

Федеральное агентство по образованию и науке Российской Федерации

Тюменский государственный университет

На правах рукописи

Зуева Анастасия Юрьевна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОИНДУЦИРОВАННОЙ  
ТЕРМОКАПИЛЛЯРНОЙ КОНВЕКЦИИ В СЛОЕ ПРОЗРАЧНОЙ ЖИДКОСТИ НА  
ПОГЛОЩАЮЩЕЙ ПОДЛОЖКЕ

Специальность 05.13.18. — “Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ”

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель —  
доктор физико-математических наук  
профессор В.Н. Кутрунов  
Научный консультант —  
кандидат физико-математических наук  
доцент Б.А. Безуглый

Тюмень, 2007

# Оглавление

<b>Список используемых обозначений</b>	<b>5</b>
<b>Введение</b>	<b>7</b>
<b>1 Термокапиллярная конвекция. (Обзор литературы.)</b>	<b>13</b>
1.1 Механизм фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции в горизонтальном слое жидкости. . . . .	15
1.2 Эффект задержки термокапиллярного отклика. . . . .	19
1.2.1 Описание эксперимента на определение времени задержки. . . . .	20
1.3 Математические модели движения тонкого слоя жидкости . .	24
1.3.1 Температурное распределение. . . . .	25
1.3.2 Модели тепло- и массопереноса. . . . .	26
1.3.3 Профиль термокапиллярной деформации. . . . .	31
1.4 Этапы математического моделирования . . . . .	34
1.5 Численные методы решения задач со свободными границами	35
Выводы. . . . .	38
<b>2 Распространение тепла до начала конвективных течений</b>	<b>39</b>
2.1 Равномерный плоский источник. Разделение теплового потока.	41
2.2 Температурное поле с гауссовым источником. . . . .	44
2.3 Вычисление температуры и времени задержки. Программа «Время задержки». . . . .	48
2.3.1 Вычисление запускающего температурного возмущения. . . . .	49
2.3.2 Вычисление времени задержки. Сравнение с экспериментами. . . . .	53

2.3.3	Температурное поле. Расчет по программе «Время задержки» . . . . .	55
	Выводы. . . . .	56
<b>3</b>	<b>Гидродинамическая модель термокапиллярной конвекции.</b>	<b>58</b>
3.1	Балансные уравнения и граничные условия. . . . .	59
3.1.1	Балансные уравнения в векторной форме. Способ учета сил Марангони в модели. . . . .	59
3.1.2	Балансные уравнения в осесимметричной системе координат. . . . .	65
3.2	Программирование VOF метода. . . . .	67
3.2.1	Дискретизация уравнений. . . . .	70
3.2.2	Постановка граничных условий. . . . .	76
3.2.3	Положение межфазной границы. PLIC-VOF метод. . .	77
	Выводы. . . . .	81
<b>4</b>	<b>Разработка программного комплекса «Термокапиллярная конвекция» и некоторые результаты расчета.</b>	<b>82</b>
4.1	Силы поверхностного натяжения. . . . .	82
4.1.1	Дискретизация сил поверхностного натяжения. . . . .	82
4.1.2	Определение положения межфазной границы из кинематического условия. . . . .	85
4.1.3	Вычисление кривизны межфазной границы. . . . .	87
4.2	Исходные данные программы «Термокапиллярная конвекция». Этапы численного счета. . . . .	87
4.3	Обсуждение основных результатов работы программы «Термокапиллярная конвекция». . . . .	91
4.3.1	Процесс установления профиля термокапиллярной деформации. . . . .	91
4.3.2	Эволюция полей температуры и скоростей. . . . .	94
4.3.3	Время задержки и всплеск термокапиллярной конвекции. О критерии начала конвекции. . . . .	96
	Выводы. . . . .	99

<b>Заключение.</b>	<b>100</b>
<b>Список литературы</b>	<b>103</b>
<b>Приложение 1. Таблица свойств веществ при нормальных условиях.</b>	<b>118</b>
<b>Приложение 2. Тестирование программного комплекса «Термокапиллярная конвекция».</b>	<b>119</b>

## Список используемых обозначений

### Обозначения:

#### *Латинские:*

$Вd$  — динамическое число Бонда;

$Вo$  — статическое число Бонда;

$Ma$  — число Марангони;

$Ra$  — число Рэлея;

$a$  [м] — диаметр пучка лазера в точке падения на слой жидкости;

$c_p$  [Дж/кг К] — удельная теплоемкость;

$F$  [1] — объем жидкой фракции в ячейке;

$g$  [м/с<sup>2</sup>] — гравитационная постоянная;

$H_0$  [Вт/м<sup>2</sup>] — интенсивность индуцирующего пучка лазера;

$h_0$  [м] — толщина недеформированного слоя жидкости;

$k$  [Вт/м К] — теплопроводность;

$L$  [м] — характерный размер области деформации;

$p$  [Па] — давление;

$P$  [Вт] — мощность пучка лазера;

$T$  [К] — температура;

$u, v$  [м/с] — радиальная и вертикальная составляющие скорости.

*Греческие:*

$\alpha$	[м <sup>-1</sup> ]	— коэффициент поглощения лазерного излучения;
$\beta$	[К <sup>-1</sup> ]	— термический коэффициент объемного расширения;
$\gamma$	[Н/м·К]	— термический коэффициент поверхностного натяжения;
$\delta$	[м <sup>-1</sup> ]	— импульсная функция Дирака;
$\kappa$	[м <sup>2</sup> /с]	— температуропроводность;
$\varkappa$	[м <sup>-1</sup> ]	— кривизна межфазной границы;
$\rho$	[кг/м <sup>3</sup> ]	— плотность;
$\mu$	[Па·с]	— динамическая вязкость;
$\nu$	[м <sup>2</sup> /с]	— кинематическая вязкость;
$\sigma$	[Н/м]	— поверхностное натяжение;
$\chi_f$	[м]	— глубина термокапиллярного зеркала.

**Индексы:**

0 — начальные значения;

$f$  — свободная граница или межфазная поверхность;

$g$  — газ;

$l$  — жидкость;

$s$  — подложка.

## Введение

“Если по какой-либо причине, существует перепад поверхностного натяжения вдоль свободной поверхности жидкости, жидкость будет перемещаться по направлению более высокого поверхностного натяжения.”

C.G. Marangoni (1871)

Существует ряд технологических процессов, математическую модель которых можно построить путем решения осесимметричных задач переноса энергии, массы и импульса. Течения, вызванные изменением поверхностного натяжения под действием квазиточечных источников энергии (луч лазера, пучок электронов, электрическая дуга, пламя газовой горелки и т.д.) представляют важный и растущий класс инженерных задач. Области применения включают новые методы лазерной диагностики жидкостей [1–10], биоинженерию [11], сверление [12], абляцию [13], поверхностное легирование [14], сварка [15–17], резка металлов и диэлектриков [18–20], наплавка [19] и т.д. Скорый прогресс в современных лазерных технологиях способствуют повышению интереса к изучению такого рода течений. Существование сил поверхностного натяжения на границах раздела фаз (жидкость–жидкость, жидкость–газ) может оказывать существенное влияние на тепломассоперенос в жидкости. В случае создания в исследуемом объеме жидкости градиента температур поверхностные термокапиллярные силы могут приводить к появлению быстрых гидродинамических течений.

Изучение конвективных процессов в жидкостях со свободными поверхностями началось с появлением фундаментальных работ Бенара [21,22]. Многие авторы впоследствии предлагали различные теоретические модели обнаруженного им явления [23, 24]. Однако, первые работы, посвященные исследованию термокапиллярной конвекции, вызванной

тепловым действием лазерного излучения, появились лишь в 1970-х годах [25–28], но долгое время это явление оставалось в тени хорошо изученной естественной термогравитационной конвекции. Поэтому ценные в практическом отношении свойства фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции были раскрыты далеко не в полной мере:

1. индуцирующий пучок лазера, частично отражаясь от деформированной термокапиллярным вихрем свободной поверхности жидкости, несет полную информацию о ее форме, которая зависит от протекающих конвективных процессов внутри жидкости, что позволяет определять ряд физических характеристик жидкости (вязкость [10, 29], температуропроводность [30]), параметры ее слоя (толщину [1, 5–8], кривизну свободной поверхности [31–33]) и свойства подложки;
2. вид получаемой информации — оптическое изображение (термокапиллярный отклик), легко поддающееся обработке, в том числе автоматизированной [34–36];
3. возможность воздействовать на слой жидкости бесконтактным путем позволяет исследовать агрессивные, радиоактивные, находящиеся в экстремальных физических условиях жидкости.

С учетом того, что для измерений не требуется дорогостоящее специализированное оборудование, а используемые маломощные ( $\sim 10$  мВт) лазеры не вызывают, в большинстве случаев, необратимых изменений в исследуемых жидкостях, этот тип конвекции перспективен для применения в технологических процессах.

В настоящее время существует большое число теоретических и экспериментальных работ, посвященных изучению фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции в органических жидкостях [1, 2, 5–10, 27–59]. Часть из них посвящена математическому моделированию и теоретическим оценкам конвективных процессов [1, 5, 7, 27, 28, 31, 32, 34, 37–59]. В других предложены практические применения этого явления [2, 6, 8–10, 29, 30, 33–36]. Важной особенностью термокапиллярной конвекции в органических



жидкостях является деформация свободной поверхности — образование термокапиллярного углубления, профиль которого зависит от физических и геометрических свойств исследуемой системы. Существенным отличием может быть расположение источника тепла, который в зависимости от коэффициента поглощения  $\alpha$  располагается в объеме жидкости, на ее свободной поверхности или на поверхности подложки, на которой находится слой жидкости [1, 5–10, 27–34, 37–59].

Рост практического значения явления фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции [2, 6, 8–10, 29, 30, 33–36], в сочетании с тем, что его экспериментальное исследование осложнено большим числом (более 10) влияющих на конвекцию параметров системы «лазерный пучок–жидкий слой–подложка», придает особую актуальность задаче создания адекватной математической модели этого явления.

За последние десятилетия численному моделированию течений с межфазными границами посвящено большое число работ. Тем не менее, подобные задачи остаются сложными для численного моделирования и возбуждают интерес к дальнейшим исследованиям [60–62]. Одним из наиболее ранних и получивших широкое распространение методов решения задач течения жидкость–газ с подвижной границей, является предложенный Харлоу и Уэлчем [63] *метод маркеров и ячеек* (MAC — *Marker And Cell*). Однако, в отличие от MAC *метод объема жидкости* (VOF — *Volume Of Fluid*) стал более популярным.

При нагреве лазерным пучком слоя прозрачной жидкости на поглощающей подложке возникает эффект задержки термокапиллярной конвекции [2]. Эта задержка вызвана тем, что требуется некоторое время  $\tau_d$ , чтобы тепловое возмущение дошло от подложки до свободной поверхности жидкости и инициировало термокапиллярное течение. Очевидно, что величина  $\tau_d$  зависит от толщины  $h_0$  слоя жидкости, мощности  $P$  пучка лазера, ряда свойств подложки и жидкости и состояния ее свободной поверхности. Возможность использовать время задержки для бесконтактного контроля указанных параметров делает задачу о развитии термокапиллярной конвекции актуальной.

Объектом исследования настоящей работы является эволюция

термокапиллярной конвекции. Цель исследования — изучить явление фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции в слое прозрачной жидкости на поглощающей подложке, выявить зависимость времени задержки  $\tau_d$  от свойств системы «лазерный пучок–жидкий слой–подложка», построить численную модель физических процессов в системе на стадии развития конвекции и формирования термокапиллярного углубления.

**Излагаемый в работе материал** разбит на четыре главы.

В первой главе приведен обзор литературы, посвященной термокапиллярной конвекции и наиболее известным ее моделям. Описаны эксперименты по обнаружению фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции и возможность ее практического применения. Выделены основные этапы математического моделирования при исследовании термокапиллярной конвекции. Так же проанализированы современные методы численного моделирования задач с межфазными границами.

Во второй главе рассматривается начальная стадия фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции. Исследуются случаи, когда число Рэлея не превышает критического значения, поэтому плавучестью можно пренебречь. Вследствие этого существует задержка термокапиллярной конвекции, т.е. жидкость находится в покое, пока запускающее температурное возмущение не достигнет ее свободной поверхности. Предложена тепловая модель начальной стадии этого эффекта, когда конвективные течения еще не возникли. Проведено сравнение результатов полуэмпирической модели с экспериментальными данными, полученными в лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии».

Третья глава посвящена гидродинамическим течениям и теплообмену при термокапиллярной конвекции, вызванной тепловым действием лазерного излучения в слое прозрачной жидкости на поглощающей подложке, строится термогидродинамическая модель явления. Проведено обезразмеривание системы балансных уравнений и граничных условий. Для численного моделирования реализован VOF метод для решения уравнений при связанном движении вязкой несжимаемой жидкости и

газа с учетом сохранения энергии. Для дискретизации уравнений использован классический МАС метод первого и второго порядка в цилиндрических координатах с учетом осевой симметрии исследуемого течения. Особенностью модели является совместное решение уравнений для твердой подложки, слоя жидкости и воздуха.

В четвертой главе описан программный комплекс для численного моделирования исследуемого явления. Построены поля скоростей, давлений и температурные поля. На основе предложенной модели вычислено время задержки термокапиллярной конвекции. Получен также профиль термокапиллярной деформации свободной поверхности в различные моменты времени.

В заключении обобщены выводы диссертационной работе.

**Апробация работы и публикации.** Результаты исследований обсуждались на научных семинарах лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии», семинарах физического факультета и факультета математики и компьютерных наук, доложены на:

- Девятой Всероссийской конференции студентов–физиков и молодых ученых, Екатеринбург–Красноярск, март–апрель 2003;
- Международной конференции “Advanced Problems in Thermal Convection”, Пермь, ноябрь 2003;
- Федеральной итоговой научно-технической конференции творческой молодежи России по естественным, техническим, гуманитарным наукам, Звенигород, декабрь 2003;
- Первой Всероссийской конференции студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук», Томск, апрель 2004;
- 36-ой и 37-ой Региональной молодежной конференции «ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ», Екатеринбург: УрО РАН, январь–февраль 2005, 2006;
- Всероссийской конференции с участием зарубежных ученых

«ЗАДАЧИ СО СВОБОДНЫМИ ГРАНИЦАМИ: ТЕОРИЯ,  
ЭКСПЕРИМЕНТ И ПРИЛОЖЕНИЯ», Бийск, июль 2005.

опубликованы в работах [57, 59, 65–72].

## Глава 1

# Термокапиллярная конвекция. (Обзор литературы.)

Отсутствие механического равновесия в неравномерном температурном поле приводит к возникновению в жидкости внутренних течений, стремящихся перемешать жидкость так, чтобы в ней установилась постоянная температура. Такое движение, возникающее в поле тяжести, называют *свободной* или *гравитационной конвекцией* [73]. В основе гравитационной конвекции лежит механизм сил плавучести. Другим типом конвекции является капиллярная, связанная с неоднородностью поверхностного натяжения жидкости. Причиной движения жидкой поверхности являются градиенты поверхностного натяжения, возникающие вдоль поверхности раздела жидкость–жидкость или жидкость–газ за счет локального изменения температуры или состава жидкости [74,75]. Эффект капиллярной конвекции вызывают различные поверхностные явления. Капиллярная конвекция преобладает в слоях жидкости тоньше 1 см со свободной поверхностью [24].

Поверхностные явления отличаются удивительным разнообразием, и хотя многие из них были известны уже в глубокой древности (эффект “слезы крепкого вина”, “танец камфары”, эффект “апельсиновой кожуры”) [76,77], и даже находили практическое применение (успокоение бурного моря с помощью масла [78]), их природа долгое время оставалась до конца невыясненной.

На протяжении многих веков ученые пытались найти объяснение этим эффектам [74], и только в середине XIX века британский инженер Томпсон [76] и итальянский физик Марангони [79,80] внесли ясность в понимание механизма капиллярного движения жидкости, которое позже

стали называть эффектом Марангони [74, 80].

Первые практические задачи с использованием вызванного светом массопереноса появились с изобретением эвапорографа Черни (1929) [81]. Предполагалось, что в тонкой однородной пленке масла при неоднородном нагреве спроецированным на нее инфракрасным изображением происходит соответствующее неравномерное испарение масла и, таким образом, образуется рельефное изображение, которое визуализируется за счет интерференции на нем белого света. Спустя 10 лет Фишер предложил идею “эйдофора” [82] — прибора для оптического увеличения телевизионного изображения для проекции на большом экране. Здесь также использовалась масляная пленка, которая деформировалась под действием падающего на нее электронного луча.

В том же 1939 году Хершей провел эксперимент [83] по образованию холмика в тонком слое воды на предметном стекле, к которому снизу касались стеклянной палочкой, охлажденной в жидком азоте. Хершей первым дал правильное объяснение термокапиллярного эффекта и получил приближенное решение уравнения Навье-Стокса для профиля термокапиллярной деформации. Это же решение спустя 20 лет воспроизвел в книге [84] Левич, не сославшись на приоритет Хершей.

В 1956 году Федосов опубликовал статью о термокапиллярном движении [85], где, между прочим, предвидел возможность использования света для инициирования термокапиллярного эффекта. Да Коста [27] и Да Коста и Эскалона [28] исследовали течение и деформацию поверхности связанную с лазерным нагревом поглощающих нефтей, в их работе использовались лазеры длительного действия. Хиджаката и др. [86] произвели несколько новых измерительных экспериментов используя коротко импульсные высокомоощные лазеры при взаимодействии с жидкостями: керосин, этанол, октан и R113. Лонгтин и др. [87] на основе этой экспериментальной работы выполнили масштабный анализ и полное численное решение основных уравнений для описания конвекции Марангони при воздействии высокоинтенсивного короткоимпульсного излучения, падающего на свободную поверхность поглощающей диэлектрической жидкости.

Излучение лазера характеризуется рядом свойств, выделяющим его среди других источников электромагнитного излучения: большой мощностью, высокой монохроматичностью, значительной временной и пространственной когерентностью. Лазерное излучение характеризуется узкой направленностью распространения, что обусловлено малым углом расходимости. В процессах обработки материалов лазерным излучением определяющую роль играют энергетические параметры, так как лазерное излучение является одним из видов высококонцентрированных источников энергии [18].

### **1.1 Механизм фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции в горизонтальном слое жидкости.**

Явление термокапиллярной конвекции, индуцированной тепловым действием лазерного излучения, впервые наблюдал в 1975 г. Б.А. Безуглый [25] в МГУ им. М.В. Ломоносова. Однако, адекватное объяснение явлению было дано лишь в 1977 г. [26].

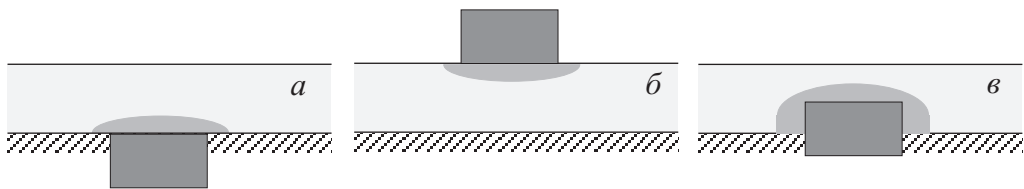
Данная работа посвящена гидродинамическим течениям и теплообмену при термокапиллярной конвекции — движения жидкости, вызванные за счет градиента поверхностного натяжения в следствие неоднородности температуры на ее свободной поверхности. Для многих однокомпонентных жидкостей (вода, органические вещества, расплавы солей, жидкие металлы) вдали от критической точки зависимость поверхностного натяжения от температуры близка к линейной:  $\sigma = \sigma_0 - \gamma(T - T_0)$ , поверхностное натяжение уменьшается с увеличением температуры. Здесь  $\sigma_0$  — поверхностное натяжение при начальной температуре,  $\gamma$  — термический коэффициент поверхностного натяжения,  $T_0$  — начальная температура. На свободной поверхности с градиентом температуры существует неустойчивость поверхностных сил, которая перемещает область низкого поверхностного натяжения (более теплая) к области высокого (холодная). Поверхностное движение передается соседним слоям жидкости благодаря ее вязкости. Под свободной поверхностью возникает

отрицательное давление, которое описывается динамически условием:

$$(p - p_0)\hat{n} = \sigma \kappa \hat{n} + \Sigma \cdot \hat{n} + \nabla \sigma,$$

где  $\Sigma_{ij} = \mu(\partial u_i/\partial x_j + \partial u_j/\partial x_i)$  — тензор вязких напряжений,  $\mu$  — динамическая вязкость,  $\kappa = (1/R_1 + 1/R_2)$  — кривизна свободной поверхности  $z = h(r, t)$ ,  $\hat{n}$  — вектор нормали к свободной поверхности, направленный внутрь жидкости,  $p_0$  — начальное давление [73]. Когда на поверхности жидкости начинается растекание и, как следствие, ее деформация, под свободной поверхностью возникает отрицательное лапласово давление, т.е. подсос. Сохранение массы требует, чтобы свежая жидкость двигалась в освобожденное пространство (возвратное течение), таким образом возбуждая конвективное движение. Конвекция, вызванная градиентами температуры или концентрации на свободной поверхности жидкости, также известна как конвекция Марангони.

Осесимметричные задачи о термокапиллярной конвекции в жидком слое можно классифицировать по способу подведения энергии. Необходимый градиент температуры для возникновения термокапиллярной конвекции можно получить контактным путем — при помощи кондуктивно подведенного источника или стока, который может находиться на поверхности дна (нагревающий или охлаждающий элемент на подложке) [83], Рис. 1.1а. С другой стороны, тепловой источник может находиться непосредственно на свободной поверхности [75, 88–91], Рис. 1.1б, а также внутри жидкости, частично выступая над подложкой [92–94], Рис. 1.1в.

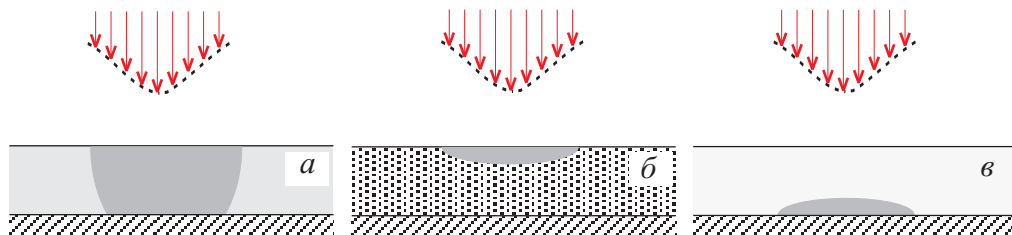


**Рис. 1.1.** Способы кондуктивного подвода тепла.

Другой способ подведения тепла — электромагнитное излучение, Рис. 1.2. При этом используются как импульсные лазеры [4, 13, 49, 87, 95–97], так и лазеры непрерывного излучения [17, 50, 55, 98]. Нагрев жидкости пучком лазера может происходить по двум причинам. Если жидкость

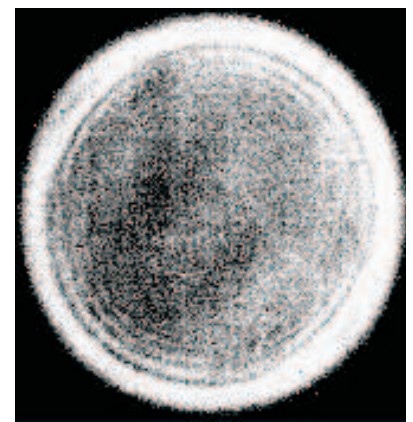


хорошо поглощает излучение [52, 99, 100], то нагрев происходит в объеме жидкости, по закону Бугера–Ламберта–Бера, Рис. 1.2*а*. В случае высокого коэффициента поглощения, тепло выделяется в тонком приповерхностном слое [37, 38, 41, 48, 57], Рис. 1.2*б*, что практически мгновенно приводит к возникновению термокапиллярного течения с последующей деформацией свободной поверхности. Однако, когда жидкость прозрачна, лазерное излучение поглощается только подложкой и на границе жидкий слой–подложка появляется плоский источник тепла [2, 68, 69, 71], Рис. 1.2*в*. В этом случае требуется некоторое время, прежде чем на свободной поверхности жидкости возникнет температурное возмущение, способное запустить термокапиллярную конвекцию, которую можно зарегистрировать. Это характерное время эффекта называют “временем задержки” термокапиллярной конвекции. В данной работе рассматривается именно этот тип конвекции.



**Рис. 1.2.** Распространение тепла за счет лазерного воздействия при различных коэффициентах поглощения жидкости.

Информацию о форме деформированной термокапиллярным вихрем поверхности несет частично отраженный лазерный пучок, проецируемый на экран, помещенный в поперечном сечении его каустики. На экране возникает интерференционная картина, которая в случае плоскопараллельного слоя жидкости имеет вид концентрических окружностей, Рис. 1.3, которую будем называть термокапиллярным откликом. В



**Рис. 1.3.** Термокапиллярный отклик [34]

случае неоднородности слоя по толщине или при наличии статической

кривизны свободной поверхности, форма отклика отклоняется от круглой. Причина возникновения интерференционной картины подробно рассмотрена в работе [37].

Конвективный процесс внутри слоя жидкости, индуцированный лазерным излучением, и деформация свободной поверхности зависят от большого числа геометрических и физических параметров системы «лазерный пучок–жидкий слой–подложка»: диаметра  $a$  пучка лазера в точке падения на слой и его мощности  $P$ , толщины слоя жидкости  $h_0$ , тепловых и оптических свойств подложки (теплопроводности  $k_s$ , теплоемкости  $c_{ps}$ , коэффициента поглощения  $\alpha_s$ ), тепловых, реологических, динамических и оптических свойств жидкости (теплопроводности  $k_l$ , теплоемкости  $c_{pl}$ , вязкости  $\mu_l$ , поверхностного натяжения  $\sigma_0$ , термических коэффициентов объемного расширения  $\beta = -\partial\rho/\partial T$  и поверхностного натяжения  $\gamma = -\partial\sigma/\partial T$ , коэффициента поглощения  $\alpha_l$ ). В связи с этим при теоретическом исследовании термокапиллярной конвекции как правило проводится предварительное обезразмеривание уравнений, а введение безразмерных комплексов позволяет сократить число значимых параметров системы. Следует также отметить, что наличие поверхностно-активных веществ даже в ничтожных количествах приводит к полному подавлению термокапиллярной конвекции [101].

На Земле действие гравитации порождает конвективные течения: более холодная, тяжелая жидкость опускается вниз, заставляя более теплую, легкую жидкость подниматься. Пирсон в 1958 году [24] теоретически рассчитал преобладание термокапиллярного или термогравитационного механизма в течении. В космосе, при условии микрогравитации, выступают термокапиллярные течения и они могут быть изучены детально. Камотани и др. [102] выполнили эксперимент термокапиллярного течения в условиях микрогравитации и сравнили результаты с наземными экспериментами.

Несмотря на всю сложность механизма конвективных процессов, зная параметры системы, возникновение какого-либо типа конвекции легко предсказать, используя безразмерные критические числа:

1. динамическое число Бонда характеризует соотношение в системе гравитационных сил и сил, вызванных неоднородностью

поверхностного натяжения. Если неоднородность вызвана градиентом температуры:

$$\mathbf{Bd} = \frac{\rho g h_0^2}{\gamma \Delta T};$$

2. число Рэлея характеризует соотношение сил плавучести и сил вязкого трения:

$$\mathbf{Ra} = \frac{\beta h_0^3 \Delta T g \rho}{\mu \kappa};$$

Часто используется число Грасгофа  $Gr = Ra/Pr$ , которое появляется при обезразмеривании уравнений Навье–Стокса в приближении Обербека–Буссинеска;

3. число Марангони характеризует соотношение поверхностных сил и сил вязкого трения:

$$\mathbf{Ma} = \frac{\gamma h_0 \Delta T}{\mu \kappa}.$$

Более подробная классификация безразмерных комплексов в капиллярной гидродинамике представлена в работе Безуглого Б.А. и Ивановой Н.А. [103], в которой предложен простой способ вывода соотношений между безразмерными комплексами.

При нагреве слоев жидкости термогравитационный и термокапиллярный механизмы конвекции действуют одновременно. Анализ чисел Рэлея и Марангони показывает, что с уменьшением характерного размера системы  $h_0$  менее 1 см, капиллярная конвекция становится доминирующей в большинстве жидкостей [24, 104].

## **1.2 Эффект задержки термокапиллярного отклика.**

Несмотря на то, что существует трудно обозримое множество разнообразных методов лазерной диагностики жидкостей, в этой области предпринимаются новые исследования и разрабатываются новые направления, что свидетельствует о растущей потребности в них. В этом параграфе излагаются физические принципы нового подхода в лазерной диагностике жидкостей, основанного на явлении фотоиндуцированной

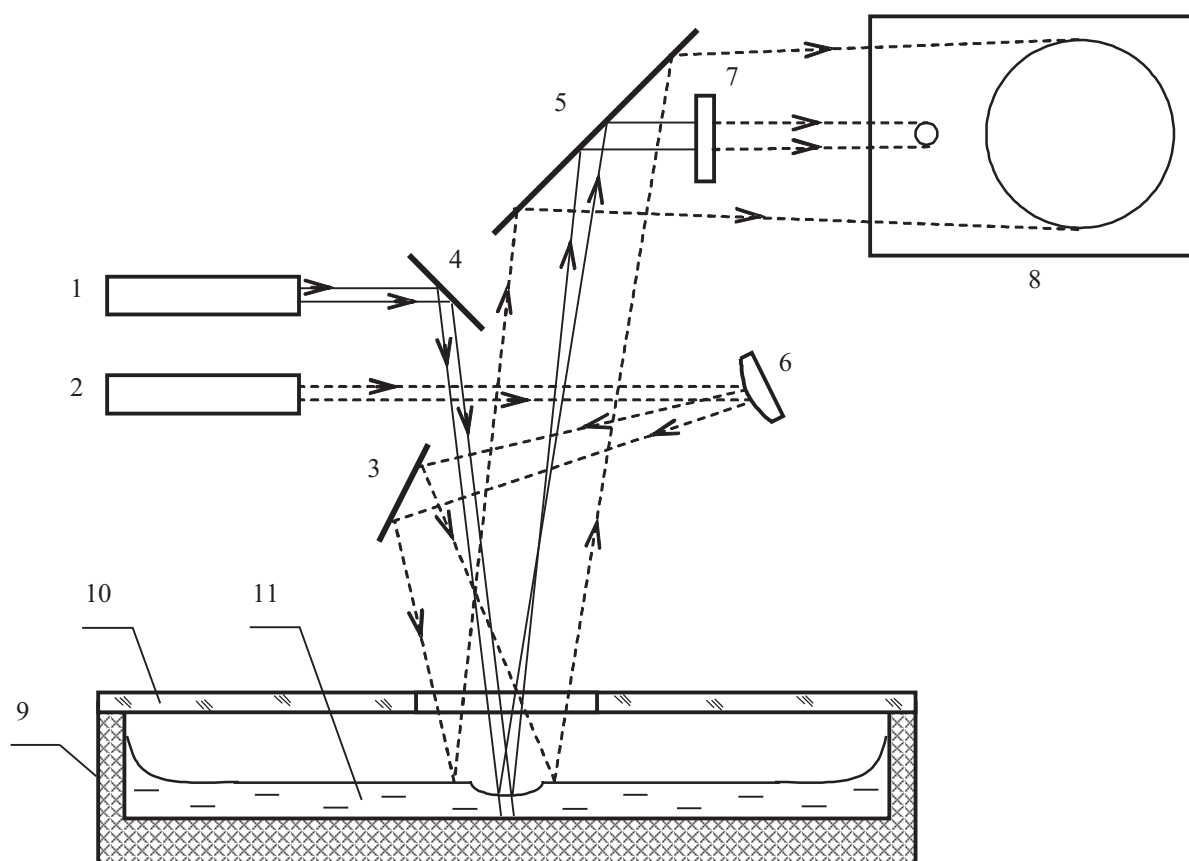
термокапиллярной конвекции. Основой этого подхода является эффект задержки термокапиллярного отклика, обнаруженный в лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии» [2]. Экспериментально доказано что время задержки зависит от толщины слоя, мощности лазерного пучка и вязкости жидкости.

В последние годы возрос интерес к лазерным методам диагностики веществ. Это связано с усовершенствованием и широким внедрением лазеров практически во все отрасли науки и техники. Лазер является практически идеальным источником излучения, которое обладает рядом уникальных характеристик. Это позволило не только поднять на новый уровень имеющиеся методы диагностики, но и разработать совершенно новые, которые невозможно было осуществить без лазеров. Эти методы основаны на различных физических эффектах и их многообразие позволяет диагностировать практически любую среду.

