

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
"МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В. ЛОМОНОСОВА"  
Физический Факультет

Кафедра физики полимеров и кристаллов

Магистерская диссертация  
**Моделирование движения несферических  
частиц в микроканалах**

*Выполнила:*  
студентка 217м группы  
Гекова Анна Сергеевна

---

*Научный руководитель:*  
д.ф.-м.н., профессор  
Виноградова О.И.

---

Допущена к защите  
«    » \_\_\_\_\_ 2020 г.  
*Заведующий кафедрой  
физики полимеров и  
кристаллов  
академик Хохлов А.Р.*

---

Москва  
2020

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение . . . . .	2
1 Литературный обзор . . . . .	4
1.1 Современные знания об инерционной подъёмной силе . . . . .	4
1.2 Уравнения движения частицы в жидкости . . . . .	6
1.3 Теоретические и экспериментальные сведения о движении несферических частиц . . . . .	10
1.4 Моделирование движения несферических частиц . . . . .	14
2 Методы исследования . . . . .	16
2.1 Математическая модель . . . . .	16
2.2 Компьютерное моделирование . . . . .	17
3 Результаты и обсуждение . . . . .	20
3.1 Траектории и режимы движения сфероидов разной формы . . . . .	20
3.2 Движение сплюснутых сфероидов . . . . .	22
3.3 Движение вытянутых сфероидов . . . . .	27
Выводы . . . . .	29
Благодарности . . . . .	30
4 Приложение . . . . .	36
4.1 Описание метода решёточного уравнения Больцмана . . . . .	36
4.1.1 Уравнение Больцмана . . . . .	36
4.1.2 Дискретизация уравнения Больцмана . . . . .	37
4.1.3 Выбор пространственной решётки . . . . .	38
4.1.4 Переход к макроскопическим параметрам . . . . .	39

## ВВЕДЕНИЕ

Разделение частиц по форме является одной из важных задач микрофлюидики – области науки, изучающей движение потоков жидкостей и движение объектов, переносимых жидкостью в микроканалах. В качестве объектов могут выступать биологические клетки, разделение которых по форме может давать ценную информацию при проведении медицинских анализов. Манипуляция клетками может осуществляться как при помощи создания внешних полей (электрическое, магнитное), так и только за счёт разности давлений в микроканале. Изучением последних систем занимается инерционная микрофлюидика: она исследует действие инерционной подъёмной силы на частицы при их движении по каналу при конечных числах Рейнольдса течения. Эта сила заставляет мигрировать частицы поперёк линий тока и фокусироваться на определённом расстоянии от стенки канала. Для частиц разного размера и формы положения равновесия различны, что позволяет искать новые механизмы их разделения.

При проведении реального эксперимента важно знать вид функциональной зависимости инерционной подъёмной силы от параметров частицы: её плотности, размера, формы и ориентации в потоке жидкости. Зная эту зависимость, можно управлять частицами посредством, например, уравнивания инерционной подъёмной силы силами, действующими со стороны внешнего поля. Проблема здесь заключается в том, что вывод аналитической формулы для подъёмной силы, действующей на частицу в канале, не представляется возможным, так как задача обтекания частицы при конечных числах Рейнольдса является нелинейной. Существуют асимптотические решения для некоторых предельных случаев, однако более точную информацию позволяет получить численное моделирование.

Предметом исследования настоящей магистерской диссертации является инерционная миграция частиц несферической формы на примере эллипсоидов вращения (сфероидов). Сфероиды выбраны в качестве объекта исследования по нескольким причинам: их форма определяется всего одним параметром, варьируя который, можно получать сплюснутые и вытянутые объекты; их движение в сдвиговом течении достаточно хорошо изучено теоретически и экспериментально; многие природные объекты имеют сфероидальную форму. В работе будут рассмотрены нейтрально плавучие частицы, то есть частицы, плотность которых совпадает с плотностью окружающей их жидкости. Проблема сортировки таких частиц актуальна, поскольку многие природные объекты являются нейтрально пла-

вучими в жидкостях, широко используемых в экспериментах, и на данный момент существует относительно мало методов, позволяющих их эффективно разделять. Для исследования миграции частиц используется численный метод решёточного уравнения Больцмана. Данный метод продолжительное время успешно применяется для решения задач по гидродинамике: он позволяет измерять силу, действующую на частицы, а также сравнительно быстро проводить расчёты по моделированию гидродинамических течений.

Для выполнения работы были поставлены следующие цели:

- численно изучить инерционную миграцию нейтрально плавучих частиц – сфероидов сплюснутой и вытянутой форм;
- изучить влияние на инерционную подъёмную силу частиц таких параметров как форма частицы и режим её движения.

Для пошаговой реализации цели решались следующие задачи:

1. определение режима движения сфероидов при заданной начальной ориентации частицы;
2. выявление зависимостей положений равновесия частиц от их формы;
3. измерение инерционной подъёмной силы в компьютерном моделировании и предложение скейлинговой формулы для сплюснутых сфероидов.

Магистерская диссертация состоит из следующих глав. В главе 1 будет сделан литературный обзор имеющихся источников по тематике исследования. Далее в главе 2 представлена теоретическая модель, там же описаны детали моделирования системы. В 3-й главе содержатся полученные лично автором результаты работы и их анализ. В конце работы – выводы, благодарности и список литературных источников.

## 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

В главе сначала рассказывается, чем обусловлено возникновение инерционной подъёмной силы при движении частиц в жидкости. Далее в параграфе 1.2 приведены уравнения движения частицы. В параграфе 1.3 описано отличие движения частиц несферической формы от движения сфер, сделан обзор экспериментальных и теоретических методов исследования инерционной миграции и режимов движения сфероидов. В последнем параграфе рассказывается о методах численного моделирования применительно к решению задачи о движении сфероидов.

### 1.1 Современные знания об инерционной подъёмной силе

Рассмотрим задачу расчёта течения вязкой несжимаемой жидкости. Движение жидкости описывается основным уравнением гидродинамики – уравнением Навье-Стокса [1]:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{U}^*}{\partial t} + (\mathbf{U}^* \nabla) \mathbf{U}^* \right) = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{U}^*. \quad (1.1)$$

Здесь  $U^*$  – макроскопическая скорость жидкости, причём здесь и далее индекс «\*» обозначает размерные величины. За  $\rho$  обозначена плотность жидкости, а  $\eta$  – динамическая вязкость. Обезразмеривание величин, входящих в уравнение Навье-Стокса для сплошной среды, даёт следующую формулу:

$$\left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \nabla) \mathbf{U} \right) = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \Delta U. \quad (1.2)$$

В этом уравнении возникает важный безразмерный параметр – число Рейнольдса  $\text{Re} = \frac{\rho U_{\text{inf}} L}{\eta}$ , характеризующее режим движения жидкости в системе – ламинарный или турбулентный. В  $\text{Re}$  входит комбинация параметров жидкости – плотности  $\rho$ , скорости невозмущённого течения  $U_{\text{inf}}$ , масштаба длины  $L$  и  $\eta$  – динамической вязкости. Величины  $\mathbf{U}$  и  $p$  обезразмерены на  $U_{\text{inf}}$  и  $\rho U_{\text{inf}}^2$  соответственно. Члены уравнения, расположенные слева в скобках, обусловлены инерцией жидкости и по этой причине называются инерционными. Справа – градиент давления и вязкие силы. В общем виде уравнение Навье-Стокса не имеет аналитического решения, однако есть частные случаи, которые позволяют решить некоторые классы задач точно [2]. Если число Рейнольдса системы мало, то инерционными членами можно пренебречь. Поскольку при течении реальной жидкости число

Рейнольдса не равно нулю никогда, то в той или иной степени инерционные члены всегда присутствуют в системе, однако пренебрежение ими даёт возможность линеаризовать задачу.

Если к уравнению Навье-Стокса для малых  $Re$  ( $-\nabla p + \eta \Delta \mathbf{U}^* = 0$ ) добавить уравнение неразрывности для несжимаемой жидкости ( $div \mathbf{U} = 0$ ), то данная система уравнений называется уравнениями Стокса (уравнениями ползущего течения). Благодаря такому упрощению становится возможным получить точные решения даже для течений сложной геометрии [3].

Задача значительно усложняется, когда инерцией течения пренебречь нельзя. Существуют классические эксперименты, которые показывают насколько велики могут быть отклонения от теории, если в её основе не лежит учёт инерционных членов в уравнении Навье-Стокса. Так, ещё Пуазейль при исследовании течения крови впервые наблюдал, что область возле стенок канала оставалась свободной от частиц [4]. Значит, на частицы действовала перпендикулярная потоку сила, заставляющая частицы двигаться поперёк линий тока, что было невозможно предсказать исходя из уравнений Стокса.

С течением времени накапливалось всё больше данных, при анализе которых нельзя было пренебрегать инерцией жидкости. Активные экспериментальные исследования инерционных эффектов начались в 60-х гг. XX века. В 1962 году Сегрэ и Зильберберг опубликовали эксперимент, в котором при движении в цилиндрическом канале нейтрально плавучие частицы мигрировали поперёк линий тока ламинарного течения и фокусировались на расстоянии 0.6 радиуса от центра канала [5], [6]. Предполагалось, что миграция обусловлена возникновением инерционной подъёмной силы, значение которой обращалось в ноль в точке равновесия. Эта структура была названа кольцом Сегрэ-Зильберберга, а сам эксперимент привлёк внимание теоретиков к изучению инерционной подъёмной силы.

Первое теоретическое объяснение инерционной миграции было предложено в статье [7]. В этой работе была вычислена инерционная подъёмная сила, действующая на частицу в сдвиговом потоке, в предположении, что источником возмущения поля скоростей является вращение частицы в однородном потоке. Несколько позже в попытках описать явление кольца Сегрэ-Зильберберга были опубликованы работы [8], [9]. В этих работах возмущение потока сферой радиуса  $a$  раскладывалось на две составляющие: трансляционное движение частицы в жидкости и свободное вращение в сдвиговом потоке. Их комбинация давала важный резуль-

тат [9]:

$$F_l \sim \rho G^2 a^4 C_l(z, a, V_s), \quad (1.3)$$

показывающий пропорциональность инерционной подъёмной силы плотности жидкости, скорости сдвига  $G$ , её радиусу и некоторому коэффициенту  $C_l$ , зависящему от радиуса, расстояния до стенки  $z$  и скорости скольжения  $V_s$ , т.е. разности скоростей частицы и невозмущённого потока жидкости в этой же точке. Асимптотики для  $C_l$  имелись только для случая точечной частицы в течении Пуазейля ([9], [10]), теми же авторами было изучено влияние стенок на силу  $F_l$  при малых  $Re$ . Позже авторы работы [11] проделали выкладки для частицы конечного радиуса  $a$  в сдвиговом течении. Продолжая теоретические исследования инерционных эффектов, автором статьи [12] было рассмотрено движение сферических частиц при числах  $Re > 100$  и показано, что положения равновесия частиц в таком течении смещаются ближе к стенкам канала. В недавней работе [13] было предложено обобщение результатов, полученных в [9] и действующих вплоть до чисел  $Re \sim 20$ : в ней учитывалось изменение локального сдвига в точке нахождения сферы.

