ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА

DOI 10.15507/2079-6900.24.202202.185-199 ISSN 2079-6900 (Print)
Оригинальная статья ISSN 2587-7496 (Online)

УДК 532.529:541.182

Определение средней электро-термофоретической силы, действующей на систему поляризующихся частиц в неоднородно нагретой жидкости

С. И. Мартынов

БОУ ВО «Сургутский государственный университет» (г. Сургут, Российская Федерация)

Аннотация. Определяется средняя сила, действующая на систему поляризующихся частиц со стороны электрического поля в неоднородно нагретой диэлектрической жидкости. Рассматривается случай парных взаимодействий в системе. Для нахождения силы, действующей на частицы, решается задача о взаимодействии двух частиц в жидкости при наличии заданного градиента температуры и напряжённости электрического поля далеко от частиц. Учитывается зависимость диэлектрической проницаемости частиц от температуры. Полученное выражение для силы, действующей на две частицы, имеет такую степенную зависимость от расстояния между частицами, которое позволяет провести процедуру прямого усреднения для системы частиц, находящихся в бесконечном объёме жидкости. При определении средней силы, используется функция плотности вероятности непрерывной случайной величины, под которой понимается вектор, соединяющий центры частиц. Дифференциальное уравнение для нахождения функции плотности вероятности записывается из условия сохранения пар частиц в пространстве всех их возможных конфигураций и что каждая пара частиц движется как точка со скоростью, равной скорости их относительного движения. Полученное уравнение в рассматриваемом случае имеет множество решений. На основе физического анализа задачи предлагается выбор функции плотности вероятности, которая позволяет определить среднюю электро-термофоретическую силу, действующую в такой системе с точностью до слагаемых второй степени по объёмной концентрации частиц.

Ключевые слова: вязкая жидкость, диэлектрические частицы, электрическое поле, градиент температуры, взаимодействие частиц, усреднение, средняя сила

Для цитирования: Мартынов С. И. Определение средней электро-термофоретической силы, действующей на систему поляризующихся частиц в неоднородно нагретой жидкости // Журнал Средневолжского математического общества. 2022. Т. 24, № 2. С. 185–199. DOI: https://doi.org/10.15507/2079-6900.24.202202.185-199

Об авторе:

Мартынов Сергей Иванович, главный научный сотрудник, БОУ ВО «Сургутский государственный университет» (628412 Россия, г. Сургут, пр. Ленина, д. 1.), доктор физико-математических наук, ORCID: https://orcid.org/0000-0001-6420-3315, martynovsi@mail.ru

Original article

MSC2020 76D07, 76D09, 76D17

Determination of the average electro-thermophoretic force acting on a system of polarizable particles in an inhomogeneously heated fluid

S. I. Martynov

Surgut State University (Surgut, Russian Federation)

Abstract. The average force acting on the system of polarizing particles from the electric field in a non-uniformly heated dielectric liquid is determined. The case of pair interactions in the system is examined. To find the force acting on the particles, the interaction of two particles in a liquid is modelled in the presence of a given temperature gradient and the electric field strength far from the particles. The dependence of the particle permittivity on temperature is taken into account. The resulting expression for the force acting on two particles has such a power-law dependence on the distance between the particles, that allows to carry out the direct averaging procedure for a system of particles located in an infinite volume of liquid. When determining the average force, the probability density function of a continuous random variable is used, and the vector connecting the centers of particles plays the role of this variable. The differential equation for finding the probability density function is derived from two conditions. First, the pairs of particles are preserved in the space of all their possible configurations. Second, each pair of particles moves like a point with a speed equal to the speed of their relative motion. The resulting equation in the case under consideration has a set of solutions. Basing on the physical analysis of the problem, the choice of the probability density function is proposed, which allows one to determine the average electro-thermophoretic force acting in such a system with an accuracy up to the second degree of the volume concentration of particles.

Keywords: viscous fluid, dielectric particles, electric field, temperature gradient, interaction of particles, averaging, average force

For citation: *S. I. Martynov.* Determination of the average electro-thermophoretic force acting on a system of polarizable particles in an inhomogeneously heated fluid. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva.* 24:2(2022), 185–199. DOI: https://doi.org/10.15507/2079-6900.24.202202.185-199

About the author:

Sergey I. Martynov, Chief Researcher, Surgut State University (1 Lenina Av., Surgut 628412, Russia), Dr.Sci. (Phys.-Math.), ORCID: https://orcid.org/0000-0001-6420-3315, martynovsi@mail.ru

