

УДК 518.8:53

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПРОФИЛЯ ПОВЕРХНОСТИ МАЛОЙ КАПЛИ РАСПЛАВА Pb–Li В РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ РЕЖИМАХ

Лесев В. Н.¹

MODELING THE KINETICS OF THE SURFACE PROFILE OF A SMALL DROP OF Pb–Li MELT IN DIFFERENT TEMPERATURE MODES

Lesev V. N.

The work presents a mathematical model, which makes it possible to simulate the deformation of liquid drops on a rigid horizontal substrate. The algorithm of numerical implementation of the model is used to study the kinetics of the surface profile of a free lead drop with the small content of lithium in non-isothermal field. Also, the possibility of solving the inverse problem has been studied, i. e. obtaining physical parameters values based on the analysis of the profile drop geometry. The examples of occurring errors have been given.

Keywords: mathematical model, liquid melts, drop profile kinetics, surface tension, angle of contact, numerical implementation.

Введение

Самые ранние результаты по анализу геометрии капель были получены Башфортом и Адамсом [1]. Они рассчитали профили для различных значений поверхностного натяжения и радиуса кривизны в аперксе капли воды, лежащей на стекле. Данные исследований были сведены в таблицы, использование которых в значительной степени ограничено каплями определенного размера, структуры и формы.

В последующем многими авторами было отмечено, что результаты теоретического и практического исследования статистики и динамики поверхности капли малого объема на твердой подложке, особенно зоны трехфазного контакта, представляют ценную информацию для решения важнейших научных и технологических проблем [2–11].

Понятен и проявляемый интерес к изучению неизотермического движения жидкостей, так как большинство физико-химических свойств жидких капель существенным образом зависит от их температуры. Хорошо известно, например, что с ростом температуры значительно снижаются вязкость жидкости и поверхностное натяже-

ние. Этот факт часто находит свое применение на практике.

В связи с интенсификацией производственных процессов увеличилась и роль математического моделирования. Практические запросы, с одной стороны, и успехи математической теории минимальных поверхностей с другой, вызвали новую волну роста активности исследований сразу по нескольким направлениям теории капиллярности [12]. Вместе с тем, следует отметить, что, несмотря на значительный прогресс в данной области, подобные процессы достаточно сложны даже на уровне построения упрощенных моделей, а некоторые проблемы теории капиллярности начали решаться лишь теперь.

В последние годы для практического исследования капиллярных поверхностей и особенностей зоны межфазного контакта стали интенсивно применяться перспективные методы, основанные на анализе оцифрованного изображения системы твердое тело – жидкость – окружающая среда [13–15].

Несмотря на достигнутые результаты в изучении процессов тепло- и массопереноса, поведению жидких капель металлов на твердых подложках при различных температурных режимах уделяется значительно меньше

¹Лесев Вадим Николаевич, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры теории функций и функционального анализа Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова; e-mail: lvn_kbsu@mail.ru.

внимания. Скорее всего, это связано со сложностью аналитического исследования исходной задачи и трудностями получения экспериментальных данных.

Отдельно следует указать и на проблему, связанную с оценкой погрешности при работе с уже имеющимися оцифрованными результатами как реальных, так и численных экспериментов. Поэтому изучение даже частных моделей неизотермического поведения капель может привести к лучшему пониманию более общих и сложных процессов.

1. Аналитическая постановка задачи

Будем исследовать влияние температурного режима на кинетику профиля свободно лежащей жидкой капли расплава на горизонтальной графитовой подложке.

Известно, что форма свободной капли определяется действием сил поверхностного натяжения и силы тяжести. Поверхностное натяжение стремится сделать каплю сферической, а сила тяжести — плоской. Математически баланс между поверхностным натяжением и внешними усилиями, как, например, гравитация, температура, электромагнитное поле и т.п., отражается уравнением Лапласа. Это уравнение является механическим условием равновесия рассматриваемой системы и может быть записано в виде

$$\Delta P = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (1.1)$$

где ΔP — разность давлений на поверхности капли, σ — поверхностное натяжение, R_1 и R_2 — два главных радиуса кривизны.

При отсутствии любых внешних усилий кроме силы тяжести и температуры, ΔP может быть выражено как линейная функция

$$\Delta P = \Delta P_0 + gz\Delta\rho,$$

где ΔP_0 — разность давлений на плоскости $z = 0$, g — ускорение свободного падения, $\Delta\rho$ — разность плотностей капли и газа, z — вертикальная координата точки, принадлежащей поверхности капли.

Прямое интегрирование уравнения (1.1) может оказаться простым только для цилиндрического мениска, т.е. для случая, когда одно из слагаемых $1/R_1$ или $1/R_2$ отсутствует. Для общего случая необходимым условием интегрирования является условие осевой симметрии.

