

УДК 532.1:517.958

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ КАПИЛЛЯРНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ С НЕРЕГУЛЯРНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

В.К. Полевиков, Ю.Н. Волотовская

Белорусский государственный университет, Минск

NUMERICAL MODELING OF EQUILIBRIUM CAPILLARY SURFACES WITH IRREGULAR BOUNDARY CONDITIONS

V.K. Polevnikov, Y.N. Volotovskaya

Belarusian State University, Minsk

Предлагается алгоритм численного моделирования равновесных капиллярных поверхностей с нерегулярными условиями контакта. Он представляет собой комбинацию итерационно-разностного метода решения краевой задачи и метода Рунге-Кутты решения начальной задачи для моделирования равновесных форм капиллярной поверхности, опирающейся на линию излома твердой стенки. Алгоритм апробирован на известной задаче капиллярной гидростатики о жидкости, вытекающей из капилляра.

Ключевые слова: капиллярная поверхность, параметрические дифференциальные уравнения, нерегулярные граничные условия, численное моделирование, вычислительный алгоритм, численные результаты.

The algorithm for numerical modeling of equilibrium capillary surfaces with irregular contact conditions is presented. It is a combination of an iteration-difference method to solve the boundary-value problem and a Runge-Kutta method to solve the initial-value problem for modeling of equilibrium shapes of a capillary surface in contact with the fracture line of a solid wall. The algorithm is approved on the well-known problem of capillary hydrostatics about fluid flowing out of the capillary.

Keywords: capillary surface, parametric differential equations, irregular boundary conditions, numerical modeling, computational algorithm, numerical results.

Введение

Освоение космического пространства потребовало развития новых разделов гидромеханики, изучающих поведение жидкости в слабых гравитационных полях и при невесомости. По мере совершенствования техники, расширения исследований на борту космических аппаратов роль жидких веществ все более возрастает. Они используются в двигательных и энергетических установках, системах терморегулирования, жизнеобеспечения и др. Создано научно-техническое направление – космическая технология, основу которого составляет получение жидких веществ или материалов, образуемых после затвердевания расплавов, с уникальными свойствами по чистоте и однородности структуры. В соответствии с этим расширяется круг возникающих задач гидромеханики. Их экспериментальные исследования сложны, трудоемки и требуют больших материальных затрат. Поэтому основное место при получении качественных и количественных результатов отводится математическому моделированию.

Специфика задач гидромеханики невесомости состоит в том, что в них при наличии свободной поверхности существенную, часто доминирующую, роль играют поверхностные силы. Капиллярные явления широко распространены и в наземных условиях, их изучение важно для многих приложений.

Составной и неотъемлемой частью общей проблемы являются задачи статики. В них изучаются формы свободной поверхности жидкости в состоянии равновесия и устойчивость этого состояния по отношению к малым возмущениям при наличии слабого поля массовых сил или его отсутствия. Решение указанных задач представляет самостоятельный интерес и имеет разнообразные приложения в наземной и космической технике и технологии. Задачи статики являются также исходными при исследовании большинства задач динамики жидкости [1].

Задачи с нерегулярными условиями на границе занимают важное место в гидромеханике невесомости. Например, численное моделирование процесса выращивания монокристаллов, как и решение многих других прикладных задач гидромеханики невесомости, требует определения равновесных форм свободной поверхности с нерегулярными условиями на границе, при которых свободная поверхность опирается на линию излома твердой стенки [1]–[7]. Такие задачи ранее численно не решались из-за отсутствия подходящих численных подходов.

Данная работа посвящена построению и апробации алгоритма численного моделирования равновесных капиллярных поверхностей с нерегулярными граничными условиями для задачи о жидкости, вытекающей из капилляра [1]–[7].

