

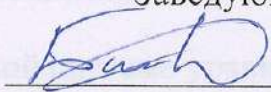
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК
Кафедра фундаментальной математики и механики

РЕКОМЕНДОВАНО К ЗАЩИТЕ
В ГЭК И ПРОВЕРЕНО НА ОБЪЕМ
ЗАИМСТВОВАНИЯ

Заведующий кафедрой

к. ф. -м. н.


Басинский К.Ю.

2019 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
(магистерская диссертация)

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ
ПРИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ВОДЫ ПРИ НАЛИЧИИ ПАВ

01.04.01 Математика

Магистерская программа «Вычислительная механика»

Выполнила работу
Студентка 2 курса
очной формы обучения



(Подпись)

Грачева
Татьяна
Александровна

Научный руководитель
к. ф. -м. н., доцент



(Подпись)

Актаев
Нуркен
Ерболатович

Рецензент
к. ф. -м. н.,
заведующий кафедрой
Моделирования физических
процессов и систем
Физико-Технического
института ТюмГУ



(Подпись)

Ганопольский
Родион
Михайлович

Тюмень, 2019

ОГЛАВЛЕНИЕ

НОМЕНКЛАТУРА.....	3
ВВЕДЕНИЕ.....	5
ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ.....	9
ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ	14
РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ.....	18
1. Конечно-разностный вид системы уравнений	18
2. Применение метода Зейделя к полученной системе уравнений	22
1.1. Суть метода.....	22
1.2. Матричная запись метода Зейделя	25
1.3. Применение.....	26
АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ.....	34
ВЫВОДЫ.....	42
СПИСОК ИСТОЧНИКОВ.....	44
ПРИЛОЖЕНИЕ 1	46
ПРИЛОЖЕНИЕ 2	47

НОМЕНКЛАТУРА

U	радиальная компонента скорости	м/с
V	вертикальная компонента скорости	м/с
T	температура	К
p	давление	Па
q	плотность мощности локального источника тепла	Вт/м ²
W	мощность локального источника тепла	Вт
r_b	радиус лазерного луча	м
w	фактор ацентричности смеси	–
M	молекулярная масса	г/моль
R_g	универсальная газовая постоянная	Дж/моль·К
p_c	критическое давление	Па
T_c	критическая температура	К
ρ	плотность жидкости	кг/м ³
μ	динамическая вязкость	Па·с
ν	кинематическая вязкость	м ² /с
σ	поверхностное натяжение	Н/м
σ_T	температурный коэффициент поверхностного натяжения	Н/м·К
\tilde{T}	температура окружающей среды	К

λ	коэффициент теплопроводности	Вт/м·К
g	ускорение свободного падения	м/с ²
a	коэффициент температуропроводности	м ² /с
h	коэффициент теплоотдачи	Вт/м ² ·К
ε	заданная точность вычислений	—

ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее актуальных тем для физических и экспериментальных исследований в последнее десятилетие являются ансамбли частиц, состоящих из микрокапель. Интерес к данной теме обусловлен применимостью методов, основанных на микрокапельных ансамблях в различных областях химии, физики, биологии и микрофлюидики.

Например, водные капли, диспергированные в масле используются в качестве реакционных сосудов пиколитрового объема, и они позволяют проводить скрининги сложных биологических систем для измерения биохимических реакций со сверхвысокой пропускной способностью [8].

Так же, массивы монодисперсных микрокапель создают микрофлюидную систему, которая может быть использована для управления множеством химических реакций в миллисекундном масштабе [15].

Более того, обширные возможности применения микрокапель демонстрируются в микроэлектромеханических системах (MEMS) и био-MEMS-устройства. В работе [13] показывается возможность применения амплификации в микрофлюидных каплях, такой метод является высокопроизводительным для обнаружения и анализа биомаркеров клеточной поверхности.

Одна из современных мировых тенденций – это создание различных нано и микроэлектромеханических систем и создание устройств lab-on-a-chip («лаборатории на чипе»). Все большая миниатюризация приборов влечет за собой необходимость в создании новых типов микросистем и микрореакторов.

В 2003 году доктор технических наук А. А. Федорев обнаружил такое явление как капельный кластер. Это гексагональная структура из микрокапель конденсата, левитирующих на расстоянии сопоставимом с диаметром капель над свободной поверхностью горизонтального слоя активно испаряющейся жидкости [6]. Кластер — стабильное образование, позволяющее изучать капли

индивидуально. Понимание механизмов микрокапельного кластера важно с фундаментальной точки зрения: в них можно проводить химические реакции, что обещает весьма перспективные применения.

Для проявления и устойчивого существования вышеописанной структуры должны быть выполнены некоторые условия:

- локальный характер нагрева межфазной поверхности;
- отсутствие термокапиллярных течений.

Интерес к термокапиллярной деформации свободной поверхности тонкого жидкого слоя впервые был продемонстрирован в работах Бенарда (1900) [9]. Он первым наблюдал деформацию поверхности с устойчивой конвекцией и измерил величину изгиба в центре ячейки.

В 1939 году Херши провел эксперименты, в которых он наблюдал образование термокапиллярного «холма» в тонком слое воды на стеклянной пластине, касаясь стеклянной пластины снизу стеклянным стержнем, охлажденным в жидком азоте. При некоторых упрощающих предположениях он также получил приблизительную оценку высоты этого холма из уравнений Навье – Стокса [10].

Впервые оценка глубины термокапиллярной деформации потребовалась в лакокрасочной промышленности для разработки методов декоративных покрытий [7].

Тонкие жидкие пленки также широко используются в технологических процессах, так как они обеспечивают высокую скорость тепломассопереноса, значительную поверхность контакта фаз и, в некоторых случаях, незначительные потери давления при малых удельных скоростях потока жидкости. Пленочные потоки специально используются в различных системах химической, пищевой, фармацевтической и криогенной промышленности.

Пленочные системы охлаждения электронных компонентов имеют большой потенциал, однако тонкие пленки могут разрушаться, и части поверхности, не содержащие жидкости, не будут участвовать в процессе тепломассопереноса, что значительно снизит эффективность систем.

Движение пленок обусловлено эффектом Марангони, вызванным градиентом температуры или градиентом концентрации компонентов на границе раздела жидкость-газ.

Во многих работах уравнения для течения вязкой жидкости в различных режимах локального нагрева как от основания, которое может быть наклонено под углом к горизонту, так и от свободной поверхности, выводятся при различных предположениях. Например, проблема нестационарного течения вязкой жидкости под действием лазерного импульса, действующего на свободную поверхность, рассмотрена в [12]. В работе [14] рассматривается течение неизотермических тонких пленок на основании, расположенном под углом к горизонту под действием силы тяжести с учетом динамического воздействия газа на жидкость.

Следует отметить, что большая часть информации о термокапиллярных течениях была получена экспериментально. Так же различные аспекты данной проблемы изучались численными методами. В данной работе будет рассмотрена математическая модель термокапиллярной конвекции Марангони и так же учтено влияние содержания поверхностно-активных веществ.

Таким образом **целью** данной работы является расчет влияния ПАВ на формирование термокапиллярной деформации в тонком, локально нагреваемом слое воды

Основные задачи:

- изучить процессы, протекающие в тонком слое воды в результате действия термокапиллярной конвекции;
- на основе процессов выделить основные допущения, применяемые в процессе построения математической модели;
- составить систему уравнений, описывающую данный процесс – т.е. построить математическую модель;
- изучить итерационный метод решения – метод Зейделя-Гаусса
- привести систему к виду, пригодному для дальнейшего численного исследования;
- написать программу для решения данной задачи, используя язык программирования matlab;
- произвести анализ полученных результатов.

ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим горизонтально расположенный тонкий слой жидкости со свободной поверхностью. В основании его расположен источник тепла, задающий конечное осесимметричное распределение температуры. Геометрия рассматриваемой задачи представлена на рисунке 1.

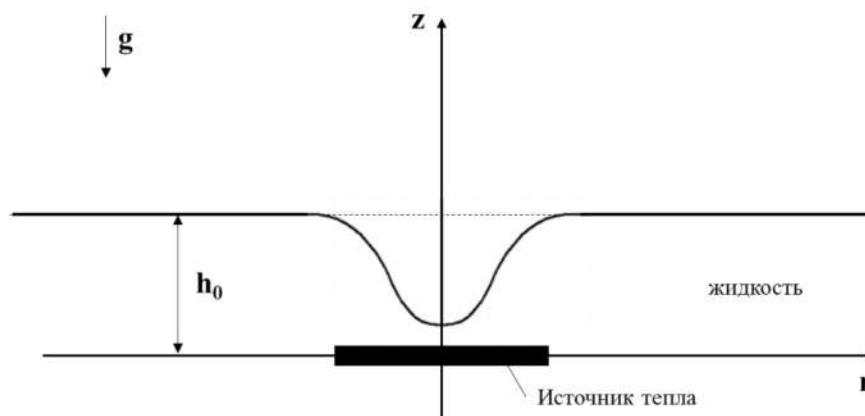


Рисунок 1. Геометрия задачи

Неравномерное распределение температуры достигается воздействием лазера с плотностью потока, равной:

$$q = \frac{W}{\pi(r_b + 3.66 \cdot 10^{-4})^2} \exp\left\{-\frac{2r^2}{(r_b + 3.66 \cdot 10^{-4})^2}\right\} \quad (1.1)$$

Где q - поверхностная плотность мощности источника тепла, Вт / м²; W - мощность локального источника тепла, Вт; r_b - радиус лазерного луча, м. [11]

Таким образом, в жидкости возникает неравномерное температурное распределение, вызванное теплопередачей и эта неравномерность, в свою очередь, является причиной проявления термокапиллярного эффекта - деформации поверхности слоя (рисунок 2).

