

На правах рукописи

Зуева Анастасия Юрьевна

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

**05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ**

Автореферат

**диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук**



Тюмень — 2007

Работа выполнена на кафедре математического моделирования
Тюменского государственного университета.

- Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор
Кутрунов Владимир Николаевич
- Научный консультант: кандидат физико-математических наук,
доцент
Безуглый Борис Антонович
- Официальные оппоненты: доктор технических наук,
профессор
Шабаров Александр Борисович
- доктор физико-математических наук
Кузнецов Владимир Васильевич
- Ведущая организация: Институт вычислительного моделирования
СО РАН. г. Красноярск.

Защита состоится “20” февраля 2007 г. в 16 ч. 00 мин. на заседании
диссертационного совета К 212.274.01 при на кафедре математического
моделирования Тюменского государственного университета по адресу:
625003, г. Тюмень, ул. Перекопская, 15а, аудитория 217.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Тюменского
государственного университета.

Автореферат разослан “ ____ ” января 2007 г.

Учёный секретарь диссертационного совета



Бутакова Н.Н.

Актуальность проблемы. Течения, вызванные изменением поверхностного натяжения под действием лазерного излучения представляют важный и растущий класс инженерных задач. Области применения включают новые методы лазерной диагностики жидкостей, биоинженерию, сверление, абляцию, поверхностное легирование, сварку, резку металлов и диэлектриков, наплавку и т.д.

Применение лазерного излучения для возбуждения термокапиллярной конвекции предоставляет дополнительные возможности применения этого эффекта. Отраженный от деформированной свободной поверхности жидкости пучок лазера несет полную информацию о ее форме, которая зависит от протекающих конвективных процессов внутри жидкости. Это позволяет определять ряд физических характеристик жидкости, параметры ее слоя и свойства подложки. Бесконтактное воздействие на слой жидкости позволяет исследовать агрессивные, радиоактивные, находящиеся в экстремальных физических условиях жидкости.

Эффект фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции зависит от большого числа влияющих параметров системы «лазерный пучок–жидкий слой–подложка». Существует множество работ, посвященных исследованию этого явления, однако, оно все еще остается не до конца изученным.

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

Методы исследования. В процессе диссертационного исследования использованы методы решения дифференциальных уравнений в частных производных, методы решения интегральных уравнений, численные методы интегрирования, дифференцирования и решения нелинейных уравнений, MAC и VOF методы. В VOF методе изменен подход к определению положения межфазной границы в соответствии с исследуемой задачей.

Научная новизна. В диссертации получены следующие результаты, характеризующиеся научной новизной:

1. Предложена модель распространения тепла до начала конвективных течений в жидкости на основе выдвинутой гипотезы о разделении теплового потока в жидкость и подложку. Получено трансцендентное уравнение для определения времени задержки термокапиллярной конвекции.
2. Впервые проведен анализ времени задержки термокапиллярной конвекции. Выявлена его зависимость от толщины слоя жидкости, мощности пучка лазера и других свойств системы.
3. Для анализа поведения системы «жидкий слой–подложка» построена модель тепло- и массопереноса, описывающая термокапиллярную конвекцию в слое прозрачной жидкости на поглощающей подложке, на основе VOF метода. Особенностью модели является описание системы «жидкость–воздух» в виде единой сплошной среды с переменными свойствами.
4. На основе VOF метода реализован комплекс программ для построенной гидродинамической модели. Численно прослежена эволюция деформации поверхности жидкости. В некоторый момент времени, зависящий от свойств системы, обнаружен всплеск всех параметров термокапиллярной конвекции, который наблюдается и экспериментально.

Практическая ценность работы. Возможность использовать время задержки для бесконтактного контроля параметров жидкости делает задачу о развитии термокапиллярной конвекции актуальной. Построенная численная модель может быть использована для теоретического выявления зависимости времени задержки от различных свойств системы, не используя эксперимент. Это в дальнейшем в свою очередь позволит вернуться к эксперименту и предложить новые методы в лазерной диагностике жидкостей.

