

УДК 004.031:669.013:532.61

И.В. Федосова, д-р пед. наук, проф.,  
Т.А. Левицкая, канд. техн. наук, доц.,  
ГВУЗ "Приазовский государственный технический университет", г. Мариуполь  
tlevitiisys@gmail.com

## Особенности построения эмпирического описания контура капли в автоматизации расчетов поверхностных свойств расплавов

*В данной работе рассматривается автоматизация процесса расчета плотности и поверхностного натяжения расплавов в методе лежащей капли. Для решения поставленной задачи выведены эмпирические формулы аналитического описания численного решения дифференциального уравнения Лапласа для контура капли. Это позволило полностью автоматизировать расчет термодинамических характеристик.*

**Ключевые слова:** цифровое изображение, алгоритм, уравнение Лапласа, плотность, метод наименьших квадратов, поверхностное натяжение, метод лежащей капли.

### Введение

Для экспериментального определения поверхностного натяжения жидкостей существуют разные методы: метод капиллярного поднятия, метод отрыва кольца или пластины, метод лежащей капли, метод висящей капли, метод веса капель, метод максимального давления в газовом пузырьке. Метод лежащей капли дает наиболее точные результаты и в настоящее время широко применяется при высокотемпературных исследованиях [1]. Для трудоемких и дорогостоящих высокотемпературных физико-химических измерений характерно изменение исследуемого объекта в ходе эксперимента за счет взаимодействия с конструкционными материалами измерительной ячейки и атмосферой печи [2]. Поэтому очень важно сокращать продолжительность эксперимента, проводить за это время измерение возможно большего количества свойств и стремиться автоматизировать труд экспериментатора. С появлением цифровой техники для регистрации измерительной информации и процессоров для её обработки такая задача становится реальной.

Высокое быстродействие и точность цифровых регистраторов позволяют осуществлять многократное измерение каждой характеристики в промежутки времени, пока они не успевают измениться, что снижает систематическую погрешность и дает возможность эффективно применять статистические методы уменьшения случайной погрешности. Естественно, что переход к цифровой технике и автоматизации эксперимента должен сопровождаться соответствующими изменениями методик расчета и подходов к их реализации. При этом большое внимание следует уделить устранению факторов, влияющих на точность эксперимента.

### Постановка задачи

В этом методе каплю металла расплавляют на горизонтальной огнеупорной подложке или принудительно формируют над острой кромкой тигля. При температуре формирования капли её фотографирую, затем измеряют максимальный диаметр капли ( $2r$ ) и высоту над ним ( $h$ ). Известно [3], что контур капли определяется уравнением капиллярности Лапласа, которое может быть записано в виде дифференциального уравнения 2-го порядка:

$$\frac{y''}{[1+(y')^2]^{\frac{3}{2}}} + \frac{y'}{x[1+(y')^2]^{\frac{3}{2}}} = \frac{(y+y_0)(\rho_1-\rho_2)\cdot g}{\sigma} \quad (1)$$

где

$\sigma$  – поверхностное натяжение, Н/м<sup>2</sup>;

$\rho_2$  – плотность среды, в которой находится капля, кг/м<sup>3</sup>;

$\rho_1$  – плотность среды, образующей каплю, кг/м<sup>3</sup>;

$g$  – ускорение силы тяжести, м/с<sup>2</sup>;

$y$  – координата точки на поверхности капли по вертикальной оси;

$y_0$  – координата точки в вершине капли по вертикальной оси.

Аналитического решения данное дифференциальное уравнение не имеет. Приближенное решение может быть получено с заданной степенью точности. Все известные методики, описанные в литературных источниках [3], основаны на использовании связи параметров системы с некоторыми характерными размерами экспериментального профиля капли. По таблицам с теоретическими формами капель, которые просчитаны заранее, осуществляют связь между характерными размерами и параметрами капли, или по формулам, аппроксимирующим табличные значения, находят параметры системы. Расчет

капиллярных характеристик с помощью таблиц является неудобным и трудоемким.

Анализ теоретических аспектов метода лежащей капли показал, что ранее разработанные формулы и таблицы либо трудно применимы, либо не применимы вовсе для расчетов на ПК, что требует преобразований уравнения Лапласа к виду, удобному для машинной математической обработки.

