

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИЗМЕРЕНИЮ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ПО ФОРМЕ ПОВЕРХНОСТИ КАПЛИ ПРИ НАЛИЧИИ НЕСОВЕРШЕНСТВ В ЕЕ ПОДВЕСЕ ИЛИ ОПОРЕ

В.Г. Речкалов¹, В.П. Бескачко²

Предлагается метод нахождения формы поверхности капли, закрепленной на державке, имеющей произвольную форму и ориентацию в пространстве. Метод позволяет находить геометрические характеристики (объем, площадь поверхности, форму сечений) висящей капли при несовершенном подвесе и моделировать связанные с таким подвесом погрешности в определении поверхностного натяжения, возникающие в условиях натуральных экспериментов. Выполненные численные эксперименты показывают, что главным фактором, влияющим на точность определения поверхностного натяжения, является нарушение круговой симметрии державки.

Ключевые слова измерение поверхностного натяжения, форма капли, численные методы

Введение

Межфазное, поверхностное, натяжение представляет собой основную термодинамическую характеристику поверхностного слоя жидкостей и твердых тел на границе с различными фазами (газами, жидкостями, твердыми телами). Оно играет ключевую роль в физике дисперсных сред, физической и коллоидной химии, электрохимии и пр., определяя многие существенные параметры гетерогенных систем, такие как капиллярное давление жидкости под искривленной поверхностью, длину капиллярных волн на поверхности жидкости, краевой угол смачивания, электрокапиллярный эффект, число Бонда, число Вебера и др.

К настоящему времени существует множество статических и динамических методов определения поверхностного натяжения: по форме капли (лежащей или висящей), капиллярного поднятия, стоячих или бегущих волн, максимального давления в пузырьке и ряд других. Наиболее надежными и распространенными являются методы, основанные на наблюдении формы капли. С их помощью в ряде случаев удается получить довольно точные и согласованные друг с другом значения поверхностного натяжения для низкотемпературных и инертных в химическом отношении жидкостей. В случае высокотемпературных жидкостей – расплавов тугоплавких веществ (металлов, солей, оксидов) – данные об этой величине гораздо более противоречивы из-за того, что в этом случае трудно контролировать условия экспериментов столь же тщательно, как и при низких температурах. Вот что сказано об этом в фундаментальном справочнике физических величин под редакцией И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова: «...измерения разных авторов даже одним методом обычно дают неодинаковые значения для одних и тех же веществ. При отборе данных для настоящего справочника в большинстве случаев использовались сведения последних публикаций» [1, с. 331]. Таким образом, проблема точности измерения поверхностного натяжения остается открытой. Поэтому представляется целесообразным выяснить, насколько сильно скажутся возможные несовершенства в проведении опытов на оценках величины поверхностного натяжения. В настоящей работе это делается на примере экспериментов с висящей каплей.

Постановка задачи

Точность измерения поверхностного натяжения зависит от многих факторов. В методе измерения по форме поверхности капли существенное значение имеет предположение, что капля представляет собой тело вращения. В действительности форма капли зависит от формы держав-

¹ Речкалов Виктор Григорьевич – кандидат педагогических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики Южно-Уральский государственный университет
E-mail: viktor-rechkalov@mail.ru

² Бескачко Валерий Петрович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики Южно-Уральский государственный университет

ки, на которой она подвешена (для случая висящей капли). На практике державка имеет цилиндрическую форму и располагается в горизонтальной плоскости только приближенно, что нарушает цилиндрическую симметрию капли. Учет влияния указанных погрешностей на точность определения поверхностного натяжения приводит к необходимости расчета формы несимметричной капли.

Для решения этой задачи воспользуемся принципом минимума энергии: капля принимает такую форму, при которой она обладает минимумом потенциальной энергии при заданном объеме. Следовательно, в такой постановке рассматриваемая задача является задачей поиска условного экстремума.