Подход с использованием фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции хорошо зарекомендовал себя в лазерной диагностике жидкостей, где он имеет ряд преимуществ: 1) простота 2) полная бесконтактность (что актуально в случае неинвазивных измерений) 3) достаточно высокая точность. На его основе создан ряд способов для измерения вязкости [10, 29], толщины слоя жидкости [5–8], концентрации поверхностно-активных веществ в воде [2] и т.д.

### **1.2.1 Описание эксперимента на определение времени задержки.**

В лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии» эксперименты с временем задержки термокапиллярной конвекции проводил Чемоданов С.И. [2, 30, 67, 68, 72, 101]. Схема эксперимента показана на Рис. 1.4. Пучок лазера 1 индуцировал термокапиллярную конвекцию в слое 11. Поскольку диаметр возникшей термокапиллярной деформации превосходил диаметр индуцирующего пучка на слое (2.5 мм), границы термокапиллярного отклика были размыты. Для полного охвата зоны деформации свободной поверхности использовали расширенный сферическим зеркалом 6 пробный пучок лазера 2 (диаметр на слое 10 мм), который не вносил заметных возмущений. С помощью



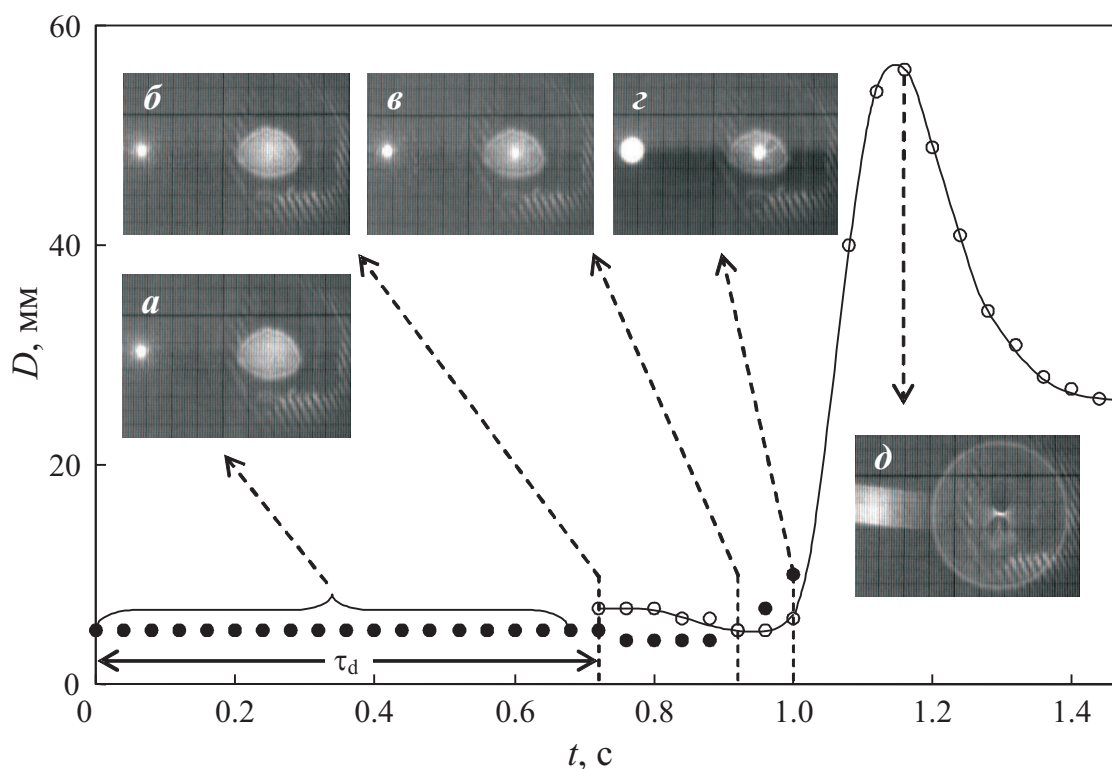
**Рис. 1.4.** Экспериментальная установка. 1 и 2 He-Ne ( $\lambda = 633$  нм) одномодовый индуцирующий ( $P = 20.9$  мВт) и пробный ( $P = 0.5$  мВт) лазеры, 3–6 зеркала, 7 светофильтр, 8 экран, 9 эбонитовая кювета диаметром 65 мм, 10 стеклянная крышка с отверстием диаметром 10 мм, 11 слой жидкости.

зеркал 3–5 установку юстировали так, чтобы на экране 8 в поле зрения видеокамеры находились отклики обоих пучков, ослабляя индуцирующий аттенюатором 7 до яркости пробного. Для выставления заданной толщины слоя использовали калиброванную проволочку, а для достижения горизонтальности дна кюветы микрометрический треножник. Характеристики исследованных жидкостей даны в таблице Приложение 1.

Эксперименты проводили при температуре  $21 \pm 1^\circ\text{C}$  следующим образом. В кювету 9 с помощью микропипетки заливали жидкость и закрывали ее стеклянной крышкой 10 с центральным отверстием диаметром 10 мм. Крышка существенно уменьшает испарение и защищает слой от воздействия конвективных токов воздуха. Отверстие обеспечивает доступ к слою для изменения его толщины, не влияя на условия в объеме газовой фазы кюветы, и исключает многократное отражение света от двух

поверхностей стекла и поверхности жидкости. После выставления слоя включали видеоманитофон на запись, открывали затвор, и записывали динамику развития отклика. По кадрам из оцифрованного видеопотока определяли диаметр отклика в программе Photoshop.

Между измерениями выдерживали паузу, чтобы система «подложка–жидкий слой» вернулась в исходное состояние. Время воздействия пучка на подложку составляло несколько секунд, а время релаксации системы — несколько минут. Последнее определяли по влиянию паузы между измерениями на результаты экспериментов, а в опытах брали заведомо большую паузу (4–5 минут).

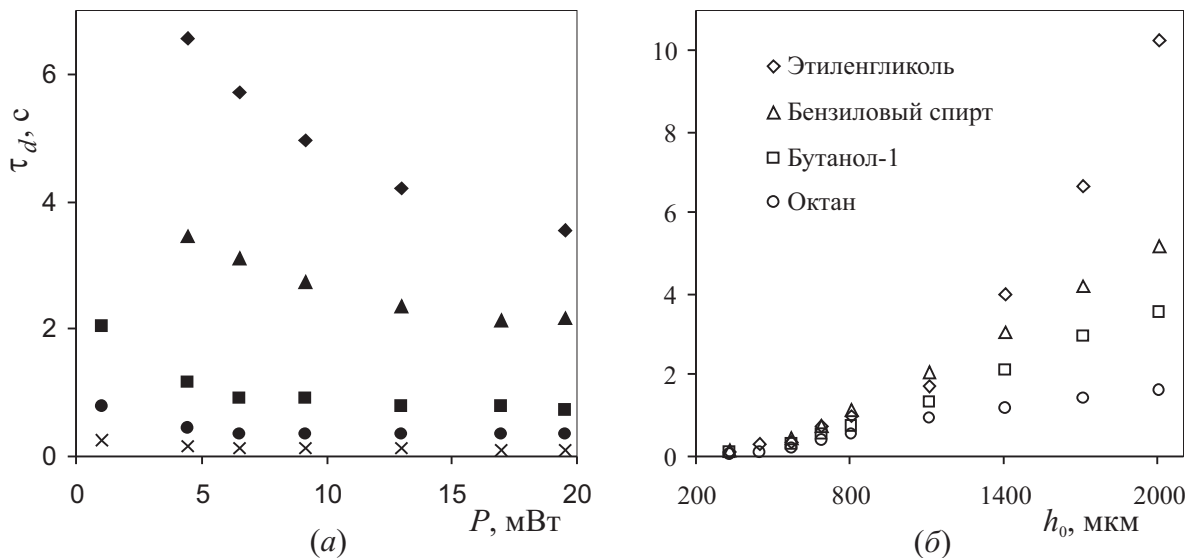


**Рис. 1.5.** Эволюция термокапиллярного отклика. На снимках изображен индуцирующий  $\bullet$  (слева) и пробный  $\circ$  (справа) пучок. (а) отклик, (б) начало деформации,  $t = \tau_d$ , (в) фокусировка пробного пучка, (г) начало перефокусировки, (д) всплеск.

После включения индуцирующего пучка картина пробного, в течение некоторого времени, не меняется. Эту паузу назовем временем задержки термокапиллярного отклика,  $\tau_d$ , а отраженный от плоского зеркала жидкости пучок (индуцирующий или пробный) на экране — просто откликом, Рис. 1.5(а), тогда как отраженный пучок от уже деформированной термокапиллярной конвекцией жидкой поверхности

удобно называть термокапиллярным откликом, Рис. 1.5(б)–(д). Начало деформации отмечали по отклонению свободной поверхности от плоской, наблюдаемому по появлению в центре пробного пучка светлого пятна, Рис. 1.5(б), диаметр которого в момент фокусировки становился минимальным, Рис. 1.5(в). Далее, с увеличением глубины деформации происходит рост диаметра как индуцирующего, так и пробного пучка, Рис. 1.5(г), который заканчивается всплеском перефокусировки, Рис. 1.5(д), что отражается в резком увеличении термокапиллярного отклика с последующим его уменьшением.

Эксперименты проводили с четырьмя жидкостями октан, бутанол, бензиловый спирт и этиленгликоль, перечисленными в порядке возрастания их вязкости. На Рис. 1.6(а) приведены результаты измерения времени задержки как функции мощности лазерного пучка, для различной



**Рис. 1.6.** Зависимость времени задержки термокапиллярного отклика: (а) от мощности пучка при толщине слоя 330, 570, 810, 1410, 2010 мкм снизу вверх соответственно для бутанола и (б) от толщины слоя для различных жидкостей, при  $P = 20.9$  мВт.

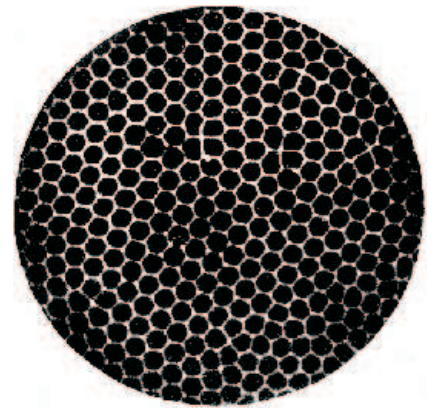
толщины слоя бутанола. Такой же характер имеют зависимости от мощности и в случае октана и бензинового спирта. С ростом толщины слоя возрастает и время задержки, Рис. 1.6(б), при этом жидкости выстраиваются по вязкости. Это объясняется тем, что чем выше вязкость, тем большее температурное возмущение должно возникнуть

на поверхности чтобы сдвинуть ее. При прочих равных условиях, это приводит к увеличению  $\tau_d$ .

### 1.3 Математические модели движения тонкого слоя жидкости

В начале прошлого столетия Бенар Х. [21, 22] наблюдал образование гексагональных конвективных картин при нагревании тонких слоев жидкости от 0.44 до 1.2 мм толщиной, Рис. 1.7. Лорд Рэлей полагал, что ячеечные картины были вызваны силами плавучести и сформулировал условия возникновения конвекции в своей работе [23], используя линейный анализ устойчивости и предполагая линейный градиент плотности при стационарном теплопереносе. Затем последовал длинный период путаницы в механизме конвекции. Норманд Ч. и др. [105] представили подробный исторический обзор.

Полвека спустя Блок М.Дж. [106] экспериментально, а Пирсон Дж. [24] теоретически пришли к выводу, что конвективные ячейки Бенара были индуцированы поверхностными силами. Последний получил безразмерный комплекс для капиллярной конвекции  $\gamma\Delta T_c h_0 / (\mu\kappa) = Ma$ , названный позже числом Марангони, критическое значение которого было найдено равным 79.6, а соответствующее критическое волновое число  $\tilde{\lambda}_c = 2.0$ . По его оценке число  $Ma$  в опытах Бенара должно быть больше 80, на основании чего он уверенно объяснил причину конвекции капиллярным механизмом.



**Рис. 1.7.** Ячейки Бенара [21]

Комбинированное влияние поверхностного натяжения и плавучести на конвекцию проанализировал Нилд Д.А. [107] и установил, что при отсутствии конвективного теплообмена с окружающей средой устойчивость определяется соотношением между  $Ma$  и числом Рэля



$$(Ra = g\beta h_0^3 \Delta T_c / \nu \kappa)$$

$$\frac{Ma}{Ma_c} + \frac{Ra}{Ra_c} = 1,$$

где  $Ma_c$  и  $Ra_c$  — теоретические критические значения, полученные методом линейного анализа устойчивости, равные соответственно 80 и 669;  $\Delta T_c$  — разница температур на дне и на свободной поверхности. Закон Нилда показывает, что капиллярные силы преобладают в очень тонких слоях жидкости, когда число  $Ra$  пренебрежимо мало. Относительную роль поверхностных сил и подъемных сил можно оценить из отношения числа  $Ma$  к числу  $Ra$ :  $\Gamma = Ma/Ra = \gamma / (g\beta\rho_0 h_0^2)$ .

Исходя из вышесказанного, можно оценить толщину  $h_{Ma}$  [104] слоя жидкости с одной свободной поверхностью, при которой термокапиллярные силы преобладают над термогравитационными, если эта поверхность деформируема

$$h_{Ma} = \sqrt{\frac{\gamma}{0.587g\beta\rho_0}} = 1.306 \sqrt{\frac{\gamma}{g\beta\rho_0}}$$

Для большинства органических жидкостей  $h_{Ma} < 4.5$  мм, а для воды  $h_{Ma} \approx 10$  мм [104].

### 1.3.1 Температурное распределение.

Существуют различные ситуации, когда при тепловом воздействии вклад конвекции незначителен и теплоперенос происходит в основном за счет кондукции (сварка, плавка, резка металлов, нагрев слоя жидкости снизу при малых числах  $Ra$ ). В таких случаях целесообразно проводить оценку теплового возмущения в системе на основе только уравнения энергии с различными граничными условиями. Наиболее простым случаем является нагрев полубесконечного теплоизолированного тела постоянным непрерывным источником тепла  $q$  [108]:

$$T(z, t) = T_0 + \frac{2q}{k} \sqrt{\kappa t} \operatorname{ierfc} \left( \frac{z}{2\sqrt{\kappa t}} \right)$$

Это решение было расширено для случая затухающего источника и с условием конвективного теплоотвода с поверхности [109].

Серия работ [18, 110–113] посвящена расчетам тепловых процессов при сварке металлов световым потоком лазера. В некоторых случаях возможно

представление теплового источника в виде равномерного круга радиуса  $a$ . Это приближение справедливо, когда источник является сосредоточенным и значение  $a$  мало по сравнению с другими линейными параметрами системы. Тогда для полуограниченной среды на оси симметрии имеем [108]

$$T(z, t) = T_0 + \frac{2q}{k} \sqrt{\kappa t} \left\{ \operatorname{ierfc} \left( \frac{z}{2\sqrt{\kappa t}} \right) - \operatorname{ierfc} \left( \sqrt{\frac{z^2 + a^2}{4\kappa t}} \right) \right\}$$

Процесс распространения теплоты при нагреве поверхности полубесконечного тела неподвижным нормально-круговым источником описывается выражением [18]

$$T(r, z, t) = T_0 + \frac{2q}{c_p \rho (4\pi\kappa)^{3/2}} \int_0^t \frac{dt}{\sqrt{t(t+t_0)}} \exp \left[ -\frac{z^2}{4\kappa t} - \frac{r^2}{4\kappa(t+t_0)} \right]$$

где  $t_0 = a^2/4\kappa$  — постоянная времени, выражающая длительность распространения тепла эквивалентного сосредоточенного источника.

Да Коста Дж. в [41] рассчитал температурное распределение в тонком образце нагреваемым гауссовым пучком лазера:

$$T - T_0 = \frac{H_0 a^2}{4kh_0} \int_{\frac{\beta^2}{1+\gamma}}^{\beta^2} \frac{d\theta}{\theta \exp \theta}$$

где  $\beta = x/a$ ,  $\gamma = t/t_0$ . В этом выражении отсутствует зависимость от вертикальной координаты.

Ксу Б.К. и др. в [96] проводят численное моделирование температурных распределений в тонкой пленке поглощающей жидкости на твердой подложке под действием лазерного импульса без учета конвективных течений. Свойства среды зависят от температуры. На границе жидкая пленка–подложка задается условие сопряжения. Моделирование проводилось конечно-элементным методом со специальной сеткой.

### 1.3.2 Модели тепло- и массопереноса.

В ряде отечественных и зарубежных работ встречаются упрощенные математические модели термокапиллярной конвекции. Более ранние

исследования являются чисто аналитическими. С появлением мощной вычислительной техники современные работы в основном направлены на численное моделирование.

В работах Да Косты Дж. [37, 38, 41] были теоретически оценены глубина термокапиллярного прогиба и профиль углубления:

$$h(\sigma) = h_0 \left[ \left( \frac{\rho_0}{\rho} \right)^{3/4} + \frac{3}{\rho g h_0^2} (\sigma - \sigma_0) \right]^{1/2},$$

в случае гауссового распределения интенсивности в индуцирующем лазерном пучке, в предположение, что распределение температуры в жидкости подчиняется распределению интенсивности в пучке, т.е. является гауссовым:

$$T - T_0 = \frac{H_0 a^2}{4k h_0} \left\{ -Ei \left[ \frac{-(x/a)^2}{1 + 4kt/a^2} \right] + Ei \left[ -\frac{x^2}{a^2} \right] \right\}.$$

Глубина деформации оказалась прямо пропорциональна температурному полю. Кроме того получено оценочное выражение для скорости свободной поверхности.

Гладуш Г.Г. и др. в работе [44] исследуется структура гидродинамических течений, возникающих в жидкой ванне вследствие неоднородного нагрева свободной поверхности жидкости излучением лазера. Здесь рассмотрены некоторые предельные случаи аналитического моделирования термокапиллярных течений при лазерной обработке металлов. Получены оценочные выражения для компонент скорости, давления и температуры на свободной поверхности и смещения поверхности в двумерной декартовой системе координат.

Чан К. и др. [46] разработали двумерную модель нестационарного конвективного теплопереноса и капиллярной конвекции. Численная модель на основе метода SOLA описывает поведение процесса нестационарного теплопереноса при стационарном тепловом потоке.

В большинстве работ по исследованию изменения рельефа поверхности жидкости под действием света изучалась деформация поверхности жидкости за счет неоднородного нагрева, приводящего к локальным изменениям поверхностного натяжения и плотности [37, 41, 42, 52].

Несколько иная ситуация исследуется в работах [114, 115]. В них проводится теоретическое и экспериментальное изучение деформации свободной поверхности жидкости, вызванной световым давлением сфокусированного лазерного импульса в условиях, когда термические эффекты исключены.

Тан М.Дж. и др. [116] на основе длинно-волновой теории провели анализ образования деформации свободной поверхности слоя жидкости под действием термокапиллярной конвекции, вызванной неоднородным спонтанным распределением температуры.

Капиллярная конвекция в жидкостях с малой вязкостью наблюдается при перепадах в поверхностном натяжении порядка 0.1 мН/м. Из экспериментов Низовцева В.В. следует, что в случае вынужденной лазерным излучением конвекции в слоях поглощающих жидкостей толщиной  $h_0$  от 100 до 500 мкм существует корреляция между диаметром  $d_r$  термокапиллярного вихря и диаметром  $a$  индуцирующего его пучка лазера [51]

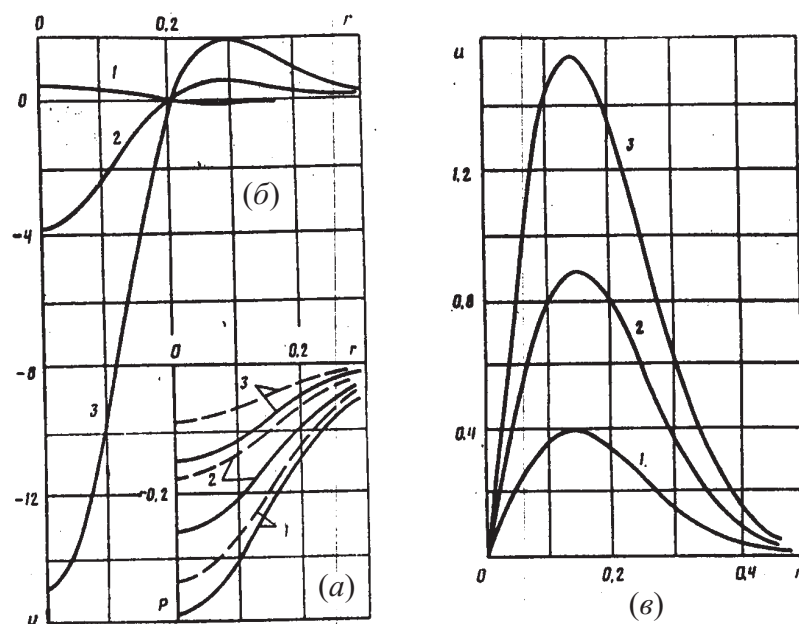
$$d_r = a + 0.5 \cdot h_0$$

Этот же автор [53] экспериментально оценил скорость движения жидкости в термокапиллярном вихре.

$$v_{\text{п}} = \frac{h_0^2 \sigma}{9r\mu} \left( \frac{2}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right).$$

Эксперименты показали, что поверхностная скорость линейно зависит от мощности лазера в диапазоне 0.2 ÷ 1 мВт. При мощности индуцирующего излучения 1 мВт и толщинах слоя бутанола 250 и 350 мкм она составляет 0.25 и 0.5 мм/с соответственно. Расчетные значения близки экспериментальным.

Наиболее информативной, на взгляд автора, из работ по теоретическому исследованию термокапиллярной конвекции в слое неравномерно нагретой лазерным излучением поглощающей жидкости является статья Индейкиной А.Е. и др. [100]. В этой работе рассматривается нестационарное термокапиллярное движение в слое вязкой несжимаемой жидкости со свободной поверхностью, в которой в начальный момент времени создана тепловая неоднородность. Получены приближенные



**Рис. 1.8.** Распределение давления и скоростей на свободной поверхности [100].

формулы для полей скорости, температуры и давления в слое жидкости, когда деформация свободной поверхности еще незначительна. На Рис. 1.8(a) показано распределение давления по радиусу для различных глубин при малых временах. На Рис. 1.8(б) и (в) показано распределение радиальной и вертикальной скоростей соответственно на поверхности слоя в различные моменты времени.

Баландин В.Ю. и др. в [13] исследовали абляцию тонкого алюминиевого слоя под действием импульсного лазера. Проводилось численное моделирование процессов распространения тепла, скорости расплавленного металла и деформации поверхности в следствие неравномерности поверхностного натяжения. В расчет брали одну компоненту скорости. Учитывалась зависимость свойств металла от температуры, т.к. металл подвергался большим перепадам температуры, и в расчеты включено испарение с поверхности металла.

В работе [95] Илбас Б.С. изучает механизм переноса тепла, включающий кондукцию, фазовый переход и процессы конвекции, происходящие при обработке стальной детали излучением Nd:YAG лазера. Учитывалась зависимость тепловых свойств вещества от температуры. Проводилось численное моделирование на основе уравнений импульса и неразрывности. Однако в самой работе результаты моделирования не

представлены, но автор утверждает, что теоретические оценки хорошо согласуются с результатами проведенных экспериментов.

Особый интерес представляет из себя статья Мерсьера Дж.-Ф. и Норманда К. [92], где проводится теоретическое исследование преобладания термокапиллярного или термогравитационного механизма конвекции в зависимости от положения горячей проволоочки в слое жидкости. Если проволоочка находится ниже свободной поверхности на расстоянии более 2.5 мм, то начинает преобладать термогравитационный механизм конвекции и на свободной поверхности образуется холмик. В противном случае преобладает термокапиллярная конвекция и на свободной поверхности образуется прогиб. Распределение температуры в слое определено методом изображений и для случая термокапиллярного механизма в двумерной декартовой системе координат на свободной поверхности имеет вид

$$\Theta = -\frac{1}{2\pi} \ln \left( \frac{\operatorname{ch}(\pi x/2A) - \sin(\pi b)/2}{\operatorname{ch}(\pi x/2A) + \sin(\pi b)/2} \right),$$

а деформация свободной поверхности

$$h^2 = 1 - \frac{3\Theta}{\operatorname{Bo}A}.$$

Отсюда выражаются вертикальная и горизонтальная составляющие скорости на свободной поверхности

$$\begin{aligned} u &= \operatorname{Bo}A \partial_x h \left( \frac{y^2}{2} - y \partial_x \Theta \right) \\ v &= -\operatorname{Bo}A \partial_{xx} h \left( \frac{y^3}{6} - \frac{y^2}{2} h \right) + \operatorname{Bo}A (\partial_x h)^2 \frac{y^2}{2} + \frac{y^2}{2} \partial_{xx} \Theta \end{aligned}$$

В формулах использованы обозначения:  $\operatorname{Bo}$  — статическое число Бонда;  $A = d/L$  — аспект-отношение, где  $d$  — толщина слоя жидкости,  $L$  — его горизонтальная протяженность.

Лонгтин Дж.П. и др. [87] проводят исследование течений жидкости под действием сил поверхностного натяжения в слое жидкости толщиной 1.2 см в следствие лазерного импульса. В жидкость добавлен фотохромный краситель (изменяет цвет под действием света). Работа в основном

направлена на изучение распространения окрашенного пятна вследствие возникших течений. Для этого проведен масштабный и численный анализ и результаты сравниваются с экспериментальными наблюдениями. Свободная поверхность считается недеформированной. Также в процессе численного моделирования на основе SIMPLEC алгоритма определено распределение температуры в слое жидкости и скорость на свободной поверхности в различные моменты времени. Максимальная температура достигалась 10 К. При таких условиях влияние сил плавучести незначительно, что и было показано численными экспериментами.

Большое число работ посвящено исследованию конвективных течений в лазерной ванне расплава [13, 15–17, 46, 97]. В [17] проводится численное моделирование конвективных течений, вызванных силами Марангони, температурного распределения в зависимости от термического коэффициента поверхностного натяжения и формы ванны расплава. Деформация свободной поверхности не учитывается. В [97] Ажаев В.С. и Уиллис Д.А. исследуют термокапиллярные течения в слое расплавленного металла на твердой подложке, проводят модельные вычисления для формы свободной поверхности и разрыва пленки в следствие термокапиллярных течений.

### 1.3.3 Профиль термокапиллярной деформации.

В одной из работ Да Косты Дж. [41] проводились исследования термокапиллярной конвекции в слое сильно вязкой жидкости (тяжелая нефть), когда под действием нагрева гауссовым пучком лазера в первую очередь наблюдается возникновение бугорка вследствие расширения жидкости, а затем образуется углубление.

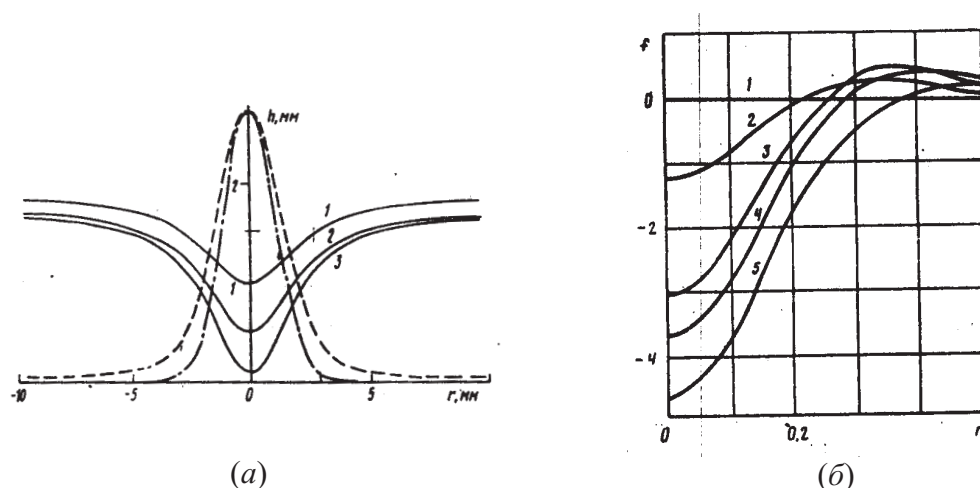
$$h = \left[ w^{3/4} - \Omega(w - 1) \right]^{1/2}$$

где

$$w = \frac{1}{1 + Df(\beta, \gamma)}, \quad D = \frac{\rho'_T T_c}{\rho_0}, \quad \Omega = \frac{3\sigma'_T}{gh_0^2 \rho'_T}, \quad f(\beta, \gamma) = \int_{\frac{\beta^2}{1+\gamma}}^{\beta^2} \frac{d\theta}{\theta \exp \theta}$$

а  $T_c = H_0 a^2 / 4k h_0$  — критическая температура материала,  $\beta = x/a$ ,  $\gamma = t/t_0$ . В приближении к экспериментам найдена критическая толщина преобладания термогравитационных или термокапиллярных сил.

В 1988 г. Визнюк С.Ф. и Суходольский А.Т. опубликовали работу [52], в которой была уточнена форма поверхности жидкости, деформированной термокапиллярным вихрем, с учетом гауссового распределения температурного поля и наличия лапласового давления искривленной поверхности. На Рис. 1.9(а) приведены расчетный стационарный профиль термолинзы (сплошные кривые), полученные для распределения температуры (пунктир), инициированной гауссовым пучком (штрихпунктир) при толщине поглощающей жидкости  $h_0 = 1.8$  (1), 1.7 (2) и 1.68 мм (3).



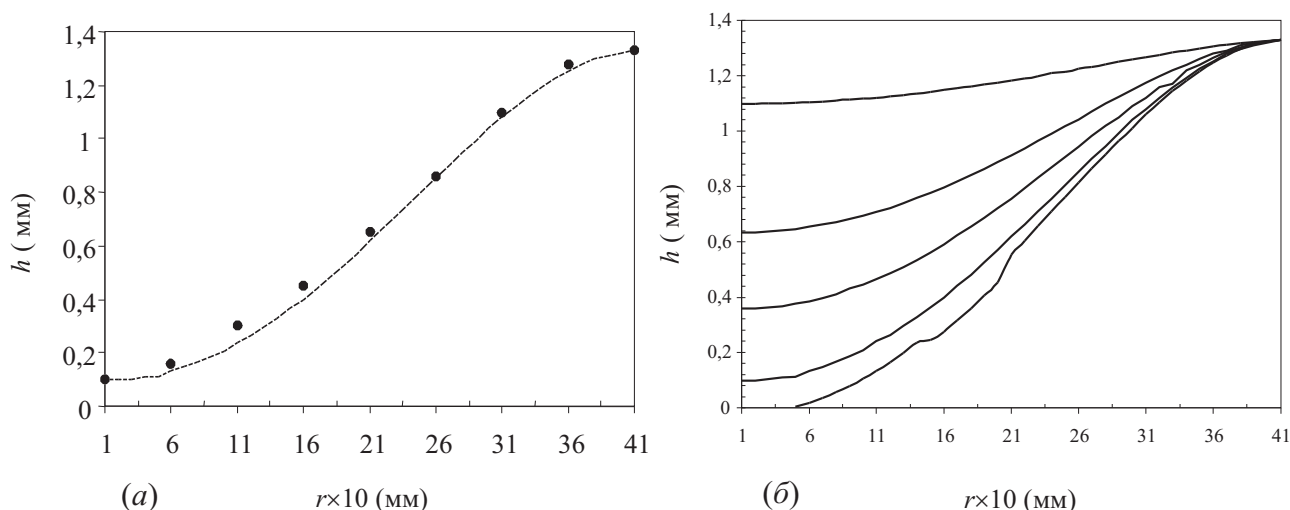
**Рис. 1.9.** Профиль поверхности жидкости.

В уже упомянутой работе [100] получена приближенная формула для формы свободной поверхности при больших временах, когда деформация уже значительная

$$h(r, t) = 1 + \beta_T \frac{3}{8} \left( 1 - \frac{4}{\text{Bd}} \right) \frac{1 - e^{-\alpha H}}{\alpha H} \left\{ e^{-r^2/a^2} - \left( 1 + \frac{4}{3} \frac{\text{Bd}}{\beta_T a^2} t \right)^{-1} \exp \left[ -\frac{r^2}{a^2} \left( 1 + \frac{4}{3} \frac{\text{Bd}}{\beta_T a^2} t \right)^{-1} \right] \right\}$$

где  $\beta_T = \beta \Delta T$ ,  $\text{Bd}$  — динамическое число Бонда и все величины безразмерные. На Рис. 1.9(б) показано отклонение формы поверхности от плоской в различные моменты времени.