### Описание

Для нахождения частных решений дифференциального уравнения (1), удовлетворяющего начальным условиям  $y(0) = 0; y'(0) = 0$  при различных значениях капиллярной постоянной воспользуемся геометрическим смыслом 1-й и 2-й производной.

В результате получим выражение:

$$\frac{y''}{[1 + (y')^2]^{3/2}} = \frac{1}{R} \quad (2)$$

которое определяет кривизну плоскости кривой, а первая производная равна тангенсу угла наклона касательной к оси  $Ox$ . Подставив эти значения в уравнение (1), введем замену

$$A = \frac{\sigma}{(\rho_1 - \rho_2) \cdot g} \quad (3)$$

получим:

$$\frac{1}{R} + \frac{tg \varphi}{x \cdot \frac{1}{\cos \varphi}} = \frac{y + y_0}{A} \quad (4)$$

$$\frac{tg \varphi}{x \cdot \frac{1}{\cos \varphi}} = \frac{\sin \varphi \cdot \cos \varphi}{x \cdot \cos \varphi} \quad (5)$$

$$R = \frac{A}{(y - y_0) - A \cdot \frac{\sin \varphi}{x}} \quad (6)$$

Уравнение (6) определяет радиус кривизны в любой точке меридиального сечения капли, но содержит неопределенное отношение  $(\sin \varphi)/x$ . При приближении к вершине капли  $x \rightarrow 0, y \rightarrow 0, \varphi \rightarrow 0$ , в вершине капли оба главных радиуса кривизны капли  $R_1$  и  $R_2$  равны между собой и равны  $R_0$ . Из уравнения Лапласа (1) для этого случая имеем  $R_0 = 2 \cdot A / y_0$

При  $R_1 \rightarrow R_2 \rightarrow R_0 = 2 \cdot A / y_0$ , подставляем это в уравнение (2) и находим предел правой части полученного выражения.

$$\frac{2 \cdot A}{y_0} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{A}{(y + y_0) - A \cdot \frac{\sin \varphi}{x}} = \frac{A}{y_0 - A \cdot \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin \varphi}{x}} \quad (7)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin \varphi}{x} = \frac{y_0}{2 \cdot A} \quad (8)$$

Выберем на линии меридионального сечения три достаточно близких друг к другу точки  $M_{i-1}, M_i$  и  $M_{i+1}$  и проведем через них нормали (см. рис.1). Нормаль, проходящая через точку  $M_{i-1}$  пересечется с нормалью, проходящей через точку  $M_i$  в точке  $O_{i-1}$ , а нормали проходящие через точки  $M_i, M_{i+1}$ , пересекутся в точке  $O_i$ . Обозначим углы, образованные нормальями  $M_{i-1}O_{i-1}, M_iO_i$  и  $M_{i+1}O_i$  соответственно  $\varphi_{i-1}, \varphi_i, \varphi_{i+1}$ . Для численного интегрирования дифференциального уравнения (1) и расчета формы капли считаем, что при достаточно малом изменении текущего угла  $\varphi$  в пределах от  $\varphi_{i-1}$  до  $\varphi_i$  радиус кривизны  $R_{i-1}$  (отрезок  $M_{i-1}O_{i-1}$  или отрезок  $M_iO_{i-1}$ ) исходного угла  $\varphi_{i-1}$  исходной абсциссы  $x_{i-1}$  и исходной ординаты  $y_{i-1}$  не меняется. В следующем интервале изменения угла  $\varphi$  от  $\varphi_i$  до  $\varphi_{i+1}$  радиус кривизны  $R_i$  (отрезки  $M_iO_i$  или  $M_{i+1}O_i$ ) или другой рассчитывается для нового значения угла  $\varphi_i$ , новой абсциссы  $x_i$  и новой ординаты  $y_i$ . Из прямоугольных треугольников  $O_i M_{i+1} P_{i+1}$  и  $O_i M_i P_i$  находим:

$$\Delta y_i = |P_i - P_{i+1}| = R_i \cdot \cos \varphi_i - R_i \cdot \cos \varphi_{i+1} = R_i [\cos \varphi_i - \cos \varphi_{i+1}]$$

$$\Delta x_i = |M_{i+1}P_{i+1}| - |M_iP_i| = R_i \cdot \sin \varphi_{i+1} - R_i \cdot \sin \varphi_i = R_i [\sin \varphi_{i+1} - \sin \varphi_i]$$

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$$

Таким образом, имеем следующий алгоритм расчета координат линии меридионального сечения капли и объема (рис.2).