1. Введение

Современные технологии с использованием наночастиц для доставки терапевтической нагрузки в клетку [1–2] или в нефтегазовой индустрии с целью восстановления и увеличения добычи [3–6] предполагают возможность управления их динамикой с использованием внешних полей (электрических, магнитных, акустических, фотонных, химических и др.). При этом возникают задачи, связанные с управлением динамикой как отдельных частиц (микро-/наномоторов), используемых для доставки, например, терапевтической нагрузки в клетку, так и с управлением коллективной динамикой большого числа таких частиц в вязкой жидкости. Решение такого рода задач требует учёта сил взаимодействия между частицами, причём, как непосредственно действующими между частицами, так и за счёт их гидродинамического взаимодействия через окружающую жидкость. Поскольку изучаемые системы находятся в неравновесном тепловом состоянии, то методы термодинамики и статистической физики, разработанные для равновесных систем, в большинстве случаев неприменимы. При моделировании динамики систем жидкость-частицы наиболее активно используются такие подходы, как метод прямого численного моделирования и методы построения феноменологических моделей. В первом случае рассматривается система N частиц в вязкой жидкости, для которой записываются уравнения движения каждой частицы и уравнения движения жидкости. Всего получается $(6N + 3)$ уравнений. Такой подход позволяет учитывать как внутренние силы, действующие между частицами, так и силы гидродинамического взаимодействия между ними и внешние силы. Сложность такого подхода состоит в том, что в реальных системах число частиц велико. Так, для объёмной концентрации порядка 4% число частиц размером 10^{-5} см представляет огромную величину 10^{13}. Современные вычислительные технологии не позволяют проводить эффективные расчёты для такого числа частиц. К тому же при достаточном сближении частиц возникает вопрос о корректности уравнений гидродинамики на малых расстояниях между ними. Вместе с тем такой подход даже на небольшом числе частиц (порядка нескольких сотен) демонстрирует преимущества по сравнению со вторым подходом, а именно позволяет моделировать динамику такой системы с корректным учётом гидродинамических сил взаимодействия. Так, в работе [7] показано, что феноменологический подход к описанию динамики частиц, часть из которых имеет положительный заряд, а другая часть – отрицательный, даёт некорректный результат по сравнению с первым подходом. Вместе с тем необходимо признать, что для систем, состоящих из (10^{13} - 10^{16}) частиц, в настоящее время только феноменологический подход позволяет учесть взаимодействие частиц, пусть и в сильно упрощённом виде, а именно в приближении среднего поля, т. е. на масштабах достаточно больших зёрен, на которые разбивается система. Такие континуальные крупнозернистые модели, полученные для макроскопических переменных (скорость, концентрация, поляризация или намагничивание и т.д.) позволяют более эффективно проводить вычисления на больших масштабах времени и координат, чем прямое численное моделирование. Однако и здесь имеются свои сложности, т. к. получение соответствующих крупнозернистых уравнений в рассматриваемых случаях является не простой задачей.

Одним из подходов к получению таких уравнений является метод усреднения. Получение усреднённых характеристик различных структур берет начало с XIX в. В работах [8–9] решена задача об эффективной теплопроводности тел с включениями, образующими случайную и кубическую структуры. Во второй половине XX в. методу усреднения было посвящено большое количество работ [10–11]. Суть метода заключается в том, что необходимо получить решение соответствующей задачи на масштабе частиц (микромасштабе), а затем провести усреднение полученного решения на макромасштабе, включающем в себя большое число частиц. Как показывают проведённые исследования, наибольшие сложности возникают при определении средних величин для случайно расположенных взаимодействующих частиц. Во-первых, получение решения задачи о взаимодействии большого числа частиц представляет собой весьма сложную проблему и фактически возможно только при использовании прямого численного моделирования. Во-вторых, даже упрощённый подход, связанный с представлением взаимодействия большого числа частиц в виде суммы всевозможных парных взаимодействий из заданной конфигурации частиц приводит к появлению расходящихся интегралов при применении процедуры усреднения. Это связано с тем, что парные взаимодействия дают выражения, имеющие зависимость от расстояния между частицами r в виде r^{-n}, где $n \leq 3$, которые при интегрировании по большому объёму среды дают расходящиеся интегралы. Это касается как кулоновского и диполь-дипольного, так и гидродинамического взаимодействия частиц. Для преодоления проблемы расходимости в работе [13] предложена процедура, позволяющая определить средние напряжения и эффективную вязкость в суспензии гидродинамически взаимодействующих сферических частиц с точностью до слагаемых второй степени по объёмной концентрации. Предложенная процедура определения средних величин основывается на решении задачи о парном взаимодействии частиц и позволяет обойти проблему расходимости для гидродинамического взаимодействия частиц при макроскопическом деформационном течении суспензии.

Для случая, когда взаимодействие частиц приводит к зависимости от расстояния между частицами с показателем $n > 3$, возможно проведения прямой процедуры усреднения. В настоящей работе на основе решения задачи о двух взаимодействующих сферах определяется средняя электро-термофоретическая сила, действующая на поляризующиеся частицы в неоднородно нагретой жидкости в электрическом поле с учётом зависимости диэлектрической проницаемости частиц от температуры. Выражение для средней силы определяется с точностью до членов второй степени по объёмной концентрации частиц.

2. Взаимодействие двух сферических частиц в неоднородно нагретой жидкости в электрическом поле

Рассмотрим две сферические частицы радиуса a, помещённые в жидкость с вязкостью η, постоянной диэлектрической проницаемостью ε_f и коэффициентом температуропроводности χ_f. Положение точки жидкости относительно первой частицы будем обозначать вектором $\mathbf{x}_1$, а относительно второй – $\mathbf{x}_2$. Для введённых векторов запишем соотношение:

$$\mathbf{r} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1.$$

Здесь вектор $\mathbf{r}$ соединяет центры частиц. В жидкости далеко от частиц приложено однородное электрическое поле напряжённости $\mathbf{E}_0$ и градиент температуры ∇T_0. Перенос частиц в жидкости определяется силами, действующими на неё со стороны жидкости и поля. Причём эти силы зависят от распределения соответствующих параметров вблизи частиц. В однородном электрическом поле сила, действующая на частицы, равна нулю. Однако наличие частиц с другой диэлектрической проницаемостью ε_p и другим коэффициентом температуропроводности χ_p, чем у жидкости, приводит к возмущению однородного электрического поля и распределению температуры в жидкости. Поскольку считается, что диэлектрическая проницаемость частиц $\varepsilon_p(T)$ зависит от температуры, то неоднородное распределение температуры в частицах также приводит к искажению электрического поля вокруг них. Следовательно, возмущение электрического поля в жидкости вокруг частиц происходит как в результате различия диэлектрической проницаемости жидкости и частиц, так и за счёт неоднородности диэлектрической проницаемости частиц из-за их неоднородного нагрева. Эти возмущения приводят к появлению силы, действующей на частицы со стороны электрического поля. Движение частиц изменяет распределение скорости $\mathbf{u}$ и давления p в жидкости, что создаёт силы, действующие на них в результате гидродинамического взаимодействия.

