

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»

На правах рукописи

Гуськова Мария Сергеевна
Моделирование движения капли в ограниченной геометрии

РЕЗЮМЕ ДИССЕРТАЦИИ
на соискание ученой степени кандидата наук
по прикладной математике

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор
Щур Лев Николаевич

Москва, 2023

Актуальность

Микрофлюидика является разделом гидродинамики, в котором изучается течение жидкости в малых объемах. Микрофлюидные устройства часто решают задачи медицины и микробиологии: сортировка клеток крови по размерам, упорядочивание клеток в течении, обнаружение патогенов, выполнение операций добавления меток к клеткам для их дальнейшего секвенирования и другие.

Частицы или капли другой жидкости могут формировать в течении упорядоченную структуру, в которой частицы находятся примерно на одинаковом расстоянии друг от друга. Такие структуры называются “плавающими” кристаллами из-за их свойства периодичности. Кристаллы могут появляться из-за внешних сил (электрического или магнитного поля) или из-за гидродинамического взаимодействия частиц друг с другом. По типу частиц кристаллы делятся на кристаллы из капель, кристаллы из инерциальных частиц, кристаллы из вязкоупругих частиц и обобщенные (compartmentalised) [Del Giudice et al., 2021]. Микрофлюидные кристаллы интересны из-за фундаментальных задач и из-за практического применения в синтезе коллоидных структур, при выполнении цифровой полимеразной цепной реакции (ПЦР) и анализа одиночных клеток (вид биологических экспериментов, где нужно качественно и количественно описать найденные молекулы РНК).

Кристаллы из капель исследуются в физических экспериментах [Beatus et al., 2006, Schiller et al., 2015] и с помощью компьютерного моделирования [Uspal and Doyle, 2012, Schaaf and Stark, 2020, Janssen et al., 2012]. В работе [Beatus et al., 2006] описан эксперимент, где в одномерном кристалле из сжатых капель воды, движущихся в масле, обнаружены колебания поперечные и продольные. Эти колебания похожи на фононы в твердых телах. Причина возникновения спектра объясняется дипольным взаимодействием микрочастиц за счет большой разницы скоростей микрочастиц и окружающего потока. Представляется важным исследовать вопрос: является ли этот механизм единственным для возникновения фононного спектра?

В этой работе рассматриваются микрофлюидные кристаллы из капель и частиц, которые формируются без воздействия внешнего поля. Компьютерное

моделирование проводится с использованием метода решеточного уравнения Больцмана (LBM) [Krüger et al., 2013].

Постановка проблемы

Целью работы является исследование механизмов возникновения фононного спектра в кристалле из капель. В двумерной постановке при малых числах Рейнольдса частицы движутся примерно со скоростью потока и из-за этого между каплями не возникает заметное дипольного взаимодействия, что позволяет проверить влияние на возникновение спектра других феноменов, например, гидродинамического взаимодействия со стенками.

Исследование проводится с использованием компьютерного моделирования: численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений, моделирование потока и помещенных в него капель другой жидкости с помощью трехмерной модели метода решеточного уравнения Больцмана (LBM) и модели Шана-Чена и двумерное моделирование потока и помещенных в него твердых частиц с помощью LBM и метода погруженной границы.

Основными задачами работы являются:

1. Исследовать влияние колебаний капли на движение цепочки капель.
2. Проверить, действительно ли дипольное взаимодействие может генерировать наблюдаемый в экспериментах спектр.
3. Получить фононный спектр в кристалле частиц без дипольного взаимодействия и изучить причины его возникновения. Исследовать влияние равновесного положения цепочки частиц на фононный спектр.

Дополнительные задачи:

1. Исследование влияния начальных условий (симметрия, угловая скорость и линейная скорость) на движение одной частицы в ограниченном пространстве.
2. Выбор граничных условий для моделирования потока Пуазейля, оценка их точности.
3. Проверка эффекта Сегре-Зильберберга и расчет равновесных положений для цепочек частиц.