Строим графики зависимостей координат  $x=x(\varphi), y=y(\varphi)$  меридионального сечения капли от текущего угла  $\varphi$ , а также объема части капли, заключенной между ее вершиной и плоскостью  $y=y_0=\text{const}$ , схематически представленные на рис. 3.

Подобные графики имеют функции

$$x = a_x \cdot \varphi^{b_x} \cdot \exp(c_x \cdot \varphi) \quad (9)$$

$$y = a_y \cdot \varphi^{b_y} \cdot \exp(c_y \cdot \varphi) \quad (10)$$

$$V = a_v \cdot \varphi^{b_v} \cdot \exp(c_v \cdot \varphi) \quad (11)$$

при соответствующих значениях параметров  $a_x, b_x, c_x, a_y, b_y, c_y, a_v, b_v, c_v$ .

Поэтому для эмпирического описания численного решения дифференциального уравнения формы капли (1) взяты именно эти зависимости [4]. Коэффициенты полученных уравнений находим методом спрямления полученных графиков и введения новых переменных. Найдем отношение последующего к предыдущему значению какой-либо из координат

$$\frac{x_{i+1}}{x_i} = \frac{a_x \varphi_{i+1}^{b_x} \exp(c_x \varphi_{i+1})}{a_x \varphi_i^{b_x} \exp(c_x \varphi_i)} = \left[ \frac{\varphi_{i+1}}{\varphi_i} \right]^{b_x} e^{c_x [\varphi_{i+1} - \varphi_i]} \quad (12)$$

Возьмем натуральные логарифмы от левой и правой части этого отношения:

$$\ln(x_{i+1}/x_i) = b_x \ln(\varphi_{i+1}/\varphi_i) + c_x [\varphi_{i+1} - \varphi_i] = b_x \ln(\varphi_{i+1}/\varphi_i) + c_x \Delta\varphi \quad \tilde{x} = b_x \cdot \tilde{\varphi} + c_x \cdot \Delta\varphi \quad (13).$$

Обозначим  $\ln(x_{i+1}/x_i)$  через  $\tilde{x}$ ,  $\ln(\varphi_{i+1}/\varphi_i)$  через  $\tilde{\varphi}$ , тогда получим линейную зависимость между переменными  $\tilde{x}$  и  $\tilde{\varphi}$

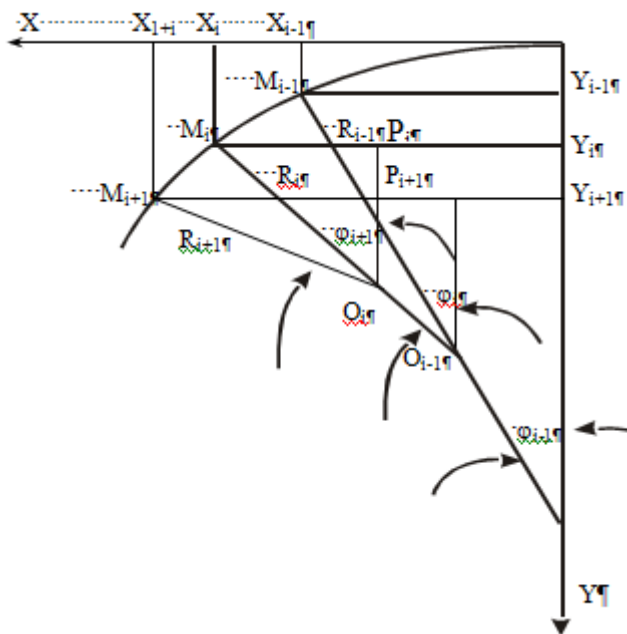


Рисунок 1 – Схема построения элементов капли для численного интегрирования.