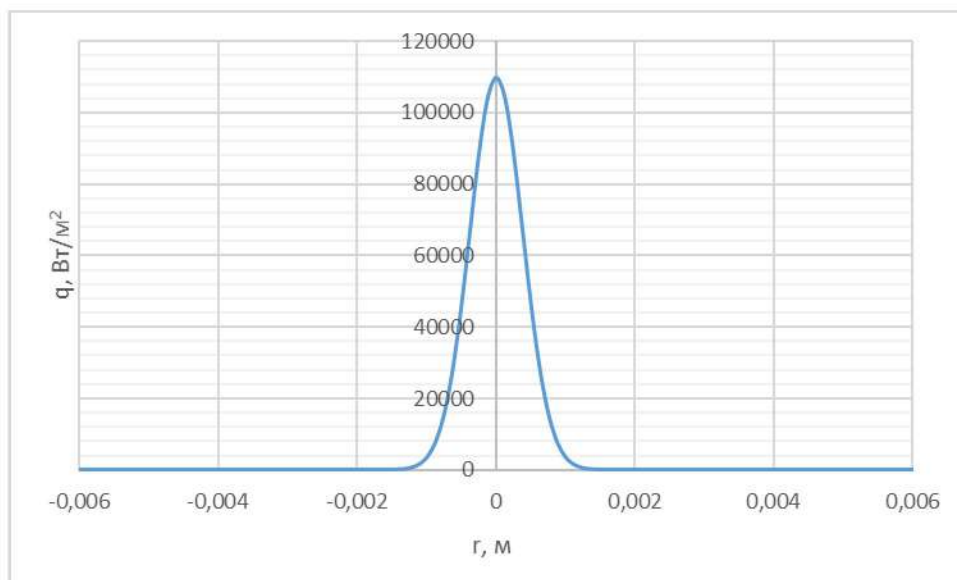


Рисунок 2. Плотность мощности источника тепла

Термокапиллярный эффект или эффект Марангони (рисунок 3) проявляется в уменьшении поверхностного натяжения жидкости при увеличении температуры. Поверхностное натяжение является характеристикой взаимодействия между двумя средами. Оно описывает количество энергии необходимой для расширения удельной поверхности такого взаимодействия на одну единицу [16].

Следующее уравнение описывает силы, которые применяются на границе раздела (вода/воздух) при эффекте Марангони. Оно показывает равенство вязкого напряжения и сил поверхностного натяжения:

$$\mu \frac{\partial U}{\partial z} = \frac{\partial \sigma}{\partial r} \quad (1.2)$$

Где μ – динамическая вязкость, Па·с; U – радиальная компонента скорости, м/с; σ – поверхностное натяжение, Н/м

Предполагается, что коэффициент поверхностного натяжения линейно зависит от температуры.

$$\sigma = \sigma_0 - \sigma_T(T - \tilde{T}) \quad (1.3)$$

Где σ_T – температурный коэффициент поверхностного натяжения жидкости, Н/м·К; \tilde{T} – температура окружающей среды, К.

При различии температур возникает движущая сила растекания пропорциональная градиенту поверхностного натяжения (жидкость начинает перемещаться в области с большим коэффициентом поверхностного натяжения - будет стремиться к правой и левой границам рассматриваемой модели), причем влияние неравномерного нагрева различно для чистых жидкостей и растворов ПАВ [17].

Системы с наличием ПАВ имеют меньшее поверхностное натяжение, что приводит к уменьшению градиента скорости и снижению эффекта термокапиллярной конвекции – уменьшению или полному отсутствию деформации.

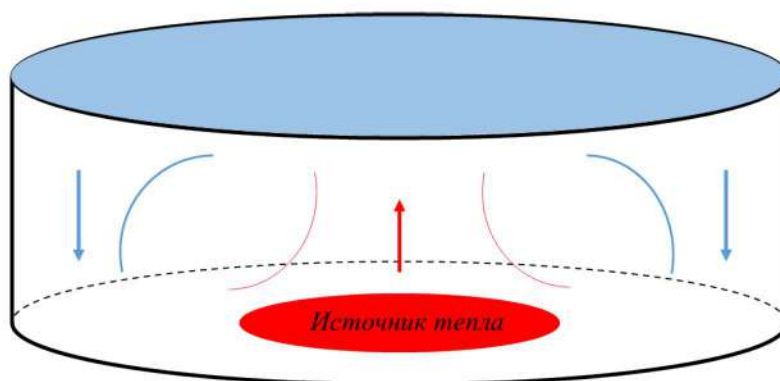


Рисунок 3. Проявление эффекта термокапиллярной конвекции

Для описания давления рассматриваемой системы используем широкодиапазонное уравнение состояния. В научной практике применение

уравнений состояния многокомпонентных газов или жидких фракций может привести к появлению погрешностей. Однако в уравнениях Навье-Стокса, применимых в данной задаче, используются не сами значения давлений, а их разность, что дает достаточное основание для применения данного уравнения к рассматриваемой проблеме.

У настоящему времени предложено большое количество уравнений состояния для расчета свойств смесей. Одно из наиболее применимых в математическом моделировании - это уравнение состояния Пенга-Робинсона. Оно является модификацией уравнения Ван-дер-Ваальса. Оно было опубликовано в 1976 году. Общая форма уравнения для однокомпонентного газа может быть записана в следующем виде [4]:

$$p = \frac{\rho R_0 T}{M - \beta \rho} - \frac{\alpha \rho^2 (1 + s_1 (1 - (s_2 T)^{1/2}))^2}{s_3 + s_4 \rho - s_5 \rho^2} \quad (1.4)$$

Где:

$$\begin{aligned} s_1 &= a_1 + a_2 w - a_3 w^2 & \alpha &= a_0 \frac{R_0^2 T_c^2}{p_c} & a_0 &= 0.45724 \\ s_2 &= T_c^{-1} & \beta &= b_0 \frac{R_0 T_c}{p_c} & b_0 &= 0.07780 \\ s_3 &= M^2 & & & a_1 &= 0.37464 \\ s_4 &= 2\beta M & & & a_2 &= 1.54226 \\ s_5 &= \beta^2 & & & a_3 &= 0.26992 \end{aligned} \quad (1.5)$$

ρ – плотность жидкости, кг/м³; w – фактор ацентричности смеси; M – молекулярная масса, г/моль; R_0 - универсальная газовая постоянная, Дж/моль·К; p_c , T_c – критические давление и температура, Па, К.

Таким образом, основные допущения:

- Осевая симметрия задачи позволяет рассматривать только часть геометрии
- Жидкость вязкая и несжимаемая
- Во всем рассматриваемом пространстве применяется фиксированное значение вязкости
- Задача стационарная
- Радиальные компоненты рассматриваются в приближении бесконечной длины
- Давление описывается широкодиапазонным уравнением состояния $p = p(\rho, T)$

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Математически задача включает в себя уравнения Навья-Стокса, уравнения неразрывности и уравнение теплопроводности. Для двумерного стационарного случая в цилиндрических координатах система примет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} U \frac{\partial U}{\partial r} + V \frac{\partial U}{\partial z} = - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial r} + \nu \Delta U \\ U \frac{\partial V}{\partial r} + V \frac{\partial V}{\partial z} = - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \Delta V - g \\ \frac{1}{r} \frac{\partial(rU)}{\partial r} + \frac{\partial V}{\partial z} = 0 \\ U \frac{\partial T}{\partial r} + V \frac{\partial T}{\partial z} = a \Delta T \end{array} \right. \quad (2.1)$$

Где U – компонента скорости в направлении r , м/с; V – компонента скорости в направлении z , м/с; ρ_0 – плотность жидкости, кг/м³; ν – кинематическая вязкость, м²/с; p – давление, Па; T – температура, К; a – коэффициент температуропроводности, м²/с; g – ускорение свободного падения, м/с².

Рассмотрим граничные условия данной задачи.

