FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2002. március 22-23.

VISZKÓZUS ÁRAMLÁSBAN TÖRTÉNŐ AGGREGÁCIÓS FOLYAMATOK VIZSGÁLATA SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓ SEGÍTSÉGÉVEL

Kovács Tamás

Abstract

Aggregation processes in shear flow are studied by Monte Carlo simulation. First a cluster-cluster aggregation model is applied to study the geometric properties of the clusters formed in the flow. It was found that due to the inhomogeneous velocity field induced rotation of the clusters the cluster growth process is isotropic under a critical length. Above this critical length the growth becomes anisotropic, and long narrow clusters are formed. In a second model we studied the cluster growth process by simple aggregation on the wall of the shear flowing solution. The results showed that the ratio between the diffusion and the convective velocity has a high influence on the geometry of the forming aggregates.

1. Bevezetés

Napjainkban a csővezetékben történő folyadéktranszport a műszaki élet szinte minden területén alapvető fontosságú. Ezzel elválaszthatatlanul összefügg az a probléma, hogy az áramló folyadék általában olyan nemkívánatos szennyező anyagokat is szállít, amelyek molekulái illetve szemcséi egymással valamilyen szintű kémiai vagy fizikai jellegű kötést létesítenek és aggregációs kiválásokat hoznak létre a folyadék belsejében és a cső falán. Ezek az aggregáló elemek rendkívül sokfélék lehetnek a méretük, alakjuk és az általuk létesített kötés minősége szerint. Emellett maga a szállító folyadék fizikai paraméterei is változatosak, a jelen problémánál a leglényegesebb a sűrűség és a viszkozitás. Ennek a sokszínűségnek köszönhetően a probléma elméleti jellegű tanulmányozása szerteágazó, a különféle esetek más és más jellegű modellt igényelnek. Ezek a modellek csoportokra oszthatók például aszerint, hogy az áramlás lamináris vagy turbulens; az aggregáló elemek diffúziója jelentős-e az áramlási sebességhez viszonyítva; továbbá, hogy a létrejött aggregátum merev klaszternek tekinthető-e, vagy kötőszögei szabadon változhatnak.

A sokféle elméleti modell azonban egy lényeges szempontból azonos képet mutat: a felmerülő matematikai problémák illetve egyenletek megoldása nem lehetséges számítógép alkalmazása nélkül. Az ilyen jellegű rendszerek tanulmányozására az egyik leghatékonyabb módszer az úgynevezett Monte-Carlo szimuláció [1][2], amelynek során a számítógép működteti a felépített modellt úgy, hogy egy vagy több ponton egy véletlen valószínűségi

változó van beépítve a rendszerbe, és ez pótolja a valóságban fellépő kiszámíthatatlan, kaotikus elemeket.

Ez a munka néhány olyan modellt mutat be, amelyek bizonyos speciális esetekben írják le a fent vázolt aggregációs problémákat.

2. Klaszter-klaszter aggregáció viszkózus áramlási térben

Az itt bemutatott modellben az áramló folyadék sebességtére olyan, hogy a rendszer szélétől befelé haladva a párhozamos folyadékrétegekben a sebesség rétegről rétegre lineárisan nő. Kis méretskálán ilyennek tekinthető az áramlási tér egy csőben történő lamináris viszkózus áramlásban [3].

Ebben a modellben az aggregálódó molekulák egymáshoz viszonyított mozgását elsősorban nem a diffúzió, hanem az inhomogén sebességtér határozza meg. (A szomszédos rétegek eltérő sebességgel szállítják a molekulákat.) Ha két ilyen molekula találkozik, irreverzibilisen összekapcsolódnak, és együtt, klaszterként folytatják az útjukat. Ugyanez történik két klaszter találkozásakor is. Ez az úgynevezett klaszter-klaszter aggregációs modell. Az így létrejött klasztereket merevnek, azaz változatlan alakúnak feltételezzük. Ez kis mérettartományban elfogadható közelítés [4]. Egy ilyen jellegű modell időbeli fejlődését elsőként S.B. Santra és H.J. Herrmann tanulmányozta [5].

Már régóta ismert az a tény, hogy az így létrejövő aggregátumok fraktálok [6], azaz jellemző tulajdonságuk, hogy térfogatuk sokkal gyorsabban nő mint a tömegük. Ilyen módon az aggregáció előrehaladtával a növekvő klaszterek által elfoglalt össztérfogat aránya jelentősen megnő.