Степень разработанности темы исследования

В работе [Beatus et al., 2012] представлены результаты серии экспериментов над микрофлюидными кристаллами. Кристалл состоит из капель воды, которые движутся в масле. Из-за трения каплей о верхнюю и нижнюю стенки канала, скорость каплей примерно в 5 раз меньше скорости основного потока. Из-за такой существенной разности в скоростях между каплями возникает дипольное взаимодействие. Капли в кристалле расположены не строго на одинаковых расстояниях и на центральной оси, а с некоторым случайным смещением, вызванным несовершенством канала (ровность стенок), асимметрией генератора каплей. В одномерной цепочке каплей возникают продольные и поперечные колебания, спектр которых похож на фононный спектр. Авторы [Beatus et al., 2012] объясняют возникновение фононного спектра именно дипольным взаимодействием. Для проверки они интегрируют обыкновенные дифференциальные уравнения для диполей и полученный численно спектр похож на реальный. Аналогично в работе [Liu et al., 2012] представлены результаты численного интегрирования уравнений движения каплей, полученных в [Beatus et al., 2006]. В отличие от спектров колебаний физического эксперимента, нет прямой линии в спектре, т.к. она возникает из-за дефектов в канале.

На движение частиц в канале при низких числах Рейнольдса влияет близость стенок, которые тормозят частицу, а также вязкость жидкости, скорость частиц относительно скорости потока и вращение частиц. В работе [Segre and Silberberg, 1961] показано, что частицы в цилиндрическом течении Пуазейля концентрируются в кольце на некотором расстоянии от стенок и центральной оси. В другой работе [Oliver, 1962] показано, что при отсутствии вращения частицы сходятся на центральную ось. В работе [Saffman, 1965] получена формула для подъемной силы, которая действует на частицу, $81.2Va^2\kappa^{1/2}/\nu^{1/2} + o(\nu^{-1/2})$, где V — скорость потока, a — радиус частицы, κ — градиент скорости потока, ν — кинематическая вязкость. Ограничения аналитических работ: совсем небольшие числа Рейнольдса [Saffman, 1965, Rubinow and Keller, 1961] или умеренные числа Рейнольдса [Asmolov et al., 2018], небольшое значение отношения диаметра частицы к диаметру канала [Saffman, 1965, Rubinow and Keller, 1961], невозможность оценить влияние колебаний капли и отраженных волн

от стенок канала. В работах компьютерного моделирования напротив сложнее моделировать небольшие числа Рейнольдса из-за необходимости использовать совсем низкую скорость или большую вязкость. В работах [Yang et al., 2005, Esipov et al., 2020] исследовано влияние числа Рейнольдса на положение равновесия частиц и увеличение числа Рейнольдса приводит к тому, что равновесное положение сдвигается к стенке канала. Другим параметром задачи является отношение диаметра частицы к диаметру канала γ . Увеличение γ приводит к тому, что равновесное положение частиц сдвигается к центру канала.

Для имитационного моделирования инерциальной микрофлюидики используются методы на основе решения уравнений Навье-Стокса или методы LBM [Bazaz et al., 2020]. Инерциальной микрофлюидикой называется миграция случайно распределенных частиц к некоторым положениям равновесия внутри микроканала в зависимости от размера частицы. Методы, основанные на решении уравнений Навье-Стокса, испытывают трудности в определении интерфейса между каплей или частицей и потоком, также эти методы затратны по времени. LBM имеет преимущество из-за относительной простоты параллелизации алгоритма и множества моделей для разной физики, в том числе и для моделирования капель одной жидкости внутри другой.

Описание методологии исследования

Исследование опирается на результаты имитационного моделирования. Для моделирования капель жидкости, помещенных в другую жидкость, используется LBM и модель Шана-Чена для многокомпонентных жидкостей [Shan and Chen, 1993]. Для оценки точности моделирования проверяется аналитическая формула Рэлея для частоты колебаний капли [Rayleigh, 1879]. Для моделирования движущихся твердых частиц в течении используется метод погруженной границы [Inamuro, 2012] вместе с LBM. Для оценки правомерности использования этих методов полученные моделированием спектры колебаний микрофлюидного кристалла сравнивались с результатами физического эксперимента [Beatus et al., 2006].

