УДК 532.135, 532.5

РАСЧЕТ ДВИЖЕНИЯ СФЕРИЧЕСКОЙ КАПЛИ В СРЕДЕ БИНГАМА

Ю. В. Пивоваров

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск
E-mail: pivov@hydro.nsc.ru

Проведено математическое моделирование наблюдаемого в эксперименте процесса сближения двух одинаковых масляных капель, находящихся в равноплотном спиртово-водном растворе (матрице). Установлено, что капля движется циклически в режиме покой — разгон — торможение со временем цикла порядка 10^{-2} с. Нарушение баланса сил на границе капли в состоянии покоя обусловлено тем, что касательные напряжения на ней не могут превышать предел текучести матрицы, при этом нормальные напряжения определяются из решения задачи теории упругости, поскольку межмолекулярные связи в покоящейся матрице делают ее подобной твердому телу. Результаты расчетов движения капли и экспериментальные данные хорошо согласуются в течение всего процесса сближения капель, за исключением финальной стадии, что можно объяснить неучетом гидродинамического взаимодействия капель.

Ключевые слова: регуляризация, неньютоновская жидкость, уравнения Стокса, вихрь, функция тока.

Введение. В работе [1], являющейся продолжением исследований, проведенных в [2], изучено поведение капель из вазелинового, подсолнечного и индустриального масел, находящихся в равноплотном спиртово-водном растворе, и обнаружено, что если расстояние между двумя каплями порядка их размеров, то независимо от масштаба системы происходит их медленное сближение с последующим слиянием в одну каплю. Экспериментальная установка, используемая в [1], была изолирована от внешних силовых и тепловых воздействий. В экспериментах установлено, что сближение наблюдается только в том случае, если обе капли обладают поверхностным натяжением.

В работе [3] предложен алгоритм вычисления силы взаимодействия капель на начальном этапе их разгона. Первым шагом в этом алгоритме является решение задачи теории упругости об определении компонент тензоров напряжений и векторов перемещений, удовлетворяющих следующим условиям на границах капель: скачок нормальных напряжений пропорционален поверхностному натяжению капель, как это принято в классической гидродинамике; касательные напряжения, а также нормальные и касательные перемещения непрерывны. В рамках теории упругости сила, действующая на каплю со стороны окружающей среды, которую согласно [1] будем называть матрицей, всегда равна нулю в силу уравнений равновесия внутри капли и постоянства поверхностного натяжения на ее границе. Однако в [3] отмечено, что касательные напряжения на границе капли не могут по модулю превышать предел текучести матрицы, тогда как ограничения на нормальные напряжения отсутствуют. Поэтому касательные напряжения необходимо скорректировать,

Работа выполнена в рамках Программы Отделения энергетики, машиностроения и процессов управления РАН № 14.3 и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 12-01-00149-а).

а нормальные оставить без изменения. В результате сила, действующая на каплю, будет отлична от нуля.

Возникновение полей напряжений и перемещений в покоящейся матрице можно объяснить наличием в ней молекулярных связей, делающих ее подобной твердому телу. Поскольку капля обладает поверхностным натяжением, она сжимается и тянет за собой частицы матрицы. В момент начала движения капли молекулярные связи разрушаются и сила исчезает, но капля продолжает двигаться по инерции, до тех пор пока не остановится. При этом молекулярные связи восстанавливаются, что приводит к появлению силы, разгоняющей каплю. Далее процесс повторяется.

В настоящей работе предполагается, что матрица является средой Бингама. Это наиболее простая модель среды, обладающей пределом текучести. Нормальные напряжения, возникающие в матрице в состояниях покоя [3] и движения, предлагается суммировать с весовыми коэффициентами, в сумме составляющими единицу. Это вызвано тем, что молекулярные связи в матрице разрушаются не мгновенно, а через некоторый промежуток времени, за который капля пройдет расстояние порядка размеров одной молекулы воды ($3 \cdot 10^{-10}$ м). Таким образом, сила, обусловленная нормальными напряжениями в покоящейся матрице, является внешней для капли и действует в течение очень малого промежутка времени. Влиянием другой капли на гидродинамическое течение в матрице пренебрегается.

При разработке алгоритма расчета движения капли используется регуляризованная модель жидкости Бингама [4, 5]. По сути, эта модель сводится к описанию движения неньютоновской жидкости, вязкость которой зависит от второго инварианта тензора скоростей деформаций. Уравнения движения записываются в переменных вихрь — функция тока.

Для тестирования алгоритма используются известное аналитическое решение в случае ньютоновской жидкости [6] и результаты расчетов [7] для случая жидкости Бингама. Проводится подгонка результатов расчета к имеющимся экспериментальным данным по трем параметрам: отношению модулей сдвига материалов капли и матрицы, пределу текучести материала матрицы и расстоянию, которое проходит капля до момента полного разрушения молекулярных связей в матрице.

1. Параметры задачи и искомые функции. Пусть r, z, φ — цилиндрическая система координат с началом в центре капли, причем ось z направлена в сторону другой капли (так как капли сближаются, вектор скорости капли направлен вдоль оси z) (рис. 1).

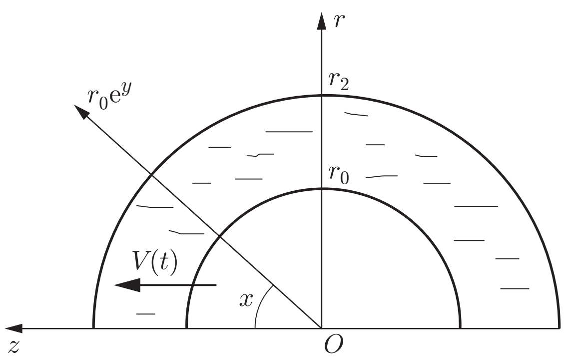

Рис. 1. Схема задачи и системы координат

Введем преобразование координат

$$r = r_0\, \mathrm{e}^y \sin x, \qquad z = r_0\, \mathrm{e}^y \cos x,$$

где r_0 — радиус капли. Тогда область течения конформно отобразится на прямоугольник $0 \leqslant x \leqslant \pi$, $0 \leqslant y \leqslant Y$ ($Y = \ln(r_2/r_0)$; r_2 — радиус шара, внутри которого движется жидкость). Данная система координат движется вместе с каплей. При этом равенство $y = 0$ определяет границу капли, $y = Y$ — внешнюю границу области течения, $x = 0$, $x = \pi$ — отрезки на оси симметрии.

