

УДК 519.673:532.7:532.529.5

**Маланичев И.В.** – кандидат технических наукE-mail: [mlnchv@bk.ru](mailto:mlnchv@bk.ru)**Ахмадиев Ф.Г.** – доктор технических наук, профессорE-mail: [akhmadiev@kgasu.ru](mailto:akhmadiev@kgasu.ru)**Казанский государственный архитектурно-строительный университет**

Адрес организации: 420043, Россия, г. Казань, ул. Зеленая, д. 1

### Стохастическая модель течения концентрированной эмульсии в микроканале

#### Аннотация

Выполнено моделирование течения высококонцентрированной эмульсии в микроканале как двухфазной среды с целью воспроизведения процесса блокировки, известного как эффект динамического запираания. Движение сплошной фазы определяется методом решеточных уравнений Больцмана, капельной фазы – на основе стохастической модели. Капли эмульсии рассматриваются как дисперсные частицы в свободном или связанном состоянии, движение которых складывается из переноса потоком жидкости и свободного блуждания. Переход в связанное состояние происходит при превышении заданной пороговой концентрации капель в узле. Течение жидкости через узел, заполненный связанными каплями, рассматривается как фильтрация. Результаты моделирования описывают процессы структуризации эмульсии при изменении характера течения от свободного до фильтрации и согласуются с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** метод решеточных уравнений Больцмана, стохастическое моделирование, эмульсия, эффект динамического запираания, фильтрация.

#### Введение

В нефтяной, нефтехимической и строительной промышленности широко применяются обратные (инвертные) водно-углеводородные эмульсии, представляющие собой полидисперсные системы, внешней (дисперсионной) средой которых является углеводородная жидкость (нефть, дизельное топливо, битум, деготь), а внутренней (дисперсной) фазой – вода или водные растворы солей, кислот, щелочей, поверхностно-активных веществ (эмульгаторов).

Течение эмульсий в микроканалах (капиллярах, трещинах, порах) сопровождается закупоривающим действием, которое традиционно объяснялось капиллярными явлениями или переносом твердых примесей, приводящим к образованию жидких или твердых структур, перекрывающих микроканалы [1]. Экспериментальные исследования показали, что блокирующая способность высококонцентрированных эмульсий имеет иную природу и наблюдается, когда размеры микрокапель эмульсии во много раз меньше характерных поперечных размеров микроканалов, а примеси отсутствуют, или их количество недостаточно для создания препятствий.

Соответствующее явление известно как «эффект динамического запираания» [2-4], который состоит в том, что несмотря на наличие постоянно действующего перепада давления, течение жидкости в микроканале через некоторое время скачкообразно практически полностью прекращается (скорость течения уменьшается на несколько порядков). Эффект наблюдается для высококонцентрированных (объемная доля сплошной фазы менее 30 %) обратных эмульсий при всех типах течений (плоских, осесимметричных, радиальных), не зависит от длины канала. Развитие процесса запираания сопровождается структуризацией эмульсии в микроканале (рис. 1): до момента запираания визуально наблюдаются продольные структуры («линии тока»), после – поперечные («эквипотенциальные линии», «четочные структуры»), часто наблюдается скопление капель эмульсии у входа в сужение микроканала.

Экспериментально установлено, что динамическое запираание обусловлено процессами структурирования деформированных микрокапель воды у входа в микроканал. Предполагается, что физическая сторона эффекта связана со сближением

капель, окруженных молекулами эмульгатора, при больших градиентах давления и появления «трения» между ними вследствие взаимодействия поверхностных слоев.

Вывод о решающей роли взаимодействия между поверхностями капель эмульсии, препятствующего взаимному перемещению капель как причины радикального замедления течения вплоть до полной блокировки сделан в работах [5, 6] на основе математического моделирования высококонцентрированной эмульсии как структуры из плотно упакованных деформированных капель, окруженных упругими оболочками.