1 Математическая модель

Рассмотрим каплю объема V , свисающую из вертикального цилиндрического капилляра радиуса R_0 . Примем радиус R_0 за единицу длины и сформулируем осесимметричную задачу о равновесной форме свободной поверхности жидкости, форма которой определяется равновесной линией меридиана, в безразмерных переменных. Для этого введем безразмерные цилиндрические координаты z и r так, чтобы ось z совпала с осью симметрии капилляра, и направим её против вектора ускорения свободного падения g . Выберем начало координат на плоской горизонтальной пластине, а именно в центре основания капилляра. Обозначим через s безразмерную длину дуги искомой равновесной линии меридиана, изменяющуюся от $s=0$ в точке контакта меридиана с плоскостью $r=0$ до $s=L$ в точке контакта меридиана с кромкой капилляра в плоскости $z=0$. Расположение осей, а также другие введенные обозначения продемонстрированы на рисунке 1.1.

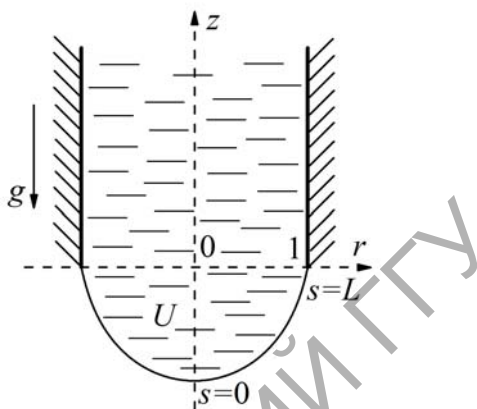


Рисунок 1.1 – Иллюстрация постановки задачи

В предположении осевой симметрии конфигурация свободной поверхности описывается некоторой парой параметрических функций $r(s)$, $z(s)$, которые в условиях равновесия и присутствия силы тяжести удовлетворяют нелинейным дифференциальным уравнениям Юнга-Лапласа [2]–[5]:

$$\begin{aligned} z'' &= r'F, & r'' &= -z'F, & 0 \leq s \leq L, & (1.1) \\ F &= -\text{Bo} z - z'/r + C, \end{aligned}$$

где производные берутся по переменной s ; $\text{Bo} = \rho g R_0^2 / \sigma$ – число Бонда, характеризующее отношение гравитационных сил к силам поверхностного натяжения; C – неопределенная константа; ρ – плотность жидкости; σ – коэффициент поверхностного натяжения.

Система дифференциальных уравнений дополняется условиями симметрии на оси капилляра

$$r(0) = 0, \quad r'(0) = 1, \quad z'(0) = 0 \quad (1.2)$$

и краевыми условиями контакта с кромкой капилляра

$$r(L) = 1, \quad z(L) = 0. \quad (1.3)$$

Считая безразмерный объем капли заданным, определим его как объем тела вращения:

$$U = -2\pi \int_0^L z r r' ds, \quad (U = V/R_0^3). \quad (1.4)$$

Естественным свойством параметрических функций $r(s)$, $z(s)$ является тождество $r'^2 + z'^2 \equiv 1$. Из системы (1.1) легко видеть, что если указанное равенство выполнено при каком-либо одном значении s , то оно справедливо и для всех $s \in [0, L]$.

Таким образом, математическая модель, описывающая равновесную форму свободной поверхности жидкости параметрическими функциями $r(s)$, $z(s)$, $0 \leq s \leq L$, состоит из дифференциальных уравнений (1.1), граничных условий (1.2), (1.3) и интегрального условия (1.4).

2 Замена переменных

Особенность параметрической постановки (1.1)–(1.4) в том, что отсутствует подходящая формула для вычисления безразмерной длины L равновесной линии меридиана на итерациях. Это создает большие трудности для численного решения. Следуя стратегии [8], [9], сделаем замену переменных

$$\bar{s} = s/L \in [0, 1], \quad \bar{z} = z/L, \quad \bar{r} = r/L$$

для получения явной формулы вычисления безразмерной длины L в процессе итерационного решения нелинейной задачи.

