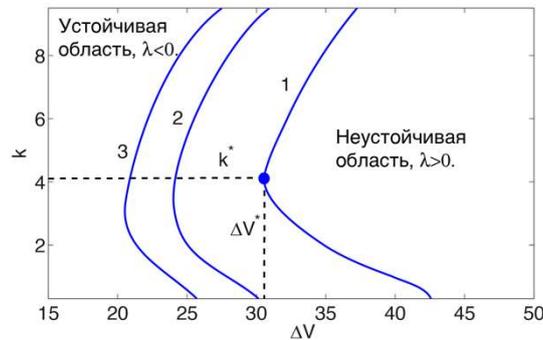


Рис. 2. Кривые нейтральной устойчивости для $v = 10^{-3}$, $S = 0.5$ и различным значениям We : 1 – $We = 100$ (практически ньютоновский случай), 2 – $We = 0.1$, 3 – $We = 0.01$

Типичные кривые нейтральной устойчивости для различных значений We для $S = 0.5$ и $\nu = 10^{-3}$ показаны на рис. 2. Они проясняют влияние добавок полимера на электрокинетическая неустойчивость. Даже относительно небольшая добавка приводит к значительной дестабилизации потока со смещением порога неустойчивости влево.

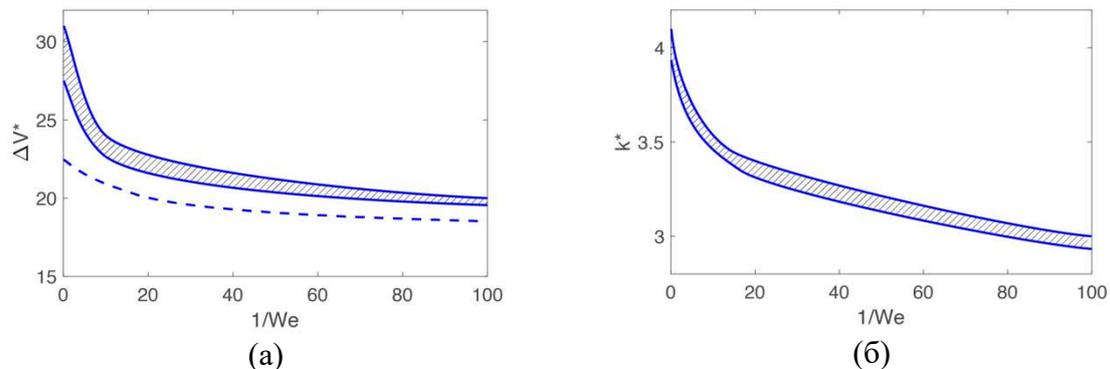


Рис. 3. Зависимости критической разности потенциалов (а) и критического волнового числа (б). Сплошная линия соответствует численным расчетам, пунктирная – аналитическим результатам. Заштрихована область соответствует параметром от 10^{-5} до 10^{-3} , где нижняя граница соответствует $\nu = 10^{-5}$

При дальнейшем уменьшении We наблюдается некоторое насыщение влияния упругости. Критическая длина волны $2\pi/k^*$ с уменьшением We становится больше, но это увеличение относительно невелико по сравнению с изменениями в ΔV^* .

Изменение We с $We = 10$ до $We = 0.01$ сопровождается увеличением $\lambda_{max}(k)$ более чем в десять раз; наблюдается явное насыщение при дальнейшем увеличении We . Результаты по устойчивости обобщены на рис. 3. На рисунке (а) представлен критический перепад потенциала ΔV^* для диапазона ν от 10^{-5} до 10^{-3} . Зависимость от числа Дебая ν довольно слабая и характеризуется заштрихованной областью на рисунке. Пунктиром отмечена полуаналитическая зависимость, полученная из условия (30). Видно, что качественно результаты соответствуют друг другу. Численные результаты находятся немного выше аналитических и, следовательно, зависимость ΔV^* от We слабее, чем предсказывают аналитическое решение. Тем не менее видно, что при уменьшении We и ν результаты становятся ближе.

5. Заключение

Влияние добавок полимера на электроосмотическое скольжение второго рода и электрокинетическую неустойчивость вблизи ионоселективных поверхностей (проницаемых мембран, электродов или систем микро- и наноканалов) теоретически исследовано с помощью простой асимптотической модели для малых чисел Вайсенберга и Дебая. Во внешней квазинейтральной области получена простая аналитическая модель для оценки параметров неустойчивости и порога неустойчивости из-за влияния сил упругости. При небольшом числе Вайсенберга, неустойчивость состояния равновесия наступает при меньших разностях потенциала между мембранами, чем без добавок полимера. Работа дополнена численными исследованиями линейной неустойчивости для модели FENE-CR вязкоупругой жидкости. Теория предсказывает уменьшение потока ионов к поверхности и показывает хорошее количественное согласие с точной численной моделью.

6. Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации, грант для молодых кандидатов наук МК-259.2021.1.1.

Список литературы

1. *R. B. Bird, R. A. Armstrong, and O. Hassager, Dynamics of Polymeric Fluids // John Wiley & Sons, 1977, New York.*
2. *M. D. Chilcott and J. M. Rallison, Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres J. Non-Newtonian // Fluid Mechanic. 1988. Vol. 29, 381.*
3. *H.-C. Chang, E. A. Demekhin, and E. Kalaidin. Iterated stretching of viscoelastic jets // Physics of fluids. 1999. Vol. 11, 7, 1717-1737.*
4. *I. Rubinstein and B. Zaltzman, Electro-osmotically induced convection at a permselective membrane // Physical Review E. 2000. Vol. 62, 2238.*
5. *B. Zaltzman and I. Rubinstein, Electro-osmotic slip and electroconvective instability // Journal of Fluid Mechanics. 2007. Vol. 579, 173.*
6. *E. D. Belashova, N. A. Melnik, N. D. Pismenskaya, K. A. Shevtsova, A. V. Nebavsky, K. A. Lebedev and V. V. Nikonenko, Overlimiting mass transfer through cation-exchange membranes modified by Nafion film and carbon nanotubes // Electrochimica Acta. 2012. Vol. 59, 412.*
7. *N. D. Pismenskaya, V. V. Nikonenko, E. I. Belova, G. Yu. Lopatkova, Ph. Sistat, G. Pourcelly, and K. Larchet, Coupled convection of solution near the surface of ion exchange membranes in intensive current regimes // Russian Journal of Electrochemistry. 2007. Vol. 43, 307.*
8. *G. Yossifon and H.-C. Chang, Selection of nonequilibrium overlimiting currents: Universal depletion layer formation dynamics and vortex instability // Physical Review Letters. 2008. Vol. 101, 254501.*
9. *S. M. Rubinstein, G. Manukyan, A. Staicu, I. Rubinstein, B. Zaltzman, R. G. H. Lammertink, F. Mugele, and M. Wessling, Direct observation of nonequilibrium electroosmotic instability // Physical Review Letters. 2008. Vol. 101, 236101.*
10. *S. J. Kim, Y.-C. Wang, J. H. Lee, H. Jang, and J. Han, Concentration polarization and nonlinear electrokinetic flow near a nanofluidic channel // Physical Review Letters. 2007. Vol. 99, 044501.*
11. *E. A. Demekhin, V. S. Shelistov and S. V. Polyanskikh, Linear and nonlinear evolution and diffusion layer selection in electrokinetic instability // Physical Review E. 2011, Vol. 84. 036318.*
12. *V. S. Pham, Z. Li, K. M. Lim, J. K. White and J. Han, Direct numerical simulation of electroconvective instability and hysteretic current-voltage response of a permselective membrane // Physical Review E. 2012. Vol. 86, 046310.*
13. *E. A. Demekhin, N. V. Nikitin and V. S. Shelistov, Direct numerical simulation of electrokinetic instability and transition to chaotic motion // Phys. Fluids. 2013. Vol. 25, 122001.*
14. *E. A. Demekhin, N. V. Nikitin, and V. S. Shelistov, Three-dimensional coherent structures of electrokinetic instability // Physical Review E. 2014. Vol. 90, 013031.*
15. *C. L. Druzgalski, M. B. Andersen, and A. Mani, Direct numerical simulation of electroconvective instability and hydrodynamic chaos near an ion-selective surface // Phys. Fluids. 2013. Vol. 25, 110804.*
16. *E. Karatay, C.L. Druzgalski, A. Mani, Simulation of chaotic electrokinetic transport: Performance of commercial software versus custom-built direct numerical simulation codes // Journal of Colloid and Interface Science. 2015. Vol. 446, 67-76.*

17. *J. Schiffbauer, E. A. Demekhin and G. S. Ganchenko*, Electrokinetic instability in microchannels // *Physical Review E*. 2012. Vol. 85, 055302(R).
18. *H.-C. Chang, E. A. Demekhin, and V. S. Shelistov*, Competition between Dukhin's and Rubinstein's electrokinetic modes // *Physical Review E*. 2012. Vol. 86, 046319.
19. *E. A. Demekhin, V. S. Shelistov and G. S. Ganchenko*, Electrokinetic Instability near Charge Selective Hydrophobic Surfaces // *Physical Review E*. 2012. Vol. 85, 055302(R).
20. *E. A. Demekhin, S. Amiroudine, G. S. Ganchenko, and N. Yu. Khasmatulina*, Thermo-electroconvection near charge-selective surfaces // *Physical Review E*. 2015. Vol. 91, 063006.
21. *M. D. Tikekar, G. Li, L. A. Archer, and D. L. Koch*, Electroconvection and Morphological Instabilities in Potentiostatic Electrodeposition across Liquid Electrolytes with Polymer Additives // *Journal of the Electrochemical Society*. 2018. Vol. 165, A3697.
22. *M. D. Tikekar, G. Li, L. A. Archer, and D. L. Koch*, Electroconvection in a Viscoelastic Electrolyte // *Physical Review Letters*. 2019. Vol. 122, 124501.
23. *S. A. Orszag*, Accurate solution of the Orr–Sommerfeld stability equation // *Journal of Fluid Mechanics*. 1971. Vol. 50, 689.

Моделирование в капилляре с учетом неравновесного капиллярного давления

С. А. Прокопьев^a, Т. П. Любимова^{a,b}, А. М. Воробьев^c

^aИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, ул. Королева, 1
email: prokopez.s@icmm.ru

^bПермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15
email: lubimova@psu.ru

^cУниверситет Саутгемптона, SO171BJ, Великобритания
email: a.vorobev@soton.ac.uk

Нами исследуется динамика вытеснения двух смешивающихся жидкостей в капилляре. Одна жидкость первоначально заполняет капилляр, вторая жидкость под постоянным перепадом давления закачивается с одного конца, другой конец считается открытым. В процессе вытеснения образуется мениск, который с течением времени растягивается, компоненты смеси при этом смешиваются, и граница раздела размывается, что приводит к изменению капиллярного давления и коэффициента поверхностного натяжения. Капиллярное давление замедляет скорости течения; в пределе отсутствия капиллярного давления (поверхностного натяжения) течение стремится к течению Пуазейля. До момента смешения, когда капиллярное давление становится несущественным, может пройти существенное количество времени. Таким образом, эффект динамически меняющегося капиллярного давления необходимо учитывать при рассмотрении систем смешивающихся жидкостей. Данный эффект, при этом, игнорируется в большинстве теорий и исследованиях по практическому моделированию подобных физических систем.

Ключевые слова: фазовое поле; капиллярное давление; вытеснение в капилляре

Modeling in a capillary with non-equilibrium capillary pressure

S. A. Prokopez^a, T. P. Lyubimova^{a,b}, A. M. Vorobev^c

^aInstitute of Continuous Media Mechanics Ural Branch RAS, Korolev St. 1, 614013, Perm
email: prokopez.s@icmm.ru

^bPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: lubimova@psu.ru

^cUniversity of Southampton, SO171BJ, UK
email: a.vorobev@soton.ac.uk

We investigate the dynamics of the displacement of two miscible liquids in a capillary. One liquid initially saturates the capillary, the second liquid is pumped from one end under a constant pressure difference, the other end of the capillary is considered open. During the process of displacement we observe the formation of

a meniscus, which stretches over time, the components of the mixture are mixed, and the interface is blurred, which leads to a changes of the capillary pressure and surface tension coefficient. The capillary pressure slows down the flow rate. In the limit of the absence of the capillary pressure (surface tension), the flow tends to the Poiseuille one. Until the moment of mixing, when the capillary pressure becomes insignificant, a significant amount of time can pass. Thus, the effect of dynamically changing capillary pressure must be taken into account when considering systems of miscible fluids. This effect, however, is ignored in most theories and studies on the practical modelling of such physical systems.

Keywords: phase field; capillary pressure; displacement in capillary

1. Введение

Процессы вытеснения в капиллярах имеют большую значимость при рассмотрении пористых сред, которые можно свести к изучению гидродинамики в капиллярах на микромасштабе. Процессы вытеснения в пористых средах, например, встречаются в задачах добычи нефти и других углеводородов. Одними из первых исследования многофазных течений в капиллярах провели Вест [11] и Уошборн [2]. Авторами, в частности, было найдено, что при малых значениях числа Рейнольдса и малых капиллярных силах течение имеет параболический профиль Пуазейля. Скорость течения при этом определяется разницей на концах капилляра за вычетом капиллярного давления.

В большинстве теоретических и экспериментальных работ при рассмотрении смешивающихся жидкостей наличие капиллярного давления и поверхностного натяжения игнорируется. Однако, например, в работах [3-5] приводятся данные о коэффициенте поверхностного натяжения системы вода/глицерин, при этом значения коэффициента поверхностного натяжения оцениваются в диапазоне 2×10^{-4} Н/м - 4×10^{-7} Н/м. Столь большой разброс свидетельствует о различных стадиях смешения, что и приводит к разности в значении коэффициента поверхностного натяжения.

Таким образом, исследование динамики вытеснения в капилляре для смешивающихся (частично смешивающихся) жидкостей является актуальной и важной задачей.

2. Постановка задачи

Задача о вытеснении двух смешивающихся жидкостей в капилляре решалась с использованием уравнений Кана-Хилларда-Навье-Стокса. В безразмерном виде данные уравнения принимают следующий вид.

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{1}{M} C \nabla \mu, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) C = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \mu, \quad (3)$$

$$\mu = \frac{\partial f_0}{\partial C} - Cn \nabla^2 C. \quad (4)$$

Здесь \mathbf{v} – вектор скорости, p – давление, C – концентрация, μ – химический потенциал. Re, M, Pe, Cn – числа Рейнольдса, Маха, Пекле, Кана. Число Рейнольдса определяет отношение инерционных сил к вязким, число Пекле определяет роль диффузии, число

Маха отвечает за капиллярные силы, число Кана задает толщину межфазной границы. Функция $f_0 = AC^2 + C^4$ – свободная энергия, где коэффициент A пропорционален температуре системы (задает равновесный уровень смешения компонент, который определяется из уравнения $f_0 = 0$).

Верхняя и нижняя стенки считаются твердыми непроницаемыми для вещества, граничные условия на этих стенках принимают вид

$$y = 0,1: \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial \mu}{\partial y} = \mathbf{v} = 0, \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}. \quad (5)$$

На левом («входном») конце капиллярной трубки ставится условие:

$$x = 0: \frac{\partial v}{\partial x} = 0, p = p_1, \frac{\partial \mu}{\partial x} = 0, C = -0.5. \quad (6)$$

На правом («выходном») конце условия записываются в следующем виде

$$x = L: \frac{\partial v}{\partial x} = 0, p = p_2 = 0, \frac{\partial \mu}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} = 0. \quad (7)$$

Уравнения (1)-(4) решались численно методом дробных шагов (метод проекций). Программа расчета реализована на CUDAS с использованием графических процессоров (GPU), подробное изложение нашего параллельного алгоритма представлено в работе [6].