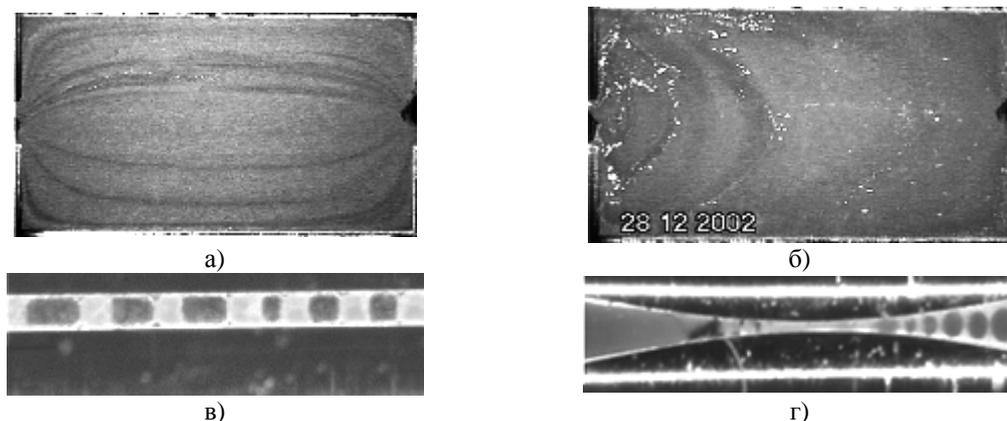


Рис. 1. Структуризация эмульсии в микроканалах различной формы при возникновении эффекта динамического запирания [2-4]:  
а) продольные структуры («линии тока») в ячейке Хилли-Шоу до момента запираения;  
б) поперечные структуры («эквипотенциальные линии») в ячейке Хилли-Шоу в состоянии запираения;  
в) «четочные» поперечные структуры в цилиндрическом канале;  
г) скопление капель у входа в сужение микроканала

### Математическая модель

В данной работе для исследования процессов, приводящих к динамическому запираению, рассмотрена модель высококонцентрированной эмульсии как двухфазной системы, состоящей из сплошной фазы (жидкости) и дисперсной фазы (капель).

Движение жидкости определяется методом решеточных уравнений Больцмана [7, 8]. Течение жидкости рассматривается как движение ансамбля псевдочастиц, заданного функциями распределения по дискретным скоростям в узлах симметричной пространственной решетки.

Эволюция во времени функции распределения частиц жидкости  $f(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{v}}, \tilde{t})$  описывается уравнением Больцмана с оператором столкновений в приближении Бхатнагара-Гросса-Крука:

$$\frac{df(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{v}}, \tilde{t})}{d\tilde{t}} = - \frac{f(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{v}}, \tilde{t}) - f^{(eq)}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})}{\tilde{\tau}}, \quad (1)$$

где  $\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{v}}$  – координаты и скорость частицы в момент времени  $\tilde{t}$ ;  $\tilde{\tau}$  – время релаксации вследствие столкновений;  $f^{(eq)}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})$  – равновесная функция распределения. После дискретизации по пространству, времени и скоростям ( $Dx = Dy = Dt = 1$ ) имеем решеточное уравнение Больцмана в виде:

$$f_i^*(\mathbf{r}, t) = f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)}{t} + F_i, \quad (2)$$

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_i^*(\mathbf{r}, t), \quad i = 0, 1, \dots, 8,$$

где  $f_i(\mathbf{r}, t)$  – функция распределения частиц с дискретной скоростью  $\mathbf{e}_i$  в узле решетки с координатами  $\mathbf{r} = (x, y)$ ;  $x = 1, 2, \dots, L_x$ ;  $y = 1, 2, \dots, L_y$ ; для двумерной девятискоростной решетки

D2Q9  $\mathbf{e}_0 = (0,0)$ ,  $\mathbf{e}_{1-4} = \{(1,0), (0,1), (-1,0), (0,-1)\}$ ,  $\mathbf{e}_{5-8} = \{(1,1), (-1,1), (-1,-1), (1,-1)\}$ ;  $f_i^{eq}$  – равновесная функция распределения в виде первых членов разложения функции Максвелла-Больцмана по степеням  $u/c$  ( $c = 1/\sqrt{3}$  – скорость звука):

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[ \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c} + 3 \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - u^2}{2c^2} \right] \quad (3)$$

$t$  – время релаксации, связанное с кинематической вязкостью жидкости  $\eta(\mathbf{r}, t)$  соотношением:

$$t = 3\eta + \frac{1}{2} \quad (4)$$

$w_0 = 4/9$ ,  $w_{1-4} = 1/9$ ,  $w_{5-8} = 1/36$  – коэффициенты нормировки;  $\mathbf{e}$  – пористость;  $F_i$  – дискретные компоненты внешних сил  $\mathbf{F}$ , вычисляемые по схеме Гао (Guo):

$$F_i = w_i \rho \left[ \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c} - \frac{1}{2t} \frac{\partial \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{\partial \mathbf{e}_i} + \frac{9 \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})}{e} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{e}_i} \right] \quad (5)$$

плотность  $\rho$ , скорость  $\mathbf{u}$  и давление жидкости  $P$  вычисляются как:

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^8 f_i \mathbf{e}_i + \frac{1}{2} \rho \mathbf{F}, \quad p = \frac{\rho}{3e} \quad (6)$$

Размерность физических величин выражается через решеточные единицы длины  $lu$  (lattice unit), времени  $ts$  (time step), массы  $mu$  (mass unit). Известно, что данная формулировка решеточного уравнения Больцмана эквивалентна уравнениям Навье-Стокса при малых числах Маха, т.е. для  $u < 0,1$ .

