



**ЧИСЛЕНО МОДЕЛИРАНЕ НА  
НЕЛИНЕЙНИ ГРАНИЧНИ ЗАДАЧИ  
ОТ ВТОРИ И ЧЕТВЪРТИ РЕД:  
ПРИЛОЖЕНИЕ ВЪВ ФИЗИКОХИМИЯТА И БИОЛОГИЯТА**

*Галина Стоянова Люцканова–Жекова*

**АВТОРЕФЕРАТ**

на дисертация за присъждане на образователна и научна степен „доктор“  
в професионално направление 4.5 Математика  
(Математическо моделиране и приложение на математиката)

**НАУЧНИ РЪКОВОДИТЕЛИ:**

*чл.-кор. проф. дмн Красимир Д. Данов*

*доц. д-р Иван Б. Бажлеков*

Дисертационният труд разглежда три приложения на гранични задачи във физикохимията и биологията:

- да се пресметне разпределението на потенциалите в две флуидни фази (полярна и неполярна фаза) и в сферична, колоидна, диелектрична частица, прикрепена към плоска граница между тях;
- да се определи силата на триене, която действа на сферична колоидна частица, прикрепена към плоска граница между два несвиваеми вискозни флуида и движеща се успоредно на нея с константна скорост;
- да се изясни ефектът на реологичното поведение на границата (тангенциална подвижност или неподвижност) върху движението на дълго мехурче в тясна цилиндрична тръбичка под действието на поток, задвижван едновременно от гравитация и налягане.

Дисертационният труд е изложен на английски върху 160 страници и съдържа 27 фигури и 1 таблица. Той включва въведение, три глави, които съответстват на трите разгледани приложения, заключение, апендикс и списък с използвана литература от 142 източника. Към труда са приложени три допълнителни материала, в които са разгледани темите „Тензори в криволинейни координати“, „Електростатика“ и „Механика на непрекъснатите среди“.

Изследванията, които са описани в дисертационния труд, са извършени в докторска програма „Математическо моделиране и приложение на математиката“ в секция „Математическо моделиране и числен анализ“ в ИМИ-БАН.



Дисертационният труд е обсъден и насочен за защита на заседание на разширено звено към секция „Математическо моделиране и числен анализ“ на ИМИ-БАН, проведено на 12.09.2022г.

Защитата на дисертационния труд ще се състои на ..... от ..... часа в аудитория ..... на ИМИ-БАН на открито заседание на научно жури.

Материалите по защитата са на разположение на интересуващите се в библиотеката на ИМИ-БАН.

# Съдържание

<b>1</b>	<b>Въведение</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Влияние на йонната сила върху електропотпящата сила</b>	<b>6</b>
2.1	Обзор на литературата . . . . .	6
2.2	Математическа формулировка на задачата . . . . .	6
2.3	Асимптотично поведение на модела . . . . .	8
2.4	Числен метод . . . . .	9
2.5	Числени резултати . . . . .	11
2.6	Заклучение . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Движение на сферична частица, закрепена на границата между два вискозни флуида</b>	<b>13</b>
3.1	Преглед на литературата . . . . .	13
3.2	Математическа формулировка на задачата . . . . .	13
3.3	Асимптотично поведение на модела . . . . .	16
3.4	Числени резултати . . . . .	16
3.5	Заклучение . . . . .	17
<b>4</b>	<b>Движение на дълги мехурчета в потоци, движени от налягане и гравитация, в цилиндрични капилляри до средни по големина капилярни числа</b>	<b>18</b>
4.1	Преглед на литературата . . . . .	18
4.2	Математически модел . . . . .	19
4.3	Области на валидност на параметрите . . . . .	22
4.4	Числени резултати . . . . .	22
4.4.1	Сравнение с експериментални данни и теоретични резултати . . . . .	23
4.4.2	Едновременно действие на поток на Поазьой и гравитация . . . . .	24
4.5	Заклучение . . . . .	26
<b>5</b>	<b>Заклучения и основни приноси</b>	<b>27</b>
5.1	Общи изводи . . . . .	27
5.2	Основни приноси . . . . .	28
<b>6</b>	<b>Разпространение на резултатите от дисертацията</b>	<b>30</b>
6.1	Списък с публикации . . . . .	30
6.2	Списък с цитирания на публикациите . . . . .	30
6.3	Списък с изнесени доклади от автора . . . . .	31

# 1. Въведение

Комплексен флуид (тримерна фаза) е флуид, който не е Нютонов или повърхностното напрежение върху неговите материални граници (двумерни фази) не е константа. Примери за комплексни флуиди са пени, емулсии, спойки, биологични клетки, тъкани и течности и т.н., които имат приложения в химичната, фармацевтичната и нефтената промишленост, в ежедневието и медицината. В механиката на непрекъснатите среди един комплексен флуид се моделира чрез законите за баланс на масата, момента на импулса и енергията, които не са затворени. За да се затворят физикохимичните модели и да се въведе математическа формулировка на съответните задачи, изследователите в областта на естествените науки използват различни полумпирични закони (линейни или нелинейни), които свързват тензорите на напреженията и деформациите. Дори в най-простия линеен реологичен случай (този на Нютонови флуиди) уравненията на Навие–Стокс за несвиваеми флуиди са от четвърти ред (премахването на налягането от уравненията води до нелинейни частни диференциални уравнения, които съдържат би-Лапласиан на вектора на скоростта). За стандартните приложения обемните фази са несвиваеми, но материалите граници не са — те могат да се деформират, да имат различна сложна форма и реологично поведение в зависимост от свойствата на биологичните мембрани, от адсорбираните повърхностно активни вещества (ПАВ), полимери и частици, т.н. Като цяло, появата на граници води до сложни гранични задачи. За да се съставят адекватни реологични модели, експериментаторите имат нужда от прости математически модели и бързи числени процедури, за да напаснат получените данни и да извлекат информацията относно реологичните параметри (например вискозитет и еластичност при разширение и прехлъзване, прагово напрежение, т.н.).

В дисертацията са разгледани три различни приложения на граничните задачи в случаи на линейни или силно нелинейни модели от втори или по-висок ред. Първата задача (Глава 2) е свързана с взаимодействието между големи протеини и колоидни частици (частици с микронни или субмикронни размери), които са прикрепени към границата между два флуида. За малки размери на частиците (под 3 микрона), протеините и колоидните частици (наречени събирателно частици) взаимодействат чрез ван дер Ваалсови, електростатични и капилярни сили. С изключение на ван дер Ваалсовото взаимодействие електростатичните и капилярните сили се появяват в следствие на повърхностната плътност на заряда на частиците и техните трифазни контактни ъгли. Поради малките обеми на частиците гравитацията е пренебрежима и деформацията на границата е резултат от разпределението на електростатичното налягане върху нея и свързаната с него електропотайща сила. Стратегията за компютърно моделиране включва да се реши съответната задача за плоска граница, да се пресметне разпределението на електростатичното налягане и електропотайщата сила, да се използва полученото разпределение в условието за баланс на заряда с цел да се пресметне деформацията на повърхността и т.н. От експериментална гледна точка първите две стъпки са най-важни.

Втората задача (Глава 3) е част от две много сложни задачи. Първата е да се моделира подреждането на голям брой молекули и колоидни частици на повърхност и силите на триене, които им действат в следствие на Брауново движение на частиците под действието на ван дер Ваалсови, електростатични и капилярни взаимодействия. Втората задача е свързана с факта, че няма пряк микроскопски метод за измерване на

стойността на трифазния контактен ъгъл. На скоро разработеният метод на оптичния капан използва лазерни пинсети, които действат на колоидални частици на граници и биологични мембрани. От тангенциалната скорост на частица и приложената сила на лазерните пинсети експериментаторите измерват силата на триене на колоидната частица (маркер). Поради това е необходим бърз и прецизен числен метод за пресмятане на силата на триене при даден трифазен контактен ъгъл, като тази процедура може да бъде използвана за напасване експериментални данни с цел да се получи най-вероятната стойност на трифазния контактен ъгъл.

Една от най-трудните задачи в моделирането на физикохимични и биологични процеси е получаването на формата на материали граници в статични и динамични режими. Сложните форми, хидродинамичната стабилност и нестабилност на границите и взаимодействие им с други материални обекти са от съществено значение за описанието на техните физикохимични свойства. Един пример е разгледан в Глава 4 — движението на дълго мехурче в цилиндрична капиляра под действието на поток, задвижван от налягането (поток на Поазьой) и/или силата на земното притегляне. Повърхността на мехурчето може да бъде свободна, т.е. тангенциално подвижна повърхност — класическа формулировка; тангенциално неподвижна, но деформируема повърхност, например модел на биологични мембрани, граници с адсорбирани ПАВ, т.н. Аналитичните решения на класическите задачи (свободни граници) за движение под действието на гравитация и налягане в случай на много малка скорост на мехурчето са известни като задачи на Bretherton [1.1]. Единствените формули, които разширяват валидността на формулите на Bretherton и са приложими в случай на движение на мехурче със свободна повърхност под действието на налягане, са публикувани в [1.2, 1.3]. Тази задача също е част от по-сложни изчисления, например движение на капки и мехурчета в скалиста пориозна среда в задачите за добиване на петрол чрез инжектиране на флуиди или газове или движението на биологични течности в човешките вени. Поради факта, че известните в литературата числени пресмятания отнемат много време, то е трудно (и дори невъзможно в повечето случаи) тези пресмятания са бъдат обобщени за комплексни флуиди и материални граници.

Дисертацията е структурирана, както следва. Съответните задачи са описани в глави 2, 3 и 4, като всяка глава съдържа кратко резюме, обзор на литературата, описание на задачата, метод за нейното решаване, заключение и списък от референции. Всъщност тези глави съответстват на публикуваните резултати, но не ги повтарят. Те съдържат детайлни математически пресмятания и описания на алгоритмите, които не са включени в публикациите поради ограничения в обема. Актуалността на разглежданите задачи, нови елементи в тяхното решаване от физикохимична и математична гледна точка, сравнени с наличните резултати в литературата, и основните стратегии за решаване на задачите са описани в Глава 5, където основните приноси са обобщени в три точки. Поради възможността за повтаряне на източниците, цитирани в различните глави, списък от всички източници е приложен към труда. Дисертацията съдържа апендикс и три допълнителни материала.

## Литература:

- [1.1] F. Bretherton, *J. Fluid Mech.* 10, 166–188 (1961).
- [1.2] J. Ratulowski, H.-C. Chang, *Phys. Fluids A - Fluid* 1, 1642–1655 (1989).
- [1.3] W. Kolb, R. Cerro, *Phys. Fluids A - Fluid* 5, 1549–1567 (1993).

## 2. Влияние на йонната сила върху електропотопящата сила

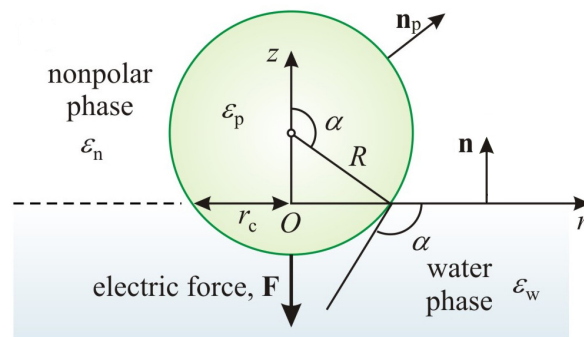
### 2.1 Обзор на литературата

Прогнозирането на свойствата на диелектрични частици на границите между две флуидни фази е от съществено значение за характеризирането на монослоеви от частици и образуването на Пикерингови емулсии, които имат широко приложение в козметиката, хранителната индустрия, биомедицината и т.н.

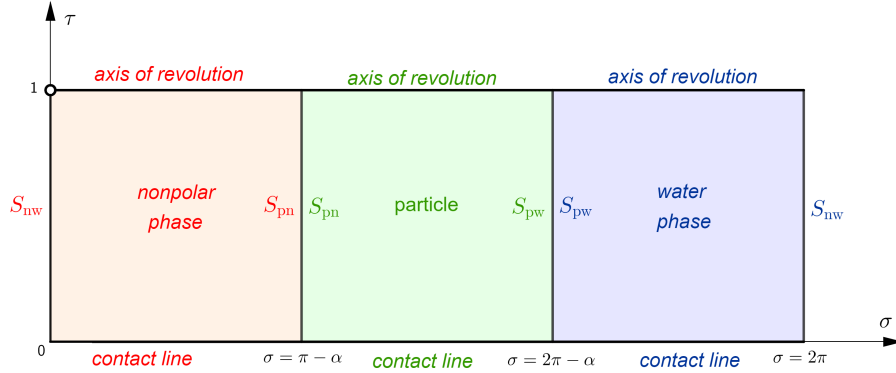
В тази глава е разгледана малка частица (с радиус по-малък от 2–3 микрона), закрепена на границата вода–неполярна фаза. Предполага се, че има повърхностни заряди на границата между частицата и неполярната фаза [2.1]. В идеализирания случай на водна фаза с безкрайна диелектрична проникваемост тази задача е решена полуаналитично [2.2]. Целта на настоящото изследване е да се анализира влиянието на водна фаза с крайна проводимост върху разпределението на електростатични потенциали във всички фази. Предложената числена схема от втори ред относно пространството и численото време пресмята разпределението на електростатичните потенциали в случай на плоска повърхност, което е важна стъпка към пресмятане на електропотопящата сила.