Таким образом, для вычисления сил, действующих на частицы, необходимо знать распределение в жидкости скорости, давления, напряжённости электрического поля и температуры. Будем предполагать, что параметры течения жидкости соответствуют малым числам Рейнольдса $Re << 1$ и Пекле $Pe << 1$. Уравнения распределения давления p, скорости $\mathbf{u}$, температуры T_f в жидкости и частицах T_{p1} и во второй T_{p2} этом случае имеют вид:

$$\nabla\mathbf{u} = 0, \quad -\nabla p + \eta\Delta\mathbf{u} = 0. \tag{2.1}$$

Граничные условия скорости на поверхности частиц записываются следующим образом:

$$\mathbf{u} = \mathbf{V}_\alpha + \mathbf{\Omega}_\alpha \times \mathbf{x}_\alpha, \mid \mathbf{x}_\alpha \mid = a. \tag{2.2}$$

Здесь, векторы $\mathbf{V}_\alpha$, $\mathbf{\Omega}_\alpha$ обозначают, соответственно, линейную и угловую скорости частицы с номером α, где $\alpha = 1, 2$; χ_f и χ_p – коэффициенты температуропроводности жидкости и частицы, соответственно; $\mathbf{n}$ - вектор единичной нормали к поверхности частицы.

На значительном расстоянии от частиц должны выполняться условия затухания возмущений для скорости и давления:

$$\mathbf{u} \to \mathbf{U}_0, \quad p \to p_0 \quad \text{при} \mid \mathbf{x}_\alpha \mid \to \infty, \tag{2.3}$$

где $\mathbf{U}_0$ – скорость; p_0 – давление, заданные в жидкости на значительном расстоянии от частиц.

В приближении малых чисел Пекле $Pe << 1$ уравнения температуры T_f в жидкости и частицах $T_{p\alpha}$ записываются в виде:

$$\Delta T_f = 0, \quad \Delta T_{p\alpha} = 0. \tag{2.4}$$

Граничные условия для температуры на поверхности частиц имеют вид:

$$T_f = T_{p\alpha}, \quad \chi_f \nabla T_f \cdot \mathbf{n} = \chi_p \nabla T_{p\alpha} \cdot \mathbf{n}, \quad \mid \mathbf{x}_\alpha \mid = a. \tag{2.5}$$

Здесь χ_f и χ_p - коэффициенты температуропроводности жидкости и частиц соответственно. На значительном расстоянии от частиц должно выполняться условие:

$$\nabla T_f \to \nabla T_0 \quad \text{при} \mid \mathbf{x}_\alpha \mid \to \infty, \tag{2.6}$$

здесь ∇T_0 - заданный градиент температуры.

Поскольку жидкость и частицы взаимодействуют с электрическим полем, то необходимо записать уравнения для определения электрического поля в жидкости и частицах. Они имеют следующий вид:

$$\nabla(\varepsilon_f \mathbf{E}_f) = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E}_f = 0,$$

$$\nabla[\varepsilon_p(T)\mathbf{E}_{p\alpha}] = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E}_{p\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2.$$

Здесь $\varepsilon_p(T)$ - диэлектрическая проницаемость частиц, зависящая от температуры.

С учётом того, что электрическое поле потенциально $\mathbf{E} = \nabla\varphi$, уравнения и граничные условия для потенциалов φ_f в жидкости и частицах $\varphi_{p\alpha}$ имеют вид:

$$\begin{gathered} \Delta\varphi_f = 0, \quad \Delta\varphi_{p\alpha} = 0, \\ \varphi_f = \varphi_{p\alpha}, \quad \varepsilon_f \nabla\varphi_f \cdot \mathbf{n} = \nabla[\varepsilon_p(T)\varphi_{p\alpha}] \cdot \mathbf{n}, \quad \text{при} \mid \mathbf{x}_\alpha \mid = a. \end{gathered} \tag{2.7}$$

На значительном расстоянии от частицы в жидкости имеем следующие условия для электрического поля:

$$\mathbf{E}_f \to \mathbf{E}_0, \quad \text{при} \mid \mathbf{x}_\alpha \mid \to \infty, \tag{2.8}$$

здесь $\mathbf{E}_0$ – напряжённость электрического поля на значительном расстоянии от частиц. Решение приведённых выше уравнений позволяют определить силы, действующие на частицы со стороны жидкости и электрического поля. Линейные $\mathbf{V}_\alpha$ и угловые $\mathbf{\Omega}_\alpha$ скорости частиц определяются из уравнений динамики, которые в без инерционном приближении имеют вид:

$$\mathbf{F}_\alpha^{(e)} + \mathbf{F}_\alpha^{(h)} = 0, \quad \mathbf{T}_\alpha^{(e)} + \mathbf{T}_\alpha^{(h)} = 0. \tag{2.9}$$

Здесь $\mathbf{F}_\alpha^{(h)}$ и $\mathbf{T}_\alpha^{(h)}$, $\mathbf{F}_\alpha^{(e)}$ и $\mathbf{T}_\alpha^{(e)}$ – силы и моменты, действующие на частицу с номером α со стороны жидкости и электрического поля соответственно.