Достоверность полученных результатов основана на сравнении полученных расчетных результатов с экспериментальными данными. Дополнительно для проверки построенной гидродинамической модели

термокапиллярной конвекции были проведены расчеты для известных задач, которые сравнивались с результатами других авторов.

Апробация работы. Результаты исследований обсуждались на научных семинарах лаборатории «Жидкостные микрогравитационные технологии», семинарах физического факультета, факультета математики и компьютерных наук ТюмГУ (г. Тюмень), института математического моделирования СО РАН под руководством д.ф.-м.н. Андреева В.К. (г. Красноярск, февраль 2006 г), института теплофизики под руководством д.ф.-м.н, чл.-корр. РАН Алексеенко С.В. им. С.С. Кутателадзе (г. Новосибирск, июль 2006 г), института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева под руководством д.ф.-м.н, чл.-корр. РАН Пухначева В.В. (г. Новосибирск, июль 2006 г) и института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН под руководством д.ф.-м.н., профессора Ильина В.П. (г. Новосибирск, октябрь 2006 г), докладывались на конференциях:

1. Девятой Всероссийской научной конференции студентов–физиков и молодых ученых, Екатеринбург–Красноярск, март–апрель 2003;
2. Международной конференции “Advanced Problems in Thermal Convection”, Пермь, ноябрь 2003;
3. Федеральной итоговой научно-технической конференции творческой молодежи России по естественным, техническим, гуманитарным наукам, Звенигород, декабрь 2003;
4. Первой Всероссийской конференции студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук», Томск, апрель 2004;
5. 36-ой и 37-ой Региональной молодежной конференции «ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ», Екатеринбург: УрО РАН, январь–февраль 2005, 2006;
6. Всероссийской конференции с участием зарубежных ученых «ЗАДАЧИ СО СВОБОДНЫМИ ГРАНИЦАМИ: ТЕОРИЯ, ЭКСПЕРИМЕНТ И ПРИЛОЖЕНИЯ», Бийск, июль 2005.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы из 137 наименований. Полный объем работы представлен на 122 страницах машинописного текста, включает 33 рисунка и 2 приложения.

Содержание работы.

Во введении обоснована актуальность темы, сформулирована цель работы, кратко изложено ее содержание.

В первой главе приведен обзор литературы, посвященной термокапиллярной конвекции и наиболее известным моделям. Описаны эксперименты по выявлению эффекта фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции и определены области ее практического применения. Выделены основные этапы математического моделирования при исследовании термокапиллярной конвекции. Проанализированы также современные методы численного моделирования задач с межфазными и свободными границами.

Необходимый для возникновения термокапиллярной конвекции градиент температуры на свободной поверхности можно получить при помощи воздействия лазерным излучением. В случае прозрачной жидкости лазерное излучение поглощается только подложкой и на границе жидкий слой–подложка появляется плоский источник тепла. Для того, чтобы на свободной поверхности жидкости возникло температурное возмущение, способное запустить регистрируемую термокапиллярную конвекцию, требуется некоторое время от начала воздействия. Это характерное время эффекта называют «временем задержки» термокапиллярной конвекции.

Во второй главе рассматривается начальная стадия фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции. Исследуются случаи, когда число Рэлея значительно ниже критического значения $Ra^* = 1100$, поэтому эффектом всплывания можно пренебречь. Построена математическая модель распространения тепла с источником на границе между жидкостью и подложкой.

На твердой подложке находится слой прозрачной жидкости толщиной h_0 . Система «жидкий слой–подложка» нагревается гауссовым пучком лазера. Жидкость прозрачная и лазерное излучение поглощается

подложкой, тепло распространяется как в подложку, так и в жидкость. В сравнении с толщиной слоя жидкости подложка считается полубесконечным твердым телом. Диаметральные размеры системы также считаем бесконечными. До тех пор, пока определенное температурное возмущение не дошло до поверхности жидкости и не вызвало градиента поверхностного натяжения, тепло в жидкости распространяется кондуктивно (тепловым расширением жидкости пренебрегаем). Справедливы уравнения теплопроводности в цилиндрической системе координат:

