УДК 004.031:669.013:532.61

Т.А. Левицкая, канд. техн. наук, доцент,
Е.Е. Пятикоп, канд. техн. наук, доцент,
Л. В. Тельных, студентка

ГВУЗ "Приазовский государственный технический университет", г. Мариуполь, Украина
tlevitiisys@gmail.com

Математический аппарат для обработки контура лежащей капли

В данной работе рассматривается автоматизация расчета поверхностного натяжения и плотности расплавов методом лежащей капли. Для решения поставленной задачи разработан математический аппарат для решения дифференциального уравнения Лапласа, описывающего контур капли. Это позволило полностью автоматизировать расчет термодинамических характеристик высокотемпературных расплавов по форме лежащей капли.

Ключевые слова: цифровое изображение, контур меридиональной кривой, уравнение Лапласа, плотность, узлы интерполяции, метод наименьших квадратов, поверхностное натяжение, метод лежащей капли.

Введение

Метод лежащей капли дает наиболее точные результаты для измерения поверхностного натяжения вязких жидкостей, а также расплавов, обладающих высокой химической активностью [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 количество свойств и стремиться автоматизировать труд экспериментатора. С появлением цифровой техники для регистрации измерительной информации и процессоров для её обработки решение такой задачи стало реально.

Высокое быстродействие и точность цифровых регистраторов позволяют осуществлять многократное измерение каждой характеристики в промежуток 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 математического аппарата. 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:

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

где

σ – поверхностное натяжение, Н/м^2;

ρ_2 – плотность среды, в которой находится капля, кг/м^3;

ρ_1 – плотность среды, образующей каплю, кг/м^3;

g – ускорение силы тяжести, м/с^2;

у – 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. Неудобства, связанные с табличным описанием функции привели С.И. Попеля и др. к графическому интегрированию уравнения (1). Изложенная ими методика применима к каплям произвольных размеров [4,5]. Построение графиков для расчета σ является весьма трудоемким процессом, а внести какие-либо изменения к уже опубликованным С.И.Попелем и др. графикам не представляется возможным. К тому же раньше точность метода определялась точностью измерительного инструмента.

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

Описание

В статье [6] описан алгоритм расчета координат линии меридионального сечения капли и объема и построеным графики зависимостей координат x=x(φ), y=y(φ) меридионального сечения капли от текущего угла φ, а также объема части капли, заключенной между ее вершиной и плоскостью $y=y_0$=const.

Подобные графики имеют функции

$$x = a_x \cdot \varphi^{b_x} \cdot \exp(c_x \cdot \varphi) \qquad (2)$$

$$y = a_y \cdot \varphi^{b_y} \cdot \exp(c_y \cdot \varphi) \qquad (3)$$

$$V = a_v \cdot \varphi^{b_v} \cdot \exp(c_v \cdot \varphi) \qquad (4)$$

при соответствующих значениях параметров a_x, $б_x$, c_x a_y, $б_y$, c_y, a_v, $б_v$, c_v.

Поэтому для эмпирического описания численного решения дифференциального уравнения формы капли (1) взяты именно эти зависимости [7]. Коэффициенты полученных уравнений находим методом спрямления полученных графиков и введения новых переменных. Найдем отношение последующего к предыдущему значению какой–либо из координат

$$\frac{x_{i+1}}{x_i} = \frac{a_x \varphi_{i+1}^{b_x} \exp(c_x \varphi_{i+1})}{a_x \varphi_i^{b_x} \exp(c_x \varphi_i)} = \left[\frac{\varphi_{i+1}}{\varphi_i}\right]^{b_x} e^{c_x[\varphi_{i+1}-\varphi_i]} \qquad (5)$$

Возьмем натуральные логарифмы от левой и правой части этого отношения:

$$\ln(x_{i+1}/x_i) = b_x \ln(\varphi_{i+1}/\varphi_i) + c_x\left[\varphi_{i+1} - \varphi_i\right] = b_x \ln(\varphi_{i+1}/\varphi_i) + c_x \Delta\varphi$$

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

$$\widetilde{x} = b_x \cdot \widetilde{\varphi} + c_x \cdot \Delta\varphi \qquad (6).$$

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 уклонение от экспериментальных данных (в данном случае расчетных данных) является минимальным.

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

$$\Phi(b_x, c_x) = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} [x_i - \widetilde{x}]^2 = \min \qquad (7)$$

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

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

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

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

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

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

Это окончательный вид нормальной системы способа наименьших квадратов [8]. Решаем эту систему и находим эмпирические значения по формулам Крамера. $c_x = \dfrac{\Delta c_x}{\Delta}$ и

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

$$\Delta = \begin{vmatrix} \sum \varphi^2 & \Delta\varphi \sum\limits_{i=1}^{n} \varphi \\ \Delta\varphi \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \varphi & \Delta\varphi^2 \cdot n \end{vmatrix} \qquad \Delta_{b_x} = \begin{vmatrix} \sum x_i \cdot \tilde{\varphi} & \Delta\varphi \sum\limits_{i=1}^{n} \varphi \\ \Delta\varphi \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i & \Delta\varphi^2 \cdot n \end{vmatrix}$$

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

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

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

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 (1).