3. Метод решения задачи о парном взаимодействии частиц

Силы, действующие на каждую частицу со стороны жидкости и электрического поля, определяются следующим образом:

$$F_{\alpha i}^{(h)} = \oint [-p\delta_{ij} + \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)] n_j ds, \quad F_{\alpha i}^{(e)} = \frac{1}{4\pi} \oint \varepsilon_f (E_{fi}E_{fj} - \frac{E_f^2}{2}\delta_{ij}) n_j ds.$$

Необходимые для вычисления сил решения уравнений гидродинамики и электрического поля в указанной выше постановке задачи находятся независимо друг от друга. Методом, представленным в работе [14], находится как решение системы уравнений гидродинамики (2.1)–(2.3), так для температуры (2.4)–(2.6) и электрического поля (2.7)–(2.8). Метод применим к решению задач о взаимодействии большого числа частиц во внешних полях, удовлетворяющих уравнениям Пуассона и Лапласа. Решения этих уравнений представляются в виде мультиполей с неизвестными тензорными коэффициентами, содержащими скалярные функции от параметра $\epsilon = a/r$. Считая, что $\epsilon \ll 1$, скалярные функции находятся в виде разложения по этому малому параметру с любой точностью. В случае двух частиц решение задачи о распределении скорости, давления в жидкости и вычислении гидродинамической силы, действующей на частицы, представлено в работе [14].

Решение задачи о распределении электрического поля вокруг частиц с учётом зависимости диэлектрической проницаемости частиц от температуры ищется в линейном приближении по заданному градиенту температуры ∇T_0 с учётом решения уравнений для распределения температуры. При этом используется следующее представление для функции $\varepsilon_p(T)$:

$$\varepsilon_p(T) = \varepsilon_p(T_0) + \left(\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial T}\right)_0 (T - T_0).$$

Здесь и далее индексом «0» обозначены значения функций, соответствующие случаю однородного распределения температуры T_0.

В нулевом по градиенту ∇T_0 приближении решение задачи о распределении температуры и потенциала электрического поля в жидкости и частицах имеют одинаковый вид. Решение задачи о взаимодействии двух частиц в магнитном поле представлено в работе [15]. Поскольку в отсутствии объёмных зарядов, что предполагается в настоящей статье, уравнения для определения электрического и магнитного поля в жидкости и частицах одни и те же, то полученный результат можно использовать в т. ч. для случая взаимодействия частиц в электрическом поле. Так, силы, действующие на частицы со стороны электрического поля, с точностью до ϵ^4, согласно [15], равны:

$$\mathbf{F}_{10}^{(e)} = -\varepsilon_f k_\varepsilon^2 \left[6\frac{(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r})}{r^5}\mathbf{E}_0 + 3\frac{E_0^2}{r^5}\mathbf{r} - 15\frac{(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r})^2}{r^7}\mathbf{r}\right], \quad \mathbf{F}_{20}^{(e)} = -\mathbf{F}_{10}^{(e)}. \tag{3.1}$$

Здесь введено следующее обозначение:

$$k_\varepsilon = -a^3 \frac{(\varepsilon_f - \varepsilon_p)}{\varepsilon_p + 2\varepsilon_f}. \tag{3.2}$$

Для определения сил, действующих на частицы в случае неоднородного распределения температуры, достаточно найти решение для распределения потенциала электрического поля в линейном по градиенту температуры приближению с точностью $\epsilon = 0$. Это связано с тем, что сила, действующая со стороны электрического поля на частицы, имеет квадратичную зависимость от напряжённости поля. Поэтому комбинация решений для электрического поля при постоянной температуре, учитывающее взаимодействие частиц с точностью ϵ^5, и при учёте градиента температуры с точностью $\epsilon = 0$ даёт искомую силу. Решение системы уравнений для потенциала электрического поля в линейном приближении по вектору ∇T_0 вне и внутри частиц в этом случае имеет вид:

$$\varphi_f = G_{ij}(L_{ij}(\mathbf{x}_1) - L_{ij}(\mathbf{x}_2), \quad G_{ij} = E_{0i}\nabla_j T_0 G,$$
$$\varphi_{p1} = K_{ij}x_{1i}x_{1j} + M_{ij}L_{ij}(\mathbf{x}_1)|\,\mathbf{x}_1\,|^5, \quad \varphi_{p2} = K_{ij}x_{2i}x_{2j} + M_{ij}L_{ij}(\mathbf{x}_2)|\,\mathbf{x}_2\,|^5,$$
$$K_{ij} = E_{0i}\nabla_j T_0 K, \quad M_{ij} = E_{0i}\nabla_j T_0 M.$$

Здесь L_{ij} – мультиполь, вычисляемый по правилу

$$L_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{x}\right).$$

С учётом распределения температуры в жидкости и частицах значения скалярных коэффициентов в решении уравнений для потенциала электрического поля, найденные из граничных условий, равны:

$$K = -\frac{q_\varepsilon q_\chi}{\varepsilon_{p0}}\left(\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial T}\right)_0, \quad G = -\frac{2\varepsilon_{p0}}{3(2\varepsilon_{p0} + 3\varepsilon_f)}a^5 K, \quad M = \frac{\varepsilon_f}{(2\varepsilon_{p0} + 3\varepsilon_f)}K,$$
$$q_\varepsilon = \frac{3\varepsilon_f}{\varepsilon_{p0} + 2\varepsilon_f}, \quad q_\chi = \frac{3\chi_f}{\chi_p + 2\chi_f}. \tag{3.3}$$