3. Результаты моделирования

При моделировании вытеснения в капилляре в пределе несмешивающихся жидкостей (параметр $A = -0.5$) возможны два сценария: 1) при малом капиллярном давлении вытеснение происходит с образованием пальцеобразной структуры (рис. 1 с, d); 2) при больших капиллярных силах процесс происходит аналогично тому, если бы вытеснение происходило за счет работы поршня (рис. 1 а, b).

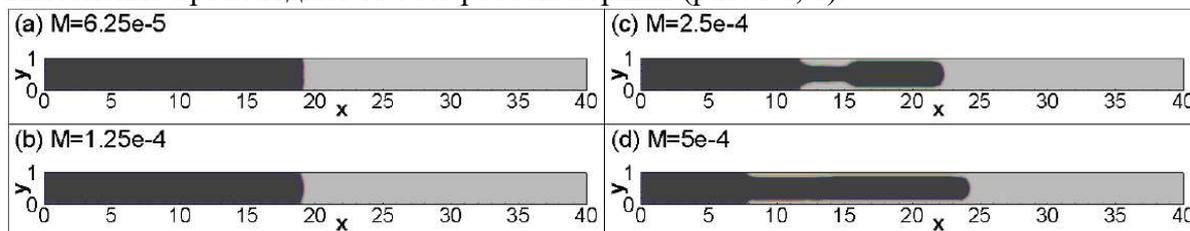


Рис. 1. Вытеснение в капилляре в зависимости от величины капиллярных сил (числа Маха). Момент времени $t = 31$. Параметры: $A = -0.5$, $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$, $Re = 1$, $Pe = 300$.

При вытеснении смешивающихся жидкостей капиллярное давление монотонно уменьшается со временем либо до некоторого конечного значения, либо до нуля (в зависимости от степени смешения компонент в состоянии термодинамического равновесия). Таким образом система переходит от одного режима (рис. 1 а) к другому (рис. 1 d), с той лишь разницей, что компоненты системы при этом смешиваются, и межфазная граница размывается. Из теории Лапласа следует, что капиллярное давление равно произведению коэффициента поверхностного натяжения и кривизны. При этом по мере смешения компонент системы кривизна мениска увеличивается (мениск растягивается), а коэффициент поверхностного натяжения уменьшается. При значениях параметра A , немногим отличающимся от предела несмешивающихся жидкостей (A немного больше -0.5), возникает ситуация, при которой эффект увеличения кривизны

оказывается сильнее, и капиллярное давление оказывается даже больше, таким образом замедляя течение. Однако при дальнейшем увеличении параметра A (по мере приближения к критической точке), коэффициент поверхностного натяжения уменьшается более значительно – данный эффект начинает играть определяющую роль и, таким образом, капиллярное давление уменьшается, а скорость течения в капилляре увеличивается. Более детально проведение моделирования описано в работе [7].

Список литературы

1. *West G. D.* On the resistance to the motion of a thread of mercury in a glass tube // Proc. R. Soc. Lond. A 1911. Vol. 86. 20–25.
2. *Washburn E. W.* The Dynamics of Capillary Flow // Phys. Rev. 1921. Vol. 17. Pp. 273-283.
3. *Petitjeans P. and Maxworthy T.* Miscible displacements in capillary tubes. Part 1. Experiments // Journal of Fluid Mechanics 1996. Vol. 326. Pp. 37-56.
4. *Carbonaro A., Cipelletti L., Truzzolillo D.* Ultralow effective interfacial tension between miscible molecular fluids // Phys. Rev. Lett. 2020. Vol. 5. No. 7. Pp. 074001.
5. *Legendre M., Petitjeans P., Kurowski P.* Instabilités à l'interface entre fluides miscibles par forçage oscillant horizontal // Comptes Rendus Mécanique 2003. Vol. 331. no. 9. Pp. 617-622
6. *Vorobev A., Prokopev S., Lyubimova T.* Phase-field modelling of a liquid/liquid immiscible displacement through a network of capillaries // Journal of Computational Physics 2020. Vol. 421. Pp. 109747.
7. *Vorobev A., Prokopev S., Lyubimova T.* Nonequilibrium Capillary Pressure of a Miscible Meniscus // Langmuir 2021. Vol. 37. Pp. 4817-4826.

Гидродинамика и солевой массообмен в специальных конструкциях кристаллизатора при выращивании кристаллов из водно-солевых растворов

А. И. Простомолотов, Н. А. Вerezуб

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН
119526, Москва, пр-т Вернадского, д. 101, корп. 1
email: aprosto@inbox.ru

Изучены закономерности пространственных течений и массообмена в пересыщенных водных растворах при выращивании ряда кристаллов (дигидрофосфат калия – KDP и смешанные кристаллы никеля и кобальта – KCNSH). Течение раствора происходит в областях сложной формы, содержащих твердые кристаллизующиеся тела, рост которых определяется условиями их обтекания (скоростью и направлением течения, степенью насыщения и температурой раствора). Рассмотрены два варианта втекания раствора в кристаллизатор: в первом – раствор втекает в центральной области и во втором – раствор втекает периферийно по периметру кристаллизатора. Процесс роста кристалла рассмотрен в сложной сопряженной постановке как массообмен в системе «раствор-кристалл». Показано специфическое влияние локальных особенностей гидродинамики и условий массообмена в растворе вблизи поверхности растущего кристалла на локальную (для конкретного места и направления) скорость его роста и образование дефектов.

Ключевые слова: рост кристалла; гидродинамика; моделирование

Hydrodynamics and salt mass transfer in special designs of crystallizer for crystal growth from water-salt solutions

A. I. Prostomolotov, N. A. Verezub

Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS
Prospekt Vernadskogo, 101-1, Moscow, 119526
email: aprosto@inbox.ru

The regularities of spatial flows and mass transfer in supersaturated water-salt solutions during a number of crystal growth (potassium dihydrogen phosphate crystal – KDP and mixed nickel-cobalt crystal – KCNSH) has been numerical modeled. Two variants of the solution inflow into the crystallizer are considered: in the first, the solution inflows in the central region, and in the second, the solution flows peripherally along the perimeter of the crystallizer. The crystal growth process is considered in a complex conjugate formulation as mass transfer in the "solution-crystal" system. It is shown, how local features of hydrodynamics

and mass transfer near a growing crystal surface specifically affect on the local crystal growth rate and defect formation.

Keywords: crystal growth; hydrodynamics; modeling

1. Формулировка задачи

Рассматривается математическая модель процессов гидродинамики и массообмена на основе решения уравнений Навье-Стокса и конвективной диффузии для соли с учетом её кристаллизации. Расчетные параметры соответствуют процессам выращивания кристаллов дигидрофосфата калия – KDP [1] и смешанных кристаллов – KCNSH [2] из смеси двух водно-солевых растворов (кобальтовой KCSH и никелевой KNSH солей). Рассмотрены два варианта кристаллизатора: в первом раствор подается к центральной части кристалла, во втором имеет место периферийная подача раствора по периметру кристаллизатора, позволяющая создать его закрученное течение. Оба случая были рассмотрены в ламинарных режимах при числах Рейнольдса, значительно ниже критических. Размеры кристаллизатора во втором варианте были пропорционально увеличены в 5 раз. В этом случае число Рейнольдса достигает большого значения $\sim 3 \times 10^4$, что отвечает турбулентному течению в кристаллизаторе, поэтому для численного моделирования применены усредненные уравнения Навье-Стокса в форме «стандартной» (k- ϵ)-модели турбулентности.

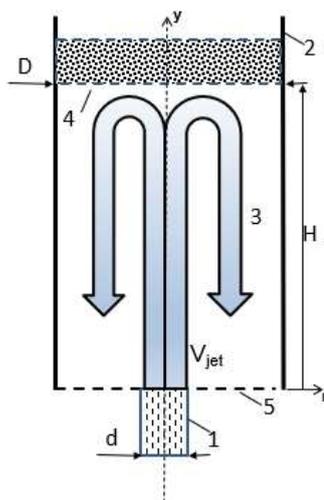


Рис. 1. Схема математической модели с центральной подачей раствора

Схема ростового процесса с центральной подачей раствора показана на Рис. 1: раствор (3) втекает вертикально вверх из трубки (1) со дна цилиндрического сосуда (2) при заданной скорости V_{jet} и обтекает поверхность растущего кристалла (4). Размеры кристаллизатора: высота $H_c = 0.04$ м, диаметр $D_c = 0.03$ м. Диаметр трубки (1) $d = 0.003$ м. Осаждение солей на поверхность кристалла обеспечивает его наращивание сверху вниз по всему диаметру сосуда. Затем «отработавший» раствор вытекает через открытую часть дна сосуда (5).

2. Результаты расчетов

Для определения компонент скорости течения и давления в растворе решаются уравнения Навье-Стокса и неразрывности, а также решаются уравнения конвективного переноса в растворе для одной (в случае выращивания кристалла KDP) или двух солей (в случае роста смешанного кристалла KCNSH). Для расчета нормальной скорости роста кристалла использована формула для простого дислокационного источника [3].

Расчеты проводились для четырех значений скорости втекания: $V_{jet} = 0.1, 0.55, 0.9$ и 2.0 м/с, что соответствует значениям в натуральных экспериментах. Втекающая струя сталкивается с твердой преградой в виде поверхности кристалла, в результате чего меняет осевое направление течения на радиальное. При $V_{jet} \geq 0.9$ м/с возникает интенсивная вихревая циркуляция при её столкновении с боковой стенкой сосуда. Раствор интенсивно стекает вниз в центральной части кристаллизатора (вне области втекания), причем в остальной периферийной области возникает слабая замкнутая (запирающая течение) циркуляция. Особенности гидродинамики влияют на распределения концентрации солей в растворе. По данным расчета концентраций солей Co и Ni было рассчитано пересыщение на фронте кристаллизации: оно составляет $\sim 9\%$ в центре (на участке натекающей струи) и монотонно падает до $6-8\%$ при удалении от оси.

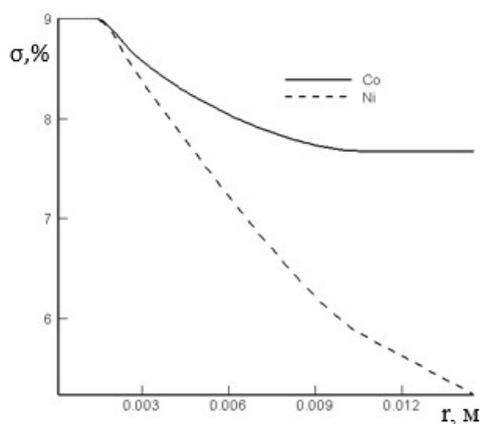


Рис. 2. Центральная подача раствора: радиальные профили пересыщения на поверхности кристалла по солевым компонентам Co и Ni при пересыщении раствора на участке натекающей струи $\sigma = 9.0\%$ и скорости втекания $V_{jet} = 0.9$ м/с

Аналогичные расчеты для периферийной подачи раствора показали более равномерное распределение пересыщения вдоль грани, что способствует более устойчивой морфологии поверхности и, как следствие, уменьшению количества дефектов в кристалле.

3. Благодарности

Работа выполнена по теме государственного задания (№ госрегистрации АААА-А20-120011690136-2).

Список литературы

1. Verezub N.A., Voloshin A.E., Manomenova V.L, Prostomolotov A.I. Modeling of hydrodynamics and mass transfer processes in KDP crystal growth // Crystallography Reports. 2020. V. 65. No. 4. P. 641–646. DOI: 10.1134/S1063774520040239
2. Verezub N.A., Voloshin A.E., Prostomolotov A.I. Hydrodynamics and mass transfer during growth of mixed crystals from solution // Crystallography Reports. 2019. V. 64. No 6. P. 979–981. DOI: 10.1134/S1063774519060257
3. Современная кристаллография /Ред. Б. К. Вайнштейн, А. А. Чернов, Л. А. Шувалов, Т.3, Образование кристаллов. М.: Наука, 1980. 408 с.

Реальная структура приповерхностного слоя кристалла ниобата лития

А. В. Сосунов, О. Р. Семенова, Н. П. Прохоров

Пермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15
email: alexeisosunov@gmail.com

В данной работе представлены результаты исследования дислокационной структуры приповерхностного слоя монокристаллов ниобата лития X- и Z-срезов методом селективного травления с использованием оптической и сканирующей электронной микроскопии. На рабочих поверхностях ниобата лития различных срезов выявлены характерные для них ямки травления. Проведен сравнительный анализ распределения дефектов в приповерхностном слое и в объеме монокристалла в ходе травления торцевых сколов монокристаллических пластин. Показано, что в приповерхностном слое монокристалла плотность дислокаций значительно выше их объемного распределения.

Ключевые слова: ниобат лития; ямки травления; дислокации; приповерхностный слой

Real structure of the near-surface layer of a lithium niobate crystal

A. V. Sosunov, O. R. Semenova, N. P. Prokhorov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: alexeisosunov@gmail.com

This paper presents the results of a study of the dislocation structure of the near-surface layer of single crystals of lithium niobate X- and Z-cut by the method of selective etching with optical and scanning electron microscopy. Typical etch pits were found for lithium niobate on working surfaces. Analysis of the distribution of defects is carried out in the near-surface layer and in the bulk of a single crystal during the etching of end cleavages of single-crystal. It is shown that the density of dislocations in the near-surface layer of a single crystal is much higher than their volume distribution.

Keywords: lithium niobate; etching pits; dislocation; near-surface layer

1. Введение

Ниобат лития (НЛ) является ключевым материалом при изготовлении базовых элементов интегрально-оптических схем, в частности модуляторов. Отличительными особенностями монокристаллов НЛ являются высокие электрооптические коэффициенты, высокая температура Кюри и возможность формирования волноводных структур с низкими оптическими потерями [1].

При рассмотрении свойств поверхности монокристаллов НЛ различных срезов, обнаруживаются дополнительные возможности для их фундаментальных исследований и применений [2]. Известно, что состав и структура приповерхностного слоя кристалла

НЛ существенно отличаются от остального объема материала, что явно показано в работе [3]. Эти особенности структуры приповерхностного слоя имеют деформационную природу и возникают при резке и последующей полировке пластин НЛ [3,4]. Многие аспекты формирования и состояния указанного слоя обсуждались неоднократно, однако реальная структура этого слоя не была представлена. При этом влияние неоднородностей структуры приповерхностного слоя НЛ является основным фактором, связанным с нестабильностью оптических характеристик интегрально-оптических схем [5] и изготовлением протонообменных волноводов [6].

Таким образом, целью данной работы является выявление реальной (дислокационной) структуры приповерхностного слоя монокристаллов НЛ.

2. Методика исследования

В данной работе исследованы монокристаллы НЛ конгруэнтного состава X- и Z-срезов. Выявление реальной структуры исследуемых кристаллов осуществляли методом селективного травления рабочей поверхности монокристаллов, а также поперечного сечения (торца) пластин НЛ после излома. Излом проводили по методике приведенной ранее в работе [3].

Травление предварительно очищенных образцов проходило в расплаве едкого калия (KOH) с добавлением 35 мас. % NaOH, как описано в работе [7]. Режим влажного селективного травления для всех образцов был идентичным.