Капли эмульсии рассматриваются как дисперсные частицы и описываются на основе стохастической модели [9] с помощью целочисленной функцией числа частиц  $N(\mathbf{r}, t)$ , заданной в каждом узле решетки. Капли могут находиться в свободном и связанном состоянии, переход в связанное состояние происходит при превышении заданной пороговой концентрации частиц  $N_{max}$  в узле.

Движение капель складывается из переноса потоком жидкости и свободного блуждания. На каждом временном шаге  $\Delta t_s^3 \Delta t = 1$  смещение дисперсной частицы определяется вектором:

$$\Delta \mathbf{r} = \eta_1 \mathbf{e}_1 + \eta_2 \mathbf{e}_2 + \eta_3 \mathbf{e}_3 + \eta_4 \mathbf{e}_4, \quad (7)$$

где  $\eta$  – случайные величины, распределенные по Бернулли, принимающие значение 1 с вероятностью  $P_i$ ,  $P_i = \max_{\mathbf{e}} \left( 0, \Delta t_s \frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{u}_p}{e} \right) \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{e}_i}$  – вероятности смещения в дискретных

направлениях решетки,  $\Delta t_s$  – шаг по времени для распределения частиц, достаточно малый, чтобы выполнялись условия  $P_i < 1$ ;  $\mathbf{u}_p$  – скорость, определяемая как:

- а) скорость случайных блужданий (параметр модели);
- б) гидродинамическая скорость жидкости  $\mathbf{u}$  в узле  $\mathbf{r}_p$  (для свободных капель эмульсии);

в) взвешенная средняя скорость в соседних с  $\mathbf{r}_p$  узлах (для связанных капель):

$$\mathbf{u}_p = \sum_{x,y} D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (8)$$

где  $D(\mathbf{r})$  – весовая функция (сглаженная дельта-функция Дирака) в виде:

$$D(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{4h^2} \left[ \frac{\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{r}}{h} + \cos \frac{\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{r}}{h} \right] \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{e}_x}, & |x| < h, |y| < h \\ 0, & |x| \geq h, |y| \geq h; \end{cases} \quad (9)$$

$h$  – сглаживающая длина весовой функции.

Движение жидкости через узел, занятый связанными каплями, описывается как фильтрация введением силы сопротивления вида [8]:

$$\mathbf{F} = - \frac{\epsilon n_0}{K} \mathbf{u}, \quad (10)$$

где  $K$  – проницаемость среды;  $n_0$  – кинематическая вязкость сплошной фазы.

Турбулентность описывается введением вихревой вязкости [10]:

$$n_t = C_s^2 S, \quad (11)$$

где  $S = \sqrt{2D_{II}}$ ;  $D_{II} = \overset{\circ}{\mathbf{a}} S_{ab} S_{ab}$  – второй инвариант тензора скоростей деформаций

$$S_{ab} = - \frac{3}{2\tau t} \overset{\circ}{\mathbf{a}} (e_i)_a (e_i)_b (f_i - f_i^{eq}), \quad \mathbf{a}, \mathbf{b} = 1, 2; \quad C_s = 0,1$$
 – константа Смагоринского.

Компоненты тензора скоростей деформаций  $S_{ab}$  вычисляются через значение  $\mathbf{t}$  на предыдущем временном шаге. Время релаксации  $\mathbf{t}(\mathbf{r}, t)$  определяется в каждом узле решетки через суммарную вязкость  $n = n_j + n_t$  из соотношения (4), учитывая зависимость вязкости от концентрации дисперсных частиц в виде [11]:

$$n_j = n_0 \frac{\overset{\circ}{\mathbf{c}}}{\overset{\circ}{\mathbf{c}}} \left( 1 + 1,5 \frac{j}{j_0} \right)^{\frac{\overset{\circ}{\sigma}}{\overset{\circ}{\sigma}}} \left( 1 - \frac{j}{j_0} \right)^{\frac{\overset{\circ}{\sigma}}{\overset{\circ}{\sigma}}}, \quad (12)$$

где  $j = \frac{N}{N_{\max}} j_0$  – объемная доля дисперсной фазы;  $j_0 = 0,6$  – объемная доля дисперсной фазы, соответствующая плотной упаковке дисперсных частиц.

