

*Анастасия Юрьевна ЗУЕВА —
соискатель кафедры
математического моделирования*

УДК 519.635:532.22:532.612.4

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОИНДУЦИРОВАННОЙ ТЕРМОКАПИЛЛЯРНОЙ КОНВЕКЦИИ

АННОТАЦИЯ. Предложена математическая модель процессов тепло- и массопереноса в системе на стадии развития термокапиллярной конвекции и формирования термокапиллярной деформации на основе VOF метода.

This article presents mathematical model of heat transmission and mass transfer processes in system during evaluation of thermocapillary convection in terms of VOF method. The model of thermocapillary deformation forming is offered also.

Введение. 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 приводят к появлению гидродинамических течений в объеме. Конвекция, вызванная градиентами температуры на свободной поверхности жидкости, известна как термокапиллярная.

Важной особенностью термокапиллярной конвекции в жидкостях является деформация свободной поверхности — образование термокапиллярного углубления, профиль которого зависит от физических и геометрических свойств исследуемой системы. Расположение теплового источника в объеме жидкости зависит от коэффициента поглощения α на свободной поверхности жидкости, в объеме по закону Бутера или на поверхности подложки, на которой находится слой жидкости [1-3].

За последние десятилетия численному моделированию течений с межфазными границами посвящено большое число работ. Одним из наиболее ранних и получивших широкое распространение методов решения задач течения жидкость — газ с подвижной границей является предложенный Харлоу и Уэлчем [4] *метод маркеров и ячеек* (MAC — *Marker And Cell*). Однако в отличие от MAC *метод объема флюида* (VOF — *Volume Of Fluid*) стал более популярным.

При нагреве лазерным пучком слоя прозрачной жидкости на поглощающей подложке возникает эффект задержки термокапиллярной конвекции [5, 6]. Эта задержка вызвана тем, что требуется некоторое время τ_d , чтобы тепловое возмущение дошло от подложки до свободной поверхности жидкости и инициировало термокапиллярное течение. Очевидно, что величина τ_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.

Механизм термокапиллярной конвекции. Явление термокапиллярной конвекции, индуцированной тепловым действием лазерного излучения, впервые наблюдал в 1975 г. Б. А. Безуглый [7] в МГУ им. М. В. Ломоносова. Однако адекватное объяснение явлению было дано лишь в 1977 г.

Для многих однокомпонентных жидкостей (вода, органические вещества, расплавы солей, жидкие металлы) вдали от критической точки зависимость поверхностного натяжения от температуры близка к линейной: $\sigma = \sigma_0 - \gamma (T - T_0)$.

Здесь σ_0 — поверхностное натяжение при начальной температуре, γ — 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). Благодаря вязкости поверхностное движение передается соседним слоям жидкости. Под свободной поверхностью возникает отрицательное давление, которое описывается динамически условием:

$$(p - p_0)\hat{n} = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \hat{n} + \sigma' \cdot \hat{n} + \nabla \sigma, \quad (1)$$

где σ' — тензор вязких напряжений, $(1/R_1 + 1/R_2)$ — кривизна свободной поверхности $z = h(r, t)$, \hat{n} — вектор нормали к свободной поверхности, направленный внутрь жидкости, p_0 — давление окружающей среды [8]. Когда на поверхности жидкости начинается растекание и, как следствие, она деформируется, под свободной поверхностью возникает отрицательное лапласово давление, т.е. подсос. Сохранение массы требует, чтобы свежая жидкость двигалась в освобожденное пространство (возвратное течение), возбуждая таким образом конвективное движение.

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_{p_s} , коэффициента поглощения α_s), тепловых, реологических, динамических и оптических свойств жидкости (теплопроводности k_l , теплоемкости c_{p_l} , вязкости μ_l , поверхностного натяжения σ_0 , термических коэффициентов объемного расширения $\beta = -\partial\rho/\partial T$ и поверхностного натяжения $\gamma = -\partial\sigma/\partial T$, коэффициента поглощения α_l).

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.

Балансные уравнения в VOF методе. Задача о термокапиллярной конвекции, индуцированной пучком лазера с гауссовым распределением интенсивности, является осесимметричной. Поэтому задача может быть сформулирована в цилиндрической системе координат (r, φ, z) , причем все компоненты с координатой угла φ обращаются в 0. Это переводит задачу к двум пространственным координатам и упрощает вычисления.