- На верхней границе $z = h_0$

На границе раздела фаз учтем равенство поверхностной силы и вязкого напряжения, то есть наличие эффекта Марангони:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial z} \right|_{z=h} = - \frac{\sigma_T}{\nu \rho_0} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (2.2)$$

Аналогично для z -компоненты скорости имеем

$$\left. \frac{\partial V}{\partial z} \right|_{z=h} = - \frac{\sigma_T}{\nu \rho_0} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (2.3)$$

На верхней границе происходит передача тепла, используем граничные условия третьего рода. При этом задаются температура окружающей среды \tilde{T} и закон теплообмена между поверхностью тела и окружающей средой. Для описания процесса теплообмена между поверхностью тела и средой используется закон Ньютона—Рихмана.

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=h} = h_2 (\tilde{T} - T) \quad (2.4)$$

Где λ – коэффициент теплопроводности, Вт/м·К; h_2 – коэффициент теплоотдачи, Вт/м²·К; \tilde{T} - температура окружающей среды, К.

- На нижней границе $z = 0$

Для скоростей выбираем условия прилипания

$$\begin{cases} U|_{z=0} = 0 \\ V|_{z=0} = 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

Для уравнения теплопроводности используем граничные условия третьего рода с учетом наличия источника тепла

$$-\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = h_1 (\tilde{T} - T) + q \quad (2.6)$$

- На левой границе $r = 0$

Исходя из симметрии задачи имеем граничные условия второго рода.

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial U}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \\ \left. \frac{\partial V}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \\ \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

В данном случае в уравнениях Навье-Стокса и теплопроводности наблюдается неопределенность типа $0/0$. Раскроем ее используя правило Лопиталья:

$$\begin{aligned} \lim_{r=0} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \right) &= \lim_{r=0} \left(\frac{\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \right)}{\frac{\partial}{\partial r} (r)} \right) \\ &= \lim_{r=0} \left(r \frac{\partial^3 U}{\partial r^3} + 2 \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right) = 2 \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \lim_{r=0} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V}{\partial r} \right) \right) &= 2 \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} \\ \lim_{r=0} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right) &= 2 \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Тогда уравнения из системы (2.1) примут вид:

$$\begin{cases} V \frac{\partial U}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial r} + \nu \left(2 \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right) \\ V \frac{\partial V}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} - g + \nu \left(2 \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right) \\ V \frac{\partial T}{\partial z} = a \left(2 \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \end{cases} \quad (2.10)$$

- На правой границе $r = R$

Для скоростей выбираем условия прилипания

$$\begin{cases} U|_{r=R} = 0 \\ V|_{r=R} = 0 \end{cases} \quad (2.11)$$

Для температуры, для большей устойчивости решения, задаем граничные условия второго рода – условия Неймана.

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R} = 0 \quad (2.12)$$

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

1. Конечно-разностный вид системы уравнений

Для решения распишем систему дифференциальных уравнений (2.1) в конечно-разностном виде, используя правые разностные формы

$$\begin{aligned}\frac{df}{dx} &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \\ \frac{d^2f}{dx^2} &= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}\end{aligned}\tag{3.1}$$

Тогда уравнения системы примут вид

$$\begin{aligned}U_{ij} \frac{U_{i+1,j} - U_{ij}}{\Delta r} + V_{ij} \frac{U_{i,j+1} - U_{ij}}{\Delta z} \\ = -\frac{1}{\rho_0} \frac{p_{i+1,j} - p_{ij}}{\Delta r} + v \left(\frac{U_{i+1,j} - 2U_{ij} + U_{i-1,j}}{\Delta r^2} \right. \\ \left. + \frac{1}{r} \frac{U_{i+1,j} - U_{ij}}{\Delta r} + \frac{U_{i,j+1} - 2U_{ij} + U_{i,j-1}}{\Delta z^2} \right)\end{aligned}\tag{3.2}$$

$$\begin{aligned}U_{ij} \frac{V_{i+1,j} - V_{ij}}{\Delta r} + V_{ij} \frac{V_{i,j+1} - V_{ij}}{\Delta z} \\ = -\frac{1}{\rho_0} \frac{p_{i,j+1} - p_{ij}}{\Delta z} - g + v \left(\frac{V_{i+1,j} - 2V_{ij} + V_{i-1,j}}{\Delta r^2} \right. \\ \left. + \frac{1}{r} \frac{V_{i+1,j} - V_{ij}}{\Delta r} + \frac{U_{i,j+1} - 2V_{ij} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} \right)\end{aligned}\tag{3.3}$$

$$\begin{aligned}
U_{ij} \frac{T_{i+1,j} - T_{ij}}{\Delta r} + V_{ij} \frac{T_{i,j+1} - T_{ij}}{\Delta z} \\
= a \left(\frac{T_{i+1,j} - 2T_{ij} + T_{i-1,j}}{\Delta r^2} + \frac{1}{r} \frac{T_{i+1,j} - T_{ij}}{\Delta r} \right. \\
\left. + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{ij} + T_{i,j-1}}{\Delta z^2} \right)
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Далее запишем граничные условия в конечно-разностном виде.

- На верхней границе $z = h_0, j = M$

Для уравнения Навье-Стокса

$$\frac{U_{i,M+1} - U_{i,M}}{\Delta z} = - \frac{\sigma_T}{\nu \rho_0} \left(\frac{T_{i+1,M} - T_{i,M}}{\Delta r} \right) \tag{3.5}$$

Окончательно

$$\begin{cases} U_{i,M+1} = - \frac{\sigma_T \Delta z}{\nu \rho_0 \Delta r} (T_{i+1,M} - T_{i,M}) \\ V_{i,M+1} = - \frac{\sigma_T \Delta z}{\nu \rho_0 \Delta r} (T_{i+1,M} - T_{i,M}) \end{cases} \tag{3.6}$$

Для уравнения теплопроводности

$$\lambda \frac{T_{i,M+1} - T_{i,M-1}}{2\Delta z} = h_2 (\tilde{T} - T_{i,M}) \tag{3.7}$$

Введем переобозначение:

$$\tilde{h}_2 = \frac{2\Delta z h_2}{\lambda} \tag{3.8}$$

Окончательно получим:

$$T_{i,M+1} = T_{i,M-1} + \widetilde{h}_2(\widetilde{T} - T_{i,M}) \quad (3.9)$$

- На нижней границе $z = 0, j = 0$

Для уравнения Навье-Стокса

$$\begin{cases} U_{i0} = 0 \\ V_{i0} = 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

Для уравнения теплопроводности

$$-\lambda \frac{T_{i,1} - T_{i,-1}}{2\Delta z} = h_1(\widetilde{T} - T_{i,0}) + q \quad (3.11)$$

Введем замену:

$$\widetilde{h}_1 = \frac{2\Delta z h_1}{\lambda} \quad (3.12)$$

Окончательно получим:

$$T_{i,-1} = T_{i,1} + \widetilde{h}_1(\widetilde{T} - T_{i,0}) + q \frac{\widetilde{h}_1}{h_1} \quad (3.13)$$

- На левой границе $r = 0$, $i = 0$

Для уравнения Навье-Стокса

$$\frac{U_{0,j} - U_{-1,j}}{\Delta r} = 0 \quad (3.14)$$

Окончательно

$$\begin{cases} U_{0,j} = U_{-1,j} \\ V_{0,j} = V_{-1,j} \\ T_{0,j} = T_{-1,j} \end{cases} \quad (3.15)$$

- На правой границе $r = R$, $i = N$

Для уравнения Навье-Стокса

$$\begin{cases} U_{N,j} = 0 \\ V_{N,j} = 0 \end{cases} \quad (3.16)$$

Для уравнения теплопроводности

$$\frac{T_{N+1,j} - T_{N,j}}{\Delta r} = 0 \quad (3.17)$$

Или

$$T_{N+1,j} = T_{N,j} \quad (3.18)$$

2. Применение метода Зейделя к полученной системе уравнений

Существует большое число методов решения систем линейных алгебраических уравнений, например, прямые: метод Гаусса, метод квадратного корня, итерационные методы: метод Якоби.

Решение, которое дают прямые методы, достигается после выполнения конечного числа операций и часто полученное этими способами решение не достигает достаточной точности. Итерационные же методы используют для решения последовательные приближения, что позволяет решать задачу с любой поставленной точностью. Однако, в случае итерационных методов заранее неизвестно количество необходимых для решения последовательных приближений.

Для решения системы уравнений (2.1) нами был использован метод Зейделя - классический итерационный метод решения системы линейных уравнений, обладающий достаточной простотой и легкостью программирования.