Исследование ямок травления на рабочей поверхности выполняли методом оптической микроскопии, структуру излома, т.е. поперечного сечения пластин, – методом сканирующей электронной микроскопии. Оптические измерения реализованы с помощью микроскопа LeicaDMi8 в отраженном свете в режиме светлого поля. Электронно-микроскопические исследования проводили в режиме вторичных электронов при ускоряющем напряжении 20 кВ с помощью микроскопа HitachiS3400N. Перед началом электронно-микроскопических исследований на все экспериментальные образцы предварительно напыляли тонкую (~2 нм) металлическую Au-пленку с помощью компактного магнетронного распылителя SC7620.

3. Результаты и обсуждение

Известно, что при селективном травлении монокристаллов на их поверхности образуются ямки травления, имеющие определенную геометрическую форму, зависящую от кристаллической структуры материала и кристаллографической ориентации травимой плоскости [8]. Так в работе [9] показано, что для пластин НЛ Z-среза при травлении плоскости (0001) ямки имеют вид правильных треугольников (ось симметрии 3 порядка), для плоскостей перпендикулярных направлению $[10\bar{1}0]$, т.е. для X-среза, ямки травления имеют ромбическую форму.

В ходе травления рабочих поверхностей исследуемых пластин НЛ были обнаружены многочисленные ямки травления, соответствующие дислокационной структуре приповерхностного слоя НЛ. Картины травления представлены на рис. 1 для X- и Z-среза слева и справа, соответственно. Из рис. 1 видно, что на поверхности пластин Z-среза форма большинства ямок травления обладает симметрией третьего порядка, что хорошо согласуется с [9]. Смещение вершины ямки свидетельствует об отклонении оси дислокации от направления $[0001]$ из-за наличия деформаций. Для кристалла X-среза были получены ямки травления в виде сильно вытянутых и искаженных ромбов с длинными осями, параллельными кристаллографическому направлению $[01\bar{1}1]$. Сильное искажение формы ямок травления также связано с деформацией кристаллической решетки в приповерхностном слое кристалла.

Плотность ямок травления составляет для кристалла X-среза $8 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$, для Z-среза – $2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$.

Преимуществом указанной методики выявления реальной структуры приповерхностного слоя монокристалла НЛ является простота и быстрота выполнения эксперимента, однако, принципиальный недостаток такого способа исследования заключается в том, что он не позволяет получить представление о распределении дислокаций в объеме кристалла. По этой причине было осуществлено травление свежих поперечных сколов пластин НЛ X- и Z-срезом. Пластины раскалывались по методике, изложенной в работе [3], таким образом, изломы соответствуют сколам близким к плоскостям $(2\bar{1}\bar{1}0)$ и $(01\bar{1}0)$. Указанные плоскости подвергались травлению.

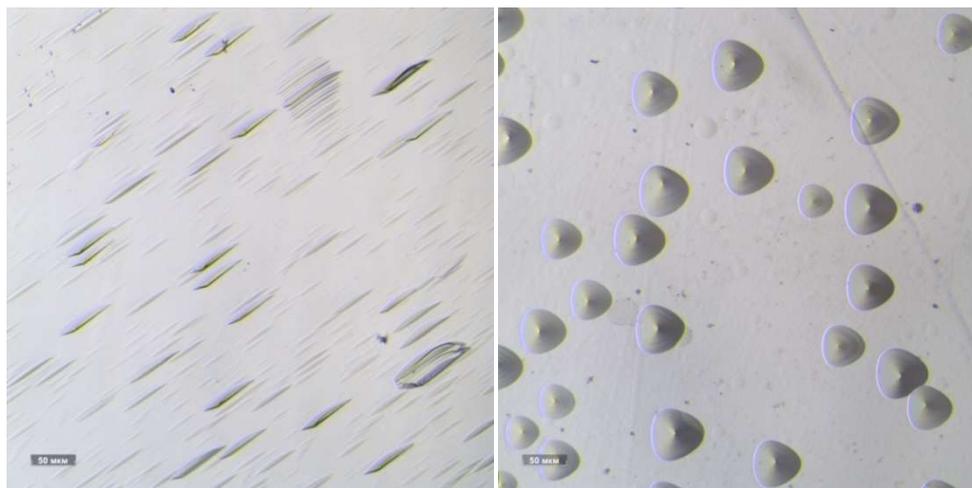


Рис. 1. Ямки травления для НЛ X-среза (слева) и Z-среза (справа)

На рис. 2 представлены результаты выявления дислокационной структуры пластин НЛ X- и Z-срезом после излома (поперечное сечение). Исследование поперечного сечения пластин НЛ после излома позволяет максимально репрезентативно показать реальную структуру всего кристалла НЛ. Видно, что приповерхностный слой обладает повышенной плотностью не просто точечных дефектов, а именно дислокаций в отличие от остального объема материала. Глубина дефектного слоя составляет до 50 мкм для НЛ Z-среза (плоскость травления $(2\bar{1}\bar{1}0)$) и 10 мкм для НЛ X-среза (плоскость травления $(01\bar{1}0)$). Формирование данного дефектного слоя происходит в процессе резки и последующей шлифовки монокристаллической були. Аналогичные особенности характерны и для других монокристаллических пластин, например, для карбида кремния [10, 11], так же используемого при создании интегрально-оптических устройств.

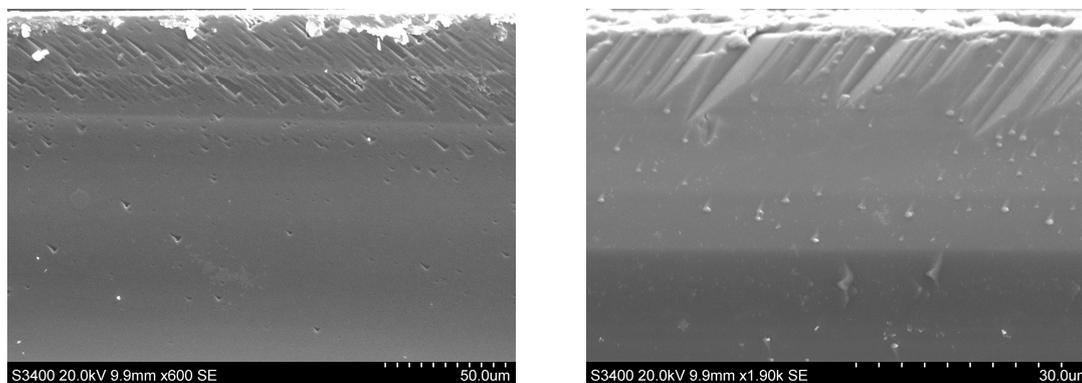


Рис. 2. Ямки травления НЛ после излома (поперечное сечение): плоскость $(2\bar{1}\bar{1}0)$ (слева) и $(01\bar{1}0)$ (справа)

4. Заключение

Таким образом, методом селективного травления удалось выявить реальную – дислокационную структуру нарушенного приповерхностного слоя кристаллов НЛ, которая существенно отличается повышенной дефектностью от остального объема монокристаллической пластины НЛ.

Полученные результаты важны, в первую очередь, с практической точки зрения. Наличие дефектного слоя может приводить как к ухудшению характеристик приборов, так и снижать стабильность работы интегрально-оптических устройств с использованием монокристаллов НЛ. В приповерхностном слое формируются протонообменные, титанодиффузные, ионные и лазерные волноводы. Оптические характеристики волноводов определяются структурой данного приповерхностного слоя. Несомненно, в процессе изготовления и эксплуатации различных интегрально-оптических компонентов на основе НЛ необходимо учитывать повышенную плотность дислокаций в его приповерхностном слое. В дальнейшем планируется исследование реальной структуры пластин НЛ различных производителей и поиск метода снижения дефектности приповерхностного слоя или его удаления.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Пермского края в рамках научного проекта № 20-42-596001».

Список литературы

1. *Noguchi K.* Broadband optical modulators: science, technology, and applications / ed. Chen A., Murphy E.J. Boca Raton: CRC Press, 2012. 548 p.
2. *Sanna S., Schmidt G.* LiNbO₃ surfaces from a microscopic perspective // J. Phys.: Condens. Matter. 2017. Vol. 29, 413001. DOI: 10.1088/1361-648X/aa818d.
3. *Sosunov A. V., Ponomarev R. S., Yuriev V. A., Tsiberkin K. B., Volyntsev A. B.* Features of structure and mechanical properties LiNbO₃ // Ferroelectrics. 2017. Vol. 506 (1), P. 24-31. DOI: 10.3103/S8756699017010125.
4. *Galinetto P. et al.* Micro-Raman analysis on LiNbO₃ substrates and surfaces: Compositional homogeneity and effects of etching and polishing processes on structural properties // Opt. Lasers Eng. 2007. Vol. 45, N. 3. P. 380-384. DOI: 10.1016/j.optlaseng.2005.05.007.
5. *Salvestrini J. P. et al.* Analysis and Control of the DC Drift in LiNbO₃ Based Mach-Zehnder Modulators // J. Light. Technol. 2011. Vol. 29, N. 10. P. 1522-1534. DOI: 10.1109/JLT.2011.2136322.
6. *Kostritskii S. M. et al.* Subsurface Disorder and Electro-Optical Properties of Proton-Exchanged LiNbO₃ Waveguides Produced by Different Techniques // J. Eur. Opt. Soc. Rap. Public. 2014. Vol. 9, P. 14055. DOI: 10.2971/jeos.2014.14055.
7. Способ травления монокристаллов ниобата лития: а. с. 1583479 СССР: МКИ С 30 В 33/00, 29/30 / Сорокина И. И., Педько Б. Б. - № 4457223/31-26; заявл. 07.07.88; опубл. 07.08.90, Бюл. №29. 2 с.
8. *Сангвал К.* Травление кристаллов: Теория, эксперимент, применение. М.: Мир, 1990. 492 с.
9. *Nassau K., Levinstein H.J., Loiacono G.M.* Ferroelectric lithium niobate. 1. Growth, domain structure, dislocations and etching // J. Phys. Chem. Solids. 1966. Vol. 27, N. 6-7. P. 983-988. DOI: 10.1016/0022-3697(66)90070-9.

10. *Friedrichs, P.* Silicon carbide: Growth, defects, and novel applications / Friedrichs P., Kimoto T., Ley L., Pensl G.. Vol. 1. Weinheim: John Wiley & Sons, 2011. 528 p.
11. *Брагин А.В., Пьянзин Д.В., Сидоров Р.И., Скворцов Д.А.* Распознавание дислокационной структуры эпитаксиальных слоев карбида кремния с использованием нейронной сети // Компьютерная оптика. 2020. Т. 44, №4. С. 653-659. DOI: 10.18287/2412-6179-СО-660.

Инерционные волны и осредненные течения во вращающемся цилиндре с наклонными торцами

С. В. Субботин, М. А. Ширяева

Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет
614990, Пермь, ул. Сибирская, 24
email: subbotin_sv@pspu.ru, davydovapsu@gmail.com

Экспериментально исследуется движение жидкости во вращающейся цилиндрической полости с параллельно наклоненными торцами. Скорость вращения периодически меняется по гармоническому закону (либрации). Либрации полости приводят к возникновению пульсационного движения жидкости в виде неосесимметричных инерционных волн, которые рождаются в местах соединения боковой и торцевых стенок. Обнаружено, что при определенных частотах интенсивность пульсационного течения резонансным образом возрастает, что связано либо с возбуждением крупномасштабных осциллирующих вихревых структур, либо фокусировкой волн на замкнутую траекторию. Показано, что в последнем случае в полости формируется осредненное азимутальное течение в виде системы вытянутых вдоль оси вращения вихрей.

Ключевые слова: вращение; либрации; инерционные волны; осредненные течения

Inertial waves and steady flows in a rotating cylinder with sloping ends

S. V. Subbotin, M. A. Shiryayeva

Perm State Humanitarian Pedagogical University, Sibirskaya St. 24, 614990, Perm
email: subbotin_sv@pspu.ru, davydovapsu@gmail.com

Fluid flow in a rotating cylindrical cavity with parallel inclined ends is experimentally investigated. The rotation rate changes periodically according to the harmonic law (libration). Librations of the cavity lead to the appearance of pulsational motion in the form of non-axisymmetric inertial waves, which are born at the junction of the side and end walls. It is found that at certain frequencies, the intensity of the pulsational flow increases in a resonant manner, which is associated either with the excitation of large-scale oscillating vortex structures or with the focusing of waves on a closed trajectory. In the latter case, steady zonal flow in the form of a system of vortices elongated along the rotation axis is formed.

Keywords: rotation; libration; inertial waves; steady flow

1. Введение

Известно, что периодические возмущения во вращающейся жидкости распространяются в виде инерционных волн [1]. Одним из наиболее популярных

способов их возбуждения являются либрации (периодические изменения скорости вращения). Интерес обусловлен, прежде всего, широким распространением либраций среди планетарных тел [2]. Осесимметричные инерционные волны в либрирующей цилиндрической полости с прямыми торцами были исследованы в работе [3]. Было показано, что колебания жидкости приводят к возникновению осредненной циркуляции в динамическом слое Стокса на боковой стенке полости. Структура течения имела вид системы осредненных тороидальных вихрей, количество которых определяется осевым волновым числом пульсационного режима течения. Нарушение азимутальной симметрии торцов приводит к возникновению неосесимметричных колебаний жидкости [4]. Например, наличие только одной наклонной стенки может обеспечивать фокусировку инерционных волн в волновой аттрактор [5]. В настоящей работе исследуются режимы течения в неравномерно вращающемся цилиндре, оба торца которого параллельно наклонены относительно оси симметрии. Такая конфигурация полости обеспечивает существование неосесимметричных инерционных режимов с азимутальным волновым числом $m = 1$. Основное внимание уделяется описанию структуры и интенсивности течения в зависимости от частоты либраций.

2. Методика эксперимента

В экспериментах используется цилиндрическая кювета круглого поперечного сечения, торцы которой наклонены параллельно друг другу на угол α , который принимает значения 8.5° и 15.0° (Рис. 1). Диаметр полости составляет $D = 52.0$ мм, в то время как расстояние между торцами зависит от величины наклона α меняется в диапазоне $L = 84.0 - 90.0$ мм. Кювета заполнена водоглицериновым раствором кинематической вязкости $\nu = 5$ сСт и вращается вокруг оси симметрии в лабораторной системе отсчета по закону

$$\Omega(t) = \Omega_{rot} [1 + \varepsilon \sin(\Omega_{lib} t)].$$

Здесь Ω_{rot} – средняя угловая скорость вращения полости, Ω_{lib} – угловая частота, а $\varepsilon = \Delta\varphi\Omega_{lib} / \Omega_{rot}$ – амплитуда либраций. В качестве безразмерной характеристики частоты либраций используется параметр $\sigma = \Omega_{lib} / \Omega_{rot}$. Значение средней скорости вращения меняется в диапазоне $\Omega_{rot} = 31.4 - 62.8 \text{ с}^{-1}$, в то время как частота либраций меняется в диапазоне $\Omega_{lib} = 11.3 - 125.6 \text{ с}^{-1}$.

