

УДК 533.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕНЬЮТОНОВСКИХ СВОЙСТВ ЖИДКОСТИ

SIMULATION OF NON-NEWTONIAN PROPERTIES OF THE FLUID

Колосов Б.В., Ларин П.А.

ФГБОУ ВПО «Уфимский государственный нефтяной технический университет»,
филиал, г. Октябрьский, Россия

B.V. Kolosov, P.A. Larin

FSBEI NPE Ufa state petroleum technological university, branch, Octobersky, Russia

e-mail: bvkolosov@mail.ru

Аннотация. В последние десятилетия получил распространение метод молекулярной динамики, который позволяет рассчитывать движение отдельных молекул при их взаимодействии друг с другом. Расчёты показали, что на малых временах существует корреляция в движении молекул, а гауссова форма распределения компонент скоростей молекул восстанавливается по истечении порядка 10^{-11} с.

Таким образом, представляет интерес выяснить, как может повлиять поведение молекул жидкости в малые промежутки времени (много меньшие гидродинамического времени) на общие уравнения движения.

Рассмотрено моделирование движения сжимаемой жидкости на основе молекулярно-кинетической теории. Показано, что на малых интервалах времени существует напряжение трения, которое позволяет объяснить неньютоновское поведение жидкостей. Это подтверждает наличие корреляции в движении молекул, полученной динамическими методами в предыдущих исследованиях. Благодаря данному подходу линейный закон трения Ньютона может быть выведен как следствие теоремы импульсов.

Abstract. In recent decades, has been extended molecular dynamics method, which allows to calculate the motion of individual molecules as they interact with each other. Calculations have shown that small-time there is a correlation in the motion of molecules, and the Gaussian shape of the distribution component velocities of the molecules return after the order 10^{-11} s.

Thus, it is interesting to find out how can affect the behavior of the liquid molecules in small intervals of time (much smaller than the hydrodynamic time) on the general equations of motion

Modeling of the real viscous liquid basing on molecular-kinetic theory is considered. In this paper we show, that during little time exists shear stress, which explain nonnewtonian

behavior for all liquids. This confirms the presence of correlation in the molecule movement, which was obtained by dynamic methods in the previous researches. Due to this approach the linear friction law of Newton can be derived as a consequence of impulse theorem.

Ключевые слова: моделирование, сплошная среда, молекулярно-кинетическая теория, напряжение трения, ньютоновское, неньютоновское поведение, столкновение молекул.

Keywords: modeling, continuous medium, the molecular-kinetic theory, the frictional stress, Newtonian, non-Newtonian behavior, the collision of molecules.

При изучении движения реальной вязкой жидкости чаще всего используется модель сплошной среды. Главные допущения этой модели – непрерывность всех характеристик этой среды (плотности, напряжений, скорости частиц и т.д.). Исходными при этом являются уравнения движения, законы сохранения массы и энергии. Дополнительно вводится реологическое уравнение, устанавливающее связь между напряжением σ_{ij} и скоростью деформации [1-3]. В общем случае это уравнение имеет вид

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + d_{ik}, \quad (1)$$

где $p\delta_{ik}$ – тензор напряжений в покоящейся жидкости,

p – среднее нормальное напряжение,

d_{ik} – девиатор напряжений, существование, которого связано с движением жидкости.

В зависимости от вида девиатора напряжений жидкости разделяют на две большие группы: ньютоновские и неньютоновские. Для ньютоновских жидкостей d_{ik} определяется формулой [4]

$$d_{ik} = \eta \left(\frac{\partial w_i}{\partial x_k} + \frac{\partial w_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial w_l}{\partial x_l} \right) + \xi \delta_{ik} \frac{\partial w_l}{\partial x_l}, \quad (2)$$

где x_i – координаты частицы жидкости,

w_i – компоненты вектора скорости,

η – коэффициент сдвиговой вязкости,

ξ – коэффициент объемной вязкости.

Влиянием объемной вязкости часто можно пренебречь. Также существует большой класс задач, для которых существенна одна, отличная от нуля компонента

скорости. Пусть такой компонентой является w_x . В этих условиях выражение (2) приводится к виду

$$\tau = \eta \frac{dw}{dy} = \nu \cdot \rho \frac{dw}{dy}, \quad (3)$$

где τ – касательное напряжение,

η, ν, ρ – соответственно динамическая, кинематическая вязкость и плотность жидкости,

$w = w_x$ – величина скорости вдоль поверхности твердого тела,

y – координата, нормальная вектору \vec{w} .