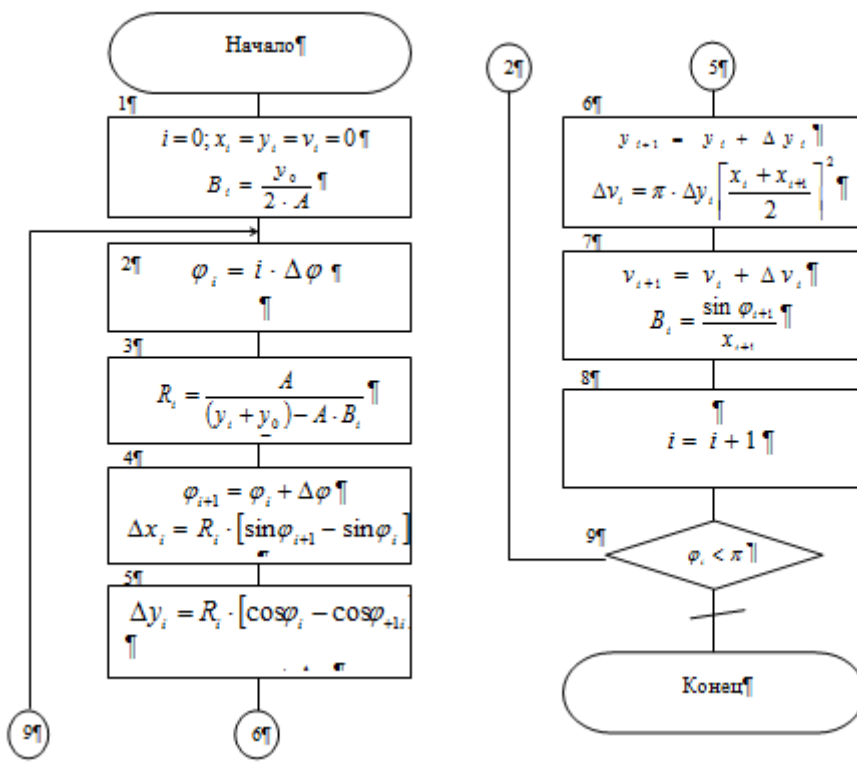


Рисунок 2 – Алгоритм расчета координат линии меридионального сечения капли и объема.

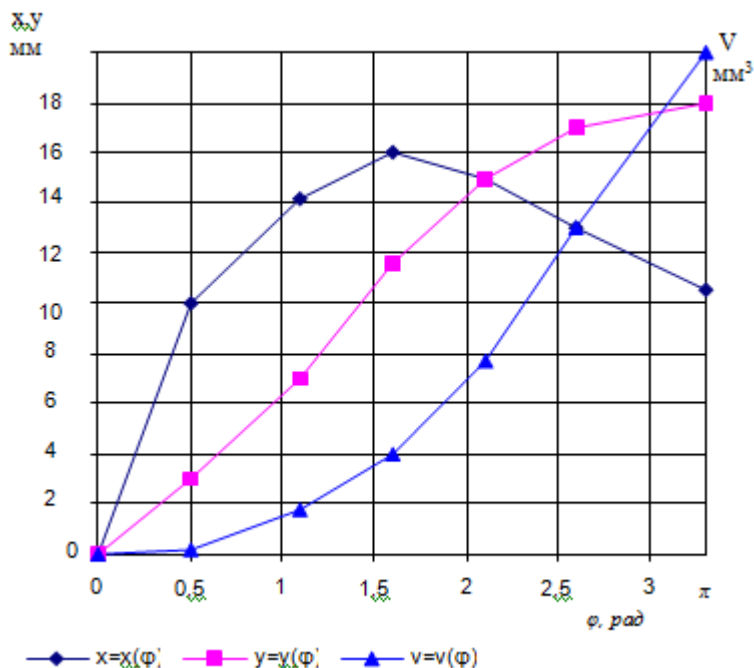


Рисунок 3 – Зависимость координат x,y и объема капли v от текущего угла φ

При исследовании неизвестных зависимостей возможны случайные ошибки, связанные с процессом измерений.

Для уменьшения влияния случайных ошибок измерения применим метод наименьших квадратов, позволяющий определять параметры выбранной зависимости, при котором отклонение от экспериментальных данных (в данном случае расчетных данных) является минимальным.