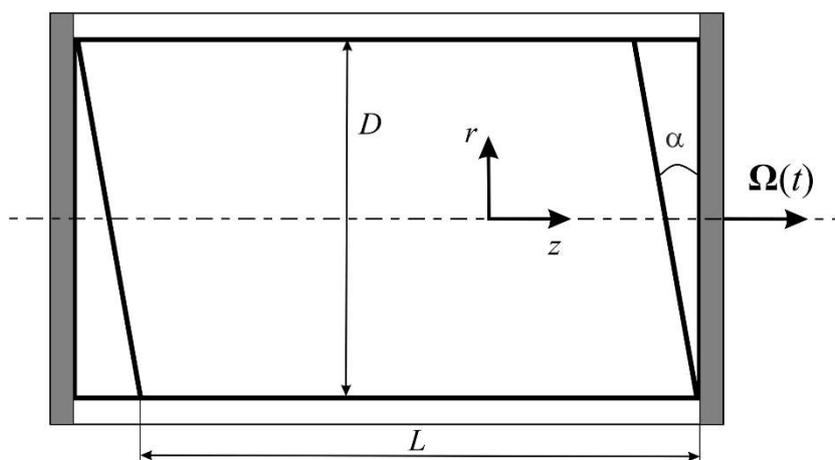


Рис. 1. Схема экспериментальной установки

Вращение полости осуществляется при помощи шагового двигателя FL86STH118-6004A совместно с драйвером SMD-8.0. Для управления скоростью среднего вращения и величиной модуляции скорости используется генератор модуля Zet 210 Sigma USB.

Исследование поля скорости осуществляется PIV-методом. Для этого в жидкость добавляются частицы с практически нейтральной плавучестью размером $d \approx 60$ мкм и плотностью $\rho \approx 1.04$ г/см³. Движение жидкости исследуется как в осевом, так и поперечном сечении полости на расстоянии $L/3$. Для этой цели используется скоростная видеокамера (OptronisCamRecordCL600x2) и лазер непрерывного действия KLM-532/h-1000, генерирующий мощный световой нож толщиной 2 мм. Последующая обработка последовательности изображений осуществляется в программе PIVlab [6].

3. Результаты экспериментов

При выполнении условия $\Omega_{lib} < 2\Omega_{rot}$ в жидкости индуцируется пульсационное течение, пространственная структура которого сильно зависит от безразмерной частоты либраций σ . В нерезонансном случае течение представляет собой систему инерционных волн, образованных свободными осциллирующими сдвиговыми слоями. Направление групповой скорости отдельных волн определяется выражением $\theta = \arcsin(\sigma/2)$ и хорошо согласуется с теоретическими предсказаниями [1]. Для характеристики полного динамического отклика жидкости на вносимые возмущения используется параметр

$$\langle u \rangle = \frac{1}{T_{lib}} \int_0^{T_{lib}} \frac{1}{S} \int_S \sqrt{u_x^2 + u_y^2} ds dt,$$

где S – площадь сечения, проходящего через ось вращения полости. Для сравнения результатов экспериментов, полученных при различных параметрах либраций, средняя скорость пульсаций $\langle u \rangle$ нормируется на $\Delta\varphi\Omega_{lib}R$ (Рис. 2).

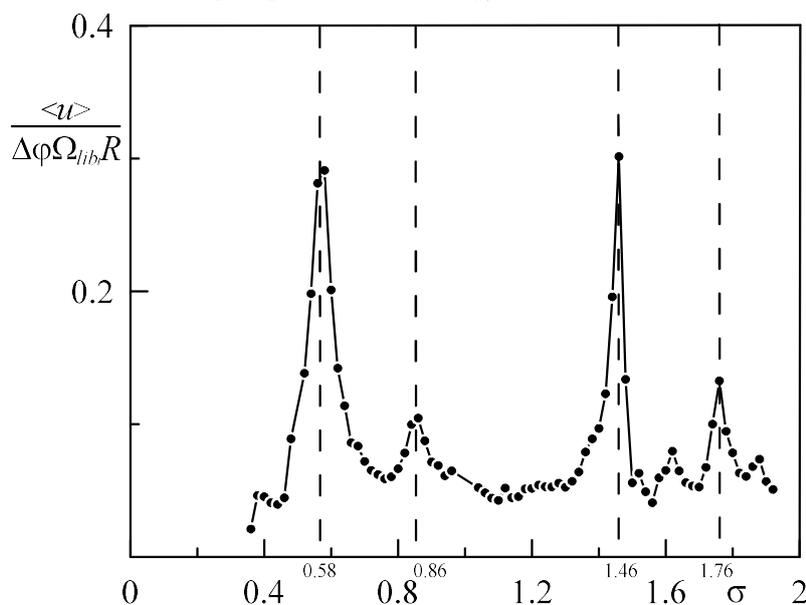


Рис. 2. Зависимость средней скорости пульсаций жидкости в осевом сечении полости от частоты либраций при угле наклона $\alpha = 8.5^\circ$

Наиболее интенсивное течение наблюдается при частотах $\sigma = 0.58$ и 1.46 (Рис. 3а, б). В первом случае в полости возникает одновихревое течение, преимущественно ориентированное вдоль большей диагонали осевого сечения. Как было отмечено в [4] подобная структура совершает вращательные колебания относительно полости с амплитудой $\sim \pi/2$, на что указывают наблюдения в двух взаимно перпендикулярных сечениях, проходящих через ось вращения. Незначительное изменение частоты σ приводит к выходу системы из резонансной области, что сопровождается резким уменьшением значения параметра $\langle u \rangle / \Delta\varphi\Omega_{lib}R$. При частоте $\sigma = 1.46$ возбуждается инерционная мода с осевым волновым числом $n = 3$, при этом интенсивность пульсационного движения жидкости сопоставима по величине с основной модой. Стоит отметить, что в силу азимутальной неоднородности геометрии торцов, колебания жидкости в поперечном сечении происходят неосесимметричным образом с $m = 1$.

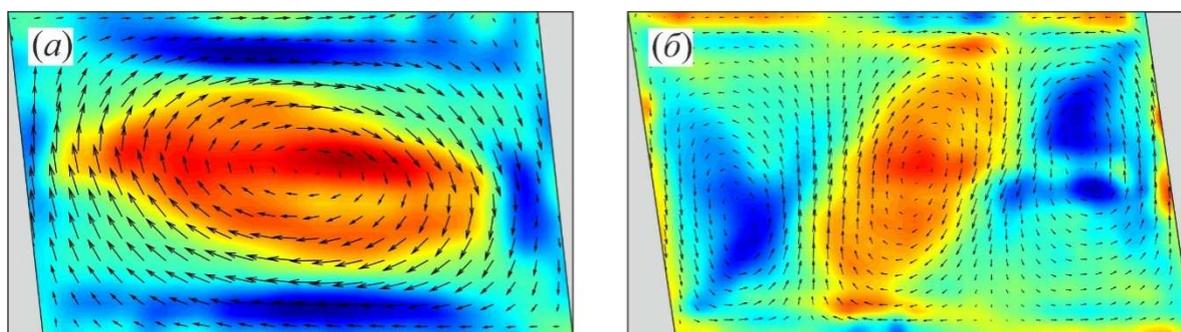


Рис. 3. Режимы пульсационного движения жидкости в осевом сечении при угле наклона $\alpha = 8.5^\circ$ и частотах $\sigma = 0.56$ (а) и 1.46 (б); цветом изображена мгновенная компонента завихренности

Детальное исследование структуры течения в окрестности $\sigma = 1.46$ показывает, что незначительное изменение частоты приводит к локализации кинетической энергии колебаний жидкости в относительно тонких сдвиговых слоях (Рис. 4а). Так, при $\sigma = 1.43$ инерционная волна образует замкнутую траекторию в форме параллелепипеда, сильно напоминающую волновой аттрактор [7]. Интересно, что одной точкой отражения волны является боковая граница цилиндра, в то время как другой точкой выступает вихрь, расположенный вблизи наклонной плоскости. Наблюдение за структурой течения показывает, что в течение полупериода либраций направление движения жидкости в параллелепипеде меняется на противоположное.

Исследование азимутального поля скорости показывает, что фокусировка волн сопровождается возникновением вытянутых вдоль оси вращения осредненных вихревых структур (Рис. 4б). Направление циркуляции жидкости в вихрях циклоническое, при этом их азимутальное положение относительно полости со временем не меняется. Измерения, выполненные при различных значениях z/L , показывают, что вихревые структуры практически двумерные. Наиболее сильно эффект проявляется при угле наклона $\alpha = 15^\circ$ и, по всей видимости, связан с нелинейными эффектами в пограничных слоях на наклонной границе. Ранее нелинейный отклик в виде осредненной циркуляции изучался в неравномерно вращающемся цилиндре с прямыми торцами [3]. В отличие от рассматриваемого случая возмущения распространялись от торцов симметричным образом, благодаря чему возбуждались исключительно осесимметричные инерционные режимы. Последнее обеспечивало формирование системы тороидальных вихрей в пограничном слое Стокса на боковой стенке цилиндра. В то же время пограничные слои Экмана на

торцевых стенках выступали генератором осесимметричного осредненного азимутального течения. Настоящие эксперименты показывают, что наклон торцевых стенок приводит к нарушению азимутальной симметрии колебаний жидкости вблизи твердых границ, в результате чего вдоль оси вращения могут формироваться двумерные вихревые структуры.

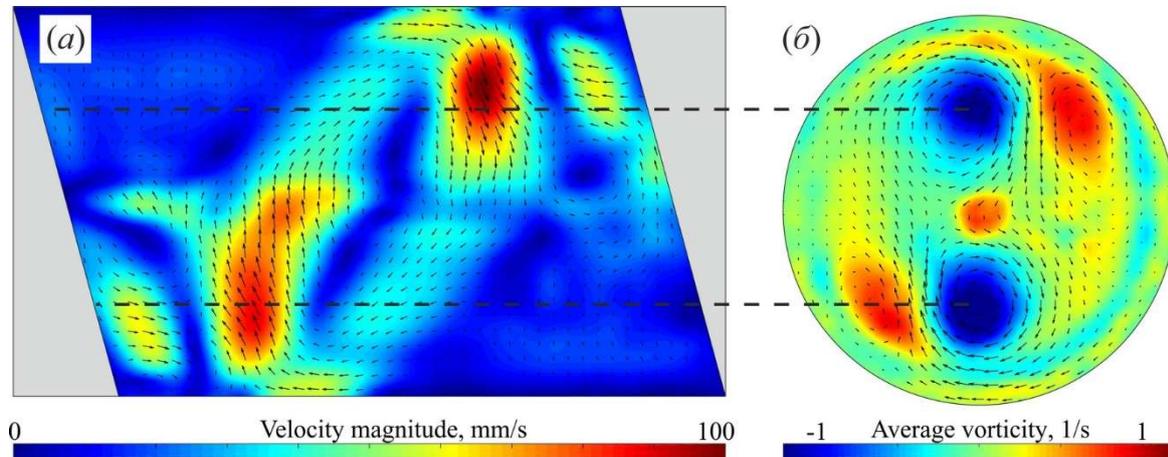


Рис. 4. Мгновенное поле скорости в осевом сечении полости (а) и осредненное по периоду либраций азимутальное поле скорости на расстоянии $z = L/3$ (б) при $\alpha = 15^\circ$, $\sigma = 1.43$ и $\varepsilon = 0.15$. Горизонтальными штриховыми линиями схематично показано положение центров осредненных вихрей. Направление вращения полости на фрагменте (б) против часовой стрелки

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации (проект МК-1779.2021.1.1) и Правительства Пермского края (грант для ведущей научной школы С-26/1191).

Список литературы

1. Гринспен Х. Теория вращающихся жидкостей. Л: Гидрометеиздат, 1975. 304 с.
2. Le Bars M., Cébron D., Le Gal P. Flows driven by libration, precession, and tides // Annu. Rev. Fluid Mech. 2016. Vol. 47. P. 163–193.
3. Subbotin S. Steady circulation induced by inertial modes in a librating cylinder // Phys. Rev. Fluids. 2020. Vol. 5. P. 014804.
4. Subbotin S. Non-axisymmetric flow excited by fluid oscillations in a rotating cylinder with sloping ends // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. V. 1809. 012015.
5. Manders A.M.M., Maas L.R.M. Observations of inertial waves in a rectangular basin with one sloping boundary // J. Fluid Mech. 2003. Vol. 493. P. 59–88.
6. Thielicke W., Stamhuis E.J. PIVlab – Time-Resolved Digital Particle Image Velocimetry Tool for MATLAB (version: 2.50).
7. Сибгатуллин И.Н., Ерманюк Е.В. Аттракторы внутренних и инерционных волн (обзор) // ПМТФ. 2019. Т. 60 (2). С. 113–136.

Численное исследование вынужденных колебаний капель и слоев жидкости

Л. Е. Тонков, И. М. Кузьмин

Удмуртский государственный университет
426036, Ижевск, ул. Университетская, 1
email: letonkov@mail.ru

Задачи численного моделирования взаимодействия деформируемого твердого тела и жидкости представляют интерес как с прикладной точки зрения при создании различных технических устройств, так и с теоретической, что обусловлено развитием методов, алгоритмов, вычислительных систем. Представленная работа посвящена численному исследованию вынужденных колебаний капель и слоев жидкости, находящихся на вибрирующей подложке. Рассмотрены варианты с недеформируемым основанием и деформируемой гибкой пластиной. Для описания динамики жидкости со свободной поверхностью использовалась модель в виде двух несмешивающихся несжимаемых сред на основе системы уравнений Навье – Стокса, с условиями динамического равновесия на границе раздела. Численная аппроксимация выполнялась на основе VOF-метода. Для корректного учета капиллярных сил применялась процедура регуляризации вычисления кривизны свободной поверхности с учетом угла смачивания в окрестности линии контакта. Необходимость учета влияния распределения массы жидкости по поверхности гибкой пластины на характер колебаний приводит к постановке сопряженной (FSI) задачи, решение которой осуществлялось в рамках разделенного подхода с сильным связыванием. Динамическая задача механики деформируемого твердого тела решалась в общей лагранжевой постановке методом конечных элементов. Построенные математические модели позволяют исследовать динамику свободной поверхности и процессов перераспределения слоя жидкости на гибком вибрирующем основании.

Ключевые слова: математическое моделирование; свободная поверхность; сопряженная задача; VOF-метод

The numerical simulation of constrained oscillations of a liquid drops and layers

L. E. Tonkov^a, I. M. Kuzmin^a

^aUdmurt State University, Universitetskaya St. 1, 426036, Izhevsk
email: letonkov@mail.ru

The study of microhydrodynamic processes have not only practical significance, but also have a wide field for theoretical approaches and numerical investigation. The article is concerned with a numerical investigation of constrained oscillation of a liquid drop on a substrate, which harmonically oscillates, and oscillation of the liquid layer located on the surface of a bending plate. Forced vibrations of the

cantilevered plate are excited by the piezoelectric element. The mathematical model is based on a system of Navier–Stokes equations for immiscible incompressible two-phase mixture. The problem of numerical simulation of the interaction between a deformed solid and a fluid layer is a Fluid-Structure Interaction problem and requires a solution of both the elastodynamic and the hydrodynamics equations. The partitioned approach to solving fluid-interaction problems is one of the most common. It allows solving each of the physical problems independently, using specific numerical schemes and a proprietary parallelism model. The elastodynamic problem taking into account geometric and physical nonlinearity is solved by the finite element method. The proposed mathematical models allow us to study the dynamics of the free surface of small liquid volumes and the processes of redistribution of a liquid layer on a flexible vibrating base.