Для неньютоновских жидкостей предложено много различных выражений τ , например,

$$\tau = k \left(\frac{dw}{dy} \right)^n \quad (4)$$

или

$$\tau = \tau_0 + k_1 \left(\frac{dw}{dy} \right)^n, \quad (5)$$

где k, k_1 – коэффициенты, аналогичные сдвиговой вязкости, τ_0 – начальное напряжение сдвига.

Сравнительно давно был обнаружен ближний порядок в расположении молекул жидкости, а в работах Френкеля [5] введено понятие «дырок», что никак не согласуется с представлением жидкости как сплошной среды. В последние десятилетия получил распространение метод молекулярной динамики, который позволяет рассчитывать движение отдельных молекул при их взаимодействии друг с другом [6,7]. Расчёты показали, что на малых временах существует корреляция в движении молекул, а гауссова форма распределения компонент скоростей молекул восстанавливается по истечении порядка 10^{-11} с [7].

Таким образом, представляет интерес выяснить, как может повлиять поведение молекул жидкости в малые промежутки времени (много меньшие гидродинамического времени) на общие уравнения движения.

Эта задача может быть отнесена к молекулярно-кинетической теории. Известное кинетическое уравнение Больцмана (и подобные ему) в данном случае не может быть использовано, так как оно основано на учете столкновений молекул, т.е. по существу описывает поведение жидкости на достаточно больших интервалах времени.

Рассмотрим с этой целью вязкую сжимаемую жидкость (газ), движущуюся параллельно плоской поверхности, на которой выполняется условие прилипания, т.е. скорость w равна нулю.

Выделим плоскость $y = const$, расположенную на расстоянии y от обтекаемой поверхности, которое много больше длины свободного пробега L молекул жидкости. Тогда характерное гидродинамическое время t_Γ данного движения будет равно

$$t_\Gamma = \frac{y}{w}, \quad (6)$$

где w — скорость гидродинамического (макроскопического) движения жидкости на расстоянии y от стенки. В большинстве прикладных задач гидродинамики

$$t_\Gamma \approx (0,01 - 100) c. \quad (7)$$

По обе стороны от плоскости $y = const$ выделим два одинаковых объема жидкости V .

Основания этих объемов представляют собой прямоугольники, параллельные плоскости xz , а их высота равна длине свободного пробега L . Мы рассматриваем ситуацию, когда $L \ll y$, т.е. эти объемы можно считать малыми по отношению по всему объему жидкости. В то же время они содержат достаточно большое число молекул, чтобы можно было пользоваться понятиями термодинамики.

За счет флуктуаций различной природы эти объемы могут двигаться относительно друг друга, и тогда между ними будет возникать сила трения F (рисунок 1).

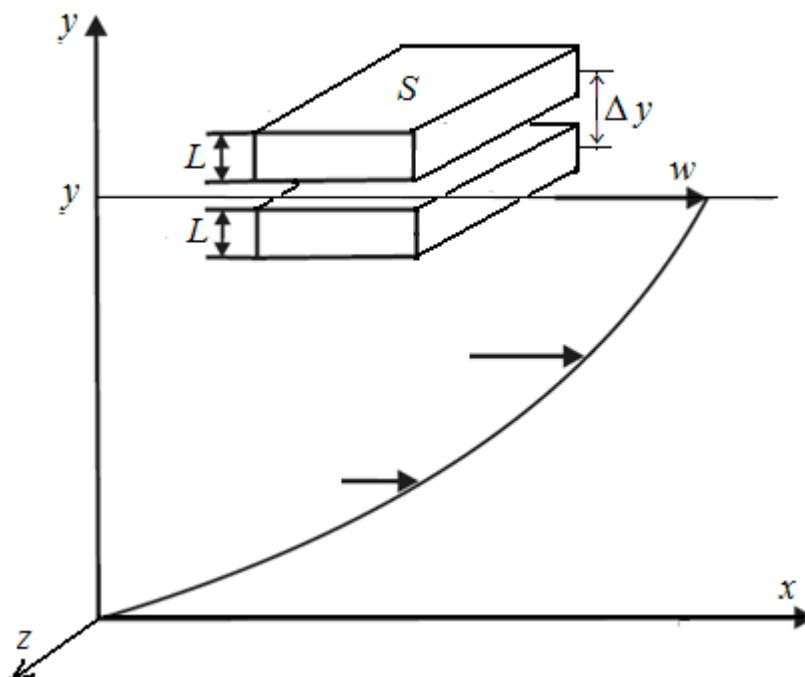


Рисунок 1. Зависимость скорости жидкости от расстояния до обтекаемой поверхности

Эта сила может быть определена из теоремы импульсов

$$\Delta(\rho \cdot w_x \cdot V) = F \Delta t, \quad (8)$$

где ρ – плотность,

Δt – малый отрезок времени, в течение которого происходит передача импульса между этими объемами,

w_x – скорость смещения центра масс одного объема относительно другого.