Пусть имеются результаты расчета  $(x_1, \varphi_1), (x_2, \varphi_2), \dots, (x_n, \varphi_n)$  и выбран вид функции  $\tilde{x} = b_x \cdot \tilde{\varphi} + c_x \cdot \Delta\varphi$ . Необходимо выбрать  $b_x$  и  $c_x$  так, чтобы сумма квадратов разностей между эмпирическим и расчетным значением (отклонений) была минимальна:

$$\Phi(b_x, c_x) = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n [x_i - \tilde{x}]^2 = \min \quad (14)$$

При подстановке выражения (7) в условие (8) имеем:

$$\Phi(b_x, c_x) = \sum_{i=1}^n [b_x \cdot \tilde{\varphi} + c_x \cdot \Delta\varphi - x_i]^2 = \min$$

Для отыскания значений  $b_x$  и  $c_x$ , обращающих левую часть полученного выражения в минимум, необходимо приравнять нулю производные по  $b_x, c_x$ . Функция может иметь экстремум (min), если все её частные производные равны нулю или не существуют

$$\frac{\partial \Phi(b_x, c_x)}{\partial b_x} = 0 \quad \frac{\partial \Phi(b_x, c_x)}{\partial c_x} = 0$$

$$\begin{cases} 2 \sum_{i=1}^n [b_x \cdot \tilde{\varphi} + c_x \cdot \Delta\varphi - x_i] \cdot \tilde{\varphi} = b_x \cdot \sum_{i=1}^n \tilde{\varphi}^2 + c_x \cdot \sum_{i=1}^n \tilde{\varphi} \cdot \Delta\varphi - \sum_{i=1}^n x_i \cdot \tilde{\varphi} = 0 \\ 2 \sum_{i=1}^n [b_x \cdot \tilde{\varphi} + c_x \cdot \Delta\varphi - x_i] \cdot \Delta\varphi = b_x \cdot \sum_{i=1}^n \tilde{\varphi} \cdot \Delta\varphi + c_x \cdot \sum_{i=1}^n \Delta\varphi^2 - \sum_{i=1}^n x_i \cdot \Delta\varphi = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \underline{b_x} \cdot \sum_{i=1}^n \tilde{\varphi}^2 + \underline{c_x} \cdot \Delta\varphi \cdot \sum_{i=1}^n \tilde{\varphi} = \sum_{i=1}^n x_i \cdot \tilde{\varphi} \\ \underline{b_x} \cdot \Delta\varphi \cdot \sum_{i=1}^n \tilde{\varphi} + \underline{c_x} \cdot \Delta\varphi^2 \cdot \sum_{i=1}^n 1 = \Delta\tilde{\varphi} \cdot \sum_{i=1}^n x_i \end{cases}$$

Это окончательный вид нормальной системы способа наименьших квадратов [5]. Решаем эту систему и находим эмпирические значения по формулам Крамера.  $c_x = \frac{\Delta c_x}{\Delta}$  и

$$b_x = \frac{\Delta b_x}{\Delta}$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} \sum \varphi^2 & \Delta\varphi \sum \varphi \\ \Delta\varphi \cdot \sum \varphi & \Delta\varphi^2 \cdot n \end{vmatrix} \quad \Delta b_x = \begin{vmatrix} \sum x_i \cdot \tilde{\varphi} & \Delta\varphi \sum \varphi \\ \Delta\varphi \cdot \sum x_i & \Delta\varphi^2 \cdot n \end{vmatrix}$$

$$\Delta c_x = \begin{vmatrix} \sum \varphi^2 & \sum x_i \cdot \tilde{\varphi} \\ \Delta\varphi \cdot \sum \varphi & \Delta\varphi \cdot \sum x_i \end{vmatrix}$$

$$b_x = \frac{\Delta b_x}{\Delta} = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n x_i \cdot \tilde{\varphi} & \Delta\varphi \sum_{i=1}^n \varphi \\ \Delta\varphi \cdot \sum_{i=1}^n x & \Delta\varphi^2 \cdot n \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n \varphi^2 & \Delta\varphi \sum_{i=1}^n \varphi \\ \Delta\varphi \cdot \sum_{i=1}^n \varphi & \Delta\varphi^2 \cdot n \end{vmatrix}} = \frac{\Delta\varphi^2 \cdot \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n x_i \cdot \tilde{\varphi} & \sum_{i=1}^n \varphi \\ \sum_{i=1}^n x_i & n \end{vmatrix}}{\Delta\varphi^2 \cdot \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n \varphi^2 & \sum_{i=1}^n \varphi \\ \sum_{i=1}^n \varphi & n \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n x_i \cdot \tilde{\varphi} & \sum_{i=1}^n \varphi \\ \sum_{i=1}^n x_i & n \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n \varphi^2 & \sum_{i=1}^n \varphi \\ \sum_{i=1}^n \varphi & n \end{vmatrix}}$$