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

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

$$0 \leq r < \infty$$

с начальными и граничными условиями

$$T_l = T_s = T_0 \quad \text{при} \quad t = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial z} = 0 \quad \text{при} \quad z = h_0; \quad (4)$$

$$T_l = T_s, \quad k_l \frac{\partial T_l}{\partial z} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = -H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \quad \text{при} \quad z = 0, \quad (5)$$

где $H_0 = P/\pi a^2$ — плотность теплового потока, P — мощность пучка лазера, a — его радиус, k — теплопроводность, κ — температуропроводность, индексами l и s обозначается принадлежность свойств жидкости или подложке соответственно.

Не составляет особой сложности получить решения задач теплопроводности для бесконечной пластины и полупространства. Проблема заключается в разделении теплового потока от источника тепла на границе между двумя средами (5). Была выдвинута гипотеза, которая состоит в том, что можно получить коэффициенты разделения тепла в упрощенной задаче и затем использовать их в сформулированной.

Такие коэффициенты были получены на основе задачи распространения тепла в двух полубесконечных пространствах с различными теплофизическими свойствами с равномерным плоским

источником на границе. Граничные условия (5) соответственно видоизменяются:

$$\frac{\partial T_l}{\partial z} = -\frac{1}{k_l} \frac{k_l \sqrt{\kappa_s}}{k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l}} H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right), \quad (6)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} = -\frac{1}{k_s} \frac{k_s \sqrt{\kappa_l}}{k_s \sqrt{\kappa_l} + k_l \sqrt{\kappa_s}} H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \quad \text{при } z = 0. \quad (7)$$

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

$$T_s(r, z, t) - T_0 = \frac{P \sqrt{\kappa_l}}{4\pi \sqrt{\pi \kappa_s} (k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l})} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau + t_{0s}) \sqrt{t - \tau}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{r^2}{4\kappa_s(t - \tau + t_{0s})}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{4\kappa_s(t - \tau)}\right) d\tau \quad (8)$$

$$T_l(r, z, t) - T_0 = \frac{P \sqrt{\kappa_s}}{4\pi \sqrt{\pi \kappa_l} (k_l \sqrt{\kappa_s} + k_s \sqrt{\kappa_l})} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau + t_{0l}) \sqrt{t - \tau}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{r^2}{4\kappa_l(t - \tau + t_{0l})}\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(z + 2nh_0)^2}{4\kappa_l(t - \tau)}\right) d\tau \quad (9)$$

Полученные решения (8) и (9) описывают распространение тепла до начала конвективных процессов. Эти выражения удовлетворяют второму условию в условии сопряжения (5), однако равенство температур выполняется неточно. 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.

Из выражений (8) и (9) можно определить температуру в любой точке среды, но для этого нужно провести интегрирование по переменной τ . Для этого автором была разработана и реализована программа «Время задержки» на языке C++, которая позволяет провести численное интегрирование выражений (8) и (9) и вычислять температурные поля в системе «жидкий слой–подложка».

Вводится понятие запускающего температурного возмущения как максимального перепада температуры на свободной поверхности в момент начала термокапиллярных течений. Эксперименты показывают, что время задержки термокапиллярной конвекции имеет квадратичную зависимость от толщины слоя жидкости h_0 . Эта закономерность выполняется в том случае, если значение запускающего температурного возмущения $(\Delta T)_{ТС}$ для конкретной жидкости постоянно и не зависит от толщины и мощности пучка лазера. Можно построить в неявном виде зависимость времени задержки τ_d от мощности пучка лазера:

$$F(\tau_d, P) = (\Delta T)_{ТС}, \quad (10)$$

где $F(\tau_d, P) = \Delta T(0, h_0, \tau_d) = T_l(0, h_0, \tau_d) - T_0$ — левая часть выражения (9), мощность P выступает как переменная величина. Значения $(\Delta T)_{ТС}$ вычисляются для конкретной жидкости по контрольной толщине 0.81 мм при мощности пучка лазера 20.9 мВт.