Размерными параметрами задачи являются радиус капли $r_0 = 0{,}005$ м, характерная скорость капли $V_0 = 10^{-6}$ м/с, характерное время процесса $t_0 = 10^{-2}$ с, плотность капли $\rho_0 = 10^3$ кг/м^3, масса капли $m = (4/3)\pi r_0^3 \rho_0 = 5{,}24 \cdot 10^{-4}$ кг, кинематическая вязкость материала матрицы $\nu_0 = 10^{-6}$ м^2/с, предел текучести материала матрицы $k_0 = 10^{-4} \div 10^{-3}$ Па, эффективная вязкость материала матрицы (вязкость, обусловленная наличием у нее предела текучести) $\nu_1 = k_0 r_0/(\rho_0 V_0) = 5 \cdot 10^{-4} \div 5 \cdot 10^{-3}$ м^2/с, расстояние, пройденное каплей за время действия разгоняющей силы, $z_0 \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м, поверхностное натяжение капли $\gamma_0 = 0{,}02$ Н/м, модули сдвига материала капли $G_1 \approx 10^9$ Па и матрицы $G_2 = 5 \cdot 10^8$ Па, коэффициенты объемного сжатия материала капли $K_1 = (1/6) \cdot 10^{10}$ Па и матрицы $K_2 = 2 \cdot 10^9$ Па, расстояние между центрами капель $r_1 = (2 \div 3{,}2) r_0$ (при $r_1 = 2r_0$ капли соприкасаются, а при $r_1 > 3{,}2 r_0$ сближение капель прекращается), радиус шара r_2, внутри которого ищется решение.

Параметры k_0, z_0, G_1/G_2 являются подгоночными параметрами модели, выбираемыми с учетом условия соответствия результатов расчетов экспериментальным данным.

Числа Пуассона (обратные коэффициенты Пуассона) определяются равенствами [8]

$$m_k = \frac{6K_k + 2G_k}{3K_k - 2G_k}, \qquad k = 1, 2,$$

причем $2 \leqslant m_k < \infty$, значение $m_k = 2$ соответствует несжимаемому материалу k-й среды. При заданных значениях $m_2 = 2{,}6$, K_1/K_2, G_1/G_2 величина m_1 определяется следующим образом:

$$m_1 = \Big(2\frac{G_2}{G_1}\frac{K_1}{K_2} + \frac{m_2 - 2}{m_2 + 1}\Big) \Big/ \Big(\frac{G_2}{G_1}\frac{K_1}{K_2} - \frac{m_2 - 2}{m_2 + 1}\Big).$$

Поэтому, для того чтобы существовало положительное значение m_1, должно выполняться условие

$$\frac{G_1}{G_2} < \frac{K_1(m_2 + 1)}{K_2(m_2 - 2)} = 5.$$

Заметим, что характерные значения V_0, k_0 получены в эксперименте, K_1, K_2 взяты из справочника, а t_0, m_2 — из работы [3].

Искомыми функциями являются компоненты вектора скорости u, v в направлениях x, y; функция тока Ψ и завихренность ω, связанные с компонентами вектора скорости и коэффициентом Ламе H следующим образом:

$$u = \frac{1}{rH}\frac{\partial \Psi}{\partial y}, \qquad v = -\frac{1}{rH}\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \qquad \omega = \frac{1}{H^2}\Big(\frac{\partial\,(uH)}{\partial y} - \frac{\partial\,(vH)}{\partial x}\Big); \tag{1}$$

$$H = \sqrt{(\partial r/\partial x)^2 + (\partial r/\partial y)^2} = r_0\, \mathrm{e}^y; \tag{2}$$

компоненты тензора скоростей деформаций D

$$D_{xx} = \frac{1}{H}\Big(\frac{\partial u}{\partial x} + v\Big), \qquad D_{yy} = \frac{1}{H}\,\frac{\partial v}{\partial y}, \qquad D_{\varphi\varphi} = \frac{1}{H}\,(u \operatorname{ctg} x + v),$$
$$D_{xy} = \frac{1}{2H}\Big(\frac{\partial u}{\partial y} - u + \frac{\partial v}{\partial x}\Big); \tag{3}$$

модуль (корень из второго инварианта) тензора скоростей деформаций

$$|D| = \sqrt{D_{xx}^2 + D_{yy}^2 + D_{\varphi\varphi}^2 + 2D_{xy}^2}; \tag{4}$$

функция вязкости матрицы $\nu(|D|)$; гидродинамическое давление p на поверхности капли; касательные P_{xy} и нормальные P_{yy} напряжения на границе капли, обусловленные наличием гидродинамического течения вокруг нее; составляющие силы, действующей на каплю, обусловленные действием нормальных G_{z1} и касательных G_{z2} напряжений при наличии гидродинамического течения вокруг капли; нормальная компонента тензора напряжений $T_{yy}^{(2)}$, обусловленная наличием поверхностного натяжения капель, создающего в покоящейся матрице поле напряжений (см. [3]); сила F_{z1}, обусловленная действием напряжений $T_{yy}^{(2)}$ на поверхности капли; суммарная сила G_z', действующая на каплю; скорость капли $V(t)$ (t — время, отсчитываемое с момента начала цикла); расстояние $z_1(t)$, пройденное каплей; средняя скорость V_c капли в течение одного цикла, включающего разгон капли, ее торможение и состояние покоя; время цикла t_c; расстояние $z_1(t_c)$, пройденное каплей в течение одного цикла. Величины V_c, t_c, $z_1(t_c)$ являются функциями расстояния r_1 между центрами капель.

Установим следующую связь размерных (отмеченных знаком “$\sim$”) и безразмерных величин:

$$\tilde H = r_0 H, \quad \tilde u = V_0 u, \quad \tilde v = V_0 v, \quad \tilde\Psi = r_0^2 V_0 \Psi, \quad \tilde\omega = \frac{V_0}{r_0}\,\omega, \quad \tilde D_{ij} = \frac{V_0}{r_0}\,D_{ij},$$
$$|\tilde D| = \frac{V_0}{r_0}\,|D|, \quad \tilde p = k_0 p, \quad \tilde P_{xy} = k_0 P_{xy}, \quad \tilde P_{yy} = k_0 P_{yy}, \quad \tilde T_{yy}^{(2)} = k_0 T_{yy}^{(2)},$$
$$\tilde G_{z1} = \pi^2 r_0^2 k_0 G_{z1}, \quad \tilde G_{z2} = \pi^2 r_0^2 k_0 G_{z2}, \quad \tilde F_{z1} = \pi^2 r_0^2 k_0 F_{z1}, \quad \tilde G_z = \pi^2 r_0^2 k_0 G_z, \tag{5}$$
$$\tilde V(t) = V_0 V(t), \quad \tilde z_1 = z_0 z_1, \quad \tilde t = t_0 t, \quad \tilde V_c = V_0 V_c, \quad \tilde t_c = t_0 t_c,$$
$$\tilde z_1(\tilde t_c) = z_0 z_1(t_c), \quad \tilde r_1 = r_0 r_1, \quad \tilde r_2 = r_0 r_2, \quad \tilde\nu = \nu_1 \nu.$$