**Рис. 1.10.** Профиль термокапиллярного углубления [57].

В [57] получены оценки стационарного профиля термокапиллярной деформации слоя поглощающей жидкости вызванного тепловым действием пучка лазера. Теоретические зависимости сопоставляются с результатами эксперимента, полученными фотоабсорбционным методом. На Рис. 1.10(а) приведены расчетный (пунктирная кривая) и экспериментальный (точки) профили термокапиллярного углубления, образованного в слое этилового спирта толщиной 1.4 мм, лазерным пучком мощностью 8 мВт. Рассчитанный профиль термокапиллярной деформации вполне удовлетворительно совпадает с экспериментальным, что говорит об адекватности теоретической модели реальному физическому явлению. На Рис. 1.10(б) показаны расчетные профили термокапиллярного углубления в зависимости от мощности лазерного излучения. При увеличении мощности пучка (кривые 1–4) от 1 до 8 мВт глубина прогиба в центре термокапиллярного углубления уменьшилась почти в 8 раз. Дальнейшее увеличение мощности пучка (кривая 5) приводит, к разрыву жидкого слоя, который наблюдали в слоях окрашенного бензилового спирта толщиной порядка 200 мкм под действием лазерного пучка мощностью более 10 мВт.

## 1.4 Этапы математического моделирования

Все явление можно разбить на три стадии и рассматривать каждую из них отдельно. На первой стадии жидкость находится в покое и подвергается тепловому воздействию. Как видно из экспериментов, температурного возмущения в жидкости до определенного момента не достаточно для возникновения конвективных течений. Кроме того, в рассмотрение берутся малые слои ( $h_0 \leq 2$  мм), когда выполняется условие для числа Рэлея  $Ra < Ra^*$ . Превышение значения числа Рэлея критического  $Ra^* = 1100$  является необходимым условием возникновения свободной конвекции под действием силы плавучести в слое жидкости толщиной  $h_0$  со свободной поверхностью. Оно было получено Рэлеем при исследовании возникновения ячеек Бенара. При этих ограничениях жидкость можно считать твердым телом и тогда тепло в нем распространяется только по законам теплопроводности.

Вторая стадия, когда деформация свободной поверхности уже началась, но возвратные потоки еще не возникли, будет проходить до обнаружимого всплеска. Здесь конвективные течения жидкости происходят только в приповерхностном слое жидкости за счет неоднородности коэффициента поверхностного натяжения, которое возникает вследствие неравномерного распределения температуры. При линейной зависимости поверхностного натяжения от температуры вторая стадия должна возникать практически мгновенно (как только свободная поверхность почувствует нагрев), но экспериментальные данные говорят о существовании паузы, которая зависит от толщины слоя, свойств жидкости и параметров пучка. Причиной этого может быть достижение определенного температурного возмущения, которое запускает термокапиллярное течение. В случае локального теплового воздействия применение числа Марангони для определения запускающего температурного возмущения уже не приемлемо и исследование начала термокапиллярной конвекции нужно применять другие способы.

Третья стадия наступает, когда в жидкости образуется вихрь и происходит это лавинообразно. Эта стадия является гидродинамической

и требует полной постановки термогидродинамической задачи. Особый интерес составляет именно момент начало этой стадии, который характеризуется параметрами системы «жидкий слой–подложка–лазерный пучок».

## **1.5 Численные методы решения задач со свободными границами**

За последние десятилетия численному моделированию течений со свободными границами или разрывами (межфазная граница, ударная волна) посвящено большое число исследований. Тем не менее, подобные задачи остаются сложными для численного моделирования и возбуждают интерес к дальнейшим исследованиям [60]. Было предложено немало методов для решения определенных и специальных задач, однако ни один из них не стал общепринятым. Поэтому для решения задачи со свободной границей необходимо аккуратно и правильно подобрать метод со осознанием его возможностей и недостатков.

Любое численное моделирование течений требует проведения дискретизации для численной реализации расчетов на компьютере. Существует два принципиально различных подхода: методы Эйлера используют опорную структуру (дискретизационные сетку или ячейки, контрольные объемы, узлы и т.д.) фиксированные в пространстве, и вещество (жидкость) двигается внутри этой структуры. В то время как методы Лагранжа используют структуру (маркерные частицы, сетка или ячейки и т.д.) связанные идвигающиеся вместе с веществом. Методы Лагранжа менее полезны, если вследствие течений происходят сильные деформации или изменяется топология, например, когда свободная граница размазывается или разрывается. В этом случае опорная структура должна быть переинициализирована, что может быть очень громоздким. С другой стороны методы Эйлера как правило менее точные вследствие численного рассеивания.

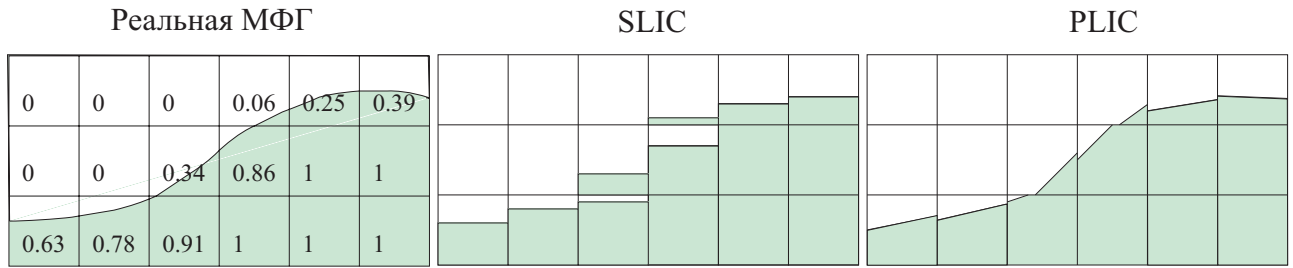
Не смотря на малые деформации в исследуемой задаче для моделирования был выбран метод Эйлера, т.к. это позволяет уменьшить

объем вычислений.

Одним из наиболее ранних и получивших широкое распространение методов решения задач течения жидкость–газ с подвижной границей, является предложенный Харлоу Ф.Х. и Уэлчем Дж.И. [63] *метод маркеров и ячеек* (МАС). По правде говоря это была комбинация эйлеровского подхода к вычислению области течения с лагранжевыми маркерными частицами, привязанными к жидкости для того, чтобы отличить ее от газа. В то время как схема с разнесенной сеткой и и другие особенности МАС метода стали шаблоном для других эйлеровских подходов, маркерные частицы оказались слишком дорогостоящими с вычислительной точки зрения и поэтому редко использовались. Тем не менее встречались некоторые улучшенные варианты этого метода, например [117–119].

В отличие от МАС *метод объема жидкости* (VOF) стал более популярным [60, 62, 120–122]. Здесь вместо маркер–частиц используют поле объема жидкой фракции, обозначаемое  $F$ . Для каждой вычисляемой ячейки оно определяет долю, заполненную жидкостью, и принимает значения  $F = 1$  в ячейке, полностью заполненной жидкостью;  $F = 0$  в ячейке, заполненной воздухом; и  $0 < F < 1$  содержащей их межфазную границу.  $F$  является свойством, которое меняется при движении жидкости; в связи с этим имеет место простое адвективное уравнение:  $DF/Dt = 0$ . Ключевым элементом в VOF методе является способ вычисления  $F$ : стандартный конечно-разностный метод страдает от численной диффузии, которая делает значения  $F$  слишком гладкими. Поэтому используются специальные методы, часто геометрические, для определения  $F$ .

Первая работа, в которой был представлен SOLA–VOF код, получившая широкую известность, стала работа Хёрта К.У. и Николса Б.Д. [123].  $F$ -поле в VOF методе является единственным источником информации о фазе. Аппроксимация положения межфазной границы находится при помощи так называемого реконструирования. Это необходимо для дальнейшего вычисления  $F$ , определения локальных свойств (плотности, вязкости, теплопроводности и др.) и для лучшего графического представления. В более ранних версиях [124], обычно



**Рис. 1.11.** Реальная межфазная граница и соответствующее  $F$ -поле. Восстановленная межфазной границы горизонтальными линиями (SLIC) и прямыми линиями с относительным наклоном (PLIC)

называемых SLIC (Simple Line Interface Method), межфазную границу аппроксимировали горизонтальной или вертикальной линией в каждой ячейке, Рис. 1.11. Конечно, такого рода реконструкция межфазной границы довольно грубая. Тем не менее, такой подход использовался во многих ранних версиях вплоть до настоящего времени и даже были получены приемлемые результаты при моделировании.

Более точное восстановление межфазной границы возможно при помощи PLIC (Piecewise Linear Interface Construction) метода [125]. В работе при моделировании используется именно этот подход. Здесь межфазная граница аппроксимируется прямыми линиями относительной ориентации в каждой ячейке. Ее положение определяется по распределению жидкости в соседних ячейках. Это имеет несколько преимуществ: поток  $F$ , при помощи которого переопределяется фаза  $F$ -поля, может быть вычислен более аккуратно, и существенно освободить численную диффузию. Площадь межфазной границы приближенно известна, поэтому силы поверхностного натяжения в процессе массопереноса проще учесть. Свойства жидкости (плотность и вязкость) более точно локализованы. И наконец, прямые наклонные линии дают более качественное графическое представление.

В девяностых годах появился другой популярный метод — метод уровней (Level Set Method) [126, 127]. Для определения межфазной границы здесь используется новое переменное поле  $\Phi$ , абсолютное значение которого показывает наикратчайшее расстояние до межфазной границы, принимает положительные значения в жидкости и отрицательные

в газе. Набор точек, где  $\Phi = 0$ , является межфазной границей.

Так же как и  $F$  в VOF методе,  $\Phi$  в первом приближении является свойством среды, которое движется вместе с ней, поэтому для нее так же справедливо простое адвективное уравнение  $D\Phi/Dt = 0$ . Однако, в следствие искажения течения,  $\Phi$  все больше и больше отклоняется от реального расстояния до межфазной границы и поэтому должна быть переинициализирована на каждом шаге по времени в процессе решения дифференциальных уравнений. При численной реализации свойства, такие как плотность и вязкость, не могут резко изменяться на межфазной границе, поэтому становится необходимым провести сглаживание (как правило синусоидальными функциями) на 3–5 ячеек окрестности межфазной границы.

Метод уровней является хорошей альтернативой VOF методу для моделирования исследуемого явления. Однако автором был выбран VOF метод по причине того, что он более прост в обращении, является явным, геометрически естественным. Кроме того метод уровней неточен и неудобен в применении.

## **Выводы.**

1. Проведено феноменологическое описание эффекта фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции с слое прозрачной жидкости на поглощающей подложке. Описаны возможности его практического применения.
2. Приведен обзор литературы, посвященной термокапиллярной конвекции, разобраны существующие математические модели эффекта.
3. Описаны эксперименты, проводимые в лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии», по выявлению времени задержки термокапиллярной конвекции.
4. Обоснован выбор численного метода для моделирования задачи о термокапиллярной конвекции с горизонтальном слое жидкости.

## Глава 2

# Распространение тепла до начала конвективных течений

Превышение числом Рэлея критического значения  $Ra^* = 1100$  является необходимым условием возникновения термогравитационной конвекции в слое жидкости толщиной  $h_0$  со свободной поверхностью. В рассматриваемых ситуациях число Рэлея не превышает критического значения, поэтому эффектом всплывания можно пренебречь. Вследствие этого до тех пор, пока некоторый градиент температуры не дойдет до свободной поверхности, жидкость можно считать твердым телом и тепло в нем распространяется только по законам теплопроводности. Требуется некоторое время, чтобы тепловое возмущение дошло от подложки до свободной поверхности слоя и запустило термокапиллярное течение. Этот интервал времени будем называть “временем задержки”  $\tau_d$ . Очевидно, что величина  $\tau_d$  должна зависеть от толщины слоя жидкости, мощности пучка, теплофизических свойств жидкости и подложки, и состояния ее свободной поверхности. Это наводит на мысль использовать время задержки для бесконтактного экспресс анализа указанных параметров [2].

Рассмотрим следующую задачу, Рис. 2.1: на твердой подложке находится слой прозрачной жидкости толщиной  $h_0$ . Система «жидкий слой–подложка» нагревается при помощи лазерного пучка, имеющего гауссово распределение. Так как жидкость прозрачная, лазерное излучение поглощается подложкой и она нагревается, тепло начинает распространяться в обе стороны — в подложку и слой жидкости. В сравнении с размерами слоя жидкости подложку будем считать полубесконечным твердым телом. Диаметральные размеры системы также считаем бесконечными. До тех пор, пока определенное температурное

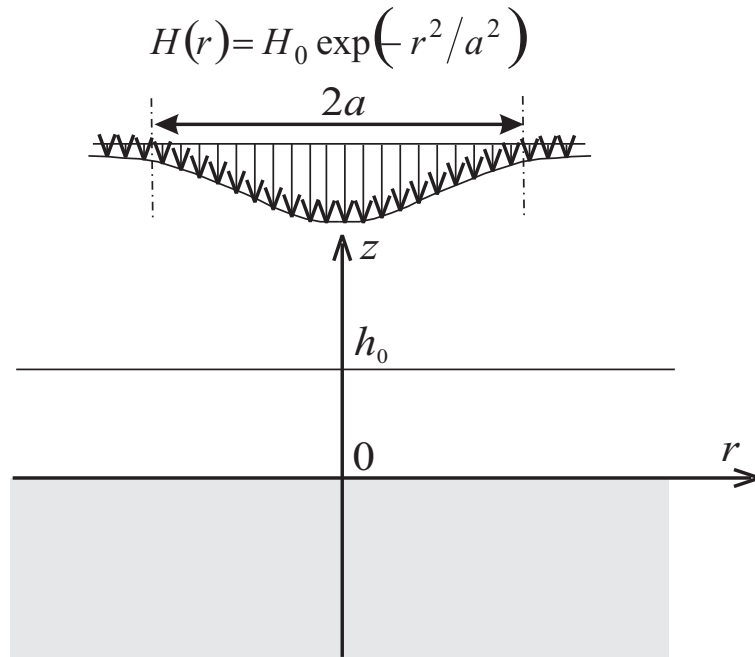


Рис. 2.1.

возмущение не дошло до поверхности жидкости и не вызвало градиента поверхностного натяжения (начало термокапиллярной конвекции) тепло в жидкости распространяется кондуктивно (тепловым расширением жидкости пренебрегаем).

При моделировании теплового поля примем следующие допущения:

- физические свойства жидкости и подложки — теплопроводность  $k_l$  и  $k_s$ , температуропроводность  $\kappa_l$  и  $\kappa_s$ , плотность  $\rho_l$  и  $\rho_s$  — не зависят от температуры;
- учитывая малые значения  $\Delta T$ , можно пренебречь механизмом передачи тепла посредством излучения.

Сформулированная задача описывается уравнениями теплопроводности в осесимметричной системе координат.

$$\frac{1}{\kappa_l} \frac{\partial T_l}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial T_l}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_l}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_l}{\partial z^2}, \quad 0 < z < h_0; \quad (2.1)$$

$$\frac{1}{\kappa_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial T_s}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_s}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2}, \quad -\infty < z < 0; \quad (2.2)$$

$$0 \leq r < \infty \quad (2.3)$$



с начальными и граничными условиями

$$T_l = T_s = T_0 \quad \text{при} \quad t = 0; \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial z} = 0 \quad \text{при} \quad z = h_0; \quad (2.5)$$

$$T_l = T_s, \quad k_l \frac{\partial T_l}{\partial z} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = -H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \quad \text{при} \quad z = 0, \quad (2.6)$$

где  $H_0 = P/\pi a^2$  — плотность теплового потока,  $P$  — мощность пучка лазера,  $a$  — его радиус.

В отдельности решения задач теплопроводности для бесконечной пластины и полупространства получить не составляет особой сложности. Проблема заключается в разделении теплового потока между этими двумя средами, условие сопряжения с источником на границе (2.6). Нами была выдвинута гипотеза, которая заключается в том, что можно получить коэффициент разделения тепла в упрощенной задаче и затем использовать его в сформулированной.

## 2.1 Равномерный плоский источник. Разделение теплового потока.

В качестве упрощенной рассмотрим задачу распространения тепла в двух полубесконечных пространствах с различными теплофизическими свойствами с равномерным плоским источником, Рис. 2.2. Этому соответствуют следующие уравнения:

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = \kappa_l \frac{\partial^2 T_l}{\partial z^2} \quad (0 \leq z < \infty)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \kappa_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \quad (-\infty < z \leq 0)$$

с начальными и граничными условиями

$$T_l = T_0, \quad \text{при} \quad t = 0 \quad T_s = T_0, \quad \text{при} \quad t = 0$$

$$T_l \rightarrow T_0, \quad \text{при} \quad z \rightarrow \infty \quad T_s \rightarrow T_0, \quad \text{при} \quad z \rightarrow -\infty$$

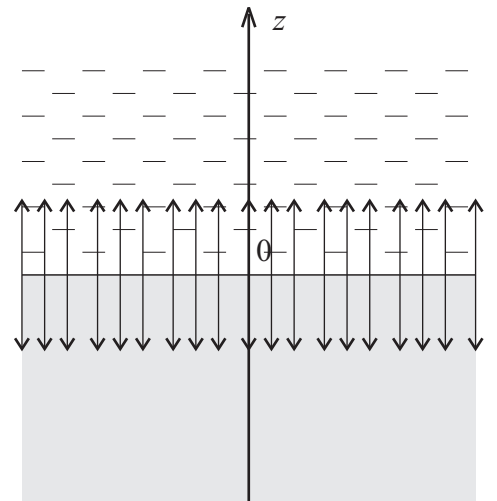


Рис. 2.2.

$$\frac{\partial T_l}{\partial z} = -\frac{1}{k_l}g_l(t), \text{ при } z = 0 \quad \frac{\partial T_s}{\partial z} = -\frac{1}{k_s}g_s(t), \text{ при } z = 0$$

Решением этой задачи является выражение, [128]:

$$T_i(z, t) - T_0 = \frac{\kappa_i}{k_i} \int_0^t g_i(\tau) G_i(z, 0, t - \tau) d\tau \quad (2.7)$$

где  $i = l, s$ , и функция Грина

$$G_i(z, \zeta, t) = \frac{1}{(4\pi\kappa_i t)^{1/2}} \left\{ \exp \left[ -\frac{(z - \zeta)^2}{4\kappa_i t} \right] + \exp \left[ -\frac{(z + \zeta)^2}{4\kappa_i t} \right] \right\}$$

Подставим функцию Грина в выражение (2.7):

$$\begin{aligned} T_i(z, t) - T_0 &= \frac{\kappa_i}{k_i} \int_0^t g_i(\tau) \frac{2}{2(\pi\kappa_i(t - \tau))^{1/2}} \exp \left[ -\frac{z^2}{4\kappa_i(t - \tau)} \right] d\tau = \\ &= \frac{\sqrt{\kappa_i}}{k_i \sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{g_i(\tau)}{\sqrt{t - \tau}} \exp \left[ -\frac{z^2}{4\kappa_i(t - \tau)} \right] d\tau \end{aligned}$$

Известен общий тепловой поток, поступающий в систему —  $H_0$ . Также должно выполняться условие равенства температур на границе. Поэтому

$$g_l(t) + g_s(t) = H_0$$

$$T_l(0, t) = T_s(0, t)$$

Отсюда

$$g_s(t) = H_0 - g_l(t)$$

Подставив (2.7) и выражение  $g_s(t)$  в условие равенства температур на границе, получим:

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{\kappa_l}}{k_l \sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{g_l(\tau)}{\sqrt{t - \tau}} d\tau &= \frac{\sqrt{\kappa_s}}{k_s \sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{g_s(\tau)}{\sqrt{t - \tau}} d\tau \\ \int_0^t \left[ \frac{\sqrt{\kappa_l}}{k_l \sqrt{\pi}} \frac{g_l(\tau)}{\sqrt{t - \tau}} + \frac{\sqrt{\kappa_s}}{k_s \sqrt{\pi}} \frac{g_l(\tau)}{\sqrt{t - \tau}} - \frac{\sqrt{\kappa_s}}{k_s \sqrt{\pi}} \frac{H_0}{\sqrt{t - \tau}} \right] d\tau &= 0 \end{aligned}$$

Преобразуем это равенство к интегральному уравнению:

$$\left[ \frac{\sqrt{\kappa_l}}{k_l\sqrt{\pi}} + \frac{\sqrt{\kappa_s}}{k_s\sqrt{\pi}} \right] \int_0^t \frac{g_l(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau = \frac{\sqrt{\kappa_s}H_0}{k_s\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}}$$

$$\int_0^t \frac{g_l(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau = \frac{k_l\sqrt{\kappa_s}H_0}{k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l}} \int_0^t \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}}$$

Получили уравнение Абеля, решение которого записывается в виде, [132]:

$$g_l(x) = \frac{1}{\pi x} \int_0^x \frac{t f'(t) + 1/2 f(t)}{\sqrt{x-t}} dt$$

где  $f(t)$  — правая часть уравнения:

$$f(t) = \frac{k_l\sqrt{\kappa_s}H_0}{k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l}} \int_0^t \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} = C \int_0^t \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} = C2\sqrt{t}$$

Тогда

$$g_l(x) = \frac{1}{\pi x} \int_0^x \frac{tC1/\sqrt{t} + 1/2C2\sqrt{t}}{\sqrt{x-t}} dt$$

откуда имеем:

$$g_l(x) = C = \frac{k_l\sqrt{\kappa_s}}{k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l}} H_0$$

Следовательно тепловые потоки в жидкость и подложку не зависят от времени и равны

$$g_l = \frac{k_l\sqrt{\kappa_s}}{k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l}} H_0$$

$$g_s = \frac{k_s\sqrt{\kappa_l}}{k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l}} H_0$$

Теперь можем определить температурное поле в жидкости и подложке:

$$T_l(z, t) - T_0 = \frac{\sqrt{\kappa_l}}{k_l\sqrt{\pi}} \frac{k_l\sqrt{\kappa_s}}{k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l}} H_0 \int_0^t \frac{1}{\sqrt{t-\tau}} \exp \left[ -\frac{z^2}{4\kappa_l(t-\tau)} \right] d\tau =$$

$$= 2H_0 \frac{\sqrt{\kappa_l\kappa_s}}{k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l}} \operatorname{ierf} \left( \frac{z}{2\sqrt{\kappa_l t}} \right)$$

$$T_s(z, t) - T_0 = 2H_0 \frac{\sqrt{\kappa_s\kappa_l}}{k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l}} \operatorname{ierf} \left( \frac{z}{2\sqrt{\kappa_s t}} \right)$$

Проверим выполнение граничного условия:

$$T_l(0, t) = T_s(0, t) = T_0 + \frac{H_0}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\kappa_l \kappa_s}}{k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l}} 2\sqrt{t},$$

откуда видно, что на границе контакта двух сред их температура совпадает.

## 2.2 Температурное поле с гауссовым источником.

В предыдущем параграфе было вычислено, что тепловой поток  $H_0$  разделяется на  $k_l \sqrt{\kappa_s} / (k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l}) H_0$  и  $k_s \sqrt{\kappa_l} / (k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l}) H_0$  для жидкости и подложки соответственно. Согласно выдвинутой гипотезе при гауссовом источнике тепла тепловой поток можно разделить с теми же коэффициентами:

$$\frac{\partial T_l}{\partial z} = g_l(r) = -\frac{1}{k_l} \frac{k_l \sqrt{\kappa_s}}{k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l}} H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right), \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} = g_s(r) = -\frac{1}{k_s} \frac{k_s \sqrt{\kappa_l}}{k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l}} H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \quad \text{при } z = 0. \quad (2.9)$$

При таких граничных условиях первоначальная задача распадается на две отдельные. Определение температурного поля сводится к решению уравнений параболического типа с граничными условиями второго рода.

Для удобства дальнейших вычислений перепишем уравнения (2.1) и (2.2) в декартовой системе координат:

$$\frac{1}{\kappa_l} \frac{\partial T_l}{\partial t} = \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_l}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T_l}{\partial z^2} \quad (0 \leq z \leq h_0) \quad (2.10)$$

$$\frac{1}{\kappa_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_s}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \quad (-\infty < z \leq 0) \quad (2.11)$$

Они описывают развитие трехмерных нестационарных температурных процессов в неподвижных средах или твердых телах с постоянным коэффициентом теплопроводности. Рассматривается бесконечный слой  $-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty$ . Остальные граничные условия и начальные условия остаются неизменными, (2.5) и (2.4).

Сначала найдем решение для подложки. Уравнение (2.11) с начальными условиями (2.4) и граничными условиями (2.9) для полубесконечной среды

имеют решение [128]:

$$T_s(x, y, z, t) - T_0 = -\kappa_s \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g_s(\xi, \eta) G_s(x, y, z, \xi, \eta, 0, t - \tau) d\xi d\eta d\tau$$

где

$$G_s(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, t) = \frac{1}{8(\pi\kappa_s t)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(x - \xi)^2 + (y - \eta)^2}{4\kappa_s t}\right] \times \\ \times \left\{ \exp\left[-\frac{(z - \zeta)^2}{4\kappa_s t}\right] + \exp\left[-\frac{(z + \zeta)^2}{4\kappa_s t}\right] \right\}$$

есть функция Грина. Подставим функции в выражение для температурного поля подложки:

$$T_s(x, y, z, t) - T_0 = \frac{H_0 \kappa_s \sqrt{\kappa_l}}{k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l}} \int_0^t \frac{2}{8(\pi\kappa_s(t - \tau))^{3/2}} \exp\left[-\frac{z^2}{4\kappa_s(t - \tau)}\right] \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\xi^2 + \eta^2}{a^2}\right) \exp\left[-\frac{(x - \xi)^2 + (y - \eta)^2}{4\kappa_s(t - \tau)}\right] d\xi d\eta d\tau$$

$$T_s(x, y, z, t) - T_0 = \frac{H_0 \kappa_s \sqrt{\kappa_l}}{4\pi\kappa_s \sqrt{\pi\kappa_s} (k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l})} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau)^{3/2}} \times \\ \times I_x(x, t - \tau) I_y(y, t - \tau) \exp\left[-\frac{z^2}{4\kappa_s(t - \tau)}\right] d\tau \quad (2.12)$$

где интегралы  $I_x$  и  $I_y$  вычислим отдельно.

$$I_x(x, t - \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\xi^2}{a^2} - \frac{(x - \xi)^2}{4\kappa_s(t - \tau)}\right) d\xi = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{4\kappa_s(t - \tau)\xi^2 + a^2x^2 - 2a^2x\xi + a^2\xi^2}{a^2 4\kappa_s(t - \tau)}\right) d\xi$$

Под интегралом преобразуем аргумент экспоненты отдельно и для удобства

введем параметр времени  $t_{0s} = a^2/4\kappa_s$ .

$$\begin{aligned} & \frac{(t - \tau)\xi^2 + t_{0s}x^2 - 2t_{0s}x\xi + t_{0s}\xi^2}{a^2(t - \tau)} = \frac{t_{0s}x^2}{a^2(t - \tau)} + \\ & + \frac{(\xi^2\sqrt{t - \tau + t_{0s}})^2 - 2\frac{t_{0s}x}{\sqrt{t - \tau + t_{0s}}}\xi\sqrt{t - \tau + t_{0s}} + \left(\frac{t_{0s}\xi}{\sqrt{t - \tau + t_{0s}}}\right)^2}{a^2(t - \tau)} - \frac{\left(\frac{t_{0s}\xi}{\sqrt{t - \tau + t_{0s}}}\right)^2}{a^2(t - \tau)} = \\ & = \frac{t_{0s}x^2}{a^2(t - \tau + t_{0s})} + \left(\frac{\xi(t - \tau + t_{0s}) - t_{0s}x}{a\sqrt{t - \tau}\sqrt{t - \tau + t_{0s}}}\right)^2 \end{aligned}$$

Отсюда

$$I_x(x, t - \tau) = \exp\left(-\frac{t_{0s}x^2}{a^2(t - \tau + t_{0s})}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\left(\frac{\xi(t - \tau + t_{0s}) - t_{0s}x}{a\sqrt{t - \tau}\sqrt{t - \tau + t_{0s}}}\right)^2\right\} d\xi$$

Для дальнейших вычислений введем новую переменную интегрирования.

$$\begin{aligned} \varphi &= \frac{\xi(t - \tau + t_{0s}) - t_{0s}x}{a\sqrt{t - \tau}\sqrt{t - \tau + t_{0s}}}, \quad \xi = \frac{\varphi a\sqrt{t - \tau}\sqrt{t - \tau + t_{0s}} + t_{0s}x}{(t - \tau + t_{0s})}, \\ & d\xi = \frac{a\sqrt{t - \tau}}{\sqrt{t - \tau + t_{0s}}} d\varphi \end{aligned}$$

При этом пределы интегрирования не изменяются. Окончательно получаем

$$\begin{aligned} I_x(x, t - \tau) &= \exp\left(-\frac{t_{0s}x^2}{a^2(t - \tau + t_{0s})}\right) \frac{a\sqrt{t - \tau}}{\sqrt{t - \tau + t_{0s}}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\varphi^2) d\varphi = \\ &= \frac{a\sqrt{\pi}\sqrt{t - \tau}}{\sqrt{t - \tau + t_{0s}}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\kappa_s(t - \tau + t_{0s})}\right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

После аналогичных преобразований получается и другой интеграл

$$I_y(y, t - \tau) = \frac{a\sqrt{\pi}\sqrt{t - \tau}}{\sqrt{t - \tau + t_{0s}}} \exp\left(-\frac{y^2}{4\kappa_s(t - \tau + t_{0s})}\right) \quad (2.14)$$

Подставив полученные интегралы в (2.12), получим

$$\begin{aligned} T_s(x, y, z, t) - T_0 &= \frac{H_0\sqrt{\kappa_l}a^2\pi}{4\pi\sqrt{\pi\kappa_s}(k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l})} \int_0^t \frac{t - \tau}{(t - \tau + t_{0s})(t - \tau)^{3/2}} \times \\ & \times \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4\kappa_s(t - \tau + t_{0s})}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{4\kappa_s(t - \tau)}\right) d\tau \end{aligned}$$

Рассматриваемая задача является осесимметричной, поэтому перейдем обратно к полярным координатам,  $x^2 + y^2 = r^2$ :

$$T_s(r, z, t) - T_0 = \frac{P\sqrt{\kappa_l}}{4\pi\sqrt{\pi\kappa_s}(k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l})} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau + t_{0s})\sqrt{t - \tau}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{r^2}{4\kappa_s(t - \tau + t_{0s})}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{4\kappa_s(t - \tau)}\right) d\tau \quad (2.15)$$

Выражение (2.15) описывает процесс распространения тепла в подложке под действием гауссова источника. Похожее выражение было предложено Рыкалиным Н.Н. и др. [18, 111] в процессе решения задачи о нагреве полубесконечного тела при сварке металлов световым потоком лазера.

Теперь перейдем к рассмотрению уравнения (2.10) с начальными и граничными условиями (2.4), (2.5) и (2.8). Решение для жидкости, выраженное через функцию Грина, выглядит следующим образом:

$$T_l(x, y, z, t) = T_0 - \kappa_l \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g_l(\xi, \eta) G_l(x, y, z, \xi, \eta, 0, t - \tau) d\xi d\eta d\tau$$

где

$$G_l(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, t) = \frac{1}{8(\pi\kappa_l t)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(x - \xi)^2 + (y - \eta)^2}{4\kappa_l t}\right] \times \\ \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \exp\left[-\frac{(z - \zeta + 2nh_0)^2}{4\kappa_l t}\right] + \exp\left[-\frac{(z + \zeta + 2nh_0)^2}{4\kappa_l t}\right] \right\}$$

После подстановки всех функций получится следующий интеграл:

$$T_l(x, y, z, t) - T_0 = \frac{H_0\kappa_l\sqrt{\kappa_s}}{4\pi\kappa_l\sqrt{\pi\kappa_l}(k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l})} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau)^{3/2}} \times \\ \times I_x(x, t - \tau) I_y(y, t - \tau) \exp\left[-\frac{z^2}{4\kappa_l(t - \tau)}\right] d\tau \quad (2.16)$$

Здесь интегралы  $I_x$  и  $I_y$  уже вычислены (2.13) и (2.14). Подставим их значения в (2.16):

$$T_l(x, y, z, t) - T_0 = \frac{H_0\kappa_l\sqrt{\kappa_s}a^2\pi}{4\pi\kappa_l\sqrt{\pi\kappa_l}(k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l})} \int_0^t \frac{t - \tau}{(t - \tau + t_{0l})(t - \tau)^{3/2}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4\kappa_l(t - \tau + t_{0l})}\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(z + 2nh_0)^2}{4\kappa_l(t - \tau)}\right) d\tau$$

где  $t_{0l} = a^2/4\kappa_l$ . Или, при переходе к полярным координатам:

$$T_l(r, z, t) - T_0 = \frac{P\sqrt{\kappa_s}}{4\pi\sqrt{\pi\kappa_l}(k_l\sqrt{\kappa_s} + k_s\sqrt{\kappa_l})} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau + t_{0l})\sqrt{t - \tau}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{r^2}{4\kappa_l(t - \tau + t_{0l})}\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(z + 2nh_0)^2}{4\kappa_l(t - \tau)}\right) d\tau \quad (2.17)$$

Полученные выражения (2.15) и (2.17) описывают распространение тепла до начала конвективных процессов. Эти выражения удовлетворяют второму условию в условии сопряжения (2.6) (градиенты), однако равенство температур выполняется не точно, но наибольшее расхождение  $|\Delta T_l - \Delta T_s|/\min\{\Delta T_l, \Delta T_s\}$  на рассматриваемой стадии не превышает 5%. Полученные выражения позволяют быстро вычислять температурные возмущения в среде на момент наступления термокапиллярной конвекции.