## 1.2 Уравнения движения частицы в жидкости

Получим уравнение траектории частицы произвольной формы при помещении её в поток жидкости. В этой задаче уравнение движения вязкой жидкости 1.1 решается совместно с уравнениями на трансляционную и угловую скорости:

$$M \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{d}, \mathbf{V}, \boldsymbol{\Omega}, t), \quad (1.4)$$

$$\hat{I} \frac{d\boldsymbol{\Omega}}{dt} + \boldsymbol{\Omega} \times (\hat{I}\boldsymbol{\Omega}) = \mathbf{T}(\mathbf{r}, \mathbf{d}, \mathbf{V}, \boldsymbol{\Omega}, t), \quad (1.5)$$

где  $M$  – масса частицы,  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{V}$ ,  $\mathbf{d}$ ,  $\boldsymbol{\Omega}$  – векторы положения, трансляционной скорости, ориентации и угловой скорости соответственно,  $\hat{I}$  – тензор инерции. В правой части уравнений стоят сила и момент вращения, действующие на частицу со стороны жидкости:

$$\mathbf{F}(t) = \iint_{s_p} \boldsymbol{\tau}(x) ds, \quad (1.6)$$

$$\mathbf{T}(t) = \iint_{s_p} \mathbf{x} \times \boldsymbol{\tau}(x) ds. \quad (1.7)$$

Интегралы берутся по поверхности частицы  $s_p$ ,  $\tau_i = \sigma_{ij}n_j$  – компонента вектора касательных напряжений жидкости, а тензор напряжений несжимаемой жидкости имеет вид  $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\eta(\partial_i U_j + \partial_j U_i)$ .

Для нахождения касательных напряжений необходимо решить задачу обтекания частицы жидкостью с учётом внешних условий. В общем случае при конечных числах Рейнольдса задача аналитически не решается, однако существуют упрощения, которые позволяют успешно получать результаты численными методами.

Одним из упрощений является квазистатическое приближение. Пусть после разгона движение частицы становится квазистационарным, тогда вкладом производных по времени и эффектом присоединённой массы можно пренебречь, и уравнение поступательного движения имеет следующий вид:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{d}, \mathbf{V}, \boldsymbol{\Omega}, t) = 0 \quad (1.8)$$

Сила, действующая на частицу со стороны жидкости, может быть разложена на две составляющие. Во-первых, возникает сила вязкого (лобового) сопротивления ( $F_{drag}$ ), которая стремится скомпенсировать разницу скоростей частицы и окружающей жидкости. Во-вторых, возникает сила, вызывающая движение частицы поперёк линий тока. Это инерционная подъёмная сила ( $F_l$ ). Значит, общая сила представима в виде суммы:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{drag} + \mathbf{F}_l \quad (1.9)$$

Для жёсткой сферической частицы в неограниченном течении [2]:

$$\mathbf{F}_{drag} = 6\pi\eta a \left( \mathbf{U}^* - \mathbf{V}^* + \frac{a^2}{6} \Delta \mathbf{U}^* \right), \quad (1.10)$$

где  $\frac{a^2}{6} \Delta \mathbf{U}^*$  – поправка Факсена для неоднородного поля скоростей [14]. Формула справедлива для случаев малых чисел Рейнольдса частицы:  $Re_p = a^2 G / \nu \ll 1$ , где  $G$  – скорость сдвига течения,  $\nu = \eta / \rho$  – кинематическая вязкость жидкости.

Если же есть ограничивающая стенка, то при движении частицы вблизи стенки канала возникает дополнительный вклад в уравнение (1.10) за счёт вращения



частицы. Совместное решение системы уравнений для силы и вращающего момента приводит к следующему уравнению на трансляционную скорость движущейся частицы:

$$V_x^* = U^*(z) h_x, \quad (1.11)$$

где  $h_x$  – поправочный коэффициент, зависящий лишь от  $z/a$ . Полный вид приближённых формул для вычисления  $h_x$  приведён в статье [15].

В отличие от силы вязкого сопротивления инерционная подъёмная сила зависит от скорости жидкости существенно нелинейным образом. Для небольших  $Re$  задача может быть частично линеаризована, и возмущение, вызываемое движением частицы, представляется в виде суммы двух составляющих и малой поправки за счёт их взаимодействия. Первая составляющая связана с трансляционным движением частицы и возникающей при этом скорости скольжения:

$$V_s^* = V^* - U^* \quad (1.12)$$

Это возмущение называют стокслетом. Вторая составляющая связана со свободным вращением частицы в сдвиговом течении (стресслет). При малом числе Рейнольдса канала, объединяя два возмущения с учётом нелинейных поправок, можно получить следующую формулу для инерционной подъёмной силы [9]:

$$F_l^* = \rho a^2 (c_{l0} a^2 G^2 + c_{l1} a G V_s^* + c_{l2} V_s^{*2}), \quad (1.13)$$

где коэффициенты  $c_{li}$  ( $i = 0, 1, 2$ ) в общем виде зависят от безразмерных параметров  $z/a$ ,  $H/a$ ,  $V_s^*/U_m^*$ , точные выражения для них были получены лишь в некоторых предельных случаях [9], [16].

В случае задачи о движении частицы в течении Пуазейля уравнение (1.13) после обезразмеривания принимает вид:

$$F_l^* = \rho a^4 G_m^2 c_l, \quad (1.14)$$

где коэффициент

$$c_l = c_{l0} + c_{l1} V_s + c_{l2} V_s^2 \quad (1.15)$$

зависит только от скорости скольжения, обезразмеренной на  $aG_m$  ( $G_m = 4U_m^*/H$  – максимальная скорость сдвига). Как было показано в [13], формула для инерционной подъёмной силы может быть обобщена на весь канал вплоть до  $Re \sim 20$ :

$$c_l = c_{l0}(z/H) + \gamma c_{l1}(z/a) V_s + c_{l2}(z/a) V_s^2, \quad (1.16)$$

где  $c_{li}$  берутся из предыдущих теоретических работ, а  $\gamma = G(z)/G_m = 1 - 2z/H \leq 1$  – безразмерный коэффициент, учитывающий изменение скорости сдвига в точке расположения частицы.

В условиях квазистационарного движения инерционная подъёмная сила уравновешивается z-компонентой силы вязкого сопротивления:

$$F_l^* = -F_{dragz}^* \quad (1.17)$$

Согласно работе [17], z-компонента  $F_{drag}$  выражается через скорость миграции частицы  $V_{mig}^*$ :

$$F_{dragz}^* \approx -6\pi\eta a V_{mig}^* f_z(z, a), \quad (1.18)$$

$f(z)$  – поправка на гидродинамическое взаимодействие со стенками канала [17].

Таким образом, знание выражения для инерционной подъёмной силы позволяет записать уравнение на скорость миграции частицы поперёк линий тока  $V_{mig}^*$ :

$$\frac{dz}{dt} = V_{mig}^* = \frac{F_l^*}{6\pi\eta a f_z} = \frac{c_l a^3 G_m^2}{6\pi\nu f_z} \quad (1.19)$$

Разделив выражение (1.19) на скорость трансляционного движения (уравнение (1.11)), получим уравнение траектории частицы в профиле Пуазейля:

$$\frac{dz}{dx} = \frac{a^3 G_m}{6\pi\nu} \frac{c_l}{f_z z (1 - z/H) h}. \quad (1.20)$$

Асимптотические формулы для инерционной подъёмной силы, описанные в данном разделе, относятся к сферическим частицам, размер которых много меньше ширины канала. Для крупных частиц, а также для частиц несферической формы подобных формул не существует. Поэтому исследование их миграции возможно только методами численного моделирования.

Главной особенностью несферических частиц (в частности, сфероидов) является наличие различных режимов вращения в зависимости от их формы и числа Рейнольдса. Вращение несферической частицы приводит к нестационарному возмущению потока, поэтому инерционная подъёмная сила становится зависима от времени. Кроме того, момент силы со стороны жидкости постепенно меняет

ориентацию частицы до тех пор, пока не будет достигнуто стабильное движение, что оказывает влияние и на поперечную миграцию. Вышесказанное означает, что инерционный коэффициент  $c_l$  становится зависим от времени и ориентации даже при фиксированной координате  $z$ :  $c_l = c_l(z, \mathbf{d}, t)$ . Об этих эффектах пойдёт речь в следующем разделе, где будет рассмотрена литература, касающаяся движения объектов несферической формы.

### 1.3 Теоретические и экспериментальные сведения о движении несферических частиц

Первое теоретическое описание движения несферических объектов относится к началу XX века. Среди работ первой четверти XX века особое внимание следует уделить статье Г.Джеффри [18]. Джеффри показал, что сфероиды, обтекаемые потоком, движутся по-разному в зависимости от их формы, сплюснутой или вытянутой. Статья важна тем, что в ней сформулированы теоретические положения, проверенные затем экспериментально Г.Тейлором [19]:

- движение сфероидов в линейном сдвиговом течении является периодическим,
- зависит от начальных условий частицы,
- подчиняется уравнению траекторий, названных впоследствии орбитами Джеффри,
- предполагается, что среди множества орбит устойчивыми являются те, что соответствуют минимуму диссипации энергии: вытянутым сфероидам соответствуют орбиты, при движении по которым в вязкой жидкости ось симметрии вращения становится перпендикулярной потоку (режим качения), а сплюснутым – параллельно (режим «кувыркания») (это положение было в дальнейшем опровергнуто).

Теоретические исследования сфероидов были продолжены в 50-х г.г. XX века. К этому времени накопилось некоторое количество экспериментальных данных, которые указывали как на подтверждения теоретических положений Джеффри, так на то, что эти положения должны быть скорректированы. Например,

Биндер для проверки траекторий Джеффри исследовал движение частицы человеческого волоса в глицерине и обнаружил, что при отношении полуосей частицы, больших критического значения, становится устойчивой орбита, соответствующая, наоборот, максимуму диссипации энергии [20]. Этим экспериментом была опровергнута последняя гипотеза Джеффри. Похожие замечания были сделаны в работах [21], [22] по исследованию движения цилиндрических стержней из разных материалов в кукурузном масле: было обнаружено, что частицы могут переходить с одной орбиты Джеффри на другую. Таким образом нарушалась зависимость конкретной траектории исключительно от начальных условий частиц. Большой шаг в обосновании экспериментов сделан Саффманом в 1956 году, который учёл в уравнениях движения жидкости нестационарность движения и ввёл скорость изменения параметра, конкретизирующего траекторию Джеффри [23]. Эти знания позволили также опровергнуть гипотезу Джеффри о минимуме диссипации энергии: определено, что для вытянутых сфероидов устойчив режим «кувыркания», а для сплюснутых – качение.

К началу 60-х гг. были накоплены знания об инерционной миграции не только сфер, но и жёстких цилиндров, стержней [24], [25], [26], что заинтересовало Е.Харпера и других учёных описать явление теоретически [27], [28]. Так, при помощи поправок Озеена из [29] были определены компоненты тензора подъёмной силы несферических частиц для случая простого сдвига [28].

Большой интерес к практическому применению инерционной миграции возник, когда технически стало возможным проведение экспериментов на микромасштабах. На тот момент уже было известно, что величина инерционной подъёмной силы зависит от размера частицы, скорости скольжения, а также что частицы разной формы могут иметь различные режимы движения. Все эти факты легли в основу использования течений в микроканалах для фокусировки и сортировки микрообъектов.

За последнее время успели стать классическими работы учёных Ди Карло и Багата [30], [31]. В этих работах была проведена так называемая пассивная фокусировка, т.е. фокусировка частиц в течении под действием градиента давления без использования внешних полей. Микроканалы имели искривлённую форму – в виде спирали и серпантина, благодаря чему на частицу, помимо инерционной подъёмной силы  $F_l$ , действовала сила Дина  $F_D$ , возникающая из-за наличия у канала радиуса кривизны. Баланс двух сил приводил частицы к фокусировке на нужном расстоянии от стенок на выходе из установки (геометрия установки показана на

рис.1.1).

