



# Численное исследование деформации и реологических свойств капель эмульсии методом граничных элементов<sup>1</sup>

Абрамова О.А.\*,\*\*, Иткулова Ю.А.\*,\*\*, Гумеров Н.А.\*,\*\*, Ахатов И.Ш.\*,\*\*

\* Центр «Микро- и наномасштабная динамика дисперсных систем» БашГУ, Уфа

\*\* Institute for Advanced Computer Studies, University of Maryland, USA,

\*\*\* North Dakota State University, USA

\*\*\*\* Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УНЦ РАН, Уфа

Настоящая работа посвящена исследованию динамики двух вязких несмешивающихся жидкостей в неограниченной области в трехмерной постановке при малых числах Рейнольдса. Численная методика основывается на методе граничных элементов. Для ускорения расчетов и увеличения масштаба рассматриваемых задач применяется распараллеливание вычислений на графических (GPU) процессорах с использованием технологии CUDA. Исследуются угол наклона и деформация капель в сдвиговом потоке при различных параметрах. Полученные результаты сравниваются с опубликованными в литературе экспериментальными данными, численными результатами и теорией малых деформаций. Проведен расчет реологических характеристик для разбавленных эмульсий в сдвиговом потоке при различных отношениях вязкостей внутренней и внешней жидкостей.

## 1. Введение

Исследование динамики дисперсных систем является актуальной проблемой современной науки и техники. Пример таких систем представляют эмульсии, которые встречаются во многих областях промышленности: нефтяной, пищевой, переработке отходов, биотехнологии, медицине. Поэтому важно разработать эффективный численный аппарат, позволяющий детально исследовать динамику систем «жидкость–жидкость», а также их реологические свойства, поскольку во многом именно они определяют возможности практического использования эмульсий. Проведение численных экспериментов по прямому моделированию дисперсных систем также обусловлено необходимостью более подробного описания некоторых явлений, возникающих при движении эмульсий в различных областях. Например, недавно был обнаружен эффект динамического заклинивания водонефтяных эмульсий в микроканалах [1]. Этот эффект носит как положительные,

так и отрицательные черты, которые влияют на величину дебита скважин, но его механизм до сих пор не изучен.

Целью данной работы является моделирование трехмерных течений Стокса двух вязких несмешивающихся жидкостей в неограниченной области. Для решения поставленных задач используются новые эффективные подходы к моделированию трехмерных процессов и современные информационные технологии. Численная методика основывается на методе граничных элементов, что уменьшает размерность задачи на единицу, так как все расчеты связаны только с границей.

Метод граничных элементов (МГЭ) для Стоксовых течений изложен в [2] и успешно применялся для расчета динамики деформируемых капель, взаимодействия капель и частиц в дисперсных течениях [3–5]. Численному изучению свойств эмульсий посвящен ряд работ, связанных не только с динамикой деформируемых капель в сдвиговом потоке, но и описывающих влияние различных полей (ВЧ, СВЧ [6]) на отдельные капли в составе дисперсных систем. Реологические свойства различных ти-

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке гранта Министерства образования и науки Российской Федерации (11.G34.31.0040).

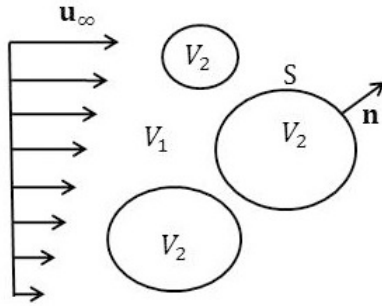


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой задачи: динамика каплей в неограниченной области (обозначен линейный профиль сдвигового течения)

пов эмульсий и закономерности их динамики широко исследуются экспериментально [7].

В настоящей работе подробно изучена динамика каплей эмульсии под действием сдвигового потока. Исследованы деформация и угол наклона одной капли, а также проведен расчет эффективной вязкости, первой и второй разности нормальных компонент тензора напряжений при различных соотношениях вязкостей каплей и окружающей жидкости и капиллярных числах. Полученные результаты сравнены с численными результатами и экспериментальными данными, опубликованными в литературе.