Keywords: numerical simulation; free surface; fluid-structure interaction; VOF-method

1. Introduction

Understanding multiphase flow at low Weber numbers is of considerable importance in a variety of environmental, industrial and engineering applications such as atomization of the fuel, contaminant cleanup, fluid absorption and separation in porous media and many others. However, accurate numerical simulation of such flows is a tricky computational problem when interfacial tension effects become dominant.

Mesh-based numerical methods are conventionally considered, as the preferred approach for most applications, however, is the need for an algorithm to determine the shape of interface boundary and its evolution with time.

One of the widespread approaches to solve the investigating problem is representing a bulk as a immiscible incompressible two phase mixture described by Navier–Stokes equations with the dynamic equilibrium condition at the interface and subsequent application algorithm, that represents the interface implicitly by marking the fluids on both sides of the interface, using an scalar indicator function such as a volume fraction α (Volume-Of-Fluid method) [1].

The main advantage of this approach is that it does not require complicated interface tracking algorithms. This is important for modeling two-phase flows through complex geometries with large interface motions and interactions. The surface tension force and the contact angle effect arise from calculation of interface normal vector $\mathbf{n}_s = \nabla\alpha/|\nabla\alpha|$ and curvature $K = \nabla \cdot \mathbf{n}_s$.

The prediction of a liquid droplet natural frequencies and a free surface shapes under constrained oscillations are extensively studied by analytical [2], numerical and experimental [3] methods. Consider these problems as the convenient testing tool of verification and validation numerical methods and algorithms for capillary simulation of the flows with a free surface.

It is of interest to investigate the interaction of the liquid with elastic bodies when bending vibrations are excited. Usually, for investigating the instability in a liquid drops or layers, rigid substrate are used, which vibrate with the same amplitude along the entire contact area. The vibrations of bodies such as beams are bending vibrations with distributed amplitude. At high frequencies of the bending vibrations of beams, the length of the bending waves in them is comparable to the sizes of the region of the contact with a liquid layer and distributed vibrations can appreciably influence the liquid behavior. In our previous studies [4-5], we investigated the interaction of a thin plate that performs bending vibrations and liquids at the interphase boundary.

2. Mathematical model and numerical method

2.1. Liquid dynamic equations

The equations of motion for an isothermal, immiscible incompressible two-phase mixture flow of Newtonian fluids can be written using a single-fluid continuum approach as follows:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}_{sv}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

where \mathbf{u} is velocity vector, total pressure p is sum of dynamic and hydrostatic pressure, $\boldsymbol{\tau} = \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$ is viscous stress tensor, \mathbf{f}_{sv} is surface tension force per unit volume. The density and viscosity are defined by

$$\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g, \quad \mu = \alpha \mu_l + (1 - \alpha) \mu_g, \quad (2)$$

where subscripts “l” and “g” denotes liquid ($\alpha = 1$) and gas ($\alpha = 0$) phase respectively. The scalar indicator function α is evolved with an advection equation of the conservative form:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{u}) = 0. \quad (3)$$

Volume-Of-Fluid method (VOF), defined by equations (1)-(3) is mass conservative, computationally efficient and flexible for treating complex interface shapes. Therefore, the VOF-method is a popular and powerful tool for the direct numerical simulation of immiscible two-phase flow.

2.2. Advection of indicator function

By its definition, the indicator function has the form of a step function in the continuum limit, while numerical approximation of convective terms in equations (1), (3) leads to smear function jump. Let us distinguish among the others two general approaches to deal with this problem. One of them is using low-dissipative second order scheme with Van-Leer limiter for approximation of convective terms, the other is an introduction of artificial compression term.

The last approach leads to the following form of advection equation (3):

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\alpha(1 - \alpha) \mathbf{u}_r) = 0, \quad (4)$$

where \mathbf{u}_r is a compression velocity, the value of which is based on the scaled maximum fluid velocity magnitude in the transition region.

2.3. Calculation of interface curvature and normal vector

The solution of equation (4) updates the indicator function in such a way that the interface remains as sharp as possible. The reverse side of this is cumulative errors of capillary forces due to the unstable calculation of the normal vector and interface curvature.

For more accurate and stable calculation of the normal in cells near the interface, we first use smoothing of the indicator function procedure [5]. This is numerically done using the following relationship:

$$\alpha_s^{i+1} = C_{fc} \langle \langle \alpha_s^i \rangle_f \rangle_c + (1 - C_{fc}) \alpha_s^i, \quad \alpha_s^0 = \alpha, \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad (5)$$

where the first operator $\langle \cdot \rangle_f$ means that the field values interpolated from the cell centers to the face centers and the second operator $\langle \cdot \rangle_c$ means that the field values at cell centers calculated by averaging values at face centers. A value of $C_{fc} = 0.5$ and $N = 2$ is used in present simulations.

The smoothed indicator function α_s is then used to obtain the interface normal vectors $\mathbf{n}_s = \nabla\alpha_s/|\nabla\alpha_s|$ at cell centers. The next step is to calculate interface curvature $K = \nabla \cdot \mathbf{n}_s$. in accordance with the control volume method, the divergence of the vector function is calculated as follows:

$$\nabla \cdot \mathbf{n}_s = \frac{1}{V_i} \sum_{f \in S_i} \left[\frac{\nabla\alpha_s}{|\nabla\alpha_s|} \right]_f \cdot \mathbf{S}_f,$$

where for each grid block i, V_i is its volume, S_i is set of its faces, \mathbf{S}_f is the outward vector area of face.

Direct calculation of gradient $\nabla\alpha_s$ with subsequent normalization leads to nonzero vectors \mathbf{n}_s outside the transition region. To deal with this problem, an extra filtration procedure is used for dummy face flux $\psi = \nabla\alpha_s \cdot \mathbf{S}$. This filtering will explicitly set the dummy fluxes ψ to zero when their magnitude is of the order of the numerical errors. The filtered flux reads:

$$\bar{\psi} = \psi - \max\left(\min(\psi, \psi_*), -\psi_*\right), \quad (6)$$

where ψ_* is a threshold value below which flux $\bar{\psi}$ is set to zero. The threshold value is chosen as $\psi_* = C_\psi |\mathbf{S}_f| |\overline{|\nabla\alpha_s|}_f$, where $|\overline{|\nabla\alpha_s|}_f$ is the average gradient magnitude over all faces where they are non-zero. The filtering coefficient should be chosen sufficiently small. In our simulations, we use $C_\psi = 0.01 \div 0.03$.

Once the interface curvature is computed, we smooth the calculated value in the direction normal to the interface, similar to that suggested in [6].

2.4. Equation of motion for elastodynamics of the plate

The equations of motion of elastodynamic problem in the Lagrangian formulation, in the general case, take the form:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial t^2} &= \nabla \cdot (\mathbf{F} \cdot \mathbf{S}) + \rho \mathbf{f}, \\ \mathbf{v}(t_0) &= \mathbf{v}^0, \\ \dot{\mathbf{v}}(t_0) &= \dot{\mathbf{v}}^0, \\ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{F} \cdot \mathbf{S}) &= p, \end{aligned} \quad (7)$$

where \mathbf{v} – displacement vector, ρ, ∇ – density and divergence operator in the reference configuration, \mathbf{f}, p – vector of mass and surface forces, \mathbf{F} – deformation gradient, $\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \cdot \sigma \cdot \mathbf{F}^{-T} \det \mathbf{F}$ – symmetrical stress tensor of Piola-Kirchhoff, σ – Cauchy stress tensor.

The elastodynamic problem taking into account geometric and physical nonlinearity is solved by the finite element method. Integration of elastodynamic problem equations is performed by the explicit scheme takes into account the dissipative properties of the system [7].

The taking into account of the influence of the liquid mass distribution on the plate's vibrations is based on the weak coupling algorithm. In this case, the coupling of solutions between the two problems is performed at the interface boundary between fluid and structure. The considered mathematical model makes it possible to reproduce the characteristic features of the liquid layer distribution on the plate surface.

3. Results and discussion

First, we consider a three-dimensional droplet of volume $87\mu\text{l}$ positioned on a cylindrical substrate with radius $R = 4$ mm that harmonically oscillates along vertical axe Oz .

The feature of the process is the droplet pinning on substrate with a cone cavity with cone-angle $\beta = 140^\circ$. For this case, we carried out both an experimental study and numerical simulation. The experiments were conducted with the use of a facility the detailed description of which is presented in [4]. In the experiment, zonal mode (4,0) (fig. 1, b, e) and tesseral mode (3,1) (fig. 2, b, e) was obtained in the excitation frequency range from 38Hz to 45Hz. In the numerical experiments, the value of the substrate oscillation frequency was 40 Hz.

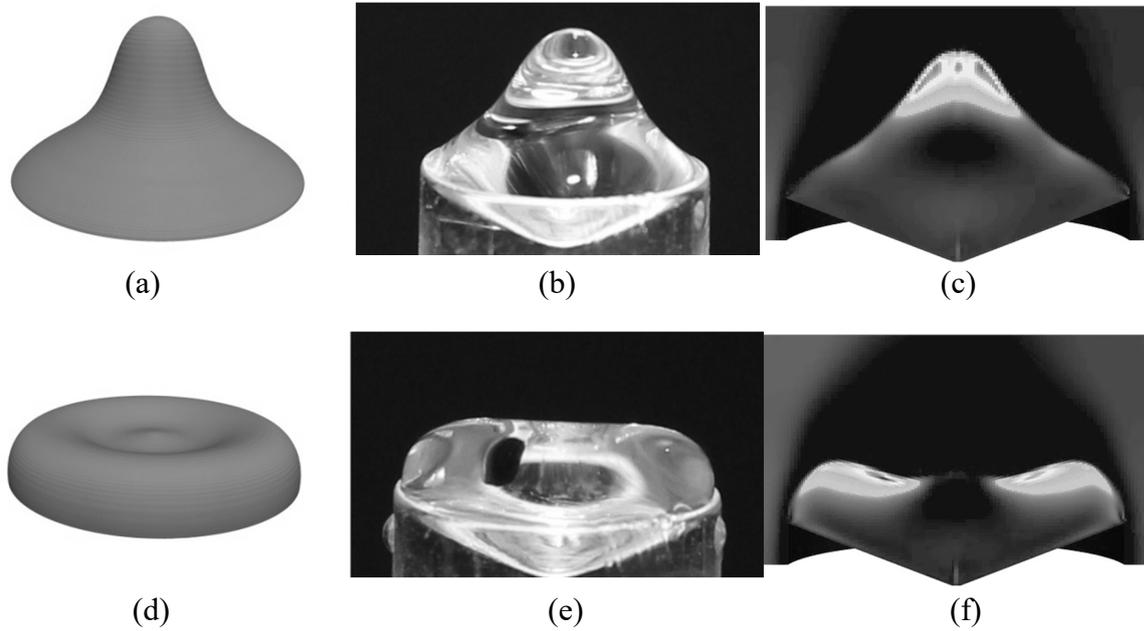


Fig. 1. Zonal oscillation mode (4,0). Calculated (a), (d) and observed (b), (e) free surface shape of the drop jointly with magnitude of the Umov–Poynting vector field (c), (e); when the phase of the oscillation (a)-(c) $\varphi = 0$, (d)-(f) $\varphi = \pi$.

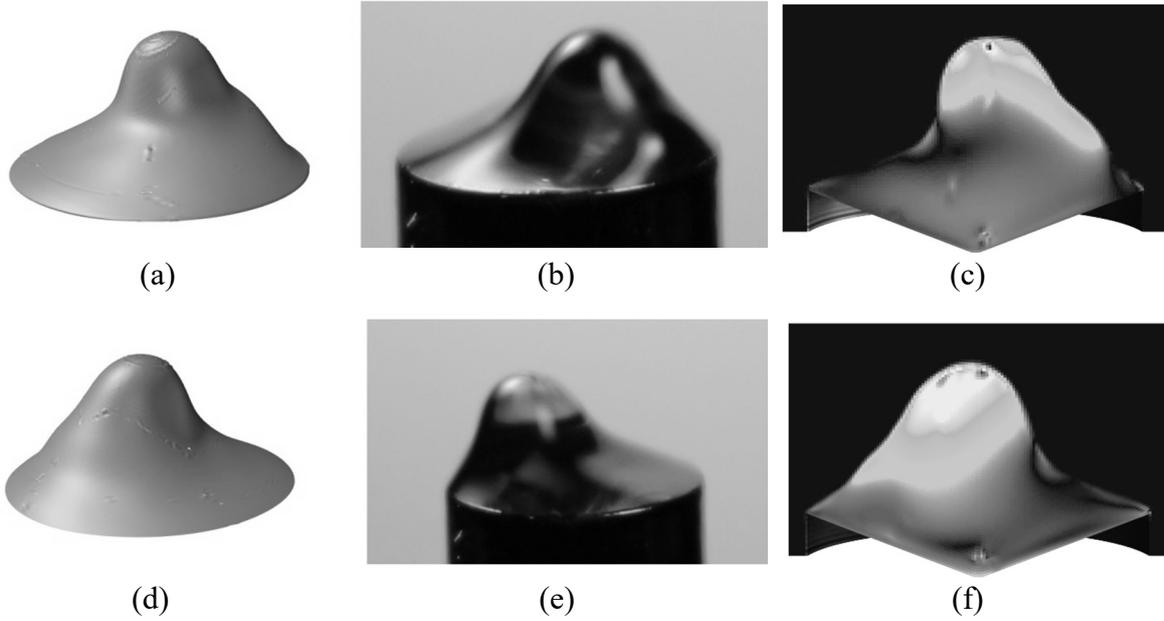


Fig. 2. Tesserel oscillation mode (3,1). Calculated (a), (d) and observed (b), (e) free surface shape of the drop jointly with magnitude of the Umov–Poynting vector field (c), (e); when the phase of the oscillation (a)-(c) $\varphi = 0$, (d)-(f) $\varphi = \pi$.

Computational block-structured grid was generated by rotating a 2-D flat grid around the axe of symmetry to become a three-dimensional grid containing 1 752 500 hexagonal cells. It should be noted that in the numerical experiment it is necessary to initially introduce small asymmetry in the forcing vibrations of the substrate to achieve the non-axisymmetric (tesserel) mode of the drop oscillations. Both the experimental and numerical drops experienced a similar free surface shapes (fig. 1, 2) and close values of maximum and minimum drop heights. Drop height was measured from the top cross-section of the substrate.

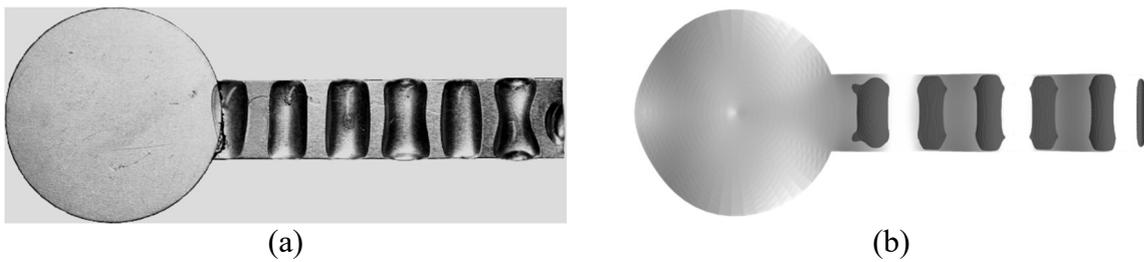


Fig. 3. The droplet of vacuum oil on the vibrating plate in the experiment described in [9] (a) and calculated results (b).