Введем декартову систему координат xOz так, чтобы ось Ox являлась касательной к поверхности капли, а ось Oz направим вниз, совместив при этом начало координат с апексом капли. Так как капля симметрична относительно вертикальной оси z , то главный радиус кривизны R_1 определяется длиной дуги ℓ , отсчитываемой от начала координат, и углом φ — отклонения поверхности от горизонтали

$$\frac{1}{R_1} = \frac{d\varphi}{d\ell}, \quad (1.2)$$

Второй радиус выражается соотношением

$$\frac{1}{R_2} = \frac{\sin\varphi}{x}, \quad (1.3)$$

Из-за осевой симметрии кривизна в вершине является константой во всех направлениях и два главных радиуса равны, т.е.

$$\frac{1}{R_1} = \frac{1}{R_2} = \frac{1}{R} = b,$$

где R и b — радиус кривизны и кривизна в апексе, соответственно.

Далее, при $\ell = 0$ из (1.1) для давления может быть получено выражение

$$\Delta P_0 = 2b\sigma. \quad (1.4)$$

Подставляя (1.2)–(1.4) в (1.1), находим

$$\frac{d\varphi}{d\ell} = 2b + cz - \frac{\sin\varphi}{x}, \quad (1.5)$$

$$c = \frac{g\Delta\rho}{\sigma}, \quad (1.6)$$

где c — капиллярная постоянная, принимающая положительные значения для капель, лежащих на подложке, и отрицательные — для свисающих.

Уравнение (1.5) вместе с геометрическими соотношениями

$$\frac{dx}{d\ell} = \cos\varphi, \quad \frac{dz}{d\ell} = \sin\varphi, \quad (1.7)$$

$$\frac{dV}{d\ell} = \pi x^2 \sin\varphi, \quad \frac{dS}{d\ell} = 2\pi x$$

для x , z , φ , объема V , площади поверхности S как функций длины дуги ℓ дает набор дифференциальных уравнений первого порядка с однородными начальными условиями

$$x(0) = z(0) = \varphi(0) = V(0) = S(0) = 0. \quad (1.8)$$

Кроме того, при $\ell = 0$ имеем

$$\frac{d\varphi}{d\ell} = b. \quad (1.9)$$

Таблица 1. Значения поверхностного натяжения и плотности жидких капель расплавов при различных температурах

T °K	0,03 % Li		0,5 % Li	
	σ , Дж/м ²	ρ , кг/м ³	σ , Дж/м ²	ρ , кг/м ³
685	0,381	9413	0,366	8724
933	0,373	9331	0,346	8573
1165	0,366	9262	0,328	8429

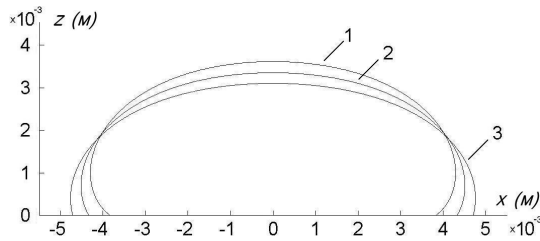


Рис. 1. Профиль капли (0,03 % Li) при температурах: 1 — T = 685°K; 2 — T = 933°K; 3 — T = 1165°K

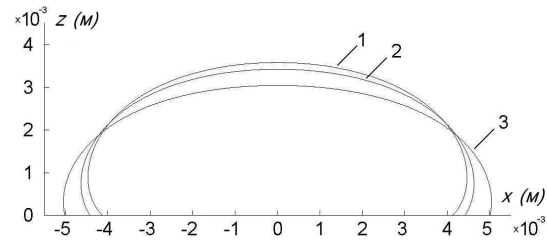


Рис. 2. Профиль капли (0,5 % Li) при температурах: 1 — T = 685°K; 2 — T = 933°K; 3 — T = 1165°K

Следовательно, форма профиля поверхности жидкой капли может быть получена одновременным интегрированием уравнений (1.5), (1.7) с условиями (1.8), (1.9) для заданных величин b и c . Параметр b , являющийся геометрической характеристикой, определяется на основе данных о краевом угле смачивания и объеме капли, а параметр c — вычисляется по формуле (1.6).

2. Численная реализация модели

Решение системы (1.5), (1.7) с условиями (1.8), (1.9) проводилось методом Рунге–Кутты четвертого порядка в пакете “MATLAB”. При этом были использованы экспериментальные данные в системе Pb–Li на графите, некоторые из которых приведены в табл. 1.

Результаты вычислительных экспериментов, проведенных на основе данных табл. 1, показаны на рис. 1, 2, где ось абсцисс совмещена с уровнем подложки.

На рис. 1 представлены профили капли массой 1,9906 г расплава свинца с 0,03 процентным содержанием лития на графитовой подложке при температурах 685°K, 933°K и 1165°K, а на рис. 2 — профили капли массой 1,9401 г при тех же температурах, но с 0,5 процентным содержанием лития.