## 2.3 Вычисление температуры и времени задержки. Программа «Время задержки».

Из выражений (2.15) и (2.17) можно определить температуру в любой точке среды, но для этого нужно провести интегрирование по переменной  $\tau$ . Нами была реализована программа «Время задержки» на языке C++, которая позволяет провести численное интегрирование выражений (2.15) и (2.17) и вычислять температурные поля в системе «жидкий слой–подложка».

Работу с программой можно разбить на несколько частей. В аргументе программы задается параметр, который указывает, что нужно вычислять. Это могут быть: 1) st и xt — вычисление запускающего температурного возмущения  $(\Delta T)_{TC}$  на свободной поверхности по заданным экспериментальным данным и свойствам системы; 2) sq — вычисление времени задержки по заданному значению  $(\Delta T)_{TC}$ ; 3) td — вычисление поля температур. Так же в аргументе программы задаются свойства жидкости и подложки в виде текстовых файлов и файл с экспериментальными данными для случая 1 и  $(\Delta T)_{TC}$  для случая 2.



Выражение для температуры в слое жидкости (2.17) представляет из себя ряд. Поэтому для вычисления используется замена его частичной суммой  $\sum_{n=-N}^N$ , где [131]

$$N \geq \sqrt{\frac{\kappa_l t^*}{2h_0}} + 1$$

В рассматриваемых экспериментах  $N \geq 1$ , но для расчета принималось  $5 \leq N \leq 10$ .

Интегрирование проводилось на основе квадратурной формулы Симпсона [130]. Правильность вычислений проверялось серией численных экспериментов и сравнением результатов по ним с численным интегрированием в Maple7.

### 2.3.1 Вычисление запускающего температурного возмущения.

Для вычисления запускающего температурного возмущения  $(\Delta T)_{TC}$  в зависимости от толщины слоя жидкости в строке аргументов программы нужно задать:

```
st <жидкость> <подложка> <экспериментальные данные>.
```

Например:

```
st butanol.txt ebonite.txt test_but.txt.
```

В файлах со свойствами жидкости и подложки значения должны стоять в определенном виде и порядке:

```
#температуропроводность, теплопроводность, плотность, теплоемкость, вязкость, ПН, темп. ПН
```

```
0.7812410642e-7, 0.153, 809.6, 2419, 2.95e-3, 24.6e-3, 0.0898e-3
```

для жидкости и

```
#температуропроводность, теплопроводность, плотность, теплоемкость
```

```
0.9687282416e-7, 0.16, 1155, 1430
```

для подложки. Понятно, что в контексте данной программы требуются только теплофизические свойства жидкости и ее плотность, т.к. учитывается распространение тепла только за счет кондуктивного переноса. Файл с экспериментальными данными должен выглядеть так:

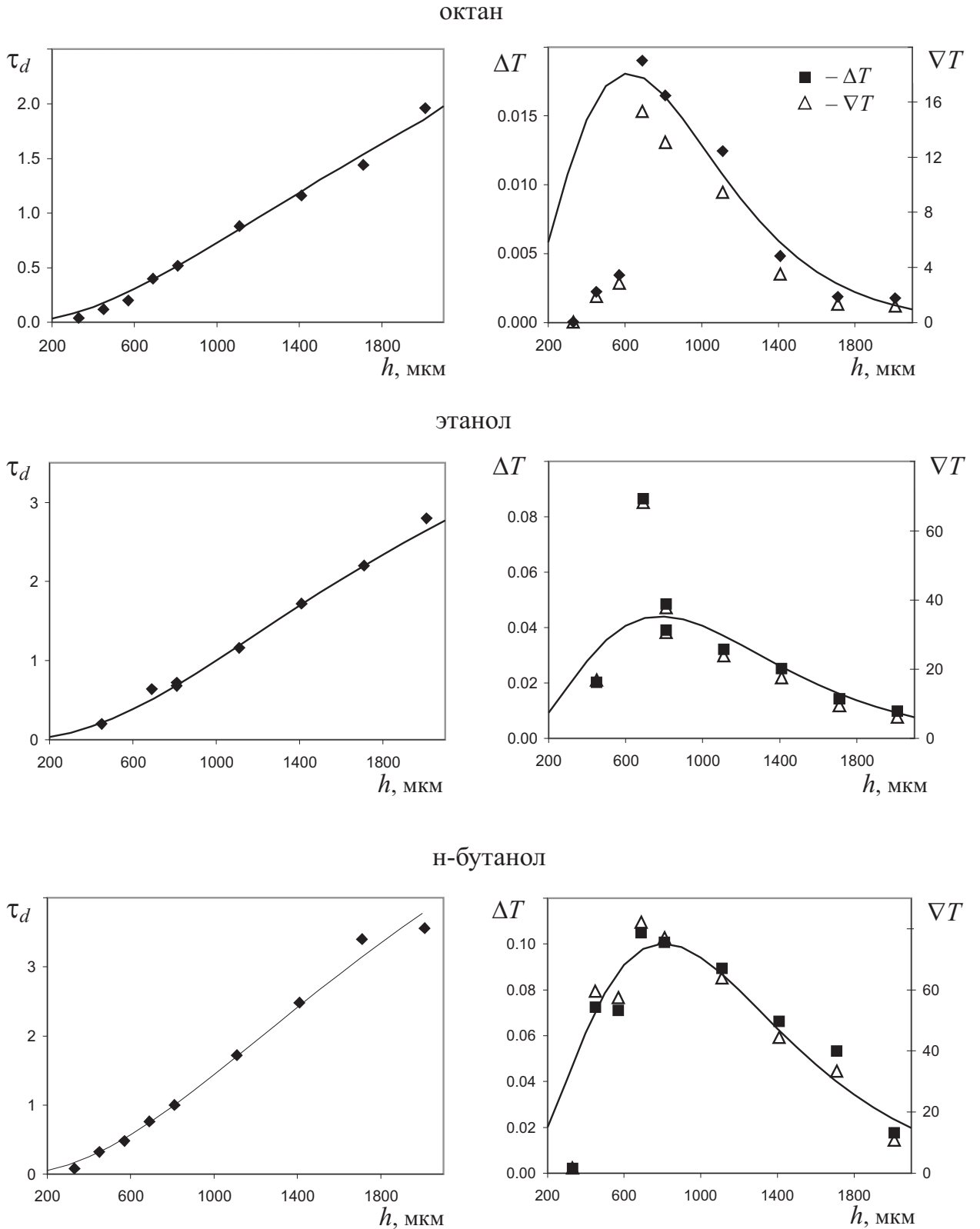
330	0.08
570	0.32
690	0.52
810	0.72
1110	1.32
1410	2.12
1710	2.96
2010	3.56

где в первом столбце стоят значения начальной толщины слоя жидкости в микрометрах, а во втором — экспериментальные значения времени задержки в секундах. При запуске программы появится строка и требование задать значение мощности пучка лазера в мВт, а затем файл, в который выводить расчетные значения  $(\Delta T)_{ТС}$ . В результате вычисления получается таблица чисел:

```
power, mW: 20.9
330 0.001434
570 0.010475
690 0.019257
810 0.022380
1110 0.025477
1410 0.028642
1710 0.025119
2010 0.014436
```

где в первом столбце заданные значения начальной толщины слоя жидкости в микрометрах, а во втором — расчетное запускаящее температурное возмущение в кельвинах. Расчеты проводились для различных жидкостей, свойства которых приведены в Приложении 1.

На Рис. 2.3 приведены экспериментальные зависимости времени задержки от толщины слоя для различных жидкостей и рядом соответствующие расчетные значения запускаящего температурного возмущения для данных эксперимента. Сплошные кривые на графиках справа являются аппроксимационными, а слева — расчетные из аппроксимационных значений для температурного возмущения. Расчетные



**Рис. 2.3.** Зависимость времени задержки от толщины слоя жидкости (слева) и соответствующие значения  $(\Delta T)_{TC}$  и максимального градиента температуры на поверхности (справа) для различных жидкостей,  $[\tau_d] = \text{с}$ ,  $[\Delta T] = \text{К}$ ,  $[\nabla T] = \text{К/м}$ .

значения показывают хорошую сходимость с экспериментом.

Из графиков видно, что эта зависимость  $(\Delta T)_{ТС}$  от толщины слоя жидкости имеет экстремум. Такое поведение зависимости характерно для всех исследованных жидкостей и этот экстремум растет с увеличением вязкости жидкости. Однако, изначально предполагалось, что значение запускающего температурного возмущения не должно зависеть от толщины слоя, т.к. эксперименты показывают, что время задержки имеет почти квадратичную зависимость от толщины (Глава 1).

Еще одним параметром в экспериментах по измерению времени задержки является мощность пучка лазера. Разработанная программа позволяет также определить запускающее температурное возмущение в зависимости от этого параметра. Для этого в строке аргументов программы вместо  $st$  нужно задать  $xt$ , а остальные данные сохраняются. Файл с экспериментальными данными должен уже состоять из значения толщины слоя жидкости, мощности и соответствующего времени задержки:

#Мощность

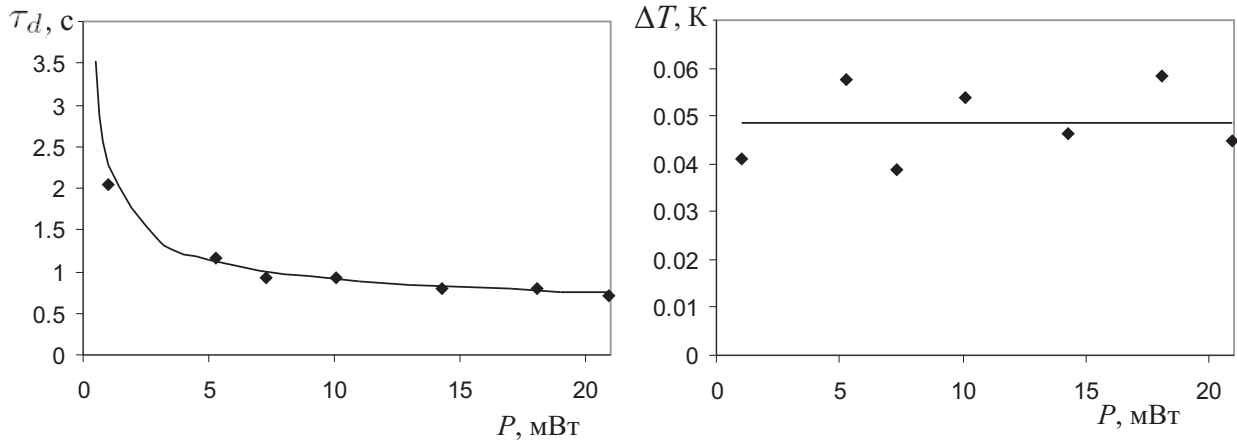
20.9, 18.1, 14.3, 10.1, 7.3, 5.3, 1.0

#Толщина #Время задержки

330,	0.12,	0.16,	0.16,	0.16,	0.16,	0.16,	0.24
570,	0.48,	0.48,	0.48,	0.56,	0.64,	0.76,	2.92
690,	0.72,	0.68,	0.88,	0.92,	1.04,	1.20,	4.68
810,	0.96,	1.24,	1.40,	1.68,	2.52,	3.40,	0
1410,	4.08,	4.36,	5.32,	7.28,	10.48,	16.12,	0
2010,	7.80,	8.6,	10.96,	16.16,	0,	0,	0

При больших толщинах и малых мощностях термокапиллярная конвекция не наблюдается. Соответствующие значения в таблице экспериментальных данных заполняются нулями для удобства вычислений.

На Рис. 2.4 слева приведены экспериментальные и рассчитанные зависимости времени задержки от мощности лазерного пучка и справа соответствующие расчетные значения запускающего температурного возмущения для данных эксперимента. Как видно, значение  $(\Delta T)_{ТС}$  осцилируют вокруг среднего значения и это наблюдается для всех



**Рис. 2.4.** Зависимость времени задержки (слева) и соответствующие расчетные значения  $(\Delta T)_{TC}$  (справа) от мощности пучка лазера для н-бутанола толщина  $h_0 = 810$  мкм.

проведенных расчетов по экспериментам. Отсюда можно сделать вывод, что запускающее температурное возмущение не зависит от мощности лазера. Данный результат говорит о соответствии физического эффекта и математической модели явления и подтверждает гипотезу об отсутствии гидродинамических течений до начала термокапиллярного течения.

### 2.3.2 Вычисление времени задержки. Сравнение с экспериментами.

В лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии» на основе экспериментальных данных была выдвинута гипотеза, что запускающее температурное возмущение  $(\Delta T)_{TC}$  имеет квадратичную зависимость от толщины слоя жидкости  $h_0$  (Глава 2). Это будет выполняться в том случае, если значение  $(\Delta T)_{TC}$  для конкретной жидкости постоянно и не зависит от толщины и мощности пучка лазера. Отсутствие зависимости от мощности уже доказано выше. Построить зависимость времени задержки  $\tau_d$  от мощности пучка лазера можно в неявном виде:

$$F(\tau_d, P) = (\Delta T)_{TC}, \quad (2.18)$$

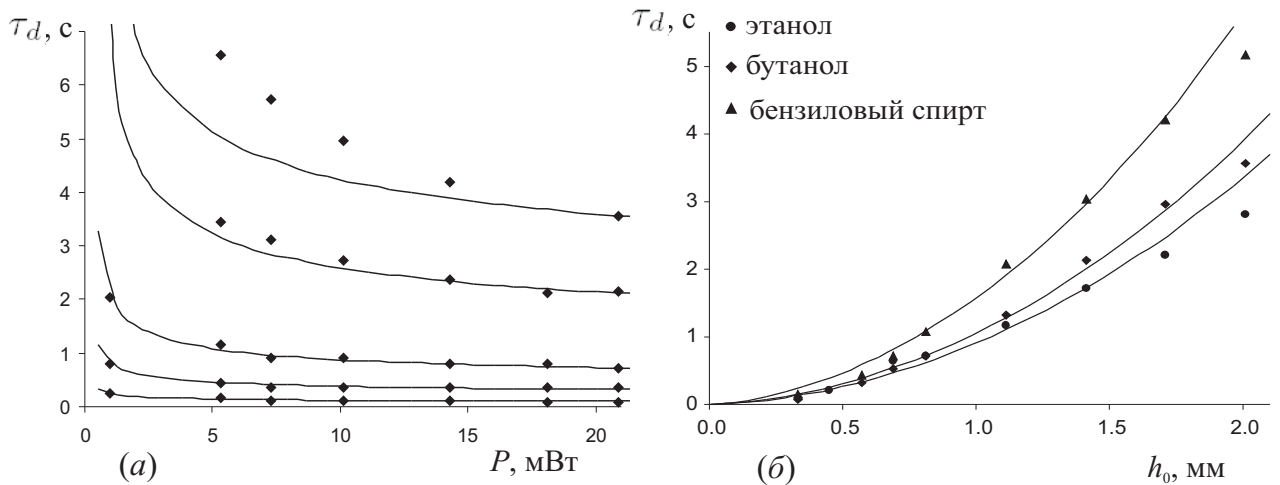
где  $F(\tau_d, P) = \Delta T(0, h_0, \tau_d)$  из выражения (2.17), а мощность  $P$  выступает как переменная.  $(\Delta T)_{TC}$  вычисляется для конкретной жидкости по контрольной толщине 810 мкм при мощности пучка лазера 20.9 мВт.

Для вычисления  $\tau_d$  в строке аргументов программы нужно указать:

sq <жидкость> <подложка> <файл с данными>

где данные должны состоять из двух столбцов, как и в случае st, где в первом столбце толщина слоя жидкости в мкм, а во втором значение  $(\Delta T)_{ТС}$ . При запуске программы появится требование задать мощность пучка лазера. Вычисления из (2.18) времени задержки проводятся методом Ньютона.

На Рис. 2.5(a) приведены экспериментальные значения времени задержки в зависимости от мощности пучка (точки) и вычисленные зависимости для указанных толщин (сплошные кривые) для слоя бутанола толщиной  $h_0 = 330, 570, 810, 1410, 2010$  мкм снизу вверх соответственно. Как видно, эта зависимость аппроксимирует экспериментальные значения (более существенное расхождение ( $\sim 30\%$ ) видно только для толщины 2.01 мм), что подтверждает гипотезу о независимости  $(\Delta T)_{ТС}$  от мощности.



**Рис. 2.5.** Зависимость времени задержки от свойств системы. Точками обозначены экспериментальные данные; сплошные кривые рассчитаны из формулы (2.17).

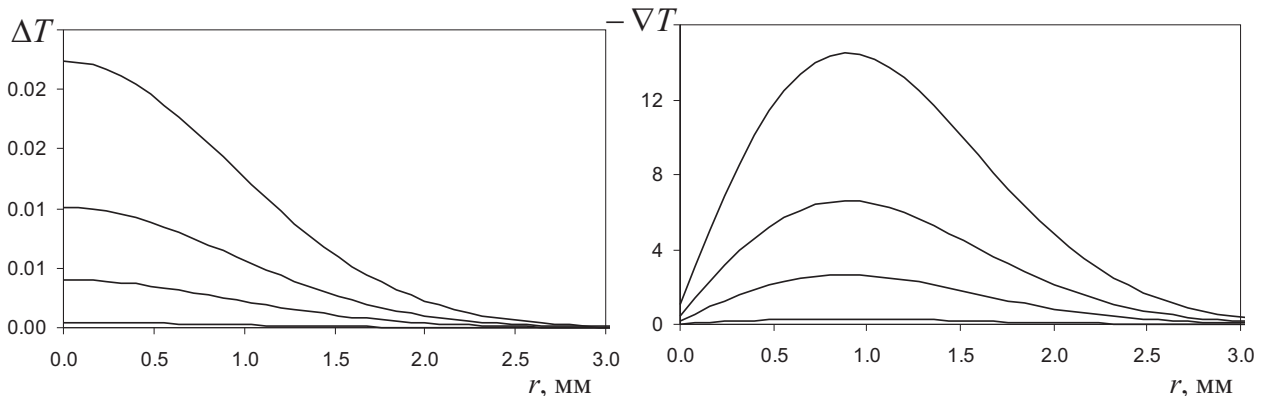
Для проверки гипотезы о квадратичной зависимости  $\tau_d$  от толщины были выполнены следующие вычисления. Как и в предыдущем случае был использован один эксперимент для определения  $(\Delta T)_{ТС}$ , вычисленное для контрольной толщины слоя жидкости 810 мкм, и из этой константы построена теоретическая зависимость  $\tau_d$  от толщины слоя  $F(\tau_d, h_0) = (\Delta T)_{ТС}$  для трех жидкостей с различными значениями вязкости ( $\mu = 1.197, 2.95, 5.8$  сПз). На Рис. 2.5(б) приведены теоретические кривые и экспериментальные значения зависимости времени задержки от толщины

слоя для различных жидкостей при мощности пучка лазера  $P = 20.9$  мВт. Здесь, как и в предыдущем случае, максимальное расхождение ( $<15\%$ ) имеет место для толщины 2.01 мм.

### 2.3.3 Температурное поле. Расчет по программе «Время задержки»

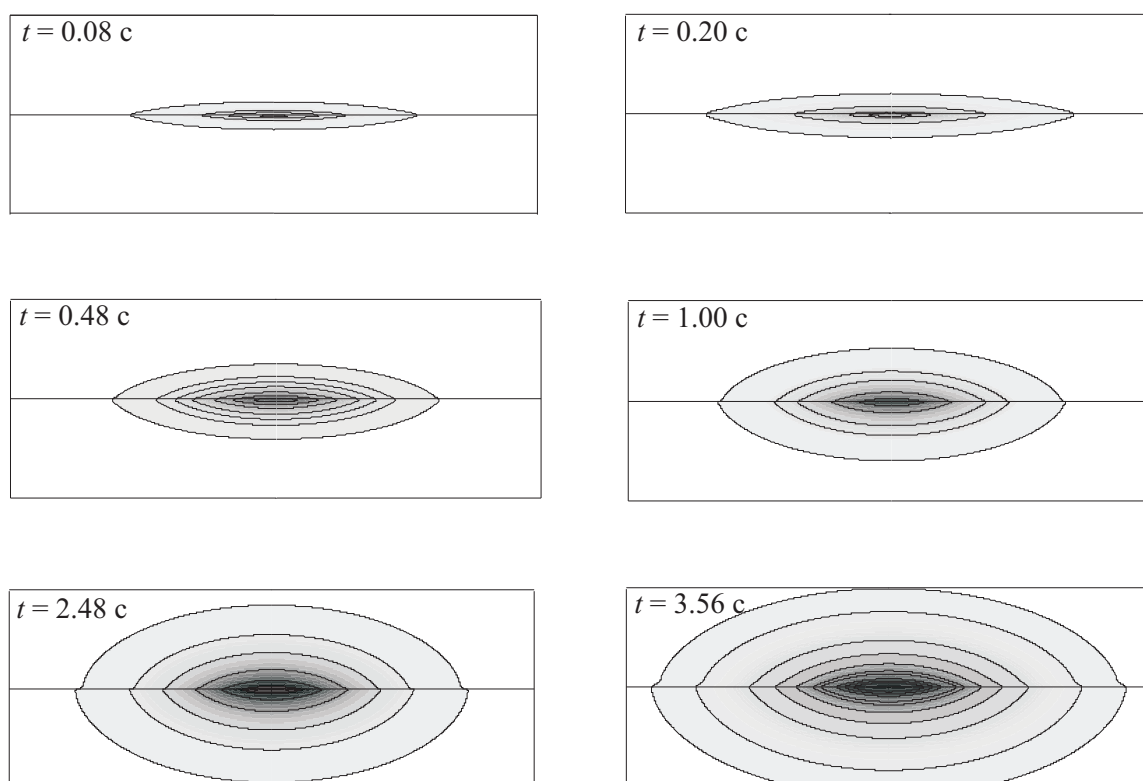
Кроме вычисления температурного возмущения и времени задержки программа позволяет вычислять поля температур. Для этого в строке аргументов нужно задать соответствующий параметр  $td$  и файлы со свойствами жидкости и подложки. Здесь уже не нужен файл с экспериментальными данными. При запуске программы появляются требования задать мощность пучка лазера, толщину слоя жидкости, количество шагов по  $r$  и  $z$  координатам и время, для которого нужно вычислить поле. Разрешается задание нескольких значений времени. Это позволяет проследить эволюцию температурного поля.

На Рис. 2.6 изображено распределение температуры на поверхности жидкости толщиной 810 мкм через 0.35, 0.5, 0.6 и 0.72 с от момента начала нагрева  $t = 0$  с. Как видно, оно имеет вид гауссового распределения.



**Рис. 2.6.** Распределение температуры (слева) и его градиент (справа) на свободной поверхности в различные моменты времени до начала термокапиллярных течений.

На Рис. 2.7 можно увидеть эволюцию температурного поля до начала термокапиллярных течений. Жидкость находится в покое, пока запускающая изотерма не достигнет свободной поверхности. На рисунке показано движение изотермы.



**Рис. 2.7.** Развитие температурного поля и движение запускающей изотермы в системе до возникновения конвекции. Слой бутанола толщиной 2.01 мм на эбонитовой подложке.

## Выводы.

1. Получены выражения для теплового возмущения в подложке и жидкости при нагреве поверхности подложки гауссовым пучком лазера с постоянной мощностью. Эти выражения позволяют приближенно вычислить температуру в системе на начальной стадии термокапиллярной конвекции, когда вклад конвективных течений еще незначителен.
2. Создан программный комплекс «Время задержки» для вычисления времени задержки термокапиллярной конвекции и запускающего температурного возмущения на основе экспериментальных данных.
3. Показано, что запускающее температурное возмущение не зависит от мощности пучка при заданной толщине слоя.
4. Обнаружено, что зависимость запускающего температурного возмущения от толщины слоя при заданной мощности пучка имеет максимум, который растет с увеличением вязкости жидкости.



Этот результат показывает, что на развитие термокапиллярного течения влияют не только теплофизические свойства жидкости и подложки, но и реологические свойства жидкости.

## Глава 3

# Гидродинамическая модель термокапиллярной конвекции.

Основная трудность расчета поля скоростей связана с неизвестным полем давления. Компоненты градиента давления входят составными частями в уравнения Навье–Стокса, но явного уравнения для определения поля давления не имеется. Если поле давления задано, то численное решение уравнений движения не вызывает особых трудностей. В уравнение неразрывности несжимаемой жидкости входят лишь компоненты скорости, т.е. в данном случае вообще нет прямой связи давления с полем скорости. Поэтому найти поле давления при расчете несжимаемых течений можно лишь косвенно. В одном из подходов используются первичные (или, как еще говорят, примитивные) переменные ( $u$ ,  $v$ ,  $p$  в рассматриваемом случае), а поле давления находят из решения уравнения неразрывности, применяя специальные процедуры. Если «правильное», т.е. соответствующее действительности, поле давления подставить в уравнения Навье–Стокса, то получаемое из них поле скорости будет удовлетворять уравнению неразрывности. Конечно, такой косвенный метод отыскания давления не очень удобен, но другие методы дают обычно неудовлетворительные результаты.

Дополнительную сложность в решение задачи вносит неизвестная область расчетов. В процессе решения кроме компонент скорости и давления нужно определять деформируемую поверхность между жидкостью и воздухом. В связи с этим для численного моделирования термогидродинамической задачи со свободной границей реализуется специальный метод, который позволяет определять межфазную границу между жидкостью и воздухом — метод объема жидкости с кусочно

линейной аппроксимацией межфазной границы — PLIC-VOF метод (Гл. 1, с. 80).

### 3.1 Балансные уравнения и граничные условия.

Для постановки задачи тепло- и массопереноса необходима система балансных уравнений. Рассматривается несжимаемая жидкость, однако вязкость является важным параметром, поэтому его исключать нельзя. При малых изменениях температуры физические свойства системы «воздух–жидкий слой–подложка» считаем постоянными, кроме поверхностного натяжения жидкости, которое зависит от температуры линейно.

#### 3.1.1 Балансные уравнения в векторной форме. Способ учета сил Марангони в модели.

Задача о термокапиллярной конвекции, индуцированной пучком лазера с гауссовым распределением интенсивности, является осесимметричной, поэтому балансные уравнения и граничные условия удобно записать в цилиндрической системе координат. Зависимость от угла  $\varphi$  отсутствует и останется зависимость от двух пространственных переменных  $r$  и  $z$  и времени  $t$ . Но для начала запишем уравнения в векторном виде.

Для постановки основных уравнений вводятся следующие гипотезы:

1. Вводятся две жидкости, обе несжимаемые и обе вязкие,  $\rho_l, \rho_g = const, \mu_l, \mu_g = const$ ,

2. Взаимопроникающий континуум.  $F$ — доля первой жидкости в конкретной точке.  $F$  зависит от точки пространства.

3. Вводится гипотетическая жидкость, называемая смесью. Плотность смеси вычисляется по формуле

$$\begin{aligned}\mu &= F\mu_l + (1 - F)\mu_g \\ \rho &= F\rho_l + (1 - F)\rho_g\end{aligned}\tag{3.1}$$

Гипотеза о вычислении вязкости смеси на самом деле пока не нужна и в общем виде скорее всего другая. Вязкость смеси вычисляется не

столь прямолинейно. Это должна быть нелинейная зависимость от доли (Например, см. суспензии [73]).

4. Предполагаем, что из-за вязкости, среды в элементарном объёме “склеились”, т.е. оба континуума в одной и той же точке имеют одну и ту же скорость  $\bar{v}$  и ускорение  $\bar{w}$ .

5. Континуумы между собой взаимодействуют только за счёт “склейки т.е. общей скорости и ускорения. Все другие силовые воздействия применяются каждое к своему континууму. Соответственно в каждом континууме имеют место свои физические соотношения. (Например, связи между тензорами напряжений и скоростей деформаций.)

Из гипотезы 3 следует, что в каждой точке пространства находится среда, являющаяся смесью. В каждой точке есть, по крайней мере, три величины  $F, \rho, \mu$ , её характеризующие: доля, плотность и вязкость, которые зависят от координат и времени.

**В эйлеровом описании** элементарные объёмы дрейфуют по пространству и в разные моменты времени в конкретной точке пространства будут находиться разные элементарные объёмы с различными значениями перечисленных величин.

**В лагранжевом описании** дрейфующий элементарный объём вследствие несжимаемости каждой из компонент смеси остается неизменным и доля, плотность и вязкость  $F, \rho, \mu$ , остаются постоянными. Иначе говоря, происходит только механическое перемешивание жидкости, диффузия не учитывается (см. [73], стр. 319)

$$\begin{aligned} F &= \text{const} \\ \rho &= \text{const} \\ \mu &= \text{const} \end{aligned} \tag{3.2}$$

Объёмы, расположенные в разных местах евклидова пространства, имеют разные значения констант и чтобы уйти от них, выполним замену лагранжевых переменных на эйлеровы и вычислим полные производные по времени. В результате получим дифференциальные уравнения, называемые

уравнениями переноса.

$$\begin{aligned}\frac{dF}{dt} &= \frac{\partial F}{\partial t} + u \frac{\partial F}{\partial r} + v \frac{\partial F}{\partial z} = 0 \\ \frac{d\rho}{dt} &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial r} + v \frac{\partial \rho}{\partial z} = 0 \\ \frac{d\mu}{dt} &= \frac{\partial \mu}{\partial t} + u \frac{\partial \mu}{\partial r} + v \frac{\partial \mu}{\partial z} = 0\end{aligned}\quad (3.3)$$

где  $u$  и  $v$  — радиальная и вертикальная компоненты вектора скорости соответственно.

Отметим, что второе уравнение есть уравнение сохранения массы в объёме гипотетической среды и если выписать уравнения неразрывности для этой смеси в эйлеровой системе координат и учесть уравнение сохранения массы в указанной форме, то получим классическое утверждение неразрывности для несжимаемой среды.

$$\nabla \cdot \bar{V} = 0$$

где  $\bar{V}$  вектор скорости частицы.

Это уравнение в цилиндрической системе координат с учётом независимости от угла имеет вид

$$\frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (3.4)$$

Перейдем к рассмотрению уравнений сохранения импульса. Так как в каждой точке пространства находятся две среды, взаимодействующие по предположению только через силу инерции (ускорение), то для каждой среды имеют место одни и те же уравнения с точностью до вида среды:

$$\rho_g \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p'_g + \nabla \cdot \sigma'_g - \beta_g \vec{g}(T - T_0) \quad (3.5)$$

$$\rho_l \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p'_l + \nabla \cdot \sigma'_l - \beta_l \vec{g}(T - T_0) \quad (3.6)$$

Здесь  $\sigma'$  — тензор вязких напряжений.

Получим следствие этих двух векторных уравнений, образовав из них линейную комбинацию. Это можно сделать, так как уравнения записаны

для одной и той же точки среды. Для этого умножим уравнение (3.5) на  $(1 - F)$ , уравнение (3.6) на  $F$  и сложим:

$$(F\rho_l + (1 - F)\rho_g)\frac{D\vec{V}}{Dt} = -(F\nabla p'_l + (1 - F)\nabla p'_g) + \\ + (F\nabla \cdot \sigma'_l + (1 - F)\nabla \cdot \sigma'_g) - (F\beta_l + (1 - F)\beta_g)\vec{g}(T - T_0) \quad (3.7)$$

Введем функцию давления и тензор вязких напряжений смеси по формулам:

$$p = Fp_l + (1 - F)p_g$$

$$\sigma' = F\sigma'_l + (1 - F)\sigma'_g$$

Вычислим отдельно градиент давления:

$$\nabla p' = F\nabla p'_l + (1 - F)\nabla p'_g + (p'_l - p'_g)\nabla F = F\nabla p'_l + (1 - F)\nabla p'_g + (p'_l - p'_g)\frac{\nabla F}{|\nabla F|} \cdot |\nabla F|$$

Функция жидкой фракции  $F$  характеризует положение межфазной границы, т.е. межфазная граница находится там, где  $\nabla F \neq 0$ . Векторное поле, характеризующее направление наискорейшего роста функции  $F$ :

$$\hat{n} = \frac{\nabla F}{|\nabla F|}$$

Поэтому имеем:

$$\nabla p' = F\nabla p'_l + (1 - F)\nabla p'_g + (p'_l - p'_g)\hat{n}|\nabla F| \quad (3.8)$$

Аналогично давлению, проведем операции с тензором вязких напряжений:

$$\nabla \cdot \sigma' = F\nabla \cdot \sigma'_l + (1 - F)\nabla \cdot \sigma'_g + (\sigma'_l - \sigma'_g) \cdot \nabla F = \\ = F\nabla \cdot \sigma'_l + (1 - F)\nabla \cdot \sigma'_g + (\sigma'_l - \sigma'_g) \cdot \frac{\nabla F}{|\nabla F|} |\nabla F|$$

или

$$\nabla \cdot \sigma' = F\nabla \cdot \sigma'_l + (1 - F)\nabla \cdot \sigma'_g + (\sigma'_l - \sigma'_g) \cdot \hat{n}|\nabla F| \quad (3.9)$$

Применим (3.8) и (3.9) к уравнению сохранения импульса (3.7), получим:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p' + \nabla \cdot \sigma' - \beta\vec{g}(T - T_0) + ((p'_l - p'_g)\hat{n} - (\sigma'_l - \sigma'_g) \cdot \hat{n})|\nabla F| \quad (3.10)$$

Полученное следствие в правой части содержит градиент функции доли первой жидкости. Как всегда, градиент есть вектор, указывающий направление максимального возрастания функции. В данном случае этот вектор всегда указывает направление максимальной скорости возрастания концентрации первой жидкости. И если в рассматриваемой точке давление первой жидкости преобладает над давлением во второй жидкости, то возникшая сила  $(p_l - p_g)\nabla F$  пытается сместить частицу в направлении возрастания концентрации первой жидкости.