Величина времени Δt в формуле (8) определяется как результат деления расстояния между центрами масс этих объемов Δy на среднеквадратичную скорость движения молекул $w_{\text{ср}}$, которыми обмениваются эти объемы. Как известно, порядок этих величин при нормальных условиях следующий:

$$\Delta y = L \approx 10^{-7} \text{ м}; \quad w_{\text{ср}} \approx 500 \frac{\text{м}}{\text{с}}.$$

В результате получим

$$\Delta t = \frac{\Delta y}{w_{\text{ср}}} = \frac{L}{w_{\text{ср}}} = \frac{10^{-7}}{500} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ с}. \quad (9)$$

Как видим, это время мало по сравнению с гидродинамическим временем, указанным в (7).

Разложим левую часть равенства (8), оставив члены первого порядка малости:

$$\rho V \Delta w_x + V w_x \Delta \rho + \rho w_x \Delta V = F \Delta t.$$

Слагаемые левой части имеют размерность импульса силы, поэтому

$$\rho V \Delta w_x = F_1 \Delta t_1, \quad V w_x \Delta \rho = F_2 \Delta t_2, \quad \rho w_x \Delta V = F_3 \Delta t_3, \quad (10)$$

где

$$F_1 \Delta t_1 + F_2 \Delta t_2 + F_3 \Delta t_3 = F \Delta t.$$

Наличие трех слагаемых означает, что трение в жидкости определяется тремя различными механизмами. Для каждого слагаемого введём удельную величину напряжения трения, равную $\tau_i = \frac{F_i}{S}$. Так как $V = L \cdot S$, то $\tau_i = \frac{L}{V} F_i$.

Подставив значения F_i из (10), будем иметь

$$\tau_1 = \rho L \frac{\Delta w_x}{\Delta t_1}, \quad \tau_2 = w_x L \frac{\Delta \rho}{\Delta t_2}, \quad \tau_3 = \frac{\rho L w_x}{V} \frac{\Delta V}{\Delta t_3}.$$

Рассмотрим сначала первое слагаемое. Изменение скорости Δw_x происходит за время Δt , поэтому, $\Delta t_1 = \Delta t$. Но по формуле (9) $\Delta t = \frac{\Delta y}{w_{cp}}$, следовательно,

$$\tau_1 = \rho L w_{cp} \frac{\Delta w_x}{\Delta y}. \quad (11)$$

Существенно, что данное равенство может быть использовано не только для потока, но и для неподвижной в целом жидкости, так как согласно молекулярно-кинетической теории объемы V могут перемещаться относительно друг друга независимо от макроскопического движения.

Тогда величина $\frac{\Delta w_x}{\Delta y}$ является непрерывной случайной величиной (потому что скорость w_x меняется непрерывно)

$$\frac{dw_x}{dy} = p \quad (13)$$

с плотностью распределения $f(p)$.

Переходя к гидродинамическому масштабу времени, следует сделать осреднение по всем p . В результате среднее значение напряжения трения τ_1 будет равно

$$\bar{\tau}_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \tau_1(p) f(p) dp = \rho L w_{cp} \int_{-\infty}^{+\infty} p f(p) dp = \rho L w_{cp} \cdot \bar{p}, \quad (14)$$

где \bar{p} – математическое ожидание величины p .

При движении, учитывая (13), математическое ожидание \bar{p} является гидродинамическим градиентом скорости $\frac{dw}{dy}$, где w – гидродинамическая, т.е. макроскопическая, скорость. Так как величина $\rho L w_{cp}$ совпадает с определением динамической вязкости η в молекулярно-динамической теории, то вместо (14) можно записать:

$$\bar{\tau}_1 = \eta \frac{dw}{dy} \quad (15)$$

Таким образом (15) совпадает с (3), т.е. закон Ньютона для вязкого трения является следствием теоремы импульсов.