Используя полученные выражения для потенциала в жидкости, найдём выражение для силы, действующей на каждую частицу со стороны электрического поля в линейном приближении по градиенту температуры. Для этого необходимо подставить найденное распределение в выражение для тензора напряжённости электрического поля и проинтегрировать по поверхности частицы. С точностью до слагаемых, имеющих порядок ϵ^5, получим следующее выражение для сил, действующих на частицы:

$$\mathbf{F}_{1t}^{(e)} = -\varepsilon_f k_\varepsilon G[6\frac{(\mathbf{E}_0\cdot\nabla T_0)}{r^5}\mathbf{E}_0 + 3\frac{E_0^2}{r^5}\nabla T_0 - 15\frac{(\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{r})^2}{r^7}\nabla T_0 - 15\frac{(\nabla T_0\cdot\mathbf{r})E_0^2}{r^7}\mathbf{r} -$$
$$-30\frac{(\nabla T_0\cdot\mathbf{r})(\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{r})}{r^7}\mathbf{E}_0 - 30\frac{(\nabla T_0\cdot\mathbf{E}_0)(\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{r})}{r^7}\mathbf{r} + 105\frac{(\nabla T_0\cdot\mathbf{r})(\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{r})^2}{r^9}\mathbf{r}], \tag{3.4}$$
$$\mathbf{F}_{2t}^{(e)} = \mathbf{F}_{1t}^{(e)}.$$

Здесь индексом «t» обозначена составляющая силы со стороны электрического поля, пропорциональная градиенту температуры. Как видно из полученного выражения (3.4), сила со стороны электрического поля при наличии градиента температуры имеет чётную степенную зависимость от вектора $\mathbf{r}$. Это качественно отличается от составляющей силы в случае однородной температуры (3.1), которая имеет нечётную степенную зависимость от вектора $\mathbf{r}$. Суммарная сила, действующая на частицы, находится как сумма найденных сил при постоянной температуре и при наличии градиента температуры. Причём в обоих случаях имеется зависимость величины силы от расстояния между частицами в виде $r^{-n}(n > 3)$, что даёт возможность прямого усреднения полученных выражений с целью получения выражения для средней силы, действующей на частицы со стороны электрического поля. Необходимо отметить, что рассмотренный случай зависимости диэлектрической проницаемости частиц от температуры существенно отличается от рассмотренного в работе [12], где диэлектрическая проницаемость жидкости зависит от температуры. В этом случае средняя сила отлична от нуля даже без учёта взаимодействия частиц.

4. Определение средней электро-термофоретической силы с точностью до слагаемых второй степени по объёмной концентрации частиц

Процедура определения средних величин разработана в работе [13] для случая парных взаимодействий частиц. Предложенный подход позволил с точностью до членов второго порядка по объёмной концентрации частиц ϕ определить средние значения напряжения и вязкости в суспензии гидродинамически взаимодействующих сферических частиц и может быть использован и в рассматриваемом случае. Среднюю величину силы $\bar{\mathbf{F}}^{(e)}$ в суспензии одинаковых частиц определяем соотношением:

$$\bar{\mathbf{F}}^{(e)} = \frac{N}{V}\int_V \mathbf{F}^{(e)} dV.$$

Здесь суммирование проводится по всем N частицам в объёме V ($n_0 = N/V$ – концентрация частиц в единице объёма). В работе [13] показано, что средняя величина, обусловленная парными взаимодействиями между частицами, может быть записана в виде

$$\bar{\mathbf{F}}^{(e)} = \phi \int \frac{\mathbf{F}^{(e)}}{(4/3)\pi a^3} P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r} \mid \mathbf{x}_0) d\mathbf{r} + o(\phi^2). \tag{4.1}$$

Здесь $P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r} \mid \mathbf{x}_0)$ – вероятность того, что центр частицы лежит в элементе объёма $\delta\mathbf{r}$ вокруг точки $\mathbf{x}_0 + \mathbf{r}$ при условии, что имеется частица с центром в $\mathbf{x}_0$, $\phi = n_0 4\pi a^3/3$ – объёмная концентрация частиц.

Рассмотрим функцию плотности вероятности для вектора $\mathbf{r}$, разделяющего центры двух частиц. Поскольку две частицы не могут занимать один и тот же объем, то можно записать

$$P(\mathbf{x}_0 + \mathbf{r} \mid \mathbf{x}_0) = \begin{cases} 0, & r < 2a, \\ n_0 q(\mathbf{r}, t), & r \geq 2a. \end{cases}$$

Дифференциальное уравнение для нахождения функции плотности вероятности $q(\mathbf{r}, t)$ записывается из условия сохранения пар частиц в пространстве всех их возможных конфигураций и что каждая пара частиц движется как точка со скоростью $\mathbf{V} = \mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1$, равной скорости их относительного движения. Оно имеет вид:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla q = -q \nabla \cdot \mathbf{V}. \tag{4.2}$$

Скорости частиц $\mathbf{V}_1$, $\mathbf{V}_2$ находятся из уравнений (2.9), причём силы $\mathbf{F}_\alpha^{(h)}$ и моменты $\mathbf{T}_\alpha^{(h)}$, действующие на частицу с номером α со стороны жидкости, зависят от макроскопического деформационного течения. Следовательно, относительная скорость частиц $\mathbf{V} = \mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1$, и решение уравнения (4.2) зависят от реализуемого макроскопического деформационного течения жидкости с частицами. Зависимость функции плотности вероятности $q(\mathbf{r}, t)$ от параметров деформационного течения означает, что и средняя сила, определяемая из (4.1), то же зависит от этих параметров и будет разной при различных течениях.