### 2.2 Математическа формулировка на задачата

Сферична, заредена, диелектрична частица с радиус  $R$  и диелектрична константа  $\epsilon_p$  е закрепена на границата между неполярна (масло, въздух) и водна фаза със съответни диелектрични константи  $\epsilon_n$  и  $\epsilon_w$  (виж Фиг. 2.1). Положението на частицата е определено от трифазения контактен ъгъл  $\alpha$ , а радиусът на трифазната контактна линия е  $r_c = R \sin \alpha$ . На границата между частицата и водната фаза,  $S_{pw}$ , както и границата между неполярна и водната фаза,  $S_{nw}$ , няма адсорбирани заряди, докато границата между частицата и неполярната фаза,  $S_{pn}$ , съдържа повърхностни заряди с константна плътност,  $\sigma_{pn}$  [2.3], които пораждат електростатични потенциали в обемите.



Фигура 2.1: Скица на частица, закрепена на границата между водна и неполярна фаза.



Фигура 2.2: Правоъгълни числени области в модифицирани тороидални координати.

Безразмерните потенциали  $\varphi_j$ , мащабирани с  $r_c \sigma_{pn} / (\varepsilon_0 \varepsilon_n)$ , се моделират като решения на уравненията на Лаплас в обемите,  $V_j$ , т.е.:

$$\nabla^2 \varphi_w = 0 \text{ в } V_w, \quad \nabla^2 \varphi_n = 0 \text{ в } V_n, \quad \nabla^2 \varphi_p = 0 \text{ в } V_p, \quad (2.1)$$

където  $\varepsilon_0$  е диелектричната проникваемост във вакуум, а индексите „p“, „n“ и „w“ означават съответно частицата, неполярната и водната фаза. На междуфазовите граници прилагаме условията за непрекъснатост на потенциалите:

$$\varphi_p = \varphi_w \text{ на } S_{pw}, \quad \varphi_p = \varphi_n \text{ на } S_{pn}, \quad \varphi_n = \varphi_w \text{ на } S_{nw} \quad (2.2)$$

и условия за баланс на заряда

$$\varepsilon_{wn} \mathbf{n} \cdot \nabla \varphi_w = \mathbf{n} \cdot \nabla \varphi_n \text{ на } S_{nw}, \quad (2.3)$$

$$\varepsilon_{wn} \mathbf{n}_p \cdot \nabla \varphi_w = \varepsilon_{pn} \mathbf{n}_p \cdot \nabla \varphi_p \text{ на } S_{pw}, \quad (2.4)$$

$$\varepsilon_{pn} \mathbf{n}_p \cdot \nabla \varphi_p - \mathbf{n}_p \cdot \nabla \varphi_n = 1 \text{ на } S_{pn}, \quad (2.5)$$

където  $\mathbf{n}_p$  е външната единична нормала към повърхността на частицата,  $\mathbf{n}$  е единичната нормала към  $S_{nw}$ , сочеща в неполярната фаза, и диелектричните параметри  $\varepsilon_{pn}$  и  $\varepsilon_{wn}$  са дефинирани, както следва

$$\varepsilon_{pn} = \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_n}, \quad \varepsilon_{wn} = \frac{\varepsilon_w}{\varepsilon_n}. \quad (2.6)$$

Електростатичните потенциали са нули на достатъчно голямо разстояние от частицата.

Задачата е осевосиметрична и поради това нейното решение зависи само от радиалното разстояние  $r$  и аксиалната координата  $z$ . Сложната геометрия на областите на диелектричните фази (Фиг. 2.1) е преобразувана в правоъгълници (Фиг. 2.2) чрез въвеждането на тороидални координати  $\tau$  и  $\sigma$ :

$$r = \frac{1 - \tau^2}{h}, \quad z = \frac{2\tau \sin \sigma}{h}, \quad h(\tau, \sigma) = 1 + \tau^2 - 2\tau \cos \sigma, \quad (2.7)$$

които са подходящо подбрани за задачата. Уравненията на междуфазовите граници са  $\sigma = 0$  и  $\sigma = 2\pi$  от двете страни на  $S_{nw}$ ;  $\sigma = \pi - \alpha$  на  $S_{pn}$ ;  $\sigma = 2\pi - \alpha$  на  $S_{pw}$ . Оста на въртене съответства на  $\tau = 1$ , а трифазната контактна линия—на полюса  $A_+$  ( $\tau = 0$ ).

Като се използват общите формули за оператор на Лаплас и производна по направление в тороидални координати, е получена следната задача:

$$L_0[\varphi_w] = 0, \quad L_0[\varphi_n] = 0, \quad L_0[\varphi_p] = 0, \quad (2.8)$$

където операторът  $L_0$  е дефиниран чрез формулата

$$L_0[\varphi] = \frac{h^3}{4\tau(1-\tau^2)} \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ \frac{\tau(1-\tau^2)}{h} \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} \right] + \frac{h^3}{4\tau^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( \frac{1}{h} \frac{\partial \varphi}{\partial \sigma} \right). \quad (2.9)$$

На междуфазовите граници  $S_{nw}$ ,  $S_{pw}$  и  $S_{pn}$  граничните условия имат вида

$$\varphi_n|_{\sigma=0} = \varphi_w|_{\sigma=2\pi}, \quad \frac{\partial \varphi_n}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=0} = \varepsilon_{wn} \frac{\partial \varphi_w}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=2\pi}, \quad (2.10)$$

$$\varphi_p|_{\sigma=2\pi-\alpha} = \varphi_w|_{\sigma=2\pi-\alpha}, \quad \varepsilon_{pn} \frac{\partial \varphi_p}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=2\pi-\alpha} = \varepsilon_{wn} \frac{\partial \varphi_w}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=2\pi-\alpha}, \quad (2.11)$$

$$\varphi_n|_{\sigma=\pi-\alpha} = \varphi_p|_{\sigma=\pi-\alpha}, \quad \frac{\partial \varphi_n}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=\pi-\alpha} - \varepsilon_{pn} \frac{\partial \varphi_p}{\partial \sigma} \Big|_{\sigma=\pi-\alpha} = \frac{2\tau}{h}. \quad (2.12)$$

Поради осевата симетрия на задачата, на оста за въртене са добавени условията

$$\frac{\partial \varphi_n}{\partial \tau} \Big|_{\tau=1} = \frac{\partial \varphi_p}{\partial \tau} \Big|_{\tau=1} = \frac{\partial \varphi_w}{\partial \tau} \Big|_{\tau=1} = 0. \quad (2.13)$$

В полюса  $A_+$  стойностите на потенциалите могат да бъдат положени нули:

$$\varphi_n = \varphi_p = \varphi_w = 0 \quad \text{за } \tau = 0 \quad (2.14)$$

поради линейността на задачата. Физичните потенциали се пресмятат, като от безразмерните  $\varphi_i$  се извади стойността им на безкрайност.

## 2.3 Асимптотично поведение на модела

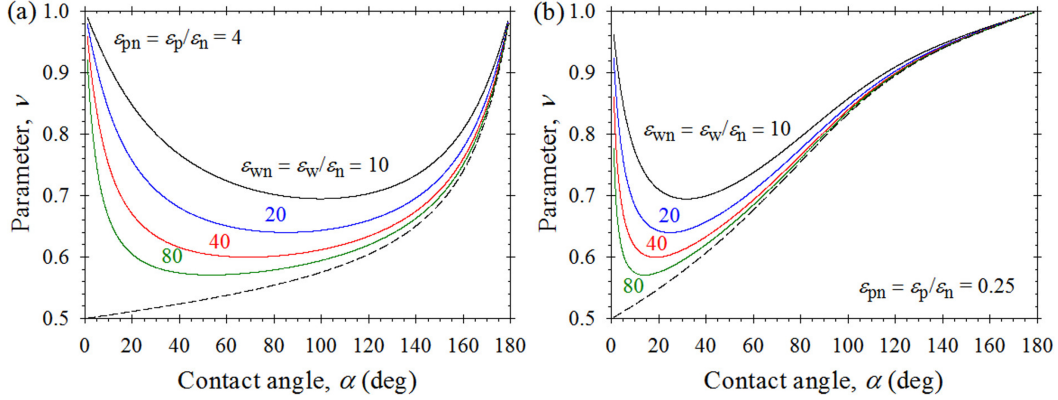
За да се пресметне електропотпящата сила с достатъчна точност, е изследвано асимптотичното поведение на модела в малка околност на трифазната контактна линия (за  $\tau \rightarrow 0$ ). Тогава решението на задачата (2.8)–(2.12) се търси във вида

$$\varphi_i = \tau^\nu [A_i^c \cos(\nu\sigma) + A_i^s \sin(\nu\sigma)], \quad i = n, p, w, \quad (2.15)$$

където  $0.5 < \nu < 1$  и  $A_i^c$  и  $A_i^s$  са неизвестни константи. Заместването на тези решения в граничните условия (2.10)–(2.12) води до хомогенна система от шест линейни уравнения за  $A_i^c$  и  $B_i^c$ . Тази система има ненулево решение, когато детерминантата ѝ е нула. В следствие е получено следното уравнение за параметъра  $\nu$ , описващ сингулярността:

$$\begin{aligned} & \frac{2\varepsilon_{pn}(1-\varepsilon_{wn})^2}{(1+\varepsilon_{pn})(1+\varepsilon_{wn})(\varepsilon_{pn}+\varepsilon_{wn})} - \sin^2(\nu\pi) = \\ & \frac{(1-\varepsilon_{pn})(1-\varepsilon_{wn})}{(1+\varepsilon_{pn})(1+\varepsilon_{wn})} \cos^2(\nu\alpha) + \frac{(1-\varepsilon_{wn})(\varepsilon_{pn}-\varepsilon_{wn})}{(1+\varepsilon_{wn})(\varepsilon_{pn}+\varepsilon_{wn})} \cos^2[\nu(\pi-\alpha)]. \end{aligned} \quad (2.16)$$





Фигура 2.3: Зависимост на параметъра  $\nu$  от контактния ъгъл  $\alpha$  и отношението  $\varepsilon_{\text{wn}}$ : a)  $\varepsilon_{\text{pn}} = 4$ ; b)  $\varepsilon_{\text{pn}} = 0.25$ . Прекъснатите линии обозначават идеализирания случай [2.2].

Решението на уравнението (2.16) за параметъра  $\nu$  за две различни отношения  $\varepsilon_{\text{pn}}$  и различни стойности на  $\varepsilon_{\text{wn}}$  е показано на Фиг. 2.3. Когато  $\varepsilon_{\text{wn}} \rightarrow \infty$ , от (2.16) следва уравнение за сингулярността на моделната задача, изследвана в [2.2]. Сингулярността на моделната задача, изобразена на Фиг. 2.3, е по-силна, отколкото във всички останали случаи. Нещо повече, стойностите на  $\nu$  се увеличават с намаляването на отношението на диелектричните константи на водната и неполярната фаза,  $\varepsilon_{\text{wn}}$ . Този ефект е по-изразен за по-големи стойности на  $\varepsilon_{\text{wn}}$  и частици с по-силни хидрофилни свойства.