## 2. Математическая модель

Рассматривается задача динамики деформируемых каплей одной ньютоновской жидкости (индекс 2) в неограниченном потоке другой жидкости (индекс 1) при малых числах Рейнольдса. Схематичное изображение исследуемого процесса представлено на рис. 1. Движение жидкостей описывается уравнениями Стокса

$$-\nabla p_i + \mu_i \nabla^2 \mathbf{u}_i = \mathbf{0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u}_i = 0, \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

где  $\mathbf{u}$  — скорость;  $\mu$  — динамическая вязкость;  $p$  — давление, которое включает гидростатический компонент. На границе раздела двух жидкостей  $S$  задаются следующие условия для скорости  $\mathbf{u}$  и нормального напряжения  $\mathbf{f} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}, \quad \mathbf{f} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_2 = f \mathbf{n}, \\ f = \gamma(\nabla \cdot \mathbf{n}) + (\rho_1 - \rho_2)(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in S, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  — тензор напряжений;  $\rho$  — плотность;  $\mathbf{x}$  — радиус-вектор рассматриваемой точки;  $\mathbf{g}$  — ускорение свободного падения;  $\gamma$  — коэффициент поверхностного натяжения;  $\mathbf{n}$  — нормаль к поверхности, направленная в жидкость 1;  $k$  — средняя кривизна

поверхности. В случае неограниченной области для внешней жидкости задается условие на бесконечности  $\mathbf{u}_1(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x})$ .

Кинематическое условие, описывающее движение точек поверхности каплей, может быть записано в виде:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in S. \quad (3)$$

## 3. Гранично-интегральная формулировка

Рассматриваемая задача решается методом граничных элементов [2]. Суть которого заключается в преобразовании дифференциального уравнения в частных производных, описывающего поведение неизвестной функции внутри и на границе области, в интегральное уравнение, определяющее только граничные значения, и поиске численного решения этого уравнения. Далее значения искомой функции в произвольных точках расчетной области можно определить из интегрального уравнения, используя найденные решения на границе. Таким образом, размерность задачи уменьшается на единицу, что делает МГЭ достаточно эффективным при моделировании трехмерных задач в бесконечных областях или областях со сложной геометрией.

Интегральное представление поля скоростей внутри и вне каплей может быть записано в следующем виде [8]:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{y} \in V_1, \quad \mathbf{u}(\mathbf{y}) - 2\mathbf{u}_\infty(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y} \in V_2, \quad \lambda \mathbf{u}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y} \in S, \quad \frac{1+\lambda}{2} \mathbf{u}(\mathbf{y}) - \mathbf{u}_\infty(\mathbf{y}) \end{aligned} \right\} = -\frac{1}{\mu_1} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) + dS(\mathbf{x}) + (\lambda - 1) \int_S [\mathbf{T}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})] \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad (4)$$

где  $V_1$  и  $V_2$  — объемы, занимаемые соответственно внешней и внутренней жидкостями;  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  определяется из уравнения (2). Нормаль в данном случае направлена из жидкости 2 в жидкость 1. Заметим, что скорость  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  находится как решение последнего уравнения (4), которое является интегральным уравнением Фредгольма 2-го рода с сингулярным ядром.  $\mathbf{G}$  и  $\mathbf{T}$  — тензоры второго и третьего ранга, компоненты которых в прямоугольной декартовой системе координат имеют вид:

$$\begin{aligned} G_{ij}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) &= \frac{1}{8\pi} \left( \frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{r_i r_j}{r^3} \right), \\ T_{ijk}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) &= -\frac{3}{4\pi} \frac{r_i r_j r_k}{r^5}, \\ r_i &= y_i - x_i, \quad i, j, k = 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера. Таким образом, если  $\mathbf{u}$  и  $\mathbf{f}$  известны на границе области, то поле скорости  $\mathbf{u}(\mathbf{y})$  может быть определено в любой точке области.