1.1. Суть метода

Рассмотрим систему:

$$Ax = f \quad (4.1)$$

где матрица $A = [a_{ij}]$, $i, j = 1, 2, \dots, m$, имеет обратную, $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T$, $f = (f_1, f_2, \dots, f_m)^T$

Преобразуем систему (4.1) в виду (предполагая, что все $a_{ii} \neq 0$):

$$x_i = - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j - \sum_{j=i+1}^m \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j + \frac{f_i}{a_{ii}} \quad (4.2)$$

При этом значение суммы равно нулю, если верхний предел суммирования меньше нижнего. То есть уравнение (4.2) при $i = 1$ имеет вид

$$x_1 = - \sum_{j=2}^m \frac{a_{1j}}{a_{11}} x_j + \frac{f_1}{a_{11}} \quad (4.3)$$

Введем обозначение номера итерации, например

$$x^n = (x_1^n, x_2^n, \dots, x_m^n)^T \quad (4.4)$$

где x_i^n - n -я итерация i -й компоненты вектора x .

Итерационный метод Зейделя имеет вид:

$$x_i^{n+1} = - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j - \sum_{j=i+1}^m \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j^n + \frac{f_i}{a_{ii}} \quad (4.5)$$

$$i = 1, 2, \dots, m \quad n = 0, 1, \dots, n_0$$

Первая компонента x_1^{n+1} вектора x_i^{n+1} находится из уравнения (4.5) явным образом, для ее вычисления нужно знать вектор x^{n+1} и значение f_1 . При нахождении x_2^{n+1} используются только что найденное значение x_1^{n+1} и известные значения $x_j^n, j=3, \dots, m$, с предыдущей итерации. Таким образом, компоненты x_i^{n+1} вектора x^{n+1} находятся из уравнения (4.5) последовательно, начиная с $i = 1$. Выбор значений, посчитанных на этой же итерации, что и искомое значение улучшает сходимость метода [5].

Итерационный процесс будет продолжаться до тех пор пока значения x_i^{n+1} не станут достаточно близкими к x_i^n . Таким образом, при заданной точности вычислений $\varepsilon > 0$ можно записать критерий окончания процесса:

$$\delta = \max_i |x_i^{n+1} - x_i^n| \leq \varepsilon \quad (4.6)$$

Доказано, что для сходимости метода Зейделя-Гаусса достаточно, чтоб модули диагональных коэффициентов были не меньше суммы модулей всех остальных коэффициентов [2].

$$|a_{ii}| \geq \sum_{i \neq j} |a_{ij}|, \quad i, j = 1, 2, \dots, m \quad (4.7)$$

Таким образом можно записать алгоритм метода:

1. Ввод исходных данных: A, f, ε
2. Задание начального приближения: x_i^1
3. Присвоение $x_i^0 = x_i^1$
4. Расчет значения x_i^1 по формуле (4.5)
5. Вычисление наибольшей из разностей $|x_i^{n+1} - x_i^n|$
6. Проверка условия (4.6). Если оно выполняется, то переход к пункту 7, иначе переход к новой итерации к пункту 3.
7. Расчет закончен. Вывод результатов x_i^1

1.2. Матричная запись метода Зейделя

Для исследования сходимости итерационных методов удобнее записывать их не в координатной, а в матричной форме. Представим матрицу A системы (4.1) в виде суммы трех матриц

$$A = A_1 + D + A_2 \quad (4.8)$$

где D - диагональная матрица с той же главной диагональю, что и матрица A , матрица A_1 — нижняя треугольная и матрица, A_2 — верхняя треугольная с нулевыми главными диагоналями.

Представление системы (4.1) в форме (4.2) эквивалентно ее записи в виде матричного уравнения:

$$x = -D^{-1}A_1x - D^{-1}A_2x + D^{-1}f \quad (4.9)$$

Метод Зейделя записывается в виде

$$x^{n+1} = -D^{-1}A_1x^{n+1} - D^{-1}A_2x^n + D^{-1}f \quad (4.10)$$

или

$$(D + A_1)x^{n+1} + A_2x^n = f \quad (4.11)$$

Учитывая (4.8) уравнение (4.11) можно привести к виду

$$(D + A_1)(x^{n+1} - x^n) + Ax^n = f \quad (4.12)$$

Из этой записи видно, что если итерационный метод сходится, то он сходится к решению исходной системы уравнений.

1.3. Применение

Используя итерационный метод Зейделя (4.5) для уравнения (3.2) получим:

$$\begin{aligned}
 U_{ij}^n \frac{U_{i+1,j}^n - U_{ij}^{n+1}}{\Delta r} + V_{ij}^n \frac{U_{i,j+1}^n - U_{ij}^{n+1}}{\Delta z} \\
 = -\frac{1}{\rho_0} \frac{p_{i+1,j}^n - p_{ij}^{n+1}}{\Delta r} + v \left(\frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{ij}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta r^2} \right. \\
 \left. + \frac{1}{r} \frac{U_{i+1,j}^n - U_{ij}^{n+1}}{\Delta r} + \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{ij}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right)
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Произведя перегруппировку получим

$$U_{i,j}^{n+1} = A_1 U_{i+1,j}^n + A_2 U_{i,j+1}^n + A_3 U_{i-1,j}^{n+1} + A_4 U_{i,j-1}^{n+1} + A_5 \tilde{p}_r \tag{5.2}$$

$$V_{i,j}^{n+1} = A_1 V_{i+1,j}^n + A_2 V_{i,j+1}^n + A_3 V_{i-1,j}^{n+1} + A_4 V_{i,j-1}^{n+1} + A_5 \tilde{p}_z \tag{5.3}$$

Где

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \frac{(v(r + \Delta r) - U_{i,j}^n r \Delta r)(\Delta z)^2}{A} \\
 A_2 &= \frac{(v - V_{i,j}^n \Delta z)r(\Delta r)^2}{A}
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

$$A_3 = \frac{vr(\Delta z)^2}{A}$$

$$A_4 = \frac{vr(\Delta r)^2}{A}$$

$$A_5 = \frac{r(\Delta r)^2(\Delta z)^2}{A}$$

$$A = v(\Delta r(\Delta z)^2 + 2r((\Delta z)^2 + (\Delta r)^2)) - r\Delta r\Delta z(U_{i,j}^n\Delta z + V_{i,j}^n\Delta r)$$

$$\tilde{p}_r = -\frac{1}{\rho_0} \frac{p_{i+1,j}^n - p_{ij}^{n+1}}{\Delta r}$$

$$\tilde{p}_z = -\frac{1}{\rho_0} \frac{p_{i,j+1}^n - p_{ij}^{n+1}}{\Delta z} - g$$

(5.5)

Аналогично для уравнения теплопроводности

$$T_{i,j}^{n+1} = B_1 T_{i+1,j}^n + B_2 T_{i,j+1}^n + B_3 T_{i-1,j}^{n+1} + B_4 T_{i,j-1}^{n+1}$$

(5.6)

Где

$$B_1 = \frac{(a(r + \Delta r) - U_{i,j}^n r \Delta r)(\Delta z)^2}{A}$$

$$B_2 = \frac{(a - V_{i,j}^n \Delta z)r(\Delta r)^2}{A}$$

$$B_3 = \frac{ar(\Delta z)^2}{A}$$

$$B_4 = \frac{ar(\Delta r)^2}{A}$$

(5.7)

$$B = a(\Delta r(\Delta z)^2 + 2r((\Delta z)^2 + (\Delta r)^2)) - r\Delta r\Delta z(U_{i,j}^n\Delta z + V_{i,j}^n\Delta r)$$

Далее рассмотрим граничные условия с помощью выбранного метода.

- Для верхней границы

Подставим (3.6) в (5.2), а (3.9) в (5.6), тогда получим

$$U_{i,M}^{n+1} = A_1 U_{i+1,M}^n - \frac{\sigma_T \Delta z A_2}{\nu \rho_0 \Delta r} (T_{i+1,M} - T_{i,M}) + A_3 U_{i-1,M}^{n+1} + A_4 U_{i,M-1}^{n+1} + A_5 \tilde{p}_r \quad (5.8)$$

$$V_{i,M}^{n+1} = A_1 V_{i+1,M}^n - \frac{\sigma_T \Delta z A_2}{\nu \rho_0 \Delta r} (T_{i+1,M} - T_{i,M}) + A_3 V_{i-1,M}^{n+1} + A_4 V_{i,M-1}^{n+1} + A_5 \tilde{p}_z \quad (5.9)$$

$$T_{i,M}^{n+1} = \frac{1}{1 + B_2 \tilde{h}_2} (B_1 T_{i+1,M}^n + B_2 (2T_{i,M-1}^{n+1} + \tilde{h}_2 \tilde{T}) + B_3 T_{i-1,M}^{n+1}) \quad (5.10)$$

- Для нижней границы

Подставим (3.13) в (5.6), тогда получим

$$U_{i,0}^n = 0 \quad (5.11)$$

$$V_{i,0}^n = 0 \quad (5.12)$$

$$T_{i,0}^{n+1} = \frac{1}{1 + B_2 \tilde{h}_1} (B_1 T_{i+1,0}^n + 2B_2 T_{i,1}^n + B_2 \tilde{h}_1 (\tilde{T} + \frac{q}{h_1}) + B_3 T_{i-1,0}^{n+1}) \quad (5.13)$$