## 2.4 Числен метод

За да се реши получената елиптична задача, е въведено числено време  $t$  и е решена следната параболична задача:

$$\frac{\partial \varphi_l}{\partial t} = T[\varphi_l] + S[\varphi_l], \quad \varphi_l \in V_l, \quad 0 < t \leq T, \quad l = \text{n, p, w}, \quad (2.17)$$

$$\varphi_l(\tau, \sigma, 0) = \varphi_{l0}(\tau, \sigma), \quad l = \text{n, p, w} \quad (2.18)$$

с приложени гранични условия (2.10)–(2.14), където  $T[\cdot]$  и  $S[\cdot]$  са следните оператори:

$$T[\varphi] = \frac{h\tau}{1-\tau^2} \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ \frac{\tau(1-\tau^2)}{h} \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} \right], \quad S[\varphi] = h \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( \frac{1}{h} \frac{\partial \varphi}{\partial \sigma} \right). \quad (2.19)$$

Въведена е мрежа  $\omega = \omega_\tau \times (\omega_n \cup \omega_p \cup \omega_w) \times \omega_t$ , където  $\omega_\tau$ ,  $\omega_n$ ,  $\omega_p$ ,  $\omega_w$  и  $\omega_t$  са

$$\omega_\tau = \{\tau_i = i\delta_\tau, \delta_\tau = 1/N, i = 0, 1, \dots, N\}, \quad (2.20)$$

$$\omega_n = \{\sigma_{n,j} = j\delta_n, \delta_n = (\pi - \alpha)/N_n, j = 0, 1, \dots, N_n\}, \quad (2.21)$$

$$\omega_p = \{\sigma_{p,j} = \pi - \alpha + j\delta_p, \delta_p = \pi/N_p, j = 0, 1, \dots, N_p\}, \quad (2.22)$$

$$\omega_w = \{\sigma_{w,j} = 2\pi - \alpha + j\delta_w, \delta_w = \alpha/N_w, j = 0, 1, \dots, N_w\}, \quad (2.23)$$

$$\omega_t = \{t_k = k\delta_t, \delta_t = T/M, k = 0, 1, \dots, M\}. \quad (2.24)$$

Приближеното решение на задачата в точка  $(\tau_i, \sigma_{l,j}, t_k)$  е означено с  $\phi_l|_{ij}^k$ ,  $l = \text{n, p, w}$ ,

стандартните апроксимации от втори ред на операторите  $S$  и  $T$  – с  $\tilde{S}$  и  $\tilde{T}$ , и

$$\delta\phi_{ij}^{k+1} = \phi_{ij}^{k+1} - \phi_{ij}^k, \quad l = n, p, w. \quad (2.25)$$

Задачата (2.17)–(2.18), (2.10)–(2.14) е решена с метода на D'Уакопов, който спада към класа от методи на променливите направления (МНП). Първо се решава системата:

$$\left(U - \frac{\delta_t}{2}\tilde{S}\right) [\psi_{ij}^{k+1}] = \delta_t\tilde{T} [\phi_{ij}^k] + \delta_t\tilde{S} [\phi_{ij}^k], \quad l = n, p, w \quad (2.26)$$

с подходящи гранични условия, приложени за  $\psi_{ij}^{k+1}$  на повърхността на частицата и на границата между двата флуида. След това се търси решение на системата:

$$\left(U - \frac{\delta_t}{2}\tilde{T}\right) [\delta\phi_{ij}^{k+1}] = \psi_{ij}^{k+1}, \quad l = n, p, w \quad (2.27)$$

с подходящи гранични условия, приложени за  $\delta\phi_{ij}^{k+1}$  на трифазната контактна линия и на оста на въртене. Накрая  $\phi_{ij}^{k+1}$  е получено чрез формула (2.25).

Основният проблем в МПН идва от сложността на граничните условия. За да се получи схема от втори ред относно  $t$ , трябва да се обърне специално внимание на приближаването на граничните условия. Граничните условия на повърхността на частицата, на границата между двата флуида и на оста на въртене са получени чрез разширяване на дефиницията на операторите  $S$  и  $T$  върху междуфазовите граници, предполагайки, че уравнението на Лаплас е изпълнено в тяхна близост. Граничните условия на трифазната контактна линия са приближени точно, а на оста на въртене условията (2.13) са заменени с (2.27), в които операторите  $S$  и  $T$  са приближени по следния начин:

$$\tilde{S}[\phi_{Nj}^k] = \frac{1 - \cos \sigma_j}{\delta_\sigma^2} \cdot \left[ \frac{\phi_{N,j+1}^k - \phi_{N,j}^k}{1 - \cos \sigma_{j+1/2}} - \frac{\phi_{N,j}^k - \phi_{N,j-1}^k}{1 - \cos \sigma_{j-1/2}} \right], \quad j = \overline{1, N_l - 1}, \quad (2.28)$$

$$\tilde{T}[\phi_{Nj}^k] = \frac{-7\phi_{Nj}^k + 8\phi_{N-1,j}^k - \phi_{N-2,j}^k}{\delta_\tau^2}, \quad j = \overline{1, N_l - 1}. \quad (2.29)$$

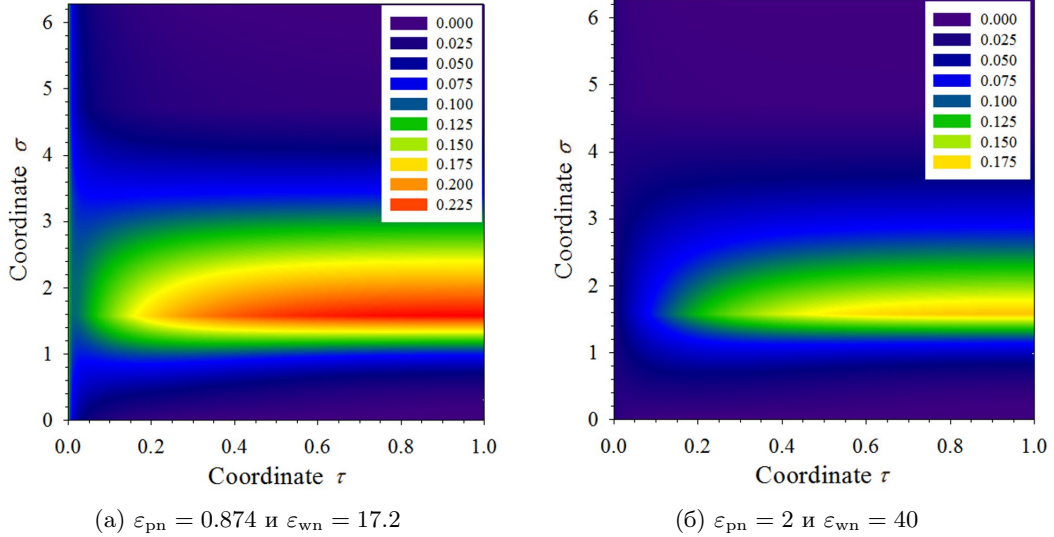
Условието за баланс на заряда (2.10) е заместено с уравнението (2.26), в което операторите  $T$  и  $S$  са апроксимирани чрез

$$\begin{aligned} \tilde{T}[\phi_n|_{i0}^k] &= \frac{\tau_i(1 - \tau_i)}{\delta_\tau(1 + \tau_i)} \cdot \left[ \frac{\tau_{i+1/2}(1 + \tau_{i+1/2})}{1 - \tau_{i+1/2}} \cdot \frac{\phi_n|_{i+1,0}^k - \phi_n|_{i,0}^k}{\delta_\tau} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\tau_{i-1/2}(1 + \tau_{i-1/2})}{1 - \tau_{i-1/2}} \cdot \frac{\phi_n|_{i,0}^k - \phi_n|_{i-1,0}^k}{\delta_\tau} \right], \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}[\phi_n|_{i0}^k] &= \frac{1}{\delta_n + \varepsilon_{wn}\delta_w} \cdot \frac{-7\phi_n|_{i0}^k + 8\phi_n|_{i1}^k - \phi_n|_{i2}^k}{2\delta_n} \\ &\quad + \frac{\varepsilon_{wn}}{\delta_n + \varepsilon_{wn}\delta_w} \cdot \frac{-7\phi_w|_{iN_w}^k + 8\phi_w|_{i,N_w-1}^k - \phi_w|_{i,N_w-2}^k}{2\delta_w}, \quad i = \overline{0, N}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Граничните условия за баланс на зарядите (2.11), (2.12) са приближени по сходен начин.

Поради вида на граничните условия линейната система в направление  $\tau$  се описва чрез петдиагонална матрица. Заради периодичността на решението на  $S_{nw}$  съответната матрица на системата в направление  $\sigma$  е петдиагонална с два допълнителни ненулеви елемента в края на първия и в началото на последния ред. Разработен е директен числен метод за решаването на линейна система от разглеждания вид.



Фигура 2.4: Разпределение на електростатичните потенциали за  $\alpha = 90^\circ$ .

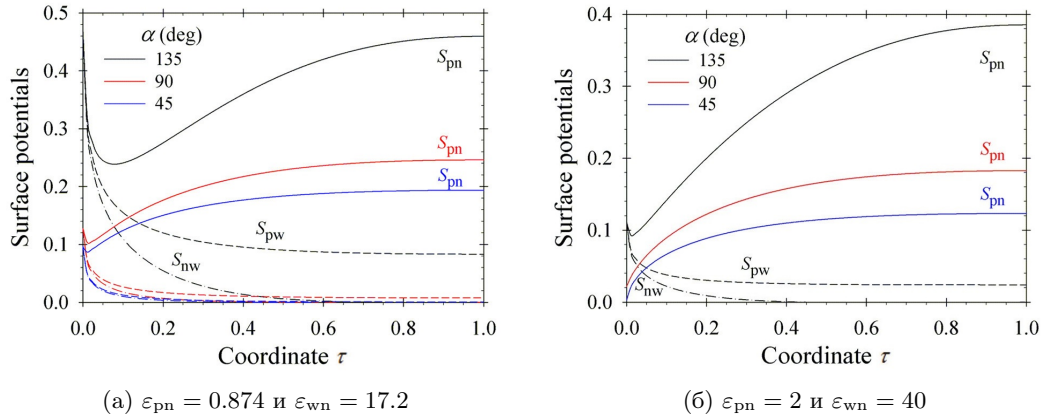
## 2.5 Числени резултати

За да се получи добра точност на числените пресмятания, във всяка числена област е въведена равномерна  $100 \times 100$  мрежа. Стъпката по времето  $\delta_t$  е избрана да бъде минимума от стъпките  $\delta_\tau$ ,  $\delta_n$ ,  $\delta_p$  и  $\delta_w$ . Времето за изчисления на разпределението на потенциалите на лаптоп с процесор Intel Core i5-4200H е по-малко от секунда за произволен контактен ъгъл  $\alpha \in (0^\circ, 180^\circ)$ .

Фиг. 2.4б и 2.5б са получени за параметри на експерименталната установка  $\varepsilon_{pn} = 2$  и  $\varepsilon_{wn} = 40$  [2.1], а Фиг. 2.4а и 2.5а — за параметри  $\varepsilon_{pn} = 0.874$  и  $\varepsilon_{wn} = 17.2$ .

Фиг. 2.4 показва разпределението на потенциалите, произтичащи от физичната задача, в числените области за трифазен контактен ъгъл  $\alpha = 90^\circ$ . Значително по-големи безразмерни потенциали се получават за по-големи стойности на диелектричната константа на неполярната фаза. На координатните линии,  $\sigma = 0$  ( $S_{nw}$ ) и  $\sigma = 3\pi/2$  ( $S_{pw}$ ), електростатичните потенциали са значително по-малки от тези на координатната линия  $\sigma = \pi/2$  ( $S_{pn}$ ). Както може да бъде очаквано, максимумът на електростатичните потенциали се достига в пресечната точка на границата частица–неполярна фаза с оста на въртене. И в двата случая, диелектричната константа на водата е толкова голяма, че водната фаза потиска проникването на електричното поле в полярната фаза.

Изчисленията в [2.1, 2.2] са получени, предполагайки нулеви потенциали на границите на полярния флуид. Големината на електропотпящата сила намалява, ако електростатичните потенциали на тези граници са различни от нула. Фиг. 2.5 показва разпределението на повърхностните потенциали върху границите (непрекъснатите линии съответстват на  $S_{pn}$ ; прекъснати линии — на  $S_{pw}$ ; прекъснати линии с точка — на  $S_{nw}$ ). Увеличаването на трифазния контактен ъгъл (по-хидрофилна частица) води до по-високи потенциали, защото има повече адсорбирани заряди на границата между частицата и неполярната фаза. Важно е да се отбележи, че повърхностните потенциали на границата частица–вода са различни от нула. Тогава границата  $S_{pw}$  също допри-



Фигура 2.5: Разпределение на потенциалите по границите за  $\alpha = 45^\circ$ ;  $\alpha = 90^\circ$ ;  $\alpha = 135^\circ$ .

нася за големината на електропотаящата сила. За  $\alpha = 45^\circ$  и  $\alpha = 90^\circ$  този принос е малък, докато за  $\alpha = 135^\circ$ —не е пренебрежим. Увеличавки диелектричната константа на неполярната фаза  $\epsilon_n$ , електростатичният потенциал на границата  $S_{pw}$  се увеличава.

## 2.6 Заключение

Разработеният метод, основан на МПН, пресмята бързо и точно разпределението на електростатичните потенциалите, породени от заредена диелектрична частица, закрепена за границата неполярна–водна фаза. За по-бързи изчисления сложните области са преобразувани в правоъгълници, използвайки подходящо зададени тороидални координати. Получените системи в съответните направления са решени, като се използва директен числен метод за системи от линейни уравнения.