#### 4. Численная реализация

Поверхность каждой капли дискретизируется треугольной сеткой. Для вычисления поверхностных интегралов используются квадратурные формулы [9]. Сингулярные интегралы определяются на основе известных интегральных тождеств для течений Стокса [8–10]. Для вычисления средней кривизны поверхности в каждом узле сетки применяется метод параболической аппроксимации [10] (см. также [9]). Используя метод коллокаций в узлах сетки, последнее уравнение в граничных интегралах (4) сводится к СЛАУ относительно неизвестных компонентов скорости на границе

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (6)$$

где  $\mathbf{A}$  — расчетная матрица системы;  $\mathbf{x}$  — вектор неизвестных;  $\mathbf{b}$  — правая часть системы. Таким образом, при моделировании динамики эмульсии с общим числом узлов сетки на поверхности капель  $N$  требуется находить решение СЛАУ размером  $3N \times 3N$  на каждом временном шаге.

Для сеток маленького размера при решении СЛАУ (6) применялись прямые методы, но при увеличении масштаба задачи их использование затрудняется. В рамках данной работы для ускорения расчетов разработан модуль матрично-векторного произведения без хранения матрицы в памяти вычислительной системы, который используется в итерационном решателе GMRES, и распараллелен на графических процессорах (GPU) с использованием технологии CUDA [11]. Результаты тестов на графической карте NVIDIA Tesla C2050 показали возможность решения граничных задач для уравнений Стокса размером до 100 000 элементов на одной рабочей станции.

В данной работе тензор напряжений  $\langle \sigma \rangle$  для разбавленной эмульсии в сдвиговом потоке  $\mathbf{u}_\infty = (Gx_2, 0, 0)$ ,  $G$  — скорость сдвига, определяется как [3, 12, 13]:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = -\delta_{ij} \langle p \rangle + 2\mu_1 \langle e_{ij} \rangle + \alpha \Sigma_{ij}, \quad (7)$$

$$\Sigma_{ij} = \frac{1}{V_2} \int_S [f_i x_j - \mu_1 (1-\lambda)(u_i n_j + u_j n_i)] dS, \quad (8)$$

$i, j = 1, 2, 3,$

где  $e_{ij}$  — компоненты тензора деформаций;  $\alpha$  — объемное содержание дисперсной фазы. Два первых члена в правой части уравнения (7) — вклад непрерывной фазы, последний интеграл выражает

вклад дисперсной фазы в тензор напряжений среды в целом и его значение зависит от микроструктуры рассматриваемой эмульсии.

Зная скорости и разности нормального напряжения на поверхности каждой капли, можно вычислить следующие реологические функции — эффективную вязкость  $\mu_{eff} = \mu_1 + \alpha \Sigma_{12}/G$ , первую  $N_1 = \alpha(\Sigma_{11} - \Sigma_{22})$  и вторую  $N_2 = \alpha(\Sigma_{22} - \Sigma_{33})$  разности нормальных напряжений.

Для стабилизации сетки в процессе моделирования динамики капель правая часть условия (3) модифицируется следующим образом:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \mathbf{w}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{x} \in S, \quad (9)$$

где  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  — скорость жидкости, определяемая из решения эллиптической граничной задачи, описанной выше;  $\mathbf{w}(\mathbf{x})$  — локально определяемая поправка, которую можно задавать произвольно для сохранения более или менее равномерного распределения узлов сетки на поверхности капель. В настоящей работе используется формула, предложенная в работе [4], в упрощенном виде (без учета коррекции для близлежащих капель).

Интегрирование по времени проводится методом Адамса–Башфорта–Моултона (АБМ) 6-го порядка (предиктор–корректор), для которого значения функции на начальном отрезке времени находят методом Рунге–Кутты 4-го порядка (РК 4). Шаг по времени выбирается в соответствии с условием численной устойчивости (см. детали в [9]).

#### 5. Результаты расчетов

В рамках данной работы в среде Matlab реализованы программные модули для исследования динамики капель одной жидкости в неограниченном потоке другой жидкости. Все результаты представлены для безразмерного времени  $t = t_{nondim} = \gamma t_{dim}/(\mu_1 a)$ , где  $t_{dim}$  — размерное время;  $a$  — радиус капли.