Задача (1.1)–(1.4) в новых переменных принимает вид

$$\begin{cases} \bar{z}'' = \bar{r}'F, & (2.1) \\ \bar{z}'(0) = 0, \quad \bar{z}(1) = 0, & (2.2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \bar{r}'' = -\bar{z}'F, & (2.3) \\ \bar{r}(0) = 0, \quad \bar{r}'(0) = 1, & (2.4) \end{cases}$$

$$F = -\text{Bo} L^2 \bar{z} - \bar{z}'/\bar{r} + C, \quad 0 \leq \bar{s} \leq 1, \quad (2.5)$$

$$L = \left(\frac{-U}{2\pi} \right)^{1/3} \left(\int_0^1 \bar{z} \bar{r} \bar{r}' d\bar{s} \right)^{-1/3}, \quad (2.6)$$

где C – неопределенная константа, U – свободный параметр.

Чтобы определить константу C запишем уравнение (2.1) в виде

$$(\bar{r} \bar{z}')' = \bar{r} \bar{r}' (-\text{Bo} L^2 \bar{z} + C).$$

Проинтегрировав его затем на отрезке $\bar{s} \in [0, 1]$ с учетом условий (2.2), (2.4), (2.6) имеем

$$C = L(2\bar{z}'(1) - \text{Bo} U / \pi). \quad (2.7)$$

3 Вычислительный алгоритм

Введем равномерную сетку

$$\{\bar{s}_i = ih \mid i = \overline{0, N}, h = 1/N\}.$$

Рассмотрим краевую задачу (2.1)–(2.2). Следуя стандартному подходу построения конечно-разностных методов, заменим производные в дифференциальном уравнении (2.1) разностными отношениями

$$\bar{z}_{ss,i} = \bar{r}_{s,i} F_i, \quad i = \overline{1, N-1},$$

где $\bar{z}_{ss,i} = (\bar{z}_{i+1} - 2\bar{z}_i + \bar{z}_{i-1})/h^2$,

$$\bar{r}_{s,i} = (\bar{r}_{i+1} - \bar{r}_{i-1})/(2h), \quad i = \overline{1, N-1}.$$

Полученное разностное уравнение имеет второй порядок аппроксимации. Аппроксимируем функцию F из (2.5) и краевые условия (2.2) со вторым порядком. Для функции F получаем

$$\begin{aligned} F(\bar{z}_i, \bar{r}_i, \bar{z}_{s,i}, L, C) &= F_i = \\ &= -\text{Bo} L^2 \bar{z}_i - \bar{z}_{s,i} / \bar{r}_i + C. \end{aligned} \quad (3.1)$$

При определении безразмерной длины L применяем аналог правила средних для вычисления интеграла в (2.6)

$$L = \left(\frac{-\frac{U}{2\pi}}{\sum_{i=1}^N (\bar{z}_i + \bar{z}_{i-1})(\bar{r}_i + \bar{r}_{i-1})(\bar{r}_i - \bar{r}_{i-1})/4} \right)^{1/3}. \quad (3.2)$$

Определим константу C из (2.7)

$$C = L(2\bar{z}'_N - \text{Bo}U/\pi). \quad (3.3)$$

В (3.3) входит незаданное на правом конце значение производной \bar{z}'_N . Из разложения в ряд Тейлора с учетом граничных условий находим

$$\bar{z}'_N = \frac{-2L\bar{z}_{N-1} + hC(1 - L\bar{r}_{N-1})}{hL(3 - L\bar{r}_{N-1})} + O(h^2).$$

Подставляя полученное приближенное выражение в (3.3), после простых преобразований имеем

$$C = \frac{-4\pi L\bar{z}_{N-1} - \text{Bo}U h L(3 - L\bar{r}_{N-1})}{\pi h(1 + L\bar{r}_{N-1})}. \quad (3.4)$$

Теперь аппроксимируем условие симметрии $\bar{z}'(0) = 0$. Из разложения в ряд Тейлора

$$\begin{aligned} \bar{z}'_0 = 0 &= \frac{\bar{z}_1 - \bar{z}_0}{h} - \frac{h}{2} z''_0 + O(h^2) = \\ &= \frac{\bar{z}_1 - \bar{z}_0}{h} + \frac{h}{2} \left(\text{Bo} L^2 \bar{z}_0 + \frac{\bar{z}'_0}{\bar{r}_0} - C \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