Анализ выражений (3.1) и (3.4) для сил, действующих на частицы со стороны электрического поля, показывает, что при однородном распределении частиц по их относительной ориентации в жидкости усреднение даёт нулевое значение средней силы. Причём для силы (3.1) в этом случае среднее от каждого слагаемого равно нулю, в то время как для силы (3.4) среднее суммы всех слагаемых даёт нуль. Такого типа распределение было получено в работе [13] для деформационного течения растяжения суспензии сферических частиц. При наличии анизотропии в распределении частиц по их ориентации относительно друг друга усреднение силы (3.4) даёт значение, отличное от нуля. Примером такой анизотропии в случае учёта парных взаимодействий является образование цепочечных структур вдоль приложенного поля. Фактически это означает, что сила, действующая на частицы со стороны электрического поля, на макроскопическом масштабе проявляется в случае, когда механизм ориентации относительного положения частиц электрическим полем преобладает над дезориентирующим механизмом деформационного течения жидкости. Ниже рассматривается случай определения средней электро-термофоретической силы для однородного потока жидкости с постоянным вектором скорости $\mathbf{U}_0$. Другими словами макроскопическое деформационное течение жидкости отсутствует, но гидродинамическое взаимодействие частиц учитывается и в этом случае. С учётом выражений (3.1), (3.4) и результатов работы [7] для гидродинамических сил из уравнений (2.9) получим:

$$-\mathbf{F}_{10}^{(e)} = 3\pi\eta a[\mathbf{V}^{\parallel}\zeta(\epsilon) + \mathbf{V}^{\perp}\xi(\epsilon)], \tag{4.3}$$

Где $\mathbf{V}^{\parallel}$ и $\mathbf{V}^{\perp}$ – составляющие относительной скорости вдоль и перпендикулярно вектору $\mathbf{r}$, а $\zeta(\epsilon)$, $\xi(\epsilon)$ следующие скалярные функции:

$$\zeta(\epsilon) = 1 + \frac{3}{2}\epsilon + \frac{9}{4}\epsilon^2 + \frac{19}{8}\epsilon^3,$$
$$\xi(\epsilon) = 1 + \frac{3}{4}\epsilon + \frac{9}{16}\epsilon^2 + \frac{59}{64}\epsilon^3.$$

Необходимо отметить, что из (4.3) следует, что относительная скорость частиц не зависит от градиента температуры, поскольку найденная составляющая силы со стороны электрического поля (3.4) одинаковая для каждой частицы. При этом поскольку сила (3.1) вычислена с точностью до членов порядка ϵ^4, то и относительная скорость частиц также должна вычисляться из (4.3) с той же точностью. В этом приближении вектор относительной скорости равен:

$$\mathbf{V} = -\frac{\mathbf{F}_{10}^{(e)}}{3\pi\eta a}.$$

Нетрудно проверить, что выполняется условие:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0.$$

Тогда в стационарном случае из (4.2) следует, что

$$\mathbf{V} \cdot \nabla q = 0. \tag{4.4}$$

Выберем сферическую систему координат с центром в первой частице таким образом, чтобы вектор ориентации $\mathbf{e} = \mathbf{r}/r$ определялся координатами:

$$e_1 = sin\theta cos\psi, \quad e_2 = sin\theta sin\psi, \quad e_3 = cos\theta.$$

Здесь θ – угол между векторами $\mathbf{E}_0$ и $\mathbf{r}$. В выбранной системе координат уравнение (4.4) записывается в виде:

$$V_r\frac{\partial q}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r}\frac{\partial q}{\partial \theta} = 0.$$

Подставляя компоненты относительной скорости V_r и V_θ – получим уравнение:

$$(1 - cos^2\theta)\frac{\partial q}{\partial r} - \frac{2sin\theta cos\theta}{r}\frac{\partial q}{\partial \theta} = 0.$$

Представляя функцию плотности вероятности в виде $q = f(r/a)g(\theta)$, получим решение с точностью до постоянной в виде:

$$f(r/a) = (r/a)^{-\lambda}, \quad g(\theta) = (cos\theta - cos^3\theta)^{\lambda/2}.$$

Здесь λ – любое вещественное число. Учитывая, что должно выполняться следующее условие нормировки для функции плотности вероятности с безразмерным параметром $\tilde{r} = r/a$:

$$\int_2^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi q(\tilde{r},\theta)\tilde{r}^2 d\tilde{r} d\psi sin\theta d\theta = 1,$$

получим наименьшее значение параметра при котором указанный интеграл абсолютно сходится $\lambda = 4$. В этом случае с учётом нормировки функция плотности вероятности имеет вид:

$$q(r/a,\theta) = \frac{105a^4}{16\pi}\frac{(cos\theta - cos^3\theta)^2}{r^4}. \tag{4.5}$$

Для значениях параметра $\lambda > 4$ были получены следующие результаты. Для нечётных и рациональных значениях параметра λ условие нормировки даёт комплексную величину интеграла, а для значений $\lambda \neq 4k$, где k – любое натуральное число, интеграл равен нулю. Для значений параметра $\lambda = 4k$ величина интеграла представляется в виде убывающего числового ряда, причём каждый последующий член ряда более чем на порядок меньше предыдущего. Таким образом, можно полагать, что найденное решение для функции плотности распределения является обоснованным. Можно добавить, что, как показано в работе [13], уравнение (4.2) допускает решение в виде функции, зависящей только от переменной r/a с граничными условиями на бесконечности. Однако, как объясняется в этой же работе, такое решение справедливо только случая, когда траектории частиц начинаются на бесконечности, например, в случае течения растяжения жидкости с частицами. В настоящей задаче частицы на бесконечности покоятся, что следует из выражений для сил, действующих на них. Это означает, что траектории частиц не могут идти из бесконечности и решение уравнения (4.2) в виде только функции от переменной r/a не имеет физического смысла.