Основные результаты исследования

Влияние колебаний капли на цепочку капель

В одномерной цепочке капель иногда возникают неустойчивости, которые приводят к разрушению кристалла [Beatus et al., 2012]. В диссертационной работе было выполнено моделирование колебаний капли для оценки влияния на соседние капли. Получилось, что колебания капли могут повлиять на устойчивость цепочки капель, если скорость впрыскиваемых капель v_d , умноженная на расстояние между каплями a , близка к наименьшей частоте Рэлея, т.е., $v_d a \approx \omega_2/2\pi$. Эффект привел бы к деформации капли, к изменению расстояния между каплями и изменению осевой симметрии цепочки. Возможно, именно этим резонансом можно объяснить нарушение порядка в экспериментах [Beatus et al., 2012].

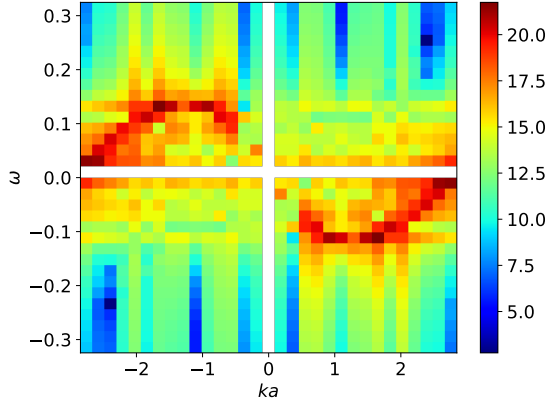
Используется модель многокомпонентной жидкости Шана-Чена [Shan and Chen, 1993] для двух несмешивающихся жидкостей. В прямоугольном параллелепипеде, где все грани являются стенками, на центральной самой длинной оси были расположены три капли одинакового объема. Капли и окружающая их среда имеют одинаковые вязкости и плотности. Центральная капля в начальный момент времени растянута вдоль оси Z , таким образом возбуждается ω_2 частота

После начала моделирования центральная капля начинает колебаться и хотя из-за вязкости колебания затухают, звуковые волны начинают двигать соседние капли к стенкам и деформировать их. Период собственных колебаний капли меньше периода фононных колебаний в цепочке, поэтому изменение формы не может являться причиной возникновения фононного спектра в цепочке.

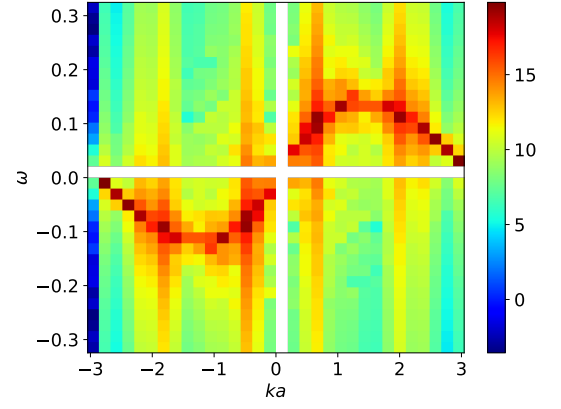
Дипольное взаимодействие

Для дополнительной проверки дипольного взаимодействия как причины для возникновения фононного спектра в кристалле капель была реализована цепочка, состоящая из пар точечных вихрей с противоположными по знаку циркуляциями. Спектры для возникших колебаний в цепочке качественно похожи на спектры в [Beatus et al., 2006].

Рассматривается система $2 \cdot N$ вихрей с циркуляциями $\kappa_i (i = 1, \dots, N)$,



(a) Спектр колебаний по x



(b) Спектр колебаний по y

Рис. 1: Спектры колебаний для пар точечных вихрей

$N = 32$ – количество пар вихрей, т.е. диполей. Координаты вихрей $x_i, y_i (i = 1, \dots, N)$. Гамильтониан такой системы определяется выражением [Манаков, 1983]:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i < j} \kappa_i \kappa_j \ln[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]$$

Тогда уравнения движения записываются в следующем виде:

$$\dot{x}_i = \{x_i, H\}, \dot{y}_i = \{y_i, H\} \quad (1)$$

Где скобка Пуассона определяется формулой $\{A, B\} = \sum \kappa_i^{-1} (\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial y_i} - \frac{\partial A}{\partial y_i} \frac{\partial B}{\partial x_i})$.