Для раскрытия неопределенности $\frac{0}{0}$ применяем правило Лопитала

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{\bar{z}'(s)}{\bar{r}(s)} = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\bar{z}''(s)}{\bar{r}'(s)} = z''_0.$$

Следовательно, с точностью до членов второго порядка будем иметь

$$z''_0 = (-\text{Bo}L^2 \bar{z}_0 + C)/2,$$

откуда следует

$$\bar{z}_{s,0} = 1/4 h (-\text{Bo}L^2 \bar{z}_0 + C),$$

где $\bar{z}_{s,0} = (\bar{z}_1 - \bar{z}_0)/h$.

Таким образом, приходим к конечно-разностной схеме второго порядка аппроксимации

$$\begin{cases} \bar{z}_{ss,i} = \bar{r}_{s,i} F_i, & i = \overline{1, N-1}, \\ \bar{z}_{s,0} = 1/4 h (-\text{Bo}L^2 \bar{z}_0 + C), & \bar{z}_N = 0, \end{cases} \quad (3.5)$$

где F , L и C вычисляются по формулам (3.1), (3.2), (3.4) соответственно.

Дифференциальное уравнение (2.3) с начальными условиями (2.4) сведет к задаче Коши для системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\begin{cases} \bar{r}' = v, & \bar{r}(0) = 0, \\ v' = -\bar{z}' F, & v(0) = 1. \end{cases}$$

Решение полученной задачи ищем явным методом Рунге-Кутты второго порядка точности

$$\begin{cases} \bar{r}_{i+1} = \bar{r}_i + h(v_i + v_{i+1})/2, & \bar{r}_0 = 0, \\ v_{i+1} = v_i + h \bar{z}_{s,i} \left(\text{Bo}L^2 \bar{z}_i + \frac{\bar{z}_{s,i}}{\bar{r}_i + h v_i/2} - C \right), \\ v_0 = 1, & i = \overline{0, N-1}, \end{cases} \quad (3.6)$$

где L и C вычисляются по формулам (3.2), (3.4) соответственно.

Для решения нелинейной задачи (3.5)–(3.6) используем итерационную схему

$$\begin{cases} \bar{z}_{ss,i}^{n+1} = \bar{r}_{s,i}^n F(\bar{z}_i^n, \bar{r}_i^n, \bar{z}_{s,i}^n, L^n, C^n), & i = \overline{1, N-1}, \\ \bar{z}_{s,0}^{n+1} = 1/4 h (-\text{Bo}(L^n)^2 \bar{z}_0^n + C^n), & \bar{z}_N^{n+1} = 0, \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\begin{cases} \bar{r}_{i+1}^{n+1} = \bar{r}_i^{n+1} + h(v_i + v_{i+1})/2, & \bar{r}_0^{n+1} = 0, \\ v_{i+1} = v_i + h \bar{z}_{s,i}^{n+1} \times \\ \times \left(\text{Bo}(L^n)^2 \bar{z}_i^{n+1} + \frac{\bar{z}_{s,i}^{n+1}}{\bar{r}_i^{n+1} + h v_i/2} - C^n \right), \\ v_0 = 1, & i = \overline{0, N-1}. \end{cases} \quad (3.8)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ – номер итерации.

Реализация схемы (3.7)–(3.8) на каждой итерации сводится к решению прогоночной задачи (3.7) и решению по рекуррентным правилам задачи (3.8). Метод прогонки устойчив на каждой итерации. В результате определяются новые итерационные приближения \bar{r}_i^{n+1} , \bar{z}_i^{n+1} для координат свободной поверхности, с помощью которых затем вычисляются L^{n+1} , C^{n+1} , F^{n+1} . Для улучшения устойчивости итерационной схемы в алгоритм вводились параметры релаксации.