Для верификации реализованных методов проведено сравнение полученных результатов с аналитическим решением для обтекания одиночной фиксированной капли. Относительная погрешность составляет 1–1.5% для случая  $\lambda = 2.5$  и  $N_\Delta = 1280$ , где  $N_\Delta$  — количество треугольных элементов сетки на поверхности капли. Также проведены расчеты движения нескольких близко расположенных друг к другу деформируемых капель. Получены хорошие количественные и качественные согласования результатов для двух капель одинакового объема при заданном значении капиллярного числа и соотношения вязкостей  $Ca = 0.35$ ,  $\lambda = 0.2$ ,  $Ca = \mu_1 a G/\gamma$  с аналогичным случаем, опубликованными в работе [10]. Для данного тестового примера количество

узлов сетки на поверхности каждой капли составляет  $N_{\Delta} = 1280$ .

### 5.1. Исследование деформации капель эмульсии

Проведены расчеты для одиночной капли в сдвиговом потоке. Исследовано изменение формы капли при различных капиллярных числах и  $\lambda$ . Некоторые результаты тестов для различных параметров показаны на рис. 2 (изменение формы капли и линии тока внутри и снаружи капли, помещенной в свиговое течение) и на рис. 3 (установившаяся форма капли).

Исследованы зависимости угла наклона и деформация капли в сдвиговом потоке от параметров  $Ca$  и  $\lambda$ . Полученные результаты сравнены с опубликованными в литературе экспериментальными данными [14, 15], численными результатами [3, 5] и теорией малых деформаций [16]. Для описания деформации капли обычно используется угол наклона  $\theta$  и деформация  $D = (c - b)/(c + b)$ , где  $c$  и  $d$  — наибольшее и наименьшее расстояние от поверхности до центра капли, а  $\theta$  — угол между  $\mathbf{u}_{\infty}$  и направлением максимального растяжения капли (рис. 4). Для изначально сферической капли эти параметры эволюционируют, но по прошествии определенного времени достигают стационарных значений.

На рис. 4 представлены расчетные зависимости установившихся параметров  $\theta$  и  $D$  от  $Ca$  при различных  $\lambda$ . Из графиков видно, что значения деформации капли хорошо согласуются с теорией малых деформаций до некоторого капиллярного числа, но угол наклона значительно отличается от теории при увеличении  $Ca$ . В то же время, настоящие расчеты хорошо согласуются с экспериментальными данными и опубликованными численными результатами.

### 5.2. Исследование реологических параметров разбавленной эмульсии

В рамках данной работы рассчитан вклад одной капли в тензор напряжений эмульсии. В частности, тесты проведены для  $\lambda = 1$  и  $\lambda = 6.4$ ,  $N_{\Delta} = 1280$ . Полученные результаты для  $\Sigma_{12}$ ,  $N_1^d = \Sigma_{11} - \Sigma_{22}$  и  $N_2^d = \Sigma_{22} - \Sigma_{33}$  при различных капиллярных числах сравнены с значениями, опубликованными в работе [3] (рис. 5, 6). Как видно из графиков, присутствие деформируемых капель оказывает влияние на эффективную вязкость дисперсной системы в целом, которая при увеличении  $Ca$  возрастает.

Также проведены расчеты относительной вязкости эмульсии  $\mu^* = \mu_{eff}/\mu_1$ . Рассматривается объем упорядоченной эмульсии, состоящей из 27 кубических ячеек, в центре каждой из которых находится

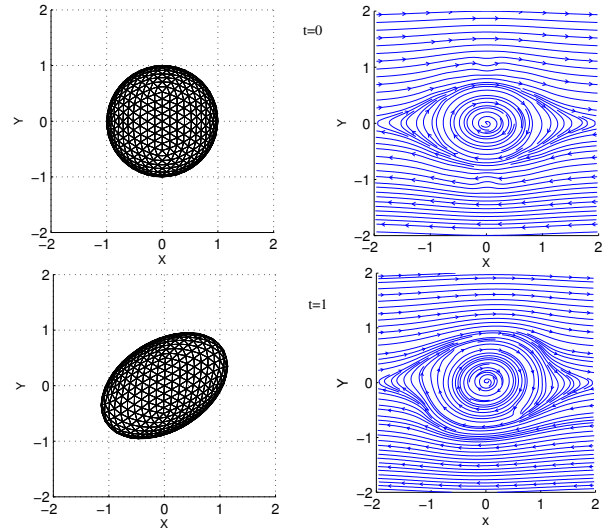


Рис. 2. Деформация капли в сдвиговом потоке  $Ca = 1, \lambda = 3.6$  и поле скорости внутри и вне капли в разные моменты безразмерного времени