Используются периодические граничные условия вдоль оси X . Вихри в паре с индексом i на каждом шаге интегрирования смещаются на один и тот же вектор $(\dot{x}_i, \dot{y}_i) = (0.5(\dot{x}_i^0 + \dot{x}_i^1), 0.5(\dot{y}_i^0 + \dot{y}_i^1))$, который является средним смещением для вихрей в этой паре.

На Рис.1 показаны спектры колебаний для координат ξ, y , где ξ это расстояние по X между соседними парами вихрей и y это y -координата верхнего из вихрей в диполе. Спектры были получены с помощью двумерного быстрого преобразования Фурье по пространству и времени.

Фононный спектр

В диссертационной работе с использованием имитационного моделирования был получен фононный спектр для кристалла из жестких частиц, которые

движутся примерно со скоростью потока. Т.к. скорости близки, то нет дипольного взаимодействия между частицами и возникновение колебаний в кристалле объясняется влиянием отраженных от стенок волн.

С использованием метода погруженной границы вместе с LBM для расчета течения [Inamoto, 2012] было проведено моделирование движения жестких круглых частиц в течении Пуазейля. Рассматривалась плоская задача. В работе [Beatus et al., 2012] рассматривается квазидвумерная задача: высота канала много меньше его длины и ширины, из-за этого возникает трение капли о стенки и капли движутся медленнее основного потока. Также в отличии от физического эксперимента плотность частицы совпадает с плотностью окружающей жидкости.

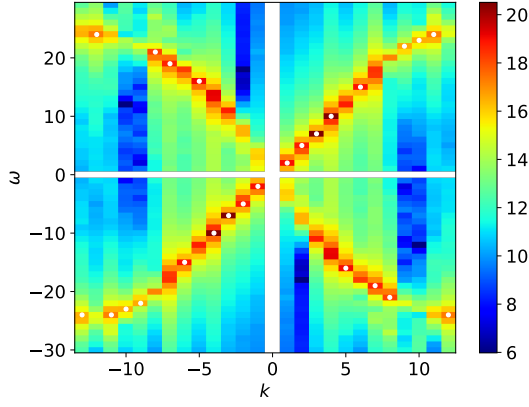
Расчетная область является длинным каналом, сверху и снизу канала граничные условия без прилипания – стенки, вдоль оси X периодические граничные условия. В начальный момент времени частицы радиуса $R = 10$ помещаются на центральную ось канала шириной $W = 40$ с расстоянием между центрами частиц $a = 4R$. К координатам частиц добавляется небольшое случайное возмущение. Число Рейнольдса $Re = 0.5$.

Для таких параметров канала равновесное положение частиц находится на центральной оси, частицы пытаются сойтись к этому положению, но гидродинамическое взаимодействие с остальными приводит к колебаниям вокруг оси. Поперечные колебания более выражены, чем продольные, и их спектр схож с результатами эксперимента [Beatus et al., 2012]. Продольные колебания в данной постановке имеют больший период, чем поперечные и требуют длительного времени моделирования для получения качественного спектра, что осложняется тем, что периодические граничные условия приводят к тому, что через некоторое время частицы синхронизируются друг с другом и спектр их колебаний становится линейным.

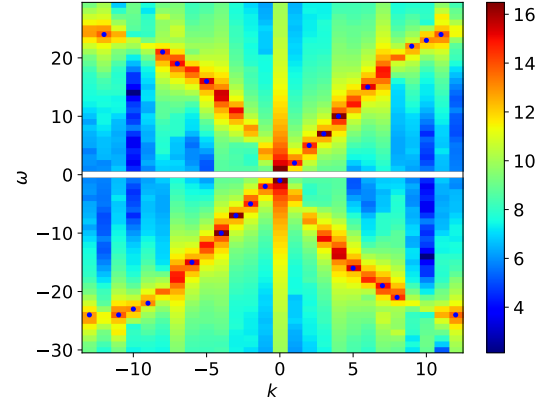
Фононный спектр для разных положений равновесия

Был получен спектр продольных и поперечных колебаний для кристалла, расположенного близко к стенке.