2. Безразмерные критерии подобия. Из уравнений задачи, записанных в безразмерном виде, следуют критерии подобия $\mathrm{Re} = r_0^2/(\nu_1 t_0) = 0{,}5 \div 5{,}0$ — число Рейнольдса; $\alpha = \nu_0/\nu_1 = 2 \cdot 10^{-4} \div 2 \cdot 10^{-3}$ — отношение кинематической и эффективной вязкостей (число, обратное числу Бингама [7]); $A = t_0 \pi^2 r_0^2 k_0/(m V_0) = 0{,}471 \div 4{,}710$ — отношение характерной силы к произведению массы капли и ее ускорения; $B = t_0 V_0/z_0 \approx 50$ — кинематический параметр; $G_{12} = G_1/G_2 = 1 \div 5$ — отношение модулей сдвига материалов капли и матрицы; $K_{12} = K_1/K_2 = 5/6$ — отношение коэффициентов объемного сжатия материалов капли и матрицы; $m_1 \approx 4$, $m_2 = 2{,}6$ — числа Пуассона материалов капли и матрицы; $r_1 = 2{,}0 \div 3{,}2$ — безразмерное расстояние между центрами капель; $r_2 = 7$ — безразмерный радиус внешнего шара; $\Gamma = \gamma_0/(\pi r_0 k_0) = 4000/\pi \div 40\,000/\pi$ — отношение напряжений, вызванных влиянием поверхностного натяжения капель, к напряжениям, обусловленным наличием предела текучести матрицы.

3. Постановка задачи. Вследствие малости параметра $\mathrm{Re}' = V_0 r_0/\nu_1 = 10^{-6} \div 10^{-5}$ нелинейные конвективные члены в уравнении для завихренности можно опустить. Тогда это уравнение принимает вид [9]

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} - \frac{1}{\mathrm{Re}\,H^2}\Big[\frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial x}\,(r\nu\omega)\Big) + \frac{\partial}{\partial y}\Big(\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial y}\,(r\nu\omega)\Big)\Big] = G.$$

Регуляризованная функция вязкости $\nu(|D|)$ имеет вид [5]

$$\nu = \begin{cases} \alpha + 1/(\sqrt{2}\,|D|), & |D| > 3\delta/2, \\ f(|D|), & \delta/2 \leqslant |D| \leqslant 3\delta/2, \\ \alpha + 1/(\sqrt{2}\,\delta), & |D| < \delta/2. \end{cases} \tag{6}$$

Здесь δ — малое число; величина $|D|$ определяется формулами (1)–(4); $f(|D|)$ — полином пятой степени, осуществляющий "склейку" значений функции $\nu(|D|)$, а также ее первых и вторых производных в точках $|D| = \delta/2$ и $|D| = 3\delta/2$:

$$f(|D|) = \alpha + 1/(\sqrt{2}\,\delta) - 17\sqrt{2}\,(|D| - \delta/2)^3/(27\delta^4) + \\ + 35\sqrt{2}\,(|D| - \delta/2)^4/(54\delta^5) - 5\sqrt{2}\,(|D| - \delta/2)^5/(27\delta^6).$$

Правая часть уравнения для завихренности определяется выражением

$$G = \frac{2}{\operatorname{Re} H^2}\Big\{\frac{\partial}{\partial x}\Big[\frac{\partial \nu}{\partial x}\Big(-\frac{1}{H}\frac{\partial}{\partial y}\Big(\frac{1}{rH}\frac{\partial \Psi}{\partial y}\Big) - \frac{1}{rH^3}\frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\Big) - \\ - \frac{\partial \nu}{\partial y}\Big(-\frac{1}{H}\frac{\partial}{\partial y}\Big(\frac{1}{rH}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\Big) + \frac{1}{rH^3}\frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial y}\Big)\Big] + \\ + \frac{\partial}{\partial y}\Big[\frac{\partial \nu}{\partial x}\Big(\frac{1}{H}\frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{1}{rH}\frac{\partial \Psi}{\partial y}\Big) - \frac{1}{rH^3}\frac{\partial H}{\partial y}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\Big) - \\ - \frac{\partial \nu}{\partial y}\Big(\frac{1}{H}\frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{1}{rH}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\Big) + \frac{1}{rH^3}\frac{\partial H}{\partial y}\frac{\partial \Psi}{\partial y}\Big)\Big]\Big\}. \tag{7}$$

Уравнение для функции тока имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{1}{r}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\Big) + \frac{\partial}{\partial y}\Big(\frac{1}{r}\frac{\partial \Psi}{\partial y}\Big) = H^2\omega. \tag{8}$$

Граничные условия для функции тока и завихренности следующие:

$$\begin{aligned} y = 0{:}& \quad \Psi = 0, \quad \partial\Psi/\partial y = 0, \\ x = 0,\ x = \pi{:}& \quad \Psi = 0, \quad \omega = 0, \\ y = Y{:}& \quad \Psi = V(t)r^2/2, \quad \omega = 0. \end{aligned} \tag{9}$$

Начальные условия:

$$t = 0: \quad \Psi = 0, \quad \omega = 0, \quad V(t) = 0.$$

Скорость капли $V(t)$ вычисляется следующим образом. Пусть $T_{yy}^{(2)}$ — нормальная компонента тензора напряжений в матрице на поверхности капли, являющаяся решением указанной выше задачи теории упругости. Тогда суммарная сила, обусловленная действием этих напряжений, равна

$$F_{z1} = \frac{2}{\pi}\int\limits_0^\pi T_{yy}^{(2)} \cos x \sin x\, dx.$$

В работе [3] выведена приближенная формула

$$F_{z1} \approx \frac{48\Gamma(G_{12} - 1)(m_2 - 2)(m_2 + 1)r_1^{-7}L(r_1)}{(2m_2 - 4 + K_{12}(m_2 + 1))((7 + 8G_{12})m_2 - 5 - 10G_{12})}$$

Значения эмпирической функции $L(r_1)$

r_1	$L(r_1)$	r_1	$L(r_1)$
2,0	4,0195	2,7	2,1243
2,1	3,5871	2,8	2,0152
2,2	3,1926	2,9	1,9238
2,3	2,8724	3,0	1,8464
2,4	2,6191	3,1	1,7802
2,5	2,4182	3,2	1,7231
2,6	2,2563	—	—

(безразмерные параметры Г, G_{12}, K_{12}, m_2 описаны в п. **2**). Значения эмпирической функции $L(r_1)$ представлены в таблице.