Аналогично находим коэффициенты $a_y, b_y, c_y, a_v, b_v, c_v$ зависимостей (3) и (4) что позволяет определить объем

Аналитическое описание численного решения дифференциального уравнения (1) эмпирическими формулами (2-4) можно считать достаточно точным [9-10]. 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.

В статье [11] представлен алгоритм графического интегрирования основного уравнения поверхности капли. Получены графики для расчета поверхностного натяжения. Достаточно малый шаг для начального радиуса $\Delta R_o \to 0$ позволилт построить кривые из бесконечно малых отрезков, что гарантировало высокую точность построения. На графиках предложенных С.И. Попелем и др. шаг для $\Delta d / \sigma$ задавали $\approx 0{,}5$-1 [5]. Возможности нашего метода позволили значительно расширить уже имеющееся семейство кривых для расчета поверхностного натяжения, уменьшив шаг.

Расчеты по графикам просты и наглядны, а возможности масштабирования в Delphi позволяют приблизить отрезки графиков настолько насколько это необходимо. В этом заключается удобство вычислений по ним. Однако экспериментатору на этом этапе работы приходится эти вычисления производить вручную. Это не экономит его времени и при этом существует вероятность того, что он может допустить ошибку. Для автоматизации этого этапа работы предлагается следующий способ. Все значения *h*, *L* и соответствующего им $\Delta d / \sigma$ хранятся в базе данных. Можно решить обратную задачу просто как поиск в базе данных и возвращение найденного значения. Однако существует и вероятность того, что решая обратную задачу таким способом, для введенных пользователем значений *h* и *L* соответствующего им значения $\Delta d / \sigma$ не будет. Для этого случая применим метод интерполяции, который позволяет восстанавливать значение функции в промежуточной точке по известным ее значениям в соседних точках [8]. Это позволило нам рассчитывать значение $\Delta d / \sigma$ для любых значений *h* и *L*.

Поскольку значения высоты и радиуса получены расчетным путем и точного шага нет, применяли интерполяционную формулу Ньютона для неравноотстоящих значений аргумента:

$$\begin{aligned} P(x) &= y_0 + [x_0, x_1](x - x_0) + [x_0, x_1, x_2] \times \\ &\times (x - x_0)(x - x_1) + \cdots + [x_0, x_1, \cdots x_n] \times \\ &\times (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) \end{aligned} \qquad 8$$

где y = P(x) - полином n-ой степени;

$[x_0, x_1, \cdots x_n]$ - разделенная разность (n +1) порядка.

Алгоритм поиска $\Delta d / \sigma$ для заданных значений h_k и L_k, заключается в следующем:

1. Для заданного значения L_k приближенно вычисляем, применяя полином Ньютона, значение h_i, где i=1,n вначале для первого значения $\Delta d/\sigma$ (узлами интерполяции являются все соотношения h и L для данного значения $\Delta d/\sigma$), затем для второго значения $\Delta d/\sigma$ и т.д.;

На основании полученных узлов интерполяции $h_1...h_n$ и соответствующих им значений $\Delta d/\sigma_1 \ldots \Delta d/\sigma_n$, составляем интерполяционный полином Ньютона (8), и по нему находим для заданного h_k соответсвующее ему значение $\Delta d/\sigma_k$.

Выводы

Разработан математический аппарат для автоматизации расчета поверхностного натяжения и плотности расплавов методом лежащей капли. Выполнено аналитическое описание численного решения дифференциального уравнения Лапласа эмпирическими формулами. В результате его применения разработана новая методика расчета плотности и поверхностного натяжения расплавов в методе лежащей капли, позволившая выполнить полную автоматизацию расчетов на ПК. Получило дальнейшее развитие решение основного уравнения поверхности капли, которое значительно ускорило обработку по сравнению с известным методом графического интегрирования, предложенным С.И. Попелем и сотрудниками, расчет в котором производился по графикам вручную. Применение интерполяционной формулы Ньютона для неравноотстоящих значений аргумента позволило разработать и реализовать в системе визуального программирования Delphi алгоритм с полной автоматизацией расчета поверхностного натяжения с высокой степенью точности (менее 0,5 %). До этого точность метода была 2-3%.