Числените резултати показват въздействието на трифазния контактен ъгъл и диелектричните свойства на фазите върху възникналите електрични полета и големината на електропотаящата сила. Като цяло намаляването на частното между диелектричните константи на частицата и неполярната фаза,  $\epsilon_p/\epsilon_n$ , и това между водната и неполярната фаза,  $\epsilon_w/\epsilon_n$ , води до по-изразено проникване на електричното поле и по-високи повърхностни потенциали на границите частица–вода и неполярен флуид–вода. Големината на потенциалите е по-голяма за частици, чиято по-малка част е потопена във вода. Пресмятанията обобщават известни резултати в литературата — идеализирания случай на водна фаза с безкрайна диелектрична проникваемост [2.2] и идеализирания случай на тънък двоен електричен слой във вода [2.1], където диелектричните константи на частицата и на неполярната фаза се счита, че са пренебрежими в сравнение с тази на водната фаза.

## Литература:

- [2.1] K. Danov, P. Kralchevsky, M. Boneva, *Langmuir* 20, 6139–6151 (2004).
- [2.2] K. Danov, P. Kralchevsky, *J. Colloid Interface Sci.* 298, 213–231 (2006).
- [2.3] T. Horozov, R. Aveyard, J. Clint, B. Binks, *Langmuir* 19, 2822–2829 (2003).

# 3. Движение на сферична частица, закрепена на границата между два вискозни флуида

## 3.1 Преглед на литературата

Двумерните слоеве от микро- и наночастици, закрепени към повърхност, са свързани с производството на антирефлекторни покрития за соларни панели, елементи със зарядна връзка и чипове с приложения в биологията. Качеството на тези слоеве зависи от стойностите на контактните ъгли,  $\alpha$ , и мобилността на частиците на тези граници. За малки частици  $\alpha$  се измерва, като се използва транслационната скорост на частици, закрепени на граници между два флуида.

В настоящата работа е пресметнат коефициентът на триене на сферична частица, която се намира на плоската граница между два вискозни флуида и се движи успоредно на нея. Ако едната от фазите е въздух, задачата има полуаналитично решение в термини на интегралното преобразуване на Mehler и Fock [3.1]. То е валидно за частици, чиято по-голяма част е потопена във флуида ( $\alpha \leq 90^\circ$ ). Общата задача е решена в [3.2], като тя се свежда до задача за две компоненти на вектора на вихъра и една компонента на вектора на скоростта. Сериозен недостатък на предложения метод в [3.2] е, че е бавен. В настоящата работа е разработен бърз и ефективен числен метод за общата задача, формулирайки задача в термини на векторен и скаларен потенциал. Този метод е необходим за експерименталното определяне на контактния ъгъл на микронни частици и за решаването на двумерната задача за кристализация.

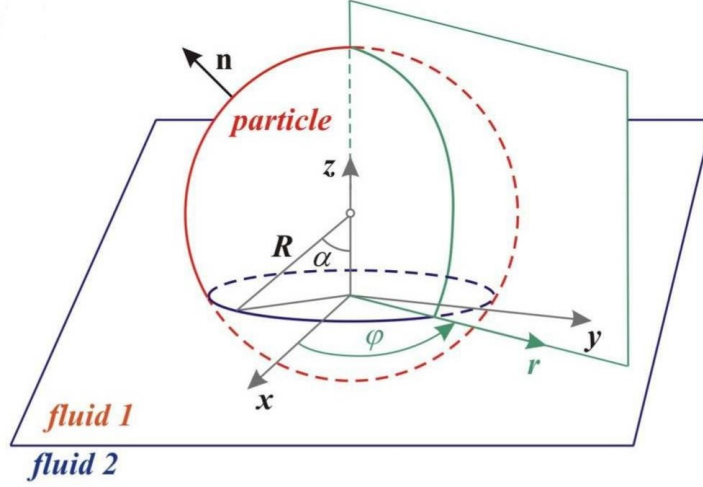
## 3.2 Математическа формулировка на задачата

Малка сферична частица с радиус  $R$  е закрепена за границата между два безкрайни несвиваеми вискозни флуида и се движи успоредно на нея с известна константна скорост  $V$  (виж Фиг. 3.1). За малки капиларни числа пертурбациите на границата в следствие от движението на частицата са много малки и поради това границата е плоска. Тогава контактната линия е окръжност с радиус  $r_c = R \sin \alpha$ , където  $\alpha$  е трифазният контактен ъгъл. Центърът на окръжността е избран така, че да съвпада с центъра на Декартовата координатна система с единични базисни вектори  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$  и  $\mathbf{e}_z$ , където  $\mathbf{e}_y$  сочи в посока на движението на частицата и  $\mathbf{e}_z$  е единичната нормала, сочеща в горната фаза (виж Фиг. 3.1).

Транслирането на частицата води до движение на флуидите, което е толкова бавно, че инерциалните членове в уравненията на Навие–Стокс могат да бъдат пренебрегнати. Тогава безразмерната локална скорост  $\mathbf{v}_m$  (скалирана с  $V$ ) в обемната фаза на флуида  $V_m$  се описва като решение на уравнението на Стокс, т.е.

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_m = 0 \text{ in } V_m, \quad \nabla p_m = \nabla^2 \mathbf{v}_m \text{ в } V_m, \quad m = 1, 2, \quad (3.1)$$

където  $\eta_m$  е динамичният вискозитет,  $p_m$  е безразмерното налягане (скалирано с  $\eta_m V / r_c$ ) и индексите „1“ и „2“ обозначават горната и долната фаза съответно.



Фигура 3.1: Скица на сферична частица, закрепена на плоска граница между два флуида.

За да се затвори задачата, се използват условия за полепване на повърхността на частицата,  $S_p$ :

$$\mathbf{v}_m = \mathbf{e}_y \text{ на } S_p, \quad m = 1, 2, \quad (3.2)$$

кинематични и динамични гранични условия на плоската граница  $z = 0$ :

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2, \quad \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{e}_z = 0, \quad \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{e}_z = 0 \text{ на } z = 0, \quad (3.3)$$

$$\mu_1 \frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial z} \times \mathbf{e}_z = \mu_2 \frac{\partial \mathbf{v}_2}{\partial z} \times \mathbf{e}_z \text{ на } z = 0, \quad (3.4)$$

където безразмерните вискозни коефициенти имат вида  $\mu_m := \eta_m / (\eta_1 + \eta_2)$ ,  $m = 1, 2$ . Физичните стойности на компонентите на скоростта  $\mathbf{v}_m$  и налягането  $p_m$  в двете фази са нули на достатъчно големи разстояния от повърхността на частицата.

Следващата стъпка е моделът да се преформулира във вид, който е удобен за числено решаване. За целта се въвеждат векторни и скаларни потенциали

$$\mathbf{v}_m = \mathbf{w}_m - \nabla \xi_m, \quad p_m = -\nabla^2 \xi_m, \quad m = 1, 2. \quad (3.5)$$

Основната идея е да се преобразува оригиналната система, която се състои от 6 частни диференциални уравнения (ЧДУ) от втори ред и две уравнения от първи ред, в такава — от осем елиптически ЧДУ. Второ тримерната задача е сведена до двумерна, като се вземат само първите моди на Фурие по отношение на полярния ъгъл:

$$w_{mr} = a_{mr} \sin \varphi, \quad w_{m\varphi} = a_{m\varphi} \cos \varphi, \quad w_{mz} = a_{mz} \sin \varphi, \quad \xi_m = b_m \sin \varphi, \quad m = 1, 2. \quad (3.6)$$

След това ЧДУ в системата се „развързват“ чрез въвеждането на следните променливи:

$$u_{m0} = \frac{a_{mr} + a_{m\varphi}}{4}, \quad u_{m1} = \frac{a_{mz}}{2}, \quad u_{m2} = \frac{a_{mr} - a_{m\varphi}}{4}, \quad b_{m1} = b_m - \frac{ra_{mr} + za_{mz}}{2} \quad (3.7)$$

за  $m = 1, 2$ . За да се преобразува сложната геометрия в правоъгълници, е използвана модификация на тороидалните координати (2.7).

В крайна сметка се получава следната задача в термини на новите функции,  $u_{mj}$  и  $b_{m1}$ , ( $m = 1, 2$  и  $j = 0, 1, 2$ ):

$$L_0[u_{m0}] = 0, L_1[u_{m1}] = 0, L_2[u_{m2}] = 0, L_1[b_{m1}] = 0, m = 1, 2, \quad (3.8)$$

където  $L_n[u]$  са дефинирани като

$$L_n[u] = \frac{h^3}{4\tau(1-\tau^2)} \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ \frac{\tau(1-\tau^2)}{h} \frac{\partial u}{\partial \tau} \right] + \frac{h^3}{4\tau^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( \frac{1}{h} \frac{\partial u}{\partial \sigma} \right) - \frac{n^2 h^2}{(1-\tau^2)^2} u. \quad (3.9)$$

Следните гранични условия са приложени към задачата:

- **Гранични условия за горната ( $\sigma = \alpha$ ) или за долната част от повърхността на сферата ( $\sigma = \alpha - \pi$ ):**

$$2[(1+\tau^2)\cos\sigma - 2\tau]u_{m2} + [(1-\tau^2)\sin\sigma]u_{m1} = 0, m = 1, 2; \quad (3.10)$$

$$u_{m2} + \frac{(1-\tau^2)\sin\sigma}{8\tau} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[ b_{m1} + \frac{1-\tau^2}{h}(u_{m0} + u_{m2}) + \frac{2\tau\sin\sigma}{h}u_{m1} \right] = 0, m = 1, 2; \quad (3.11)$$

$$u_{m0} - u_{m2} = \frac{1}{2}, b_{m1} + \frac{1-\tau^2}{h}(u_{m0} + u_{m2}) + \frac{2\tau\sin\sigma}{h}u_{m1} = 0, m = 1, 2; \quad (3.12)$$

- **Гранични условия за границата флуид-флуид ( $\sigma = 0$ ):**

$$u_{10} = u_{20}, u_{12} = u_{22}, b_{11} = b_{21}, m = 1, 2; \quad (3.13)$$

$$u_{m1} - \frac{(1-\tau)^2}{2\tau} \frac{\partial b_{m1}}{\partial \sigma} - \frac{1-\tau^2}{2\tau} \frac{\partial}{\partial \sigma} (u_{m0} + u_{m2}) = 0, m = 1, 2; \quad (3.14)$$

$$\mu_1 \frac{\partial u_{10}}{\partial \sigma} = \mu_2 \frac{\partial u_{20}}{\partial \sigma}, \mu_1 \frac{\partial u_{12}}{\partial \sigma} = \mu_2 \frac{\partial u_{22}}{\partial \sigma}, \mu_1 \frac{\partial b_{11}}{\partial \sigma} = \mu_2 \frac{\partial b_{21}}{\partial \sigma}, m = 1, 2; \quad (3.15)$$

- **Гранични условия на оста на въртене ( $\tau = 1$ ):**

$$\frac{\partial u_{m0}}{\partial \tau} = 0, u_{m1} = 0, u_{m2} = 0, b_{m1} = 0, m = 1, 2; \quad (3.16)$$

- **Гранични условия на трифазната контактна линия ( $\tau = 0$ ):**

$$u_{m2} = \frac{1}{8} \left( \frac{\partial b_m}{\partial \tau} \cos\sigma - \frac{\partial^2 b_m}{\partial \sigma \partial \tau} \sin\sigma \right), m = 1, 2, \quad (3.17)$$

$$u_{m1} = \frac{1}{4} \left( \frac{\partial b_m}{\partial \tau} \sin\sigma + \frac{\partial^2 b_m}{\partial \sigma \partial \tau} \cos\sigma \right), m = 1, 2, \quad (3.18)$$

$$u_{m0} = u_{m2} + \frac{1}{2}, b_{m1} = -u_{m0} - u_{m2}, m = 1, 2, \quad (3.19)$$

където  $b_m$  е дефинирано като

$$b_m(\tau, \sigma) = b_{m1} + \frac{1-\tau^2}{h}(u_{m0} + u_{m2}) + \frac{2\tau\sin\sigma}{h}u_{m1}, m = 1, 2; \quad (3.20)$$