4 Численные результаты

Расчеты осуществлялись на равномерной сетке с шагом $h = 1/500$ для различных чисел Бонда. Считали, что значение объема превышает критическое, если при этом значении итерации

расходились. Такой способ исследования устойчивости апробирован в [8], [9]. Критические значения объема вычислены по методу дихотомии с погрешностью не более 0.01%.

На рисунке 4.1 показана эволюция жидкости, вытекающей из капилляра с увеличением объема капли U при различных числах Бонда. Из рисунка видно, что с ростом объема капля сначала принимает выпуклые формы, близкие к сферическим, но наступает момент, когда у свободной поверхности вблизи кромки капилляра скачкообразно образуется шейка, которая постепенно сглаживается, и в итоге капля не удерживается на кромке и происходит ее отрыв. Критические (отрывные)

формы показаны на рисунке штриховыми линиями.

В таблице 4.1 приведены теоретические критические значения объема U^* и высоты свисающей капли $z_0^* = |z^*(0)|$ при $U = U^*$ для некоторых характерных чисел Бонда, полученные линейной интерполяцией по данным таблицы 1, приведенной в [7], и соответствующие критические значения U_{cr} , $z_{cr} = |z_{cr}^*(0)|$ при $U = U_{cr}$, полученные численно. Погрешность между численными и аналитическими значениями может быть обусловлена погрешностью линейной интерполяции порядка 0.0014.