При $m_2 \geqslant 3$ величина F_{z1} слабо зависит от m_2, поэтому оптимизацию решения по параметру m_2 проводить не нужно. Положим $m_2 = 2{,}6$. Номинальным значением G_{12} является $G_{12} = 2$ (тогда $m_1 = 4$). При $m_2 < 2{,}6$ значения F_{z1}, меньшие по сравнению со значениями F_{z1} при $m_2 = 2{,}6$, можно получить, уменьшая параметр G_{12}, а бо́льшие — увеличивая его. Вообще говоря, допустимыми являются значения $G_{12} \in (1, 5)$, но оптимизацию будем проводить в более узком диапазоне $G_{12} \in [2, 4]$.

Выражения для нормальных и касательных напряжений на границе капли, обусловленных наличием гидродинамического течения вокруг нее, имеют вид

$$P_{yy} = -p, \qquad P_{xy} = \nu\omega,$$

где p — гидродинамическое давление:

$$p = \int_0^x \frac{1}{r} \frac{\partial (r\nu\omega)}{\partial y} \, dx.$$

Составляющие силы, обусловленные наличием нормальных и касательных напряжений в гидродинамическом течении вокруг капли, равны

$$G_{z1} = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi P_{yy} \cos x \sin x \, dx, \qquad G_{z2} = -\frac{2}{\pi} \int_0^\pi P_{xy} \sin^2 x \, dx.$$

Суммарная сила, действующая на каплю, определяется по формуле

$$G'_z = \xi(z_1) F_{z1} + (1 - \xi(z_1)) G_{z1} + G_{z2},$$

где

$$\xi(z_1) = \begin{cases} 1 - z_1, & z_1 < 1, \\ 0, & z_1 \geqslant 1 \text{ —} \end{cases} \tag{10}$$

доля неразрушенных молекулярных связей в матрице, за счет которых она приобрела свойства твердого тела. Из (10) следует, что эта величина линейно зависит от расстояния, пройденного каплей, и обращается в нуль, когда оно становится приближенно равным размеру одной молекулы воды. Заметим, что сила F_{z1} является разгоняющей, сила G_{z2} — тормозящей, а сила G_{z1} может быть как разгоняющей, так и тормозящей.

Скорость капли определяется по формуле

$$V(t) = A \int_0^t G_z'(t)\,dt.$$

Расстояние, пройденное каплей, равно

$$z_1(t) = B \int_0^t V(t)\,dt.$$

Пусть t_c — момент времени, в который значение $|D|$ во всей области $0 \leqslant x \leqslant \pi$, $0 \leqslant y \leqslant Y$ становится меньше $\delta/2$. Тогда средняя скорость капли в течение одного цикла определяется соотношением

$$\tilde{V}_c = V_0\,\frac{z_1(t_c)}{Bt_c}.$$

В эксперименте с каплями подсолнечного масла установлено, что при $r_1 = 3$ $\tilde{V}_c = 1{,}8925 \cdot 10^{-7}$ м/с, при $r_1 = 2{,}8$ $\tilde{V}_c = 2{,}4752 \cdot 10^{-7}$ м/с, а при $r_1 = 2{,}6$ $\tilde{V}_c = 2{,}6274 \cdot 10^{-7}$ м/с. При меньших расстояниях между центрами капель, по-видимому, большое влияние оказывают силы их гидродинамического взаимодействия. Поэтому далее используются указанные экспериментальные данные. Таким образом, поставлена задача о подборе параметров G_{12}, k_0, z_0, обеспечивающих вычисление значений средней скорости, максимально близких к трем заданным экспериментальным значениям. Набор этих параметров, доставляющий минимум некоторому функционалу (см. п. **7**), будем называть оптимальным.

4. Численный метод решения задачи. Уравнение (6) можно записать в виде

$$\Big(\frac{\partial}{\partial t} + L_1 + L_2\Big)\omega = G, \tag{11}$$

где

$$L_1\omega = -\frac{1}{\mathrm{Re}\,H^2}\,\frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial x}\,(r\nu\omega)\Big), \qquad L_2\omega = -\frac{1}{\mathrm{Re}\,H^2}\,\frac{\partial}{\partial y}\Big(\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial y}\,(r\nu\omega)\Big).$$

Пусть задана неравномерная сетка

$$0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_{N-1} < x_N = \pi, \qquad 0 = y_0 < y_1 < \ldots < y_{M-1} < y_M = Y.$$

Введем следующие обозначения:

$$x_{n-1/2} = (x_{n-1} + x_n)/2, \qquad h_{xn-1/2} = x_n - x_{n-1}, \qquad n = \overline{1, N},$$
$$y_{m-1/2} = (y_{m-1} + y_m)/2, \qquad h_{ym-1/2} = y_m - y_{m-1}, \qquad m = \overline{1, M},$$
$$\bar{h}_{xn} = (x_{n+1} - x_{n-1})/2, \qquad n = \overline{1, N-1},$$
$$\bar{h}_{ym} = (y_{m+1} - y_{m-1})/2, \qquad m = \overline{1, M-1}.$$

Будем считать, что

$$h_{xn+1/2} - h_{xn-1/2} = O(h^2_{xn+1/2}), \qquad h_{ym+1/2} - h_{ym-1/2} = O(h^2_{ym+1/2}).$$

Введем также равномерную сетку на полуоси $t \geqslant 0$ с шагом τ. Для любой функции $f(x, y, t)$ примем обозначение

$$f(x_n, y_m, k\tau) = f^k_{nm},$$

причем индексы n, m могут быть дробными либо отсутствовать, если f не зависит от x, y или если эти индексы несущественны. Индекс k может отсутствовать, если f не зависит от t или если этот индекс несуществен.