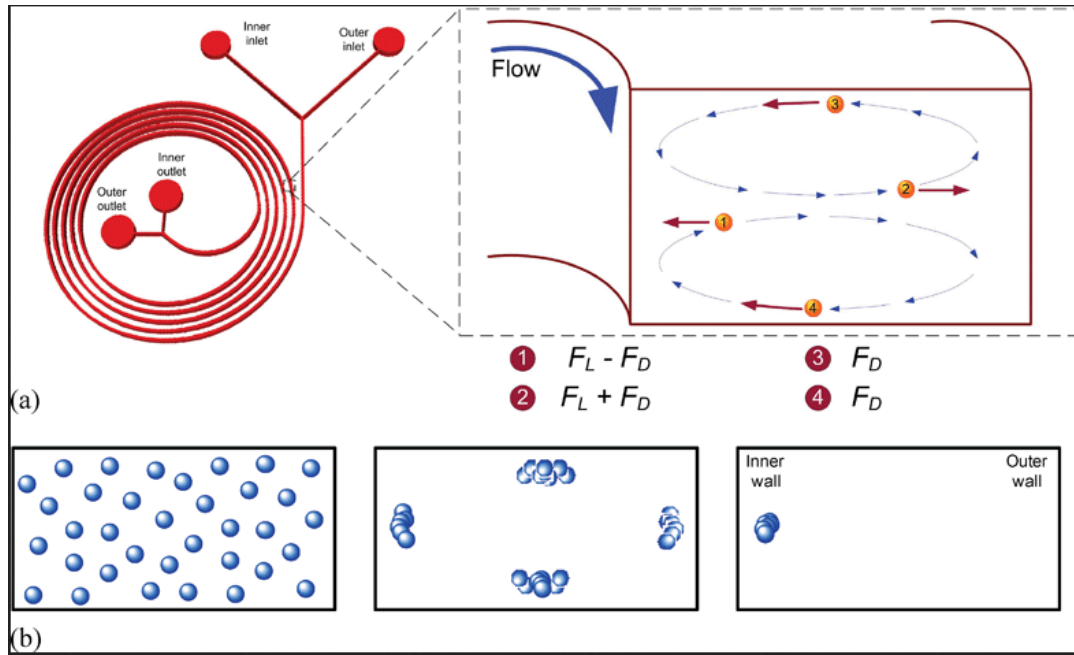


Рисунок 1.1 – а) Схема канала для фокусировки частиц; б) Схема поперечного сечения канала: левый рисунок – распределение частиц на входе, средний – положения равновесия при действии только  $F_L$ ; справа – сокращение количества положений равновесия при действии дополнительной силы Дина. Рисунок взят из [31].

С момента выхода двух основополагающих работ, положивших начало инерционной микрофлюидике, было проведено огромное количество исследований, основными задачами которых являлись поиск наиболее эффективных механизмов как сортировки, так и фокусировки микрообъектов в зависимости от их плотности, размера. В центре внимания также стояла задача сортировки по форме. Сделать механизм эффективным получалось за счёт уравнивания инерционной подъёмной силы уже описанной силой Дина [32], созданием электрического [33] и магнитного [34], [35] полей, а также модификацией формы канала [36], [37]. При помощи микрофлюидных устройств удалось провести сортировку таких биологических объектов как ДНК, бактерий [38] и вирусов [39]. Наиболее полный обзор существующих на данный момент методов в инерционной микрофлюидике сделан в работе [40], а в работе [41] собран огромный материал, касающийся сортировки частиц по форме.

Сортировка по форме подразумевает разделение объектов одинакового или очень близкого объёма. Так, авторами работы [42] продемонстрирован способ деления близких по объёму частиц в форме сфероидов по степени отношения полуосей, т.е. степени «вытянутости» сфероидов. Чем больше это отношение, тем

ближе к центру канала фокусировалась частица, что видно на рисунке 1.2 (с).

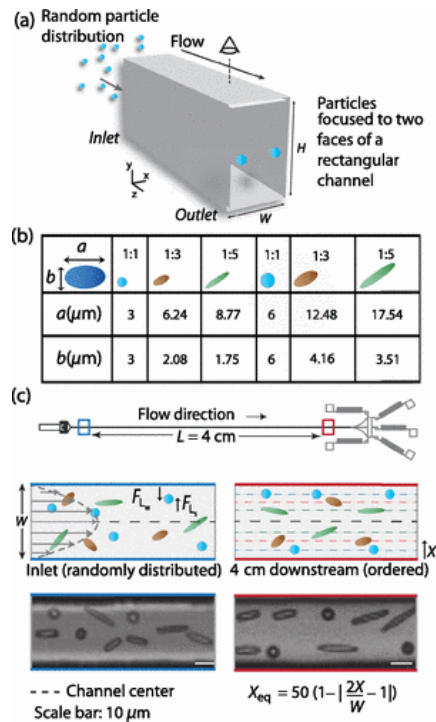


Рисунок 1.2 – Эксперимент по фокусировке сфероидальных частиц. а) Схема микроканала; б) Размеры сфероидов в) Наблюдение фокусировки частиц в профиле Пуазейля. Рисунок взят из [42].

Несмотря на большое количество созданных микрофлюидных устройств, в инерционной микрофлюидике есть немало число ещё не решённых задач. Они решаются путём проведения не только реальных экспериментов, но и численных.

## 1.4 Моделирование движения несферических частиц

Для численного моделирования инерционной миграции частиц и определения действия инерционной подъёмной силы на частицы в потоке в настоящее время широко используются метод конечных элементов [43], [44], метод диссипативной динамики частиц [45] и метод решёточного уравнения Больцмана (Lattice Boltzmann method – LBM) [46]. Последний метод хорошо подходит для моделирования течений с частицами, потому что позволяет рассчитывать течения в сложных областях, в том числе с подвижными границами, без перестройки сетки [47], подходит для моделирования многофазных сред, а также превосходит остальные методы по лёгкости распараллеливания процессов. В силу наличия таких преимуществ для проведения расчётов был выбран именно LBM. Детальное описание метода решёточного уравнения Больцмана приведено в приложении к работе.

Численное моделирование позволило хорошо изучить движение сфероидов разной формы как в сдвиговом потоке [48], так и в течении Пуазейля в каналах круглого [49] и прямоугольного [50] поперечных сечений, и построить аналог фазовых диаграмм: устойчивость того или иного режима в зависимости от отношения полуосей частицы и числа Рейнольдса.

В работе [48] было установлено, что в сдвиговом течении существует 5 режимов движения сфероидов сплюснутой формы (показаны на рисунке 1.3). В зависимости от внешних условий реализуется один из них.

Согласно рисунку 1.3 определим систему координат, связанную со сфероидом. Ось  $x'$  направим вдоль оси симметрии частицы. Режим «кувыркания» характеризуется периодическим вращением оси  $x'$  в плоскости течения. При качении частица вращается вокруг  $x'$ , которая всё время остаётся перпендикулярна плоскости течения. «Каякинг» характеризуется прецессией оси  $x'$  вокруг оси, направленной вдоль течения. При наклонном качении  $x'$  всё время остаётся зафиксированной под некоторым углом к плоскости течения, частица при этом продолжает вращаться вокруг  $x'$ . Стационарное движение – движение, при котором и наклон  $x'$ , и угловая скорость частицы фиксированы. Вытянутый сфероид помимо таких же режимов движения имеет ещё один – наклонный «каякинг» [51].

При исследовании сфероидов в каналах различных сечений в [45], [50] установлены пределы устойчивости режимов качения и «кувыркания» для сплюснутых и вытянутых сфероидов в зависимости от числа Рейнольдса. Так, известно,

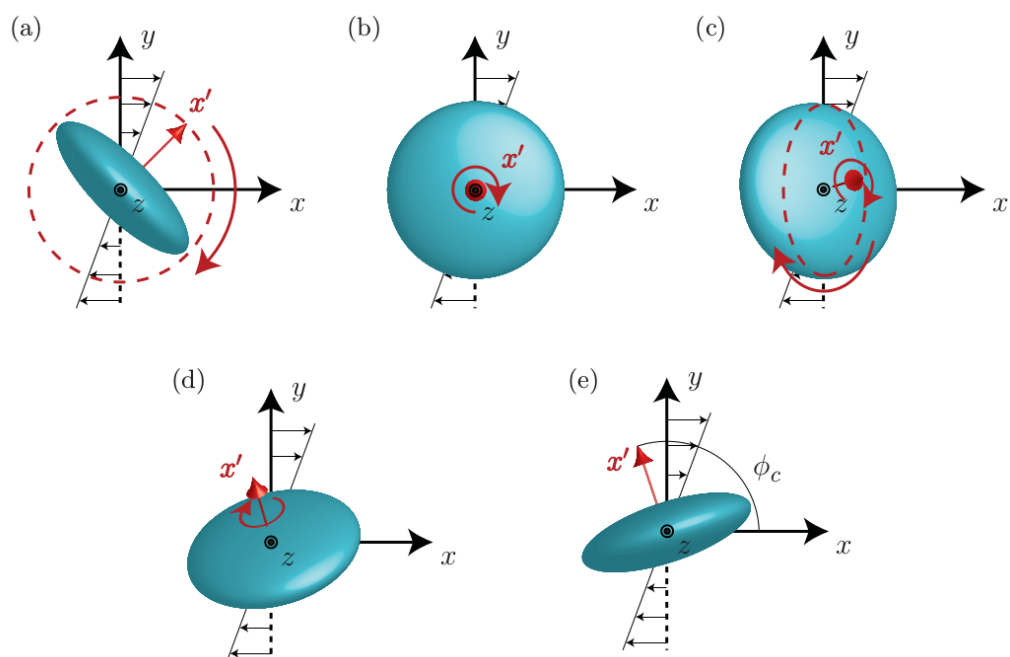


Рисунок 1.3 – Режимы движения сфероидов в линейном сдвиговом потоке: а) «кувыркание»; б) качение; с)«каякинг»; д) качение под наклоном; е) стационарное движение. Рисунок взят из [48].

что для чисел Рейнольдса до  $Re = 100$  для сфероидов сплюснутой формы устойчив режим качения, а для вытянутых – «кувыркание». Также было показано, что положения равновесия частиц одинакового объема зависят от их формы. Однако в этих работах при изучении инерционной миграции сфероидов задача определения функциональной зависимости подъемной силы от геометрических параметров частицы не ставилась. На данный момент ни экспериментальными, ни численными методами не выявлено, какой комбинации полуосей пропорциональна подъемная сила  $F_l$  и как она зависит от ориентации частицы в потоке. В этой связи необходимо всесторонне исследовать инерционную миграцию несферических частиц в каналах при умеренных числах Рейнольдса течения, с чем и связана постановка целей настоящей работы.



## 2. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В настоящем разделе изложены методы исследования, использованные в ходе работы. В пункте 2.1 описана решаемая задача. Далее в пункте 2.2 представлено описание параметров, использованных в ходе компьютерного моделирования течения в канале.

### 2.1 Математическая модель

Рассмотрим плоский микроканал в виде двух бесконечных плоскостей, разделённых на расстояние  $H$  друг от друга. Рассмотрим течение ньютоновской жидкости по каналу под действием градиента давления  $\nabla p$ . Организуем следующую декартову систему координат: ось  $x$  направим вдоль течения жидкости,  $y$  – вдоль плоскости перпендикулярно к  $x$ , а  $z$  – ортогональна плоскости  $(xy)$ . Описанная система представлена на рисунке 2.1.