$$c_x = \frac{\Delta c_x}{\Delta} = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n \varphi^2 & \sum_{i=1}^n x_i \cdot \tilde{\varphi} \\ \Delta\varphi \cdot \sum_{i=1}^n \varphi & \Delta\varphi \cdot \sum_{i=1}^n x_i \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n \varphi^2 & \sum_{i=1}^n \varphi \\ \Delta\varphi \cdot \sum_{i=1}^n \varphi & \Delta\varphi^2 \cdot n \end{vmatrix}} = \frac{1}{\Delta\varphi} \cdot \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n \varphi^2 & \sum_{i=1}^n x_i \cdot \tilde{\varphi} \\ \sum_{i=1}^n \varphi & \sum_{i=1}^n x_i \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^n \varphi^2 & \sum_{i=1}^n \varphi \\ \sum_{i=1}^n \varphi & n \end{vmatrix}}$$

После определения коэффициентов  $c_x, b_x$  находим

$$a_x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[ \frac{x_i}{\varphi_i^{b_x} \exp(c_x \varphi_i)} \right]$$

то есть определили все коэффициенты эмпирической зависимости (3).

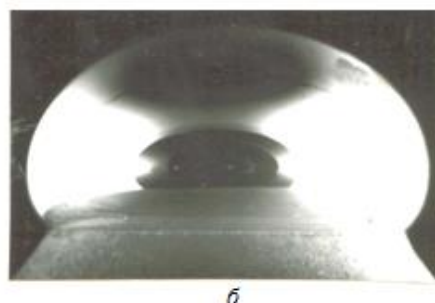
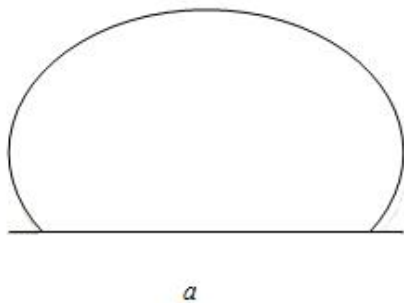


Рисунок 4 – Геометрические параметры капли расплава Cu, при температуре 1500°C:

а – контур, полученный на основе выражений (9-10);  
б – реальное изображение, полученное в результате высокотемпературного эксперимента.

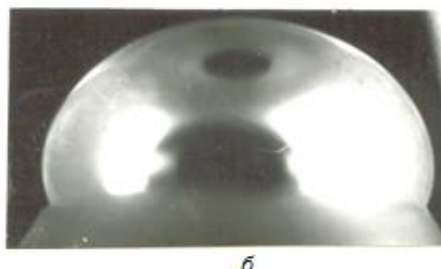
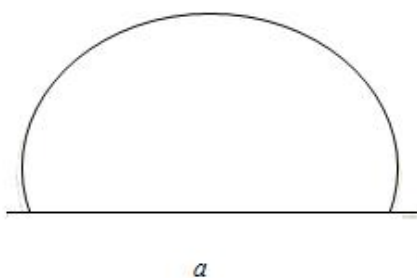


Рисунок 5 – Геометрические параметры капли расплава чистого железа, при температуре 1500°C:

а – контур, полученный на основе выражений (9-10);  
б – реальное изображение, полученное в результате высокотемпературного эксперимента.

Аналогично находим коэффициенты  $a_y, b_y, c_y, a_v, b_v, c_v$  зависимостей (4) и (5), что позволяет определить объем

Аналитическое описание численного решения дифференциального уравнения (1) эмпирическими формулами (9-11) можно считать достаточно точным [6-7]. Таким образом, на основе полученных эмпирических зависимостей получены прототипы контуров капель. Это дает возможность перейти к реализации следующего этапа идентификации контуров капель в процессе проведения эксперимента и определения поверхностных свойств расплавов.

Сопоставление геометрических капель расплавов чистых металлов и полученных расчетным путем показывают их идентичность, что гарантирует точность выполненных измерений (рис.4, рис.5).