Заметим, что если смесь приготовлена очень тщательно, то концентрация (доля) везде одинакова и в рассматриваемый момент времени градиент равен нулю. Тогда из указанных гипотез и лагранжевого взгляда на среду следует, что и в любой момент времени концентрация останется неизменной.

С другой стороны, если есть зоны разных концентраций, то есть и силы, которые могут заставить объёмы смещаться. Конечно, при таких постановках необходимо рассматривать не полученное следствие, а все уравнения, которые необходимы для решения.

Рассмотрим один частный случай. Осесимметричная задача. Две жидкости не перемешаны. Один слой горизонтально основанию и второй (возможно бесконечный) слой выше. В этом случае уравнение-следствие, полученное выше, в каждом из слоёв превращается в обычное уравнение Навье–Стокса со своими физическими константами. В нижнем слое  $F = 1$ , а в верхнем  $F = 0$ . То есть, концентрация внизу выше и вектор

$$\bar{n} = \frac{\nabla F}{|\nabla F|}$$

при предельном переходе к разделению жидкостей будет указывать вниз (в первую жидкость, там больше концентрация.)

В указанном частном случае на границе двух движущихся сред справедливо динамическое условие [64]:

$$(p'_l - p'_g)\hat{n} - (\sigma'_l - \sigma'_g) \cdot \hat{n} = \sigma \varkappa \hat{n} + \nabla_T \sigma \quad (3.11)$$

где  $\sigma$  — поверхностное натяжение жидкости,  $\varkappa = 1/R_1 + 1/R_2$  — кривизна поверхности раздела,  $\nabla_T = \nabla - \hat{n}(\hat{n} \cdot \nabla)$  — поверхностный градиент. С

учетом динамического условия (3.11) в уравнении (3.7) в итоге имеем:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p' + \nabla \cdot \sigma' - \beta \vec{g}(T - T_0) + (\sigma \kappa \hat{n} + \nabla_T \sigma) |\nabla F| \quad (3.12)$$

В работах М. Мейера [60, 120] уравнения Навье–Стокса задаются в несколько иной форме, а именно:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla p' + (\nabla \cdot \sigma'_g + F(\nabla \cdot \sigma'_l - \nabla \cdot \sigma'_g)) - \beta \vec{g}(T - T_0) + \sigma \kappa \hat{n} |\nabla F|$$

и на свободной поверхности условие Юнга–Лапласа:

$$p'_l - p'_g = \sigma \kappa,$$

т.е. тензор вязких напряжений и градиент поверхностного натяжения не учитывался.

Аналогично закон сохранения энергии:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \nabla T = (c_p \rho)^{-1} \nabla (k \nabla T) \quad (3.13)$$

для жидкой среды ( $z > 0$ ) и

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \kappa_s \Delta T_s \quad (3.14)$$

подложки ( $z < 0$ ).

В статье [126] рассматривается задача о падении капли на нагретую твердую поверхность. Сформулированная система балансных уравнений совпадает с предложенной, различие составляет динамическое условие на свободной поверхности — также, как и М. Мейер, авторы используют условие Юнга–Лапласа.

В начальный момент времени система находится в покое

$$\vec{V} = 0, \quad T_l = T_s = T_0, \quad p' = 0, \quad h = h_0 \quad \text{при } t = 0$$

Необходимо условие на оси симметрии:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial p'}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T_l}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial h}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = 0$$



причем горизонтальная составляющая скорости должна обращаться в нуль на оси симметрии, и условие затухания на бесконечности:

$$\vec{V} \rightarrow 0, \quad T_l, T_s \rightarrow T_0, \quad p' \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \quad T_s \rightarrow T_0 \quad \text{при } z \rightarrow -\infty$$

Граничное условие к уравнениям движения вязкой жидкости состоит в требовании обращения в нуль скорости жидкости на неподвижных твердых поверхностях (условие прилипания):

$$\vec{V} = 0, \quad \text{при } z = 0$$

На границе контакта жидкости и подложки ( $z = 0$ ) задано условие сопряжения с гауссовым источником тепла на границе:

$$T_l - T_s = 0, \quad k_l \frac{\partial T_l}{\partial z} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = -H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \quad (3.15)$$

### 3.1.2 Балансные уравнения в осесимметричной системе координат.

Тепловой источник является осесимметричным, а именно тепловой источник является причиной возникновения неустойчивости в системе. Это переводит задачу к двум пространственным координатам и позволяют уменьшить компьютерные вычисления и упростить VOF метод. Таким образом, гидродинамические уравнения в  $(r, z)$  координатах принимают вид:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial r} + \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right\} + \\ & + \left\{ \sigma \kappa n_r - \gamma \left( \frac{\partial T}{\partial r} - n_r \left( n_r \frac{\partial T}{\partial r} + n_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right) \right\} \frac{|\nabla F|}{\rho} \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right\} + \\ & + \left\{ \sigma \kappa n_z - \gamma \left( \frac{\partial T}{\partial z} - n_z \left( n_r \frac{\partial T}{\partial r} + n_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right) \right\} \frac{|\nabla F|}{\rho} + g\beta(T - T_0) \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} + u \frac{\partial F}{\partial r} + v \frac{\partial F}{\partial z} = 0 \quad (3.19)$$

$$0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq z < \infty$$

Уравнение сохранения энергии для жидкости (3.13) запишется:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{c_p \rho} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right\} \quad (3.20)$$

$$0 \leq r < \infty, \quad 0 < z < \infty$$

Уравнение энергии для подложки (3.14) имеет вид:

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \kappa_s \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \right\} \quad (3.21)$$

$$0 \leq r < \infty, \quad -\infty < z < 0$$

В уравнениях  $k$  — теплопроводность,  $c_p$  — удельная теплоемкость,  $\kappa$  — температуропроводность.

В цилиндрических координатах  $r$ ,  $z$  вектор нормали к свободной поверхности  $z = h(r, t)$ , направленный внутрь жидкости, принимает вид:

$$\hat{n} = \left( \frac{h'}{\sqrt{1 + (h')^2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{1 + (h')^2}} \right)$$

а вектор, касательный к свободной поверхности, соответственно

$$\hat{\tau} = \left( \frac{1}{\sqrt{1 + (h')^2}}, 0, \frac{h'}{\sqrt{1 + (h')^2}} \right)$$

Общая кривизна свободной поверхности  $z = h(r, t)$ :

$$\varkappa = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} = -\frac{h''}{(1 + (h')^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{h'}{r \sqrt{1 + (h')^2}} \quad (3.22)$$

Уравнения (3.16)–(3.21) — основные уравнения осесимметричной задачи термокапиллярной конвекции, которые будем решать численно. Для замыкания этих уравнений нужно сформулировать начальные и граничные условия. В начальный момент времени среда неподвижна, а температура и давление постоянны во всей среде.

$$u = v = 0, \quad T = T_s = T_0, \quad p' = 0, \quad h = h_0 \quad \text{при } t = 0$$

На стенках выполняются условия прилипания

$$u = v = 0, \quad \text{при } z = 0$$

и на границе жидкости и подложки условие теплового контакта с источником:

$$T_l - T_s = 0, \quad k_l \frac{\partial T_l}{\partial z} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = -H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \quad (3.23)$$

На бесконечности выполняются условия затухания:

$$\begin{aligned} u, v, \rightarrow 0, \quad T = T_s \rightarrow T_0, \quad p' \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \\ u, v, \rightarrow 0, \quad T \rightarrow T_0, \quad p' \rightarrow 0 \quad \text{при } z \rightarrow \infty, \\ T_s \rightarrow T_0 \quad \text{при } z \rightarrow -\infty \end{aligned} \quad (3.24)$$

Следует также учитывать условия осевой симметрии.

$$u = \frac{\partial v}{\partial r} = \frac{\partial p'}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = 0$$

Адвективные слагаемые в (3.17)–(3.20) с учетом (3.16) удобно записать в виде:

$$u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(ruY) + \frac{\partial}{\partial z}(vY)$$

где  $Y$  есть  $u'$ ,  $v'$ ,  $T'$  или  $F$  для соответствующих уравнений.

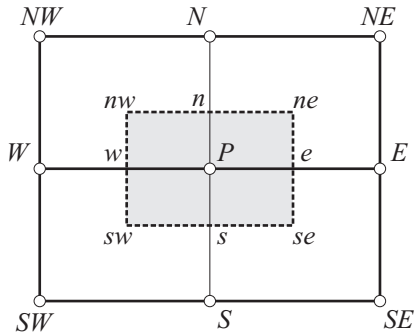
Как правило при решении гидродинамических задач производится обезразмеривание уравнений. Это позволяет в первую очередь сократить число параметров в задаче путем введения безразмерных комплексов. Задача о термокапиллярной конвекции в предложенном виде будет в дальнейшем решаться в размерном виде. Обезразмеривание в данном случае лишь увеличит число параметров, т.к. все свойства в системе являются функциями.

### **3.2 Программирование VOF метода — численного метода расчета гидродинамических задач со свободными границами.**

Первая трудность, с которой можно столкнуться, пытаясь численно решить систему уравнений (3.16)–(3.18), заключается в построении конечно-разностной сетки (или в выборе местоположения узлов в методе

конечных элементов). В уравнения баланса импульса входят компоненты градиента давления, интегрирование которых по контрольному объему (или аппроксимация центральными разностями) приводит к выражениям, Рис. 3.1:

$$P_e - P_w = 0.5(P_E - P_W), \quad P_n - P_s = 0.5(P_N - P_S).$$



**Рис. 3.1.** Шаблон конечно-разностной сетки.

Иными словами, дискретный аналог локального уравнения баланса импульса будет содержать разность давлений между двумя несоседними точками, т.е. давление берется с сетки более грубой, чем основная, что должно привести к снижению точности решения. Но дело даже не столько в этом; такая аппроксимация допускает зигзагообразное поле давления, что нельзя считать соответствующим

физике процесса.

Аналогичная ситуация имеет место при дискретизации уравнения неразрывности (3.16). Поэтому при работе с первичными переменными обычно используют *разнесенную сетку*, которую также часто называют *шахматной* [129]. Пример конфигурации разнесенной сетки с прямоугольными ячейками  $\Delta r \times \Delta z$  представлен на Рис. 3.2, из которого видно, что функции  $p', T, F$  и свойства  $\mu, \rho, k, c_p$  определяются в центре ячейки, а компоненты скорости — в середине сторон ячейки. Индексы  $i$  и  $j$  определяют положение в ячейке. Целые значения  $(1, 2, 3, \dots, i - 1, i, i + 1, \dots)$  указывают на центр ячейки, дробные значения  $(0.5, 1.5, 2.5, \dots, i - \frac{1}{2}, i + \frac{1}{2}, i + \frac{3}{2}, \dots)$  — на сторону ячейки. Ось симметрии ( $r = 0$ ) находится в начальной ячейке и соответствует положению при  $i = \frac{1}{2}$ . Соотношения между индексами и координатами представляются как  $r_i = (i - 0.5)\Delta r$  и  $z_j = (j - 0.5)\Delta z$ . Такая процедура делает сетку особенно удобной для проведения дискретизации по методу контрольного объема. В результате дискретизации уравнения (3.16) на разнесенной сетке, изображенной на



е в методе контрольного объема). Это позволяет представить  $\partial p'/\partial r$  в виде выражения  $(p'_{i+1,j} - p'_{i,j})/\Delta r$ , которое в точке  $(i + \frac{1}{2}, j)$  имеет второй порядок точности. Аналогично (3.18) дискретизируется центральными разностями относительно точки  $(i, j + \frac{1}{2})$  (точка  $n$  в методе контрольного объема) и  $\partial p'/\partial z$  представляется в виде  $(p'_{i,j+1} - p'_{i,j})/\Delta z$ .

Использование разнесенной сетки позволяет избежать появления осцилляций в решении, в частности для давления, о которых говорилось выше. Однако применение разнесенных сеток имеет и некоторые недостатки, основным из которых является сложность постановки граничных условий, поскольку по крайней мере одна из зависимых переменных  $u$  или  $v$  не будет определена на границе.

### 3.2.1 Дискретизация уравнений.

Причиной конвективной неустойчивости в системе является температурное возмущение в объеме и на межфазной границе. Поэтому вычисления целесообразно начинать с тепловых уравнений (3.20) и (3.21). При их дискретизации используются следующие конечно-разностные выражения (знаком  $\bullet$  обозначаются функции, вычисляемые на текущем шаге, без  $\bullet$  — значения с предыдущего шага по времени):

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{i,j} &\approx \frac{T_{i,j}^{\bullet} - T_{i,j}}{\Delta t} \\ \left. \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ruT) \right|_{i,j} &\approx \frac{r_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j} \bar{T}_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},j} \bar{T}_{i-\frac{1}{2},j}}{r_i \Delta r} \\ \left. \frac{\partial}{\partial z} (vT) \right|_{i,j} &\approx \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} \bar{T}_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \bar{T}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta z} \\ \left. \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right|_{i,j} &\approx \frac{k_{i+\frac{1}{2},j} r_{i+\frac{1}{2}} (T_{i+1,j} - T_{i,j}) - k_{i-\frac{1}{2},j} r_{i-\frac{1}{2}} (T_{i,j} - T_{i-1,j})}{r_i (\Delta r)^2} \\ \left. \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right|_{i,j} &\approx \frac{k_{i,j+\frac{1}{2}} (T_{i,j+1} - T_{i,j}) - k_{i,j-\frac{1}{2}} (T_{i,j} - T_{i,j-1})}{(\Delta z)^2} \end{aligned}$$

В результате дискретизации уравнения (3.20) для среды жидкость–воздух на разнесенной сетке, изображенной на Рис. 3.2, получается

следующее выражение:

$$T_{i,j}^{\bullet} = T_{i,j} + \Delta t \left[ \frac{1}{c_{p_{i,j}} \rho_{i,j}} (L_r(kL_r T)_{i,j} + L_z(kL_z T)_{i,j}) - L_r(uT)_{i,j} - L_z(vT)_{i,j} \right] \quad (3.26)$$

$$i = 1, \dots, M - 1, \quad j = 1, \dots, N - 1,$$

где

$$\begin{aligned} L_r(uT)_{i,j} &= \frac{r_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j} \bar{T}_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},j} \bar{T}_{i-\frac{1}{2},j}}{r_i \Delta r} \\ L_z(vT)_{i,j} &= \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} \bar{T}_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \bar{T}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta z} \\ L_r(kL_r T)_{i,j} &= \frac{k_{i+\frac{1}{2},j} r_{i+\frac{1}{2}} (T_{i+1,j} - T_{i,j}) - k_{i-\frac{1}{2},j} r_{i-\frac{1}{2}} (T_{i,j} - T_{i-1,j})}{r_i (\Delta r)^2} \\ L_z(kL_z T)_{i,j} &= \frac{k_{i,j+\frac{1}{2}} (T_{i,j+1} - T_{i,j}) - k_{i,j-\frac{1}{2}} (T_{i,j} - T_{i,j-1})}{(\Delta z)^2} \end{aligned}$$

а свойства среды

$$\begin{aligned} k_{i,j} &= k_g + F_{i,j} \cdot (k_l - k_g) \\ c_{p_{i,j}} &= c_{p_g} + F_{i,j} \cdot (c_{p_l} - c_{p_g}) \\ \rho_{i,j} &= \rho_g + F_{i,j} \cdot (\rho_l - \rho_g) \end{aligned}$$

Для подложки скорости равны нулю, разностная аппроксимация уравнения (3.21) имеет вид:

$$T_{s_{i,j}}^{\bullet} = T_{s_{i,j}} + \Delta t [\kappa_s (L_{rr} T_{s_{i,j}} + L_{zz} T_{s_{i,j}})] \quad (3.27)$$

$$i = 1, \dots, M - 1, \quad j = 1, \dots, N_s - 1$$

где

$$\begin{aligned} L_{rr} T_{s_{i,j}} &= \frac{r_{i+\frac{1}{2}} (T_{s_{i+1},j} - T_{s_{i,j}}) - r_{i-\frac{1}{2}} (T_{s_{i,j}} - T_{s_{i-1},j})}{r_i (\Delta r)^2} \\ L_{zz} T_{s_{i,j}} &= \frac{T_{s_{i,j+1}} - 2T_{s_{i,j}} + T_{s_{i,j-1}}}{(\Delta z)^2} \end{aligned}$$

На границе контакта жидкости и подложки должно выполняться условие (3.23), которое в дискретной форме принимает вид:

$$\begin{aligned} T_{i,0}^\bullet + T_{i,1}^\bullet - T_{s i,0}^\bullet - T_{s i,1}^\bullet &= 0 \\ k_l(T_{i,1}^\bullet - T_{i,0}^\bullet) + k_s(T_{s i,1}^\bullet - T_{s i,0}^\bullet) &= \Delta z H_0 \exp\left(-\frac{(i-0.5)^2(\Delta r)^2}{a^2}\right) \end{aligned}$$

из которых после преобразований получаем выражения для определения граничных значений:

$$\begin{aligned} T_{s i,0}^\bullet &= \frac{1}{k_l + k_s} \left\{ 2k_l T_{i,1}^\bullet - (k_l - k_s) T_{s i,1}^\bullet - \Delta z H_0 \exp\left(-\frac{(i-0.5)^2(\Delta r)^2}{a^2}\right) \right\} \\ T_{i,0}^\bullet &= T_{s i,0}^\bullet + T_{s i,1}^\bullet - T_{i,1}^\bullet \end{aligned} \quad (3.28)$$

Температура определяется в центре ячейки, поэтому значения на границе будем определять следующим образом. При  $r = R$  нужно определить значение  $T_{M-\frac{1}{2},j}^\bullet = (T_{M-1,j}^\bullet + T_{M,j}^\bullet)/2$ . На этой границе температура принимает значение  $T_0$ , но для удобства вычислений примем  $T_0 = 0$ . Тогда граничное значение определяется следующим образом:

$$T_{M,j}^\bullet = -T_{M-1,j}^\bullet \quad (3.29)$$

Аналогично определяются и остальные граничные значения:

$$T_{i,N}^\bullet = -T_{i,N-1}^\bullet \quad (3.30)$$

$$T_{s i,N_s}^\bullet = -T_{s i,N_s-1}^\bullet \quad (3.31)$$

Из условия симметрии имеем:

$$T_{0,j}^\bullet = T_{1,j}^\bullet \quad (3.32)$$

Выражения (3.26)–(3.32) позволяют определить температуру в любой точке системы до начала конвективных течений. Существование времени задержки говорит о том, что жидкость находится в покое пока запускающее температурное возмущение  $(\Delta T)_{TC}$  не достигнет межфазной границы.

Когда определено поле температур на расчетном шаге, через разностную аппроксимацию уравнений (3.16)–(3.18) можно вычислить



скорости и давление. Уравнения сохранения импульса дискретизируются в контрольном объеме, определенном вокруг скоростей, как показано на Рис. 3.2. Используются следующие аппроксимации [60]:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{i+\frac{1}{2},j} &\approx \frac{u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta t} \\
\left. \frac{\partial v}{\partial t} \right|_{i,j+\frac{1}{2}} &\approx \frac{u_{i,j+\frac{1}{2}}^\bullet - u_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \\
\left. \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru^2) \right|_{i+\frac{1}{2},j} &\approx \frac{r_{i+1} \bar{u}_{i+1,j}^2 - r_i \bar{u}_{i,j}^2}{r_{i+\frac{1}{2}} \Delta r} \\
\left. \frac{\partial}{\partial z} (uv) \right|_{i+\frac{1}{2},j} &\approx \frac{(\bar{u}\bar{v})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - (\bar{u}\bar{v})_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{\Delta z} \\
\\
\left. \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ruv) \right|_{i,j+\frac{1}{2}} &\approx \frac{r_{i+\frac{1}{2}} (\bar{u}\bar{v})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - r_{i-\frac{1}{2}} (\bar{u}\bar{v})_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{r_i \Delta r} \\
\left. \frac{\partial}{\partial z} (v^2) \right|_{i,j+\frac{1}{2}} &\approx \frac{\bar{v}_{i,j+1}^2 - \bar{v}_{i,j-1}^2}{\Delta z} \\
\left. \frac{\partial p}{\partial r} r \right|_{i+\frac{1}{2},j} &\approx \frac{p'_{i+1,j}^\bullet - p'_{i,j}^\bullet}{\Delta r} \\
\left. \frac{\partial p}{\partial r} r \right|_{i,j+\frac{1}{2}} &\approx \frac{p'_{i,j+1}^\bullet - p'_{i,j}^\bullet}{\Delta z} \\
\left. \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} \right) \right|_{i+\frac{1}{2},j} &\approx \frac{\mu_{i+1,j} (r_{i+\frac{3}{2}} u_{i+\frac{3}{2},j} - r_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j})}{r_{i+1} (\Delta r)^2} - \\
&\quad - \frac{\mu_{i,j} (r_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},j})}{r_i (\Delta r)^2} \\
\left. \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right|_{i+\frac{1}{2},j} &\approx \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} (u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}) - \mu_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-1})}{(\Delta z)^2} \\
\left. \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial v}{\partial r} \right) \right|_{i,j+\frac{1}{2}} &\approx \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} r_{i+\frac{1}{2}} (v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}})}{r_i (\Delta r)^2} - \\
&\quad - \frac{\mu_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} r_{i-\frac{1}{2}} (v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i-1,j+\frac{1}{2}})}{r_i (\Delta r)^2} \\
\left. \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right|_{i,j+\frac{1}{2}} &\approx \frac{\mu_{i,j+1} (v_{i,j+\frac{3}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}) - \mu_{i,j} (v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}})}{(\Delta z)^2}
\end{aligned}$$

Для решения уравнения (3.17) применим следующий явный алгоритм:

$$u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet = U_{i+\frac{1}{2},j} - \Delta t(p'_{i+1,j}^\bullet - p'_{i,j}^\bullet)/\Delta r \quad (3.33)$$

где

$$U_{i+\frac{1}{2},j} = u_{i+\frac{1}{2},j} + \Delta t \left[ \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}} \left( \frac{\mu_{i+1,j}(r_{i+\frac{3}{2}}u_{i+\frac{3}{2},j} - r_{i+\frac{1}{2}}u_{i+\frac{1}{2},j})}{r_{i+1}(\Delta r)^2} - \frac{\mu_{i,j}(r_{i+\frac{1}{2}}u_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}}u_{i-\frac{1}{2},j})}{r_i(\Delta r)^2} + \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}) - \mu_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-1})}{(\Delta z)^2} \right) - \frac{r_{i+1}\bar{u}_{i+1,j}^2 - r_i\bar{u}_{i,j}^2}{r_{i+\frac{1}{2}}\Delta r} - \frac{(\bar{u}v)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - (\bar{u}v)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{\Delta z} + f_{r_{i+\frac{1}{2},j}} \right] \quad (3.34)$$

Аналогично в дискретном виде представляется уравнение (3.18)

$$v_{i,j+\frac{1}{2}}^\bullet = V_{i,j+\frac{1}{2}} - \Delta t(p'_{i,j+\frac{1}{2}}^\bullet - p'_{i,j}^\bullet)/\Delta z \quad (3.35)$$

где

$$V_{i,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j+\frac{1}{2}} + \Delta t \left[ \frac{1}{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}} \left( \frac{r_{i+\frac{1}{2}}\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}})}{r_i(\Delta r)^2} - \frac{r_{i-\frac{1}{2}}\mu_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i-1,j+\frac{1}{2}})}{r_i(\Delta r)^2} + \frac{\mu_{i,j+1}(v_{i,j+\frac{3}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}) - \mu_{i,j}(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}})}{(\Delta z)^2} \right) - \frac{r_{i+\frac{1}{2}}(\bar{u}v)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - r_{i-\frac{1}{2}}(\bar{u}v)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{r_i\Delta r} - \frac{\bar{v}_{i,j+1}^2 - \bar{v}_{i,j}^2}{\Delta z} + f_{z_{i,j+\frac{1}{2}}} + \beta g\bar{T}_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \quad (3.36)$$

В уравнениях  $\vec{f} = \{f_r, f_z\}$  — условие на межфазной границе будет рассмотрено позднее (Глава 4).

В уравнениях (3.33) и (3.35) давление  $p'$  входит неявно; однако  $p'^\bullet$  определяется до решения (3.33) и (3.35) следующим образом. Уравнение неразрывности (3.16) записывается в разностном виде

$$D_{i,j}^\bullet = \frac{r_{i+\frac{1}{2}}u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet - r_{i-\frac{1}{2}}u_{i-\frac{1}{2},j}^\bullet}{r_i\Delta r} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}^\bullet - v_{i,j-\frac{1}{2}}^\bullet}{\Delta z} = 0 \quad (3.37)$$

где  $D_{i,j}^\bullet$  — дилатация в ячейке  $(i, j)$ , т.е. скорость относительного объемного расширения элементарного жидкого объема в данной точке. Подстановка  $u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet$  и т.д. из уравнений (3.33) и (3.35) в (3.37) позволяет представить последнее в виде разностного уравнения Пуассона для давления, т.е.

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{r_{i+\frac{1}{2}}(p'_{i+1,j} - p'_{i,j}) - r_{i-\frac{1}{2}}(p'_{i,j} - p'_{i-1,j})}{r_i(\Delta r)^2} + \frac{p'_{i,j+1} - 2p'_{i,j} + p'_{i,j-1}}{(\Delta z)^2} \right]^\bullet = \\ & = \frac{1}{\Delta t} \left[ \frac{r_{i+\frac{1}{2}}U_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}}U_{i-\frac{1}{2},j}}{r_i\Delta r} + \frac{V_{i,j+\frac{1}{2}} - V_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta z} \right] = R_{i,j} \quad (3.38) \end{aligned}$$

После подстановки в правой части (3.38) значений  $U$  и  $V$  из (3.34) и (3.36) появляется выражение  $D_{i,j}/\Delta t$ . Эту величину в (3.38) можно интерпретировать как дискретизацию —  $(\partial D/\partial t)_{i,j}$  при  $D_{i,j}^\bullet = 0$ . Таким образом, сходящееся решение для давления, полученное из (3.38), приводит к выполнению дискретного уравнения неразрывности (3.37) на расчетном шаге по времени.

Система линейных уравнений (3.38) решается на каждом временном шаге на основе обобщенного алгоритма Томаса [136]. После того как  $p'^\bullet$  получено из решения (3.38), подстановка этого значения в уравнения (3.33) и (3.35) позволяет определить  $u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet$  и  $v_{i,j+\frac{1}{2}}^\bullet$ .

Поле жидкой фракции  $F$  определяем по известным скоростям:

$$\begin{aligned} F_{i,j}^\bullet = F_{i,j} & - \frac{\Delta t}{r_i\Delta r} (r_{i+\frac{1}{2}}u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet \bar{F}_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}}u_{i-\frac{1}{2},j}^\bullet \bar{F}_{i-\frac{1}{2},j}) - \\ & - \frac{\Delta t}{\Delta z} (v_{i,j+\frac{1}{2}}^\bullet \bar{F}_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}^\bullet \bar{F}_{i,j-\frac{1}{2}}) \quad (3.39) \end{aligned}$$

В приведенных уравнениях скорости  $\bar{u}$  и  $\bar{v}$ , температура  $\bar{T}$  и функция фракции  $\bar{F}$  являются усредненными, например:

$$\bar{u}_{i,j} = 0.5 \left( u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j} \right)$$

Аналогично  $\bar{u}\bar{v}$  аппроксимируется выражением

$$\bar{u}\bar{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = 0.25(u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j+1})(v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}})$$

### 3.2.2 Постановка граничных условий.

При постановке граничных условий сетка строится таким образом, что граница проходит через точки, в которых определяется скорость, а не давление. Например, на Рис. 3.2 изображена часть расчетной сетки, для которой ВС — твердая стенка, АВ — ось симметрии.

Очевидно, что  $v_{0,\frac{1}{2}} = v_{1,\frac{1}{2}} = v_{2,\frac{1}{2}} = \dots = 0$ , поскольку ВС — твердая стенка. Для вычисления выражения (3.33) в узлах  $(i + \frac{1}{2}, 1)$  необходимо значение  $u_{i+\frac{1}{2},0}$ . Оно может быть получено через значение на стенке

$$\bar{u}_{i+\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = 0 = (u_{i+\frac{1}{2},0} + u_{i+\frac{1}{2},1})/2 \quad u_{i+\frac{1}{2},0} = -u_{i+\frac{1}{2},1}.$$

При решении уравнения Пуассона для давления (3.38) требуются значения давления за пределами области расчета. При записи (3.38) относительно узла  $(i, 1)$  требуются значения  $p'_{i,0}$  и  $v_{i,-\frac{1}{2}}$ . Значение  $p'_{i,0}$  получается из уравнения (3.18) на стенке, т.е.  $\partial p'/\partial z = \text{Re}^{-1} \mu^*/\rho^*(\partial^2 v/\partial z^2)$ , поскольку  $v$  на стенке не зависит от времени. В дискретной форме это выражение имеет вид

$$\frac{p'_{i,1} - p'_{i,0}}{\Delta z} = \frac{\mu^* v_{i,\frac{3}{2}} - 2v_{i,\frac{1}{2}} + v_{i,-\frac{1}{2}}}{\rho^* \text{Re}(\Delta z)^2}$$

Для выполнения (3.37) на стенке должно иметь место равенство  $\partial v/\partial z = 0$ .

Тогда

$$v_{i,-\frac{1}{2}} = v_{i,\frac{3}{2}}; \quad p'_{i,0} = p'_{i,1} - \frac{\mu^*}{\rho^*} \frac{2v_{i,\frac{3}{2}}}{\text{Re}\Delta z}.$$

На границе АВ радиальная скорость обращается в нуль, т.е.  $u_{\frac{1}{2},j} = 0$ . Для вертикальной скорости и давления задается равенство нулю их частных производных по  $r$ , т.е.

$$(v_{1,j+\frac{1}{2}} - v_{0,j+\frac{1}{2}})/\Delta r = 0, \quad (p'_{1,j} - p'_{0,j})/\Delta r = 0, \quad (T_{1,j} - T_{0,j})/\Delta r = 0$$

или

$$v_{0,j+\frac{1}{2}} = v_{1,j+\frac{1}{2}}, \quad p'_{0,j} = p'_{1,j}, \quad T_{0,j} = T_{1,j}.$$

В задаче заданы граничные условия на бесконечности (3.24). Для численного счета необходимо ограничить расчетную область. Для этого

проводилась серия численных экспериментов. Известно, что толщина кюветы в экспериментах составляет 15 мм. Для расчета задавалась область от 5 до 15 мм для подложки в зависимости от времени и соответствующего значения числа Фурье. Для длительных расчетов и выхода на стационар граница задавалась 15 мм.

Из экспериментов видно, что деформация свободной поверхности не превышает радиуса 10 мм. В лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии» проводятся эксперименты по определению профиля скоростей при близких условиях рассматриваемых в задаче. Наблюдения показали, что обратный поток обнаруживается на расстоянии около 4 мм от оси симметрии. Автором были проведены сравнительные расчеты для области радиусом 10 мм и выше. Результаты показали, что увеличение радиуса расчетной области не вносит значительных изменений. Однако для чистоты эксперименты для счета задавалась граница  $R = 20$  мм при радиусе кюветы 30 мм. Сложность представляет задание области, заполненной воздухом. Эта область определялась только на основе численных экспериментов и было выявлено, что превышение общей области расчета для жидкости и воздуха по вертикали 3 мм сказывается незначительно. Для выхода на стационар область задавалась порядка 6 мм.