Для широких каналов положение равновесия на центральной оси является неустойчивым, а положение на некоторой оси между центром и стенкой – устойчивым. Например, для ширины канала $W = 80$ и радиуса частицы



(a) Спектр колебаний по x



(b) Спектр колебаний по y

Рис. 2: Спектры колебаний кристалле, расположенном на оси $y/W = 0.748$ в канале шириной $W = 80$

$R = 10$, такой осью является $y/W \approx 0.748$ и симметричная ей $y/W \approx 0.252$.

При смещении цепочки к стенке (если отношение диаметра частицы к ширине канала уменьшить) из-за несимметричного гидродинамического взаимодействия со стенкой в кристалле возникают продольные колебания, а так же и вторая ветвь (Рис.2). Удивительно, что четные и нечетные частицы движутся при этом в противофазе, что похоже на цепочку чередующихся атомов разных масс. В спектре для четных (и нечетных) частиц обнаруживается ветвь оптических колебаний (Рис.3).

Спектр колебаний в цепочке с чередующимися частицами не зависит от плотности частицы. При изменении радиуса цепочка распадается на две цепочки, но они продолжают колебаться вместе, и снова возникает оптическая ветвь в спектре. Частота продольных колебаний падает с увеличением расстояния между частицами, но даже при увеличении расстояния вдвое, элементарная ячейка состоит из двух частиц.

Вычислительные инструменты

Для моделирования колебаний капель использовалась библиотека Palabos [Latt et al., 2020], написанная на языке C++ и использующая MPI для параллелизации вычислений. В ходе работы был исправлен баг с генерацией осциллирующего потока "<https://gitlab.com/unigespc/palabos/-/issues/14>", исправления были внесены в библиотеку. Для моделирования цепочки частиц в потоке Пуазейля был реализован код на языке Python 3.8 с

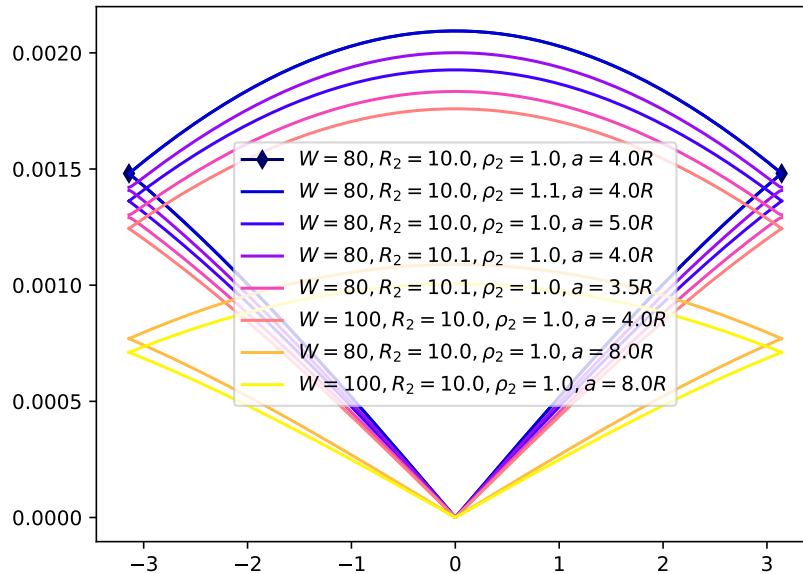


Рис. 3: Дисперсия для продольных колебаний

использованием библиотек `numba`, `numru`. Код доступен в репозитории https://github.com/msguskova/lbm_chain_of_particles [Guskova, 2023].