### Выводы

Выполнено аналитическое описание численного решения дифференциального уравнения Лапласа эмпирическими формулами с использованием геометрического смысла 1-й и 2-й производной. В результате его применения разработана новая методика расчета плотности и поверхностного натяжения расплавов в методе лежащей капли, позволившая выполнить полную автоматизацию расчетов на ПК.

**Список использованной литературы**

1. Carla M. An automated apparatus for interfacial tension measurements by the sessile drop / M. Carla, R. Bordini S. Cecchini // Rev. Sci. Instrum. – 1991. – Vol.62. – №4. – P. 1088-1092.
2. Moser Z. Surface tension measurements of the Bi-Sn and Sn-Bi-Ag liquid alloys / Z. Moser, W. Gasior, J. Pstrum // J. Electron. Mater. – 2001. – Vol. 30. – №9. – P. 1109-1111.
3. Физико-химические методы исследований металлургических процессов / С.И. Филлипов, П.П. Арсентьев, В.В. Яковлев и др. – М.: Металлургия, 1986. – 550 с.
4. Львовский В.Н. Статистические методы построения эмпирических формул / В.Н. Львовский. – М.: Высшая школа, 1988. – 239 с.
5. Лоусон Ч. Численное решение задач методом наименьших квадратов / Ч. Лоусон, Р. Хенсон. – М.: Наука, 1986.
6. Бахвалов Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – М.: Лаборатория Базовых знаний, 2002. – 632 с.
7. Rotenberg Y. Determination of surface tension and contact angle from the shapes of axisymmetric fluid interfaces / Rotenberg Y., Boruvka L., Neumann A.W. // J. Colloid and Interface Sci. – 1993. – N 1. – P. 169-183.

*Надійшла до редакції 15.03.2015*

**І.В. ФЕДОСОВА, Т.О. ЛЕВИЦЬКА**

ДВНЗ "Приазовський державний технічний університет"

**ОСОБЛИВОСТІ АВТОМАТИЗАЦІЇ МЕТОДУ ЛЕЖАЧОЇ КРАПЛІ В ДОСЛІДЖЕННЯХ ПОВЕРХНЕВИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ РОЗПЛАВІВ.**

У даній роботі розглядається автоматизація процесу розрахунку щільності та поверхневого натягу розплавів у методі лежачої краплі. Для вирішення поставленого завдання виведені емпіричні формули аналітичного опису чисельного рішення диференціального рівняння Лапласа для контуру краплі. Це дозволило повністю автоматизувати розрахунок термодинамічних характеристик.

**Ключові слова:** цифрове зображення, алгоритм, рівняння Лапласа, щільність, метод найменших квадратів, поверхневий натяг, метод лежачої краплі.

**I.V. FEDOSOVA, T.A. LEVITSKAYA**

Priazovsky State Technical University

**AUTOMATION FEATURES OF SESSILE DROP METHOD IN RESEARCHES OF THE SURFACE PROPERTIES OF THE MELT**

The work describes an improved method of calculation of the density and surface tension of the melt in the sessile drop method using an analytical description of the numerical solution of differential Laplace equations by empirical formulas and geometric meaning of the 1st and 2nd derivative. The method allowed performing fully automated calculations on a personal computer.

The analysis of the theoretical aspects of the method of sessile drop showed that the previously developed formulas and tables are difficult to apply and require a transformation of the Laplace equation to a form suitable for processing on PC. In order to find a particular solution of the differential equation that satisfies the initial conditions  $y(0) = 0$ ;  $y'(0) = 0$  for different values of the capillary constant, we used the geometric meaning of the 1st and 2nd derivative. Graphs are represented by the formulas  $x = a_x \cdot \varphi^{b_x} \cdot \exp(c_x \cdot \varphi)$ ,  $y = a_y \cdot \varphi^{b_y} \cdot \exp(c_y \cdot \varphi)$ ,  $v = a_v \cdot \varphi^{b_v} \cdot \exp(c_v \cdot \varphi)$ . The coefficients of the first equation are calculated by the method of straightening the graphs and the introduction of new variables. To reduce the effect of random errors of measurement we used the method of least squares and identified all the coefficients of the empirical dependence.

**Keywords:** digital image, algorithm, Laplace equation, density, method of least squares, surface tension, sessile drop method.