Задача на поиск условного экстремума приводит к системе уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial x_i} + \lambda \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0, \\ V = V_0 \end{cases},$$

где λ – неизвестный вспомогательный коэффициент, E – энергия капли, V – ее объем, V_0 – заданный объем, x_i – независимый геометрический параметр, определяющий форму капли.

К сожалению уравнения данной системы нелинейные. Однако если имеется хорошее приближение для формы капли, то можно написать:

$$V = V^{\{0\}} + \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i} \Delta x_i.$$

Здесь и далее по одноименным индексам предполагается суммирование. Индекс $\{0\}$ означает, что величина рассчитывается по имеющемуся приближению для формы поверхности капли.

Используя формулу для полного дифференциала функции нескольких переменных, получаем:

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} = \frac{\partial E^{\{0\}}}{\partial x_i} + \frac{\partial^2 E^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} \Delta x_j.$$

В результате приходим к следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 E^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} \Delta x_j + \lambda \frac{\partial^2 V^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} \Delta x_j = -\frac{\partial E^{\{0\}}}{\partial x_i} - \lambda \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i} \Delta x_i = V_0 - V^{\{0\}}. \end{cases}$$

К сожалению и эта система уравнений все еще не является линейной из-за неизвестного вспомогательного коэффициента λ , который тоже должен быть определен. Рассматривая его наравне с другими переменными и считая известным некоторое начальное значение λ_0 , приходим к системе линейных уравнений, которую можно решить любым из известных методов:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial^2 E^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} + \lambda_0 \frac{\partial^2 V^{\{0\}}}{\partial x_i \partial x_j} \right) \Delta x_j + \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i} \Delta \lambda = -\frac{\partial E^{\{0\}}}{\partial x_i} - \lambda_0 \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial V^{\{0\}}}{\partial x_i} \Delta x_i = V_0 - V^{\{0\}}. \end{cases}$$

Будем искать решение методом последовательных приближений. При каждой итерации коэффициенты системы и свободные члены находятся по последнему найденному решению. Верхний индекс при этом принимает значение последнего найденного приближения. Поиск решения прекращается, когда разность значений некоторого контрольного параметра для двух соседних итераций не превышает заданной величины. В качестве такого параметра удобно использовать объем капли. Как показывает опыт, последовательность приближенных решений очень быстро сходится. Обычно достаточно от трех до пяти последовательных итераций, чтобы объемы отличались не более чем на 10^{-5} мм³.

Метод приближенного решения

При построении алгоритма решения удобнее считать, что решение ищется не для заданного объема, а для заданного веса. Вместо объема в этом случае мы должны будем подставить величину $\rho g V$, где ρ – плотность жидкости, g – ускорение свободного падения. Если после этого каждое уравнение поделить на ρg , получим:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{\rho g} \frac{\partial^2 E}{\partial x_i \partial x_j} + \lambda_0 \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right) \Delta x_j + \frac{\partial V}{\partial x_i} \Delta \lambda = -\frac{1}{\rho g} \frac{\partial E}{\partial x_i} - \lambda_0 \frac{\partial V}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial V}{\partial x_j} \Delta x_j = V_0 - V. \end{cases} \quad (1)$$

Верхние индексы в системе уравнений (1), обозначающие номер приближения, мы опустили.

За нулевое приближение принимается форма осесимметричной капли, рассчитанная по методу Адамса [2]. При этом точки поверхности капли, граничащие с твердой опорой, изменяются в соответствии с заданной формой державки.

Если форма сечения державки сильно отличается от круга, то поиск решения ведется постепенно путем плавной деформации опорного контура капли. На рис. 1 показана плавная деформация опорного сечения капли в процессе решения.