- Для левой границы

Уравнения (2.10) с помощью метода Зейделя распишутся как

$$\begin{aligned}
V_{0j}^n \frac{U_{0,j+1}^n - U_{0j}^{n+1}}{\Delta z} &= \tilde{p}_r + v \left(2 \frac{U_{1,j}^n - 2U_{0j}^{n+1} + U_{-1,j}^{n+1}}{\Delta r^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{U_{0,j+1}^n - 2U_{0j}^{n+1} + U_{0,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right)
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Произведем перегруппировку с учетом (3.15)

$$U_{0,j}^{n+1} = C_1 U_{1,j}^n + C_2 U_{0,j+1}^n + C_3 U_{0,j-1}^{n+1} + C_4 \tilde{p}_r \tag{5.15}$$

$$V_{0,j}^{n+1} = C_1 V_{1,j}^n + C_2 V_{0,j+1}^n + C_3 V_{0,j-1}^{n+1} + C_4 \tilde{p}_z \tag{5.16}$$

Где

$$\begin{aligned}
C_1 &= \frac{2v(\Delta z)^2}{C} \\
C_2 &= \frac{(v - V_{i,j}^n \Delta z)(\Delta r)^2}{C} \\
C_3 &= \frac{v(\Delta r)^2}{C} \\
C_4 &= \frac{(\Delta r)^2 (\Delta z)^2}{C}
\end{aligned} \tag{5.17}$$

$$C = 2v((\Delta z)^2 + (\Delta r)^2) - (\Delta r)^2 \Delta z V_{i,j}^n$$

А для температуры

Произведем перегруппировку с учетом (3.15)

$$T_{0,j}^{n+1} = D_1 T_{1,j}^n + D_2 T_{0,j+1}^n + D_3 T_{0,j-1}^{n+1} \quad (5.18)$$

Где

$$\begin{aligned} D_1 &= \frac{2a(\Delta z)^2}{D} \\ D_2 &= \frac{(a - V_{i,j}^n \Delta z)(\Delta r)^2}{D} \\ D_3 &= \frac{a(\Delta r)^2}{D} \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$D = 2a((\Delta z)^2 + (\Delta r)^2) - (\Delta r)^2 \Delta z V_{i,j}^n$$

- Для правой границы

Подставим (3.18) в (5.6), тогда получим с учетом того, что $B_2 = B_4$ (так как $V = 0$)

$$U_{N,j}^n = 0 \quad (5.20)$$

$$V_{N,j}^n = 0 \quad (5.21)$$

$$T_{N,j}^{n+1} = \frac{1}{1-B_1} (B_2 T_{N,j+1}^n + B_2 T_{N,j-1}^{n+1} + B_3 T_{N-1,j}^{n+1}) \quad (5.22)$$

По получившимся выражениям можно заметить, что заполнение расчетной сетки начинается из нижнего левого угла и заканчивается в верхнем правом углу. Обход возможен либо по горизонтальным, либо по вертикальным линиям (рисунок 4).

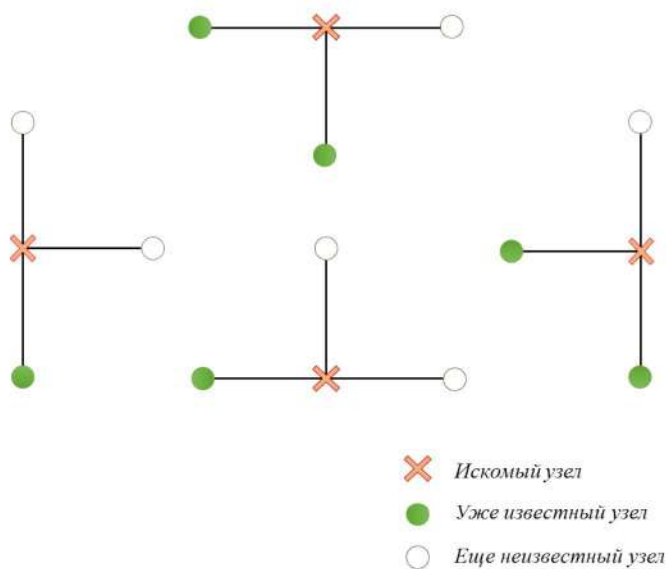


Рисунок 4. Границы. Численные схемы

Далее рассмотрим численные схемы в углах. Условия в углах выводятся путем совмещения условий на границах

- Верхний левый угол

Подставим условия для верхней границы (3.6) в условия для левой (5.15)-(5.16), с учетом $C_2 = C_3$, $D_2 = D_3$

$$U_{0,M}^{n+1} = C_1 U_{1,M}^n + C_2 (U_{0,M-1}^{n+1} - \frac{\sigma_T \Delta z}{\nu \rho_0 \Delta r} (T_{1,M}^n - T_{0,M}^{n+1})) + C_4 \tilde{p}_r \quad (5.23)$$

$$V_{0,M}^{n+1} = C_1 V_{1,M}^n + C_2 (V_{0,M-1}^{n+1} - \frac{\sigma_T \Delta z}{\nu \rho_0 \Delta r} (T_{1,M}^n - T_{0,M}^{n+1})) + C_4 \tilde{p}_z \quad (5.24)$$

$$T_{0,M}^{n+1} = \frac{1}{1 + D_2 \tilde{h}_2} (D_1 T_{1,M}^n + 2D_2 T_{0,M-1}^{n+1} + D_2 \tilde{h}_2 \tilde{T}) \quad (5.25)$$

- Верхний правый угол

Подставим условия для верхней границы (3.6) в условия для правой (5.22)

$$U_{N,M}^n = 0 \quad (5.26)$$

$$V_{N,M}^n = 0 \quad (5.27)$$

$$T_{N,M}^{n+1} = \frac{1}{1 - B_1 + B_2 \tilde{h}_2} (B_2 (\tilde{h}_2 \tilde{T} + T_{N,M-1}^{n+1}) + B_3 T_{N-1,M}^{n+1}) \quad (5.28)$$

- Нижний левый угол

Подставим условия для нижней границы (3.13) в условия для левой (5.15)-(5.16), с учетом $D_2 = D_3$

$$U_{0,0}^n = 0 \quad (5.29)$$

$$V_{0,0}^n = 0 \quad (5.30)$$

$$T_{0,0}^{n+1} = \frac{1}{1 + D_2 \tilde{h}_1} (D_1 T_{1,0}^n + D_2 (2T_{0,1}^n + \tilde{h}_1 \tilde{T} + \frac{\tilde{h}_1}{h_1} q)) \quad (5.31)$$

- Нижний правый угол

Подставим условия для верхней границы (3.13) в условия для правой (5.22)

$$U_{N,0}^n = 0 \quad (5.32)$$

$$V_{N,0}^n = 0 \quad (5.33)$$

$$T_{N,0}^{n+1} = \frac{1}{1 - B_1 + B_2 \widetilde{h}_1} (2B_2 T_{N,1}^n + B_2 \left(\widetilde{h}_1 \widetilde{T} + \frac{\widetilde{h}_1}{h_1} q \right) + B_3 T_{N-1,0}^{n+1}) \quad (5.34)$$

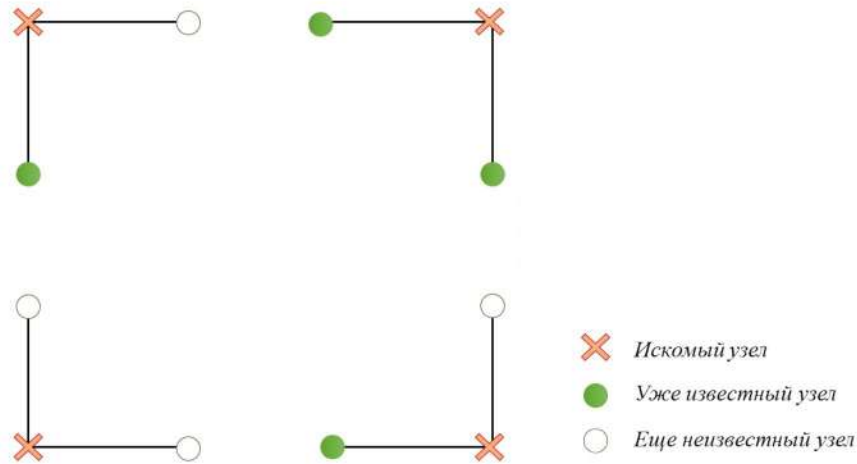


Рисунок 5. Углы. Численные схемы

Вышеописанные численные схемы были использованы для написания компьютерной программы, реализующей рассматриваемый в работе процесс деформации тонкого слоя жидкости.