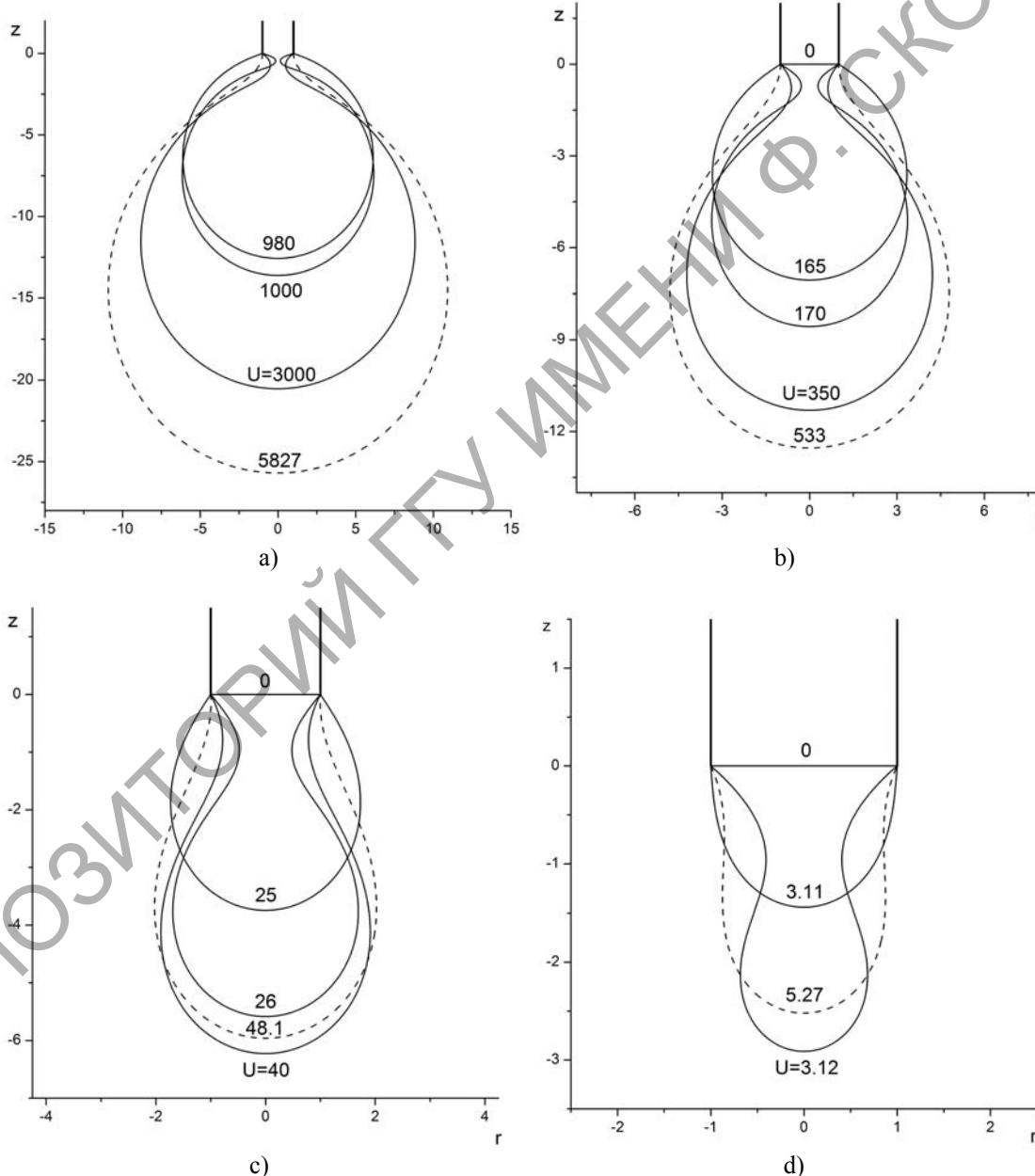


Рисунок 4.1 – Равновесные формы капли, свисающей с кромки капилляра:

a) $Bo = 10^{-3}$; b) $Bo = 10^{-2}$; c) $Bo = 10^{-1}$; d) $Bo = 1$;

штриховые линии – отрывные равновесные формы

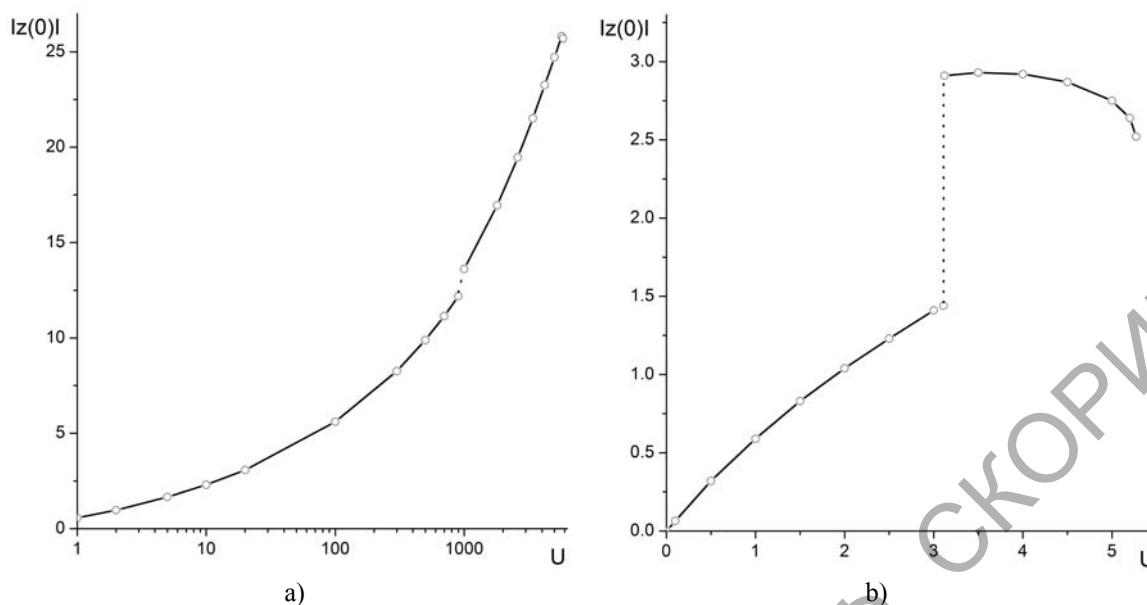


Рисунок 4.2 – Изменение высоты капли, свисающей с кромки капилляра, в зависимости от ее объема: а) $Bo = 10^{-3}$; б) $Bo = 1$

Таблица 4.1 – Значения характерных критических параметров, полученных численно и предсказанных теорией устойчивости