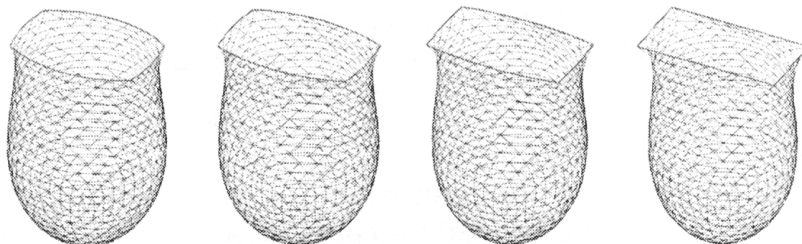


Рис. 1. Постепенная деформация опорного сечения капли к прямоугольному сечению

Для вычисления приближенных функций энергии капли (гравитационной и поверхностной), а также объема капля разбивается на конечные элементы. Последние выбираются в виде пирамид (тетраэдров) с вершинами в начале координат (рис. 2). При этом направления векторов \vec{r}_i считаем заданными. Форма капли, следовательно, будет зависеть только от расстояний r_i точек до начала координат. Это позволяет уменьшить количество неизвестных сразу в три раза.

Объем тетраэдра выражается как функция r_i :

$$V^{\{e\}} = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} r_{ix} & r_{jx} & r_{kx} \\ r_{iy} & r_{jy} & r_{ky} \\ r_{iz} & r_{jz} & r_{kz} \end{vmatrix} = \frac{1}{6} r_i r_j r_k \begin{vmatrix} r_{ix}^0 & r_{jx}^0 & r_{kx}^0 \\ r_{iy}^0 & r_{jy}^0 & r_{jy}^0 \\ r_{kz}^0 & r_{kz}^0 & r_{kz}^0 \end{vmatrix} = \frac{1}{6} r_i r_j r_k \Delta^{\{e\}}. \quad (2)$$

Верхний индекс в фигурных скобках обозначает номер конечного элемента. Через r_{im}^0 обозначены единичные направляющие векторы, а r_i – расстояния от вершин треугольников основания тетраэдров до начала координат. Определитель, составленный из координат направляющих векторов, является величиной постоянной в соответствии с нашим выбором способа задания поверхности капли. Верхний индекс $\{e\}$ в обозначении объема и определителя означает номер конечного элемента.

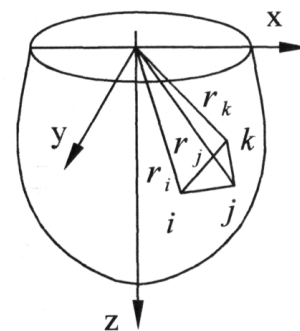


Рис. 2. Конечный элемент в виде тетраэдра

Полный объем капли находится как сумма объемов отдельных элементов $V = \sum_{\{e\}} V^{\{e\}}$.

Определители, стоящие в правой части выражения для объема конечного элемента, вычисляются один раз по координатам точек нулевого приближения. В дальнейшем они считаются постоянными величинами, и мы имеем очень простое выражение для объема, как функцию произведений координат вершин треугольных элементов на поверхности капли.

Вычисление площади поверхности капли

Площадь поверхности конечно-элементной модели капли складывается из суммы площадей оснований тетраэдров. Площадь основания тетраэдра найдем из векторного произведения

$$S^{(e)} = \frac{1}{2} |\bar{r}_1 \times \bar{r}_2|, \text{ где } \bar{r}_1 = \bar{r}_j - \bar{r}_i \text{ и } \bar{r}_2 = \bar{r}_k - \bar{r}_i.$$

$$S^{(e)} = \frac{1}{2} |(\bar{r}_j - \bar{r}_i) \times (\bar{r}_k - \bar{r}_i)| = \frac{1}{2} |\bar{r}_i \times \bar{r}_j + \bar{r}_j \times \bar{r}_k + \bar{r}_k \times \bar{r}_i|,$$

$$\bar{r}_i \times \bar{r}_j = r_i r_j \bar{r}_i^0 \times \bar{r}_j^0, \bar{r}_j \times \bar{r}_k = r_j r_k \bar{r}_j^0 \times \bar{r}_k^0, \bar{r}_k \times \bar{r}_i = r_k r_i \bar{r}_k^0 \times \bar{r}_i^0.$$

Векторные произведения единичных направляющих векторов вычисляются один раз по координатам точек нулевого приближения, поэтому для них полезно ввести самостоятельное обозначение и рассматривать их как константы:

$$\bar{r}_i^0 \times \bar{r}_j^0 = \bar{a}, \bar{r}_j^0 \times \bar{r}_k^0 = \bar{b}, \bar{r}_k^0 \times \bar{r}_i^0 = \bar{c}.$$

Сумму векторов $\bar{r}_i \times \bar{r}_j + \bar{r}_j \times \bar{r}_k + \bar{r}_k \times \bar{r}_i$ обозначим $\begin{bmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{bmatrix}$.