Az itt bemutatott munka a Santra és Herrmann által tanulmányozott alapmodellhez képest figyelembe vesz egy lényeges elemet: a kiterjedt klaszterekre a fent leírt inhomogén áramlási térben jelentős forgatónyomaték hat a klaszterek alakjától függően (részletesebb leírás a [7]-ben). A klaszterek forgásának köszönhetően a növekedésük egy a_{cr} kritikus méret eléréséig izotróp módon történik, e méret felett pedig a rendszer anizotróppá válik és hosszú vékony klaszterek alakulnak ki (1. ábra). Ennek magyarázata, hogy a kritikus méret elérése után az aggregátumok olyan nagy relatív térfogatot foglalnak el, hogy a klaszter-klaszter aggregációk gyakorisága ugrásszerűen megnő. Ennek következtében a klaszterek nem tudnak jelentős szögelfordulást végrehajtani két aggregációs összekapcsolódás között. Ezt a gondolatmenetet matematikailag is végigszámolva [7] megkapható az összefüggés az $\bar{a}_{cr}$ kritikus méret és a c molekula-koncentráció között:

$$a_{cr} \sim c^{\frac{1}{D-d}},$$

ahol D a fraktáldimenzió és d pedig a beágyazó tér dimenziója (a jelen esetben a rendszer síkbeli, azaz $d=2$). A numerikus mérések viszonylag pontosan megadták a fraktáldimenzió értékét:

$$D = 1.5 \pm 0.05.$$

Az a_{cr} méret felett kialakuló hosszú, vékony klaszterek hamarosan elérik azt a mérettartományt ahol a klaszterek merevségére vonatkozó feltétel már nem érvényes, és az inhomogén áramlási tér „összesodorja” őket, a rendszer ismét izotróppá válik. Ekkor azonban a klaszterek képlékeny geometriája miatt már megszűnik a fraktáljelleg.

Fontos megjegyezni, hogy az a_{cr} méret feletti tartományban nem végeztünk szimulációs méréseket, ezért az erre vonatkozó állítások csupán elméleti következtetések.

3. Aggregációs kiválás az áramlás határán

A következő szimulációs modell aggregálódó elemei az előző részben leírt tulajdonságú molekulák (tehát az aggregátumok ezúttal is merev klaszterek), de itt a rendszer falán megtapadt és ott növekvő klaszter áll a vizsgálat középpontjában.

I.ábra: Az ábrán egyazon szimulációs folyamatról három pillanattfelvétel látható. A t paraméter a szimulációs lépések számát jelöli (fizikai megfelelője az eltelt idő), az L paraméter a rendszer kinagyított részletének lineáris mérete rácsállandó egységekben.

A folyamatosan növekvő aggregátumhoz igazodó stacionárius áramlási teret újra és újra ki kell számítani. Ehhez használhatjuk a Navier-Stokes egyenletet is, de gyorsabb megoldást tesz lehetővé, ha a stacionárius áramlások esetén szokásos módon egy folytonos komplex függvény segítségével állítjuk elő a sebességpotenciált. A függvény megkonstruálásának alapja, hogy egy gömb alakú részecske körül kialakult áramlási tér sebességpotenciálját egy $F(z) = A \cdot z + B/z$ alakú függvény adja meg [8]. Az egyszerűség kedvéért itt nem klaszter-klaszter aggregációt vizsgálunk, hanem egyszerű aggregációt, azaz a molekulák egymáshoz nem, csak a tanulmányozott klaszterhez kapcsolódhatnak.

Ennél a modellnél az egyik leglényegesebb paraméter az aggregációra hajlamos részecskék diffúziós átlagsebességének és az áramlási sebességnek az aránya. A diffúzió egymagában statisztikusan szimmetrikus növekedést eredményez, míg az áramlás megtöri a szimmetriát [9].

A bemutatott demonstrációs jellegű ábrán (2.ábra) a rendszer falán növekvő aggregátumot láthatjuk, körülötte pedig az áramlási teret.

A bemutatott modell fejlesztése jelenleg olyan irányba folyik, hogy képes legyen rugalmas szerkezetű aggregátumok leírására, amelyekre hatással van a belső hőmozgás és a külső sodrás.

2.ábra: A demonstrációs céllal készült ábrán egy stacionárius áramlásban növekvő aggregátum látható még korai stádiumban. Az áramlási képet az aggregációra hajlamos szemcsék (molekulák) sorozatban megjelölt koordinátái rajzolják ki.

Irodalom:

- [1] D.Stauffer and A. Aharony: Introduction to Percolation Theory (Taylor and Francis, London 1992)
- [2] M.EJ.Newman and R.M.Ziff: Efficient Monte Carlo algorithm and high precision results for percolation , [xxx.lanl.gov/ cond-mat/0005264](http://xxx.lanl.gov/cond-mat/0005264) (2000)
- [3] B.S.Massey: Mechanics of Fluids (Chapman & Hall, London 1989) p156.
- [4] T. Hashimoto,T. Takabe and S. Suehiro, J. Chem. Phys. 88 (1988) 5874.
- [5] S. B. Santra and H.J. Herrmann, Physica A 218 (1995) 298.
- [6] P.Meakin, Phys. Rev. Lett.51 (1983) 1119.
- [7] T. Kovács, G. Bárdos, Physica A 234 (1997) 665.
- [8] B.S.Massey: Mechanics of Fluids (Chapman & Hall, London 1989) p329.
- [9] T.Kovács, G.Bárdos, Physica A 247 (1997) 59.

Dr. Kovács Tamás (Ph.D.)

Kecskeméti Főiskola - Műszaki Főiskolai Kar (GAMF)

Informatika Tanszék

Kecskemét Izsáki út 10. 6000 Magyarország

Tel: 36-76-516 332, E-mail: kovacs.tamas@kefo.hu