### **3.2.3 Положение межфазной границы. PLIC-VOF метод.**

Положение межфазной границы определяется геометрической аппроксимацией ее реального положения. Для этого использован так называемый PLIC (Piecewise Linear Interface Construction) метод, Рис. 1.11. Для определения межфазной границы могут быть использованы различные условия одним, из которых является условие, чтобы прямые линии соединялись на сторонах ячеек. В результате полученная межфазная граница будет непрерывной. Однако в работе используются несоединенные прямые линии: каждая линия определяется независимо от соседних и их концы находятся на сторонах ячейки. Такой подход гарантирует максимальную устойчивость и простоту.

Для построения линии в ячейке  $(i, j)$  используется два условия,

которые позволяют всегда получить однозначное решение:

1. Прямая линия перпендикулярна к вектору нормали  $\hat{n}_{i,j}$  (который направлен в жидкость).
2. Она ограничивает площадь/объем жидкости в соответствии с известным значением  $F_{i,j}$  в ячейке.

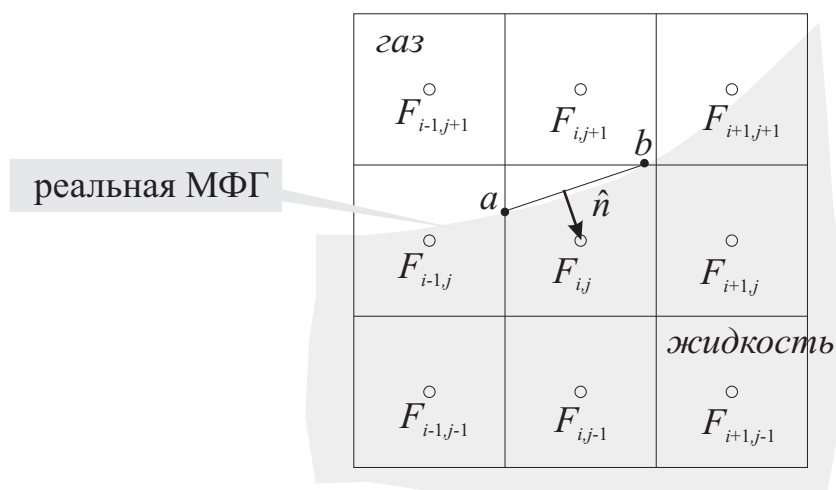
Вектор нормали  $\hat{n}$  — это единичный вектор, перпендикулярный к свободной поверхности, направленный в сторону жидкости, (??). В ячейке  $(i, j)$  его аппроксимация может быть найдена через значения функции фракции, которая несет информацию о фазе. Вектор  $\hat{n}$  можно определить только по соседним ячейкам, используя шаблон  $\mathbf{F}_{i,j}^9$  из девяти ячеек:

$$\mathbf{F}_{i,j}^9 = \begin{bmatrix} F_{i-1,j+1} & F_{i,j+1} & F_{i+1,j+1} \\ F_{i-1,j} & F_{i,j} & F_{i+1,j} \\ F_{i-1,j-1} & F_{i,j-1} & F_{i+1,j-1} \end{bmatrix}$$

Поэтому вектор нормали является функцией от  $\mathbf{F}_{i,j}^9$ :

$$\hat{n} = f(\mathbf{F}_{i,j}^9)$$

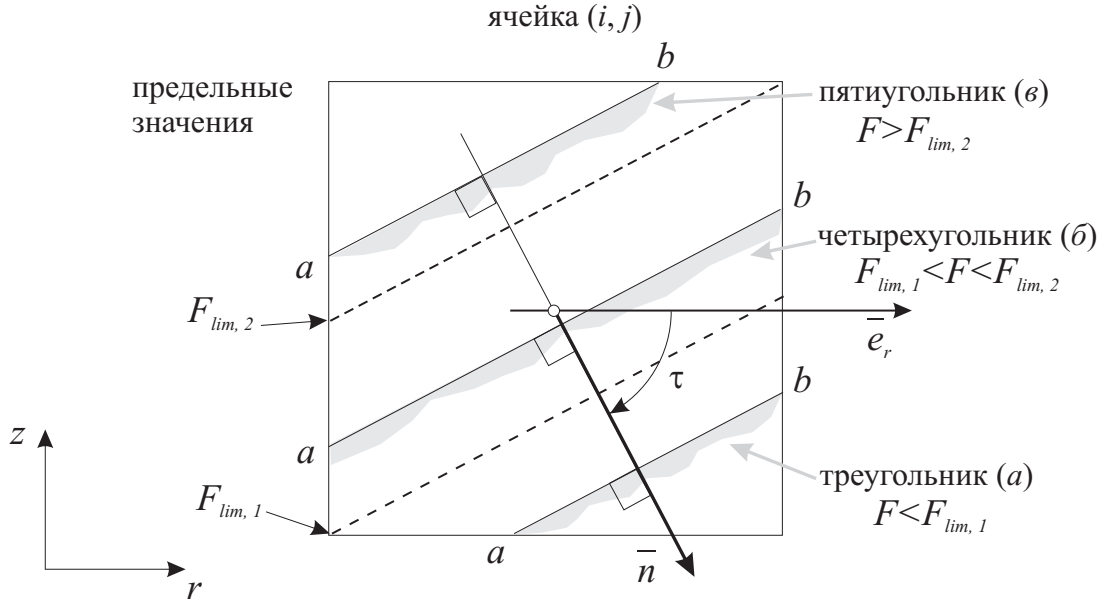
Рис. 3.3 иллюстрирует эту ситуацию. Вектор нормали вычисляется по



**Рис. 3.3.** Восстановление межфазной границы прямыми линиями на основе шаблона из девяти ячеек.

формуле (3.40)

$$\hat{n}_{i,j} = \begin{bmatrix} F_{i+1,j+1} + 2F_{i+1,j} + F_{i+1,j-1} - F_{i-1,j+1} - 2F_{i-1,j} - F_{j-1,j-1} \\ F_{i+1,j+1} + 2F_{i,j+1} + F_{i-1,j+1} - F_{i+1,j-1} - 2F_{i,j-1} - F_{j-1,j-1} \end{bmatrix} \quad (3.40)$$



**Рис. 3.4.** Три возможные ситуации при определении положения прямой линии в зависимости от значения  $F_{i,j}$

которая может быть получена из градиента  $F$  ( $\hat{n}_{i,j} = \nabla F|_{i,j}$ ), в сочетании с центрально-разностной аппроксимацией по строкам  $i - 1, i, i + 1$  или столбцам  $j - 1, j, j + 1$ , соответственно. После вычислений по формуле (3.40)  $\hat{n}$  необходимо нормировать.

Когда единичный вектор нормали уже вычислен, можно определить прямую линия, позиционируя ее перпендикулярно  $\hat{n}_{i,j}$  и в соответствии со значением  $F_{i,j}$ . Угол наклона  $\tau$  между  $\hat{n}$  и  $\hat{e}_r$  находится в диапазоне  $0 \leq \tau < 2\pi$ , но при подходящем зеркальном отражении на оси  $r$  или  $z$  можно свести его значения в первый октант ( $0 \leq \tau < \pi/4$ ). На Рис. 3.4 показан пример положения вектора  $\hat{n}$  в первом октанте. Площадь, отделенная прямой линией перпендикулярной  $\hat{n}$  может быть треугольником, четырехугольником или пятиугольником в зависимости от значения  $F_{i,j}$ . Предельные значения

$$F_{lim,1} = \left| \frac{n_z}{2n_r} \right|$$

$$F_{lim,2} = 1 - F_{lim,1}$$

где  $n_r$  и  $n_z$  — компоненты вектора  $\hat{n}$ . Результирующая прямая линия соединяет точки  $a$  и  $b$ . Таким образом  $a$  и  $b$  полностью определяют положение межфазной границы и жидкости в ячейке. Для каждого из трех случаев, описанных на Рис. 3.4, и в зависимости от ориентации вектора

нормали, получим выражения для точек в каждой ячейке  $(i, j)$  в локальных координатах от 0 до 1:

1. Если  $|n_r| > |n_z|$  и они одного знака, то  $F_{lim,1} = n_z/2n_r$  и координаты точек

$$\begin{aligned} (a) \quad a_r &= 0, \quad a_z = \sqrt{\frac{2Fn_r}{n_z}}, & b_r &= \sqrt{\frac{2Fn_z}{n_r}}, \quad b_z = 0; \\ (б) \quad a_r &= F - \frac{n_z}{2n_r}, \quad a_z = 1, & b_r &= F + \frac{n_z}{2n_r}, \quad b_z = 0; \\ (в) \quad a_r &= 1 - \sqrt{\frac{2(1-F)n_z}{n_r}}, \quad a_z = 1, & b_r &= 1, \quad b_z = 1 - \sqrt{\frac{2(1-F)n_r}{n_z}}. \end{aligned}$$

2. Если  $|n_r| > |n_z|$  и они разных знаков, то  $F_{lim,1} = |n_z/2n_r|$  и координаты точек

$$\begin{aligned} (a) \quad a_r &= 1 - \sqrt{\left|\frac{2Fn_z}{n_r}\right|}, \quad a_z = 0, & b_r &= 1, \quad b_z = \sqrt{\left|\frac{2Fn_r}{n_z}\right|}; \\ (б) \quad a_r &= 1 - F - \left|\frac{n_z}{2n_r}\right|, \quad a_z = 0, & b_r &= 1 - F + \left|\frac{n_z}{2n_r}\right|, \quad b_z = 1; \\ (в) \quad a_r &= 0, \quad a_z = 1 - \sqrt{\left|\frac{2(1-F)n_r}{n_z}\right|}, & b_r &= 1 - \sqrt{\left|\frac{2(1-F)n_z}{n_r}\right|}. \end{aligned}$$

3. Если  $|n_r| < |n_z|$  и они одного знака, то  $F_{lim,1} = n_r/2n_z$  и координаты точек

$$\begin{aligned} (a) \quad a_r &= 0, \quad a_z = \sqrt{\frac{2Fn_z}{n_r}}, & b_r &= \sqrt{\frac{2Fn_r}{n_z}}, \quad b_z = 0; \\ (б) \quad a_r &= 0, \quad a_z = F + \frac{n_r}{2n_z}, & b_r &= 1, \quad b_z = F - \frac{n_r}{2n_z}; \\ (в) \quad a_r &= 1 - \sqrt{\frac{2(1-F)n_z}{n_r}}, \quad a_z = 1, & b_r &= 1, \quad b_z = 1 - \sqrt{\frac{2(1-F)n_r}{n_z}}. \end{aligned}$$

4. Если  $|n_r| < |n_z|$  и они разных знаков, то  $F_{lim,1} = |n_r/2n_z|$  и координаты точек

$$\begin{aligned} (a) \quad a_r &= 1 - \sqrt{\left|\frac{2Fn_z}{n_r}\right|}, \quad a_z = 0, & b_r &= 1, \quad b_z = \sqrt{\left|\frac{2Fn_r}{n_z}\right|}; \\ (б) \quad a_r &= 0, \quad a_z = F - \left|\frac{n_r}{2n_z}\right|, & b_r &= 1, \quad b_z = F + \left|\frac{n_r}{2n_z}\right|; \\ (в) \quad a_r &= 0, \quad a_z = 1 - \sqrt{\left|\frac{2(1-F)n_r}{n_z}\right|}, & b_r &= \sqrt{\left|\frac{2(1-F)n_z}{n_r}\right|}, \quad b_z = 1. \end{aligned}$$

О вычислении кривизны свободной поверхности подробно изложено в Главе 5.



**Выводы.**

1. Сформулирована система балансных уравнений и граничных условий для решения задачи о термокапиллярной конвекции с тепловым источником на границе контакта жидкости и подложки. Силы поверхностного натяжения включаются в основные уравнения и учитывается совместное движение жидкости и воздуха.
2. Для построения схемы численного счета используется VOF метод — специальный метод для решения задач со свободными границами.
3. Обоснованы задание границ расчетной области и граничные условия в численной схеме.

## Глава 4

# Разработка программного комплекса «Термокапиллярная конвекция» и некоторые результаты расчета.

В этой главе более подробно рассматриваются силы поверхностного натяжения при численном моделировании термокапиллярной конвекции. Описан программный комплекс и работа с ним. Приведены некоторые результаты расчета по модели, построены поля скоростей. Решена центральная задача диссертационного исследования — определение времени задержки термокапиллярной конвекции. Для этого предложен критерий начала конвекции.

### 4.1 Силы поверхностного натяжения.

В Главе 3 описан VOF метод, который позволяет численно моделировать термокапиллярную конвекцию. В этом методе силы поверхностного натяжения, запускающие конвекцию, включаются в уравнения Навье–Стокса в виде слагаемых с дельта-функцией Дирака, уравнения (3.33) и (3.35).

#### 4.1.1 Дискретизация сил поверхностного натяжения.

Динамическое условие на свободной поверхности включается в уравнения импульса в следующем виде:

$$\vec{f} = (\kappa(\sigma_0 - \gamma T_l)\hat{n} - \gamma \nabla_T T_l) \frac{|\nabla F|}{\rho}$$

Вычисление кривизны межфазной границы  $\varkappa$  в осесимметричных координатах будет рассмотрено позднее.

Для дискретной аппроксимации будем использовать уже вычисленное положение межфазной границы (Глава 3, с. 77). Когда известны координаты точек  $a$  и  $b$  в ячейке  $(i, j)$ , легко определить площадь поверхности раздела в этой ячейке. В осесимметричной системе координат  $A_{i,j}$  является площадью поверхности усеченного конуса:

$$A_{i,j} = 2\pi \vec{r}_{i,j} \cdot |b_{i,j} - a_{i,j}|,$$

где  $\vec{r}_{i,j}$  — радиус середины линии, т.е. точки  $\frac{1}{2}(a + b)$ . Тензор напряжений на свободной поверхности  $(p_l - p_g)\hat{n} - (\sigma'_l - \sigma'_g) \cdot \hat{n}$  соответствует силе  $\mathbf{K}_{i,j}$ , действующей в ячейке  $(i, j)$ :

$$\mathbf{K}_{i,j} = \left( (p_{l,i,j} - p_{g,i,j})\hat{n}_{i,j} - ((\sigma'_l - \sigma'_g) \cdot \hat{n})_{i,j} \right) A_{i,j}$$

**Плотность в ячейке и средняя плотность.** Сила  $\mathbf{K}_{i,j}$  определяется в ячейке  $(i, j)$ , которая имеет объем  $V_{i,j}^c$ . Рассматриваемая задача является осесимметричной, поэтому дискретная ячейка является тором, полученным вращением ячейки вокруг оси симметрии ( $z$ -оси). Объем  $V$  осесимметричного тора есть

$$V = A \cdot 2\pi r_{cg}$$

где  $A$  — площадь поперечного сечения тора в направлении центральной оси и  $r_{cg}$  — радиус центра тяжести поперечного сечения площадью  $A$ .

Сила, действующая на единицу объема,  $\mathbf{K}_{i,j}/V_{i,j}^c$ , может быть напрямую включена в аппроксимацию уравнения импульса (3.33). В представленной формулировке уравнения сохранения импульса (3.17) и (3.18) делятся на плотность. В дискретной форме этих уравнений естественно использовать  $\rho_{i+\frac{1}{2},j}$  или  $\rho_{i,j+\frac{1}{2}}$ , определенной из уравнений (3.1) на разнесенной сетке. Однако, вследствие того, что  $\mathbf{K}_{i,j}$  определяется в ячейке  $(i, j)$ , то эту силу следует делить на площадь в ячейке  $\rho_{i,j}$  и после этого включать объемную силу в контрольный объем. Таким образом, объемная сила в ячейке:

$$\vec{f}_{i,j} = \frac{\mathbf{K}_{i,j}}{\rho_{i,j}V_{i,j}^c} = \frac{A_{i,j}}{\rho_{i,j}V_{i,j}^c} \left( (\sigma_0 - \gamma T_{i,j})\varkappa_{i,j}\hat{n}_{i,j} - \gamma(\nabla_T T)_{i,j} \right) \quad (4.1)$$

Это конечно-разностная аппроксимация слагаемого  $\vec{f}_{i,j}$  в уравнениях импульса (3.17) и (3.18).

Однако, при использовании плотности в ячейке  $\rho_{i,j}$  ускорение  $\vec{f}_{i,j}$  зависит от значения функции фракции  $F_{i,j}$  в этой ячейке. Это становится значительным, когда  $F_{i,j}$  и  $\rho_{i,j}$  принимают маленькие значения и ускорение  $\vec{e}_{i,j}$  увеличивается, тогда оно должно быть сбалансировано со слагаемыми ускорения  $\partial u/\partial t$  и  $\partial v/\partial t$  в уравнениях импульса. В этом случае возникает искусственно высокая скорость в газе.

Действительно,  $\vec{f}$  должно действовать равномерно в независимости от значения объема жидкости и плотности в ячейке на текущий момент. Это можно аргументировать тем, что сила должна действовать на массу в смещении ячейки на толщину  $\Delta r/2$  с обеих сторон границы раздела фаз. Тогда можно использовать постоянную плотность  $\bar{\rho} = 0.5(\rho_l + \rho_g)$ . Деление на среднюю плотность  $\bar{\rho}$  в (4.1) предпочтительнее, чем на  $\rho_{i,j}$ :

$$\vec{f}_{i,j} = \frac{\mathbf{K}_{i,j}}{\bar{\rho}V_{i,j}^c}. \quad (4.2)$$

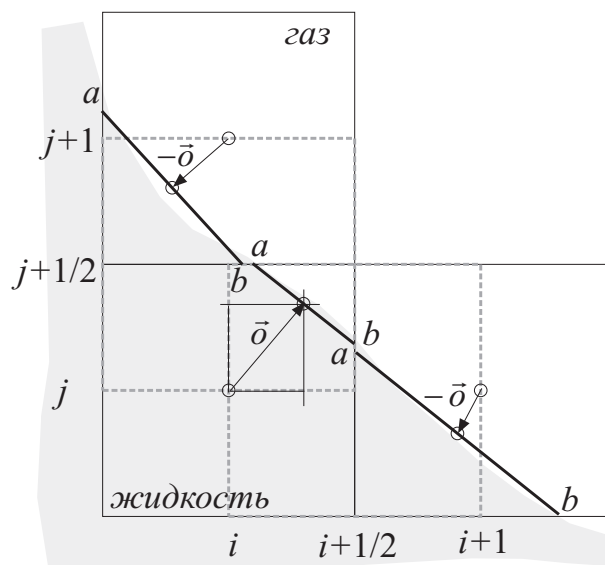
Для численной реализации корректны оба варианта. В программе используется ускорение в виде (4.1), т.к. свободная поверхность подвергается незначительным деформациям и величина  $F_{i,j}$  не сильно отклоняется от 0.5.

**Разделение пополам и по весу.** В связи с тем, что используется разнесенная схема,  $\vec{f}_{i,j}$  должно быть разделено по контрольным объемам в уравнениях неразрывности. Самым простым способом было бы разделение пополам:

$$\begin{aligned} f_{ri+\frac{1}{2},j} &= 0.5f_{ri,j} + 0.5f_{ri+1,j} \\ f_{zi,j+\frac{1}{2}} &= 0.5f_{zi,j} + 0.5f_{zi,j+1} \end{aligned}$$

Однако, для более точной аппроксимации можно использовать реконструированную межфазную границу. Если межфазная граница отклоняется от середины ячейки, то это несет свой вклад в разделение  $\vec{f}_{i,j}$ . В качестве варианта может быть использован вектор отклонения  $\vec{\sigma} = (o_r, o_z)^T$  от середины восстановленной в ячейке межфазной границы и

центром ячейки, как показано на Рис. 4.1. Используя  $o_r$  и  $o_z$  для линейного разделения, получим:



**Рис. 4.1.** Вектор смещения  $\vec{o}$  для разделения по весу силы поверхностного натяжения  $\vec{f}_{i,j}$  в ячейке  $(i, j)$  для контрольного объема в уравнениях импульса на разнесенной сетке.

$$f_{ri+\frac{1}{2},j} = (0.5 + o_{ri,j})f_{ri,j} + (0.5 - o_{ri+1,j})f_{ri+1,j}$$

$$f_{zi,j+\frac{1}{2}} = (0.5 + o_{zi,j})f_{zi,j} + (0.5 - o_{zi,j+1})f_{zi,j+1}$$

При таком разделении силы поверхностного натяжения действуют только в тех ячейках, где непосредственно существует межфазная граница.

Эти выражения завершают конечно-разностную аппроксимацию уравнений (3.17) и (3.18).

#### 4.1.2 Определение положения межфазной границы из кинематического условия.

В VOF методе положение межфазной границы рассчитывается на основе поля фракции  $F$  [61,62,126] (Глава 3, с. 77), которое на каждом временном шаге определяется из адвективного уравнения (3.39). Это удобно в случае значительных деформаций поверхности раздела (инжекция, падение капли, всплывание пузырьков). При термокапиллярной конвекции свободная поверхность жидкости подвергается незначительным деформациям, вследствие чего для определения ее положения удобно воспользоваться кинематическим условием.

При отсутствии испарения скорость пленки свободной поверхности и скорость жидкости под свободной поверхностью должны быть равными, поэтому в осесимметричном случае и в безразмерном виде имеем:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial r} = v, \quad (4.3)$$

где  $h = h(r, t)$  — форма свободной поверхности, которая в начальный момент времени недеформирована, т.е.  $h(r, 0) = h_0$ .

Его дискретная аппроксимация

$$h_i^\bullet = h_i + \Delta t \left( \bar{v}_{f_i}^\bullet - \bar{u}_{f_i}^\bullet \frac{\bar{h}_{i+\frac{1}{2}} - \bar{h}_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta r} \right) \quad (4.4)$$

где индекс  $f$  указывает на принадлежность скорости свободной поверхности. Скорость на свободной поверхности определяется из вычисленных значений скорости в соседних ячейках и положения аппроксимационной линии межфазной границы в ячейке. Для каждой ячейки  $(i, j)$ , где вектор нормали ненулевой, имеем:

$$\begin{aligned} \bar{u}_{f_i}^\bullet &= F \cdot 0.25(u_{i-\frac{1}{2},j}^\bullet + u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet + u_{i-\frac{1}{2},j+1}^\bullet + u_{i+\frac{1}{2},j+1}^\bullet) + \\ &+ (1 - F) \cdot 0.25(u_{i-\frac{1}{2},j-1}^\bullet + u_{i+\frac{1}{2},j-1}^\bullet + u_{i-\frac{1}{2},j}^\bullet + u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet) \\ \bar{v}_{f_i}^\bullet &= F \cdot v_{i,j+\frac{1}{2}}^\bullet + (1 - F) \cdot v_{i,j-\frac{1}{2}}^\bullet \end{aligned}$$

Для дальнейших вычислений необходимо заполнить  $F$ -поле на расчетном шаге. Для этого для каждого  $i$  определяется номер  $f$  по  $z$ -координате ячейки, в которой находится межфазная граница:

$$f = \left[ \frac{h_i^\bullet}{\Delta z} \right]$$

Здесь  $[ ]$  — целая часть от аргумента. Для всех  $j < f$  значения  $F_{i,j}^\bullet$  принимаются равными 1, для  $j > f$   $F_{i,j}^\bullet = 0$ , а при  $j = f$  находится межфазная граница и

$$F_{i,f}^\bullet = \left\{ \frac{h_i^\bullet}{\Delta z} \right\}$$

$\{ \}$  — дробная часть от аргумента.

Такой подход позволяет определять форму межфазной границы более гладко и вычисленное по ней поле фракции  $F$  получается равномерным, без дополнительных скачков внутри жидкости или газа, т.е. ниже свободной поверхности находится только жидкость, а выше — газ.

### 4.1.3 Вычисление кривизны межфазной границы.

Когда форма свободной поверхности определена, необходимо вычислить ее кривизну. Согласно формуле (3.22) кривизну в осесимметричных координатах можно записать через компоненты вектора нормали:

$$\varkappa = \ddot{h}(n_z)^3 - \frac{n_r}{r} \quad (4.5)$$

Вектор нормали уже известен из (3.40), нужно только вычислить вторую производную. Здесь опять же удобно представление свободной поверхности в виде (4.4). Тогда

$$\ddot{h}\Big|_i \approx \frac{h_{i+1} - 2h_i + h_{i-1}}{(\Delta r)^2}$$

и  $\varkappa_{i,j}$  из (4.5) примет соответствующие значения в ячейках с межфазной границей и нулевые в остальных ячейках.

## 4.2 Исходные данные программы «Термокапиллярная конвекция». Этапы численного счета.

Для моделирования конвективных течений по схеме, описанной в Главе 3, на языке C++ создана программа «Термокапиллярная конвекция». Все необходимые данные задаются в виде текстового файла. Пример такого файла:

```

EXPERIMENT_TITLE      = Experiment 1
EXPERIMENT_COMMENT    = Test case no.1
GAS_THICKNESS_PART    = 3
LIQ_THICKNESS         = 0.00081
SUB_THICKNESS         = 0.002
POWER_LASER           = 0.0209
RADIUS_LASER          = 0.00125
RADIUS_LIMIT          = 0.02
EPSILON               = 0.1
N_STEPS               = 50
M_STEPS               = 100
COURANT               = 0.001
TIME_LIMIT            = 10
OUTPUT_TIME           = 0.01
include               = octane.txt
include               = air.txt
include               = ebonite.txt

```

Все линейные размеры задаются в метрах. Значение `GAS_THICKNESS_PART` означает долю газа в расчетной области и вся область расчета по координате  $z$  определяется:  $(1+\text{GAS\_THICKNESS\_PART}) \cdot \text{LIQ\_THICKNESS}$ . `SUB_THICKNESS` — толщина подложки, для которой рассчитывается температурное поле. `POWER_LASER` и `RADIUS_LASER` — мощность пучка лазера и его толщина соответственно в ваттах и метрах. `RADIUS_LIMIT` — расчетная область по координате  $r$ . `N_STEPS` и `M_STEPS` — число шагов по  $z$  в слое жидкости и по  $r$ . Задавая значения `EPSILON` и `COURANT` можно регулировать расчетный шаг по времени (см. ниже). `TIME_LIMIT` — время окончания расчета и `OUTPUT_TIME` — шаг по времени вывода результатов расчета в файл.

Свойства жидкости, газа и подложки задаются в виде текстовых файлов и включаются в расчетный файл.



Шаг сетки вычисляется следующим образом:

$$\Delta r = \frac{\text{RADIUS\_LIMIT}}{\text{M\_STEPS} + 0.5}$$

$$\Delta z = \frac{\text{LIQ\_THICKNESS}}{\text{N\_STEPS} + 0.5}$$

и число шагов сетки по  $z$  координате для подложки и газо-жидкостной среды:

$$N_s = \left\lceil \frac{\text{SUB\_THICKNESS}}{\Delta z} \right\rceil$$

$$N_l = \left\lceil \frac{(1 + \text{GAS\_THICKNESS\_PART}) \cdot \text{LIQ\_THICKNESS}}{\Delta z} \right\rceil$$

Прежде чем переходить к непосредственному счету, нужно определить шаг по времени. Поскольку используется явная схема, для устойчивости необходимо выполнение четырех условий для временного шага  $\Delta t$ :

- для скорости: условие Куранта–Фридриха–Леви:

$$\Delta t \leq \Delta t_{CFL} = \frac{\Delta r}{V}$$

где  $V$  — максимальная из всех скоростей  $|u_{i+\frac{1}{2},j}^\bullet|$ ,  $|v_{i,j+\frac{1}{2}}^\bullet|$

- для теплопроводности:

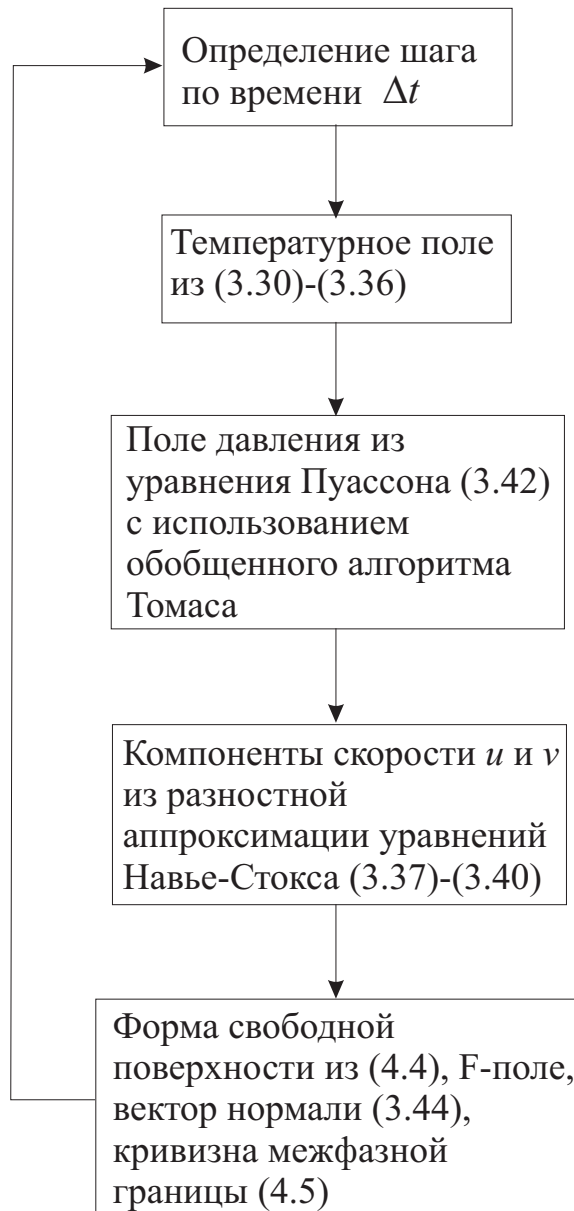
$$\Delta t \leq \Delta t_{th} = \frac{(\Delta r)^2}{2\kappa}$$

- для вязкости (Roache, 1972):

$$\Delta t \leq \Delta t_{vis} = \frac{\rho(\Delta r)^2}{2\mu}$$

- для поверхностного натяжения (Brackbill et al., 1992):

$$\Delta t \leq \Delta t_{s.t.} = \sqrt{\frac{\rho_l + \rho_g}{4\pi\sigma_0}} (\Delta r)^{1.5}$$



**Рис. 4.2.** Блок-схема вычислений в программе «Термокапиллярная конвекция».

Свойства среды являются величинами постоянными, в то время, как  $\Delta t_{CFL}$  зависит от максимальной скорости  $V$  в данный момент. Когда скорость в среде возрастает,  $\Delta t_{CFL}$  уменьшается и становится значимым для определения временного шага  $\Delta t$ .

Для регулирования значения  $\Delta t$  используются дополнительные константы, которые задаются как внешний параметр при вводе, это число EPSILON и число Куранта COURANT. В начале всего счета определяется величина  $\Delta t_{min} = \text{EPSILON} \cdot \min\{\Delta t_{th}, \Delta t_{vis}, \Delta t_{s.t.}\}$ . Перед каждый новым шагом вычислений определяется наименьшее из значений  $\Delta t_{min}$  и  $\text{COURANT} \cdot \Delta t_{CFL}$ . Полученная величина и является расчетным шагом по времени

Вычисления, проводимые в программе «Термокапиллярная конвекция» можно представить в виде блок-схемы, Рис. 4.2.

### **4.3 Обсуждение основных результатов работы программы «Термокапиллярная конвекция».**

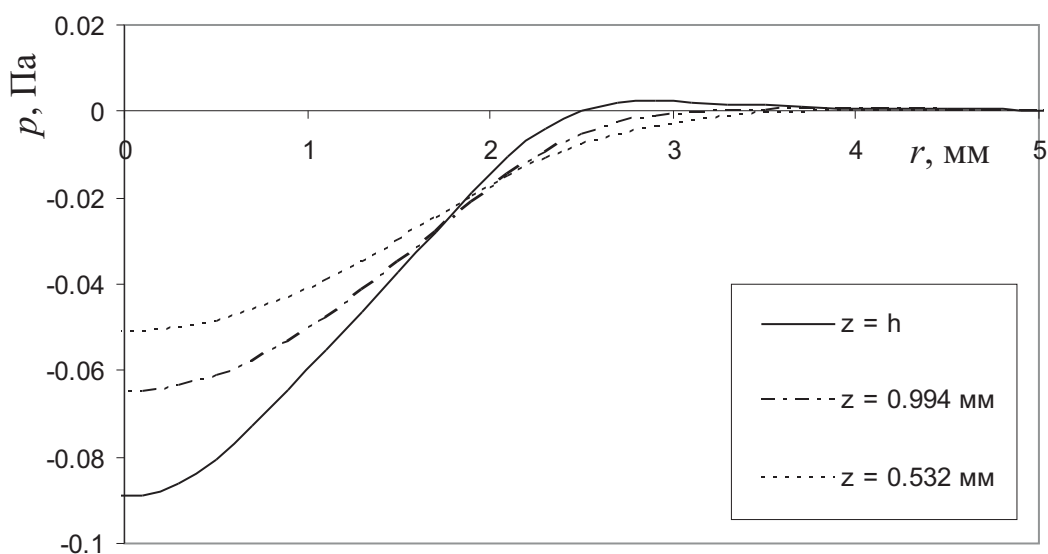
При помощи программы «Термокапиллярная конвекция» была проведена серия расчетов, результаты которых сравнивались с работами других авторов и физическими экспериментами, проводимыми в лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии». В этом параграфе приводятся некоторые из этих результатов. Показано начало деформации свободной поверхности, развитие температурного поля с учетом конвекции и поля давлений. Построены поля скоростей внутри слоя жидкости и проанализировано поведение скорости на свободной поверхности.