Для определения межфазной границы в VOF методе используют функцию концентрации жидкости, обозначаемое F . После дискретизации при численном счете для каждой вычисляемой ячейки оно определяет долю, заполненную жидкостью. Эта функция принимает значения $F=1$ в области, заполненной жидкостью; $F=0$ в области, заполненной воздухом; и $0 < F < 1$ в окрестности межфазной границы. Функция F удовлетворяет уравнению переноса [9]:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + u \frac{\partial F}{\partial r} + v \frac{\partial F}{\partial z} = 0. \quad (2)$$

где u и v — радиальная и вертикальная компоненты вектора скорости соответственно. Выражение (2) используется для определения положения межфазной границы в VOF методе и при выводе основных уравнений. Физически это означает, что F является свойством, которое меняется при движении жидкости, т.е. объем жидкости в элементарном объеме, движущемся вместе со средой, не изменяется.

Жидкость и окружающий ее воздух предполагаются одной сплошной жидкой средой [4] со свойствами, линейно связанными с F :

$$\begin{aligned} \mu &= F\mu_l + (1 - F)\mu_g, \\ \rho &= F\rho_l + (1 - F)\rho_g \end{aligned} \quad (3)$$

где индексы указывают принадлежность к жидкости — l и воздуху — g . Для них также справедливы уравнения переноса.

В данной работе учитывается изменение толщины слоя жидкости $h=h(r, t)$, следовательно, общее давление в среде:

$$p = p_0 + F(\rho_l g(h(r, t) - z) + p'_l) + (1 - F)p'_g,$$

где слагаемое $\rho_l g(h(r, t) - z)$ — гидростатическое давление в жидкости, p'_l и p'_g — давление за счет конвекции и деформации свободной поверхности в жидкости и воздухе соответственно.

Функция концентрации жидкости F характеризует положение межфазной границы, т.е. межфазная граница находится там, где $\nabla F \neq 0$. Единичный вектор нормали, перпендикулярный к свободной поверхности и направленный внутрь жидкости, определяет ориентацию межфазной границы:

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

Кроме того, при уменьшении пленки межфазной границы $|\nabla F| = \delta_f$, где δ_f — дельта-функция Дирака на межфазной границе.

Гидродинамические уравнения в (r, z) координатах принимают вид:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial r} + \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right\} + \\ & + \left(\sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) n_r - \gamma \frac{\partial T}{\partial r} \right) \frac{\delta_f}{\rho} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right\} + \\ & + \left(\sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) n_z - \gamma \frac{\partial T}{\partial z} \right) \frac{\delta_f}{\rho} + g\beta(T - T_0) \end{aligned} \quad (6)$$

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

Уравнение сохранения энергии для жидкой среды:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{c_p \rho} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right\} \quad (7)$$

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

Уравнение энергии для подложки имеет вид:

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \kappa_s \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \right\} \quad (8)$$

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

Здесь k — теплопроводность, c_p — удельная теплоемкость, κ — температуропроводность.

Начальные и граничные условия. Уравнения (2), (4)-(8) — 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

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

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:

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

где H_0 — тепловая интенсивность пучка лазера, a — его радиус.

На бесконечности выполняются условия затухания:

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

Следует также учитывать условия осевой симметрии:

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

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.

Для дискретизации уравнений используется классический метод маркеров и ячеек [9] в 2D цилиндрических координатах. Для лучшей сходимости строится равномерная разнесенная сетка с прямоугольными ячейками $\Delta r \times \Delta z$. Значения функции (p' , T , F) и свойства (μ , ρ , k , c_p) определяются в центре ячеек, а скорости — в середине сторон ячеек.

Определение положения межфазной границы. В VOF методе положение межфазной границы рассчитывается на основе концентрации жидкости F , кото-

рое на каждом временном шаге определяется из уравнения переноса. 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 имеем:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial r} = v$$

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

Его дискретная аппроксимация

$$h_i^\bullet = h_i + \Delta t \left(v_{f_i}^\bullet - u_{f_i}^\bullet \frac{h_{i+1/2} - h_{i-1/2}}{\Delta r} \right)$$

где индекс f указывает на принадлежность скорости свободной поверхности, значения s^\bullet берутся с расчетного шага, без $^\bullet$ с предыдущего.

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

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

$\{ \}$ — дробная часть от аргумента.

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

Когда форма свободной поверхности определена, необходимо вычислить ее кривизну. Кривизну в осесимметричных координатах можно записать через компоненты вектора нормали:

$$\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} = \ddot{h} \cdot (n_z)^2 - \frac{n_r}{r}$$

где \ddot{h} вычисляется по форме свободной поверхности:

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

Профиль термокапиллярной деформации. После начала конвективных течений вследствие изменения поверхностного натяжения жидкости и ее растекания, свободная поверхность начинает деформироваться, образуется термокапиллярное углубление. На рис. 1 изображен профиль термокапиллярной деформации свободной поверхности в различные моменты времени и в установив-

шемся режиме. В модели учитывается движение жидкости под действием теплового расширения. Это вызывает незначительное поднятие холмика жидкости на начальной стадии конвекции. Эта ситуация изображена на рис. 1(а).