Второе слагаемое в уравнении (10) принимает вид:

$$\tau_2 = w_x \cdot L \frac{\Delta \rho}{\Delta t_2} \quad (16)$$

Из этого равенства видно, что причиной возникновения напряжения τ_2 является изменение плотности. Необходимо отметить, что это есть локальное изменение плотности для малого объема V . Время изменения этой плотности Δt_2 должно быть меньше времени свободного пробега, иначе, это изменение было бы осреднено, и плотность приняла бы постоянное (макроскопическое) значение.

Поэтому можно считать:

$$\Delta t_2 \ll 2 \cdot 10^{-10} \text{ с.} \quad (17)$$

При таких малых временах существенны квантовые эффекты и нижнюю границу Δt_2 в (17) можно оценить из соотношения неопределенностей

$$\frac{kT}{2} = \frac{h}{\Delta t_2}, \quad (18)$$

где k – постоянная Больцмана,
 T – абсолютная температура жидкости,
 h – постоянная Планка.

При $T = 300\text{ K}$ из (18) получим $\Delta t_2 \approx 3 \cdot 10^{-13}\text{ с}$. Таким образом, можно считать, что Δt_2 заключено в пределах

$$3 \cdot 10^{-13} < \Delta t_2 < 2 \cdot 10^{-10}\text{ с}. \quad (19)$$

Третье слагаемое в (10) преобразуется в виду

$$\tau_3 = w_x \cdot \rho \frac{\Delta L}{\Delta t_3} \quad (20)$$

и определяет напряжения в жидкости при изменении длины свободного пробега. Такое изменение может возникнуть только при наличии периодических внешних сил, так как в равновесном состоянии длина свободного пробега остается постоянной (в той мере, в которой неизменны термодинамические параметры).

Проведем краткое обсуждение полученных результатов.

Относительно величины τ_3 можно сказать, что она определяется объемной вязкостью, так как возникает при периодическом изменении объема. Эти периоды относительно велики, потому что длина свободного пробега определяется механизмом столкновений и поэтому Δt_3 , входящее в (20), больше времени свободного пробега

$$\Delta t_3 > 2 \cdot 10^{-10}\text{ с}. \quad (21)$$

Такое периодическое изменение объема, очевидно, будет иметь место в акустических явлениях. Действительно, известно, что объемная вязкость учитывается, например, при поглощении ультразвука в жидкости. В гидродинамике этой вязкостью обычно пренебрегают [3], и мы в дальнейшем изложении её рассматривать не будем.

Наибольший интерес представляет второе слагаемое в (10), так как оно определяет новый, ранее неизвестный механизм напряжения трения в жидкости. Поскольку это напряжение возникает в очень короткие интервалы времени, то оно присутствует практически во всех гидродинамических движениях. Не менее важно и то, что именно этот механизм рождает флуктуацию (в том числе в неподвижной жидкости), а механизм, определяемый первым слагаемым $\left(\tau_1 = \eta \frac{dw}{dy} \right)$, только сглаживает уже имеющуюся флуктуацию. Этот (второй) механизм является следствием возникновения результирующего направления при движении некоторого объема свободных частиц (т.е. механизм столкновения не участвует). При этом величина τ_2 никак не связана с внешним градиентом скорости $\frac{dw}{dy}$, и её можно

считать постоянной в пределах этого объема

$$\tau_2 = \text{const} \quad (22)$$

Таким образом, напряжение сдвига в жидкости включает в себя, по меньшей мере, два механизма $\tau_1 = \eta \frac{dw}{dy}$ и $\tau_2 = const$ (рисунок 2).

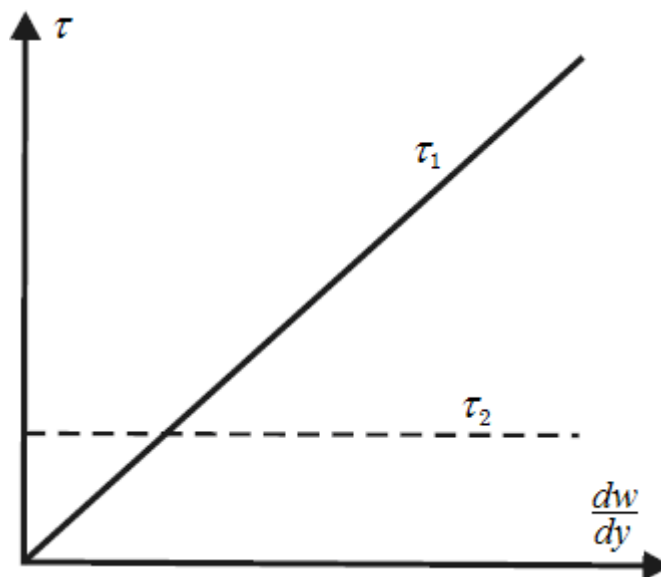


Рисунок 2. Зависимость напряжения трения от градиента скорости

В области пересечения графиков на рисунке 2 можно ожидать появления неньютоновских свойств за счет взаимодействия разных механизмов переноса импульса. Имеются некоторые подтверждения этой ситуации [8,9], где неньютоновское поведение обнаружено для простых жидкостей, однако для количественной оценки необходимы дальнейшие исследования.