С учетом введенных обозначений можем записать

$$A_x = r_i r_j a_x + r_j r_k b_x + r_k r_i c_x, A_x = r_i r_j a_y + r_j r_k b_y + r_k r_i c_y, A_x = r_i r_j a_z + r_j r_k b_z + r_k r_i c_z.$$

Выражение для площади боковой поверхности отдельного элемента и всей конечно-элементной модели капли:

$$S^{(e)} = \frac{1}{2} \sqrt{A_x^2 + A_y^2 + A_z^2}, S = \sum_{\{e\}} S^{(e)}. \tag{3}$$

Поверхностная энергия капли, деленная на ρg , равна

$$\frac{1}{\rho g} E_s = \frac{\sigma}{\rho g} S = \frac{\sigma}{\rho g} \sum_{\{e\}} S^{(e)} = \sum_{\{e\}} \frac{\sigma}{\rho g} S^{(e)} = \sum_{\{e\}} c S^{(e)}, \tag{4}$$

где c – капиллярный коэффициент.

Гравитационная энергия капли

$$\frac{1}{\rho g} E_g \approx \frac{1}{\rho g} \sum_{\{e\}} \rho g V^{(e)} z_c^{(e)} = \sum_{\{e\}} V^{(e)} z_c^{(e)},$$

где $z_c^{(e)}$ – вертикальная координата центра тяжести отдельного тетраэдра.

Для тетраэдра $\bar{r}_c = \frac{1}{4}(\bar{r}_i + \bar{r}_j + \bar{r}_k)$, следовательно, $z_c^{(e)} = \frac{1}{4}(r_i r_{iz}^0 + r_j r_{jz}^0 + r_k r_{kz}^0)$.

Подставляя полученное ранее выражение для объема, получаем выражение для гравитационной энергии одного конечного элемента:

$$V^{(e)} z_c^{(e)} = \frac{\Delta^{(e)}}{24} (r_i^2 r_j r_k r_{iz}^0 + r_i r_j^2 r_k r_{jz}^0 + r_i r_j r_k^2 r_{kz}^0). \tag{5}$$

Полученные выражения позволяют перейти от абстрактных геометрически параметров x_i в системе уравнений (1) к переменным r_i и вычислить все необходимые для решения системы коэффициенты.

Примеры расчетов

На рис. 3 приведены примеры расчетов формы капли, висящей на круглой и наклонной державке (а), на прямоугольной державке (б) и формы лежащей капли, опирающейся на прямоугольный контур (в).