На Рис. 1(а) для слоя бутанола с толщинами $h_0 = 0.33, 0.57, 0.81, 1.41, 2.01$ мм снизу вверх соответственно, приведены экспериментальные (точки) значения времени задержки в зависимости от мощности пучка и те же величины (сплошные кривые), вычисленные на основе математической модели. Как видно, эти зависимости удовлетворительно аппроксимируют экспериментальные значения. Более существенное расхождение ($\sim 30\%$) видно только для толщин, близких 2 мм. Это подтверждает гипотезу о независимости $(\Delta T)_{ТС}$ от мощности.

Для проверки гипотезы о квадратичной зависимости τ_d от толщины были выполнены следующие вычисления. Как и в предыдущем случае использовался один эксперимент для определения $(\Delta T)_{ТС}$. Эта величина вычислялась для контрольной толщины слоя жидкости 0.81 мм. С использованием полученной константы построена теоретическая зависимость τ_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. 1(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 также расхождение ($<15\%$) заметно лишь для толщин более 1.8 мм.

В третьей главе строится термогидродинамическая модель явления. По сравнению с классической системой балансных уравнений,

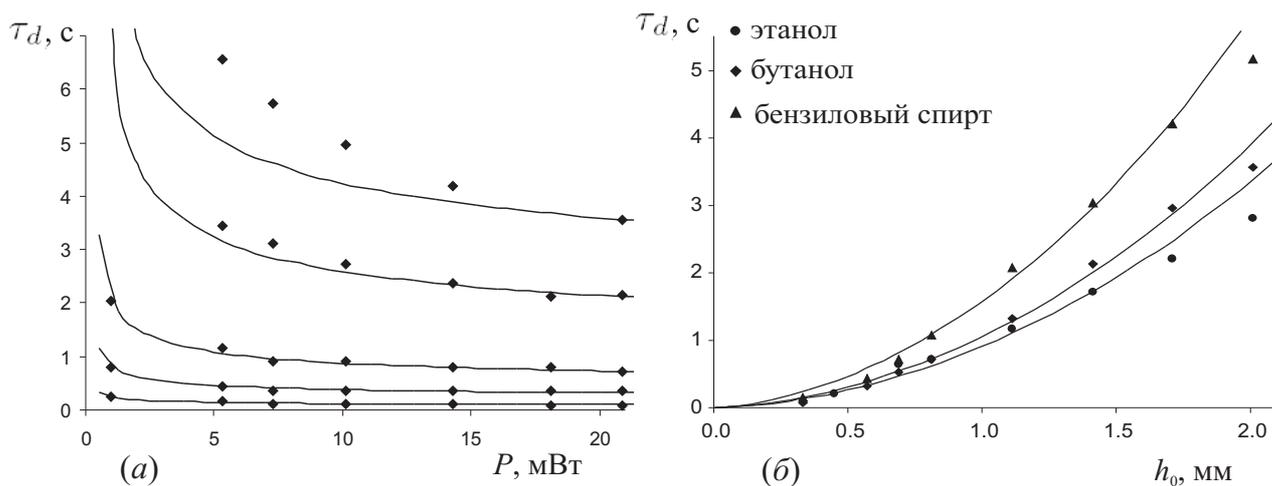


Рис. 1: Зависимость времени задержки от свойств системы. Точками обозначены экспериментальные данные; сплошные кривые рассчитаны из формулы (9).

предлагаемая модель учитывает влияние сил Марангони на свободной поверхности, которые включаются в уравнения Навье–Стокса. Эта система уравнений выведена автором и для ее решения построена и запрограммирована численная схема на основе VOF метода. Для численного счета требуется проводить вычисления на конечной области. В диссертации указаны способы ухода от бесконечно удаленных границ, опирающиеся на анализ поведения безразмерных переменных параметров задачи.