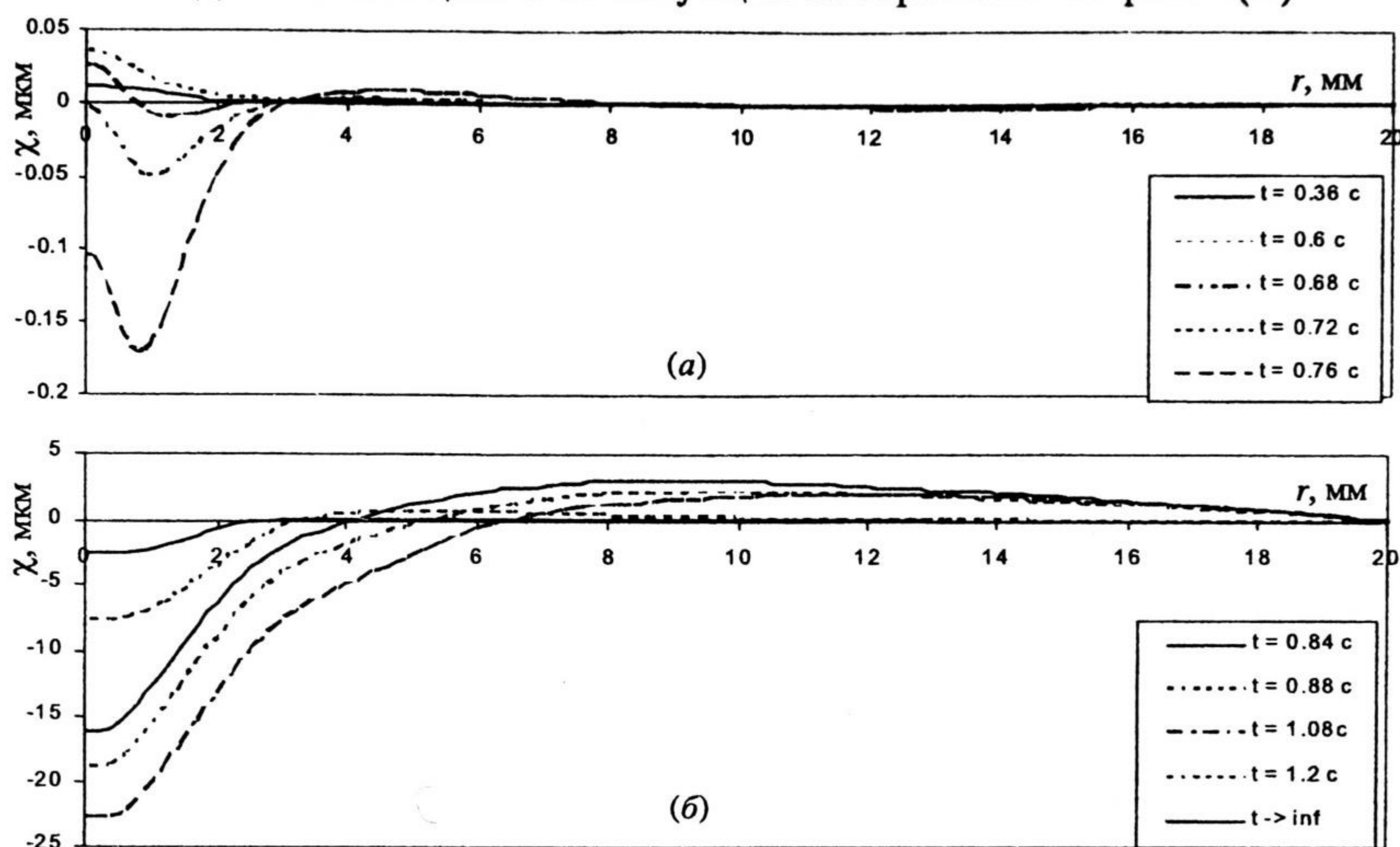


Рис. 1. Формирование профиля термокапиллярной деформации свободной поверхности жидкости.

Слой н-октана толщиной 1.5 мм, мощность пучка лазера 20.9 мВт

С некоторого момента времени жидкость растекается и формируется углубление. На рис. 1(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 810 мкм этот момент соответствует времени $t = 1.08 \text{ c}$ от начала теплового воздействия пучком лазера. В дальнейшем поверхность незначительно поднимается и течения и профиль стационаризируются.