Заключение и выводы

В модели сплошной среды закон вязкого трения Ньютона для жидкостей, или закон с начальным напряжением сдвига, являются предположениями, основанными на экспериментальных данных. Область их применения не определена. Использование в настоящей работе молекулярно-кинетической теории позволило получить закон Ньютона, как следствие теоремы импульсов, при любых значениях градиента скорости сдвига.

Из этой же теоремы найден второй механизм передачи импульса, который действует в очень малые промежутки времени и не зависит от градиента скорости сдвига. Взаимодействие этих двух механизмов может привести, при определенных условиях, к появлению неньютоновского поведения.

Литература

1. Милн-Томсон Л.М. Теоретическая гидродинамика. М.: Мир, 1964. 655 с.
2. Бэтчелор Дж. Введение в динамику жидкости. М.: Мир, 1973. 758 с.
3. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Мир, 1974. 711 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Гидродинамика. М.: Наука, 1988. Т. 6. 736 с.
5. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкости. Собрание сочинений. М.: изд.-во АН СССР, 1959. 460 с.
6. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. Метод молекулярной динамики в статистической физике//Успехи физических наук. 1978. Т. 125, вып.3, №6. С. 409-448.
7. Крокстон К. Физика жидкого состояния. М.: Мир, 1978. 400 с.
8. Дерягин Б.В., Чураев Н.В, Муллер Б.М. Поверхностные силы. М.: Наука, 1985. 396 с.
9. Эванс Д.Дж, Хенли Г.Дж, Гесс Э. Неньютоновские явления в простых жидкостях. Физика за рубежом, 1986, Серия А: сб. статей. М.: Мир, С.7-28 = Evans D.J., Hanley H.I., Hess S. // Physics Today. January. 1984. P. 26.

References

1. L.M. Milne-Thomson Theoretical hydrodynamics. Wiley, 1964. 655 p.
2. Batchelor, An introduction to fluid dynamics. Wiley, 1973. 758 p.
3. Schlichting, Theory of the boundary layer. Wiley, 1974. 711 p.
4. L.D. Landau, E.M. Lifshitz Theoretical Physics. Hydrodynamics. Moscow: Nauka, 1988. T. 6. 736 p. [in Russia]
5. I. Frenkel 'The kinetic theory of liquids. Works. M. eds AN SSSR, 1959. 460 p. [in Russia]
6. Lagarkov A.N. Sergeev, V. Molecular dynamics method in statistical physics // Successes of physical sciences. 1978. T. 125, Issue 3, № 6. P. 409-448. [in Russia]
7. Croxton K. Physics of the liquid state. Springer-Verlag, 1978. 400 p.
8. Derjaguin B.V., Churaev N.V., Muller BM Surface Forces. Moscow: Nauka, 1985. 396 p. [in Russia]
9. Evans D.Dzh, Henley G.Dzh, Hess E. Non-Newtonian effects in simple liquids. Physics Abroad, 1986 Serie A: Wed. articles. Wiley, with P. 7-28. = Evans D.J., Hanley H.I., Hess S. //Physics Today. January. 1984. P. 26.

Сведения об авторах

Колосов Б. В., ст. преподаватель кафедры «Механика и технология машиностроения», ФГБОУ ВПО УГНТУ, филиал, г. Октябрьский, Россия.

B.V Kolosov, head teacher of chair «Mechanics and mechanical engineering», FSBEI HPE USPTU, branch, Octobersky, Russia.

e-mail: bvkoloso@mail.ru

Ларин П. А., ст. преподаватель кафедры «Информационные технологии», ФГБОУ ВПО УГНТУ, филиал, г. Октябрьский, Россия.

P.A. Larin, head teacher of chair «Information Technology, FSBEI HPE USPTU, branch, Octobersky, Russia.

e-mail: larinpa@mail.ru