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 гидродинамической задачи со свободной границей реализуется специальный метод, который позволяет определять межфазную границу между жидкостью и воздухом. Этот метод известен как метод объема жидкости (*Volume Of Fluid* — VOF) с кусочно линейной аппроксимацией межфазной границы (*Piecewise Linear Interface Construction* — PLIC).

Для постановки задачи тепло- и массопереноса необходима система балансных уравнений. Рассматривается несжимаемая вязкая жидкость. При малых изменениях температуры физические свойства системы «воздух–жидкий слой–подложка» считаем постоянными, кроме поверхностного натяжения жидкости, которое зависит от температуры

линейно.

Для определения межфазной границы в VOF методе вводится функция F , которая характеризует концентрацию жидкости и для каждой вычисляемой ячейки принимает значения $F = 1$ в области, полностью заполненной жидкостью; $F = 0$ в области, заполненной воздухом; и $0 < F < 1$ содержащей межфазную границу. Поле F меняется при движении жидкости и справедливо уравнение переноса:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + u \frac{\partial F}{\partial r} + v \frac{\partial F}{\partial z} = 0 \quad (11)$$

На межфазной границе происходит скачок физических свойств и действуют силы поверхностного натяжения:

$$\vec{f}_s = \sigma \varkappa \hat{n} + \nabla_T \sigma \quad (12)$$

где $\varkappa = 1/R_1 + 1/R_2$ — кривизна свободной поверхности, \hat{n} — единичный вектор нормали к свободной поверхности, направленный внутрь жидкости. Уравнение неразрывности справедливо для всей расчетной области, включая межфазную границу.

Жидкость и окружающий ее воздух предполагаются сплошной жидкой средой со свойствами, линейно связанными с F :

$$\begin{aligned} \mu &= F\mu_l + (1 - F)\mu_g \\ \rho &= F\rho_l + (1 - F)\rho_g \end{aligned} \quad (13)$$

где индексы указывают принадлежность: l — к жидкости, g — воздуху. На межфазной границе выполняется динамическое условие (12), которое включается в уравнения Навье–Стокса. С учетом всех сделанных предположений автором получена система балансных уравнений:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right\} + \\ &+ \left\{ \sigma \varkappa n_r - \gamma \left(\frac{\partial T}{\partial r} - n_r \left(n_r \frac{\partial T}{\partial r} + n_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right) \right\} \frac{|\nabla F|}{\rho} \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right\} + \\ &+ \left\{ \sigma \varkappa n_z - \gamma \left(\frac{\partial T}{\partial z} - n_z \left(n_r \frac{\partial T}{\partial r} + n_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right) \right\} \frac{|\nabla F|}{\rho} + g\beta(T - T_0) \end{aligned} \quad (16)$$

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

где β — коэффициент термического расширения. В отличие из известных уравнений (Хирт и Николс 1981, Мейер 1999), приведенные позволяют учитывать изменения поверхностного натяжения вследствие градиента температуры на свободной поверхности.

Уравнение сохранения энергии для жидкой среды:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{c_p \rho} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right\} \quad (17)$$

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

Уравнение энергии для подложки имеет вид:

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \kappa_s \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \right\} \quad (18)$$

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

В уравнениях k — теплопроводность, c_p — удельная теплоемкость, κ — температуропроводность.

Уравнениях (11), (14), (15)–(18) — основные уравнения осесимметричной задачи термокапиллярной конвекции, которые решаются численно. Для замыкания этих уравнений нужно сформулировать начальные и граничные условия. В начальный момент времени среда неподвижна, а температура и давление p постоянны во всей среде. На стенках выполняются условия прилипания и непротекания

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

В работе рассматривается модель фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции в слое прозрачной жидкости на поглощающей подложке. Поэтому все тепло от пучка лазера поглощается подложкой. Тогда на границе жидкости и подложки справедливо условие теплового контакта с источником:

$$T - T_s = 0, \quad k \frac{\partial T}{\partial z} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = -H_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right), \quad \text{при } z = 0 \quad (19)$$

где H_0 — тепловая интенсивность пучка лазера. На бесконечности выполняются условия затухания. Следует также учитывать условия осевой симметрии.