Блок-схема написанной программы представлена в ПРИЛОЖЕНИИ 1. Код компьютерной программы представлен в ПРИЛОЖЕНИИ 2.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для оценки влияния поверхностно-активных веществ на процессы, происходящие в тонком слое локально нагреваемой жидкости, расчёты производились с использованием различных параметров жидкости (варьировался ее температурный коэффициент поверхностного натяжения). Была использована расчетная сетка 40×200 . 40 – по оси z и 200 по оси r . Численные эксперименты показали, что данная сетка обеспечивает приемлемую точность и скорость расчета.

Далее рассмотрим получившиеся поля скоростей (рис 7). Максимальная скорость потока наблюдается на свободной поверхности и составляет:

$\sigma_T, \text{Н/м}\cdot\text{К}$	$V_{\text{max}}, \text{м/с}$
$2 \cdot 10^{-4}$	0.0821
$1.45 \cdot 10^{-4}$	0.0648
$0.8 \cdot 10^{-4}$	0.0381
$0.5 \cdot 10^{-4}$	0.0241
$0.08 \cdot 10^{-4}$	0.0067

На рисунке 6 мы видим зависимость максимальной скорости, наблюдаемой в тонком слое локально нагреваемой жидкости от температурного коэффициента поверхностного натяжения. Полученная аппроксимация может быть использована в дальнейшем для анализа поведения модели.

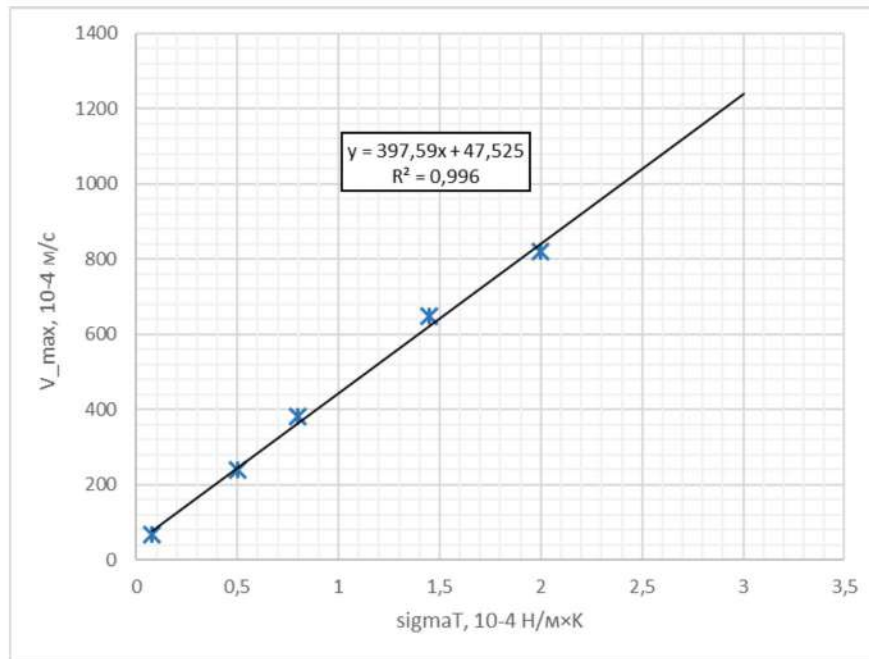


Рисунок 6. Максимальная скорость при различных σ_T

На поверхности рассматриваемой жидкости существуют термокапиллярные силы, вызванные неравномерным распределением тепла по объему рассматриваемого тонкого слоя жидкости. Верхний ее слой движется от центра нагрева к периферии, и под действием силы тяжести в нижних слоях жидкости возникает движение в обратном направлении. Таким образом в тонком слое наблюдается стабильное движение (циркуляция) вблизи области нагрева. Такое происходит до тех пор, пока мощность нагревателя не становится больше чем значение, при котором образуется «сухое пятно».

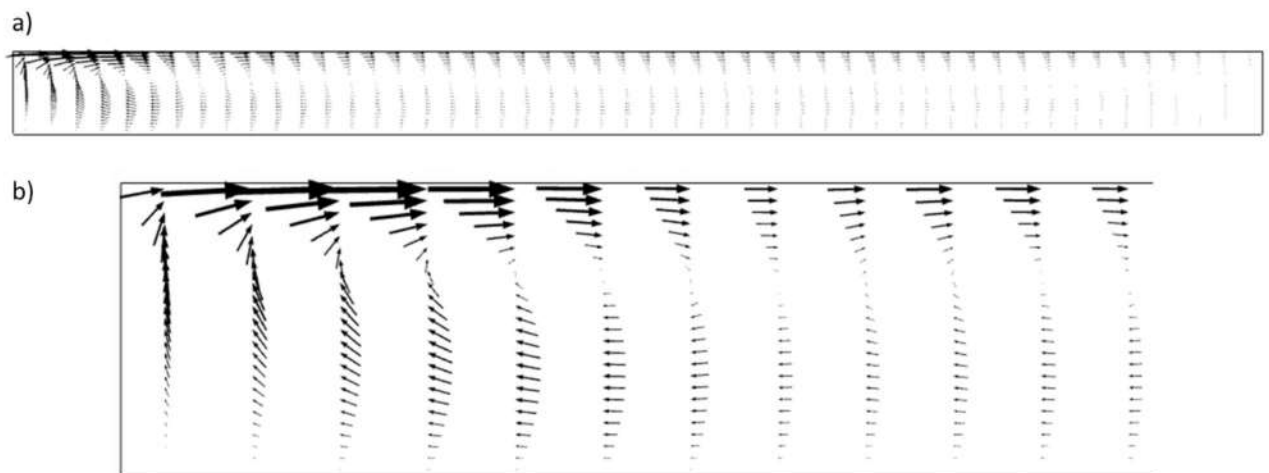
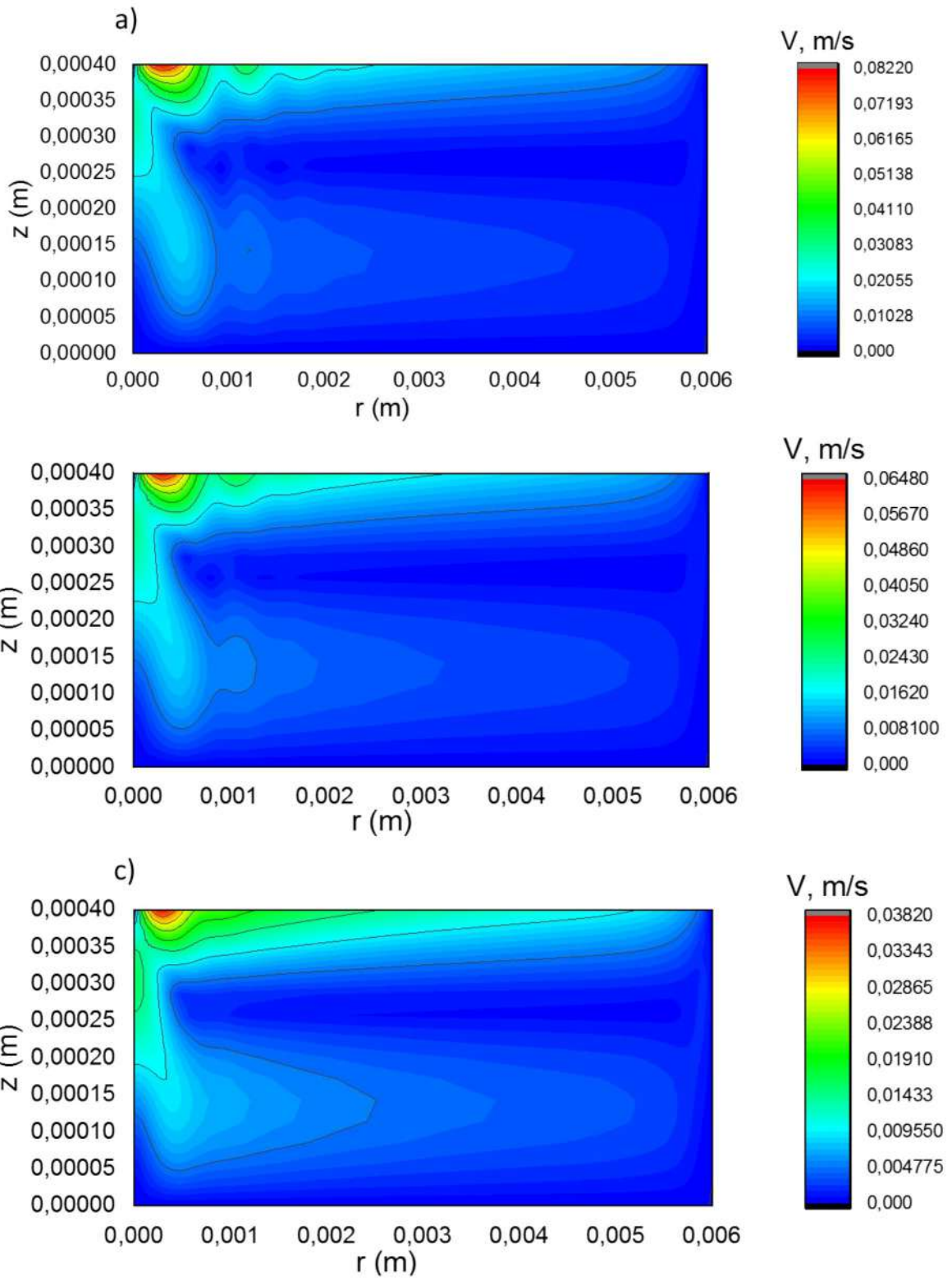


Рисунок 7. Векторное поле скоростей а) во всем рассматриваемом слое, б) увеличенное изображение

Так же можно обратить внимание на то, что при росте поверхностного натяжения происходит значительное увеличение скорости потока жидкости, что объяснимо увеличением влияния эффекта Марангони, что и можно наблюдать на рис 8.