- **Гранични условия на безкрайност ( $\tau = 1, \sigma = 0$ ):**

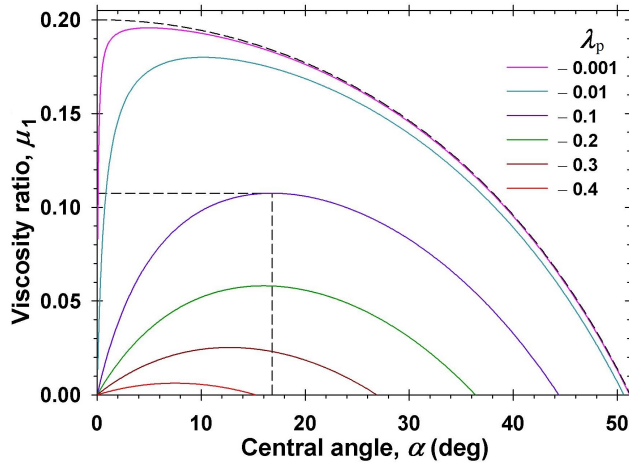
$$u_{m0}(1, 0) = u_{m1}(1, 0) = u_{m2}(1, 0) = b_{m1}(1, 0) = 0, m = 1, 2. \quad (3.21)$$

### 3.3 Асимптотично поведение на модела

За да се получи добро приближение за коефициента на триене, е изследвано асимптотичното поведение на модела в близост до трифазната линия ( $\tau \rightarrow 0$ ). Аналогично на пресмятанията в Глава 2, е получено следното уравнение за параметъра  $\lambda$ :

$$\begin{aligned} \mu_1 [\sin(2\lambda\alpha) - \lambda \sin(2\alpha)] \{ \cos[2\lambda(\alpha - \pi)] - \lambda^2 \cos(2\alpha) + \lambda^2 - 1 \} \\ = \mu_2 \{ \sin[2\lambda(\alpha - \pi)] - \lambda \sin(2\alpha) \} [ \cos(2\lambda\alpha) - \lambda^2 \cos(2\alpha) + \lambda^2 - 1 ]. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Функцията на налягането има сингулярност, по-силна от логаритмичната, в регионите, изобразени на Фиг. 3.2, където параметърът  $\lambda_p := \lambda - 1$  е в интервала  $(-0.5, 0)$ . Фиг. 3.2 показва зависимостта на  $\lambda_p$  от трифазния контактен ъгъл,  $\alpha$ , и отношението на вискозитетите,  $\mu_1$ . Поради симетрията изображението е аналогично на това, което се получава при замяна на  $\mu_1$  с  $\mu_2$  и на  $\alpha$  с  $\pi - \alpha$ . Сингулярността на налягането става по-силна с намаляване на  $\mu_1$ . Поради факта, че  $\lambda_p > -0.5$ , сингулярността е слаба и силата на триене, както и коефициентът на триене, са крайни.



Фигура 3.2: Линии за фиксирани стойности на параметъра,  $\lambda_p$ .

### 3.4 Числени резултати

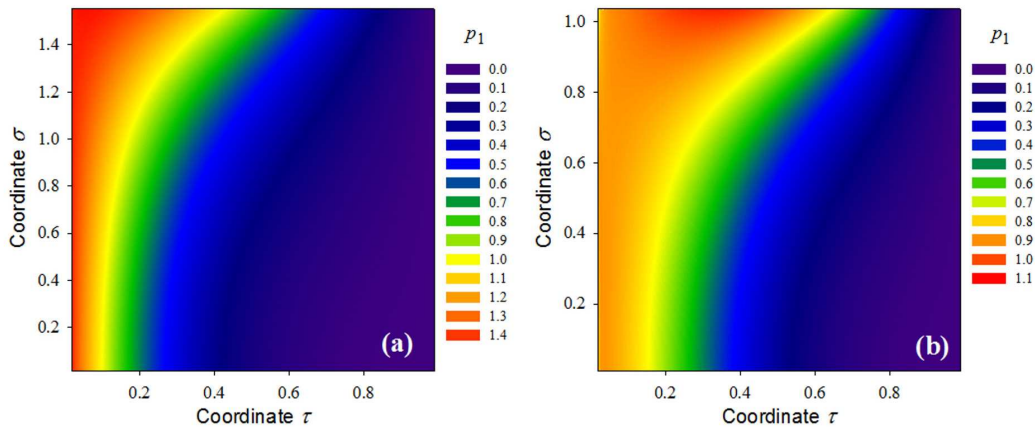
Задачата (3.8)–(3.21) е решена чрез въвеждане на числено време и прилагане на метода на D’Уакопов (виж Глава 2). В таблицата 3.1 е направено сравнение между стойностите на коефициента на триене, пресметнати чрез предложения метод, и полуаналитичните резултати [3.1] за  $\alpha \leq 90^\circ$  и граница флуид–въздух. Числените пресмятания са извършени за  $\delta_\sigma = 0.017$ ,  $\delta_\tau = 0.05$  и различни стъпки по времето  $\delta_t$ . Относителната грешка е по-малка от 1% и времето за изпълнение на лаптоп с процесор Intel Core i5-4200H е по-малко от 10 с. във всички разгледани случаи. Фиг. 3.3 показва разпределението на налягането за границата въздух–вода за две различни стойности на контактния ъгъл. Ясно се вижда, че максималното налягане се постига в контактната линия за  $\alpha = 90^\circ$ , докато това за  $\alpha = 60^\circ$  се намира върху повърхността на частицата във флуидната фаза. Предложеният алгоритъм намалява изчислителното време на



алгоритъма в [3.2] от 10 до 1000 пъти. Колкото по-малък е контактният ъгъл, толкова по-бърз е предложеният метод.

Таблица 3.1: Сравнение между приближените стойности, пресметнати чрез предложеният метод, и аналитичните стойности на коефициента на триене [3.1].

$\alpha$ ( $^\circ$ )	$\delta_t$	време за изпълнение (с)	приближен коеф. на триене	точен коеф. на триене	относителна грешка (%)
15	0.10	2.534	1.4306	1.4374	0.473
30	0.15	7.332	1.4013	1.3392	0.612
60	0.45	7.504	1.2522	1.2509	0.104
75	0.60	5.242	1.1473	1.1370	0.906
90	0.60	8.798	0.9916	1.0000	0.840



Фигура 3.3: Разпределение на налягането за граници въздух–флуид: а)  $\alpha = 90^\circ$ ; б)  $\alpha = 60^\circ$ .

### 3.5 Заключение

Хидродинамичната задача за транслационното движение на сферична частица, закрепена на границата флуид–флуид, е опростена чрез въвеждането на скаларен и векторен потенциал; на подходящи функции и тороидални координати, които свеждат задачата до двумерна система от 8 хомогенни ОДУ. Тази задача е решена чрез метода на D’Уакопов и съответстващо адекватно преформулиране на граничните условия. В резултат е постигнато намаляване на численото време за решаване от 10 до 1000 пъти в сравнение с това в [3.2]. От практическа гледна точка тези пресмятания са важни за определяне на контактния ъгъл на микронни частици и за решаване на задачи за двумерна кристализация.

### Литература:

- [3.1] M. Zabaranin, *Proc. R. Soc. A* 463, 2329–2349 (2007).  
 [3.2] K. Danov, R. Dimova, B. Pouligny, *Phys. Fluids* 12, 2711–2722 (2000).

# 4. Движение на дълги мехурчета в потоци, движени от гравитация и налягане, в цилиндрични капиляри до средни по големина капилярни числа

## 4.1 Преглед на литературата

Движението на мехурчета и капки през капиляри и повиозни среди играе важна роля в много технологични и биологични системи: добиване на петрол чрез инжектиране на флуиди или газове; движение на червени кръвни клетки; отваряне на белодробните дихателни пътища; движение на мехурчета в повиозни материали; биомеханика и микрофлуидни устройства; устройства с циркулираща течност; т.н. В някои от тези приложения (например микрофлуидната техника), безразмерната дебелина на течния слой,  $h$ , е определящ параметър за дизайна и поради това е от решаващо значение неговото определяне.

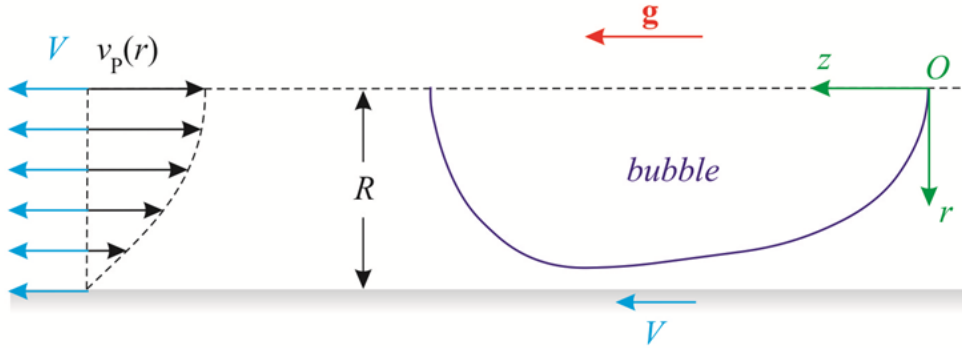
В настоящата работа е разгледано движението на дълги мехурчета под действие на налягане (поток на Поазбой) и гравитация през цилиндрични капиляри. В литературата се разглеждат двата ефекта отделно и тяхното взаимодействие не е описано системно [4.1]. Поради това е удобно да се разгледат два опростени случая за движението на мехурчета и капки: във вертикални капиляри, затворени от едната страна, под действие на гравитация; в хоризонтални тръбички, в които тече течност. Bretherton е решил тези два опростени случая, като е използвал опростено приближение на смазката за поток в тънък слой между мехурчето и капилярата [4.2]. След това той е напаснал приближението на смазката с радиуса на кривина във върха на мехурчето, съответстващ на радиуса на капилярата. Получените асимптотични разложения са точни до 10% за малки капилярни числа  $Ca$  ( $Ca < 5.0 \times 10^{-3}$ ) в случай на поток, задвижван от налягане, и за числа на Бонд в интервала (0.842, 1.04) в случай на поток, задвижван от гравитация. През 2014 използвайки подхода на Bretherton и съствайки приближението на смазката с по-реалистичен радиус на кривина във върха на мехурчето, Klaseboer и сътрудници [4.3] извеждат теоретично израз за безразмерната дебелина на слоя, който е валиден за  $Ca < 2$  в случай на потоци, задвижвани от налягане.

За да разширят областта на валидност на модела на Bretherton [4.2], Ratulowski и Chang [4.4] разглеждат приближението на смазката в цилиндрични координати. С цел да избегнат лошо дефинираната процедура по неговото състване с формата във върха на мехурчето [4.2, 4.3], те използват нормалната проекция на динамичното гранично условие, написана в термини на дължина на дъга от повърхността на мехурчето. Така се решава съответната гранична задача за дебелината на филма в цилиндричната част на мехурчето,  $h$ , в [4.4]. Този подход води до добро теоретично описание на експериментални данни за относителното увеличение в скоростта,  $W$ , за до 40 пъти по-големи

капилярни числа ( $Ca < 0.2$ ), отколкото е приложимостта на формулата на Bretherton, но са необходими допълнителни подобрения, за да обяснят значителните разминавания при по-големи капилярни числа. В настоящата работа е обобщен подходът, предложен от Ratulowski и Chang, като са запазени не само ченовете от нулев ред, но и тези от първи в приближението на смазката. Този метод води до значително подобрение в точността. Нещо повече той е валиден за средни по големина капилярни числа и числа на Бонд и може да бъде обобщен чрез въвеждане на граници със сложна реология и междумолекулни сили.

## 4.2 Математически модел

Разгледана е цилиндрична тръбичка с радиус  $R$ , пълна с несвиваем вискозен флуид с динамичен вискозитет  $\eta$  и плътност  $\rho$ . Във флуида има осевосиметрично мехурче, чиято ос на въртене съвпада с оста на въртене на капилярата. Мехурчето се движи със скорост  $V_b$ , успоредно на стената на тръбичката, под действието на поток на Поазьой и гравитация с ускорение  $\mathbf{g}$  (виж Фиг.4.1). Повърхността на мехурчето е свободна (тангенциалното напрежение на повърхността е нула) или тангенциално неподвижна (тя действа като твърда повърхност).



Фигура 4.1: Осевосиметрично мехурче се движи в цилиндрична капиляра с радиус  $R$  под действие на гравитация и поток на Поазьой.

Въвеждаме цилиндрична координатна система  $(r, \varphi, z)$  с център във върха на мехурчето и ос на въртене  $Oz$ , сочеща в посока, противоположна на движението на мехурчето (виж Фиг. 4.1). Задачата е осевосиметрична, т.е. променливите зависят само от  $r$  и  $z$ , и поради това тя е разгледана само в равнината  $r$ - $z$ . Тъй като координатната система е фиксирана във върха на мехурчето, транслационната скорост на мехурчето е нула, а стената на капилярата и целият флуид се транслират по оста  $Oz$  със скорост  $V_b$ .