Время задержки термокапиллярной конвекции. При нагреве лазерным пучком слоя прозрачной жидкости на поглощающей подложке возникает задержка термокапиллярного отклика [5]. Эта задержка вызвана тем, что требуется некоторое время τ_d , чтобы тепловое возмущение дошло от подложки до свободной поверхности жидкости и инициировало термокапиллярное течение. Очевидно, что величина τ_d зависит от толщины h_0 слоя жидкости, мощности P пучка лазера, ряда свойств подложки и жидкости и состояния ее свободной поверхности. Это наводит на мысль использовать время задержки для бесконтактного экспресс-анализа указанных параметров, что делает задачу о развитии термокапиллярной конвекции актуальной [5].

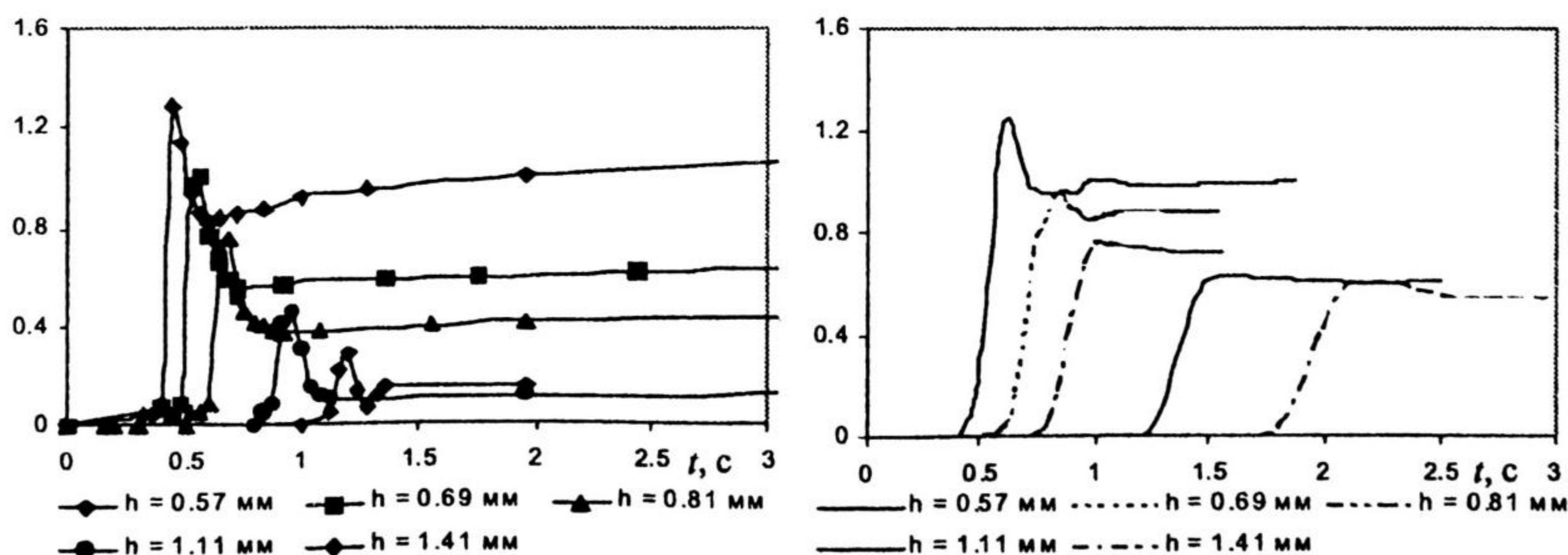


Рис. 2. Зависимость диаметра отклика (слева) и тангенса максимального угла наклона свободной поверхности (справа) в абсолютных величинах

Из экспериментов известно, что диаметр термокапиллярного отклика связан с максимальным углом наклона деформированной свободной поверхности. На рис. 2 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 стационаризацию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Визнюк С. Ф., Суходольский А. Т. О ТК самовоздействию лазерного излучения в тонких слоях поглощающей жидкости // КЭ-1988. Т. 15. № 4. С. 767-770.
2. 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.
3. 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.
4. Harlow, F. H., Welch, J. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface // The Physics of Fluids. 1965. V. 8. №. 12. P. 2182-2189.
5. 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.
6. Безуглый Б. А., Чемоданов С. И. Эффект задержки термокапиллярного отклика слоя прозрачной жидкости при лазерном нагреве поглощающей подложки // Журнал технической физики. 2005. Т. 75. Вып. 9. С. 136-138.
7. Безуглый Б. А., Галашин Е. А., Дудкин Г. Я. О фотоконденсации йода // Письма в ЖЭТФ. 1975. № 22 (2). С. 76-79.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Гидродинамика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 736 с.
9. Зуева А. Ю. Математическая модель термокапиллярной конвекции // Под. ред. В.Н. Кутрунова, Б. А. Безуглого. Тюмень, Вектор Бук, 2006. 48 с.