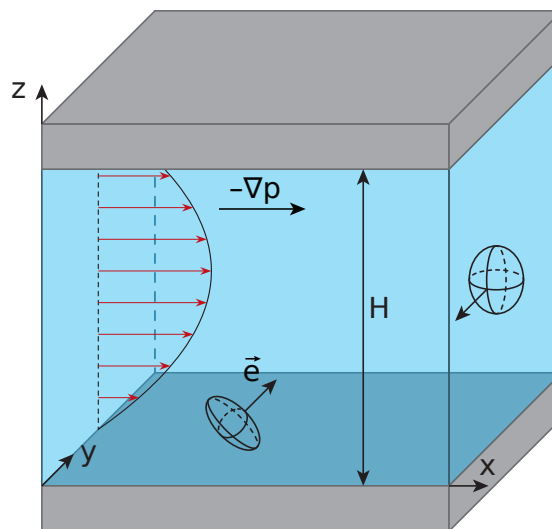


Рисунок 2.1 – Система координат и схема течения жидкости в канале.

Движение жидкости в канале описывается уравнением Навье-Стокса для несжимаемой жидкости 1.1. Зададим граничные условия (ГУ) на стенках канала – условия прилипания и непротекания (ГУ первого рода):

$$\mathbf{U}^*|_{z=0, z=H} = 0 \quad (2.1)$$

В таком случае скорость жидкости описывается профилем Пуазейля:

$$U(z)^* = 4U_m^* \frac{z}{H} \left(1 - \frac{z}{H}\right), \quad (2.2)$$

где  $U_m^*$  – скорость жидкости в центре канала. Число Рейнольдса канала вводится следующим образом:  $Re = U_m^* H / \nu$ ,  $\nu$  – кинематическая вязкость жидкости.

Движение нейтрально плавучих сфероидов описывается уравнениями (1.4-1.7) со следующими начальными условиями: частицы запускаются на конечном расстоянии  $z_0$  от стенки канала с заданной ориентацией  $d_0$ , трансляционная и угловая скорости равны нулю. В работе рассмотрены сфероиды с радиусами вращения  $a/H = 0.1, 0.075$  и с разным отношением полуосей  $b/a = 0.5, 0.8, 1, 1.25, 1.5, 1.75, 2$ . Объекты с  $b/a = 0.5, 0.8, 1, 1.5, 2$  представлены на рисунке 2.2.

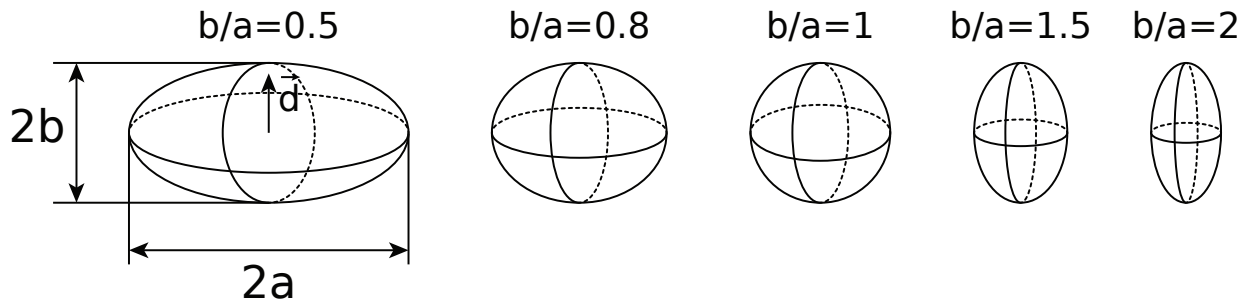


Рисунок 2.2 – Изучаемые в работе сфероиды:  $b/a < 1$  – сплюснутые частицы,  $b/a > 1$  – вытянутые частицы. Директор  $\vec{d}$  направлен вдоль оси вращения.

## 2.2 Компьютерное моделирование

Все компьютерные расчёты в работе проводились методом решётчного уравнения Больцмана (Lattice Boltzmann Method) [46]. Подробное описание метода приведено в приложении к работе.

Для проведения вычислительного эксперимента был использован компьютерный код, реализованный на языке Fortran группой учёных под руководством Й.Хартинга [52]. Распараллеливание процессов реализовано передачей информации через MPI (Message Passing Interface) [53]. Обработка полученных данных производилась путём написания скриптов на языке программирования Python.

Область моделирования, состоящая из ячеек D3Q19, заключена между двумя непроницаемыми плоскостями, находящимися в координатах  $z = 1\delta$  и  $z = 81\delta$ , так что ширина канала оказывается равной  $H = 80\delta$  ( $\delta$  – условное расстояние между узлами решётки). Длина и ширина ячейки  $N_x = N_y = 128\delta$  выбраны исходя из оптимального времени счёта. На верхней и нижней стенках заданы граничные условия прилипания. На боковых стенках ячейки установлены периодические граничные условия: при пересечении границ ячейки частицы смещаются на расстояние  $N_x$  или  $N_y$  назад без изменения своего состояния (иллюстрация приведена на 2.3).

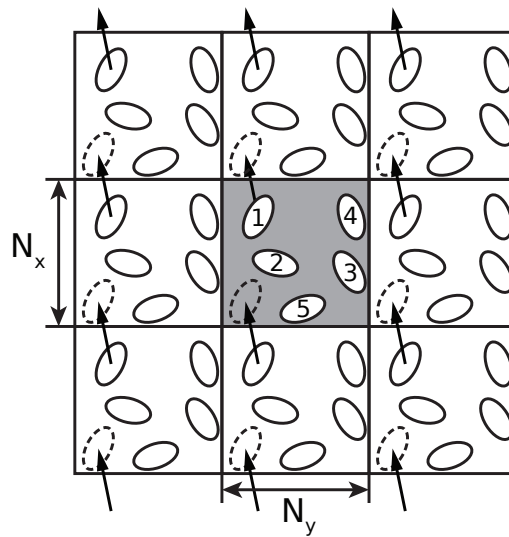


Рисунок 2.3 – Иллюстрация периодических граничных условий. Стрелка указывает на перемещение частицы в соседнюю ячейку. Основа для рисунка взята из [47]

К частицам жидкости приложена объёмная сила, генерирующая течение Пуазейля, эквивалентное возникающему течению при перепаде давления  $\nabla p$ . Время релаксации в операторе столкновений едино и равно единице (см. формулу 4.6 приложения), тогда вязкость жидкости  $\nu$  тоже одинакова и, согласно формуле (4.18), равна  $1/6$ . Числа Рейнольдса, использованные в компьютерном эксперименте:  $Re = U_m^* H / \nu = 11.5; 23; 46$ .

Для моделирования движения частицы в компьютерном коде содержится модуль молекулярной динамики. Частица представляет собой группу жёстко связанных точек заданной массы. Если в непрерывном случае радиус объекта составляет  $a$  для сферы, а радиусы большой и малых полуосей для сфероидов равны соответственно  $a$  и  $b$ , то в численном методе эти частицы дискретизируют-

ся на решётке, причём чем больше размер частицы, тем лучше дискретизированная и реальная частицы соответствуют друг другу. Граничное условие «частица-жидкость» реализовано согласно [47]. На частицу действует такая же объёмная сила, что и на жидкость, что обеспечивает её нейтральную плавучесть. Также мы не интересовались эффектом взаимодействия частиц друг с другом.

Проводилось два вида компьютерного эксперимента: свободное движение частиц по каналу с миграцией к положениям равновесия и движение при фиксированной координате  $z$ , при котором измерялась компонента объёмной силы  $F_z$ . Для поиска положений равновесия частицы запускались из точек, достаточно близких к предполагаемому положению равновесия и с ориентацией, близкой к устойчивой. Использовался следующий критерий достижения равновесия: разность между  $z$ -координатой частицы, усредненной по 1000 и 2000 последним временным шагам не должна превышать 0.1%. Типичная длина траектории составляла 300 000 временных шагов, в отдельных случаях до 500 000. Для вычисления подъемной силы в уравнениях движения фиксировали  $z$ -координату и проводили моделирование движения частицы в течении 30 000 шагов. На начальном этапе происходит разгон частицы до некоторого стационарного значения скорости. Этот процесс занимал 15 000-20 000 шагов. Вертикальная составляющая силы, действующей на частицу, получалась путем усреднения мгновенных значений силы по 10 000 шагов после окончания разгона. Мы предполагаем, что такого количество шагов достаточно для надежного измерения силы, т.к. значения силы, полученные усреднением по 5000 и 10000 шагов практически не отличались.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

#### 3.1 Траектории и режимы движения сфероидов разной формы

В первую очередь необходимо было выяснить, каков режим движения будет устойчивым для сфероидов той или иной формы при умеренных числах Рейнольдса канала. Как было показано в литературном обзоре, хорошо изучено вращение сфероидов в простом сдвиговом течении. Поскольку в нашем компьютерном эксперименте профиль течения параболический, то движение характеризуется локальной скоростью сдвига, зависящей от координаты  $z$ . Числа Рейнольдса частиц при любой скорости сдвига в поставленном эксперименте такие, что мы ожидали получить качение для сплюснутых сфероидов и кувыркание – для вытянутых ([50]).

Был поставлен следующий эксперимент. Нейтрально плавучие частицы в форме сфероидов разных отношений полуосей запускались в течение с числом Рейнольдса  $Re \sim 23$  на некотором расстоянии от стенки канала с нулевой начальной скоростью и небольшим отклонением директора  $\mathbf{d}$  от оси  $z$ :  $\mathbf{d} = (0.308, 0.308, 0.9)$ . Частицы разгонялись потоком до некоторой равновесной скорости, при этом за счёт действия инерционной подъёмной силы мигрировали поперёк линий тока к своему положению равновесия. В таблице 3.1 в первых трёх колонках показано, какие частицы были исследованы.

На рисунке 3.1 для сфероидов с  $b/a = 0.5, 0.8, 1, 1.25, 1.5, 1.75, 2$  изображены траектории движения, а на рисунке 3.2 – положения равновесия, к которым приходят частицы. Начальное положение  $z_0/H = 0.225$ ,  $d_0 = (0.308, 0.308, 0.9)$ .

На рисунке 3.1 видно, что режимы движения сплюснутых и вытянутых сфероидов различаются. Если сплюснутые сфероиды приходят к своему положению равновесия  $z_{eq}$  и не выходят из него, то вытянутые продолжают вращаться относительно некоторого среднего положения, т.е. условного  $z_{eq}$ , которое определяется усреднением по периоду вращения. Таким образом, сплюснутые и вытянутые сфероиды приходят к разным устойчивым режимам. Также, согласно рисунку 3.2, положения равновесия сплюснутых сфероидов почти не зависят от  $b/a$ , в то же время наблюдается явная зависимость от  $b/a$  средних положений вытянутых частиц. Так как динамика движения сфероидов разной формы различается, то частицы разной формы далее будут рассмотрены по отдельности.