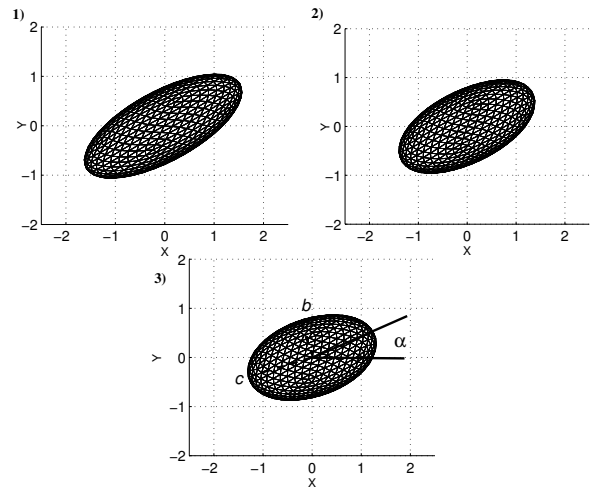


Рис. 3. Стабильная форма капли в сдвиговом потоке при различных параметрах: 1)  $Ca = 0.4, \lambda = 0.08$ ; 2)  $Ca = 0.3, \lambda = 1$ ; 3)  $Ca = 0.3, \lambda = 3.6$

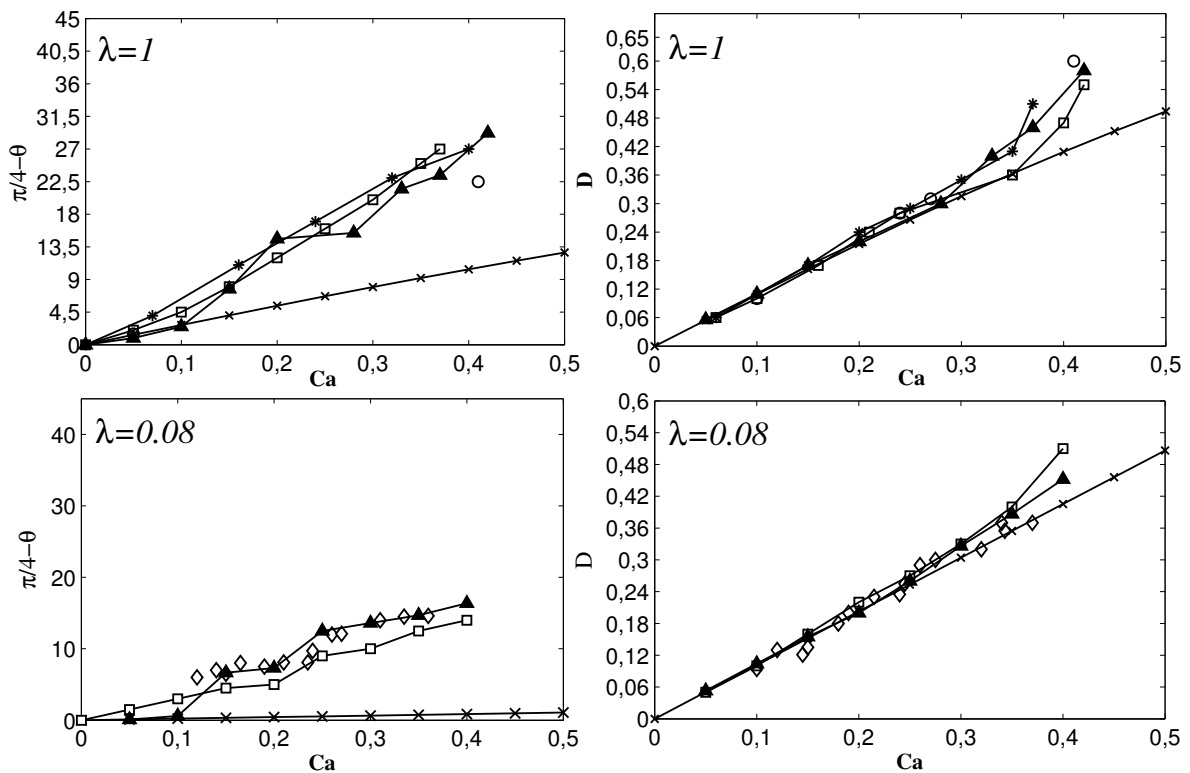


Рис. 4. Зависимость деформации капли  $D$  и угла наклона  $\theta$  от  $Ca$ :  $\times$  — теория малых деформаций [16],  $\circ$  — экспериментальные данные [14],  $-\ast$  — расчеты [5],  $-\square$  — расчеты [3],  $\diamond$  — экспериментальные данные [15],  $-\blacktriangle$  — расчеты, представленные в работе

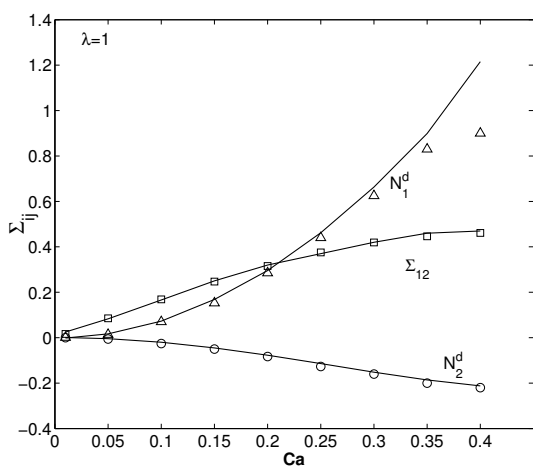


Рис. 5. Зависимость реологических функций от  $Ca$ : сплошные линии — расчеты, представленные в работе, символы — расчеты [3]

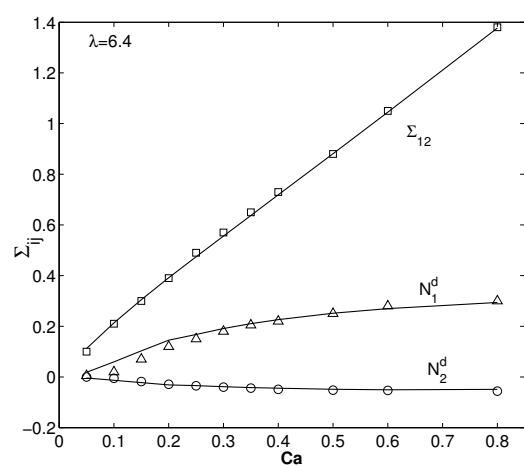


Рис. 6. Зависимость реологических функций от  $Ca$ : сплошные линии — расчеты, представленные в работе, символы — расчеты [3]

ся одна капля под действием сдвигового потока. Относительная вязкость рассчитана для стабильного состояния формы каплей при  $Ca = 0.05$ ,  $\lambda = 6.4$ ,  $\alpha = 0.00153$ ,  $N_{\Delta} = 1280$  и равна  $\mu^* = 1.0340$ , что хорошо согласуется со значением  $\mu^* = 1.0325$ , полученным из асимптотической формулы, выведенной в работе [17]:

$$\mu^* = 1 + 2.5\phi\alpha \left( 1 + 0.1368\phi\alpha - 1.403\delta\alpha^{2/3} \right), \quad (10)$$

$$\alpha \rightarrow 0,$$

где  $\phi = (\lambda + 2.5)/(\lambda + 1)$  и  $\delta = \lambda/(\lambda + 1)$ .

## 6. Заключение

Разработан подход для исследования трехмерных задач динамики деформируемых капель одной вязкой жидкости в другой жидкости для бесконечной области. Сопоставление показало хорошее согласование с аналитическими и численными решениями, а также с экспериментальными данными по стационарному углу наклона и деформации каплей в сдвиговом потоке при различных капиллярных числах и отношениях вязкостей жидкостей. Исследованы реологические функции разбавленных эмульсий.