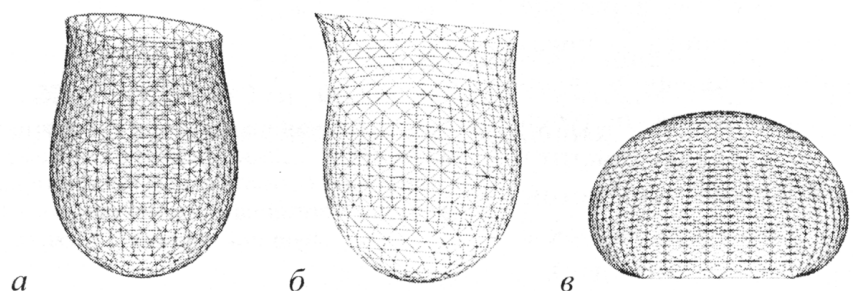
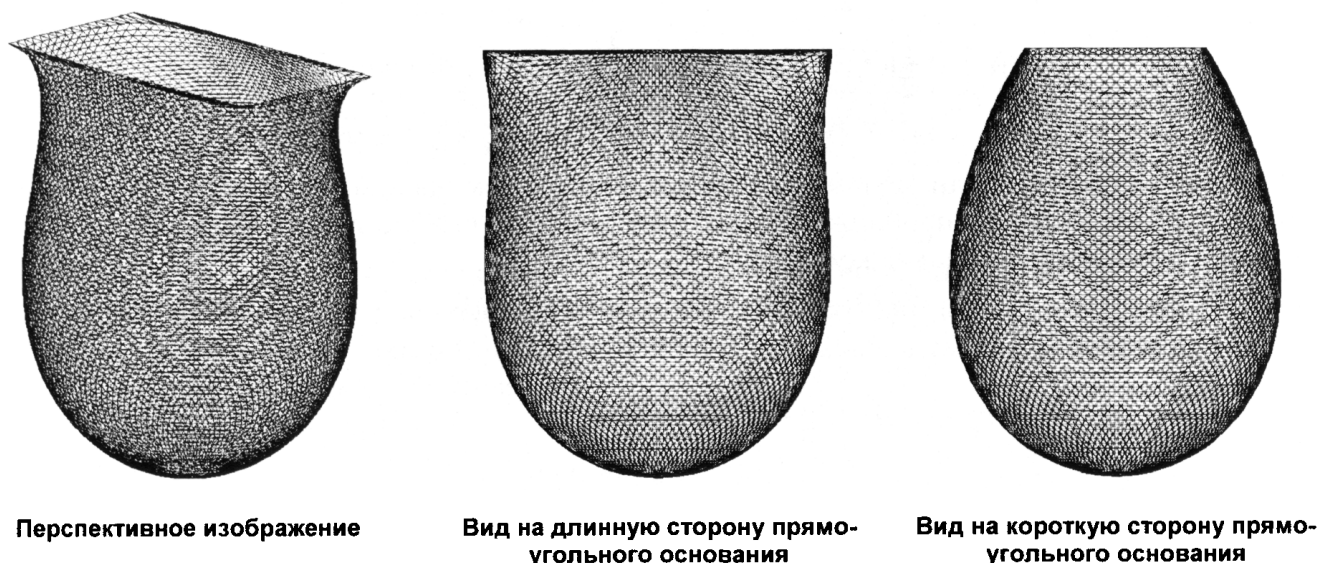


Рис. 3. Примеры расчетов

На рис. 4 приводится пример расчета с высоким разрешением, где поверхность разбивалась на 17 364 элемента 8 731 узлом.

Для капли, подвешенной на прямоугольном основании, была проведена экспериментальная проверка, которая показала хорошее соответствие расчетов с экспериментом.



Перспективное изображение

Вид на длинную сторону прямоугольного основания

Вид на короткую сторону прямоугольного основания

Рис. 4. Высокое разрешение

Моделирование процесса измерения поверхностного натяжения для случая несовершенства формы и ориентации державки капли

Координаты осевых сечений капли определялись при помощи программы «Форма», реализующей описанный выше метод расчета. Координаты находились для двух сечений, проведенных через минимальный и максимальный диаметры сечения державки. Затем по этим координатам по методике, описанной в [3], рассчитывалось поверхностное натяжение. Несовершенства формы капли приводят к появлению погрешностей в оценке поверхностного натяжения. Конечно, погрешности зависят и от размеров используемых конечных элементов. Меньшие элементы, позволяя получить большую точность, в то же время повышают вычислительную сложность и серьезно увеличивают время счета. В то же время, даже для самых мелких из использованных элементов количество точек на профиле капли получается значительно меньше того, что может быть получено в реальном эксперименте. Поэтому мы сравнивали полученные значения коэффициента поверхностного натяжения не с табличным значением для данной жидкости, а с тем значением, которое было получено при обработке расчетного профиля неискаженной капли, подвешенной на круглой горизонтальной державке.