Положения, выносимые на защиту

1. Оценено характерное время устойчивости колеблющейся капли с использованием метода решеточного уравнения Больцмана. Колебания затухают за время на порядок меньше периода колебаний в цепочке, и поэтому не могут оказать заметного влияния.
2. Исследовано влияние собственных колебаний капли на соседние и произведена оценка характерного времени до начала движения соседних капель в цепочке, вызванного колебаниями центральной капли. Сделан вывод о том, что взаимное влияние колебаний формы также не оказывает существенного влияния на коллективные колебания.
3. Исследована природа возникновения колебаний в течении Пуазейля и установлено, что колебания обусловлены взаимодействием частиц со стенками канала. Впервые обнаружено возникновение оптической ветви колебаний в микрофлюидике. Такой спектр возникает при равновесном положении цепочки частиц не на оси симметрии.

Научная новизна

1. Проверена гипотеза, что собственные колебания капель могут стать причиной возникновения колебаний в цепочке капель.
2. Было показано, что причиной возникновения фононного спектра в микрофлюидном кристалле может быть гидродинамическое взаимодействие со стенками канала. Ранее в работе [Beatus et al., 2006] как причина колебаний было указано дипольное взаимодействие капель. В нашей постановке скорость частиц относительно основного потока невелика (менее 5%), поэтому не возникает заметного дипольного взаимодействия.
3. Продемонстрирована оптическая ветвь в спектре продольных и поперечных колебаний в кристалле, расположенном не на оси симметрии.

Апробация результатов исследования

1. “Использование модели со скоростью звука $\sqrt{2/3}$ в методе решеточного уравнения Больцмана на примере движения частицы в потоке Пуазейля”, Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов имени Е.В.Арменского, 27.02-7.03, 2023, Москва
2. “Wave spectrum of the flowing drops”, Суперкомпьютерные дни в России, 27-28 сентября 2021 г.
3. “Drop chain simulation with Lattice Boltzmann method”, 29th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics, 13-17 сентября 2021, Viterbo.
4. “LBM simulation of the chain of three drops”, Conference on Computer Simulation in Physics and beyond, October 12-16, 2020

Публикации

Все публикации входят в международную систему цитирования Scopus.

1. Guskova M. et al. Simulation of the Particle Dynamics in the Two-Dimensional Poiseuille Flow with Low Reynolds Number //Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2022. – Т. 43. – №. 2. – С. 381-385.
2. Guskova M., Shchur V., Shchur L. Simulation of drop oscillation using the lattice Boltzmann method //Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2020. – Т. 41. – №. 6. – С. 992-995.
3. Guskova M., Shchur L. Immersed boundary simulation of drop stability //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2021. – Т. 1740. – №. 1. – С. 012026.
4. Guskova M., Shchur L. Wave Spectrum of Flowing Drops //Russian Supercomputing Days. – Cham : Springer International Publishing, 2021. – С. 283-294.
5. Shchur L., Guskova M. Drop Oscillation Modeling //Russian Supercomputing Days. – Cham : Springer International Publishing, 2020. – С. 198-206.

Личный вклад автора

Идеи, предложенные в диссертации, выдвинуты соискателем совместно с научным руководителем. Автор самостоятельно разрабатывал код, провел вычислительные эксперименты, обработал результаты. Автор лично докладывал результаты работы на указанных конференциях и написал основную часть статьи 4.

Литература

- [Манаков, 1983] Манаков, С.В. и Щур, . (1983). Стохастичность в двухчастичном рассеянии. *Письма в ЖЭТФ*, 37(1):45–48.
- [Asmolov et al., 2018] Asmolov, E. S., Dubov, A. L., Nizkaya, T. V., Harting, J., and Vinogradova, O. I. (2018). Inertial focusing of finite-size particles in microchannels. *Journal of fluid mechanics*, 840:613–630.