Средната кривина и координатите на мехурчето са мащабирани с радиуса на капилярата  $R$ , компонентите на скоростта — със скоростта на мехурчето  $V_b$ , а налягането — с  $\eta V_b / R$ . Подемната и капилярната сила се измерват чрез числото на Бонд,  $Bo$ , капилярните числа,  $Ca$  и  $Ca_{pm}$ , и относителното увеличение в скоростта,  $W$ :

$$Bo = \frac{\rho g z R^2}{\sigma}, \quad Ca = \frac{\eta V_b}{\sigma}, \quad Ca_{pm} = \frac{\eta V_{pm}}{\sigma}, \quad W = 1 - \frac{V_{pm}}{V_b}, \quad (4.1)$$

където  $g_z$  е  $z$ -координатата на гравитацията  $\mathbf{g}$ ,  $\sigma$  е повърхностното напрежение на мехурчето и  $V_{pm}$  е средната скорост на потока на Поазьой.

Движението на флуида се описва, като се използват уравненията на Стокс. В цилиндрични координати безразмерните радиална и аксиална координата на вектора на скоростта,  $u$  и  $v$ , са моделирани чрез

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u) + \frac{\partial v}{\partial z} = 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u) \right] + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{Bo}{Ca}. \quad (4.4)$$

Повърхността на мехурчето е описана като  $r = r_b(s)$ ,  $z = z_b(s)$ , където  $r_b$  и  $z_b$  са радиалната и аксиалната координата на формата на мехурчето и  $s$  е дължината на дъгата от  $S$ , измерена от върха на мехурчето. Използвайки геометрични съображения, формата на мехурчето  $S$  се моделира като

$$\frac{dr_b}{ds} = \cos \theta, \quad (4.5)$$

$$\frac{dz_b}{ds} = \sin \theta, \quad (4.6)$$

$$2H = \frac{d\theta}{ds} + \frac{\sin \theta}{r_b}, \quad (4.7)$$

където  $\theta$  е ъгълът между допирателната към повърхността и абсцисната ос, а  $H$  е безразмерната средна кривина. Задачата е затворена със следните гранични условия:

- условия за полепване върху стената на капиларата:

$$u = 0, \quad v = 1 \quad \text{за } r = 1; \quad (4.8)$$

- гранични условия на безкрайност:

$$u = 0, \quad v = 1 + v_p(r) \quad \text{за } |z| \rightarrow \infty, \quad (4.9)$$

където  $v_p(r)$  е аксиалната координата на скоростта на потока на Поазьой;

- гранично условие за дебит на флуида:

$$2 \int_{r_b}^1 r v dr = W; \quad (4.10)$$

- тангенциалната проекция на закона за баланса на импулса (ЗБИ) на повърхността на мехурчето:

$$\cos(2\theta) \left( \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \sin(2\theta) \left( \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial r} \right) = 0 \quad \text{на } S; \quad (4.11)$$

- нормалната проекция на ЗБИ на повърхността на мехурчето:

$$p_b = p - 2 \sin^2 \theta \left[ \cot^2 \theta \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} - \cot \theta \left( \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] + \frac{2H}{Ca} \quad \text{на } S. \quad (4.12)$$

За свободни повърхности задачата се състои от ур. (4.2)–(4.12). В случай на тангенциално неподвижна повърхност ур. (4.11) е заменено от условията за тангенциална неподвижност:

$$u = 0, v = 0 \text{ на } S \quad (4.13)$$

и нормалната проекция на ЗБИ е опростена:

$$p_b = p + \frac{2H}{Ca} \text{ на } S. \quad (4.14)$$

Предполага се, че характеристичната безразмерна дебелина на течния слой,  $\varepsilon$ , далеч от върха на мехурчето е малък параметър на разглежданата задача и радиалната координата,  $r$ , се мащабира, както следва

$$r = 1 + \varepsilon\xi. \quad (4.15)$$

Асимптотичните развиятия за радиалната и аксиалната координата на скоростта на флуида и за налягането по отношение на малкия параметър,  $\varepsilon$ , се търсят във вида

$$u = \varepsilon\tilde{u}_0 + \varepsilon^3\tilde{u}_2 + O(\varepsilon^4), v = \tilde{v}_0 + \varepsilon^2\tilde{v}_2 + O(\varepsilon^3), p = \frac{\tilde{p}_0}{\varepsilon^2} + \tilde{p}_2 + O(\varepsilon). \quad (4.16)$$

Развиятията (4.15)–(4.16) са заместени в задачата на Стокс (4.2)–(4.4), затворена с условията за полепване (4.8), условията за дебита на потока (4.10) и тангенциалната проекция на динамичното гранично условие (4.11) или (4.13). Приравнявайки водещите коефициенти във всяко едно от уравненията, се получава система от ЧДУ с гранични условия. Нейното решение, нулевото приближение на смазката за променливите  $u$ ,  $v$  и  $p$ , е пресметнато аналитично. Аналогично се получава и първото приближение на смазката. Получените приближения се заместват в нормалната проекция на ЗБИ и се получава следната нелинейна система от четири обикновени диференциални уравнения за  $r_b$ ,  $z_b$ ,  $\theta$  и разликата в динамичните налягания  $p_s$ :

$$\frac{dr_b}{ds} = \cos \theta, \quad (4.17)$$

$$\frac{dz_b}{ds} = \sin \theta, \quad (4.18)$$

$$\frac{d\theta}{ds} = -Ca p_s - \frac{\sin \theta}{r_b}, \quad (4.19)$$

$$\frac{dp_s}{ds} = F(r_b, \theta, p_s, Bo, Ca_{pm}). \quad (4.20)$$

Началните условия за задачата в случай на дълго мехурче имат вида

$$r_b(s_{in}) = r_c - \delta, z_b(s_{in}) = z_{in}, \quad (4.21)$$

$$\theta(s_{in}) = \frac{\pi}{2} + \lambda\delta, p_s(s_{in}) = -\frac{1}{Ca r_c} - \left(\lambda^2 + \frac{1}{r_c^2}\right) \frac{\delta}{Ca}, \quad (4.22)$$

където  $r_c$  е радиусът на цилиндричната част на мехурчето,  $\delta$  е началната стойност на пертурбацията на формата на мехурчето, а  $\lambda$  е реалният корен на уравнението

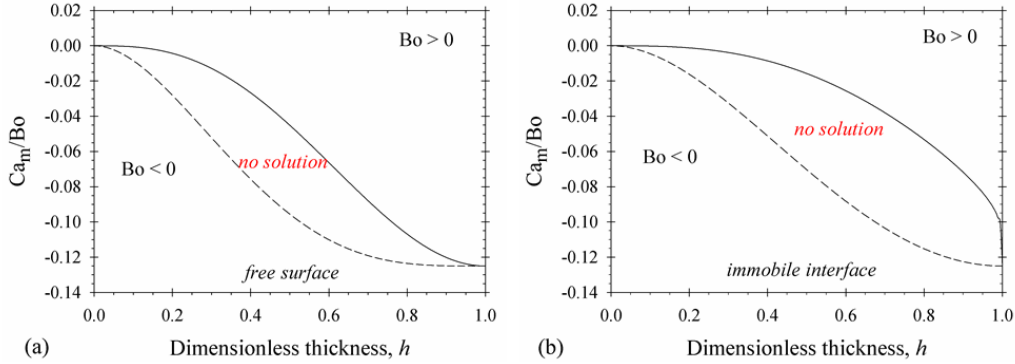
$$(\lambda r_c)^3 + \lambda r_c + a = 0. \quad (4.23)$$

В последното  $a$  се пресмята по формулата

$$a = \begin{cases} \frac{2r_c^2 [8Ca_{pm} + Bo(1 - r_c^4 + 4r_c^4 \ln r_c)]}{1 - 4r_c^2 + 3r_c^4 - 4r_c^4 \ln r_c}, & \text{за свободна} \\ & \text{повърхност;} \\ \frac{r_c^2 (1 - r_c^2 + 2r_c^2 \ln r_c) [8Ca_{pm} + Bo(1 - r_c^2)^2]}{(1 - r_c^2)^2 [r_c^2 - 1 - (1 + r_c^2) \ln r_c]}, & \text{за танг. неподвижна} \\ & \text{повърхност.} \end{cases} \quad (4.24)$$

### 4.3 Области на валидност на параметрите

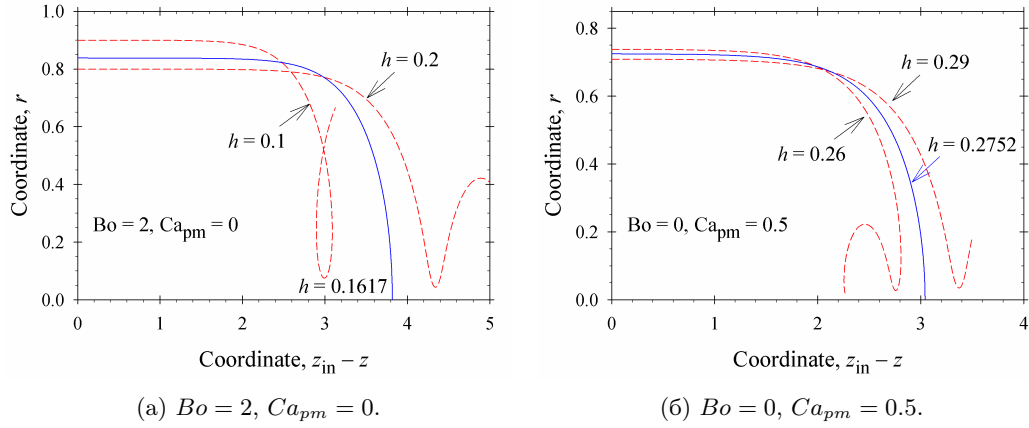
Поради факта, че дълги мехурчета се получават само ако  $a > 0$ , проверяваме дали изразите (4.24) са положителни за  $0 < r_c < 1$  и  $Ca > 0$ . Получените ограничения за отношението  $Ca_{pm}/Bo$  са изобразени на Фиг. 4.2 в случай на свободна или на тангенциално неподвижна повърхност. Трябва да се отбележи, че задачата няма решение за стойности на параметрите в областта, оградена от непрекъснатата ( $Ca = 0$ ) и прекъснатата линия ( $a = 0$ ).



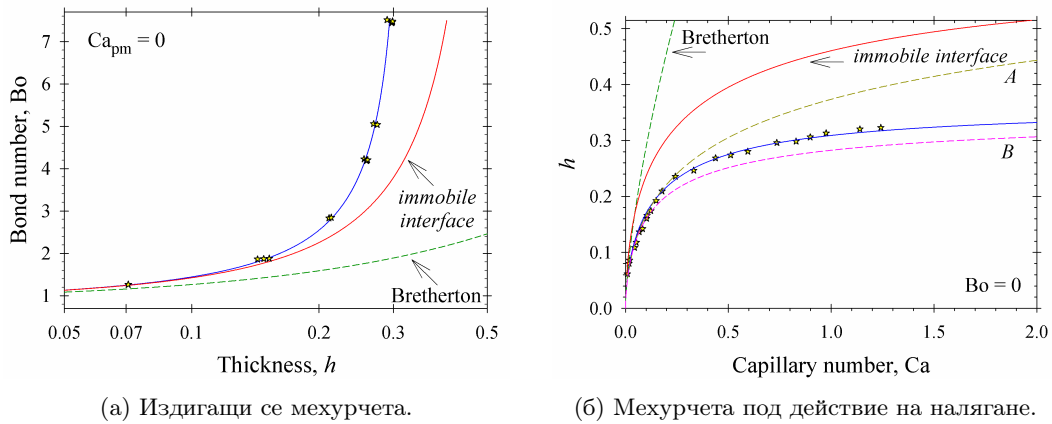
Фигура 4.2: Областите от физични параметри, в които е възможно да се получат профили на дълги мехурчета със свободни или тангенциално неподвижни повърхности. Непрекъснатите линии съответстват на  $Ca = 0$ , а прекъснатите — на  $a = 0$ .

### 4.4 Числени резултати

Общо казано, системата (4.17)–(4.20) моделира формата на капка за известно разпределение на налягането на повърхността на мехурчето. Решението зависи от началните условия и описва различни профили: отворени, затворени или самопресичащи се (виж Фиг. 4.3). Например в случай на свободна повърхност,  $Bo = 2$  и  $Ca_{pm} = 0$ , кривата, описваща профила, се самопресича за  $h = 0.1$ , профилът е отворен за  $h = 0.2$  и само за  $h = 0.1617$  се получава истинската форма на мехурчето (Фиг. 4.3а). Аналогично за  $Bo = 0$  и  $Ca_{pm} = 0.5$  в случай на свободна повърхност, профилът е отворен при  $h = 0.26$  и  $h = 0.29$ , а физичното решение се получава при  $h = 0.2752$  (Фиг. 4.3б). Тези експерименти показват разнообразието на решенията на задачата, но само физичното решение, което съответства на затворен профил, представлява интерес от практическа гледна точка. За дадени  $Bo$  и  $Ca_{pm}$  то може да се пресмятне, като се варира безразмерната дебелина,  $h$ , така че да се получи затворен профил.