Дифференциальные операторы L_1, L_2 аппроксимируем разностными операторами Λ_1, Λ_2 следующим образом:

$$\Lambda_1\omega_{nm} = -\frac{1}{\operatorname{Re} H_{nm}^2 \bar{h}_{xn}}\Big(\frac{r_{n+1m}\nu_{n+1m}\omega_{n+1m} - r_{nm}\nu_{nm}\omega_{nm}}{r_{n+1/2m}h_{xn+1/2}} - \\ - \frac{r_{nm}\nu_{nm}\omega_{nm} - r_{n-1m}\nu_{n-1m}\omega_{n-1m}}{r_{n-1/2m}h_{xn-1/2}}\Big),$$

$$\Lambda_2\omega_{nm} = -\frac{1}{\operatorname{Re} H_{nm}^2 \bar{h}_{ym}}\Big(\frac{r_{nm+1}\nu_{nm+1}\omega_{nm+1} - r_{nm}\nu_{nm}\omega_{nm}}{r_{nm+1/2}h_{ym+1/2}} - \\ - \frac{r_{nm}\nu_{nm}\omega_{nm} - r_{nm-1}\nu_{nm-1}\omega_{nm-1}}{r_{nm-1/2}h_{ym-1/2}}\Big).$$

Аппроксимируем (11) с помощью формулы

$$(E + \gamma\tau\Lambda_1^k)(E + \gamma\tau\Lambda_2^k)\,\frac{\omega_{nm}^{k+1} - \omega_{nm}^k}{\tau} = G_{nm}^k - (\Lambda_1^k + \Lambda_2^k)\omega_{nm}^k, \\ n = \overline{1, N-1}, \qquad m = \overline{1, M-1}, \tag{12}$$

где E — тождественный оператор; $\gamma = 0 \div 1$ — весовой коэффициент. Из уравнения (8) и первых двух условий (9) следует, что на границе капли приближенно выполняется условие Тома

$$\omega_{n0}^{k+1} = \frac{2\Psi_{n1}^{k+1}}{r_{n0}H_{n0}^2 h_{y1/2}^2}.$$

Функцию ω_{nm}^{k+1} представим в виде

$$\omega_{nm}^{k+1} = \hat{\omega}_{nm}^{k+1} + P_{nm}^{k+1}\Big(\frac{2\Psi_{n1}^{k+1}}{r_{n0}H_{n0}^2 h_{y1/2}^2} - \omega_{n0}^k\Big), \tag{13}$$

где сеточная функция P_{nm}^{k+1} удовлетворяет задаче

$$(E + \gamma\tau\Lambda_2^k)P_{nm}^{k+1} = 0, \qquad P_{n0}^{k+1} = 1, \qquad P_{nM}^{k+1} = 0, \qquad n = \overline{1, N-1},$$

а функция $\hat{\omega}_{nm}^{k+1}$ — уравнению (12) и граничным условиям

$$\hat{\omega}_{n0}^{k+1} = \omega_{n0}^k, \quad \hat{\omega}_{nM}^{k+1} = 0, \quad n = \overline{0, N}, \qquad \hat{\omega}_{0m}^{k+1} = \hat{\omega}_{Nm}^{k+1} = 0, \quad m = \overline{0, M}. \tag{14}$$

Подставляя в правую часть уравнения (8) выражение (13) и аппроксимируя его левую часть, получаем уравнение для функции тока (в силу (14) функцию ω_{n0}^k можно заменить на $\hat{\omega}_{n0}^{k+1}$)

$$a_{nm}^x\Psi_{n-1m}^{k+1} + b_{nm}^x\Psi_{n+1m}^{k+1} + a_{nm}^y\Psi_{nm-1}^{k+1} + b_{nm}^y\Psi_{nm+1}^{k+1} - c_{nm}\Psi_{nm}^{k+1} + \\ + d_{nm}^{yk+1}\Psi_{n1}^{k+1} = -f_{nm}^{k+1}, \qquad n = \overline{1, N-1}, \quad m = \overline{1, M-1}, \tag{15}$$

где

$$a_{nm}^x = \frac{1}{r_{n-1/2m}h_{xn-1/2}\bar{h}_{xn}}, \qquad b_{nm}^x = \frac{1}{r_{n+1/2m}h_{xn+1/2}\bar{h}_{xn}},$$

$$a^y_{nm}=\frac{1}{r_{nm-1/2}h_{ym-1/2}\bar h_{ym}},\qquad b^y_{nm}=\frac{1}{r_{nm+1/2}h_{ym+1/2}\bar h_{ym}},\tag{16}$$
$$c_{nm}=a^x_{nm}+b^x_{nm}+a^y_{nm}+b^y_{nm},$$
$$d^{yk+1}_{nm}=-\frac{2H^2_{nm}P^{k+1}_{nm}}{r_{n0}H^2_{n0}h^2_{y1/2}},\qquad f^{k+1}_{nm}=-H^2_{nm}(\hat\omega^{k+1}_{nm}-\hat\omega^{k+1}_{n0}P^{k+1}_{nm}).$$

Уравнение (15) нужно дополнить граничными условиями (9):

$$\Psi^{k+1}_{n0}=0,\quad \Psi^{k+1}_{nM}=V^{k+1}r^2_{nM}/2,\quad n=\overline{0,N},\qquad \Psi^{k+1}_{0m}=\Psi^{k+1}_{Nm}=0,\quad m=\overline{0,M}.\tag{17}$$

Система уравнений (15), (17) отличается от системы (33), (34), полученной в работе [9], тем, что в левой части (15) отсутствует член $e^{yk+1}_{nm}\Psi^{k+1}_{nM-1}$, а правые части граничных условий (17) имеют другой вид. Поэтому для решения системы (15), (17) можно использовать описанный в [9] способ решения, положив $e^{yk+1}_{nm}=0$.

5. Особенности аппроксимации некоторых функций. При вычислении компонент тензора скоростей деформаций по формулам (3) и правой части уравнения для вихря по формуле (7) следует учитывать особенности аппроксимируемых выражений. Рассмотрим, например, функцию $\partial u/\partial x$, входящую в выражение для вычисления D_{xx} (см. первую формулу в (3)). В силу (1) имеем

$$\frac{\partial u}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{1}{rH}\,\frac{\partial\Psi}{\partial y}\Big)=\mathrm{e}^{-2y}\,\frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{1}{\sin x}\,\frac{\partial\Psi}{\partial y}\Big).$$

При $x\to 0$ функция $\partial\Psi/\partial y$ имеет следующую асимптотику:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial y}=a(y)x^2+O(x^4).$$

Кроме того,

$$\sin x=x+O(x^3).$$

Рассмотрим сетку с постоянным шагом h_x по оси x. Аппроксимируем производную $\partial u/\partial x$ следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{nm}\approx\frac{\mathrm{e}^{-2y_m}}{2h_x\varepsilon}\Big(\frac{(1-\varepsilon)(\partial\Psi/\partial y)\big|_{nm}+\varepsilon(\partial\Psi/\partial y)\big|_{n+1m}}{(1-\varepsilon)\sin(x_n)+\varepsilon\sin(x_{n+1})}-$$
$$-\frac{(1-\varepsilon)(\partial\Psi/\partial y)\big|_{nm}+\varepsilon(\partial\Psi/\partial y)\big|_{n-1m}}{(1-\varepsilon)\sin(x_n)+\varepsilon\sin(x_{n-1})}\Big).\tag{18}$$