- [Bazaz et al., 2020] Bazaz, S. R., Mashhadian, A., Ehsani, A., Saha, S. C., Krüger, T., and Warkiani, M. E. (2020). Computational inertial microfluidics: A review. *Lab on a Chip*, 20(6):1023–1048.
- [Beatus et al., 2012] Beatus, T., Bar-Ziv, R. H., and Tlusty, T. (2012). The physics of 2D microfluidic droplet ensembles. *Physics Reports*, 516(3):103–145.
- [Beatus et al., 2006] Beatus, T., Tlusty, T., and Bar-Ziv, R. (2006). Phonons in a one-dimensional microfluidic crystal. *Nature Physics*, 2(11):743–748.
- [Del Giudice et al., 2021] Del Giudice, F., D’Avino, G., and Maffettone, P. L. (2021). Microfluidic formation of crystal-like structures. *Lab on a Chip*, 21(11):2069–2094.
- [Esipov et al., 2020] Esipov, D. V., Chirkov, D. V., Kuranakov, D. S., and Lapin, V. N. (2020). Direct numerical simulation of the segre–silberberg effect using immersed boundary method. *Journal of Fluids Engineering*, 142(11).
- [Guskova, 2023] Guskova, M. (2023). Lbm simulation of particles in poiseuille flow. https://github.com/msguskova/lbm_chain_of_particles.
- [Inamuro, 2012] Inamuro, T. (2012). Lattice Boltzmann methods for moving boundary flows. *Fluid Dynamics Research*, 44(2).
- [Janssen et al., 2012] Janssen, P. J., Baron, M. D., Anderson, P. D., Blawdziewicz, J., Loewenberg, M., and Wajnryb, E. (2012). Collective dynamics of confined rigid spheres and deformable drops. *Soft Matter*, 8(28):7495–7506.
- [Krüger et al., 2013] Krüger, T., Gross, M., Raabe, D., and Varnik, F. (2013). Crossover from tumbling to tank-treading-like motion in dense simulated suspensions of red blood cells. *Soft Matter*, 9(37):9008–9015.
- [Latt et al., 2020] Latt, J., Malaspinas, O., Kontaxakis, D., Parmigiani, A., Lagrava, D., Brogi, F., Belgacem, M. B., Thorimbert, Y., Leclaire, S., Li, S., et al. (2020). Palabos: Parallel lattice boltzmann solver. *Computers & Mathematics with Applications*.
- [Liu et al., 2012] Liu, B., Goree, J., and Feng, Y. (2012). Waves and instability in a one-dimensional microfluidic array. *Physical Review E*, 86(4):046309.

- [Oliver, 1962] Oliver, D. (1962). Influence of particle rotation on radial migration in the poiseuille flow of suspensions. *Nature*, 194(4835):1269–1271.
- [Rayleigh, 1879] Rayleigh, L. (1879). On the capillary phenomena of jets. *Proc. R. Soc. London*, 29(196-199):71–97.
- [Rubinow and Keller, 1961] Rubinow, S. I. and Keller, J. B. (1961). The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 11(3):447–459.
- [Saffman, 1965] Saffman, P. G. (1965). The lift on a small sphere in a slow shear flow. *Journal of fluid mechanics*, 22(2):385–400.
- [Schaaf and Stark, 2020] Schaaf, C. and Stark, H. (2020). Particle pairs and trains in inertial microfluidics. *The European Physical Journal E*, 43:1–13.
- [Schiller et al., 2015] Schiller, U. D., Fleury, J.-B., Seemann, R., and Gompper, G. (2015). Collective waves in dense and confined microfluidic droplet arrays. *Soft Matter*, 11(29):5850–5861.
- [Segre and Silberberg, 1961] Segre, G. and Silberberg, A. (1961). Radial particle displacements in poiseuille flow of suspensions. *Nature*, 189(4760):209–210.
- [Shan and Chen, 1993] Shan, X. and Chen, H. (1993). Lattice Boltzmann model for simulating flows with multi phases and components. *Physical Review E*, 47(3):1815–1819.
- [Uspal and Doyle, 2012] Uspal, W. E. and Doyle, P. S. (2012). Collective dynamics of small clusters of particles flowing in a quasi-two-dimensional microchannel. *Soft Matter*, 8(41):10676–10686.
- [Yang et al., 2005] Yang, B. H., Wang, J., Joseph, D. D., Hu, H. H., Pan, T.-W., and Glowinski, R. (2005). Migration of a sphere in tube flow. *Journal of Fluid mechanics*, 540:109–131.