Для дискретизации уравнений используется классический метод маркеров и ячеек (*Marker And Cell* — MAC) в 2D цилиндрических координатах. Для лучшей сходимости строится равномерная разнесенная сетка с прямоугольными ячейками $\Delta r \times \Delta z$. Значения функций (p, T, F) и свойства (μ, ρ, k, c_p) определяются в центре ячеек, а скорости — в середине сторон ячеек. В ячейках координаты задаются $r_i = (i - 0.5)\Delta r$ и $z_j = (j - 0.5)\Delta z$. Из-за своей громоздкости конечно-разностная схема в автореферате не приводится.

В четвертой главе описан программный комплекс для численного моделирования исследуемого явления. Построены поля скоростей, давлений и температурные поля. Решена центральная задача диссертации: на основе предложенной модели вычислены времена задержки термокапиллярной конвекции для непрерывного изменения некоторых физических свойств жидкости.

Четкого критерия для определения начала конвективных течений нет. Поэтому автором предложен критерий, основанный на погрешности аппроксимации дифференциальных уравнений. Полученные результаты сравнены с небольшим числом имеющихся экспериментальных данных. Математическая модель позволяет теперь вычислить большое количество времен задержки, что очевидно практически невозможно получить экспериментально. Получены также профили термокапиллярной деформация свободной поверхности, которые экспериментально в динамике пока получить не удастся. Полученные теоретически профили свободной поверхности могут быть использованы на практике для идентификации свойств исследуемой жидкости в тех случаях, когда эти свойства не удается изучить экспериментально.

В VOF методе положение межфазной границы рассчитывается на основе поля фракции F , которое на каждом временном шаге определяется из уравнения переноса (11). Это удобно в случае больших деформаций поверхности раздела (инжекция, падение капли, всплывание пузырьков). В диссертации использован физический факт о том, что при термокапиллярной конвекции свободная поверхность жидкости подвергается незначительным деформациям. По этой причине для определения положения межфазной границы предложено воспользоваться кинематическим условием. С вычислительной точки

зрения такая замена оказалась очень удобной. Предложенная схема опирается на следующие рассуждения: 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:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial r} = v, \quad (20)$$

где $h = h(r, \tau)$ — форма свободной поверхности, которая в начальный момент времени недеформирована, т.е. $h(r, 0) = h_0$. Его дискретная аппроксимация

$$h_i^\bullet = h_i + \Delta t \left(\bar{v}_{fi}^\bullet - \bar{u}_{fi}^\bullet \frac{h_{i+1} - h_{i-1}}{2\Delta r} \right) \quad (21)$$

где u_f и v_f скорости свободной поверхности.