Тогда при $n=1$ получаем

$$\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{1m}\approx\frac{a_m\,\mathrm{e}^{-2y_m}}{2h_x\varepsilon}\Big(\frac{h^2_x(1-\varepsilon)+4h^2_x\varepsilon+O(h^4_x)}{h_x(1-\varepsilon)+2h_x\varepsilon+O(h^3_x)}-\frac{h^2_x(1-\varepsilon)+O(h^4_x)}{h_x(1-\varepsilon)+O(h^3_x)}\Big)=$$
$$=\frac{a_m\,\mathrm{e}^{-2y_m}}{1+\varepsilon}+O(h^2_x).$$

В то же время непосредственные вычисления показывают, что

$$\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{1m}=a_m\,\mathrm{e}^{-2y_m}+O(h^2_x).$$

Таким образом, если $\varepsilon=O(h^2_x)$, то при $n=1$ формула (18) имеет второй порядок аппроксимации. Из численных экспериментов следует, что в этом случае второй порядок аппроксимации формулы (18) сохраняется при любых $n = \overline{1, N-1}$. В расчетах полагалось $\varepsilon = 1/N^2$. Исследования показали, что введение малого параметра ε необходимо только в случае, если в аппроксимируемом выражении имеется член вида $(\partial/\partial x)((1/\sin x)\,\partial\Psi/\partial y)$. Среди компонент тензора скоростей деформаций другие такие члены отсутствуют, но имеется три члена в выражении для G_{nm} (первый, четвертый и пятый члены в правой части формулы (7)). Остальные члены следует аппроксимировать стандартным образом, что соответствует значению $\varepsilon = 1/2$.

6. Результаты тестирования программы. Для численного моделирования движения капли составлена компьютерная программа.

При $\nu = \mathrm{const}$ численное стационарное решение исследовалось на сходимость к точному решению Стокса, описывающему движение сферы в безграничной ньютоновской жидкости [8]. При измельчении расчетной сетки получен второй порядок сходимости вихря и функции тока к точным аналогам.

Для решения Стокса приближенно вычислялись функции D_{xx}, D_{yy}, $D_{\varphi\varphi}$, D_{xy} (см. формулы (1), (3)). При измельчении расчетной сетки для этих функций установлен второй порядок сходимости к точным аналогам.

При $\nu_{nm} = 1 + x_n + y_m$ для решения Стокса вычислялись восемь членов (из которых шесть членов являлись ненулевыми) в выражении для функции G (см. формулу (7)). При измельчении расчетной сетки для каждого из этих членов получен второй порядок сходимости к точным аналогам.

При $\nu_{nm} = 1 + x_n^2 + y_m^2$ исследовано стационарное решение на сходимость "в себе" [9]. При измельчении расчетной сетки установлен второй порядок сходимости вихря и функции тока.

В случае функции ν_{nm}, определяемой формулой (6) при $\delta = 0{,}1$, $\alpha = 1$, исследовалось стационарное решение на сходимость "в себе". При измельчении расчетной сетки получен второй порядок сходимости для вихря и функции тока.

При $\nu_{nm} = 1 + N_B/(2|D_{nm}| + P_R)$, $N_B = 0{,}747$, $P_R = 1{,}038 \cdot 10^{-4}$ рассчитывалось стационарное решение и сравнивалось с решением, полученным в работе [7]. Изолинии функции тока и функции $|D|$ хорошо согласуются с изолиниями этих функций, полученными в работе [7]. Незначительные различия можно объяснить различным числом разбиений расчетной области: в работе [7] $N = 16$, $M = 14$, в настоящей работе $N = 80$, $M = 80$.

7. Порядок расчетов и их результаты. Несмотря на то что путем введения параметра δ выполнена регуляризация задачи, она является плохо обусловленной вследствие малости параметра $\alpha \sim 10^{-3}$. Проведенные исследования показали, что для корректного расчета при таком значении α необходимо использовать большое число разбиений ($N = 80$, $M = 80$), сильно сгущающуюся вблизи границы капли сетку и очень малый шаг по времени $\tau \sim 10^{-6}$. В результате время расчета одного варианта составляет порядка 1 сут. Если рассчитывать тот же вариант при $\alpha = 0{,}1$, то значения средней скорости капли различаются лишь на 10 %. При этом время расчета одного варианта составляет порядка 1 мин.

При расчете одного варианта задавались следующие исходные данные: $\delta = 0{,}1$, $\alpha = 0{,}1$, $N = 40$, $M = 40$, $\varepsilon = 10^{-9}$, $\tau = 5 \cdot 10^{-4}$, $r_0 = 0{,}005$, $\gamma = 0{,}99$, $k_0 = 10^{-4} \div 5 \cdot 10^{-4}$, $G_{12} = 2 \div 4$, $z_0 = 3 \cdot 10^{-10} \div 7 \cdot 10^{-10}$, $r_1 = 2 \div 3$.

Сетка строилась следующим образом: минимальный шаг по оси y выбирался равным $0{,}2Y/M$. Этот шаг достигался при $y = 0$. При $y = y_m$ и $y = y_{m-1}$ отношение шагов сетки было постоянным и бóльшим единицы при $m \leqslant M/2 - 1$. При $m = M/2 - 1$ и $m = M/2$ шаги сетки были равны, а при $m > M/2$ они уменьшались с постоянным коэффициентом до значения Y/M при $m = M - 1$. Шаг сетки по оси x был постоянным и равным π/N.

При вычислении функции тока сначала определялся параметр

$$P_* = \int_0^{\pi} \Psi^2(x, Y)\, dx + \iint_D f^2(x, y)\, dx\, dy.$$

Здесь функция $f(x_n, y_m) = f_{nm}$ определяется по формуле (16). Затем итерационно решалась задача (15), (17), до тех пор пока параметр

$$\varepsilon_L = \Big(\frac{1}{P_*} \iint_D N_*^2(x, y)\, dx\, dy\Big)^{1/2}$$

($N_*(x_n, y_m)$ — невязка уравнения (15); L — число итераций) не становился меньше ε.

Расчет прекращался, если $\max\limits_{n,m} |D_{nm}^{k+1}| \leqslant 0{,}5\delta$ и $\max\limits_{n,m} |D_{nm}^{k}| \geqslant 0{,}5\delta$.