Фигура 4.3: Капилярни профили за три различни безразмерни дебелини на флуидния слой,  $h$ , в случай на свободна повърхност.

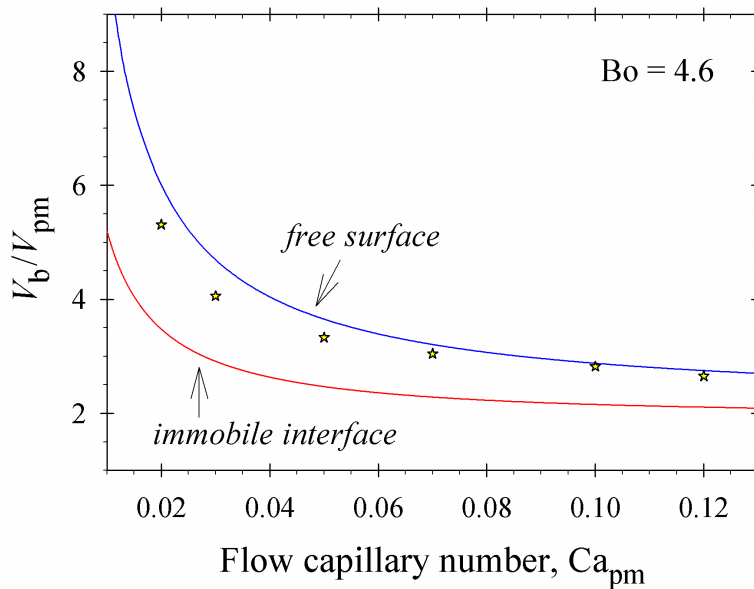


Фигура 4.4: Сравнение между експериментални данни [4.5–4.7] (символи) и теоретични пресмятания. Непрекъснатата линия — обобщено приближение на смазката; линия А — нулево приближение на смазката [4.4]; линия В — разширен модел на Bretherton [4.3].

#### 4.4.1 Сравнение с експериментални данни и теоретични резултати

Фиг. 4.4а показва експериментални данни [4.5] (символи) за безразмерната дебелина на слоя на дълги издигащи се мехурчета в капиляра като функция на числото на Бонд ( $Ca_{pm} = 0$ ). Пресмятанията за свободни повърхности (непрекъснатата синя линия) описват отлично експерименталните данни за всички разгледани случаи ( $Bo \leq 7.5$ ). Асимптотичната формула на Bretherton [4.2] (прекъснатата линия на Фиг. 4.4а) дава добри резултати за ниски стойности на капилярното число,  $Ca < 3.2 \times 10^{-4}$ .

В случай на движение на дълги мехурчета под действие на поток на Поазьой ( $Bo = 0$ ) сравнение между експериментални данни и числени резултати, получени чрез общото приближение на смазката, е показано на Фиг. 4.4б. Асимптотичното решение на Bretherton [4.2] (прекъснатата линия) описва експерименталните данни с точност от



Фигура 4.5: Сравнение между експериментални данни [4.1] (символи) за относителната скорост  $V_b/V_{pm} > 0$  на дълги мехурчета и теоретично пресмятане за свободни и тангенциално неподвижни повърхности за константно число на Бонд,  $Bo = 4.6$ .

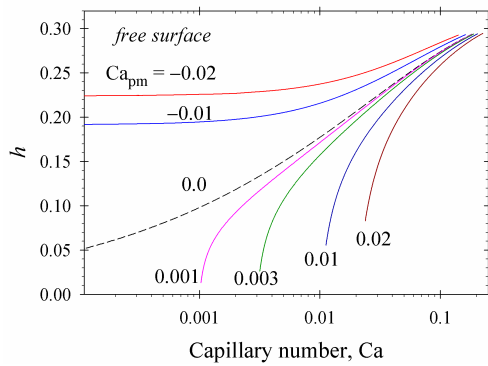
10% за малки стойности на капилярното число ( $Ca < 5 \times 10^{-3}$ ). Разширеният модел на Bretherton [4.3] (линия В) ни дава приемливи резултати за  $Ca < 0.1$ . Моделът [4.4] (линия А), основан на нулевото приближение на смазката, описва добре експерименталните данни за  $Ca < 0.2$ . Използването на обобщено приближение на смазката, което взема предвид приближението на смазката от първи ред, води до отлично описание на експерименталните данни за  $Ca < 2.0$ , виж Фиг. 4.4б.

Фиг. 4.5 показва сравнение между експериментални и теоретични пресмятания за относителната скорост  $V_b/V_{pm}$  в случай на едновременното действие на поток на Поазьой и гравитация. Експерименталните данни [4.1] (символи) са близо до теоретичните пресмятания за мехурчета със свободни повърхности. Малките разминавания между експерименталните данни и теорията се дължат най-вероятно на остатъчни количества от ПАВ в работния флуид [4.1].

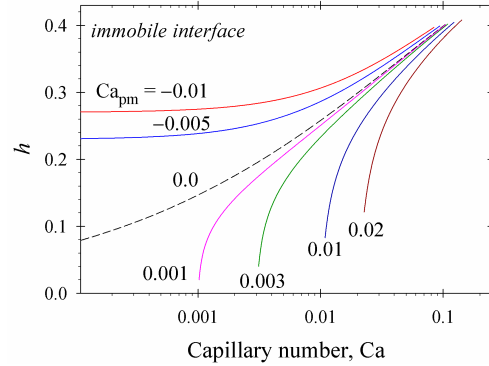
#### 4.4.2 Едновременно действие на поток на Поазьой и гравитация

В литературата няма систематизирани експериментални данни за дълги мехурчета под действие на поток на Поазьой и гравитация (като тези, които са илюстрирани на Фиг. 4.5). Фиг. 4.2 показва, че има два основни случая. Първият съответства на  $Bo > 0$ , когато потокът на Поазьой ускорява движението на мехурчето за  $Ca_{pm} > 0$  и го забавя за  $Ca_{pm} < 0$ . Експерименталните данни на Фиг. 4.5 съответстват на  $Bo > 0$  и  $Ca_{pm} > 0$ . Фиг. 4.6 обобщава числените резултати за ефекта на потока на Поазьой върху дебелината на флуидния филм в цилиндричната част на мехурчето за положителни стойности на число на Бонд и различни модели за повърхностите



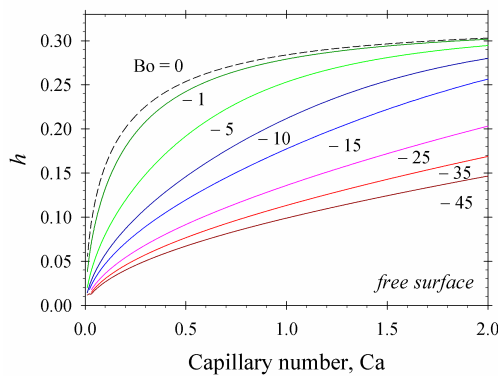


(a) Свободни граници.

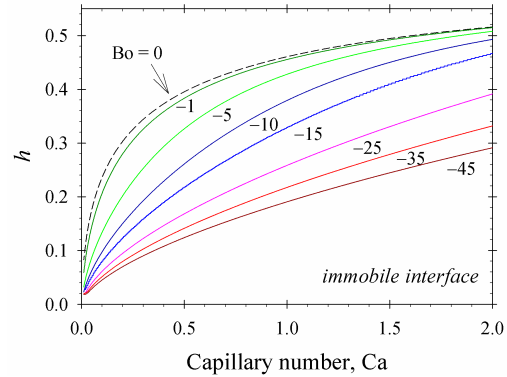


(б) Тангенциално неподвижни граници.

Фигура 4.6: Ефектът на потока на Поазьой върху дебелината на флуидния слой в цилиндричната част на мехурчето.



(a) Свободни граници.



(б) Тангенциално неподвижни граници.

Фигура 4.7: Ефектът на гравитацията на транслационната скорост и на дебелината на слоя в цилиндричната част на мехурчето,  $h$ , при поток на Поазьой.

(свободни или тангенциално неподвижни). По-голямата прагова стойност за числото на Бонд е свързана с увеличаването на дебелината на омокрящия филм в цилиндричните части на мехурчето (Фиг. 4.6). Противоположно за  $Ca_{pm} > 0$ , много тънки флуидни слоеве в цилиндричната част на мехурчето могат да съществуват на практика. Както може да бъде очаквано, слоевете за тангенциално неподвижни граници са по-дебели от тези за свободни повърхности.

Вторият общ случай е, когато гравитацията забавя движението на мехурчето ( $Bo < 0$  и  $Ca_{pm} > 0$ , виж Фиг. 4.2). Числените резултати за зависимостта на  $h$  от капилярното число,  $Ca$ , за двата вида повърхности са обобщени на Фиг. 4.7. Увеличаването на големината по абсолютна стойност на числото на Бонд,  $|Bo|$ , намалява дебелината на омокрящия филм в цилиндричната част. Нещо повече мехурчетата с тангенциално неподвижни повърхности се движат със същата транслационна скорост, както тези със свободни повърхности под действието на по-интензивен поток на Поазьой.

## 4.5 Заключение

Изследвано е движението на осевосиметрични мехурчета със свободна или тангенциално неподвижна граница през капилари, като се използва точното решение на хидродинамичната задача в цилиндрични координати в термини на обобщеното приближение на смазката, запазвайки не само членовете от нулев ред [4.4], но и тези от първи ред. Като резултат изразите за скоростта на флуида и динамичното налягане са пресметнати за произволна форма на мехурчето. Тези величини са заместени в нормалната проекция на ЗБИ, за да се получи гранична задача за формата на мехурчето в термините на дължина на дъгата. Графики за необходимите условия за поява на дълги мехурчета са построени (Фиг. 4.2). Разгледаният метод позволява бързо и прецизно пресмятане на зависимостта на капилярното число и дебелината на омокрящия филм в цилиндричната част от параметрите, описващи задачата.

Сравнения с налични експерименти (Фиг. 4.4 и 4.5) показват валидността на предложения метод за капилярни числа,  $Ca$ , и числа на Бонд,  $Bo$ , със средна големина ( $Ca < 2$  и  $Bo < 7.5$ ). Когато потокът на Поазьой възпрепятства издигането на мехурчето, гравитацията трябва да е достатъчно силна, за да осигури неговото движение (Фиг. 4.6). Ако е приложен много малък градиент на налягането в обратна посока на транслирането на мехурчето, това води до неговото движение и условието на Bretherton ( $Bo > 0.842$ ) не се реализира. Когато гравитацията действа в противоположна посока на движение на мехурчето, задвижвано от налягане (Фиг. 4.7), трансланционната скорост намалява за високи абсолютни стойности на числото на Бонд. Като цяло, в случаи на тангенциално неподвижни повърхности трансланционната скорост,  $V_b$ , е по-ниска и дебелината на омокрящия филм,  $h$ , е по-висока от тези, предсказани за свободни повърхности на мехурчетата при фиксирани стойности на параметрите.

## Литература:

- [4.1] A. Borhan, J. Pallinti, *Ind. Eng. Chem. Res.* 37, 3748–3759 (1998).
- [4.2] F. Bretherton, *J. Fluid Mech.* 10, 166–188 (1961).
- [4.3] E. Klaseboer, R. Gupta, R. Manica, *Phys. Fluids* 26, 032107 (2014).
- [4.4] J. Ratulowski, H.-C. Chang, *Phys. Fluids A - Fluid* 1, 1642–1655 (1989).
- [4.5] H. Goldsmith, S. Mason, *J. Fluid Mech.* 14, 42–58 (1962).
- [4.6] G. Taylor, *J. Fluid Mech.* 10, 161–165 (1961).
- [4.7] P. Aussillous, D. Quéré, *Phys. Fluids* 12, 2367–2371 (2000).

# 5. Заключение и основни приноси

## 5.1 Общи изводи

В литературата [5.1, 5.2] задачата за разпределение на електростатичните потенциали е решена числено и аналитично (в термини на интегрално преобразуване на Mehler и Fock) в случай на една идеално проводима обемна фаза (вода). Това опростяване води до гранични условия на Дирихле на границата частица-вода и диелектрична фаза-вода (електростатичният потенциал на тези граници е равен на нула). Оценката на частта от електропотаящата силата, породена от водната фаза, показва, че приносът на водната фаза не е пренебрежим и трябва да се вземат предвид всички диелектрични фази едновременно. В глава 2 уравненията на Лаплас за електростатичните потенциали в трите области (сферична частица, горна и долна диелектрична фаза) се решават заедно с гранични условия на трите разделителни повърхности (непрекъснатост на електростатичните потенциали и баланс на повърхностните заряди). Численото решение на тази обобщена (всъщност по-реалистична) задача дава отговор на въпроса за ролята на водната фаза върху разпределението на електростатичните потенциали. В повечето случаи някои от физичните величини имат слаби сингулярности на трифазната контактна линия (в разгледания случай производната на електростатичния потенциал, който е векторът на електрическото поле). От физична гледна точка слаба сингулярност означава, че интегралът за съответната сила, съдържащ величините върху повърхността, има точно определена крайна стойност. Изолирането на слабата сингулярност, трансформирането на сложните числови области в правоъгълници, използвайки тороидални координати, и прилагането на бързи и прецизни числени методи са от решаващо значение за решаването на задачата, описана в Глава 2.