For a more thorough analysis of the numerical solution, the Umov–Poynting vector field was constructed. The Umov–Poynting vector $\mathbf{u}(p + \rho\mathbf{u}\mathbf{u}/2)$ describes total energy flux in liquid. Fig. 1, c, f and fig. 2, c, f shows magnitude of the energy flux in the corresponding phase of oscillation. One can see that, for both zonal and tesserel modes, the most intense energy flow occurs at the top part of the drop near the interface surface. . One can see that, for both zonal and tesserel modes, the most intense energy flow occurs at the top part of the drop near the interface surface.

Despite the pinning of the drop, the low-frequency eigenforms obtained in the experiment and reproduced by the numerical simulation are close to those shown in [8]. The developed numerical scheme allows to obtaining a detailed structure of microflows in an

oscillating drop and contribution of a different mechanisms to the transition from one mode to another.

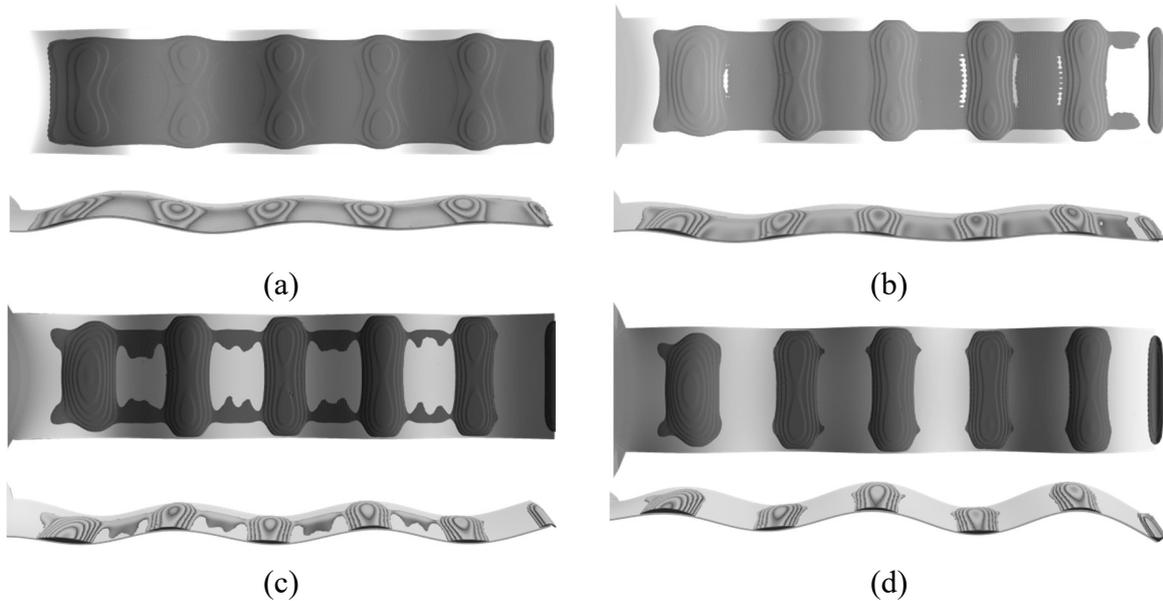


Fig. 4. The distribution of liquid over the surface of the plate and the longitudinal bending of the plate at different time intervals in numerical simulation: (a)-(d) $t=0.04s$, $t=0.08s$, $t=0.12s$, $t=0.16s$.

The taking into account of the influence of the liquid mass distribution on the plate's vibrations is based on the weak coupling algorithm. In this case, the coupling of solutions between the two problems is performed at the interface boundary between fluid and structure. The considered algorithms for implicit coupling were used to numerical simulation of the physical experimental investigation of the interaction of the vibrating console plate with a layer of viscous liquid deposited on its surface [4]. Forced vibrations of a plate with a frequency of 4.5 kHz are excited by a piezoelectric element, with a cantilevered plate.

The fig. 3 (a) shows the result of the experiment [9] performed for the vacuum oil with and fig. 3 (b) shows the result of numerical simulation. At the excitation of vibrations, viscous liquids applied as a thin layer on the plate surface initially flow to the plate surface areas with the antinodes of vibrations taking a convex form.

The coupled solution of the problems is carried out on hexahedral non-matching meshes with a size of 1300000 cells for the fluid dynamics problem and 23000 cells for the elastodynamic problem. The point-concentrated force is applied at the center of the piezoelectric element. It is important to note that the vibrations of a thin plate in the form of the superposition of longitudinal (see fig. 4)) and transverse waves allow obtaining stable droplet patterns (see fig. 4, $t = 0.16$) which cannot be formed on a rigid substrate.

Compared with the experiment in numerical simulation, the destruction of a thin liquid film between droplets formed at antinodes occurs more slowly. This is a feature of the numerical solution of the advection equation of the indicator function near the wall.

The study showed that the topological features of the distribution of the fluid are determined by the peculiarities of the bending vibrations of the plate. The comparison of the results of numerical simulation with the experimental data allows us to conclude that the numerical methods and algorithms used to describe the processes of interaction between the liquid layer and the vibrating plate quite accurately.

4. Acknowledgments

Our work was funded by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation in the framework of state assignment No. 075-00232-20-01, project 0827-2020-0010 and was performed using «URAN» supercomputer of center for collective use IMM UB RAS.

References

1. *Hirt C. W., Nichols B. D.* Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // *Journal of Computational Physics*. 1981. Vol. 39. N. 1. P. 201–225.
2. *Lubimov D. V., Lubimova T. P., Shklyayev S. V.* Behavior of a drop on an oscillating solid plate // *Physics of Fluids*. 2006. Vol. 18. N. 1. P. 012101. DOI: 10.1063/1.2137358.
3. *Chang-Seok Park, Hun Kim, Hee-Chang Lim* Study of internal flow and evaporation characteristics inside a water droplet on a vertically vibrating hydrophobic surface // *Experimental Thermal and Fluid Science*. 2016. Vol. 78. P. 112–123. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2016.05.018.
4. *Aleksandrov V. A., Kopysov S. P., Tonkov L. E.* Vortex Flows in the Liquid Layer and Droplets on a Vibrating Flexible Plate // *Microgravity Science and Technology*. 2018. Vol. 30. P. 85–93. DOI: 10.1007/s12217-017-9579-0.
5. *Aleksandrov V. A., Kopysov S. P., Tonkov L. E.* Jet formation at interaction of a vibrating plate with liquid // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2017. Vol. 208. P. 012001. DOI: 10.1088/1757-899X/208/1/012001.
6. *Shams M., Raeini A. Q., Martin J. B., Branko B.* A numerical model of two-phase flow at the micro-scale using the volume-of-fluid method // *Journal of Computational Physics*. 2018. Vol. 357. P. 159–182. DOI: 10.1016/j.jcp.2017.12.027.
7. *Chang S.-Y.* A new family of explicit methods for linear structural dynamics // *Computers & Structures*. 2018. Vol. 88. P. 755–772. DOI: 10.1016/j.compstruc.2010.03.002.
8. *Chang C.-T., Bostwick J. B., Steen P. H., Daniel S.* Substrate constraint modifies the Rayleigh spectrum of vibrating sessile drops // *Physical Review E*. 2013. Vol. 88. N. 2. P. 023015–023032. DOI: 10.1103/PhysRevE.88.023015.
9. *Александров В.А.* Взаимодействие вибрирующего стержня и жидкости на межфазной границе // *Химическая физика и мезоскопия*. 2013. Т. 15. № 1. С. 116–126.

Фазовое описание колебательной термоконцентрационной конвекции в смежных слоях пористой среды

И. В. Тюлькина^a, Д. С. Голдобин^{a,b}

^aИнститут механики сплошных сред УрО РАН

614013, Пермь, ул. Академика Королева, 1

email: irinatiulkina95@gmail.com

^bПермский государственный национальный исследовательский университет

614990, Пермь, ул. Букирева, 15

В данной работе строится фазовое описание колебательной термоконцентрационной конвекции с эффектом Соре в смежных горизонтальных слоях пористой среды, подогреваемых снизу. Границы слоя полагаются непроницаемыми (в том числе для примеси), тепловой поток – фиксированным. Уравнения для тепловой конвекции учитывают эффект Соре. Уравнения фазы колебаний выводятся с использованием метода многих масштабов. В рассматриваемой системе есть слагаемое распределенного источника тепла, описывающее теплообмен между ячейками. Отсюда получаем уравнения конвекции Соре в ячейках со связью через температурное поле. Используя метод многих масштабов, можно получить уравнения для длинноволновой конвекции. Затем вывести уравнения для амплитуды колебательных мод со связью и из них получить уравнения для фаз колебаний. В будущем к этой задаче планируется применить метод круговых кумулянтов и исследовать явление синхронизации.

Ключевые слова: фазовое описание; термоконцентрационная конвекция; пористая среда

Phase description of oscillatory Soret-driven convection in adjacent porous cells

I. V. Tiulkina^a, D. S. Goldobin^{a,b}

^aInstitute of Continuous Media Mechanics UrB RAS, Akademika Koroleva St. 1, 614013 Perm, Russia

email: irinatiulkina95@gmail.com

^bPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm, Russia

In this work, we construct a phase description of vibrational Soret-driven convection in adjacent rectangular cells of a porous medium heated from below. The boundaries of the cells are assumed to be impermeable (also for impurities), and the heat flux is assumed to be fixed. The oscillation phase equations are derived using the standard method of multiple scales. We take the equations for the thermal convection with the Soret effect. In this system, there is a distributed heat source term describing the heat exchange between the cells. Thus, the equations for the Soret convection in cells with a connection through the

temperature field are obtained. Using the standard method of multiple scales, equations for long-wavelength convection can be derived. Then we obtain equations for the amplitude of oscillatory modes with coupling, and from them derive the equations for the oscillation phases. In the future, it is planned to apply the method of circular cumulants to this problem and to investigate the phenomenon of synchronization.

Keywords: phase reduction; Soret-driven convection; porous medium

1. Введение

Ранее были исследованы течения в тонком слое пористой среды, вызванные локализованным источником тепла или примеси, также были изучены режимы поведения системы [1]. В работе [2] построено коллективное фазовое описание колебательной конвекции в ячейках Хеле-Шоу и описана динамика колебательной конвекции в системе. Синхронизация популяций осцилляторов является важным эффектом для многих областей физики. Для характеристики синхронности используется понятие фазы.

2. Постановка физической задачи

Рассматривается термоконцентрационная конвекция двухкомпонентной жидкости в подогреваемых снизу смежных горизонтальных ячейках пористой среды (рис. 1). Границы ячеек полагаются непроницаемыми (в том числе для примеси), тепловой поток через горизонтальные границы – фиксированным, вертикальные границы обладают очень низкой теплопроводностью. Тепловая конвекция рассматривается с учетом эффекта Соре (эффект термодиффузии), в данном случае имеется поток концентрации примеси, который выглядит так:

$$\mathbf{j} = -D\nabla C + \frac{\alpha}{T}\nabla T, \quad (1)$$

D и α – коэффициенты диффузии и термодиффузии соответственно.

Предполагается, что выравнивание температуры между жидкостью и твердым скелетом происходит достаточно быстро, и отдельных температур для них не вводится. При малых перепадах температуры и концентрации можно полагать, что плотность жидкости зависит от них линейно:

$$\rho = \rho_0(1 - \beta(T - T_0) + \beta_C(C - C_0)), \quad (2)$$

где C – концентрация тяжелой компоненты, ρ_0 – плотность смеси при температуре T_0 и концентрации C_0 , β – коэффициент теплового расширения жидкости, $\beta_C = \rho_0^{-1}(\partial\rho/\partial C)_{T,p}$ определяет зависимость плотности от концентрации. Для потока концентрации изменения концентрации и температуры учитываются лишь в градиентах. Система координат выбирается так, что плоскость (x, y) горизонтальна, $z = 0$ и $z = h$ – нижняя и верхняя границы слоя (рис. 1).

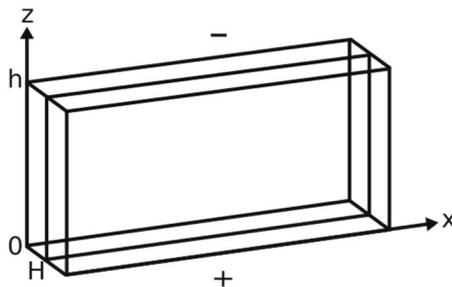


Рис. 1. Геометрия задачи

Для описания поведения системы используется модель Дарси-Буссинеска [5]:

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{\rho_0} \nabla P_1 - \frac{\nu m}{K} \mathbf{v}_1 + \mathbf{g}(\beta T_1 - \beta_c C_1) \mathbf{e}_z, \\
\frac{\partial C_1}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla C_1 &= D \Delta C_1 - \frac{\alpha}{T_0} \Delta T_1, \\
\frac{\partial T_1}{\partial t} + \frac{1}{b} \mathbf{v}_1 \nabla T_1 &= \chi \Delta T_1 + Q_1, \\
\nabla \cdot \mathbf{v}_1 &= 0 \\
z = 0, h: \quad \frac{\partial T_1}{\partial z} &= A, \quad v_{1z} = 0, \quad j_{1z} = 0.
\end{aligned} \tag{3}$$

где \mathbf{v} - средняя скорость (осредненная по масштабам пор) жидкости в порах, m - пористость среды (отношение объема пор в элементе пористой среды к объему этого элемента), K - коэффициент проницаемости, h - высота ячейки, $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_z$ - поле тяжести, b - отношение теплоемкости пористой среды, насыщенной жидкостью, к части этой теплоемкости, приходящейся на жидкость в порах ($b > 1$), χ - температурапроводность пористой среды, насыщенной жидкостью, Q - распределенный источник тепла. Индекс 1 означает, что поля относятся к первой ячейке. Аналогичная система уравнений получится для второй ячейки.

Система безразмерных уравнений, описывающая поведение конечных возмущений состояния механического равновесия:

$$T = -z, \quad C = -z, \tag{4}$$

имеет вид:

$$\begin{aligned}
-\nabla P_1 - \mathbf{v}_1 + Ra((1 - Nb)\theta_1 + N\phi_1)\mathbf{e}_z &= 0, \\
\frac{\partial \phi_1}{\partial t} + b\mathbf{v}_1 \cdot \nabla(\phi_1 - (b-1)\theta_1) &= b\Delta\theta_1 + S\Delta(\phi_1 - (b-1)\theta_1), \\
\frac{\partial \theta_1}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \nabla \theta_1 &= \Delta\theta_1 + w_1 + a(\theta_2 - \theta_1), \\
\nabla \cdot \mathbf{v}_1 &= 0, \\
z = 0, 1: \quad w = \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} &= 0,
\end{aligned} \tag{5}$$

где θ - возмущение поля температуры, ϕ - возмущение поля $\Phi \equiv bT - C$.

Здесь коэффициент связи между пористыми ячейками a определяется как

$$a = \frac{\chi_b}{\chi} \frac{h^2}{Hl}, \tag{6}$$

где χ_b - температурапроводность боковых стенок ячеек, H - толщина ячейки, l - ширина стенки между ячейками.

Безразмерные параметры:

$$N = \frac{\beta_c \alpha}{\beta D T_0}, \quad Ra = \frac{\beta A h^2 g K}{m b \nu \chi}, \quad S \equiv \frac{D}{\chi}, \tag{7}$$

N – параметр плавучести, Ra – число Релея-Дарси (концентрационное число Релея Дарси $Rc \equiv RaN$), $S \equiv Le^{-1}$ – обратное число Льюиса.