В расчетах определялся минимум функционала

$$F_* = \big[0{,}25\big(\tilde V_c\big|_{r_1=2,6} - 2{,}6274 \cdot 10^{-7}\big)^2 + \\ + 0{,}75\big(\tilde V_c\big|_{r_1=2,8} - 2{,}4752 \cdot 10^{-7}\big)^2 + \big(\tilde V_c\big|_{r_1=3} - 1{,}8925 \cdot 10^{-7}\big)^2\big] \cdot 10^{14}.$$

При этом параметры задачи принимали следующие значения: $k_0 = 10^{-4}$; $2 \cdot 10^{-4}$; $3 \cdot 10^{-4}$; $4 \cdot 10^{-4}$; $5 \cdot 10^{-4}$, $G_{12} = 2{,}0$; $2{,}5$; $3{,}0$; $3{,}5$; $4{,}0$, $z_0 = 3 \cdot 10^{-10}$; $4 \cdot 10^{-10}$; $5 \cdot 10^{-10}$; $6 \cdot 10^{-10}$; $7 \cdot 10^{-10}$. Таким образом задача решалась $3 \cdot 125 = 375$ раз. Получены следующие результаты расчетов: $k_0 = 10^{-4}$, $G_{12} = 4$, $z_0 = 4 \cdot 10^{-10}$, $\tilde V_c\big|_{r_1=2,6} = 3{,}0653 \cdot 10^{-7}$, $\tilde V_c\big|_{r_1=2,8} = 2{,}3295 \cdot 10^{-7}$, $\tilde V_c\big|_{r_1=3} = 1{,}8126 \cdot 10^{-7}$, $F_* = 7{,}0227 \cdot 10^{-2}$.

Ниже приведены результаты расчетов для оптимального набора параметров k_0, G_{12}, z_0. На рис. 2 показаны зависимости безразмерных силы G_z' и скорости V капли от времени t при $r_1 = 3$. На рис. 3 приведена зависимость безразмерного расстояния z_1, пройденного каплей с момента начала цикла, от времени t при различных значениях r_1. На рис. 4 представлена схема движения капли при $r_1 = 3$, $t = 0{,}5$ (движение капли прекратилось при $t = 0{,}8025$).

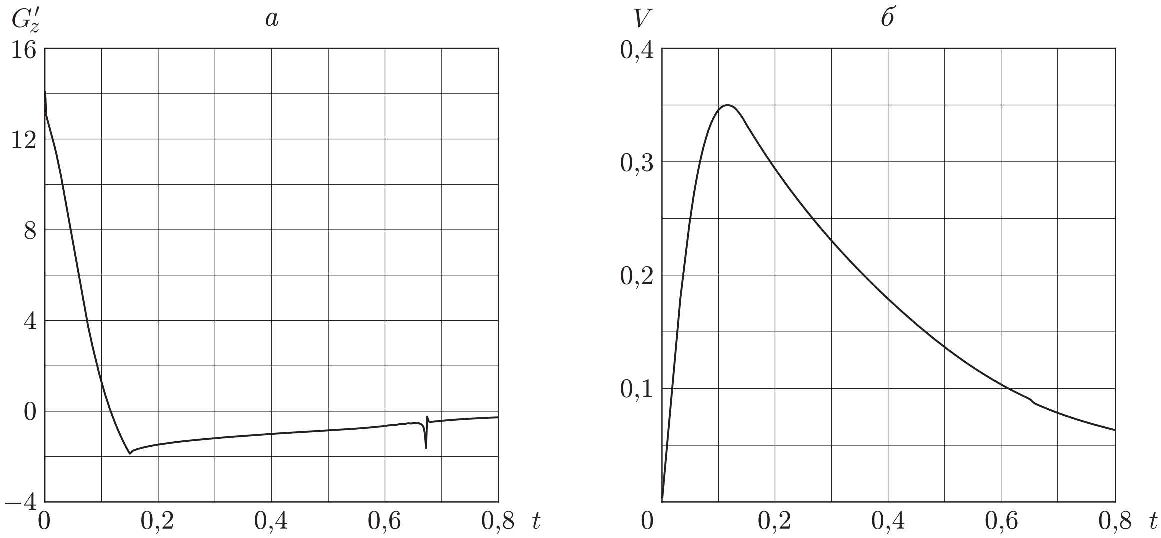

Рис. 2. Зависимости безразмерных силы, действующей на каплю (a), и скорости капли ($б$) от безразмерного времени в течение одного цикла при $r_1 = 3$

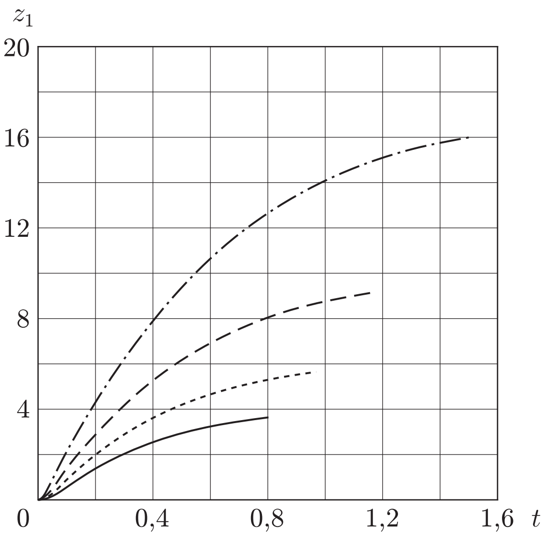

Рис. 3

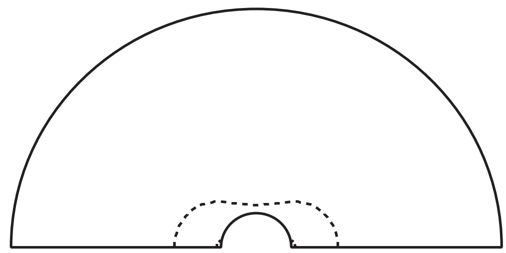

Рис. 4

Рис. 3. Зависимость безразмерного расстояния, пройденного каплей, от безразмерного времени в течение одного цикла при различных значениях r_1:
сплошная линия — $r_1 = 3$, пунктирная — $r_1 = 2{,}8$, штриховая — $r_1 = 2{,}6$, штрихпунктирная — $r_1 = 2{,}4$

Рис. 4. Схема движения капли при $r_1 = 3$, $t = 0{,}5$:
сплошная линия — граница области течения (малый полукруг — граница капли, прямые отрезки — отрезки на оси симметрии, большой полукруг — внешняя граница области течения), штриховая — граница жидкой зоны

Ниже приведено макроскопическое описание движения капли. Вследствие малости параметров $V_0 = 10^{-6}$ м/с, $t_0 = 10^{-2}$ с не имеет смысла рассматривать все циклы движения капли. Достаточно ограничиться дискретным набором из 11 значений средней по циклу скорости $\tilde{V}_c$ в точках $r_{1k} = 3 - 0{,}1k$, $k = \overline{0, 10}$ (r_{1k} — значения безразмерного расстояния между центрами капель). Если $\tilde{V}_c(r_1)$ — функция средней размерной скорости, зависящей от r_1, t — макроскопическое время, измеряемое в секундах, то для определения функции $r_1(t)$ имеем дифференциальное уравнение

$$r_0 \frac{dr_1}{dt} = -2\tilde{V}_c(r_1),$$

решая которое, находим

$$t(r_1) = \frac{r_0}{2} \int\limits_{r_1}^{3} \frac{dr_1}{\tilde{V}_c(r_1)}. \qquad (19)$$

Подставляя в (19) вместо r_1 дискретные значения r_{1k} и вычисляя интеграл методом трапеций, получаем набор дискретных значений t_k, $k = \overline{0, 10}$.