### Анализ результатов

Моделирование течения эмульсии выполнялось для прямоугольной области (решетка размером  $500 \times 100$  узлов), описывающей микроканал переменного сечения, с целью воспроизведения эффекта динамического запираания. Граничные условия задавались в виде значений плотности (давления) на входе  $\Gamma_{in}$  и выходе  $\Gamma_{out}$  микроканала. Для дисперсной фазы на входе задавалось распределение с постоянным средним числом частиц  $N_0$ .

Численное моделирование выполнялось с помощью специально разработанной программы на языке FORTRAN при следующих значениях параметров (в решеточных единицах):

$$\mathbf{t} = 1, \quad r_{in} = 1,1, \quad r_{out} = 1,0, \quad N_0 = 25, \quad N_{\max} = 40, \quad e = 0,25, \quad K = 0,005, \quad (13)$$

$$h = 3, \quad 10, \quad Dt_s = 10, \quad 50.$$

Анализ результатов вычислительных экспериментов позволяет предположить, что к явлению динамического запираания приводят процессы структуризации эмульсии в микроканале (рис. 2). При течении концентрированной эмульсии как дисперсной среды происходит кластеризация (группировка) капель в виде слоев вдоль линий тока. Для этой стадии процесса характерны продольные структуры связанных капель. Вследствие сил притяжения оболочек капель формируются цепочки и скопления, размер которых постепенно становится сравнимым с размерами микроканала, а подвижность уменьшается. Снижение скорости течения и увеличения радиуса взаимного влияния связанных капель приводит к образованию поперечных структур, перекрывающих микроканал. Перепад давления происходит в небольшой области у входа в микроканал (рис. 3), где образуется скопление связанных капель. Течение сплошной фазы и несвязанных микрокапель принимает характер фильтрации сквозь скопления связанных капель. Фильтрация через подвижную сжимаемую среду с переменной степенью

извилистости (tortuosity) сопровождается развитием капиллярных неустойчивостей, ведущим к хаотизации течения – движение подаваемой жидкости происходит не по направлению приложенного градиента давления, а в виде микропотоков по случайно образовавшимся каналам между неподвижными скоплениями капель.

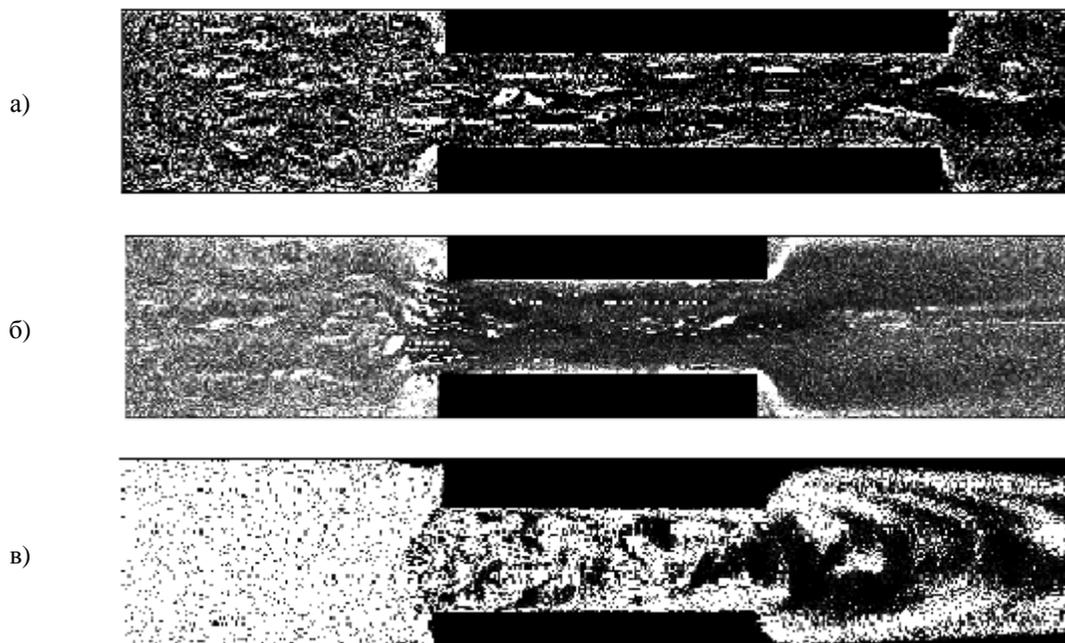


Рис. 2. Структуризация эмульсии в микроканале по результатам моделирования:  
а) продольные структуры («линии тока») до момента запираания;  
б) скопление капель у входа в микроканал;  
в) поперечные структуры («эквипотенциальные линии») в состоянии запираания