Полученное выражение для функции плотности вероятности не зависит от величины приложенного поля и определяется только коэффициентами, учитывающими взаимодействие частиц. Это связано с тем, что, как было указано выше, рассматривается случай только одного механизма, отвечающего за распределение частиц, а именно приложенного поля. Если наложить на систему жидкость-частицы макроскопическое деформационное течение, то добавится ещё один механизм, связанный с распределением частиц в результате действия этого механизма. В этом случае функция плотности вероятности будет зависеть от отношения характерных параметров, отвечающих за эти два механизма.

С учётом полученного выражения (4.5) для функции $q(r/a,\theta)$ из соотношения (4.1) определим усреднённую электро-термофоретическую силу, действующую на единицу объёма смеси:

$$\bar{\mathbf{F}}^{(e)} = \frac{\varepsilon_f k_\varepsilon G}{\pi^2 a^8}\left[\frac{3}{512}E_0^2\nabla T_0 + \frac{1575}{16896}(\nabla T_0 \cdot \mathbf{E}_0)\mathbf{E}_0\right]\phi^2. \tag{4.6}$$

Вклад в выражение для средней силы дают слагаемые чётной степени по вектору $\mathbf{r}$. При расчётах учитывались следующие отличные от нуля значения интегралов:

$$\int_0^\pi (cos\theta - cos^3\theta)^2 sin\theta d\theta = \frac{16}{105},$$
$$\int_0^\pi (cos\theta - cos^3\theta)^2 cos^2\theta sin\theta d\theta = \frac{16}{315},$$
$$\int_0^\pi (cos\theta - cos^3\theta)^2 cos^4\theta sin\theta d\theta = \frac{16}{693}.$$

Полученные результаты можно рассматривать с точки зрения управления перемещением частиц в неоднородно нагретой жидкости электрическим полем. Как видно из (4.6), электрическое поле, перпендикулярное градиенту температуры, уменьшает силу, действующую на частицы. Само перемещение частиц зависит от диэлектрических свойств жидкости и частиц. Полагая, что диэлектрическая проницаемость частиц больше, чем жидкости $\varepsilon_p > \varepsilon_f$ и что $(\partial\varepsilon_p/\partial T) < 0$, с учётом выражений для коэффициентов (3.2) и (3.3) следует, что электрическое поле приводит к перемещению частиц в направлении, противоположном приложенному градиенту температуры. Для частиц, у которых $\varepsilon_p < \varepsilon_f$ и $(\partial\varepsilon_p/\partial T) < 0$, перемещение происходит по направлению градиента температуры.

5. Заключение

Предложена процедура получения средней по объему электро-термофоретической силы, действующей на поляризующиеся частицы в неоднородно нагретой жидкости в однородном электрическом поле с точностью до членов второго порядка малости по объёмной концентрации частиц. При определении средней силы использовалось приближенное решение задачи о распределении температуры и электрического поля в жидкости и частицах с учётом зависимости диэлектрической проницаемости частиц от температуры. Полученное выражение показывает, что величина и направление средней электро-термофоретической силы зависит от взаимной ориентации векторов напряжённости электрического поля и градиента температуры, а также от разницы диэлектрических проницаемостей жидкости и частицы. Электрическое поле с вектором напряжённости, перпендикулярным градиенту температуры уменьшает величину силы. В случае, когда диэлектрическая проницаемость частиц больше, чем у жидкости, вектор средней силы направлен против градиента температуры. Для частиц с диэлектрической проницаемостью, меньшей, чем у жидкости, направление средней силы совпадает с направлением градиента температуры. Во всех случаях считалось, что диэлектрическая проницаемость частиц уменьшается с увеличением температуры.

Благодарности. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-41-860002/18.

Список литературы

1. Gao W., de Avila B. E.-F., Zhang L., Wang J. Targeting and Isolation of Cancer Cells Using Micro/Nanomotors // Adv. Drug Deliv. Rev. 2018. Vol. 125. pp. 94–101. DOI: https://doi.org/10.1016/j.addr.2017.09.002

2. Medina-Sanchez M., Haifeng Xu H., Schmidt O.G. Micro- and nano-motors: the new generation of drug carriers // Therapeutic Delivery. 2018. Vol. 9. pp. 303-316. DOI: https://doi.org/10.4155/tde-2017-0113

3. Alsaba M.T., Al Dushaishi M. F., Abbas A.K. A comprehensive review of nanoparticles applications in the oil and gas industry //Journal of Petroleum Exploration and Production Technology. 2020. Vol.10. pp. 1389-1399. DOI:https://doi.org/10.1007/s13202-019-00825-z

4. Agista M. N., Guo K., Yu Z. A State-of-the-Art Review of Nanoparticles Application in Petroleum with a Focus on Enhanced Oil Recovery// Appl. Sci. 2018. Vol. 8, No. 6. DOI: https://doi.org/10.3390/app8060871

5. Rezk M. Y., Allam N. K. Impact of Nanotechnology on Enhanced Oil Recovery: A Mini-Review // Ind. Eng. Chem. Res. 2019. Vol. 58. pp. 16287-16295. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b03693

6. Fakoya M. F., Shah S. N. Emergence of nanotechnology in the oil and gas industry: Emphasis on the application of silica nanoparticles // Petroleum. 2017. Vol. 3, No. 4. pp. 391-405. DOI: https://doi.org/10.1016/j.petlm.2017.03.001

7. Martynov S. I., Tkach L. Yu. Model of Hydrodynamic Mechanism of the Movement of Nanomotors // Mathematical Models and Computer Simulations. 2021. Vol. 13, No. 4. pp. 684–691. DOI: https://doi.org/10.1134/S2070048221040153

8. Maxwell J.C. Electricity and magnetism. Oxford: Clarendon Press, 1892. 420 p.

9. Rayleigh J.W. On the influence of obstacles arrenged in rectengular order upon the properties of a medium //Phil. Meg. 1892. Vol. 34, No. 241. pp. 481-491.