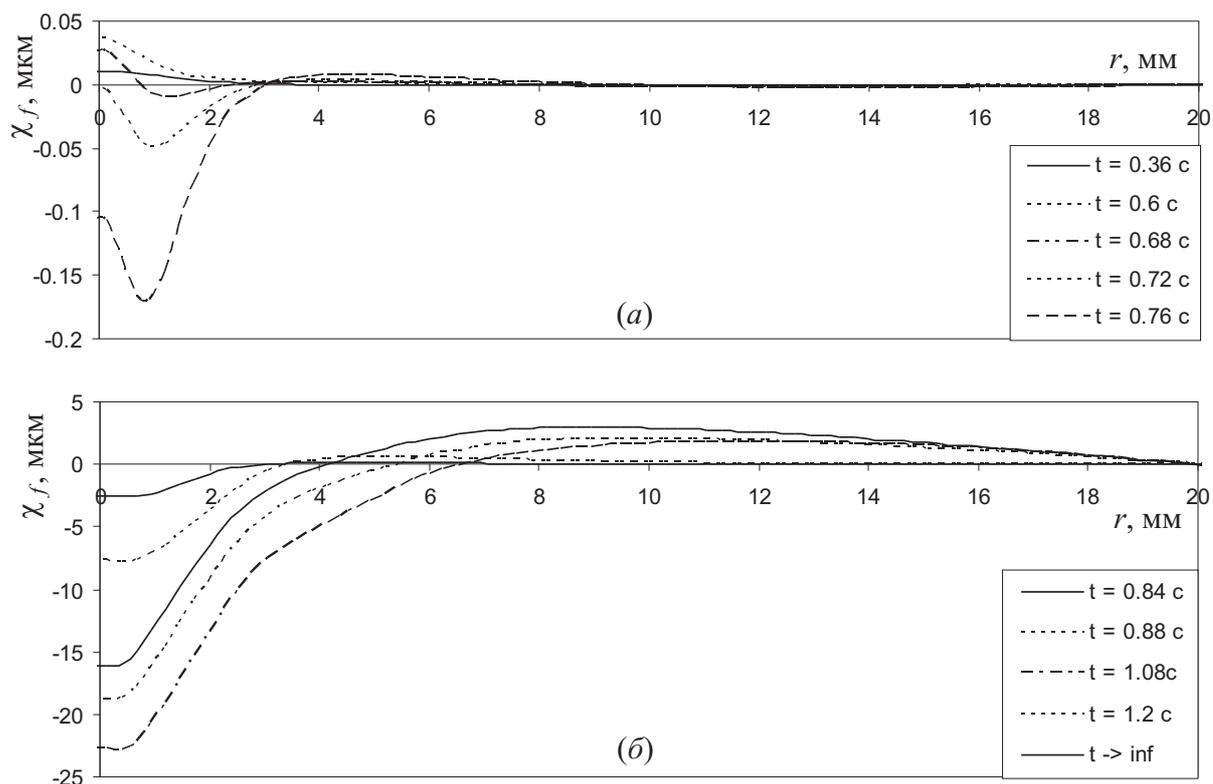


Рис. 2: Формирование профиля термокапиллярной деформации свободной поверхности жидкости. Слой н-октана толщиной 1.5 мм, мощность пучка лазера 20.9 мВт.

Поскольку используется явная схема, для устойчивости необходимо выполнение известных условий для временного шага Δt : для скорости (условие Куранта–Фридриха–Леви) $\Delta t \leq \Delta t_{CFL} = \Delta r/V$, где V —

максимальная из всех скоростей $|u_{i+1/2,j}^\bullet|$, $|v_{i,j+1/2}^\bullet|$; теплопроводности $\Delta \leq \Delta_{th} = (\Delta r)^2/2\kappa$, вязкости $\Delta t \leq \Delta t_{vis} = \rho(\Delta r)^2/2\mu$ и поверхностного натяжения $\Delta \tau \leq \Delta \tau_{s.t.} = \sqrt{(\rho_l + \rho_g)/4\pi\sigma_0}(\Delta r)^{1.5}$. Реализация программы «Термокапиллярная конвекция» дает возможность регулировать шаг по времени дополнительными внешними параметрами.

После начала конвективных течений вследствие изменения поверхностного натяжения жидкости и ее растекания, свободная поверхность начинает деформироваться, образуется термокапиллярное углубление. На Рис. 2 изображен профиль термокапиллярной 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. 2(a).

С некоторого момента времени жидкость растекается и формируется углубление. На Рис. 2(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 н-октана толщиной 0.81 мм этот момент соответствует времени $t = 1.08$ с от начала теплового воздействия пучком лазера. В дальнейшем поверхность незначительно поднимается и течения и профиль стационаризируются.