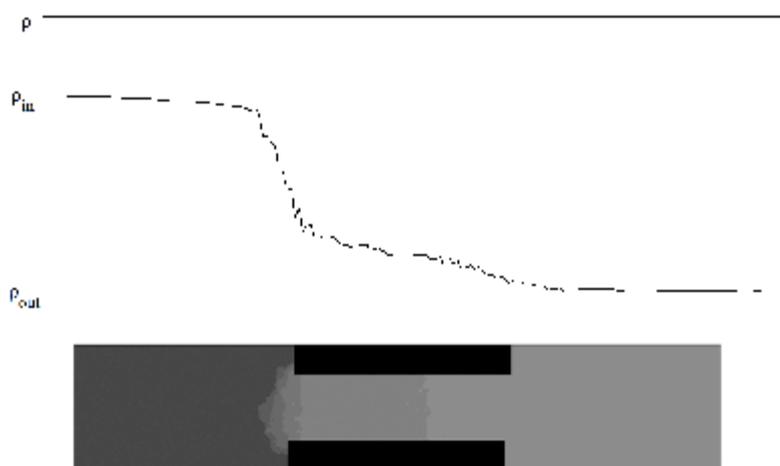


Рис. 3. Распределение плотности (давления) эмульсии вдоль микроканала в состоянии запираания (рис. 2б)

**Заключение.** Применение стохастической модели движения капель эмульсии и метода решеточных уравнений Больцмана позволяет моделировать течение концентрированных эмульсий в микроканалах и воспроизвести некоторые существенные особенности течения, связанные со структуризацией эмульсии при изменении характера течения от свободного до фильтрации. Результаты моделирования согласуются с экспериментальными данными и подтверждают гипотезу о роли взаимодействия капель эмульсии в развитии эффекта динамического запираания.

**Список библиографических ссылок**

1. Wyss H., Blair D., Morris J., Stone H., Weitz D. Mechanism for clogging of microchannels // *Physical Review E*. 2006. Vol. 74 (6), 061402 (4).
2. Ахметов А.Т., Саметов С.П. Особенности течения дисперсии из микрокапель воды в микроканалах // *Письма в ЖТФ*, 2010, Т. 36, Вып. 22. – С. 21-28.
3. Саметов С.П., Ахметов А.Т. Гидродинамические эффекты при течении обратных эмульсий в микроканалах. Lambert Academic Publishing, 2011. – 113 с.
4. Рахимов А.А. Изучение эффекта динамического запираания в микроканале. Влияние включений // *Вестник Башкирского университета*, 2013, Т. 18, № 2. – С. 344-349.
5. Маланичев И.В., Ахмадиев Ф.Г. Численное моделирование эффекта динамического запираания течения обратных эмульсий. Математические методы в технике и технологиях – ММТТ-26. Сб. трудов XXVI Междунар. науч. конф., Т. 3. – Нижний Новгород, 2013. – С. 44-47.
6. Маланичев И.В., Ахмадиев Ф.Г. Моделирование течения высококонцентрированных эмульсий в микроканалах. Математические методы в технике и технологиях – ММТТ-27. Сб. трудов XXVII Междунар. науч. конф., Т. 4. – Саратов, 2014. – С. 24-28.
7. Sukop M., Thorne D. Lattice Boltzmann Modeling. An Introduction for Geoscientists and Engineers. – Berlin: Springer, 2006. – 172 p.
8. Guo Z., Zhao T. A Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media // *Physical Review E*. 2002, Vol. 66, 036304(9).
9. Chopard B., Masselot A., Dupuis A. A lattice gas model for erosion and particles transport in a fluid // *Computer Physics Communications*, 2000, Vol. 129. – P. 167-176.
10. Hou S., Sterling J., Chen S., Doolen G. A lattice Boltzmann subgrid model for high Reynolds number flows // *Fields Institute Communications*, 1996, Vol. 6. – P. 151-166.
11. Romero C., Davis R. Global model of crossflow microfiltration based on hydrodynamic particle diffusion // *Journal of Membrane Science*, 1988, Vol. 39 (2). – P. 157-185.