#### **4.3.1 Процесс установления профиля термокапиллярной деформации.**

Прежде чем переходить к рассмотрению процессов внутри жидкости, сначала необходимо уделить внимание поведению свободной поверхности. Интерес составляет движение свободной поверхности — распределение компонент скорости на поверхности, развитие ее деформации во времени

и изменение давления под поверхностью.

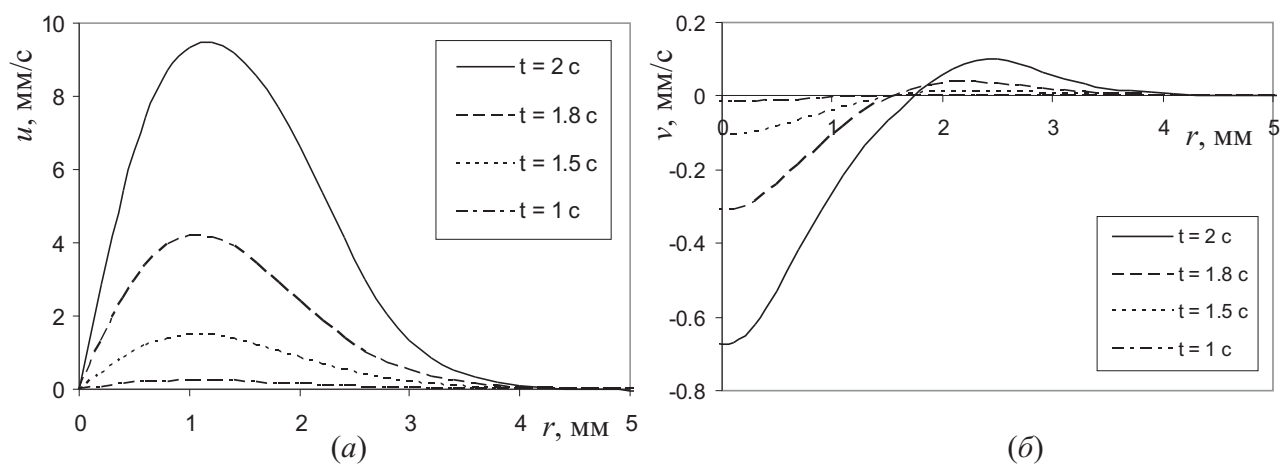
Под действием градиента поверхностного натяжения жидкость на свободной поверхности растекается, образуя углубление. Под этим углублением вследствие отрицательной кривизны возникает отрицательное давление Лапласа (давление подсоса). На Рис. 4.3 показано распределение давления  $p$  по радиусу под свободной поверхностью и на различной глубине.



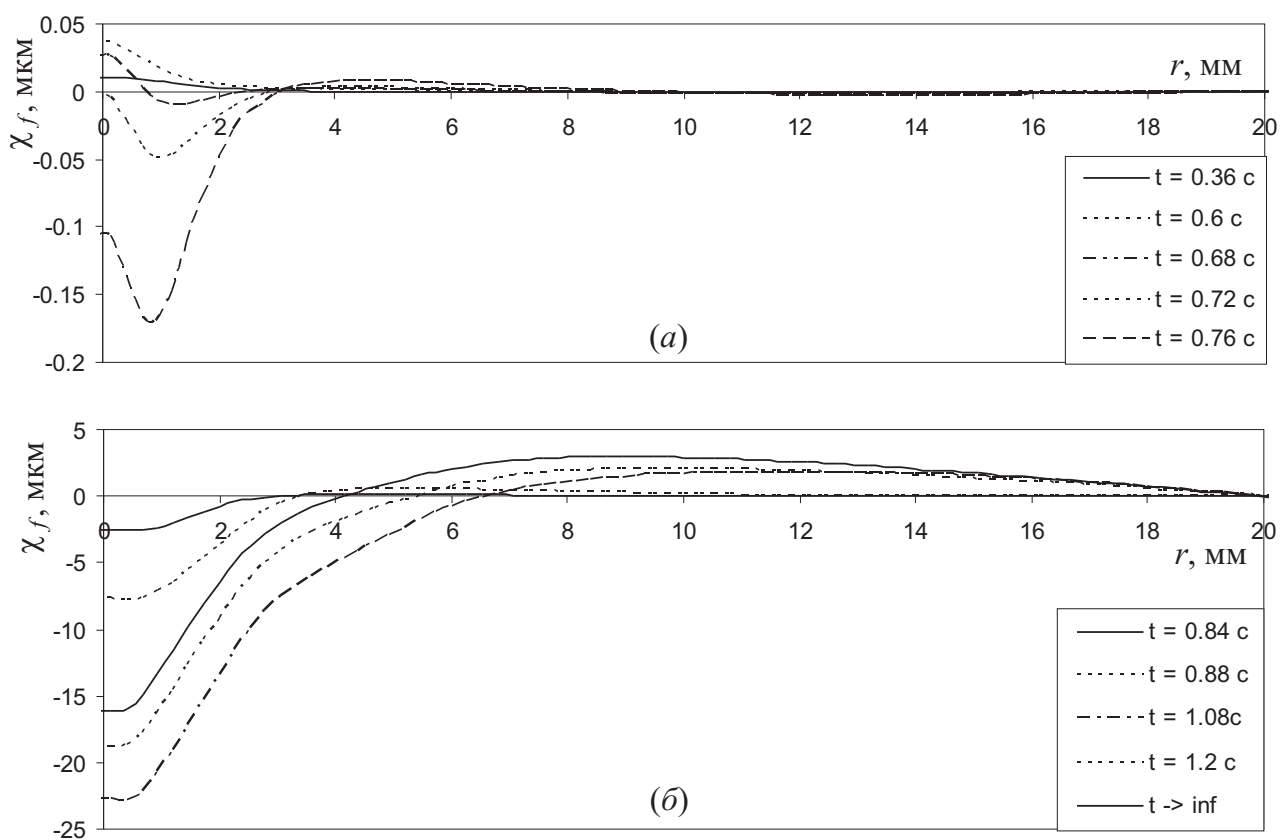
**Рис. 4.3.** Профиль давления на различных глубинах для слоя воды толщиной 1.41 мм при  $t = 2$  с

На Рис. 4.4 показано распределение радиальной (а) и вертикальной (б) скоростей на свободной поверхности жидкости в различные моменты времени. Качественное поведение скорости аналогично полученным в работах [49, 100], движение жидкости локализовано. Вертикальная составляющая начиная с некоторого момента становится отрицательной. Это говорит о том, что появляется движение поверхности, направленное внутрь слоя, т.е. начинается искривление поверхности, которое увеличивается со временем.

После начала конвективных течений вследствие изменения поверхностного натяжения жидкости и ее растекания, свободная поверхность начинает деформироваться, образуется термокапиллярное углубление. На Рис. 4.5 изображен профиль термокапиллярной



**Рис. 4.4.** Профили вертикальной и горизонтальной составляющих скорости на свободной поверхности для слоя воды толщиной 1.41 мм.



**Рис. 4.5.** Формирование профиля термокапиллярной деформации свободной поверхности жидкости. Слой *n*-октана толщиной 1.5 мм, мощность пучка лазера 20.9 мВт.

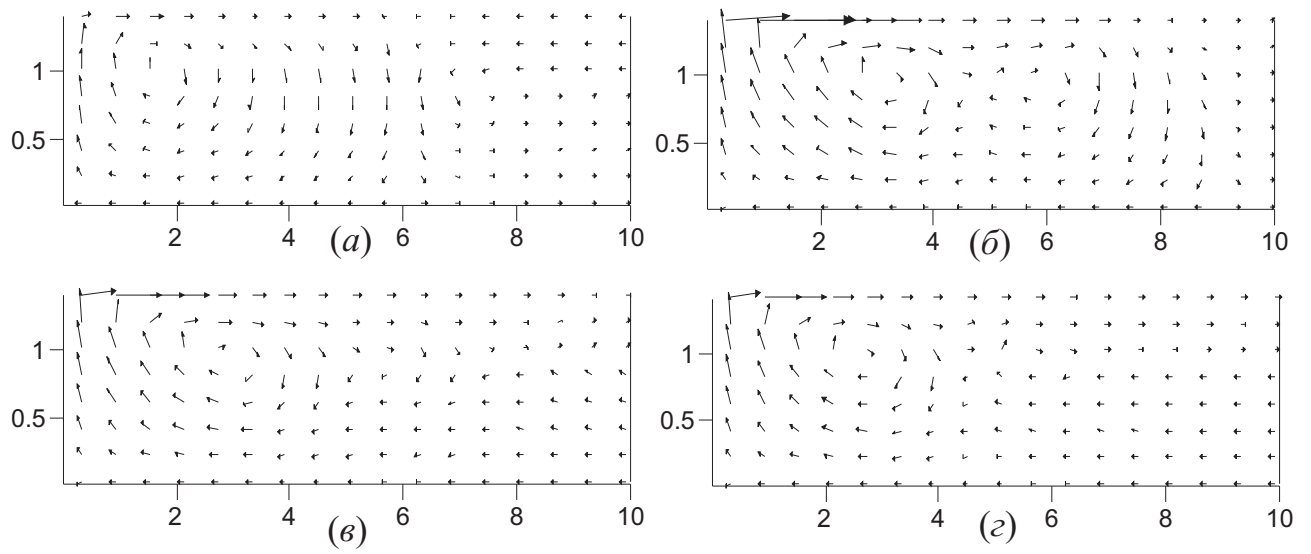
деформации свободной поверхности в различные моменты времени и в установившемся режиме. В модели учитывается движение жидкости под действием теплового расширения и гравитации. Это вызывает небольшое поднятие холмика жидкости на начальной стадии конвекции. Эта ситуация изображена на Рис. 4.5(а).

С некоторого момента времени жидкость растекается и формируется углубление. На Рис. 4.5(б) изображено формирование этого углубления. Из графиков видно, что максимальная глубина термокапиллярного зеркала достигается не в стационарном положении, а в процессе его формирования. Для слоя *n*-октана толщиной 810 мкм этот момент соответствует времени  $t = 1.08$  с от начала теплового воздействия пучком лазера. В дальнейшем поверхности незначительно поднимается и течения и профиль стационаризируются.

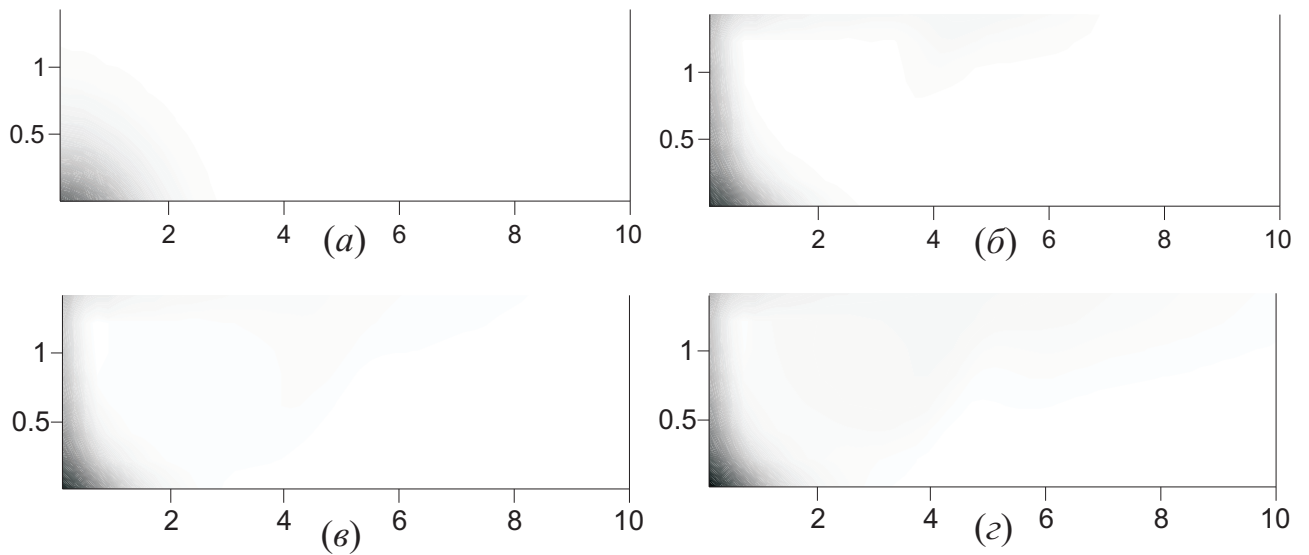
### 4.3.2 Эволюция полей температуры и скоростей.

В предыдущем параграфе рассматривались распределения скоростей и давлений под свободной поверхностью. Мы уже говорили о том, что под свободной поверхностью жидкости вследствие растекания и ее деформации образуется отрицательное лапласово давление, т.е. подсос. Закон сохранения массы требует, чтоб свежая жидкость двигалась в освобожденное пространство (возвратное течение), таким образом образуется конвективное движение. В слое жидкости возникает торроидальный вихрь.

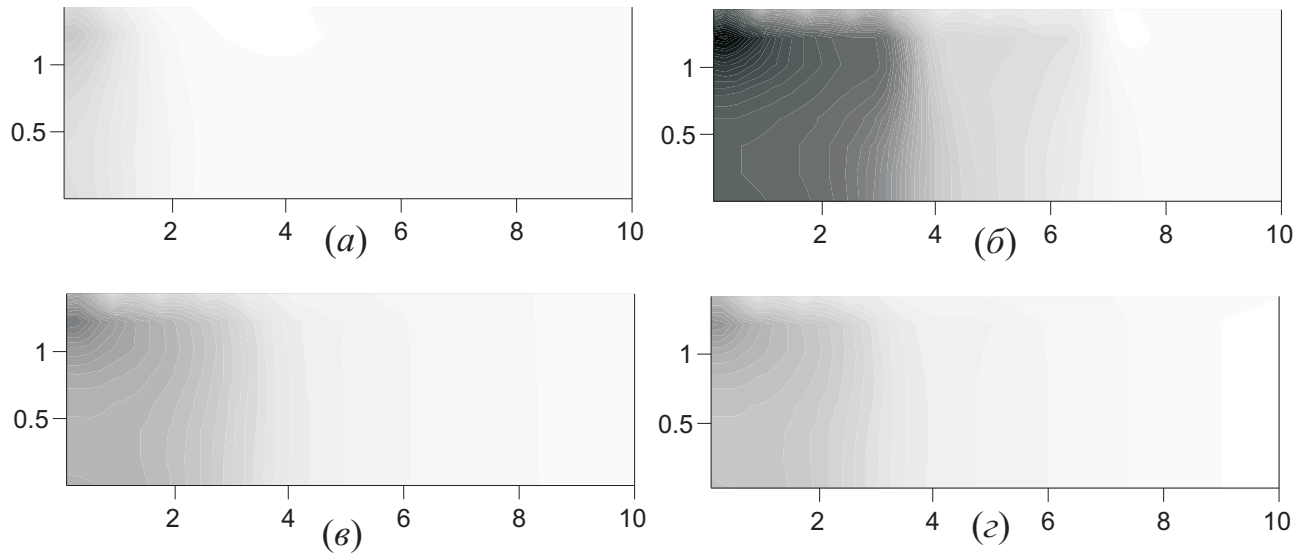
При проведении экспериментов по термокапиллярной конвекции был обнаружен всплеск (Глава 1, с. 20). На Рис. 4.6 изображены векторные поля скоростей в различные моменты времени ((а) — начало деформации свободной поверхности, (б) — достижение максимального углубления, (в) — некоторый момент после всплеска) и при установлении движения (г). На рисунках хорошо видно, как образуется вихрь. Максимальная скорость жидкости достигается на свободной поверхности около 10–15 см/с на момент всплеска, но не превышая этого значения. В стационарном состоянии для рассматриваемого случая максимальная скорость составляет величину 7 см/с.



**Рис. 4.6.** Поля скоростей при  $t = 1.26, 2.16, 3$  с и при  $t \rightarrow \infty$  для слоя  $n$ -октана толщиной 1.41 мм.



**Рис. 4.7.** Поля температуры при  $t = 1.26, 2.16, 3$  с и при  $t \rightarrow \infty$  для слоя  $n$ -октана толщиной 1.41 мм.



**Рис. 4.8.** Поля давлений при  $t = 1.26, 2.16, 3$  с и при  $t \rightarrow \infty$  для слоя н-октана толщиной 1.41 мм.

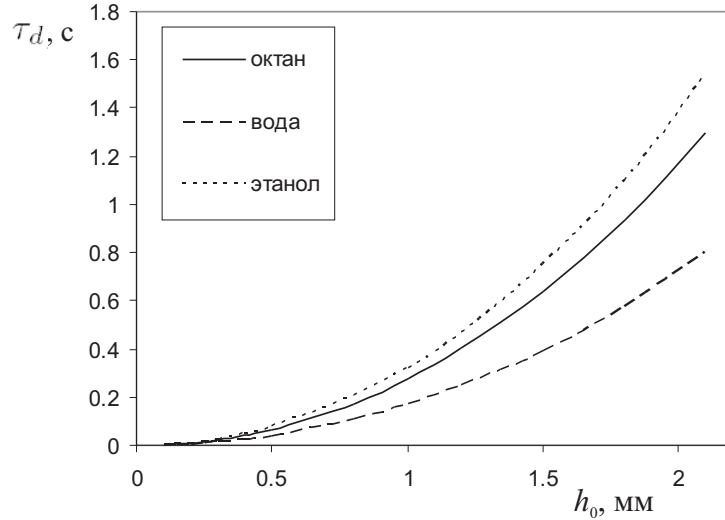
Конвективные течения охлаждают жидкость и подложку. Следовательно в установившемся режиме максимальная температура в системе будет меньше, чем при отсутствии конвекции. На Рис. 4.7 можно увидеть температурные поля в жидкости с учетом конвективных течений. Здесь максимальный нагрев на границе жидкости и подложки достигается  $\Delta T = 7.5$  К. Тепловое возмущение за счет течения жидкости распространяется на большее расстояние, чем при отсутствии движения.

Выше уже было сказано, что давление в слое жидкости связано с деформацией свободной поверхности. На Рис. 4.8 изображены поля давлений в указанные моменты времени. Видно, что наименьшее лапласово давление достигается при максимальной деформации свободной поверхности.

### 4.3.3 Время задержки и всплеск термокапиллярной конвекции. О критерии начала конвекции.

В главах 1 и 2 уже шла речь о времени задержки и возможности его использования на практике, в частности в лазерной диагностике жидкостей. Одной из центральных задач диссертации было отыскание времени задежки термокапиллярной конвекции. Для этого необходимо ввести критерий начала конвективных течений.





**Рис. 4.9.** Время задержки термокапиллярной конвекции рассчитанное по программе «Термокапиллярная конвекция». Мощность пучка лазера 20.9 мВт.

Известно, что ненулевые значения скоростей начинаются сразу при изменении температуры, но эти скорости незначительны. При дискретизации уравнений Навье–Стокса известна погрешность их аппроксимации. Особый интерес представляет аппроксимация ускорения, т.е. слагаемых  $\partial u/\partial t$  и  $\partial v/\partial t$  в уравнениях (3.17) и (3.18) соответственно:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j}^{\bullet} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta t} + O(\Delta t),$$

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}^{\bullet} - v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + O(\Delta t).$$

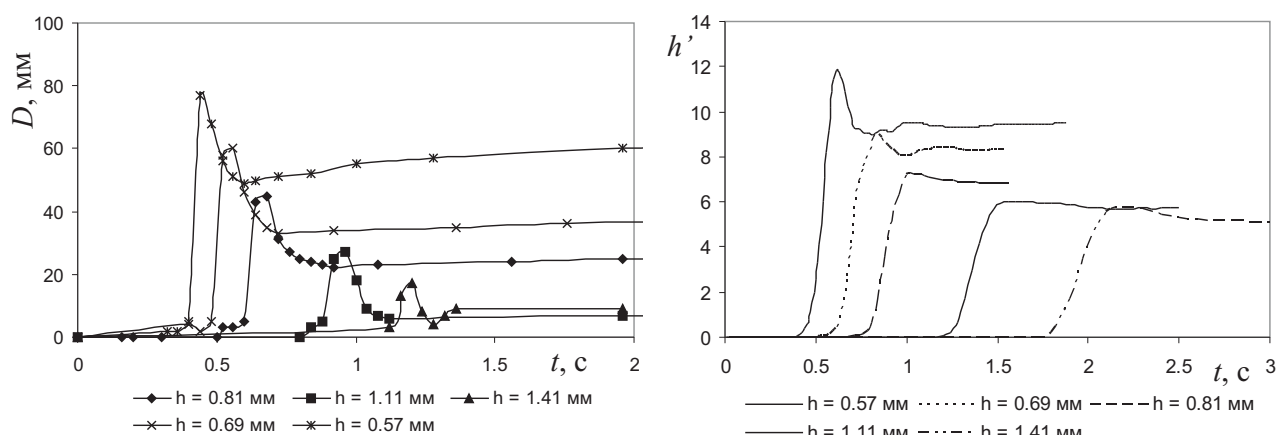
Вследствие этого в качестве критерия начала конвекции автором был предложен следующий подход. После вычисления поля скоростей и формы свободной поверхности определяется максимальное ускорение на текущем шаге, т.е.:

$$\max_{i,j} \left( \frac{u_{i+\frac{1}{2},j}^{\bullet} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta t}, \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}^{\bullet} - v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right)$$

Когда это значение превысит погрешность аппроксимации  $\Delta t$ , то считаем, что конвекция началась.

На Рис. 4.9 представлена зависимость вычисленного времени задержки термокапиллярной конвекции от толщины слоя для различных жидкостей. Качественно зависимость соответствует экспериментальным

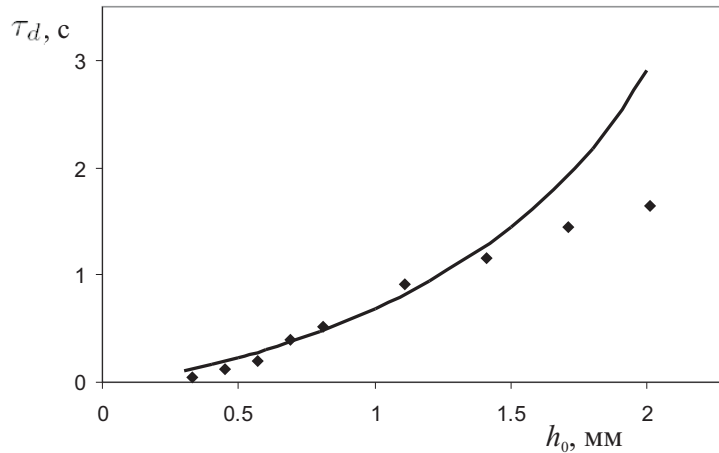
(Глава 2), однако численно они отличаются на некоторый коэффициент. Для определения времени задержки, приемлемого для практического применения, необходим подходящий критерий. Этот критерий должен быть предложен экспериментаторами.



**Рис. 4.10.** Зависимость диаметра отклика (слева) и тангенса максимального угла наклона свободной поверхности (справа).

Из экспериментов известно, что диаметр термокапиллярного отклика связан с максимальным углом наклона деформированной свободной поверхности. На Рис. 4.10 изображена зависимость от времени тангенса угла наклона межфазной границы в точке перегиба, вычисленная на основе построенной математической модели для различных слоев  $n$ -октана. На графике видны все стадии, наблюдаемые в эксперименте. Следовательно, модель адекватно описывает наблюдаемые в эксперименте задержку термокапиллярной деформации, всплеск и стационаризация.

Из Рис. 4.10 видно, что некоторое время свободная поверхности остается практически недеформируемой, однако конвекция уже наступила и максимальные скорости достигают значения порядка 1 мм/с. На Рис. 4.5 видно и об этом уже говорилось, что вначале в слое образуется небольшое поднятие жидкости за счет ее расширения. Поэтому можно предложить критерий начала деформации свободной поверхности из формирования углубления. Считать время задержки в момент времени, когда на оси симметрии жидкость начинает прогибаться. При таком критерии были проведены расчеты для  $n$ -октана и они сравниваются с экспериментальными данными. Полученные результаты приведены на



**Рис. 4.11.** Время задержки термокапиллярной деформации рассчитанное по программе «Термокапиллярная конвекция».

Рис. 4.11. Точного совпадения нет, однако для толщин до 1.5 мм расхождение незначительно. Здесь стоит отметить также, что вычисленные значения получены без экспериментальных данных, для расчетов брались только известные свойства жидкости, подложки и пучка лазера.

## Выводы.

1. Численная схема, описанная в Главе 3, реализована в программном комплексе «Термокапиллярная конвекция». Программа позволяет вычислять поля температуры с конвективными слагаемыми, поля скоростей и давлений и деформацию свободной поверхности.
2. При реализации VOF метода предложен специальный метод определения поля жидкой фракции через форму свободной поверхности, которая в свою очередь вычисляется на основе кинематического условия.
3. На основе построенной модели получено формирование и установление профиля свободной поверхности жидкости. Вычислено распределение компонент скоростей и давления под свободной поверхностью и в слое жидкости.
4. Построены поля температур и векторные поля скоростей, из которых видно образование торроидального вихря.

## Заключение.

В диссертационной работе проведено теоретическое исследование ТК конвекции в тонком слое прозрачной жидкости на поглощающей подложке, индуцированной тепловым действием лазерного пучка, построена математическая модель этого явления и реализована программа для численного счета процессов тепло- и массопереноса. Наиболее существенные результаты работы следующие:

1. Построена модель распространения тепла до начала конвективных течений в жидкости. Получены коэффициенты разделения теплового потока в жидкость и подложку. На основе этой модели вычислено время задержки термокапиллярной конвекции, построена ее зависимость от толщины слоя жидкости и мощности пучка лазера.
2. Разработана и реализована программа «Время задержки» на языке C++, которая на основе интегрирования выражений (2.15) и (2.17) позволяет вычислять температурные поля в системе «жидкий слой–подложка», запускающее температурное возмущение и время задержки термокапиллярной конвекции.
3. Впервые для моделирования термокапиллярной конвекции было предложено использовать новый метод решения задач со свободными границами — VOF метод. С учетом сил Марангони в динамическом условии на свободной поверхности выведены балансные уравнения для реализации этого метода.
4. На основе VOF метода построена термогидродинамическая модель термокапиллярной конвекции в слое прозрачной жидкости на поглощающей подложке. Учитывается распространение тепла в подложку и жидкость. Определение межфазной границы основано

на кинематическом условии и уже после ее определения вычисляется поле жидкой фракции  $F$  на расчетном шаге.

5. Построен комплекс программ «Термокапиллярная конвекция» для реализации построенной модели, который позволяет получить поле температур, скоростей и давлений, а также профиль деформации свободной поверхности.
6. Предложенная математическая модель хорошо описывает всплеск термокапиллярной конвекции и качественно согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

Результаты, полученные в настоящей работе, могут использоваться в практических целях, для теоретического (без эксперимента) определения зависимости процессов, протекающих в слое жидкости, от различных свойств системы «лазерный пучок–жидкий слой–подложка». При наличии подходящего критерия для определения времени задержки термокапиллярной конвекции построенная модель может быть использована в методах лазерной диагностики жидкостей. Например, по экспериментально найденному времени задержки математическая модель позволит определить физические свойства исследуемой жидкости, что будет бесконтактным методом ее изучения.

Данная работа и предложенный комплекс программ может стать основой для создания полноценной программы для моделирования термокапиллярной конвекции с различным расположением источника тепла. Возможно также применение проведенного исследования в учебном процессе.

В заключение хочу поблагодарить моего научного руководителя КУТРУНОВА Владимира Николаевича за поддержку в работе над диссертационным исследованием, полезные советы и направление в проводимом исследовании. Соруководителя БЕЗУГЛОГО Бориса Антоновича, предложившего интересную тему исследования и плодотворные дискуссии в лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии». Сотрудников лаборатории за возможность совместной работы, и в особенности ЧЕМОДАНОВА

Сергея Игоревича за предоставленные экспериментальные данные. За интерес к исследуемому явлению и полезные дискуссии благодарю ШАБАРОВА Александра Борисовича, КУЗНЕЦОВА Владимира Васильевича, АНДРЕЕВА Виктора Константиновича и АКТЁРШЕВА Сергея Петровича.

## Литература

- [1] *Bezuglyi B.A., Fedorets A.A., Tarasov O.A.* Laser diagnostics of liquids and its layers // First Conference of the International Marangoni Association. — Giessen, Germany. — 2001. — P. 84–85.
- [2] *Bezuglyi B.A., Chemodanov S.I., Tarasov O.A.* New approach to diagnostics of organic impurities in water // Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects. — 2004. — V. 239. — P. 11–17.
- [3] *Агровский Б.С., Богатуров А.Н., Зуев В.И., Ольхов В.М.* Измерение распределений температуры в конвективном потоке, наведенным мощным тепловым излучением // Инж.-физ. Ж. — 1988. — Т. 54. — № 6. — С. 980–982.
- [4] *Chen S., Grigoropoulos C.P.* Noncontact nanosecond-time-resolution temperature measurement in excimer laser heating of Ni-P disk substrates // Appl. Phys. Lett. — 1997. — V. 71. — N. 22. — pp. 3191–3193.
- [5] *Безуглый Б.А., Тарасов О.А., Федорец А.А.* Применение ТК эффекта для измерения толщины тонкого слоя жидкости // Вестник Тюменского госуниверситета. — 2000. - № 3. — С. 64–67.
- [6] Патент РФ № 2149353. Способ измерения толщины тонкого слоя прозрачной жидкости. *Безуглый Б.А., Тарасов О.А., Федорец А.А., Шепеленок С.В.* — Бюл. № 14 // Изобретения. — 2000.
- [7] *Безуглый Б.А., Федорец А.А.* Лазерный метод измерения толщины тонкого слоя жидкости на твердой поверхности с помощью ТК отклика // Письма в ЖТФ. — 2001. — № 9. — С. 20–25.
- [8] Патент РФ № 2165071. Способ измерения толщины тонкого слоя

прозрачной жидкости. *Безуглый Б.А., Федорец А.А.* — Бюл. № 10 // Изобретения. — 2001.

- [9] Патент РФ № 2178155. Способ измерения мощности лазерного пучка и энергии лазерного импульса. *Безуглый Б.А., Федорец А.А.* — Бюл. № 1 // Изобретения. — 2002.
- [10] Патент РФ № 2201587. Бесконтактный способ измерения вязкости. *Безуглый Б.А., Федорец А.А.* — Бюл. № 9. // Изобретения — 2003.
- [11] *Ozkan M., Pisanic T., Scheel J., Barlow C., Esener S., Bhatia S.N.* Electro-optical platform for the manipulation of live cells. // *Langmuir*. — 2003. — V. 19. — pp. 1532–1538.
- [12] *Lehane C., Kwok H.S.* Enhanced drilling using a dual-pulse Nd:YAG laser // *Appl. Phys.* — 2001. — A 73. — pp. 45–48.
- [13] *Balandin V.Yu., Niedrig R., Bostanjoglo O.* Simulation of transformations of thin metal films heated by nanosecond laser pulse // *J. Appl. Phys.* — 1995. — V. 77. — N. 1. — pp. 135–142.
- [14] *Майоров В.С., Матросов М.П.* Влияние ПАВ на гидродинамику лазерного легирования металлов // *КЭ* — 1989. — Т. 16. — № 4. — С. 806–810.
- [15] *Chung F.K., Wei P.S.* Mass, momentum and energy transport in a molten pool, when welding dissimilar metals // *J. Heat Transfer*. — 1999. — V. 121. — pp. 451–461.
- [16] *Wei P.S., Chung F.K.* Unsteady Marangoni flow in a molten pool when welding dissimilar metals // *Metall. Mater. Trans.* — 2000. — V. 31B. — N. 6, — pp. 1387–1403.
- [17] *Lei Y.P., Murakawa H., Shi Y.W., Li X.Y.* Numerical analysis of the competitive influence of Marangoni flow and evaporation on heat surface temperature and molten pool shape in laser surface remelting // *Computational Materials Science*. — 2001. — V. 21. — pp. 276–290.