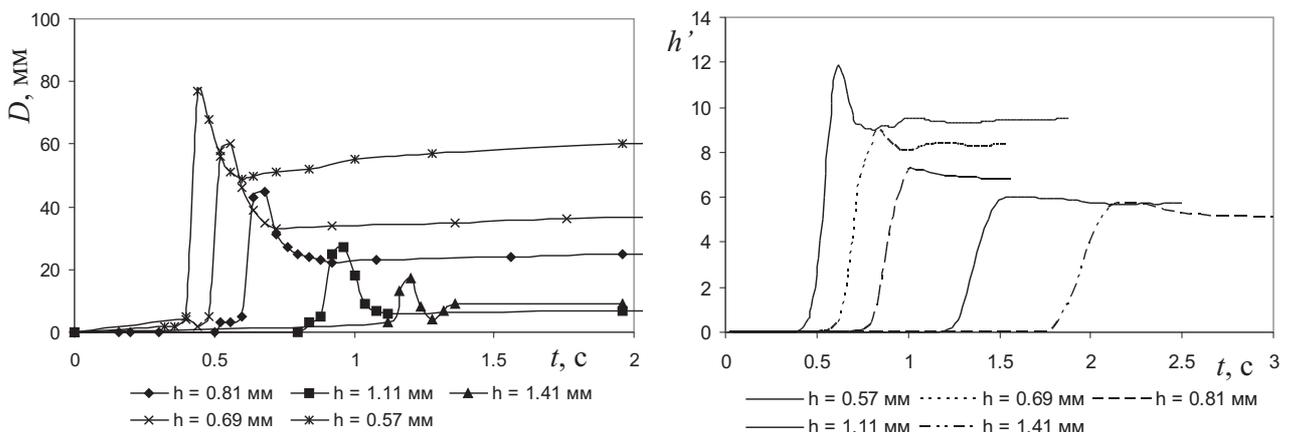


Рис. 3: Зависимость диаметра отклика (слева) и тангенса максимального угла наклона свободной поверхности (справа).

Из экспериментов лаборатории «Жидкостные микрогра-

витационные технологии» пока известно только, что диаметр термокапиллярного отклика связан с максимальным углом наклона деформированной свободной поверхности. На Рис. 3 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 качественно описывает наблюдаемые в эксперименте задержку термокапиллярной деформации, всплеск и установление стационарного конвективного течения.

Основные результаты работы.

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 (8) и (9) позволяет вычислять температурные поля в системе «жидкий слой–подложка», запускаящее 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.

Основное содержание диссертационной работы изложено в следующих публикациях:

- [1] *Безуглый Б.А., Иванова Н.А., Зуева А.Ю.* Термокапиллярная деформация тонкого слоя жидкости вызванная пучком лазера // ПМТФ. — 2001. — Т. 3. — № 42. — С. 130–134.
- [2] *Зуева А.Ю., Аксенов А.Н.* Моделирование фотоиндуцированной термокапиллярной деформации тонкого слоя жидкости // Сборник тезисов докладов: Тезисы ВНКСФ9. Т.1. Екатеринбург–Красноярск, 2003. — Изд-во АСФ России, — с. 383–384.
- [3] *B.A. 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.
- [4] *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.
- [5] *Зуева А.Ю., Чемоданов С.И.* Расчет теплового возмущения, вызывающего термокапиллярную 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.

- [6] Зуева А.Ю. Моделирование начальной стадии фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции // ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ: Труды 36-й Региональной молодежной конференции. Екатеринбург: УрО РАН, 2005. — с. 136–140.
- [7] Зуева А.Ю. Фотоиндуцированная термокапиллярная конвекция: этапы математического моделирования. // Математическое и информационное моделирование: сборник научных трудов. Вып. 7. Тюмень: Изд-во “Вектор Бук”. — 2005. — с. 143–153.
- [8] Безуглый Б.А., Зуева А.Ю., Чемоданов С.И. Теоретический расчет времени задержки термокапиллярного 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.
- [9] Зуева А.Ю. Математическая модель термокапиллярной конвекции. // Под ред. В.Н. Кутрунова, Б.А. Безуглого. — Тюмень: Изд-во «Вектор Бук», 2006. — 48 с.
- [10] Зуева А.Ю., Кутрунов В.Н. Математическое моделирование термокапиллярной конвекции на основе VOF метода. // ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ: Труды 37-й Региональной молодежной конференции. Екатеринбург: УрО РАН, 2006. — с. 200–204.
- [11] Зуева А.Ю. Математическое моделирование фотоиндуцированной термокапиллярной конвекции. // Вестник ТюмГУ. — 2006. — Вып. 5. — с. 47–57.