На рис. 5 приведены результаты расчета погрешностей в определении поверхностного натяжения, связанных с несовершенством формы державки. Они получены для капли воды ($\sigma = 72,8$ мН/м), подвешенной на державке в форме эллипса с параметрами: большая полуось 1,681 мм, малая полуось 1,668 мм, эксцентриситет 0,1217 (такие параметры имела одна из державок в натурном эксперименте).

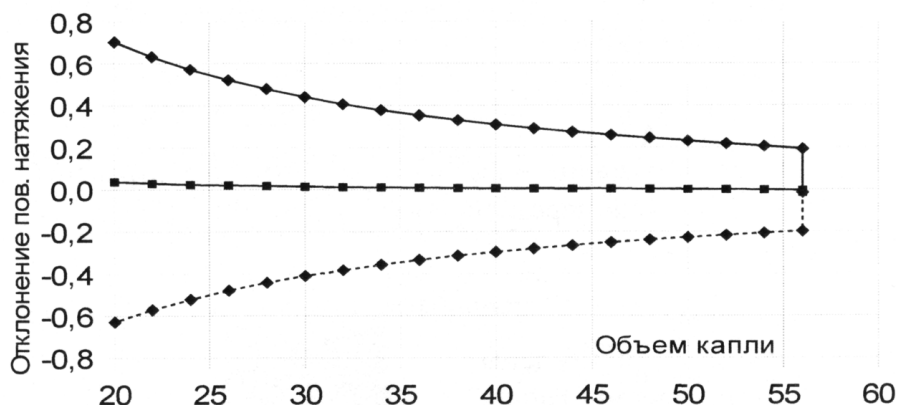


Рис. 5. Отклонение оценок поверхностного натяжения от «истинного» значения (в мН/м) в зависимости от объема капли (мм³). Верхняя кривая – значения, полученные обработкой профиля капли, проходящего через короткую ось опорного эллипса. Нижняя кривая – для профиля, проходящего через длинную ось эллипса. Кривая в центре – средние значения

Из рис. 5 видно, что для данного капилляра погрешность измерения поверхностного натяжения, связанная с неточностью его изготовления, наиболее существенна для малых капель и

уменьшается с увеличением объема капли тем медленнее, чем больше этот объем. Другой важный вывод заключается в том, что средние значения поверхностного натяжения, полученные по форме двух взаимно перпендикулярных сечений, практически совпадают с точными значениями.

На рис. 6 приведены результаты расчета погрешностей в определении поверхностного натяжения для капли, висящей на круглой, но наклонной державке (наклон державки $1,4^\circ$). Такая державка проектируется на горизонтальную плоскость в виде эллипса. Расчет сделан для вертикальных сечений, содержащих большую и малые оси этого эллипса.

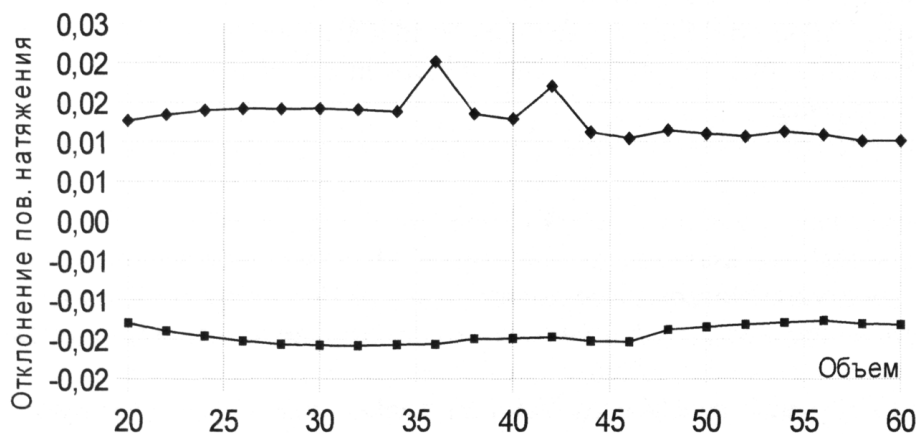


Рис. 6. Отклонение измеренного значения поверхностного натяжения от «истинного» значения (в мН/м) в зависимости от объема капли (мм³). Верхняя и нижняя кривые получены обработкой профилей капли, проходящих через короткую и длинную оси эллипса соответственно