На рис. 5 показаны экспериментальная и расчетная зависимости $r_1(t)$. Видно, что эти зависимости различаются только на заключительной стадии сближения капель ($r_1 < 2{,}25$). Такое различие можно объяснить неучетом гидродинамического взаимодействия капель при построении расчетной кривой.

Заключение. Предложен метод расчета процесса сближения двух одинаковых масляных капель, находящихся в равноплотном спиртово-водном растворе (матрице), рассматриваемом как жидкость Бингама. Капли считаются упругими твердыми телами. На

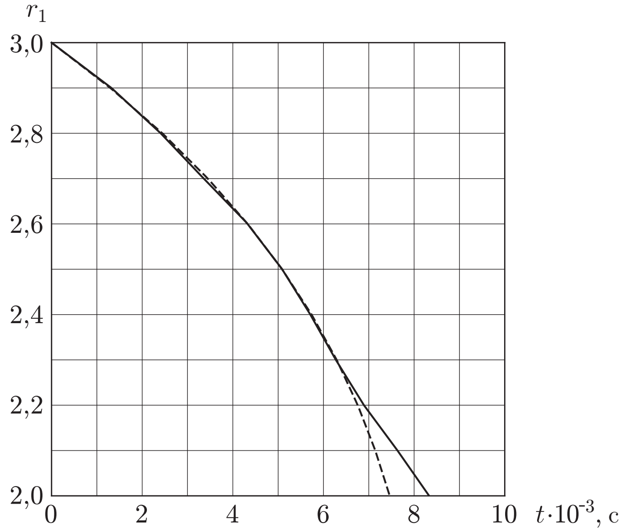

Рис. 5. Зависимость безразмерного расстояния между центрами капель от времени: сплошная линия — экспериментальные данные, штриховая — результаты расчетов

основе выполненных оценок и расчетов установлено, что капля движется циклически в режиме покой — разгон — торможение со временем цикла порядка 10^{-2} с и средней скоростью порядка 10^{-6} м/с. При расчете силы, действующей на каплю, вводится функция ξ расстояния z_1, пройденного каплей с момента начала цикла, определяющая долю неразрушенных молекулярных связей в матрице и обращающаяся в нуль после прохождения каплей расстояния z_0 порядка размера одной молекулы воды. Сила, созданная нормальными напряжениями в данный момент времени, определяется как сумма силы, созданной этими напряжениями в состоянии покоя с коэффициентом $\xi(z_1)$, и силы, созданной ими под влиянием гидродинамического течения в матрице в тот же момент времени, с коэффициентом $1 - \xi(z_1)$. Сила, созданная касательными напряжениями, определяется решением гидродинамической задачи. Влияние второй капли учитывается при расчете нормальных напряжений упругого взаимодействия в состоянии покоя, но не учитывается при расчете гидродинамического течения, так как, с одной стороны, его учет довольно сложен, а с другой — при достаточно большом расстоянии между центрами капель их гидродинамическое взаимодействие незначительно и им можно пренебречь. Осуществлена оптимизация процесса сближения капель по трем параметрам и выбраны значения этих параметров, согласующиеся с экспериментальными данными о динамике движения капель. Значение каждого из этих параметров находится в узком диапазоне: предел текучести матрицы $k_0 = 10^{-4} \div 10^{-3}$ Па (границы известны из других экспериментов); отношение модулей сдвига масла и спиртово-водного раствора $G_{12} = 1 \div 5$ (границы заданы с учетом результатов теоретического анализа, выполненного в п. **1**); значение $z_0 \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м (размер одной молекулы воды). В расчетах диапазоны значений первых двух параметров сужались: $k_0 = 10^{-4} \div 5 \cdot 10^{-4}$ Па, $G_{12} = 2 \div 4$, а значение z_0 варьировалось в диапазоне $3 \cdot 10^{-10} \div 7 \cdot 10^{-10}$ м. При оптимальных значениях параметров $k_0 = 10^{-4}$ Па, $G_{12} = 4$, $z_0 = 4 \cdot 10^{-10}$ м построены расчетный и экспериментальный графики зависимости расстояния между центрами капель от времени. Экспериментальная и расчетная кривые очень близки при расстоянии между центрами капель $r_1 = 2{,}25 \div 3{,}00$ и существенно различаются на заключительной стадии сближения капель при $r_1 = 2{,}00 \div 2{,}25$, что объясняется неучетом гидродинамического взаимодействия капель в теоретической модели.

Автор выражает благодарность В. В. Пухначеву и В. В. Шелухину за полезные обсуждения рассматриваемой задачи.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Стебновский С. В.** Термодинамическая неустойчивость дисперсных сред, изолированных от внешних воздействий // ПМТФ. 1999. Т. 40, № 3. С. 53–58.
2. **Стебновский С. В.** О взаимодействии жидких капель, взвешенных в растворах // Журн. техн. физики. 1981. Вып. 10. С. 2177–2180.
3. **Пивоваров Ю. В.** Вычисление силы взаимодействия двух капель, находящихся в пластической среде // ПМТФ. 2009. Т. 50, № 6. С. 100–114.
4. **Шелухин В. В.** Модель жидкости Бингама в переменных напряжение — скорость // Докл. АН. 2001. Т. 377, № 4. С. 455–458.
5. **Malek J., Ruzicka M., Shelukhin V. V.** Herschel — Bulkley fluids: existence and regularity of steady flows // Math. Models Methods Appl. Sci. 2005. V. 15, N 12. P. 1845–1861.
6. **Кочин Н. Е.** Теоретическая гидромеханика / Н. Е. Кочин, И. А. Кибель, Н. В. Розе. М.: Физматгиз, 1963. Ч. 2.
7. **Beris A. N., Tsamopoulos J. A., Armstrong R. C., Brown R. A.** Creeping motion of a sphere through a Bingham plastic // J. Fluid Mech. 1985. V. 158. P. 219–244.
8. **Ландау Л. Д.** Теория упругости / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. М.: Наука, 1965.
9. **Пивоваров Ю. В.** Расчет движения жидкости с переменной вязкостью в области с криволинейной границей // Вычисл. технологии. 2005. Т. 10, № 3. С. 87–107.

Поступила в редакцию 15/VII 2011 г.,
в окончательном варианте — 31/X 2011 г.