Сделаем замену переменных и параметров

$$\begin{aligned}\phi^* &= \frac{\phi}{(b - S(b-1))}, \\ Ra^* &= (1 - NS(b-1))Ra, \\ N^* &= \frac{Nb - NS(b-1)}{1 - NS(b-1)}.\end{aligned}\tag{8}$$

Опуская звездочки, получаем

$$\begin{aligned}\Delta w_1 &= Ra\Delta_2((1-N)\theta_1 + N\phi_1), \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial t} + b\Gamma_1(\phi_1 - \tilde{b}\theta_1) &= S\Delta\phi_1 + \Delta\theta_1 + \frac{ba}{b-S(b-1)}(\theta_2 - \theta_1), \\ \frac{\partial \theta_1}{\partial t} + \Gamma_1\nabla\theta_1 &= \Delta\theta_1 + w_1 + a(\theta_2 - \theta_1), \\ \frac{\partial w_1}{\partial z} &= \Delta_2 P_1,\end{aligned}\tag{9}$$

где $\Gamma = w\frac{\partial}{\partial z} - \nabla_2 P \cdot \nabla_2$ – оператор конвекционной производной.

3. Длинноволновое приближение

В рамках длинноволнового приближения можно предположить малость горизонтальных производных поля скорости по сравнению с вертикальной. Для учета нелинейности уравнений, связанной с конвективной производной, вертикальную компоненту поля скорости нужно полагать малой: $w \sim L^{-1}$, где L – характерный горизонтальный масштаб течений. Скалярные поля в свою очередь предполагаются большими $P, \phi, \theta \sim L$.

Воспользовавшись методом многих масштабов, можно получить уравнения для некоторого аналога «химического потенциала» φ_1 и температуры \mathcal{G}_1 :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} - \frac{6b^2}{5S}\nabla_i\left(\nabla_j\left(\varphi_1 - \frac{(b-1)\mathcal{G}_1}{b-S(b-1)}\right)\nabla_i P_1 \nabla_j P_1\right) &= \frac{ba}{b-S(b-1)}(\mathcal{G}_2 - \mathcal{G}_1), \\ \frac{\partial \mathcal{G}_1}{\partial t} - \frac{6}{5}\nabla_i(\nabla_j \mathcal{G}_1 \nabla_i P_1 \nabla_j P_1) &= a(\mathcal{G}_2 - \mathcal{G}_1) + S\Delta\varphi_1 + \Delta\mathcal{G}_1.\end{aligned}\tag{10}$$

Здесь амплитуда поля давления $P_1 = \frac{Ra}{12}((1-N)\mathcal{G} + N\varphi)$.

4. Фазовые уравнения для колебательной конвекции

Вблизи границы колебательной неустойчивости системы (10) [1], используя метод многих масштабов, можно получить амплитудные уравнения

$$\frac{\partial A_1}{\partial t_2} = C_R \delta Ra A_1 + C_A a(A_2 - A_1) + C_T |A_1|^2 A_1,\tag{11}$$

при этом поля

$$\begin{cases} \varphi \\ \mathcal{G} \end{cases} = \begin{cases} (A_1 e^{i\omega_0 t} + c.c.) \cos kx \\ (-A_1 (S + i\omega / k^2) e^{i\omega_0 t} + c.c.) \cos kx \end{cases}. \quad (12)$$

Коэффициенты C_R , C_A , C_T зависят от безразмерных параметров и вычисляются на основе уравнений (10).

Из амплитудного уравнения для $A_1 = R_1 e^{i\xi_1}$ можно получить уравнения для динамики амплитуды R_1 и фазы колебаний $\Psi_1 = \xi_1 + \omega_0 t$:

$$\begin{aligned} \dot{\Psi}_1 &= \Omega_0 + |K| (\sin(\Psi_2 - \Psi_1 + \beta) - \sin \beta), \\ \Omega_0 &= \omega_0 + \left\{ \text{Im } C_R + \text{Re } C_R \frac{\text{Im } C_T}{\text{Re } C_T} \right\} \delta R a, \\ |K| e^{i\beta} &= C_A a. \end{aligned} \quad (13)$$

где Ω_0 – собственная частота, β – фазовый сдвиг связи, $|K|$ – сила связи, ω_0 – частота колебаний на границе устойчивости.

В итоге получаем систему связанных уравнений для фазы колебаний вида:

$$\begin{aligned} \dot{\Psi}_1 &= \Omega_0 + |K| (\sin(\Psi_2 - \Psi_1 + \beta) - \sin \beta), \\ \dot{\Psi}_2 &= \Omega_0 + |K| (\sin(\Psi_1 - \Psi_2 + \beta) - \sin \beta). \end{aligned} \quad (14)$$

Это система типа Курамото-Сакагучи [6] – классическая модель для изучения коллективных колебаний в нелинейной динамике.

В дальнейшем к уравнениям для фазы обеих ячеек будет применен метод круговых кумулянтов [4,5] для изучения колебательных эффектов в системе, а также для изучения синхронизации колебательных течений в ячейках.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 19-42-04120.

Список литературы

1. *Goldobin D.S., Lyubimov D.V.* Soret-Driven Convection of Binary Mixture in a Horizontal Porous Layer in the Presence of a Heat or Concentration Source // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2007. Vol. 104(5), P. 830–836.
2. *Kawamura Y., Nakao H.* Collective phase description of oscillatory convection // *Chaos*. 2013. Vol. 23, 043129.
3. *Nield D. A., Bejan A.* Convection in Porous Media. New-York: Springer Verlag, 1998.
4. *Tyulkina I.V., Goldobin D.S., Klimenko L.S., Pikovskiy A.* Dynamics of Noisy Oscillator Populations beyond the Ott-Antonsen Ansatz // *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 120, 264101.
5. *Goldobin D.S., Tyulkina I.V., Klimenko L.S., Pikovskiy A.* Collective mode reductions for populations of coupled noisy oscillators // *Chaos*. 2018. Vol. 28, 101101.
6. *Sakaguchi H., Kuramoto Y.* A Soluble Active Rotator Model Showing Phase Transitions via Mutual Entertainment // *Progress of Theoretical Physics*. 1986. Vol. 76, Iss. 3, P. 576–581.

Влияния направлений вибраций и гравитации на формирование вихревых структур неравномерно нагретой жидкости в квадратной полости

А. Н. Шарифулин^а, С. А. Плотников^а, Т. П. Любимова^б

^аПермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990, Пермь, Комсомольский проспект, 29

email: sharifulin@bk.ru

^бИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1

email: lubimova@icmm.ru

Исследуется взаимодействие двух механизмов тепловой конвекции, – гравитационной и вибрационной для валовых течений буссинесковской жидкости в квадратной полости. В полости, находящейся в постоянном гравитационном поле и совершающей вибрации, задан постоянный градиент температуры ∇T_0 , определенный двумя противоположными изотермическими гранями. Направление вверх составляет с ∇T_0 угол α , а направление вибраций угол β . Жидкость предполагается буссинесковской. Возникающая в ней свободная тепловая конвекция определяется числом Грасгофа Gr . Благодаря вибрациям возникает и осредненное вибрационно-конвективное течение, характеризующееся вибрационным числом Грасгофа S . Угол наклона полости α и направление вибраций β могут плавно изменяться.

В работе из уравнений тепловой вибрационной конвекции, записанных, в стоковом приближении, аналитически путем сведения к задаче Штурма-Лиувилля, определим приближенный вид функции тока вибрационного течения. Получено и численно конечно разностным методом исследовано уравнение определяющее безразмерную функцию тока осредненного течения. Анализ показал, что варьируя параметры задачи можно управлять структурой осредненного течения меняя ее от практически одно вихревой через трех вихревую до четырех вихревой и обратно. Для любого значения вибрационного числа Грасгофа и угла наклона можно подобрать угол направления вибраций и гравитационное число Грасгофа так, что в полости установится симметричное четырех вихревое состояние, исчезающе малой интенсивности (динамическое равновесие).

Ключевые слова: тепловая конвекция; вибрации; динамическое равновесие; квадратная полость, управление вихрями

Influence of the directions of vibrations and gravity on the formation of vortex structures of a nonuniformly heated fluid in a square cavity

A. N. Sharifulin^a, S. A. Plotnikov^a, T. P. Lyubimova^b

^aPerm National Research Polytechnic University, 614990, Perm, Komsomolsky pr. 29, email: sharifulin@bk.ru

^bInstitute of Continuous Media Mechanics of the Ural Branch of Russian Academy of Science, 614013, Perm, Academician Korolev Street, 1, email: lubimova@icmm.ru

The interaction of two mechanisms of thermal convection - gravitational and vibrational for gross currents of the Bussinesq fluid in a square cavity is investigated. In a cavity located in a constant gravitational field and performing vibrations, a constant temperature gradient ∇T_0 is specified, determined by two opposite isothermal faces. The upward direction is an angle α , and the vibration direction is an angle β . The fluid is assumed to be bussinesque. Free thermal convection arising in it is determined by the Grashof number Gr . Instead of the vibrations, an averaged vibrational-convective flow arises, characterized by the vibrational Grashof number S . The angle of inclination of the cavity α and the direction of vibrations β can be smoothly changed.

In this work, from the equations of thermal vibrational convection, written in the Stokes approximation, analytically by reducing to the Sturm-Liouville problem, we determine the approximate form of the vibrational flow stream function. The equation determining the dimensionless stream function of the averaged flow is obtained and numerically investigated by the finite difference method. The analysis showed that by varying the parameters of the problem, it is possible to control the structure of the averaged flow by changing it from practically one vortex through three vortex to four vortex and vice versa. For any value of the vibrational Grashof number and angle of cavity inclination, the angle of vibrations direction and the gravitational Grashof number can be chosen so that a symmetric four-vortex state of vanishingly low intensity (dynamic equilibrium) is established in the cavity.

Keywords: thermal convection; vibrations; dynamic equilibrium; square cavity, vortex control

Крупномасштабное движение неравномерно нагретой жидкости в замкнутой полости может генерироваться как тепловой гравитационной конвекцией, так и тепловой вибрационной конвекцией. Изучение совместного действия обоих механизмов движения жидкости в стоксовом приближении в цилиндрической полости с гармоническим распределением температуры на идеально теплопроводных стенках показало, что в случае линейной зависимости плотности от температуры (буссинескова жидкость) при любых взаимных ориентациях направления подогрева, направления вверх и направления вибраций можно подобрать значения числа Грасгофа Gr и вибрационного числа Грасгофа S такими, что указанные механизмы конвекции полностью друг друга компенсируют и в полости установится состояние динамического равновесия [1], когда осредненное движение в жидкости отсутствует.

В настоящей работе, с целью обобщения результатов [1] на случай прямоугольной формы полости, в стоксовом приближении исследуется совместное действие вибрационного и гравитационного механизмов конвекции в квадратной полости (Рис.1) с заданным линейным распределением температуры.

С этой целью по заданному распределению температур обезразмеренному по заданному перепаду температур на границах $T_0(z)=1-z$ из уравнений тепловой вибрационной конвекции, записанных, в стоксовом приближении [1], аналитически путем сведения к задаче Штурма-Лиувилля, определяется приближенный вид функции тока вибрационного течения $F_1(x, z, \alpha, \beta)$. Подставив $T_0(z)$ и $F_1(x, z, \alpha, \beta)$ в уравнения вибрационной конвекции, записанные в стоксовом приближении [1], получаем уравнение для определения безразмерной функции тока осредненного течения $\psi(x, z, \alpha, \beta, Gr, S)$:

$$\Delta^2 \psi = -Gr \sin(\alpha) + S \frac{\sin(2\beta)}{4} + S \frac{7\pi^2 \sin(2\beta)}{2500} \{ \sin(\pi z) [\sinh(\pi x) + \sinh(\pi - \pi x)] - \sin(\pi x) [\sinh(\pi z) + \sinh(\pi - \pi z)] \} - S \frac{7\pi^2 \cos^2(\beta)}{1250} \{ \cos(\pi z) [\cosh(\pi x) - \cosh(\pi - \pi x)] + \cos(\pi x) [\cosh(\pi z) - \cosh(\pi - \pi z)] \} \quad (1)$$

Дополнив (1) граничными условиями прилипания получаем задачу для определения функции тока осредненного вибрационного течения. Эта задача решалась численно, конечно разностным методом на сетке 128 на 128.

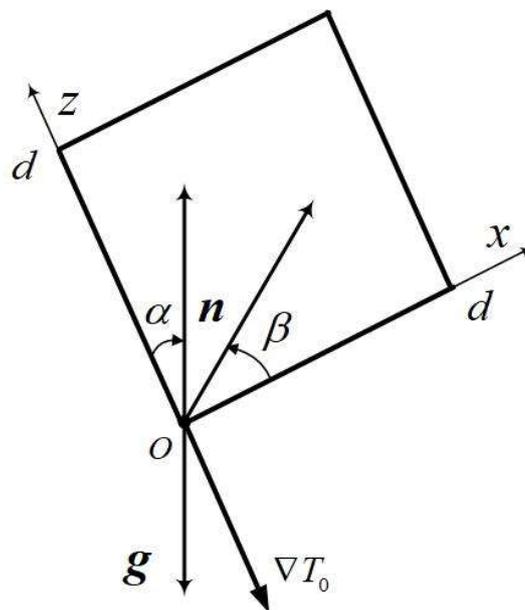


Рис. 1. Геометрия задачи.