Таблица 3.1 – Типы сфероидов, их режимы движения и положения равновесия

$a/H$	$a_r$	тип сфероида	$z_{eq}/H$	устойчивый режим движения
0.1	0.5	сплюснутый	0.249	качение
0.1	0.8	сплюснутый	0.249	качение
0.1	1	сфера	0.248	–
0.1	1.25	вытянутый	0.253	«кувыркание»
0.1	1.5	вытянутый	0.258	«кувыркание»
0.1	1.75	вытянутый	0.264	«кувыркание»
0.1	2	вытянутый	0.270	«кувыркание»
0.075	0.5	сплюснутый	0.237	качение
0.075	0.8	сплюснутый	0.236	качение
0.075	1	сфера	0.236	–
0.075	1.25	вытянутый	0.240	«кувыркание»
0.075	1.5	вытянутый	0.244	«кувыркание»
0.075	1.75	вытянутый	0.250	«кувыркание»
0.075	2	вытянутый	0.256	«кувыркание»

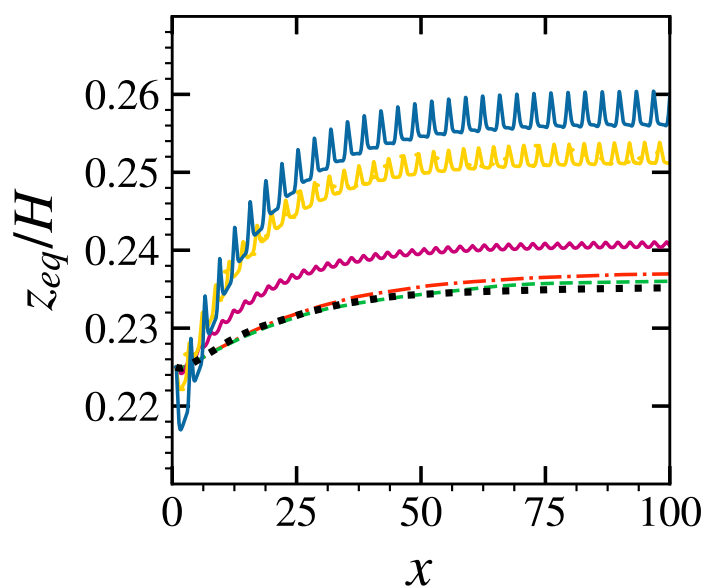


Рисунок 3.1 – Траектории движения сфероидов с  $a/H = 0.1$ . Сплошные кривые разных цветов соответствуют вытянутым сфероидам с  $b/a = 1.25$  (фиолетовый),  $1.75$  (жёлтый),  $2$  (синий). Пунктирные линии соответствуют сплюснутым сфероидам с  $b/a = 0.5$  (красный штрих-пунктир),  $0.8$  (зеленый штрих),  $1$  (черный пунктир).

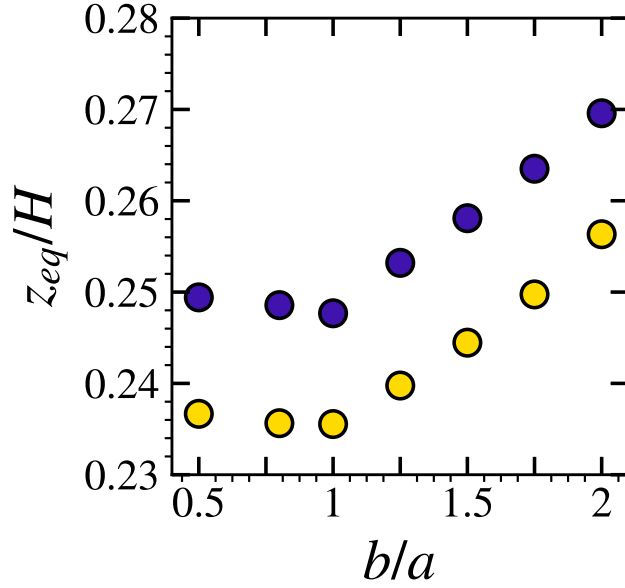


Рисунок 3.2 – Положения равновесия сфероидов  $z_{eq}$  ( $z$ -компоненты положения центра частицы) в зависимости от отношения полуосей  $b/a$  для двух радиусов вращения:  $a/H = 0.1$  (синие символы) и  $0.075$  (жёлтые символы).

### 3.2 Движение сплюснутых сфероидов

Рассмотрим свободное движение трёх частиц с  $a/H = 0.1$  при  $b/a = 0.5$ ,  $b/a = 0.8$  (сфероиды) и  $b/a = 1$  (сфера). Два сфероида запускались с нулевой начальной скоростью из точки  $z/H = 0.1875$  с начальной ориентацией  $\mathbf{d} = (1, 1, 1)$ . На рисунке 3.3 (а) приведены траектории всех частиц: видно, что оба сфероида и сфера приходят к близким положениям равновесия. На рисунке 3.3 показано изменение  $y$ -компоненты вектора ориентации сфероидов. Видно, что частицы постепенно приходят в режим качения – режим, при котором вектор ориентации  $\mathbf{d}$  и вектор угловой скорости  $\Omega$  параллельны друг другу и направлены по оси  $y$  (поперёк потока). Схема установившегося режима изображена на рисунке 3.4.

Рисунок 3.3 (b) показывает, что скорость изменения ориентации частиц зависит от отношения  $b/a$ : более плоский сфероид приходит в режим качения быстрее. Одновременно  $b/a$  оказывает лишь небольшое влияние на поперечную миграцию: положения равновесия всех трёх частиц почти не зависят от  $b$ , как было видно на рис. 3.2. Тот же результат показан на рис. 3.5 (а) в укрупнённом масштабе. Поскольку разделение частиц по форме предполагает, что частицы одинакового объёма, но разной формы мигрируют по-разному, то для анализа возможности раз-

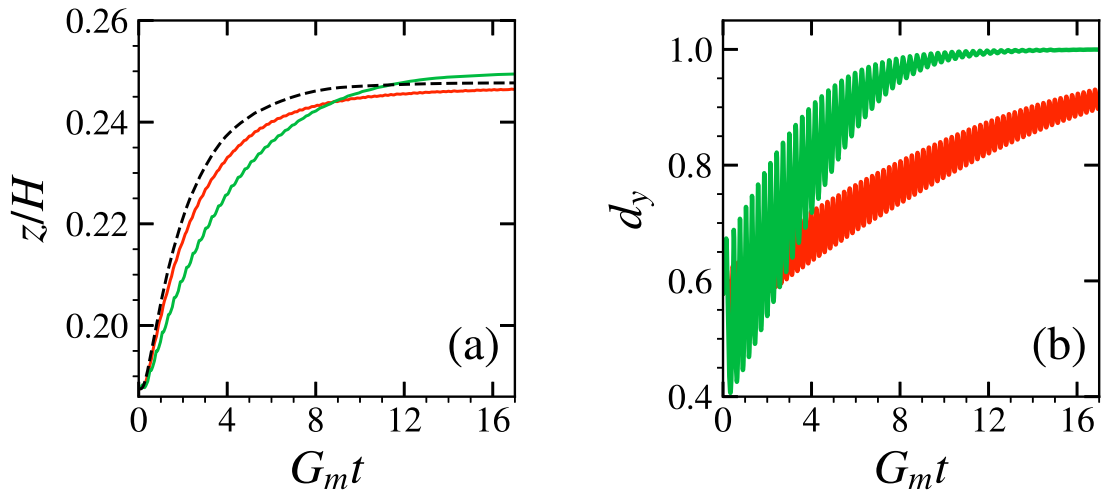


Рисунок 3.3 – (а) Траектории движения сплюснутых сфероидов с  $b/a = 0.5$  (сплошная красная линия),  $0.8$  (сплошная зелёная линия),  $1$  (чёрная штриховая линия) (б)  $y$ -компонента вектора ориентации сплюснутых сфероидов с  $b/a = 0.5$  (красная кривая),  $0.8$  (зелёная кривая).  $G_m t$  – обезразмеренное время.

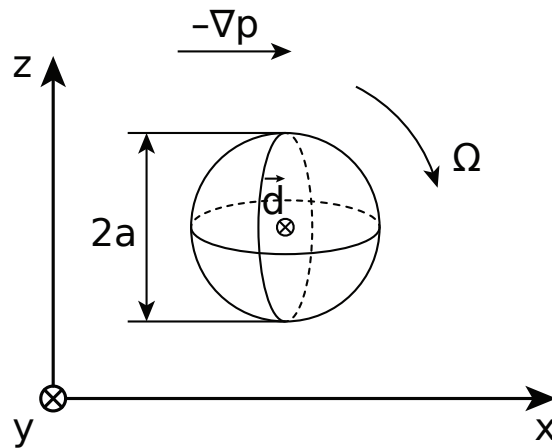


Рисунок 3.4 – Схематическое изображение режима качения сплюснутого сфероида.  $\Omega$  – направление вращения,  $d$  – вектор ориентации.

деления построен также график зависимости  $z_{eq}$  от эквивалентного сферического радиуса  $a_e$ , то есть радиуса сферы, объём которой равен объёму соответствующего сфероида (рисунок 3.5 (b)).

Скачок, который виден на рис.3.5 (b) и наблюдается при переходе от поперечного сечения  $a/H = 0.075$  к  $a/H = 0.1$ , означает, что частицы практически одинакового объёма, но разной формы имеют разные положения равновесия. Настоящий результат полезен тем, что он является предпосылкой к сортировке



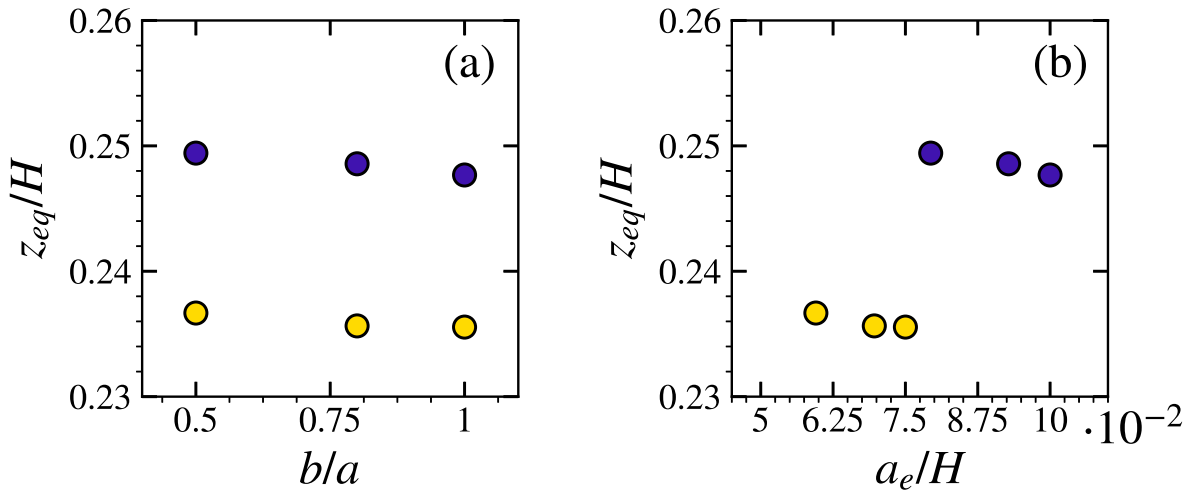


Рисунок 3.5 – Положения равновесия сплюснутых сфероидов (а) в зависимости от отношения полуосей  $b/a$  и (б) в зависимости от эквивалентного сферического радиуса  $a_e$ . Синие символы соответствуют сфероидам с радиусом вращения  $a/H = 0.1$ , жёлтые - сфероидам с  $a/H = 0.075$ .

частиц по размеру.