Список литературы

1. Carla M. An automated apparatus for interfacial tension measurements by the sessile drop/ M. Carla, R. Bordi S. Ceechini // Rev. Sci. Instrum. -1991. Vol.62, №4.-P. 1088 -1092.
2. Moser Z. Surface tension measurements of the Bi-Sn and Sn-Bi-Ag liguid 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. Филлиппов, П.П.Арсентьев, В.В. Яковлев, М.Г. Крашенинников. - М.: Металлургия, 1986. – 550 с.
4. Попель С.И. Поверхностные явления в расплавах /С.И. Попель. – М.:Металлургия, 1994.– 432 с.
5. Попель С.И. Графики для расчета поверхностного натяжения по размерам капли // С.И.Попель, Ю.П.Никитин, С.М.Иванов. – Свердловск,1961. – 16с.
6. Федосова И.В. Особенности построения эмпирического описания контура капли в автоматизации расчетов поверхностных свойств расплавов/ И.В. Федосова, Т.А. Левицкая // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка: Зб. наук. праць. – Донецьк: ДонНУ, 2015. – Вип. 1(20). – С. 119-125.
7. Львовский В.Н. Статистические методы построения эмпирических формул / В.Н. Львовский -М.: Высшая школа, 1988. - 239 с .
8. Лоусон Ч. Численное решение задач методом наименьших квадратов / Ч. Лоусон , Р. Хенсон – М.: Наука, 1986.
9. Бахвалов Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов, Жидков Н.П., Кобельков Г.М. – М.: Лаборатория Базовых знаний, 2002.– 632с.
10. 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.
11. Левицкая Т.А. Автоматизация процесса расчета плотности и поверхностного натяжения расплавов в методе лежащей капли / Т.А. Левицкая // Наукові праці Донецького національного технічного університету.Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка: Зб. наук. праць. – Донецьк: ДонНУ, 2015. – Вип. 2(21). – С. 105-110.

Надійшла до редакції 10.09.2016

Т.О. ЛЕВИЦЬКА, О. Є. П'ЯТИКОП, Л.В. ТЕЛЬНИХ
ДВНЗ "Приазовський державний технічний університет"

МАТЕМАТИЧНИЙ АПАРАТ ДЛЯ ОБРОБКИ КОНТУРУ ЛЕЖАЧОЇ КРАПЛІ

У даній роботі розглядається автоматизація процесу розрахунку щільності і поверхневого натягу розплавів в 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, контур меридіональної кривої, рівняння Лапласа, щільність, вузли інтерполяції, метод найменших квадратів, поверхневий натяг, метод лежачої краплі.

T.A. LEVITSKAYA, E.E. PYATIKOP, L.V. TELNYKH
Priazovsky State Technical University

MATHEMATICAL APPARATUS FOR PROCESSING CIRCUIT LYING

Further development of the sessile drop is directly related to the development of new technique sand specially developed algorithms enabling automatic computer calculation of surface properties. Improvement of mathematical apparatus by sessile drop method, the transformation equation circuit drops to a form suitable for machining, automation methodology for calculating the droplet surface, analysis of relative errors in the calculation of surface tension are relevant and have a great knowledge of the practice of experimental determinations.

For the experimental determination of the surface tension of liquids, there are different methods, including sessile drop method gives the most accurate results and is now widely used in high-temperature studies. In the sessile drop method, a drop of molten metal on a horizontal refractory substrate or forced form of a sharp edge of the crucible. Formed drop photographed and these photos increase. Also drop can be projected onto the screen for maximum sharpness in the image contour drops. On the projection photographs or drops build maximum diameter (*l*) and the height above it (*h*). Measurements of the picture and especially spending a tangent, a researcher in making this procedure the elements of subjectivity, the measurement error depends on the quality of the picture. It is clear that further development of the method of sessile drop is directly related to the development of new techniques and specially developed algorithms enabling automatic computer calculation of surface We have automated technique for solving the basic equation of the surface of the droplets on the basis of advanced mathematical apparatus with the implementation of a system of visual programming Delphi, which significantly expedite the processing of data and implement fully automated calculation of surface tension melts.

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 equations Laplace by empirical formulas and geometric meaning of the 1st and 2nd derivative.

The analysis of the theoretical aspects of the method of sessile drop showed that the previously developed formulas and tables difficult to apply and require a transformation of the Laplace equation to a form suitable for processing on PC. In order to find particular solutions of the differential equation that satisfies the initial conditions y (0) = 0; y '(0) = 0 for different values of the capillary constant, used the geometric meaning of the 1st and 2nd derivative. Schematically built graphic of coordinate dependencies x = x (φ), y = y (φ) meridian section drops from the current angle φ and the volume of the droplet confined between its top and the plane y = y0 = const. Graphs represented by the formulas $x = a_x \cdot \varphi^{b_x} \cdot \exp(c_{x\cdot} \cdot \varphi)$, $y = a_y \cdot \varphi^{b_y} \cdot \exp(c_{y\cdot} \cdot \varphi)$, $v = a_v \cdot \varphi^{b_v} \cdot \exp(c_{v\cdot} \cdot \varphi)$. The coefficient of the first equation is calculated by the method of straightening the graphs and the introduction of new variables. To reduce the effect of random errors of measurement used the method of least squares and identified all the coefficients of the empirical dependence.

Key words: digital pictures, Laplace equation, density, units of interpolation, least square method, method of lying drops.