Полученные результаты показали, что реализованные алгоритмы достаточно хорошо описывают динамику каплей в неограниченной области, что дает возможность применять их для моделирования течения дисперсных систем «жидкость–жидкость» и для более точного предсказания их поведения при различных меняющихся внешних параметрах. Все это позволяет проводить исследования реологических свойств эмульсий в широком диапазоне отношения вязкостей и подробно изучать влияние деформации каплей и полидисперсности на эффективную вязкость эмульсий в целом.

## Список литературы

- [1] Ахметов А.Т., Саметов С.П. Особенности течения дисперсии из микрокапель воды в микроканалах // Письма в ЖТФ. 2010. Том 36, вып. 22. С. 21–28.
- [2] Pozrikidis C. Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow. 1992 (Cambridge University Press, Cambridge, MA).
- [3] Kennedy M.R., Pozrikidis C., Skalak R. Motion and deformation of liquid drops, and the rheology of dilute emulsions in simple shear flow // Computers and Fluids. 1994. Vol. 23, № 2. P. 251–278.
- [4] Loewenberg M., Hinch E.J. Numerical simulation of a concentrated emulsion in shear flow // J. Fluid Mech. Vol. 321. 1996. P. 395–419.
- [5] Rallison J.M. A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in general shear flows // J. Fluid Mech. 1981. Vol. 109. P. 465–482.
- [6] Kovaleva L., Musin A., Fatkhullina Yu., Zamula Yu., Zinnatullin R., Akhatov I.S. Numerical study of emulsion droplet in electromagnetic field // Proc. IMECE–12. Texas, Houston. 2012.
- [7] Ахметов А.Т., Мавлетов М.В., Валиев А.А. Динамическое закливание и реология дисперсий при фазовом переходе // Труды Института механики Уфимского научного центра РАН. 2011. Вып. 8. С. 77–91.
- [8] Rallison J.M., Acrivos A. A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow // J. Fluid Mech. Vol. 89. N. 1, 1978. P. 191–200.
- [9] Абрамова О.А., Иткулова Ю.А., Гумеров Н.А. Моделирование трехмерного движения деформируемых каплей в стоковом режиме методом граничных элементов // Вычисл. мех. сплош. сред. Том 6, вып. 2. 2013. С. 214–223.
- [10] Zinchenko A.Z., Rother M.A., Davis R.H. A novel boundary-integral algorithm for viscous interaction of deformable drops // Phys. Fluids. 1997. Vol. 9, № 1. P. 1493–1511.
- [11] Солнышкина О.А., Иткулова Ю.А., Гумеров Н.А. Ускорение расчетов на графических процессорах при исследовании течения Стокса методом граничных элементов // Вестник УГАТУ. 2013. Том 17, вып. 2 (55). С. 92–100.
- [12] Batchelor G.K. The stress in a suspension of force-free particles // J. Fluid Mech. 1970. Vol. 41. P. 545–570.
- [13] Cunha F.R., Almeida M.H.P., Loewenberg M. Direct numerical simulations of emulsion flows // J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng. 2003. Vol. 25, № 1.
- [14] Rumscheidt F.D., Mason S.G. Particle motions in sheared suspensions. XII. Deformation and burst of fluid drops in shear and hyperbolic flow // J. Colloid Interface Sci. 1961. Vol. 16. P. 238–261.
- [15] Torza C., Henry C.P., Cox R.G., Mason S.G. Particle motions in sheared suspensions. XXVI. Streamlines in and around liquid drops // J. Colloid Interface Sci. 1981. Vol. 35, № 4. P. 529–543.
- [16] Cox R.G. The deformation of drop in general time-dependent fluid flow // J. Fluid Mech. 1969. Vol. 37, № 3, P. 601–623.
- [17] Pozrikidis C. On the transient motion of ordered suspensions of liquid drops // J. Fluid Mech. 1993. Vol. 246. P. 301–320.