Поскольку в реальных экспериментах, ставящих перед собой задачу сортировки по размеру, инерционная подъёмная сила часто уравнивается другой силой, например, магнитной или гравитационной, то для того, чтобы иметь возможность реализовать сортировку по форме, нужно знать, как информация о форме входит в выражение для инерционной подъёмной силы. Поэтому на следующем этапе стояла задача узнать, как инерционная подъёмная сила зависит от формы частицы. Для нахождения этой зависимости была проведена серия экспериментов по измерению  $F_l$  на разных расстояниях от стенки канала: сплюснутый сфероид, находящийся в режиме качения, фиксировался на определённом расстоянии  $z$ , движение в остальных направлениях и вращение оставались свободными. В зафиксированном положении измерялась вертикальная компонента силы, действующей на частицу. На рисунке 3.6 показаны значения  $F_l$  для половины канала. Первое предположение заключалось в том, что (по аналогии со сферическими частицами) подъёмная сила  $F_l$  может быть обезразмерена на эквивалентный сферический радиус  $a_e$ :  $F_l = \rho a_e^4 G_m^2 c_l(z)$ . Как видно на графике, предложенный скейлинг не приводит к наложению кривых, а значит, коэффициент подъёмной силы зависит и от размера частиц, и от их формы.

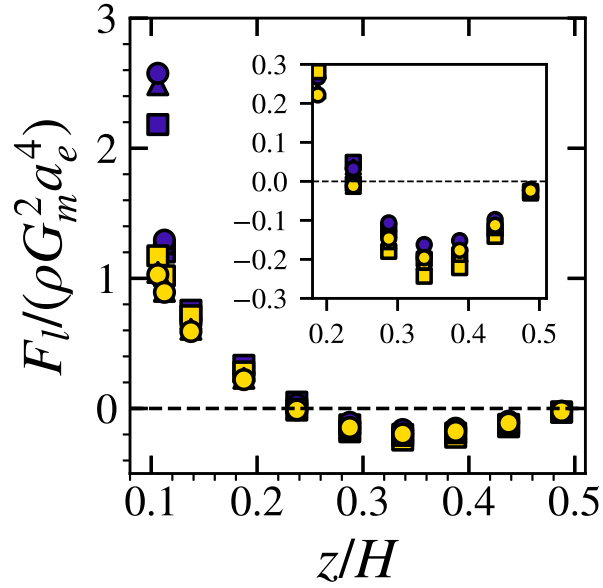


Рисунок 3.6 – Значения коэффициента подъёмной силы  $c_l = F_l / (\rho G_m^2 a_e^4)$  в зависимости от расстояния до стенки канала  $z/H$  для сфероидов с отношением полуосей  $b/a = 1$  (круги), 0.8 (треугольники), 0.5 (квадраты). Синие символы соответствуют сфероидам с радиусом вращения  $a/H = 0.1$ , жёлтые символы - сфероидам с  $a/H = 0.075$ .

Второй вариант предполагает линейную зависимость подъёмной силы от соотношения полуосей сфероида  $b/a$ . Предложена и затем проверена на следующая скейлинговая формула для  $F_l$ :

$$F_l(z) = \rho a^3 b G_m^2 c_l(z) = \rho a^4 \frac{b}{a} G_m^2 c_l(z). \quad (3.1)$$

Проверка этой скейлинговой формулы приведена на рисунке 3.7.

Как видно на рис.3.7(а), кривые для  $c_l$  наложились друг на друга в центральной части канала. На рис.3.7(б) показано, что отношение  $F_l$  сфероида к  $F_l$  сферы такого же значения  $a/H$  сходится к значению  $b/a$  при удалении от стенки, что подтверждает предложенную формулу. Настоящий вывод был проверен и подтверждён и при других числах Рейнольдса течения:  $Re = 11.5, 46$ . Заметим, что вблизи стенки ( $z < 2a$ ) скейлинговая формула не подтверждена. Предположительно это связано с тем, что на таких расстояниях от  $b/a$  зависит ещё и скорость скольжения частиц, которая входит в выражение для  $c_l$  (1.15). Рисунок 3.8 свидетельствует о том, что на больших расстояниях от стенки канала скорость скольжения одинакова и равна поправке Факсена для сферических частиц (формула 1.10), а вблизи стенки наблюдается расхождение, что и ожидалось.

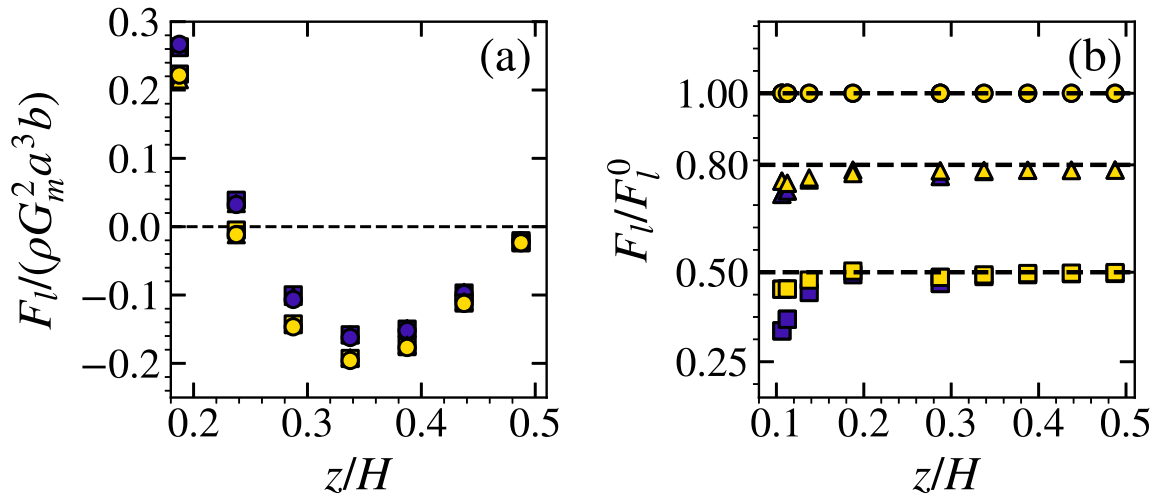


Рисунок 3.7 – (а) Значения коэффициента подъёмной силы  $c_l = F_l / (\rho G_m^2 a^3 b)$  в зависимости от расстояния до стенки канала  $z/H$  для сфероидов с отношением полуосей  $b/a = 1$  (круги), 0.8 (треугольники), 0.5 (квадраты). (б) Отношение подъёмной силы  $F_l$ , действующей на сфероид к силе  $F_l^0$ , действующей на сферу такого же радиуса вращения  $a$  в зависимости от расстояния до стенки канала  $z/H$ . Синие символы соответствуют сфероидам с радиусом вращения  $a/H = 0.1$ , жёлтые символы - сфероидам с  $a/H = 0.075$ .

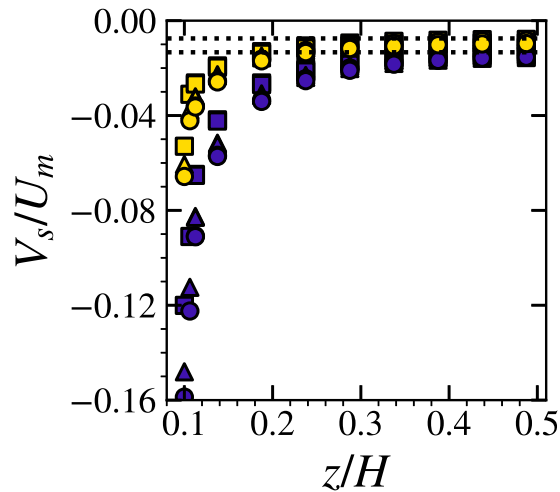


Рисунок 3.8 – График зависимости скорости скольжения в зависимости от расстояния до стенки канала  $z/H$  для сфероидов с отношением полуосей  $b/a = 1$  (круги), 0.8 (треугольники), 0.5 (квадраты). Синие символы соответствуют сфероидам с радиусом вращения  $a/H = 0.1$ , жёлтые символы - сфероидам с  $a/H = 0.075$ .

### 3.3 Движение вытянутых сфероидов

Движение вытянутых сфероидов характеризуется колебаниями вокруг условного положения равновесия. Расчёты показали, что для свободно движущегося вытянутого сфероида при малых числах Рейнольдса частицы устойчивым режимом вращения является «кувыркание» в плоскости течения. Схематически движение вытянутого сфероида представлено на рисунке 3.9.

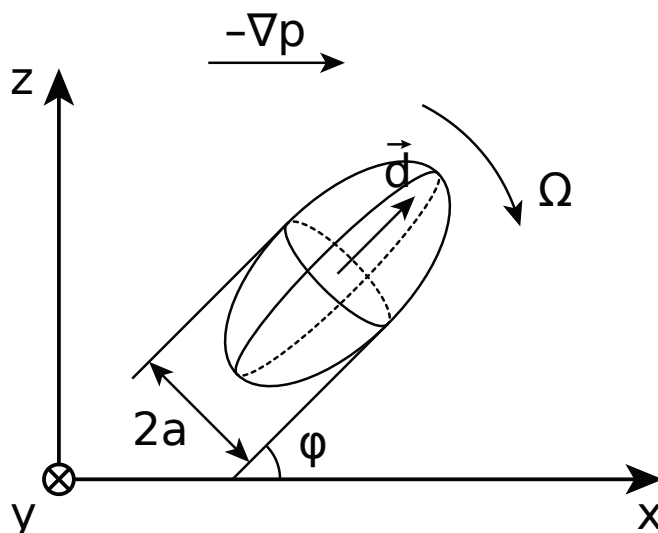


Рисунок 3.9 – Схематическое изображение режима «кувыркания» вытянутого сфероида.  $\Omega$  – направление вращения,  $d$  – вектор ориентации.

Ориентация частицы в режиме «кувыркания» меняется периодическим образом – вектор  $d$  совершает вращение в плоскости  $(xz)$ , а вертикальная компонента действующей на частицу силы зависит от мгновенной ориентации частицы. Непосредственное измерение нестационарной подъемной силы в режиме «кувыркания» не представляется возможным, так как для надёжного измерения силы в методе решёточного уравнения Больцмана требуется усреднение по большому числу шагов. Поэтому была измерена сила при фиксированной ориентации, для чего проведена следующая серия экспериментов. Сфероид фиксировался на расстоянии условного положения равновесия от стенки под углом  $\varphi$  к направлению течения так, что у частицы сохранялась свобода перемещения только вдоль линий тока. Разные ориентации частицы давали разное значение подъемной силы. Полученные результаты в диапазоне  $\varphi$  от 0 до  $\pi$  показаны на рисунке 3.10.

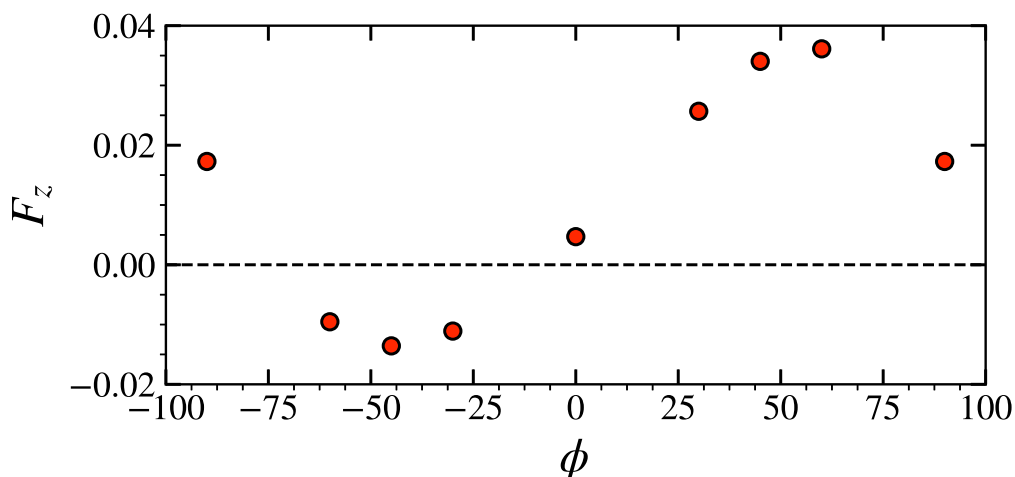


Рисунок 3.10 – Вертикальная компонента силы, действующей на сфероид в зависимости от угла между его осью вращения и стенкой канала. Параметры частицы:  $a/H = 0.1, b/a = 2$ .