10. Бахвалов Н.С. Осреднённые характеристики тел с периодической структурой // ДАН СССР. 1974. Т. 218, № 5. С. 1046-1048.

11. Бердичевский А.Л. Пространственное осреднение периодических структур // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1975. Т. 222, № 3. С. 565-567.

12. Мартынов С.И. Моделирование перемещения частицы в неоднородно нагретой поляризующейся жидкости // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». 2021. Т. 14, № 1. С. 42-51. DOI: https://doi.org/10.14529/mmp210104

13. Batchelor G., Green J. The bulk stress in a suspension of spheres to order c^2. // Rheologica Acta. 1974. Vol. 13. pp. 890-890. DOI: https://doi.org/10.1007/BF01527090

14. Мартынов С.И. Гидродинамическое взаимодействие частиц // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1998. № 2. С. 112–119.

15. Борискина И.П., Сыромясов А.О. Парное магнитогидродинамическое взаимодействие твёрдых сфер в медленном продольном потоке вязкой жидкости // Журнал Средневолжского математического общества. 2019. Т. 21, № 1. С. 78-88. DOI: https://doi.org/10.15507/2079-6900.21.201901.78-88

Поступила 11.02.2022; доработана после рецензирования 3.05.2022; принята к публикации 25.05.2022

Автор прочитал и одобрил окончательный вариант рукописи.
Конфликт интересов: автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

References

1. W. Gao, B. E.-FY. de Avila, L. Zhang, J. Wang, "Targeting and isolation of cancer cells using micro/nanomotors", *Adv. Drug Deliv. Rev.*, **125** (2018), 94–101. DOI: https://doi.org/10.1016/j.addr.2017.09.002

2. M. Medina-Sanchez, H. Haifeng Xu, O. G. Schmidt, "Micro- and nano-motors: the new generation of drug carriers", *Therapeutic Delivery*, **9** (2018), 303–316. DOI: https://doi.org/10.4155/tde-2017-0113

3. M. T. Alsaba, M. F. Al Dushaishi, A. K. Abbas, "A comprehensive review of nanoparticles applications in the oil and gas industry", *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, **10** (2020), 1389–1399. DOI: https://doi.org/10.1007/s13202-019-00825-z

4. M. N. Agista, K. Guo, Z. Yu, "A state-of-the-art review of nanoparticles application in petroleum with a focus on enhanced oil recovery", *Appl. Sci.*, **8**:6 (2018). DOI: https://doi.org/10.3390/app8060871

5. M. Y. Rezk, N. K. Allam, "Impact of Nanotechnology on Enhanced Oil Recovery: A Mini-Review", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **58** (2019), 16287–16295. DOI: https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b03693

6. M. F. Fakoya, S. N. Shah, "Emergence of nanotechnology in the oil and gas industry: Emphasis on the application of silica nanoparticles", *Petroleum*, **3**:34 (2017), 391–405. DOI: https://doi.org/10.1016/j.petlm.2017.03.001

7. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach, "Model of hydrodynamic mechanism of the movement of nanomotors", *Mathematical Models and Computer Simulations*, **1**:4 (2021), 684–691. DOI: https://doi.org/10.1134/S2070048221040153

8. J. C. Maxwell, *Electricity and Magnetism*, Clarendon Press, Oxford, 1892, 420 p.

9. J. W. Rayleigh, "On the influence of obstacles arrenged in rectengular order upon the properties of a medium", *Phil. Meg.*, **34**:241 (1892), 481–491.

10. H. C. Bakhvalov, "The averaged characteristics of bodies with a periodic structure", *Dokl. USSR Academy of Sciences*, **218**:5 (1974), 1046–1048 (In Russ.).

11. A. L. Berdichevsky, "Spatial averaging of periodic structures ", *Dokl. USSR Academy of Sciences*, 1975, № 3, 565–567 (In Russ.).

12. S. I. Martynov, "On the force acting on particles in an inhomogeneously heated polarizing liquid", *Bulletin SUSU MMCS*, **14**:1 (2021.), 42–51 (In Russ.). DOI: https://doi.org/10.14529/mmp210104

13. G. Batchelor, J. Green, “The bulk stress in a suspension of spheres to order c^2”, *Rheologica Acta*, **13** (1974), 890–890.

14. S. I. Martynov, “Hydrodynamic interaction of particles”, *Proceedings of the Russian Academy of Sciences. Mechanics of fluid and gas*, 1998, no. 2, 112–119 (In Russ.).

15. I. P. Boriskina, A. O. Syromyasov, “Pair-wise MHD-interaction of rigid spheres in longitudinal creeping flow”, *Zhuznal SVMO*, **21**:1 (2019), 78–88 (In Russ.). DOI: https://doi.org/10.15507/2079-6900.21.201901.78-88

Submitted 11.02.2022; Revised 3.05.2022; Accepted 25.05.2022

The author have read and approved the final manuscript.
Conflict of interest: The author declare no conflict of interest.