От физическа гледна точка формулировката на модела в глава 3 е ясна: уравнение на Стокс за несвиваем флуид във всяка от фазите; непрекъснатост на скоростта и тангенциалните напрежения на плоската повърхност между тях; дадена транслационна скорост на сферична колоидна частица, закрепена към границата и ключваща с нея константен трифазен контактен ъгъл. Един възможен числен подход за решаване на тази задача е чрез преформулиране ѝ в термини на две компоненти на вектора на вихъра и една компонента на вектора на скоростта [5.3]. Разгледаният метод е от втори ред в тримерните области (по отношение на уравненията на Стокс), но от първи ред в двумерните области (по отношение на граничните условия). В резултат на това той е бавен и не е удобен за приложения, които изискват многократното му използване. Задачата има и аналитично решение в термини на интегралното преобразуване на Mehler и Fock за пренебрежим вискозитет на един от флуидите (напр. граница вода-въздух) и контактни ъгли  $\leq 90^\circ$  [5.4]. Всъщност този частен случай не е реалистичен и е с доста ограничено приложение. Независимо от това, единственият начин да се провери валидността на числения метод и неговата точност е да се използва това точно решение на задачата. Основната причина за трудностите при числените изчисления в [5.3] и за ограничената валидност на аналитичното решение (контактни ъгли  $\leq 90^\circ$ ) [5.4] е слабата сингулярност на функцията на налягането при трифазната контактна линия.

Разгледаният подход в глава 3 се основава на преформулиране на задачата на Стокс в термини на векторни и скаларни потенциали на скоростта и налягането; свеждане

на тримерната задача към двумерна за първите моди в развитието на Фурие по отношение на полярния ъгъл; трансформирането на сложните области в правоъгълници, използвайки модификация на стандартните тороидални координати. В резултат на това първоначалната задача за обемните фази се свежда до система от четири ЧДУ от втори ред за всяка от фазите. Тези системи са свързани чрез граничните условия на разделителните повърхности. Основната трудност във формулировката в термини на векторни и скаларни потенциали е да се въведат самосъгласувани гранични условия. В Глава 3 е предложен нов тип гранични условия, който разрешава този проблем и дава възможност за конструиране на достатъчно бърза и точна схема от втори ред, която използва метода на променливите направления. Асимптотичният анализ на слабата сингулярност при трифазната контактна линия показва области на регулярно и сингулярно разпределение на налягането и подобрява точността на пресмятанията за силата на триенето.

В глава 4 е комбинирана идеята на Bretherton с подхода в [5.5] и така е решена хидродинамичната задача за приближението на смазката не само от нулев ред, но и от първи за налягането и скоростта на флуида. Както може да се очаква, това повишава точността на използваното приближено решение. Едно предимство на този аналитичен метод е неговата приложимост за произволна гладка форма на границата. В резултат на това се получават аналитични изрази за величините, които описват потока, за тангенциално подвижни или неподвижни повърхности. Нормалната проекция на ЗБИ, в която се замества приближението на смазката, определя формата на мехурчето. Получената числена задача е система от четири нелинейни диференциални уравнения с един параметър, който трябва да се напасне, така че да се получи затворен капилярен профил. От математическа и числена гледна точка получената задача е аналогична на метода, който се използва за определянето на формата на осевосиметрична капка. Той е включен в много търговски апарати за измерване на повърхностно напрежение и контактен ъгъл. Получените числени резултати описват отлично наличните експериментални данни; разширяват валидността на полуаналитичния метод с най-малко два порядъка до капилярни числа и числа на Бонд със средна големина; обясняват сложното поведение при едновременно действие на гравитация и поток на Поазьой; показват принципната разлика между свободни и неподвижни граници.

## 5.2 Основни приноси

1. Задачата за разпределение на електростатичните потенциали в диелектрични среди (две флуидни фази и сферична колоидална частица, закрепена за плоската граница между тях) се състои от уравнения на Лаплас за функциите в тримерните области, непрекъснатост на тези функции и условия за техните производни в нормално направление върху известни граници. Задачата е решена числено, като използва разработен за целта ефикасен и бърз алгоритъм. Стратегията на пресмятанията се основава на преобразуване на сложните области в правоъгълници, използвайки подходящи тороидални координати; аналитично пресмятане на слабата сингулярност на трифазната контактна линия; имплементация на самосъгласувана числена схема от втори ред, която използва метода на променливите направления. Резултатите обобщават идеализирания случай в [5.1], в който проникваемостта на водата се счита, че е безкрайна. В настоящата работа се взима предвид нейната крайна стойност, както и едновременното действие на всички диелектрични среди.

2. Задачата за трансланционното движение на сферична колоидна частица, закрепена за плоска граница между два вискозни несвиваеми флуида, се състои от уравнения на Стокс за вектора на скоростта и за налягането (всъщност би-Лапласиан от вектора на скоростта е равен на нула) в тримерните области, непрекъснатост на скоростта и на тангенциалните напрежения на двумерната граница между двата флуида и известен вектор на скоростта на повърхността на частицата. Задачата е решена числено от 10 до 1000 пъти по-бързо, отколкото с предложения метод в [5.3]. Стратегията на пресмятанията се основа на: формулиране на задачата в термини на векторни и скаларни потенциали на скоростта и налягането; трансформиране на тримерната задача в двумерна за първите моди на Фурие по отношение на полярния ъгъл; трансформиране на сложните области в правоъгълници, използвайки подходящи тороидални координати; построяване на числена схема от втори ред, използвайки метода на променливите направления и отчитайки оригиналната формулировка на двумерните гранични условия; аналитично пресмятане на слабата сингулярност в трифазната контактна линия и изолиране на сингулярността на налягането, което увеличава точността на пресмятането на коефициента на триене.

3. Задачата за движение на дълго мехурче със свободна (класически случай) или тангенциално неподвижна граница (биологична мембрана, повърхност с прекрепени ПАВ и т.н.) през цилиндрична капиляра под действие на гравитация и налягане е решена полуаналитично. Задачата се състои от: уравнения на Стокс в тримерните области; известен профил на скоростта на голямо разстояние от мехурчето; условия за полепване върху капилярната стена; тангенциални и нормални проекции на динамичните гранични условия върху деформируемата повърхност на мехурчето. Стратегията на пресмятанията се основа на: точното аналитично решение на задачата на Стокс за малки наклони на допирателната към повърхността на мехурчето, което води до приближения от нулев и първи ред за произволна гладка форма на мехурчето; заместване на получените решения в нормалната проекция на динамичното гранично условие, от което следва система от четири нелинейни обикновени диференциални уравнения от първи ред по отношение на дължината на дъгата с един неизвестен параметър (капилярното налягане във върха на мехурчето); ефикасна числена схема за пресмятане на граничната задача от четвърти ред за формата чрез напасване на параметъра, така че да се получи затворен профил. Като резултат полученият метод описва отлично наличните експериментални данни, увеличава повече от два порядъка големината на областта на приложимост на известни в литературата аналитични методи и обяснява сложната физична картина при движение на дълги мехурчета под действието на потоци, задвижвани едновременно от гравитация и налягане, за класически и тангенциално неподвижни повърхности.

## Литература:

- [5.1] K. Danov, P. Kralchevsky, *J. Colloid Interface Sci.* 298, 213–231 (2006).
- [5.2] P. Petkov, K. Danov, P. Kralchevsky, *J. Colloid Interface Sci.* 462, 223–234 (2015).
- [5.3] K. Danov, R. Dimova, B. Pouligny, *Phys. Fluids* 12, 2711–2722 (2000).
- [5.4] M. Zabaranin, *Proc. R. Soc. A* 463, 2329–2349 (2007).
- [5.5] J. Ratulowski, H.-C. Chang, *Phys. Fluids A - Fluid* 1, 1642–1655 (1989).

# 6. Разпространение на резултатите от дисертацията

## 6.1 Списък с публикации

1. G. Lyutskanova-Zhekova, K. Danov, Effect of ionic strength on the electro-dipping force. In Proceedings of the 9th International conference on Numerical Methods and Applications NMA, Borovets, Bulgaria, 20–24 August 2018; Lecture Notes in Computer Science Volume, SJR: 0.427 (2019). DOI: 10.1007/978-3-030-10692-8\_49.
2. G. Lyutskanova-Zhekova, K. Danov, Motion of a spherical particle attached to the interface between two viscous fluids, Progress in Industrial Mathematics (2019). DOI: 10.1007/978-3-030-27550-1\_12.
3. K. Danov, G. Lyutskanova-Zhekova, S. Smoukov, Motion of long bubbles in gravity- and pressure-driven flow through cylindrical capillaries up to moderate capillary numbers, Physics of fluids **33** (2021), no. 11, IF: 4.980, Quartile: Q1. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0070619>.

## 6.2 Списък с цитирания на публикациите

G. Lyutskanova-Zhekova, K. Danov, Effect of ionic strength on the electro-dipping force. In: G. Nikolov, N. Kolkovska, K. Georgiev (Eds.), Numerical Methods and Applications. LNCS 11189, Springer, 2019, 433–440.

### Цитати(1):

1. V. Lotito, M. Karlusic, N. Jaksic, K.T. Luketic, U. Muller, T. Zambelli, S. Fazinic, Shape deformation in ion beam irradiated colloidal monolayers: An AFM investigation, Nanomaterials **10** (2020), no. 453.

K. Danov, G. Lyutskanova-Zhekova, S. Smoukov, Motion of long bubbles in gravity- and pressure-driven flow through cylindrical capillaries up to moderate capillary numbers, Physics of fluids **33** (2021), no. 11, IF: 4.980, Quartile: Q1. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0070619>.

### Цитати(2):

1. B. Monnet, M. Christopher, V. Vidal et al., Bubble rise in a Hele-Shaw cell: bridging the gap between viscous and inertial regimes, July 2022, Journal of Fluid Mechanics 942, DOI: 10.1017/jfm.2022.361.
2. Z. Zhu, H. Liu, H. Ding, Buoyancy-driven bubbles in a constricted vertical capillary, March 2022, Physics of Fluids 34(3):032102, DOI: 10.1063/5.0083160.

### 6.3 Списък с изнесени доклади от автора

1. “Motion of spherical particle attached to the interface between two viscous fluids”, доклад на международна конференция “20th European Conference on Mathematics for Industry”, 18-22 юни 2018, Будапеща, Унгария.  
Връзка към сайта на конференцията: <https://ecmi.bolyai.hu/>
2. “Axisymmetric equilibrium shapes of single-wall carbon nanotubes under pressure”, доклад на международната конференция BIOMATH 2018, 24-29 юни 2018, София, България.  
Връзка към сайта на конференцията: <http://www.biomath.bg/2018/>
3. “Effect of ionic strength on the electro-dipping force”, report at the international conference NM&A’18, 20-24 август 2018, Боровец, България.  
Връзка към сайта на конференцията: <https://nma18.fmi.uni-sofia.bg/>
4. „Движение на сферична частица, закрепена за границата между два вискозни флуида“, Пролетна научна сесия на ФМИ, 16 март 2019, София, България.  
Връзка към сайта на конференцията:  
<https://www.fmi.uni-sofia.bg/bg/proletna-nauchna-sesiya-na-fmi-2019>
5. “Generalized lubrication approach, applied to the Bretherton problem for motion of long bubbles in tubes”, доклад на международната конференция “Mathematics and its Applications”, 4-10 август 2019, Новосибирск, Русия.  
Връзка към сайта на конференцията:  
<http://www.math.nsc.ru/conference/gsk/90/en/>
6. “Differential equations of second and fourth order with applications in physicochemistry and biology”, доклад на научния семинар на секция „Математическо моделиране и числен анализ“, 13 юли 2020.
7. “Motion of long bubbles in gravity- and pressure-driven flow through cylindrical capillaries up to moderate capillary numbers”, доклад на международната виртуална конференция “International conference on mathematical science”, 7-9 октомври 2021, Сурат, Индия.  
Връзка към сайта на конференцията:  
<https://sites.google.com/view/icms2021/home?authuser=0>