График свидетельствует о том, что подъёмная сила частицы в отсутствие вращения является знакопеременной функцией от  $\varphi$ . В диапазонах  $F > 0$  подъёмная сила направлена вверх вдоль оси  $z$ , и частица поднимается. Однако при определённом значении  $\varphi$  сила меняет направление, поэтому частица начинает опускаться. При достижении угла  $\varphi$  значения, при котором  $F_i$  снова меняет знак, движение повторяется. Следует отметить, что измеренная сила является линейной комбинацией инерционной подъёмной силы и силы вязкого сопротивления, связанной с несимметричностью обтекания сфероида при фиксированной ориентации. Однако можно полагать, что для свободно вращающейся частицы инерционная подъёмная сила будет знакопеременной во времени, что и приводит к колебаниям  $z$ -координаты центра частицы.

## ВЫВОДЫ

1. Численно методом решёточного уравнения Больцмана установлено, что сплюснутый сфероид при миграции к положению равновесия приходит к устойчивому режиму движения – режиму качения. В этом режиме вектор ориентации сфероида направлен перпендикулярно потоку жидкости.
2. Получена скейлинговая оценка для инерционной подъёмной силы сплюснутого сфероида, хорошо согласующаяся с численными результатами вдали от стенки канала.
3. Установлено, что движение вытянутого сфероида отличается от движения сплюснутого периодическим колебанием относительно среднего условного положения равновесия. В этом режиме вектор ориентации частицы вращается вокруг оси, перпендикулярной направлению течения.
4. Показана причина колебаний траектории вытянутого сфероида: она обусловлена зависимостью знака подъёмной силы от ориентации частицы.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Благодарю каждого сотрудника лаборатории физико-химии модифицированных поверхностей ИФХЭ РАН им. А.Н. Фрумкина за совместную работу на протяжении трёх лет моего обучения!

В первую очередь я хочу выразить огромную благодарность научному руководителю Виноградской Ольге Игоревне за предложение интересной темы магистерской диссертации и структуризацию моей деятельности за весь период обучения в магистратуре. Благодарю Асмолова Евгения Савельевича за регулярные и продуктивные обсуждения результатов расчётов, за помощь при разборе мною деталей теории инерционной подъёмной силы. Отдельно хочу выделить и поблагодарить Низкую Татьяну Валентиновну за помощь в разрешении любых вопросов по работе.

Также невозможно не поблагодарить зарубежных коллег Йенса Хартинга и его лабораторию из Helmholtz Institute Erlangen-Nürnberg for Renewable Energy за предоставление исходных кодов метода решёточного уравнения Больцмана.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика, т.6. «Гидродинамика». М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1986.
- [2] J. Happel, H. Brenner. Low Reynolds Number Hydrodynamics with special applications to particulate media. The Hague: Martinus Nijhoff Publishers, 1965.
- [3] Г. Ламб. Гидродинамика. М: ОГИЗ Гостехиздат, 1947.
- [4] J. Poiseuille. Recherches sur les causes du mouvement du sang dans les vaisseaux capillaires // Annales des Sciences Naturelles. 1836. Vol. 5. P. 111–115.
- [5] G. Segré, A. Silberberg. Behaviour of macroscopic rigid spheres in Poiseuille flow. Part 1. Determination of local concentration by statistical analysis of particle passages through crossed light beams // Journal of Fluid Mechanics. 1962. Vol. 14. P. 115–135.
- [6] G. Segré, A. Silberberg. Behaviour of macroscopic rigid spheres in Poiseuille flow. Part 2. Experimental results and interpretation // Journal of Fluid Mechanics. 1962. Vol. 14. P. 136–157.
- [7] S. Rubinow, J. Keller. The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid // Journal of Fluid Mechanics. 1961. Vol. 11, № 3. P. 447–459.
- [8] P. Saffman. The lift on a small sphere in a slow shear flow // Journal of Fluid Mechanics. 1965. Vol. 22. P. 385–400.
- [9] P. Vasseur, R. Cox. The lateral migration of a spherical particle in two-dimensional shear flows // Journal of Fluid Mechanics. 1976. Vol. 78. P. 385–413.
- [10] R. Cox, H. Brenner. The lateral migration of solid particles in Poiseuille flow. I. Theory. // Chemical Engineering Science. 1968. Vol. 23. P. 147–173.
- [11] P. Cherukat, J. McLaughlin. The inertial lift on a rigid sphere in a linear shear flow field near a flat wall // Journal of Fluid Mechanics. 1994. Vol. 263. P. 1–18.
- [12] E. Asmolov. The inertial lift on a spherical particle in a plane Poiseuille flow at large channel Reynolds number // Journal of Fluid Mechanics. 1999. Vol. 381. P. 63–87.



- [13] Inertial focusing of finite-size particles in microchannels / Asmolov E., Dubov A., Nizkaya T. [et al.] // *Journal of Fluid Mechanics*. 2018. Vol. 840. P. 613–630.
- [14] H. Faxen. Die Bewegung einer starren Kugel langs der Achse eines mit zäher Flüssigkeit gefüllten Rohres // *Arkiv för matematik, astronomi och fysik*. 1922. Vol. 17, № 27. P. 1–28.
- [15] Standardless method for quantitative particle-size distribution studies by gravitational field-flow fractionation. Application to silica particles / Reschiglian P., Melucci D., Torsi G. [et al.] // *Chromatographia*. 2000. Vol. 51, № 1-2. P. 87–94.
- [16] P. Cherukat, J. McLaughlin. The inertial lift on a rigid sphere in a linear shear flow field near a flat wall // *Journal of Fluid Mechanics*. 1994. Vol. 263. P. 1–18.
- [17] Lattice-Boltzmann simulations of the drag force on a sphere approaching a superhydrophobic striped plane / A. Dubov, Schmieschek S., Asmolov E. [et al.] // *Journal of Chemical Physics*. 2014. Vol. 140, № 3. P. 034707.
- [18] G. Jeffery. The Motion of Ellipsoidal Particles Immersed in a Viscous Fluid // *Royal Society A*. 1922. Vol. 102. P. 161–179.
- [19] G. Taylor. The Motion of Ellipsoidal Particles in a Viscous Fluid // *Royal Society A*. 1923. Vol. 103. P. 58–61.
- [20] A. Binder. The motion of cylindrical particles in viscous flow // *Journal of Applied Physics*. 1939. Vol. 10. P. 711.
- [21] B. Trevelyan, S. Mason. Particle motions in sheared suspensions. I. Rotations // *Journal of Colloid Science*. 1951. Vol. 6, № 4. P. 354 – 367.
- [22] S. Mason, R. Manley. Particle Motions in Sheared Suspensions: Orientations and Interactions of Rigid Rods // *Proceedings of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1956. 12. Vol. 238. P. 117–131.
- [23] P. Saffman. On the motion of small spheroidal particles in a viscous liquid // *Journal of Fluid Mechanics*. 1956. Vol. 1, № 5. P. 540–553.
- [24] T. Starkey. The laminar flow of streams of suspended particles // *British Journal of Applied Physics*. 1956. feb. Vol. 7, № 2. P. 52–55.
- [25] G. Blair. The importance of the sigma phenomenon in the study of the flow of blood // *Rheologica Acta*. 1958. Vol. 1. P. 123–126.

- [26] H. Goldsmith, S. Mason. Axial Migration of Particles in Poiseuille Flow // *Nature*. 1961. Vol. 190. P. 1095–1096.
- [27] F. Bretherton. The motion of rigid particles in a shear flow at low Reynolds number // *Journal of Fluid Mechanics*. 1962. Vol. 14, № 2. P. 284–304.
- [28] E. Harper, C. I-Dee. Maximum dissipation resulting from lift in a slow viscous shear flow // *Journal of Fluid Mechanics*. 1968. Vol. 33, № 2. P. 209–225.
- [29] W. Oseen G. Methoden und Ergebnisse in der Hydrodynamik. Leipzig: Akademische Verlag,, 1927.
- [30] Continuous inertial focusing, ordering, and separation of particles in microchannels / Di Carlo D., Irimia D., Tompkins R. [et al.] // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 2007. Vol. 104, № 48. P. 18892–18897.
- [31] A. Bhagat, S. Kuntaegowdanahalli, I. Papautsky. Continuous particle separation in spiral microchannels using dean flows and differential migration // *Lab on a Chip*. 2008. Vol. 8, № 11. P. 1906–1914.
- [32] Continuous form-dependent focusing of non-spherical microparticles in a highly diluted suspension with the help of microfluidic spirals / Roth T., Sprenger L., Odenbach S. [et al.] // *Physics of Fluids*. 2018. Vol. 30. P. 045102.
- [33] Microfluidic electrical sorting of particles based on shape in a spiral microchannel / DuBose J., Lu X., Patel S. [et al.] // *Biomicrofluidics*. 2014. Vol. 8. P. 014101.
- [34] D. Matsunaga, J. Meng F. and Zöttl A. and Golestanian R. and Yeomans. Focusing and Sorting of Ellipsoidal Magnetic Particles in Microchannels // *Physical Review Letters*. 2017. Vol. 119. P. 198002.
- [35] R. Zhou, F. Bai, C. Wang. Magnetic separation of microparticles by shape // *Lab on a Chip*. 2017. Vol. 17. P. 401–406.
- [36] Inertial focusing of ellipsoidal *Euglena gracilis* cells in a stepped microchannel / Li M., Munoz H., Schmidt A. [et al.] // *Lab on a Chip*. 2016. Vol. 16. P. 4458–4465.
- [37] M. Jiang, K. Budzan, G. Drazer. Fractionation by shape in deterministic lateral displacement microfluidic devices. // *Microfluidics and Nanofluidics*. 2015. Vol. 19. P. 427–434.

- [38] B. Kim, J. Kim. Elasto-inertial particle focusing under the viscoelastic flow of DNA solution in a square channel // *Biomicrofluidics*. 2016. Vol. 10. P. 024111.
- [39] Microfluidic techniques for high throughput single cell analysis / Reece A., Xia B., Jiang Z. [et al.] // *Current Opinion in Biotechnology*. 2016. Vol. 40. P. 90 – 96. *Tissue, cell and pathway engineering (2016)*.
- [40] Fundamentals and applications of inertial microfluidics: a review / Zhang J., Yan S., Yuan D. [et al.] // *Lab on a Chip*. 2016. Vol. 16. P. 10–34.
- [41] Shape-based separation of micro-/nanoparticles in liquid phases / Behdani B., Monjezi S., Mason J. [et al.] // *Biomicrofluidics*. 2018. Vol. 12. P. 051503.
- [42] Continuous Inertial Focusing and Separation of Particles by Shape / Masaeli M., Sollier E., Amini H. [et al.] // *Physical Review X*. 2012. Sep. Vol. 2. P. 031017.
- [43] R. Glowinski. Finite element methods for incompressible viscous flow // *Numerical Methods for Fluids (Part 3)*. Elsevier, 2003. Vol. 9 of *Handbook of Numerical Analysis*. P. 3 – 1176.
- [44] *The Finite Element Method for Fluid Dynamics // The Finite Element Method for Fluid Dynamics (Seventh Edition)* / Ed. b. Zenkiewicz O., Taylor R, Nithiarasu P. Butterworth-Heinemann, 2014.
- [45] Y. Huang, R. Marson, R. Larson. Inertial migration of neutrally buoyant prolate and oblate spheroids in plane Poiseuille flow using dissipative particle dynamics simulations // *Computational Materials Science*. 2019. Vol. 162. P. 178 – 185.
- [46] R. Benzi, S. Succi, M. Vergassola. The lattice Boltzmann equation: theory and applications // *Physics Reports*. 1992. Vol. 222. P. 145 – 197.
- [47] A. Ladd, R. Verberg. Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions // *Journal of Statistical Physics*. 2001. . Vol. 104, № 5. P. 1191.
- [48] Effect of fluid and particle inertia on the rotation of an oblate spheroidal particle suspended in linear shear flow / Rosén T., Do-Quang M., Aidun C. [et al.] // *Physical Review E*. 2015. May. Vol. 91. P. 053017.
- [49] H. Huang, X. Lu. An ellipsoidal particle in tube Poiseuille flow // *Journal of Fluid Mechanics*. 2017. Vol. 822. P. 664–688.