«Сухое пятно» или разрыв тонкого слоя не наблюдается, пока температурный коэффициент поверхностного натяжения не достигает критического значения, при котором термокапиллярная конвекция начинает оказывать очень большое влияние на процессы, происходящие в тонком слое жидкости.



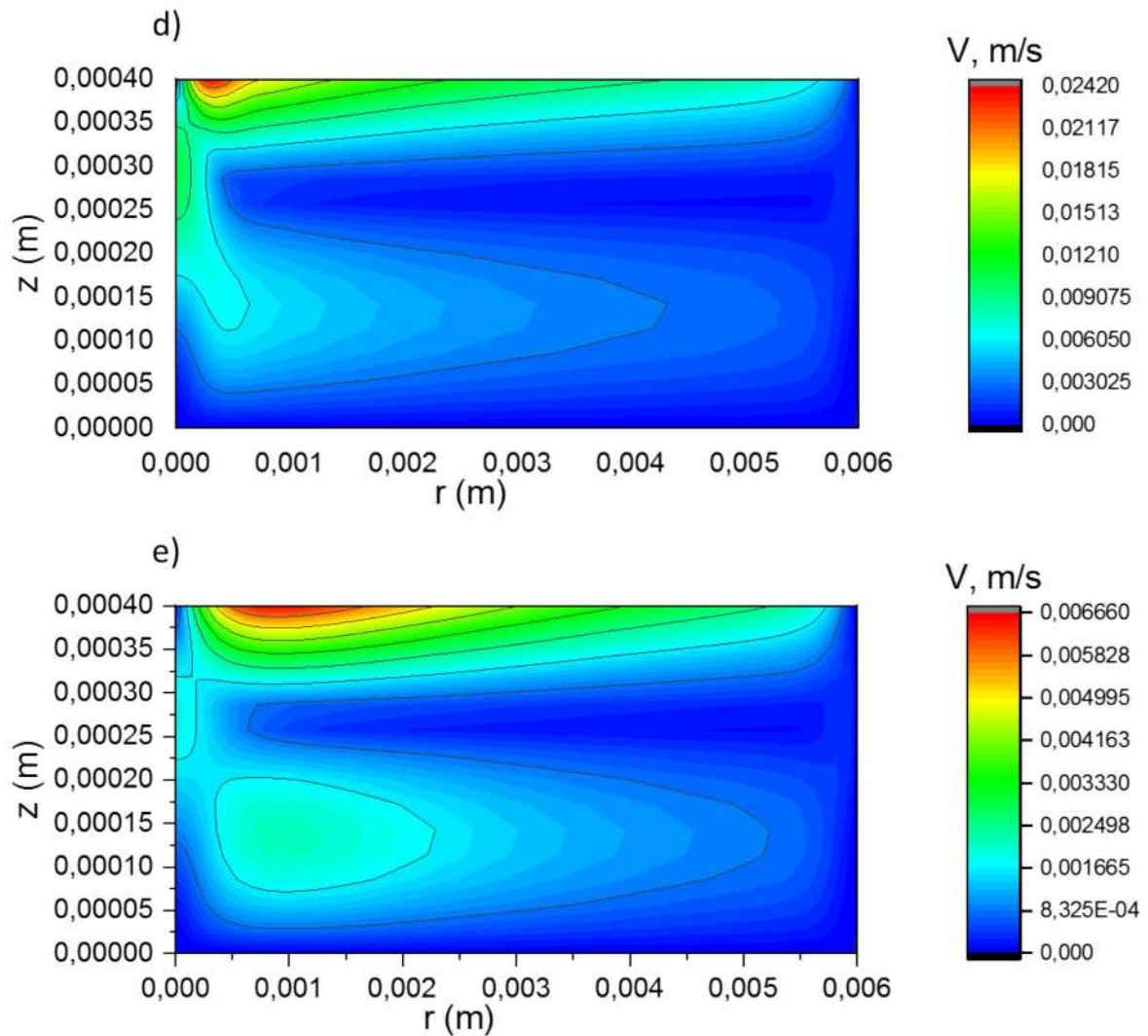
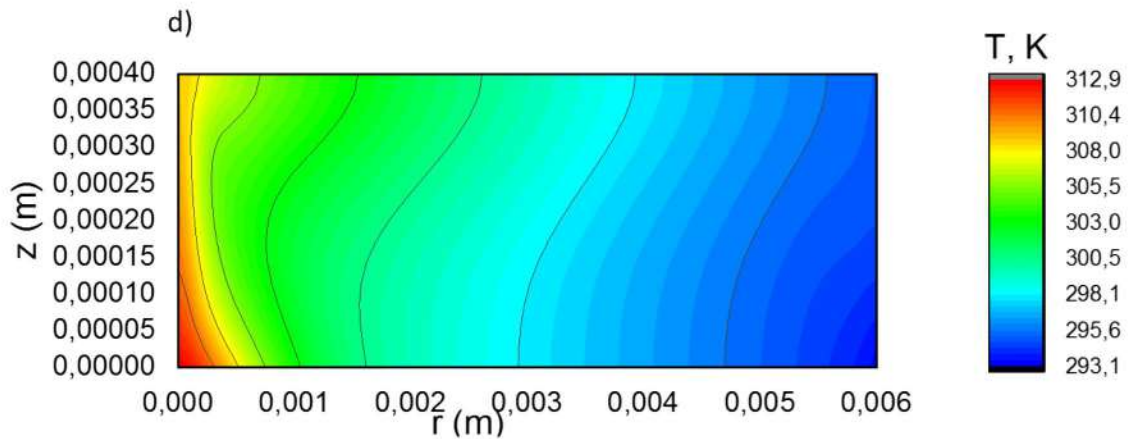
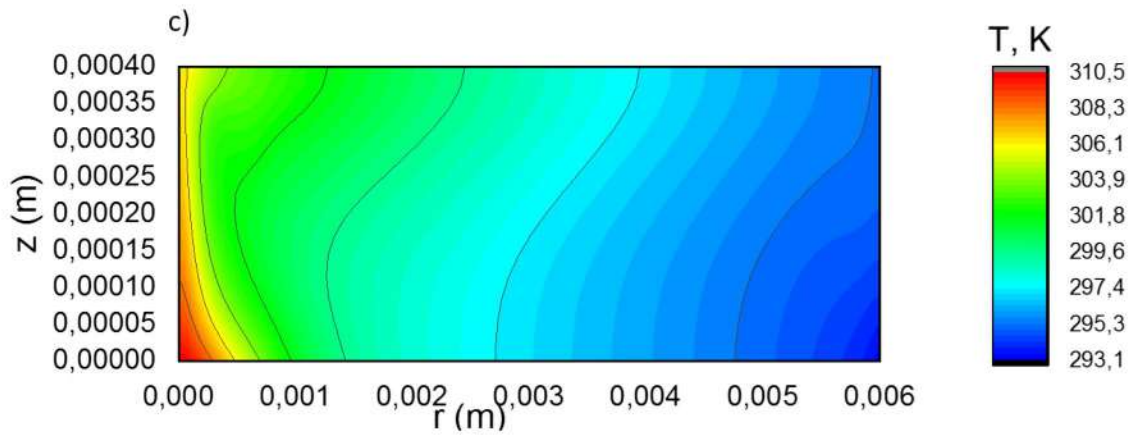
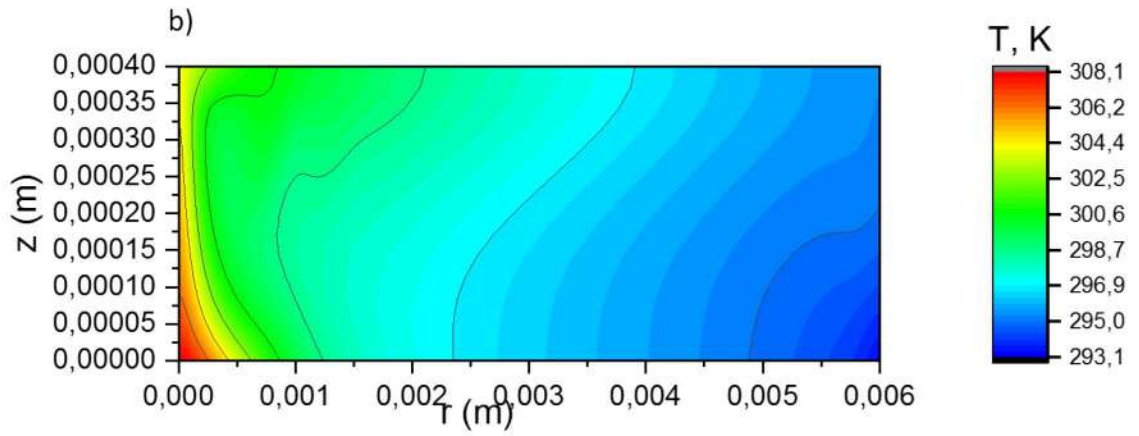
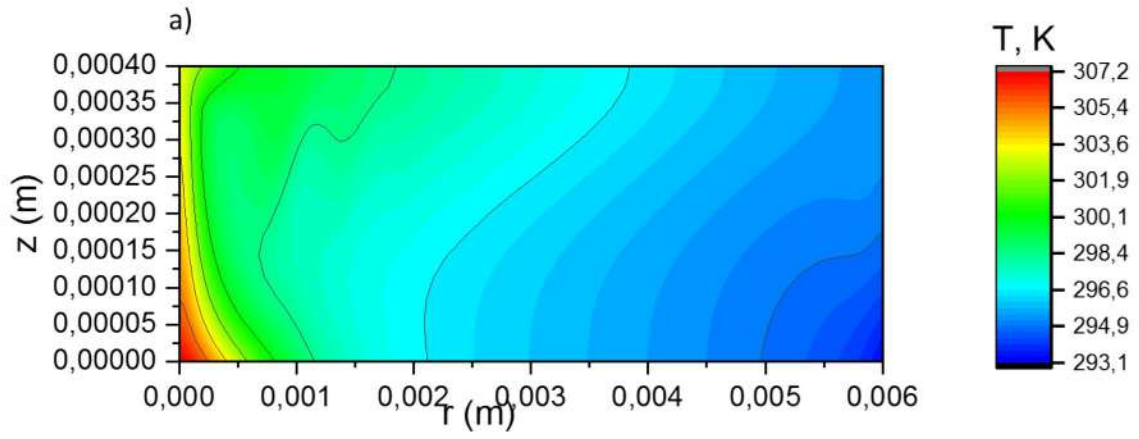