Несмотря на то, что наклон в $1,4^\circ$ весьма большой и должен быть замечен при настройке установки, погрешность, связанная с ним, не превышает $0,02$ мН/м. Кроме того, эта погрешность практически не зависит от объема капли в широком диапазоне размеров.

Заключение

Предложен и программно реализован метод расчета формы поверхности капли, прикрепленной к державке произвольной формы и общего положения. Метод позволяет находить геометрические характеристики (объем, площадь поверхности, форму сечений) висящей капли при несовершенном подвесе и моделировать связанные с таким подвесом погрешности в определении поверхностного натяжения, возникающие в условиях натуральных экспериментов.

Результаты моделирования показывают, что наиболее важным фактором, влияющим на точность определения поверхностного натяжения по профилю висящей капли, является нарушение круговой симметрии державки, тогда как отклонение (в разумных пределах) ее плоскости от горизонтальной менее существенно. Кроме того, в ситуациях, когда можно ожидать, что требуемая симметрия подвеса нарушена, желательно определять профиль капли в нескольких проекциях, а полученные для них значения поверхностного натяжения усреднять.

Литература

1. Физические величины: справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
2. Adams, J.C. An attempt to test the theories of capillary action / J.C. Adams. – Cambridge: Deighton, Bell and CO, 1883. – 60 p.
3. Компьютерная обработка изображения в методе определения коэффициента поверхностного натяжения жидкости по форме поверхности капли / В.Г. Речкалов, В.Л. Ушаков, Г.П. Пызин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2010. – Вып. 3. – № 30(206) – С. 83–88.

SIMULATION OF EXPERIMENTS TO MEASURE SURFACE TENSION BY THE SHAPE OF A DROP SURFACE AT THE EXISTANCE OF IRREGULARITY IN ITS HANGER OR BEARING

V.G. Rechkalov¹, V.P. Beskachko²

We suggest a technique to determine surface shape for a drop suspended to a hanger of an arbitrary form and orientation in space. This technique allows researchers to obtain geometrical characteristics (such as volume, surface area, cross-sectional areas) of the drop suspended to a flawed hanger, and to find experimental errors in determining surface tension that are associated with using such hanger. Our numerical experiments show that the main source of error in determining surface tension is braking of circular symmetry of the hanger.

Keywords: surface tension measurements, the shape of a drop, numerical methods.

References

1. Babichev A.P., Babushkina N.A., Bratkovskij A.M. *et al. Fizicheskie velichiny: spravochnik* [Physical values: a handbook]. Moscow: Energoatomizdat, 1991. 1232 p. (in Russ.).
2. Adams J.C. *An attempt to test the theories of capillary action*. Cambridge: Deighton, Bell and CO, 1883. 60 p.
3. Rechkalov V.G., Pyzin G.P., Ushacov V.L., Beskachko V.P. Kompyuternaya obrabotka izobrazheniya v metode opredeleniya koefficienta poverkhnostnogo natyazheniya zhidkosti po forme poverkhnosti kapli [Computer-driven processing of the liquid drop shape image for determination of surface tension coefficient]. *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mexanika. Fizika»*. 2010. Issue 3. no. 30(206). pp. 83–88. (in Russ.).

Поступила в редакцию 24 октября 2012 г.

¹ Rechkalov Viktor Grigorevich is Cand Sc (Pedagogical), Associate Professor, General and Teoretical Physics Department, South Ural State University

E-mail viktor-rechkalov@mail.ru

² Beskachko Valeriy Petrovich is Dr Sc (Physics and Mathematics) Professor, General and Teoretical Physics Department, South Ural State University