- [50] Inertial migration of spherical and oblate particles in straight ducts / Lashgari I., Ardekani M., Banerjee I. [et al.] // *Journal of Fluid Mechanics*. 2017. Vol. 819. P. 540–561.
- [51] T. Rosén, F. Lundell, C. Aidun. Effect of fluid inertia on the dynamics and scaling of neutrally buoyant particles in shear flow // *Journal of Fluid Mechanics*. 2014. Vol. 738. P. 563–590.
- [52] M. Hecht, J. Harting. Implementation of on-site velocity boundary conditions for D3Q19 lattice Boltzmann simulations // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2010. Vol. 2010, № 01. P. 01018.
- [53] P. Pacheco. *Parallel Programming with MPI*. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 1997.
- [54] S. Livi, E. Marsch. Comparison of the Bhatnagar-Gross-Krook approximation with the exact Coulomb collision operator // *Physical Review A*. 1986. Jul. Vol. 34. P. 533–540.
- [55] O. Aouane, E Breitmoser, al. Chin J. Et. A Parallel Implementation of the Lattice-Boltzmann Method for Simulation of Interacting Amphiphilic Fluids. 2018.
- [56] H. Xiaoyi, L. Li-Shi. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation // *Physical Review E*. 1997. Dec. Vol. 56. P. 6811–6817.

## 4. ПРИЛОЖЕНИЕ

### 4.1 Описание метода решёточного уравнения Больцмана

#### 4.1.1 Уравнение Больцмана

Метод моделирования основан на главном уравнении кинетической теории газов – уравнении Больцмана, дающем микроскопическое описание эволюции состояния газа, т.е. описывающем динамику изменения распределения частиц газа по скоростям в каждой точке пространства.

Введём функцию плотности распределения молекул газа в фазовом пространстве –  $f(r, u, t)$ . Тогда  $f(r, u, t)d^3rd^3u$  есть доля частиц, находящаяся в момент времени  $t$  в кубе  $d^3rd^3u$ . Для того, чтобы найти плотность газа, необходимо проинтегрировать плотность распределения по пространству скоростей:

$$\rho = \int f(r, u, t)d^3u. \quad (4.1)$$

Зная плотность, можем записать выражение для макроскопической скорости:

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\rho} \int f(r, u, t)\mathbf{u}d^3u. \quad (4.2)$$

Субстанциональная производная плотности распределения:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla f + \mathbf{F}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}, \quad (4.3)$$

где  $\mathbf{F}$  – сила, действующая на молекулу со стороны поля.

По причине столкновений молекул постоянство функции распределения вдоль фазовых траекторий не будет выполняться, поэтому

$$\frac{df}{dt} = \Omega_k \quad (4.4)$$

или

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m}\nabla_u f = \Omega_{coll}. \quad (4.5)$$

Величина  $\Omega_{coll}$  называется интегралом столкновений. Её значение в приближении Батнагара-Гросса-Крука [54]:

$$\Omega_{coll} = -\frac{1}{\tau} \left( f(\mathbf{r}, t) - f^{eq}(\mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}, t)) \right), \quad (4.6)$$

$f^{eq}$  – равновесное распределение (Максвелла-Больцмана):

$$f^{eq} = \left( \frac{\rho}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-\frac{(u-U)^2}{2RT}}, \quad (4.7)$$

$\tau$  – время релаксации (обезразмеренное). Разность  $u - U$  означает, что мы находимся в системе отсчёта, где газ неподвижен.

Уравнение (4.5) при условии определённого оператора  $\Omega_{coll}$  называется кинетическим уравнением Больцмана.

#### 4.1.2 Дискретизация уравнения Больцмана

Чтобы численно решить уравнение, вводится равномерная пространственно-временная решётка, при бесконечно малом шаге которой совершается переход в уравнение Больцмана. Поведение системы будем определять в узлах решётки. Дальнейшие уравнения запишем в отсутствие внешнего поля и единичном шаге по времени. Пронумеруем все возможные направления скорости для  $i$ -й частицы от 1 до  $Q$ , тогда  $f_i(r, t)$  описывает частицы, летящие в направлении  $i$  за единичный шаг во времени, и уравнение Больцмана для этой группы частиц запишется в виде:

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{u}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} \quad (4.8)$$

$f_i^{eq}$  будем извлекать из узла  $r + u_i t$  в момент времени  $t + 1$ , тогда уравнение (4.8) можно разложить на 2 составляющие – распространение (advection/streaming) и столкновение частиц (collision). На этапе распространения:

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{u}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} \quad (4.9)$$

Этап столкновения частиц:

$$f_i(\mathbf{r}, t) - \hat{f}_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hat{f}_i - f_i^{eq}}{\tau}, \quad (4.10)$$

где за  $\hat{f}_i(\mathbf{r}, t)$  принята функция распределения частиц, ещё не столкнувшихся на текущем временном шаге.

Соответственно, дискретизированные макроскопические скорости будут равны

$$\rho = \sum_{i=1}^Q f_i, \quad (4.11)$$

$$U = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^Q f_i u_i. \quad (4.12)$$

Таким образом, каждый шаг вычислительной схемы состоит из этапов:

1. распространение частиц во всех допустимых направлениях;
2. пересчёт плотностей, скоростей, равновесных функций распределения;
3. реализация столкновения частиц.

#### 4.1.3 Выбор пространственной решётки

Теперь коснёмся вопроса, какие вектора скорости являются разрешёнными. Заметим, что любая ячейка должна содержать нулевой вектор, т.е. такое положение, при котором частица остаётся на месте. Кроме нулевого вектора, возможны вектора переходов в соседние узлы. Обозначим за  $D = m$  размерность пространства, а за  $Q = n$  – число разрешённых векторов в решётке. При реализации метода обычно используют решётки D2Q9, D3Q15 и D3Q19 (представлены на рисунках 4.1, 4.2).

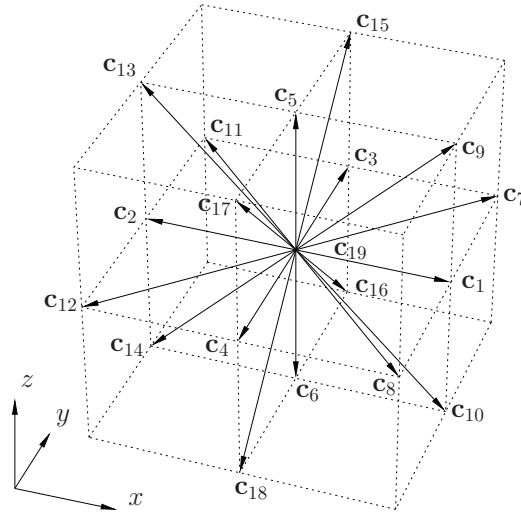


Рисунок 4.1 – Геометрия решётки D3Q19,  $c_1, \dots, c_{19}$  – набор базисных векторов. Рисунок сделан на основе [55].

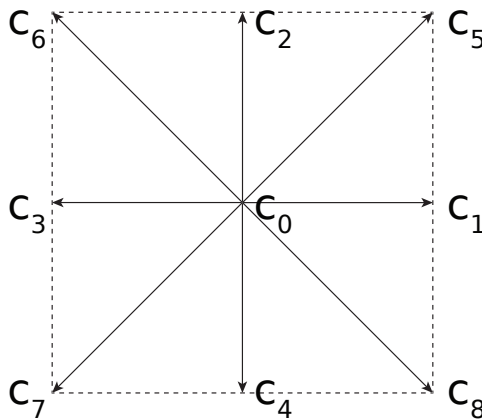


Рисунок 4.2 – Геометрия решётки D2Q9,  $c_0, \dots, c_8$  – набор базисных векторов.

#### 4.1.4 Переход к макроскопическим параметрам

Переход к макроскопическому описанию означает, что уравнение Больцмана, дискретизированное на решётке, в устремлении шага по времени к нулю должно переходить в непрерывное уравнение Больцмана, которое, в свою очередь, должно перейти в уравнению Навье-Стокса. Не углубляясь в детали, в общих чертах коснёмся перехода.



Эквивалентность  $\rho$  и  $u$  в дискретном и непрерывном случаях означает следующее:

$$\rho = \int f^{eq}(r, u, t) d^3u = \sum_{i=1}^Q f_i^{eq}, \quad (4.13)$$

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\rho} \int f^{eq}(r, u, t) \mathbf{u} d^3u = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^Q f_i^{eq} u_i. \quad (4.14)$$

Настоящие равенства выполняются только в том случае, если распределение Максвелла-Больцмана разложить в ряд Тейлора до 2-го порядка по макроскопической скорости [56]:

$$f^{eq} = \frac{\omega_i \rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp(-u^2/2RT) \left\{ 1 + \frac{(u \cdot U)}{RT} + \frac{(u \cdot U)^2}{2(RT)^2} - \frac{U^2}{2RT} \right\}, \quad (4.15)$$

$\omega_i$  – весовые коэффициенты.

Разложение в ряд возможно в том случае, если  $U/\sqrt{RT} \ll 1$ . Пересчитаем  $RT$  в единицах моделирования. Поскольку в численной модели за единицу времени частица проходит единицу длины решётки, то скорость распространения частицы равна единице. Из молекулярной физики известно:

$$c_s = \sqrt{\frac{\gamma RT}{\mu}}, \quad (4.16)$$

$\gamma = 1 + 2/i$  – постоянная адиабаты,  $\mu$  – молекулярная масса газа, принимаемая в модели за единицу.  $i$  – степень свободы газа, равная единице, так как молекулы двигаются лишь вдоль прямых, соединяющих узлы решётки. Отсюда  $\gamma = 3$  и  $\sqrt{RT} = 1/\sqrt{3}$ . Обычно скорость звука перенормируют на  $\gamma$ , т.е.  $c_s = 1/\sqrt{3}$ , тогда выражение для  $f^{eq}$  принимает вид:

$$f^{eq} = \frac{3^{3/2} \omega_i \rho}{(2\pi c_s^2)^{3/2}} \exp(-3u^2/2c_s^2) \left\{ 1 + \frac{(3u \cdot U)}{c_s^2} + \frac{9(u \cdot U)^2}{2(RT)^2} - \frac{3U^2}{2c_s^2} \right\} \quad (4.17)$$

Кинематическая вязкость жидкости вычисляется следующим образом:

$$\nu = (\tau - 1/2)c_s^2 = \frac{2\tau - 1}{6} \quad (4.18)$$

Число Рейнольдса:

$$Re = \frac{Lv}{\nu}, \quad (4.19)$$

$L, v$  – характеристические длина и скорость соответственно.