- [18] Рыкалин Н.Н., Красулин Ю.Л. Оценка энергетических параметров сварки металлов световым потоком лазера // Доклады Академии наук СССР. — 1965. — Т. 163. — № 1. С. 87–90.
- [19] Софонов А.Н. Технологические процессы лазерной обработки материалов // Технологическое оборудование и материалы. — 1998. — № 5.
- [20] Антонова Г.Ф., Гладуш Г.Г., Красюков А.Г., Косырев Ф.К., Родионов Н.Б. О механизме дистанционной резки металлов излучением  $CO_2$ -лазера // ТВТ. — 2000. — Т. 38. — № 3. — С. 501–506.
- [21] Bénard H. Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide // Rev. generales Sci. pures et appliquées. — 1900. — N 11. — pp. 1261–1271, 1309–1328.
- [22] Bénard H. Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide transportant de la chaleur par convection en regime permanent // Anns. Chim. Phys. — 1901. — N. 23. — pp. 62–144.
- [23] Rayleigh Lord. On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side // Phil. Mag. Ser.6. — 1916. — V. 32. — N. 192. — pp. 529–546.
- [24] Pearson J.R.A. On convection cells induced by surface tension // J. Fluid Mech. — 1958. — V. 4. — N. 5. — pp. 489–500.
- [25] Безуглый Б.А., Галашин Е.А., Дудкин Г.Я. О фотоконденсации йода. // Письма в ЖЭТФ. — 1975. — № 22(2). — с. 76–9.
- [26] Безуглый Б.А., Низовцев В.В. Капля, рожденная Солнцем // Химия и жизнь. — 1977. — № 7. — С. 33–36.
- [27] Da Costa G., Calatrony J. Thermocapillary liquids as transient photographic receivers // Proceedings International Commission for Optics Conference. — Madrid, 1978. — pp. 779–782.

- [28] *Da Costa G., Calatrony J.* Self-holograms of laser induced surface depression in heavy hydrocarbons // *Appl. Opt.* — 1978. — V. 17. — N. 15. — pp. 2381–2385.
- [29] Авт. свидет. СССР № 1242764. Способ определения вязкости. *Безуглый Б.А., Ланин С.Н., Низовцев В.В.* Оpubл. 07.07.86. — Бюл. № 25.
- [30] *Безуглый Б.А., Тарасов О.А., Чемоданов С.И.* Эволюция ТК отклика тонкого слоя прозрачной жидкости на поглощающей подложке // Труды IX межотраслевого научного и методического семинара «Теплофизика, гидрогазодинамика, теплотехника». — Тюмень, ТюмГУ. — 2002. — С. 47–52.
- [31] *Безуглый Б.А., Тарасов О.А., Шепеленок С.В.* Применение ТК эффекта для контроля плоскостности жидкой поверхности // Вестник Тюменского госуниверситета. — 1998. — т. 2. — С. 66–71.
- [32] *Безуглый Б.А., Иванова Н.А., Федорец А.А.* Теоретическое и экспериментальное исследование фотоиндуцированной капиллярной конвекции. — Отчет о НИР депонированный в ВИНТИ, № госрегистрации 02.200.1 06846, инв. № 01. 2001103608. — 2001. — 31 с.
- [33] Патент РФ № 2165073. Способ контроля горизонтальности поверхности. *Безуглый Б.А., Федорец А.А.* — Бюл. № 10 // Изобретения. — 2001.
- [34] *Безуглый Б.А.* Капиллярная конвекция, управляемая тепловым действием света, и ее применение в способах регистрации информации // Дис... канд-та физ.-мат. наук. — МГУ, Москва. — 1983. — 214 С.
- [35] *Федорец А.А.* ФТК эффект и его применение для измерения свойств жидкостей // Дис... канд-та физ.-мат. наук. — ТюмГУ, Тюмень. — 2002. — 200 С.

- [36] *Тарасов О.А.* Экспериментальное исследование ТК конвекции, индуцированной лазерным излучением и ее практические применения // Дис... канд-та физ.-мат. наук. — ТюмГУ, Тюмень. — 2002. — 200 С.
- [37] *Da Costa G., Calatrony J.* Transient deformation of liquid surfaces by laser-induced thermocapillarity // *Appl. Opt.* — 1979. — V. 18. — N. 2. — pp. 233–235.
- [38] *Da Costa G.* Real-time recording of light patterns in heavy hydrocarbons: a theoretical analysis // *Appl. Optics.* — 1980. — V. 19. — N. 20. — pp. 3523–3528.
- [39] *Da Costa G.* Self-focusing of gaussian laser beam reflected from a thermocapillary liquid surface // *Phys. Lett.* — 1980. — V. 80A. — N. 4. — pp. 320–322.
- [40] *Da Costa G.* Thermocapillary self-focusing of a laser beam: a theoretical analysis // *Phys. Lett.* — 1980. — V. 80A — N. 4. — pp. 323–324.
- [41] *Da Costa G.* Competition between capillary and gravity forces in a viscous liquid film heated by a Gaussian laser beam // *J. Physique.* — 1982. — V. 43. — N. 10. — pp. 1503–1508.
- [42] *Da Costa G., Bentolila F., Ruiz E.* Laser induced thermohydrodynamic effect in thin liquid membranes // *Phys. Lett.* — 1983. — V. 95A. — N. 6. — pp. 313–315.
- [43] *Da Costa G., Escalona R.* Time evolution of the caustics of a laser heated liquid film // *Applied Optics.* — 1990. — V. 29. — N. 7. — pp. 1023–1033.
- [44] *Гладуш Г.Г., Красицкая Л.С., Левченко Е.Б., Черняков А.Л.* ТКК в жидкости под действием мощного лазерного излучения // *КЭ.* — 1982. — Т. 9. — № 4. — С. 660–667.

- [45] *Calatroni J., Da Costa G.* Interferometric determination of the surface profile of a liquid heated by a laser beam // *Optics commun.* — 1982. — V. 42. — N. 1. — pp 5–9.
- [46] *Chan C., Mazumder J., Chen M.M.* A two-dimensional transient model for convection in laser melted pool // *Metall. Trans.* — 1984. — V. 15A. — pp. 2175–2184.
- [47] *Gied W.H., Wei X.-C., Wei S.-R.* Effect of surface convection on stationary GTA weld zone // *Welding Research Supplement.* — 1984. — pp. 376–381.
- [48] *Helmerts H., Witte W.* Holographic study of laser-induced liquid surface deformations // *Optics Communications.* — 1984. — V. 49. — N. 1. — pp. 21–23.
- [49] *Альварес-Суарес В.А., Рязанцев Ю.С.* О ТК движении, вызванном локальным нагревом жидкости импульсом ультрафиолетового излучения // *МЖГ* — 1986. — № 6. — С. 165–167.
- [50] *Сейдгазов Р.Д., Сенаторов Ю.М.* ТК механизм глубокого проплавления материалов лазерным излучением // *КЭ* — 1988. — Т. 15. — № 3. — С. 622–624.
- [51] *Низовцев В.В.* Капиллярная конвекция в жидком слое при лазерном облучении // *ИФЖ.* — 1988. — т. 55. — № 1. — С. 85–92.
- [52] *Визнюк С.Ф., Суходольский А.Т.* О ТК самовоздействии лазерного излучения в тонких слоях поглощающей жидкости // *КЭ* — 1988. — Т. 15. — № 4. — С. 767–770.
- [53] *Низовцев В.В.* Исследование стимулированной локальным облучением естественной конвекции в тонком слое испаряющейся жидкости // *ПМТФ* — 1989. — № 1. — С. 138–145.
- [54] *Viznyuk S.A., Rastopov S.F., Sukhodol'skii A.T.* On thermocapillary aberrational transformation of laser beams // *Optics Communications.* — 1989. — V. 71. — № 5. — pp. 239–243.

- [55] *Гладуш Г.Г., Дробязко С.В., Лиханский В.В., Лобойко А.И., Сенаторов Ю.М.* ТК конвекция при лазерном нагреве поверхности // КЭ 1998. — Т. 25. — № 5. — С. 439–442.
- [56] *Безуглый Б.А., Иванова Н.А.* Явления переноса и безразмерные комплексы. // Вестник Тюменского госуниверситета. — 2000. — № 3. — С. 47–60.
- [57] *Безуглый Б.А., Иванова Н.А., Зуева А.Ю.* ТК деформация тонкого слоя жидкости вызванная пучком лазера // ПМТФ. — 2001. — т. 3. — № 42. — С. 130–134.
- [58] *Bezuglyi B.A., Fedorets A.A., Ivanova N.A.* Application of the photoinduced capillary phenomena in liquid microgravity technologies // First Conference of the International Marangoni Association. — Giessen, Germany. — 2001. — P. 116.
- [59] *Безуглый Б.А., Федорец А.А., Тарасов О.А., Иванова Н.А., Зуева А.Ю.* Фотоиндуцированная капиллярная конвекция — новое капиллярное явление. — Отчет по гранту РФФИ № 01-01-652-а. // URL: <http://library.intra.ru>. — 2002.
- [60] *Meier M.* Numerical and experimental study of large steam-air bubbles injected in a water pool. A dissertation for the degree of Doctor of Technical Sciences. — Winterthur (ZH), 1999. — P. 142.
- [61] *James A.J., Lowengrub J.* A surfactant-conserving volume-of-fluid method for interfacial flows with insoluble surfactant // J. of Comput. Physics. — 2004. — N. 201. — pp. 685--722.
- [62] *Wang F., Schultz W.W., Xu G., Hu .S.J., Kannatey-Asibu E., Hou W.* Development of free surface tracking algorithms for fusion welding simulations. — P. 44. URL:// [www-personal.engin.umich.edu/~schultz/Manuscripts/WangSchultzXu.pdf](http://www-personal.engin.umich.edu/~schultz/Manuscripts/WangSchultzXu.pdf)
- [63] *Harlow F.H., Welch J.E.* Numerical calculation of time-dependent vis-

cous incompressible flow of fluid with free surface // The Physics of Fluids. — 1965. — V. 8. — N. 12. — pp. 2182–2189.

- [64] *Пухначев В.В.* Движение вязкой жидкости со свободной границей. Учебное пособие. — Новосибирск. — 1989. — 96 С.
- [65] *Зуева А.Ю., Аксенов А.Н.* Моделирование ФТК деформации тонкого слоя жидкости // Сборник тезисов докладов: Тезисы ВНКСФ9. Т.1. Екатеринбург-Красноярск, 2003. — Изд-во АСФ России, — с. 383–384.
- [66] *В.А. Bezuglyi, F.H. Chapparov, A.A. Fedorets, A.Yu. Zueva.* Experimental setup for investigation of liquid surface deformed by convective flows in thin liquid layer // International Conference “Advanced problems in thermal convection”. Abstracts. Perm, 2003. — p.44–45
- [67] *Горбачева Н.А., Зуева А.Ю., Чемоданов С.И.* Новый метод измерения температуропроводности жидкостей // Федеральная итоговая научно-техническая конференция творческой молодежи России по естественным, техническим, гуманитарным наукам: Тезисы докладов. Звенигород, 15–20 декабря 2003. — М.: Изд-во МИЭМ, 2003. — с. 55–56.
- [68] *Зуева А.Ю., Чемоданов С.И.* Расчет теплового возмущения, вызывающего ТК деформацию, при лазерном нагреве слоя прозрачной жидкости на поглощающей подложке // I Всероссийская конференция студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук». г. Томск, 26-28 апреля 2004 г. Сборник трудов. — Томск: Изд-во Томского политехн. ун-та, 2004. — с. 127–129.
- [69] *Зуева А.Ю.* Моделирование начальной стадии ФТК конвекции // ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ: Труды 36-й Региональной молодежной конференции. Екатеринбург: УРО РАН, 2005. — с. 136–140.

- [70] *Зуева А.Ю.* Математическая модель термокапиллярной конвекции. // Под ред. В.Н. Кутрунова, Б.А. Безуглого. — Тюмень: Изд-во «Вектор Бук», 2006. — 48 с.
- [71] *Зуева А.Ю.* ФТК конвекция: этапы математического моделирования. // Математическое и информационное моделирование: сборник научных трудов. Вып. 7. Тюмень: Изд. “Вектор Бук”. — 2005. — с. 143–153.
- [72] *Безуглый Б.А., Зуева А.Ю., Чемоданов С.И.* Теоретический расчет времени задержки ТК отклика. Тезисы докладов. Всероссийская конференция с участием зарубежных ученых “ЗАДАЧИ СО СВОБОДНЫМИ ГРАНИЦАМИ: ТЕОРИЯ, ЭКСПЕРИМЕНТ И ПРИЛОЖЕНИЯ”, 4–8 июля 2005 г. Бийск. — с. 17, 19.
- [73] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. — 5-е изд., стереот. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 736 с.
- [74] *Scriven L.E., Sternling C.V.* The Marangoni effects. // Nature. — 1960. — V. 187. — pp. 186–188.
- [75] *Scogen N.* Increase of surface tension of certain solutions when brought into contact with hot gases // Am. J. Phys. — 1958. — V. 26. — pp. 25–27.
- [76] *Thompson J.* On certain curious motions observable at the surfaces of wine and other alcoholic liquors // J. Phil. Mag. — 1855. — Ser.4. — N. 10. — p. 330.
- [77] *Tomlison C.* Motions of camphor on water. // Phil. Mag. — 1870. — Ser. 4. — V. 39. — p. 17.
- [78] *Джейкок М., Парфит Жд* Химия поверхностей раздела фаз. Пер. с англ. — М., Мир. — 1984. — 269 с.
- [79] *Marangoni C.G.M.* Sull’ espansione delle gocce di un liquido galleggiante sulla superficie di altro liquido // Fusi, Pavia. — 1865.

- [80] *Marangoni C.G.M.* Ueber die Ausbreitung der Tropfen einer Flüssigkeit auf der Oberfläche einer anderen. *Ann. Phys. Chem. (Poggendorff)* — 1871. — V. 143. — N. 7. — pp. 337–354.
- [81] *Cherni M.* Uber photographie im Ultraroten // *Z. F. Physik.* — 1929. — V. 53. — N. 1.
- [82] *Baumann.* The Fischer large-screen projection system // *J. of SMPTE.* — 1953. — V. 60. — p. 344–356.
- [83] *Hershey A.V.* Ridges in a liquid surface due to the temperature dependence of surface tension // *Phys. Rev.* — 1939. — N. 56. — p. 204.
- [84] *Левич И.Г.* Физико-химическая гидродинамика. — М., 1952; 1959.
- [85] *Федосов А.И.* Влияние ПАВ на движение капель и пузырьков в жидкостях // *ЖФХ* — 1956. — Т. 30. — № 1. — С. 223–227.
- [86] *Hijikata K., Fukasaku Y., Nakabeppu O.* Theoretical and experimental studies on the pseudodropwise condensation of binary vapor mixture // *J. Heat Transfe.* — 1996. — V. 118. — N. 1. — pp. 140–147.
- [87] *Longtin J.P., Hijikaia K., Ogawa K.* Laser-induced surface-tension-driven flows in liquids // *International journal of heat and mass transfer.* — 1999, N. 42. — pp. 85–93.
- [88] *Саночкин Ю.В.* ТКК в тонком слое жидкости, локально нагреваемом сверху // *ПМТФ* — 1983. — № 6. — С. 134–137.
- [89] *Lai C.-L., Greenberg P.S., Chai An-Ti.* Experimental study of TC flows in a thin liquid layer with heat fluxes imposed on the free surface // *Metall. Trans. A.* — 1988. — V. 19A. — N. 8. — pp. 1895–1898.
- [90] *Wu T.-C., Yang Y.-M., Maa J.-R.* Surfactant-induced retardation of the thermocapillary flow at a gas/liquid interface // *Int. Comm. Heat Mass Transfer.* — 2000. — V. 27. — N. 5. — pp. 655–666.



- [91] *Pumir A., Blumenfeld L.* Heat transport in a liquid layer locally heated on its free surface // *Phys. Rev.* 1996. — V. 54 — N. 5. — pp. 4528–4531.
- [92] *Mersier J.-F., Normand C.* Flow driven by a hot wire immersed in a horizontal liquid layer // *International Journal of Heat and Mass Transfer.* — 1999. — N. 42. — pp. 95–100.
- [93] *Братухин Ю.К., Макаров С.О., Мизёв А.И.* Колебательные режимы ТК конвекции от сосредоточенного источника тепла // *МЖГ* — 2000. — № 2. — С. 92–103.
- [94] *Мизёв А.И.* Экспериментальное исследование ТК конвекции, индуцированной локальной температурной неоднородностью вблизи поверхности жидкости. 1. Твердотельный источник тепла // *ПМТФ* — 2004. — Т. 45. — № 4. — С. 36–49.
- [95] *Yilbas B.S.* Laser heating process and experimental validation // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 1997. — V. 40. — N. 5. — pp. 1131–1143.
- [96] *Xu B.Q., Shen Z.H., Lu J., Ni X.W., Zhang S.Y.* Numerical simulation of laser-induced transient temperature field in film-substrate system by finite element method // *Int. J. of Heat and Mass Transfer.* — 2003. — N. 46. — pp. 4963–4968.
- [97] *Ajaev V.S., Willis D.A.* Thermocapillary flow and rupture in films of molten metal on a substrate // *Phys. Fluids.* — 2003. — V. 15. — N. 10. — pp. 3144–3150.
- [98] *Gugliotti M., Baptista M.S., Politi M.J.* Laser-induced Marangoni convection in the presence of surfactant monolayers // *Langmuir.* — 2002. — V. 18. — N. 25. — pp. 9792–9798.
- [99] *Альварес-Суарес В.А., Рязанцев Ю.С., Шевцова В.М.* Теоретическое и экспериментальное исследование конвекции в слое жидкости при локальном нагреве // *ПМТФ* — 1990. — № 2. — С. 53–57.

- [100] *Индейкина А.Е., Рязанцев Ю.С., Шевцова В.М.* Нестационарная термокапиллярная конвекция в слое неравномерно нагретой жидкости // МЖГ — 1991. — № 3. — С. 17–25.
- [101] Заявка на изобретение № 2003135453/28(037969). Способ измерения концентрации поверхностно-активного вещества. *Безуглый Б.А., Тарасов О.А., Чемоданов С.И.* Решение о выдаче патента от 04.12.2003.
- [102] *Kamotani Y., Ostrach S., Masud J.* Surface tension driven convection experiment-2 // Fourth Microgravity Fluid Physics & Transport Phenomena Conference. — 1998. — pp. 263–268.
- [103] *Безуглый Б.А., Иванова Н.А.* Явления переноса и безразмерные комплексы. // Вестник ТюмГУ. — 2000. — № 3. — С. 47–60.
- [104] *Tan K.K., Thorpe R.B.* On convection driven by surface tension caused by transient heat conduction // Chemical Engineering Science. — 1999. — N. 54. — pp. 775–783.
- [105] *Normand Ch., Pomeau Y., Velarde M.G.* Convective instability: a physicist's approach. // Rev. Mod. Phys. — 1977. — V. 49. — N. 3. — pp. 581–624.
- [106] *Block M.J., Harwit M.* Free surface of liquids as an optical element // Journal of the Optical Society of America. — 1958. — V. 48. — N. 7. — pp. 480–482.
- [107] *Nield D.A.* Surface tension and buoyancy effects in cellular convection. // J. Fluid Mech. — 1964. — N. 19. — p. 341.
- [108] *Карслоу Г., Егер Д.* Теплопроводность твердых тел. Пер. со 2-го англ. изд. Под ред. проф. А.А. Померанцева. — М.: Наука, 1964. — 487 с.
- [109] *Zubair S.M., Aslam Chaudhry M.* Heat conduction in a semi-infinite solid due to time-dependent laser source // Int. J. Heat Mass Transfer. — 1996. — V. 39. — N. 14 — pp. 3067–3074.

- [110] *Рыкалин Н.Н.* Расчеты тепловых процессов при сварке. — М.: Машгиз, 1951. — 296 с.
- [111] *Рыкалин Н.Н., Углов А.А., Кокора А.Н.* Лазерная обработка материалов. — М.: Машиностроение, 1975. — 296 с.
- [112] *Рыкалин Н.Н.* Лазерная и электроннолучевая обработка материалов: Справочник. — М.: Машиностроение, 1985. — 496 с.
- [113] *Рыкалин Н.Н., Углов А.А., Анищенко Л.М.* Высокотемпературные технологические процессы: теплофизические основы. — М.: Наука, 1985. — 172 с.
- [114] *Островская Г.Ф.* Деформация свободной поверхности жидкости под действием светового давления. 1. Теория // *ЖТФ* — 1988. — Т. 58. — № 4. — С. 762–768.
- [115] *Комиссарова И.И., Островская Г.Ф., Шедова Е.Н.* Деформация свободной поверхности жидкости под действием светового давления. 2. Эксперимент // *ЖТФ* — 1988. — Т. 58. — № 4. — С. 769–772.
- [116] *Tan M.J., Bancoff S.G., Davis S.H.* Steady TC flows of thin liquid layers // I. Theory. *Phys. Fluids A*. — 1990. — V. 2. — N. 3. — pp. 313–321.
- [117] *Chen S., Johnson D.B., Raad P.E.* Velocity boundary conditions for the simulation of free surface fluid flow // *Journal of Computational Physics*. — 1995. — N. 116. — pp. 262–276.
- [118] *Mangiavacchi N., Filho A.C., Tomé M.F., Cuminato J.A., Oliveira M.L.B., McKee S.* An effective implementation of surface tension using the marker and cell method for axisymmetric and planar flows. — P. 43. URL:// [www.lcad.icmc.sc.usp.br/publicacoes/paperNOV2003d.pdf](http://www.lcad.icmc.sc.usp.br/publicacoes/paperNOV2003d.pdf)
- [119] *Bidoae R, Ciobotaru R.M., Raad P.E.* An eulerian-lagrangian marker and micro cell simulation method for fluid interaction with solid/porous bodies. — P. 9. URL:// [mechanical.rutgers.edu/iutam/th6.pdf](http://mechanical.rutgers.edu/iutam/th6.pdf).

- [120] *Meier M., Yadigaroglu G., Smith B.L.* A novel technique for including surface tension in PLIC-VOF methods // *Eur. J. Mech. B-Fluids.* — 2001. — N. 0. — pp. 1–15.
- [121] *Uzuoka R., Yashima A., Kawakami T.* Fluid dynamics based prediction of liquefaction induced lateral spreading load. — P. 14. (preprint)
- [122] *Rhee S.H., Makarov B.P., Krishnan H., Ivanov V.* Assessment of numerical techniques in volume of fluid method for free-surface wave flows // 9<sup>th</sup> Symposium on Practical Design of Ships and Other Floating Structures Luebeck-Travemuende, Germany. — 2004. — P. 8.
- [123] *Hirt C.W., Nichols B.D.* Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // *Journal of Computational Physics.* — 1981. — N. 39. — pp. 201–225.
- [124] *Noh W.F., Woodward P.R.* SLIC (Simple Line Interface Method) // *Lecture Notes in Physics.* — 1976. — N. 59. — pp. 330–340.
- [125] *Youngs D.L.* Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion // *Numerical Methods for Fluid Dynamics: Proceedings of a First Conference.* — UK, 1982. — pp. 273–285.
- [126] *Healy W.M., Hartley J.G., Abdel-Khalik S.I.* On the validity of the adiabatic spreading assumption in droplet impact cooling // *Int. J. of Heat and Mass Transfer.* — 2001. — N. 44. — pp. 3869–3881.
- [127] *Koren B., Lewis M.R., van Brummelen E.H., van Leer B.* Riemann-problem and level-set approaches for two-fluid flow computations. I. Linearized Godunov scheme. — Report rapport “Modelling, Analysis and Simulation”. — 2001. — P. 24.
- [128] *Полянин А.Д.* Справочник по линейным уравнениям математической физики. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 576 с.
- [129] *Механика жидкости и газа: Учебное пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доп. / Под ред. В.С. Швыдкого.* — М.: ИКЦ “Академкнига”, 2003. — 464 с.

- [130] *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. — М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2003. — 632 с.
- [131] *Будак Б.М., Самарский А.А., Тихонов А.Н.* Сборник задач по математической физике. — 4-е изд., испр. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. — 688 с.
- [132] *Васильев А.Б., Тихонов Н.А.* Интегральные уравнения. — 2-е изд. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — 160 с.
- [133] *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров). Определения, теоремы, формулы. 6-е изд., стер. — СПб.: Издательство “Лань”, 2003. — 832 с.
- [134] *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. — М.: Мир, 1980. — 616 с.
- [135] *Самарский А.А., Гулин А.В.* Устойчивость разностных схем. — М.: Наука, 1973. — 415 с.
- [136] *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей. Пер. с англ. В двух томах. — М.: Мир, 1991. — 504-552 с.
- [137] *Физические величины. Справочник.* Под. ред И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. — М., Энергоатомиздат. — 1991. — 1232 с.
- [138] *Варгафтик Н.Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. — Москва. — 1963.

**Приложение 1. Таблица свойств веществ при нормальных условиях.**

Характеристики (20° С)	Вода	Бензиловый спирт	Бутанол-1	п-октан	Этиловый спирт	Этилен- гликоль	Эбонит	Воздух
$\nu \times 10^{-6}$ , м <sup>2</sup> /с	1.0	5.56	3.64	0.78	1.52	17.9	–	14.7
$\mu \times 10^{-3}$ , Па с	1.0	5.8	2.95	0.546	1.2	19.9	–	0.01795
$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	997	1045.5	809.6	702.2	790	1113	1155	1.217
$c_p$ , Дж/кг К	4180	2044	2419	2229	1490	2390	1430	1006
$k$ , Вт/м К	0.60	0.16	0.153	0.145	0.161	0.26	0.16	0.02544
$\kappa \times 10^{-7}$ , м <sup>2</sup> /с	1.44	0.75	0.78	0.93	1.37	0.98	0.97	207.8
$\sigma \times 10^{-3}$ , Н/м	72	42.76	24.6	21.76	22.03	46.1	–	–
$\gamma \times 10^{-3}$ , Н/м К	0.1477	0.1381	0.0898	0.0982	0.0832	0.089	–	–
$\beta \times 10^{-3}$ , К <sup>-1</sup>	0.182	0.75	0.95	1.14	1.12	0.638	–	–

## Приложение 2. Тестирование программного комплекса «Термокапиллярная конвекция».

Для тестирования построенной схемы и программного комплекса была решена задача, рассмотренная в статье Лонгтина Дж.П. и др. [87]. В статье рассматриваются конвективные течения, вызванные неоднородностью поверхностного натяжения вследствие нагрева слоя поглощающей жидкости лазерным импульсом высокой интенсивности. Эти течения преобладают при переносе тепловой энергии в жидкости. В работе построены профили температуры и горизонтальной составляющей скорости на свободной поверхности.

Сформулированная задача описывается следующей системой балансных уравнений. Уравнение сохранения массы:

$$\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

Уравнение сохранения импульса представляет из себя два уравнения по радиальной координате  $r$  и по оси  $z$ :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \nu \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right\} \quad (2)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right\} \quad (3)$$

Уравнение сохранения энергии принимает вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial z} = \kappa \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right\} \quad (4)$$

Замыкают систему уравнений (1)–(4) граничные и начальные условия:

$$\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial \sigma}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial r} \quad \text{при } z = h$$

$$u = 0 \quad \text{при } r = 0, r = R \text{ и } z = 0$$

$$v = 0 \quad \text{при } z = 0, z = h \text{ и } r = R$$

$$\frac{\partial v}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = 0$$

$$u = v = 0 \quad \text{при } t = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad \text{при } z = 0, \text{ и } z = h$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = 0, \text{ и } r = R$$

$$T = T_p(r, z) \quad \text{при } t = 0.$$

Функция  $T_p(r, z)$  представляет из себя начальное распределение вследствие локального воздействия лазерного импульсного ( $\sim 25$  нс) излучения и поглощения жидкости:

$$T_p(r, z) = \frac{\Delta T_0 \exp(-\alpha z)}{1 + \exp\left(\frac{r-a}{\zeta}\right)}$$

где  $\Delta T_0$  — максимальный перепад температуры в жидкости,  $a$  — радиус пучка лазера,  $\alpha$  — коэффициент поглощения жидкости,  $\zeta$  — малый параметр.

Как видно из граничных условий, авторы статьи считали свободную поверхность недеформируемой. Однако, построенная модель учитывает деформацию свободной поверхности. Этот факт практически не вносит дополнительных изменений в результат, т.к. в сравнении с толщиной слоя жидкости ( $h_0 = 1.2$  см) деформация поверхности незначительна.

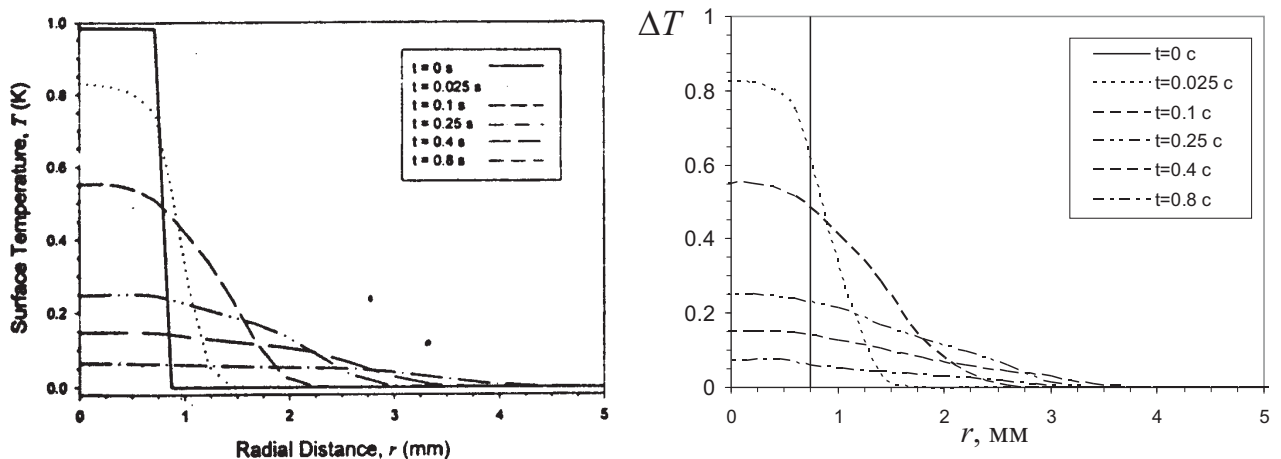


Рис. 1. Распределение температуры на свободной поверхности.



На Рис. 1 представлены профили температуры как функции координаты  $r$ , рассчитанные в статье [87] (слева) и на основе защищаемой модели (справа). Результаты расчета проведены для слоя подкрашенного этанола с коэффициентом поглощения  $\alpha = 28 \text{ см}^{-1}$  при радиусе пучка лазера  $a = 0.75 \text{ мм}$  и максимальном перепаде температуры  $\Delta T_0 = 1.0 \text{ К}$ . Диаметр кюветы  $D = 4.3 \text{ см}$ . На Рис. 2 показаны рассчитанные профили радиальной скорости на свободной поверхности при тех же входных данных. Как видно, результаты расчета по предложенной модели хорошо согласуются с результатами авторов работы [87].

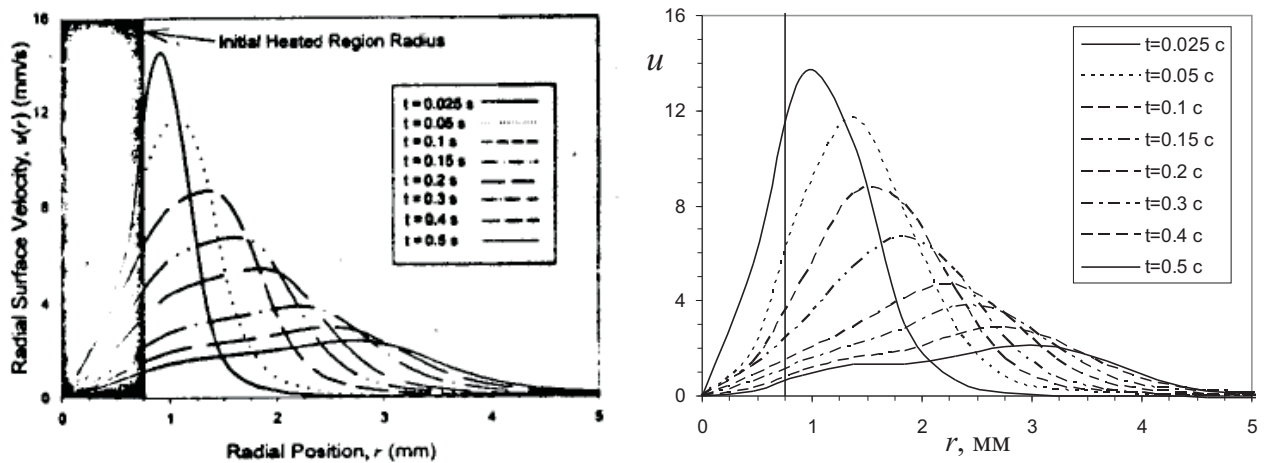


Рис. 2. Радиальная скорость на свободной поверхности.