Расчеты показывают, что кинетика профиля поверхности свободной капли свинца под действием температуры представляет собой нелинейный процесс, который суще-

ственно зависит от массы капли и содержания в ней лития.

С другой стороны, используемая расчетная схема, при проведении оцифровки экспериментально полученных снимков позволяет на основе геометрических характеристик профиля поверхности устанавливать некоторые физические параметры системы. При этом на снимках фиксируются отклонения от равновесного профиля, вызванные пузырями внутри капли, ее неоднородностью, а также несимметричностью. В подобных случаях и на этапе распознавания границ объекта, даже при субпиксельном разрешении, избежать погрешности не удастся. Результаты проведенных расчетов по оценке этой погрешности достаточно громоздки и могут служить темой отдельных исследований, выходящих за рамки настоящей статьи, поэтому ограничимся характерными данными, полученными для капли свинца с 0,03 процентным содержанием лития при температуре 933°K (табл. 2).

В табл. 2 приведены выраженные в процентах отклонения: высоты капли в апексе h , трехфазного угла φ , кривизны вблизи апекса b и радиуса растекания x_0 , вызывающие увеличение расчетного значения плотности поверхностного натяжения на 1 %.

3. Анализ результатов

Данные, полученные на основе большого количества вычислительных экспериментов,

Таблица 2. Влияние геометрических параметров профиля капли на поверхностное натяжение

Варьируемый параметр	Отклонение параметра (%)
h	–0,07
φ	–0,79
b	–0,54
x_0	0,525

позволяют утверждать, что указанный подход дает возможность решать как прямую, так и обратную задачи, т.е. не только исследовать форму профиля свободной поверхности капли по заданным физическим параметрам, но и по заданному углу трехфазного контакта, радиусу растекания и высоте в апексе, полученных из оцифрованного изображения, устанавливать важные физические параметры, например, плотность поверхностного натяжения для капель определенной массы. Кроме этого, при построении профилей жидких капель появляется возможность судить о точности полученных таким образом результатов.

Литература

1. *Bashforth F., Adams J.C.* An attempt to test the theory of capillary action. Cambridge Univ. Press and Deighton, Bell & Co., 1892. 145 p.
2. *Алчагиров Б.Б., Мозговой А.Г., Куршев О.А.* Поверхностное натяжение жидкой свинец-висмутовой эвтектики при технически важных температурах // Перспективные материалы. 2003. № 6. С. 50–54.
3. *Быховский А.И.* Растекание. Киев: Наукова думка, 1983. 191 с.
4. *Зубарев Н.М.* Точное решение задачи о равновесной конфигурации заряженной поверхности жидкого металла // ЖЭТФ. 1999. Т. 116. Вып. 6 (12). С. 1990–2005.
5. *Калинин В.В., Старов В.М.* Гравитационно-термокапиллярное растекание капель жидкости по горизонтальной поверхности // Коллоид. журн. 1992. Т. 54. № 2. С. 97–106.
6. *Копылова О.С., Диканский Ю.И., Закинян Р.Г.* Особенности движения взаимодействующих капель магнитной жидкости // ЖТФ. 2006. № 11. С. 30–35.
7. *Найдич Ю.В.* Контактные явления в металлических расплавах. Киев: Наукова думка, 1972. 96 с.
8. *Сумм Б.Д., Горюнов Ю.В.* Физико-химические основы смачивания и растекания. М.: Химия, 1976. 231 с.
9. *Шапиро Г.И.* О растекании вязкой жидкости по горизонтальной поверхности // ПМТФ. 1983. № 3. С. 45–48.
10. *Ширяева С.О., Григорьев О.А.* О капиллярном движении вязкоупругой жидкости с заряженной свободной поверхностью // ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 8. С. 39–44.
11. *Langemann D.* Modeling a droplet moving in an electric field // Mathematics and Computers in Simulation. 2005. V. 68. P. 157–169.
12. *Финн Р.* Равновесные капиллярные поверхности. Математическая теория. М.: Мир, 1989. 312 с.
13. *Емельяненко А.М., Бойнович Л.Б.* Применение цифровой обработки видеоизображений для определения параметров сидячих и висящих капель // Коллоидный журнал, 2001. Т. 63. № 2. С. 178–193.
14. *Aldana G.* Effect of surfactants on drop size distributions in a batch, Rotor-stator mixer. University of Maryland, 2005. 315 p.
15. *Bateni A., Amirfazli A., Neumann A.W.* Effects of an electric field on the surface tension of conducting drops // Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects. 2006. Vol. 289. P. 25–38.

Ключевые слова: математическая модель, расплавы, кинетика профиля капли, поверхностное натяжение, контактный угол, численная реализация

Статья поступила 11 июня 2008 г.

Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова, г. Нальчик

© Лесев В. Н., 2008