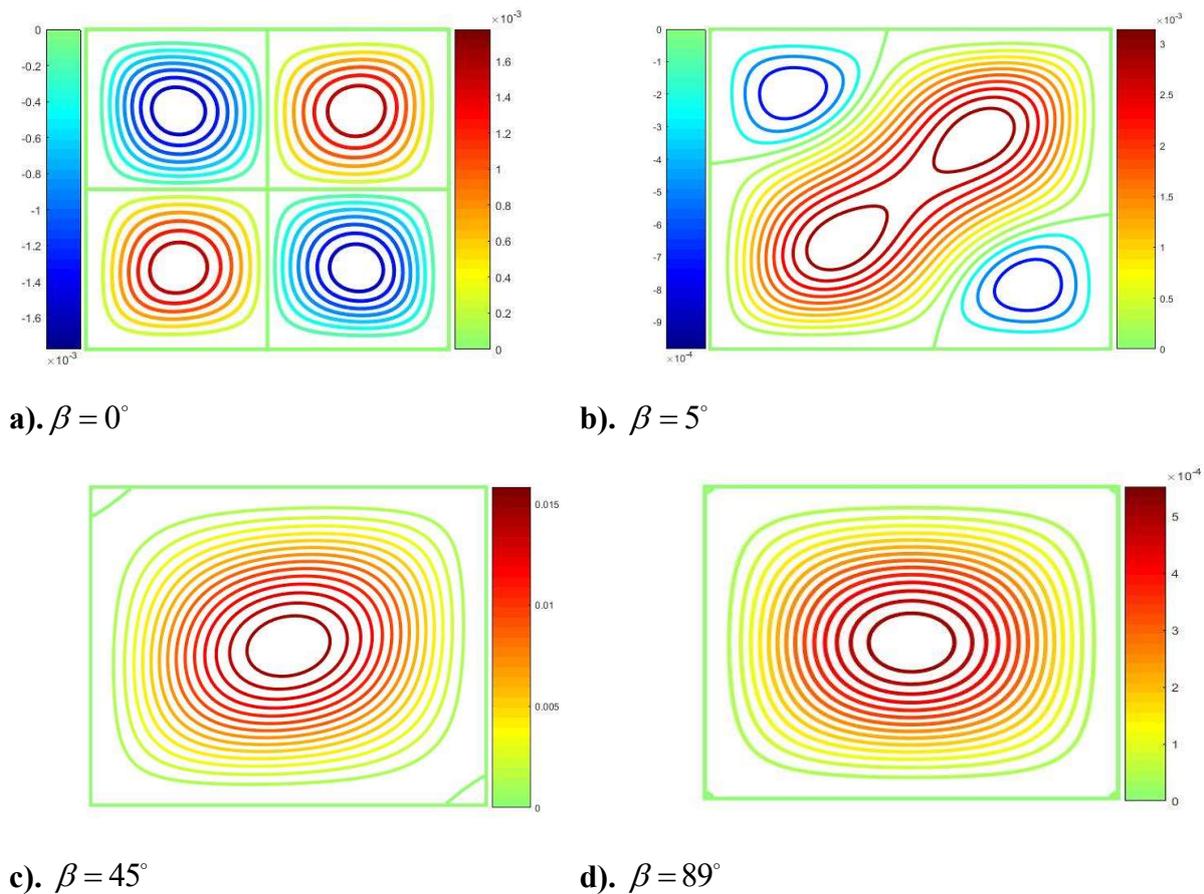
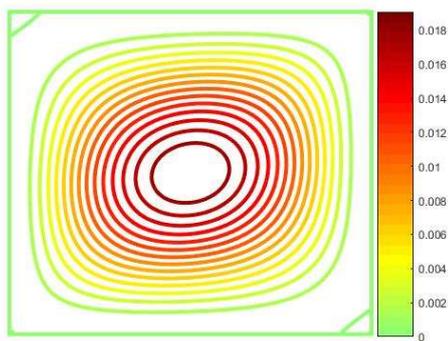


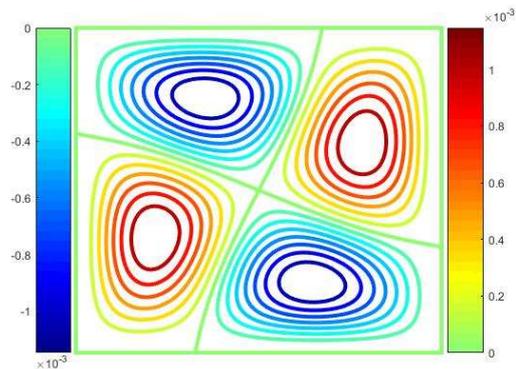
Рис. 2. Линии тока осредненного вибрационного конвективного течения при $Gr = 0, S = 50$.

Расчеты показывают, что в случае невесомости ($Gr = 0$), при направлении вибраций перпендикулярно градиенту температур и любом, отличном от нуля, значении вибрационного числа Грасгофа наблюдается образование четырёхвихревого течения (Рис.2а). При изменении угла направления вибраций β происходит объединение двух диаметрально-противоположных вихрей в один доминирующий, а интенсивность двух других, изолированных друг от друга, уменьшается и структура течения становится трёхвихревой (Рис.2б). Дальнейшее изменение угла β приводит к увеличению доминирующего вихря и практическому исчезновению упомянутых изолированных (Рис.2с и Рис.2д).

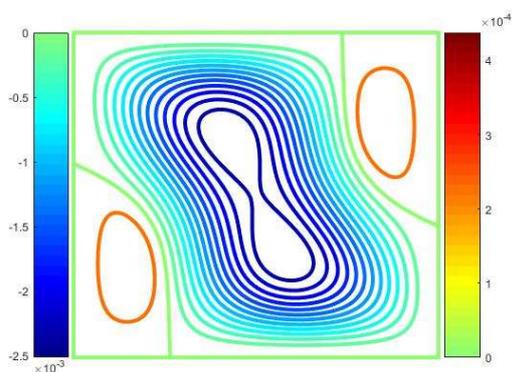
При малом значении Gr и достаточно большом S вибрационное воздействие много больше гравитационного, и структура течения описывается преимущественно вибрационным членом, что даёт один доминирующий вихрь, который занимает почти всю полость (Рис.3а). При увеличении Gr происходит подавление этого вихря и увеличение интенсивности пары противоположных угловых вихрей; при $Gr=23$ влияние вибрационной и гравитационной конвекции практически компенсируют друг друга, а течение приобретает симметричную четырёхвихревую форму (Рис.3б). При дальнейшем увеличении Gr происходит образование и рост вихрей, которые при $Gr=7$ (см. Рис.3а) были паразитными на фоне интенсивного вибрационного (Рис.3с). При числе $Gr = 45$ гравитационный член много больше вибрационного, а структура течения вновь становится одновихревой, но вихрь теперь вращается в противоположную сторону (Рис.3д).



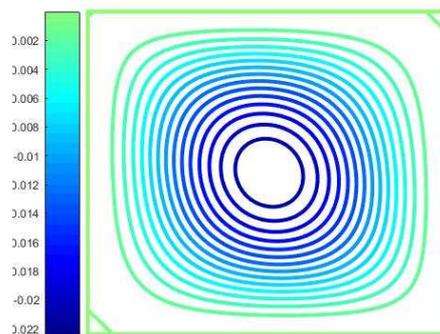
a). $S = 100, \beta = 60^\circ, Gr = 7, \alpha = 70^\circ$



b). $S = 100, \beta = 60^\circ, Gr = 23, \alpha = 70^\circ$



c). $S = 100, \beta = 60^\circ, Gr = 25, \alpha = 70^\circ$



d). $S = 100, \beta = 60^\circ, Gr = 45, \alpha = 70^\circ$

Рис. 3. Эволюция линий тока осредненного течения при плавном увеличении числа Грасгофа Gr .

Благодарности Работа была финансово поддержана РФФИ в рамках совместного российско-германского проекта 20-51-12010 ННИО_а.

Список литературы

1. *Sharifulin A. N.* Controllable equilibrium of an inhomogeneously heated liquid in a vibrational field // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2010. V. 110. №. 1. P. 157-161. DOI:10.1134/s1063776110010188

Структура течения на поверхности пузырька газа, омываемого осесимметричным потоком жидкости

А. И. Шмырова^а, А. В. Шмыров^б

Институт механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, ул. Королева, 1

^аemail: lutsik@icmm.ru

^бemail: shmyrov@icmm.ru

В настоящей работе приведены результаты экспериментального исследования устойчивости течения на поверхности пузырька газа, омываемого осесимметричным потоком жидкости, которые демонстрируют, что при некотором критическом значении управляющих параметров на границе раздела происходит формирование первой моды неустойчивости в виде вихревого течения. Последнее обоснованно опровергает допущения об осесимметричности течения в известных авторам математических моделях и в дальнейшем может быть использовано для верификации теории с экспериментальными данными.

Ключевые слова: пузырёк газа; осесимметричный поток; устойчивость поверхностного течения

Structure of the flow on the surface of a single gas bubble streamlined by uniform fluid flow

A. I. Shmyrova^а, A. V. Shmyrov^б

^аInstitute of Continuous Media Mechanics, Ak. Koroleva St. 1, 614013, Perm

email: lutsik@icmm.ru

^бInstitute of Continuous Media Mechanics, Ak. Koroleva St. 1, 614013, Perm

email: shmyrov@icmm.ru

In this paper, we describe the results of the flow structure visualization experiments conducted on the surface of a single bubble in an axially symmetric flow. It has been found that, at certain critical values for bubble size, flow velocity, and system contamination level, the axial symmetry of the surface flow loses its stability in a threshold manner, and the first instability mode in the form of two vortices appears. The latter refutes the assumptions about the axial symmetry of the flow made in the mathematical models known to the authors. These experimental data can be used to verify the theory.

Keywords: gas bubble; axially symmetric flow; surface flow stability

1. Введение

Одной из наиболее изученных задач неравновесной механики многофазных сред, содержащих ПАВ, является задача о движении пузырька газа или капли одной жидкости в другой, а также о движении капли жидкости в вязкой газовой фазе.

Несмотря на кажущуюся простоту, задача до сих пор не имеет аналитического решения. В силу большой ресурсоёмкости численное моделирование производится в дискретных диапазонах параметров задачи на основании заранее сделанных допущений об осевой симметрии течения на поверхности всплывающего пузырька газа. В работе по изучению осесимметричного течения от сосредоточенного источника неоднородности в системах с границей раздела, содержащей ПАВ [1] было показано, что независимо от природы сил, вызывающих движение жидкости, на поверхности, занятой адсорбированной пленкой ПАВ, наблюдалась перестройка радиального течения в вихревое. На наш взгляд в случае свободно всплывающего пузырька газа малого диаметра наблюдаемая неустойчивость ответственна за спиральную траекторию всплытия. Для пузырьков газа диаметром 1-2 мм такой характер движения до сих пор не имеет общепризнанного объяснения, в отличие от пузырьков большего размера, где отклонение от сферической формы оказывает существенное влияние на смену траектории.

2. Методика эксперимента

Экспериментальное исследование условий, приводящих к развитию трёхмерной неустойчивости осесимметричного течения жидкости, омывающей всплывающий сферический пузырек газа, проводилось на неподвижном в лабораторной системе отсчёта газовом включении. Организация объемного течения осуществлялась двумя независимыми способами. В первом случае пузырек диаметром 1–3 мм создавался на торце тонкого капилляра, закрепленного на оси стеклянного цилиндра. Цилиндр, заполненный рабочей жидкостью (высокоочищенная вода, изопропанол, растворы ДТАВ, TritonX-100, 1-Hexanol), равномерно перемещался вдоль вектора \mathbf{g} . Движение сосуда как целого позволяло создать осесимметричный поток жидкости относительно пузырька газа вдоль всего сечения канала. При втором способе организации течения пузырек создавался на капилляре, размещенного на оси неподвижного стеклянного цилиндра. Движение жидкости осуществлялось путем прокачки высокоочищенной воды в замкнутом контуре с помощью химического центробежного насоса. Для ламинаризации потока использовалась система успокоителей, расположенных в верхней части канала. Такая система позволяет проводить длительные эксперименты при постоянных управляющих параметрах, а также реализует более широкий диапазон скоростей потока.

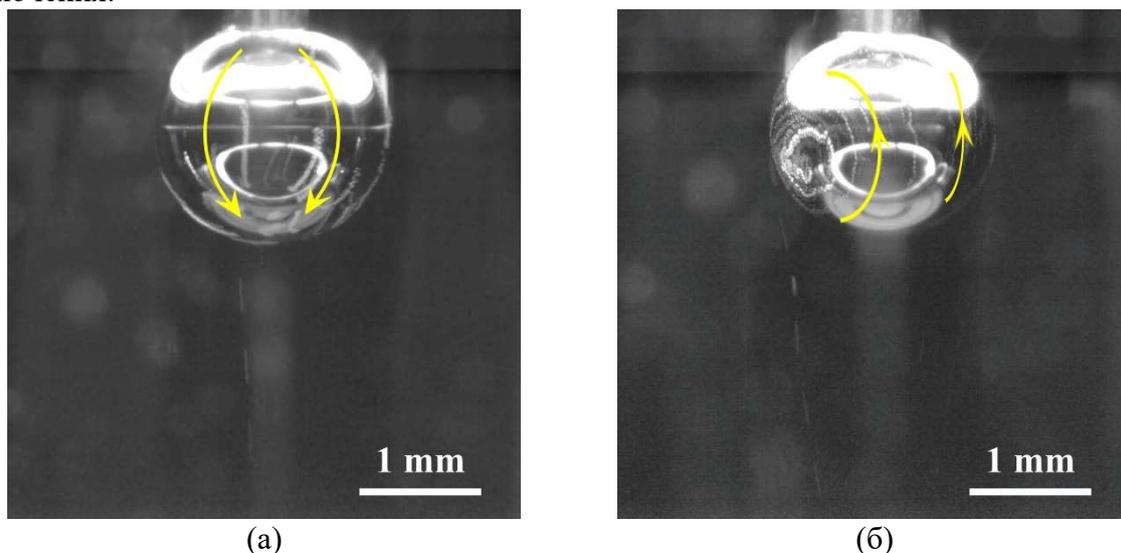
Приповерхностное течение визуализировалось методом подкрашенных струй и методом лазерного ножа, плоскость которого параллельна вектору скорости основного потока. Визуализация структуры течения на поверхности пузырька осуществлялась с помощью полиамидных частиц, осажденных на границе раздела, в рассеянном свете кольцевого осветителя.

3. Результаты

Визуализация структур приповерхностного течения вблизи пузырька газа и в следе за ним методом подкрашенных струй показала, что в отсутствие обтекания пузырька потоком в условиях равномерной подачи красителя в экспериментах наблюдается формирование вихревого течения на поверхности сферы. Последнее связано с более высокой плотностью раствора красителя относительно базовой жидкости и делает невозможным использование данного метода визуализации в данной задаче.

Результаты визуализации поверхностного течения, отражающие типичный сценарий развития неустойчивости, наблюдаемый в различных реализациях при

переходе числа Рейнольдса критического значения, представлены на рисунке ниже. При малых числах Рейнольдса трассеры движутся по поверхности пузырька вдоль меридианов, концентрируясь в нижней полусфере (рисунок (а)). После чего замирают, сохраняя свою неподвижность при неизменной скорости потока. Этот режим течения, по нашему мнению, развивается на поверхности газовых пузырьков малого диаметра, которые всплывают вверх по прямой. С ростом интенсивности окружающего течения на границе раздела наблюдается формирование первой моды неустойчивости в виде двухвихревого движения поверхности пузырька (рисунок (б)). Оси вращения вихрей расположены вблизи экватора напротив друг друга и ориентированы ортогонально относительно вектора скорости основного потока. При числах Рейнольдса порядка 100 оси вихрей сближаются и, как следствие, смещаются на одну полусферу газового включения.



Структура течения на поверхности пузырька газа при обтекании его осесимметричным потоком воды при Рейнольдсе: 30 (а) и 80 (б).

4. Выводы

Приведенные результаты исследований демонстрируют необходимость корректировки математической модели для одной из базовых задач межфазной гидродинамики о всплытии пузырька газа. Наличие вихревых структур на поверхности всплывающего пузырька также должно сказаться на нюансах взаимодействия нескольких пузырьков между собой и с мелкодисперсной твёрдой фракцией в потоке, что является основой таких технологий как флотация и экстракция. В перспективе предлагаемые исследования должны позволить повысить эффективность таких технологий.

5. Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-71-00097).

Список литературы

1. Шмырова А. И., Шмыров А. В. Механизмы формирования вихревых структур на границе раздела жидкость-газ в присутствии адсорбционного слоя // Вестник Пермского университета. Физика. 2020. Вып. 3., С. 31-38. DOI:10.17072/1994-3598-2020-3-31-38.

Научное издание

Неравновесные процессы в сплошных средах

Сборник статей
по материалам Международного симпозиума

(г. Пермь, 16–18 сентября 2021 г.)

Издается в авторской редакции
Техническая подготовка материалов: *М. И. Петухов, Т. В. Демина*

Объем данных 11 Мб
Подписано к использованию 23.11.2021

Размещено в открытом доступе
на сайте www.psu.ru
в разделе НАУКА / Электронные публикации
и в электронной мультимедийной библиотеке ELiS

Издательский центр
Пермского государственного
национального исследовательского университета.
614990, г. Пермь, ул. Букирева, 15