Bo	$U^* Bo^{3/2}$	$U_{cr} Bo^{3/2}$	$z_0^* \sqrt{Bo}$	$z_{cr} \sqrt{Bo}$
10^{-4}	0.060	0.061	0.53	0.53
10^{-3}	0.183	0.184	0.81	0.81
10^{-2}	0.532	0.533	1.25	1.25
10^{-1}	1.518	1.520	1.88	1.88
1	5.265	5.267	2.51	2.52

Таким образом, полученные численные результаты согласуются с данными линейной теории устойчивости [1]–[7], а итерационная схема (3.7)–(3.8) адекватно реагирует на кризис равновесного состояния, обусловленный осесимметричными возмущениями.

С ростом числа Бонда скачок между выпуклой и шейкообразной конфигурациями свободной поверхности увеличивается, он показан на рисунке 4.2 пунктирной линией. Интересно, что при достаточно больших числах Бонда по мере приближения к точке отрыва длина капли $|z(0)|$ монотонно убывает вплоть до наступления неустойчивости.

Заключение

В статье впервые построен алгоритм численного моделирования равновесных капиллярных поверхностей в случае, когда свободная поверхность жидкости опирается на линию излома твердой стенки. Алгоритм апробирован на известной задаче капиллярной гидростатики о жидкости, вытекающей из вертикального капилляра в поле

силы тяжести. Впервые получены равновесные формы свободной поверхности с нерегулярными условиями контакта, вплоть до момента потери устойчивости, когда происходит отрыв капли от кромки капилляра. Совпадение критических значений параметров с данными линейной теории устойчивости дает основания предполагать, что построенный алгоритм адекватно реагирует на кризис равновесия и может использоваться не только для моделирования равновесных форм, но и как метод исследования их устойчивости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Слобожанин, Л.А. Гидростатика при слабой гравитации. Форма и устойчивость свободной поверхности : автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук : 01.02.05 / Л.А. Слобожанин; АН СССР. – Новосибирск, 1988. – 32 с.
2. Методы решения задач гидромеханики для условий невесомости / А.Д. Мышкис [и др.] ; под ред. А.Д. Мышкиса. – Киев : Наукова думка, 1992. – 592 с.
3. Гидромеханика невесомости / В.Г. Бабский [и др.] ; под ред. А.Д. Мышкиса. – М. : Наука, 1976. – 504 с.
4. Low-Gravity Fluid Mechanics / A.D. Myshkis. – Springer-Verlag, 1987. – 583 p.
5. Лабунцов, Д.А. Механика двухфазных систем : учеб. пособие для вузов / Д.А. Лабунцов, В.В. Ягов. – М. : Издательство МЭИ, 2000. – 374 с.
6. Слобожанин, Л.А. Об эволюции и отрыве капель и пузырей при их медленном росте / Л.А. Слобожанин, А.Д. Тюпцов. – Харьков, 1972. – 16с. – (Препринт / Физ.-техн. институт низких температур АН УССР).

7. Слобожанин, Л.А. Задачи гидростатики, возникающие при моделировании процесса очистки материалов и выращивания монокристаллов методом плавающей зоны. Часть I. Равновесие и устойчивость расплавленной капли / Л.А. Слобожанин, Н.С. Щербакова. – Харьков, 1984. – 26 с. – (Препринт / Физ.-техн. институт низких температур АН УССР; №13).

8. Polevikov, V.K. Methods for numerical modeling of two-dimensional capillary surfaces / V.K. Polevikov // Computational Methods in Applied Mathematics. – 2004. – Vol. 4, № 1. – P. 66–93.

9. Полевиков, В.К. О методах численного моделирования равновесных капиллярных поверхностей / В.К. Полевиков // Дифференциальные уравнения. – 1999. – Т. 35, № 7. – С. 975–981.

Работа выполнена в рамках задания 1.5.03.2 подпрограммы «Математические методы» Государственной программы научных исследований «Конвергенция» на 2011–2015 гг.

Поступила в редакцию 20.04.12.