**Malanichev I.V.** – candidate of technical sciences

E-mail: [mlnchv@bk.ru](mailto:mlnchv@bk.ru)

**Akhmadiev F.G.** – doctor of technical sciences, professor

E-mail: [akhmadiev@kgasu.ru](mailto:akhmadiev@kgasu.ru)

**Kazan State University of Architecture and Engineering**

The organization address: 420043, Russia, Kazan, Zelenaya st., 1

**Stochastic model of concentrated emulsion flow in microchannel****Resume**

Invert water-hydrocarbon emulsions as a dispersions of microdroplets of water in the hydrocarbon (oil, diesel fuel, bitumen, tar) are widely used in the oil and building industry. Dynamic flow blocking effect is detected during the flow of concentrated (the volume fraction of the continuous phase of less than 30 %) invert emulsions in microchannels (capillaries, cracks, pores). Flow rate over time is slowed by several orders of magnitude despite the permanent pressure drop. It can not be explained by capillary effects, since the size of the microdroplets of the emulsion is much smaller than the characteristic transverse dimensions of the microchannels. The nature of this phenomenon is not clear enough. Attempts of theoretical description of the effect of locking is based on assumption about of elastic interaction of emulsifier films surrounding microdroplets acquiring property of «rigidity» during deformation.

A model of the flow of highly concentrated emulsions as a two-phase medium is considered for the study of the processes leading to the dynamic flow blocking effect. The movement of a continuous phase is determined by the lattice Boltzmann method, as droplet phase motion is based on a stochastic model. Emulsion droplets are considered as dispersed

particles whose motion is the sum of the transfer by fluid flow and free roaming. Droplets may be in the free and bound states. The transition to a bound state occurs above a given threshold concentration of drops in the node. Fluid flow through a node filled with drops in the bound state is regarded as filtering.

Simulation of the emulsion flow in microchannel was carried out and processes of emulsion structuring during changing the flow character from free flow to filtration were investigated. It is shown that the longitudinal structures are formed before locking and transverse structures after.

The simulation results are consistent with experimental data.

**Keywords:** lattice Boltzmann method, stochastic simulation, emulsion, effect of dynamic blocking, filtering.

### Reference list

1. Wyss H., Blair D., Morris J., Stone H., Weitz D. Mechanism for clogging of microchannels // *Physical Review E*. 2006. Vol. 74 (6), 061402(4).
2. Akhmetov A.T., Sametov S.P. Peculiarities of the flow of water microdroplets dispersion in microchannels // *Pisma v Zhurnal Tehnicheskoj Fiziki*, 2010, Vol. 36, № 22. – P. 21-28.
3. Sametov S.P., Akhmetov A.T. Hydrodynamic effects in the flow of invert emulsions in microchannels: Lambert Academic Publishing, 2011. – 113 p.
4. Rahimov A.A. The study of the effect of dynamic blocking in microchannel. Effect of inclusions // *Vestnik Bashkirskogo Universiteta*, 2013, Vol. 18, № 2. – P. 344-349.
5. Malanichev I.V., Akhmadiev F.G. Numerical simulation of invert emulsion dynamic flow blocking effect // The collection of proceedings «Mathematical Methods in Technics and Technologies – MMTT-26», Vol. 3. – Nizhniy Novgorod, 2013. – P. 44-47.
6. Malanichev I.V., Akhmadiev F.G. Flow simulation of highly concentrated emulsions in microchannels // The collection of proceedings «Mathematical Methods in Technics and Technologies – MMTT-27», Vol. 4. – Saratov, 2014. – P. 24-28.
7. Sukop M., Thorne D. Lattice Boltzmann Modeling. An Introduction for Geoscientists and Engineers. – Berlin: Springer, 2006. – 172 p.
8. Guo Z., Zhao T. A Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media // *Physical Review E*, 2002, Vol. 66, 036304(9).
9. Chopard B., Masselot A., Dupuis A. A lattice gas model for erosion and particles transport in a fluid // *Computer Physics Communications*, 2000, Vol. 129. – P. 167-176.
10. Hou S., Sterling J., Chen S., Doolen G. A lattice Boltzmann subgrid model for high Reynolds number flows // *Fields Institute Communications*, 1996, Vol. 6. – P. 151-166.
11. Romero C., Davis R. Global model of crossflow microfiltration based on hydrodynamic particle diffusion // *Journal of Membrane Science*, 1988, Vol. 39 (2). – P. 157-185.