Рисунок 8. Профили скорости при различных σ_T .

- a) $\sigma_T = 2 \cdot 10^{-4} \text{ H/m}\cdot\text{K}$, b) $\sigma_T = 1.45 \cdot 10^{-4} \text{ H/m}\cdot\text{K}$, c) $\sigma_T = 0.8 \cdot 10^{-4} \text{ H/m}\cdot\text{K}$,
d) $\sigma_T = 0.5 \cdot 10^{-4} \text{ H/m}\cdot\text{K}$, e) $\sigma_T = 0.08 \cdot 10^{-4} \text{ H/m}\cdot\text{K}$

Далее рассмотрим распределение температуры. Как видно из рис. 9 изменение скорости потока оказывает влияние на распределение температуры в слое жидкости. С уменьшением скорости конвективный тепловой поток становится значительно меньше кондуктивного и температура начинает выравниваться.



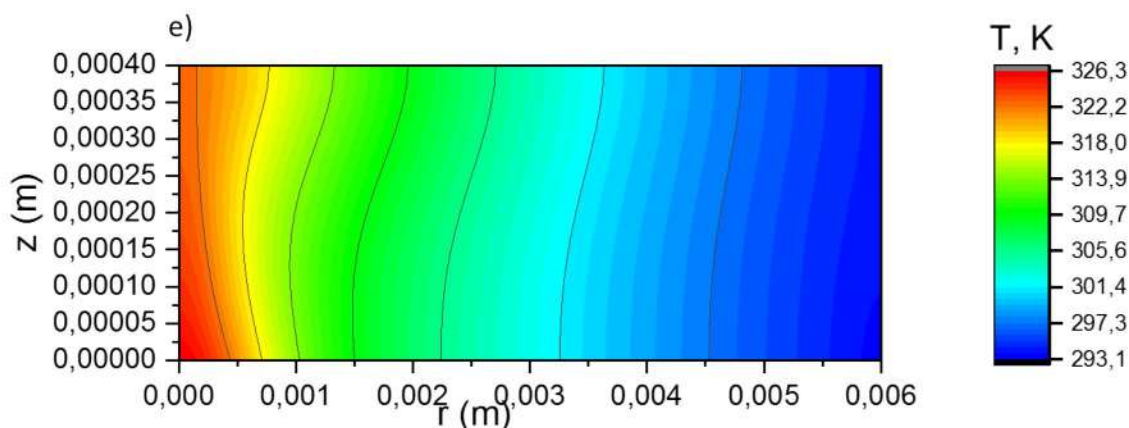


Рисунок 9. Распределение температуры в тонком слое при различных σ_T .

a) $\sigma_T = 2 \cdot 10^{-4} \text{ Н/м}\cdot\text{К}$, b) $\sigma_T = 1.45 \cdot 10^{-4} \text{ Н/м}\cdot\text{К}$, c) $\sigma_T = 0.8 \cdot 10^{-4} \text{ Н/м}\cdot\text{К}$,

d) $\sigma_T = 0.5 \cdot 10^{-4} \text{ Н/м}\cdot\text{К}$, e) $\sigma_T = 0.08 \cdot 10^{-4} \text{ Н/м}\cdot\text{К}$

Ситуация, когда начальная толщина пленки фиксирована, а изменяется интенсивность эффекта Марангони показана на рисунке 10. В результате расчётов выявлено что, чем больше температурный коэффициент поверхностного натяжения, тем сильнее деформация и, тем тоньше пленка. При постепенном увеличении коэффициента поверхностного натяжения при расчете формы поверхности толщина пленки начинает приобретать отрицательные значения. В этом случае механическое равновесие не достигается – появляется разрыв приповерхностного слоя.

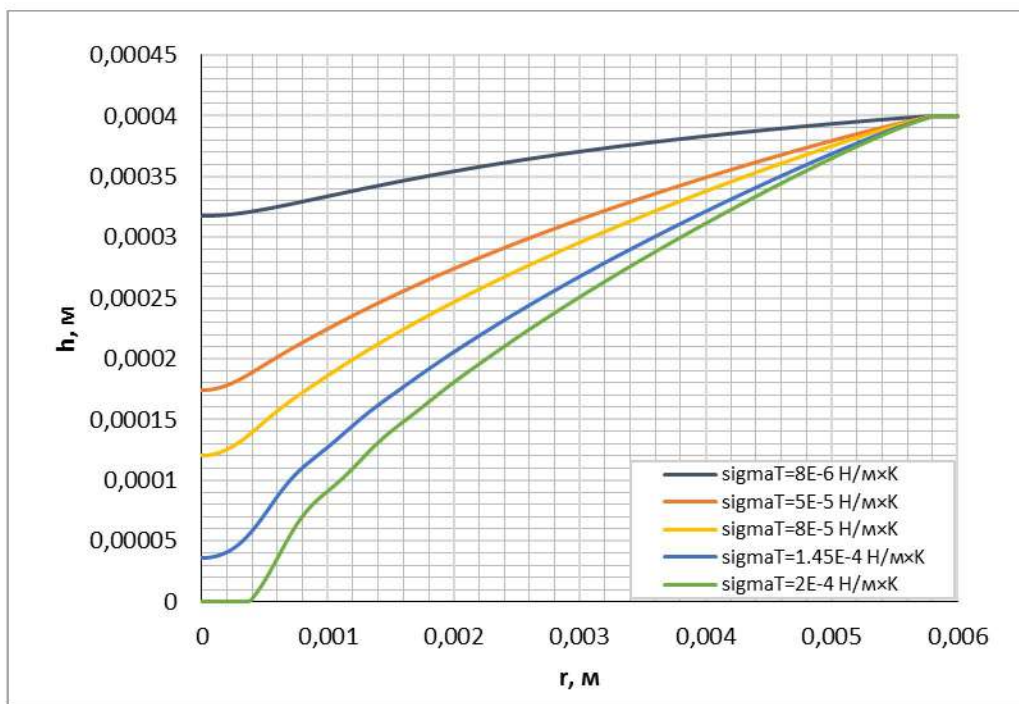


Рисунок 10. Деформация поверхности жидкости

Таким образом, можно получить зависимость максимальной деформации тонкого слоя жидкости в зависимости от ПАВ, находящихся на ее поверхности (рисунок 11). Черной линией на рисунке показана аппроксимация получившихся в результате расчётов значения, величина достоверности аппроксимации 99,7%.

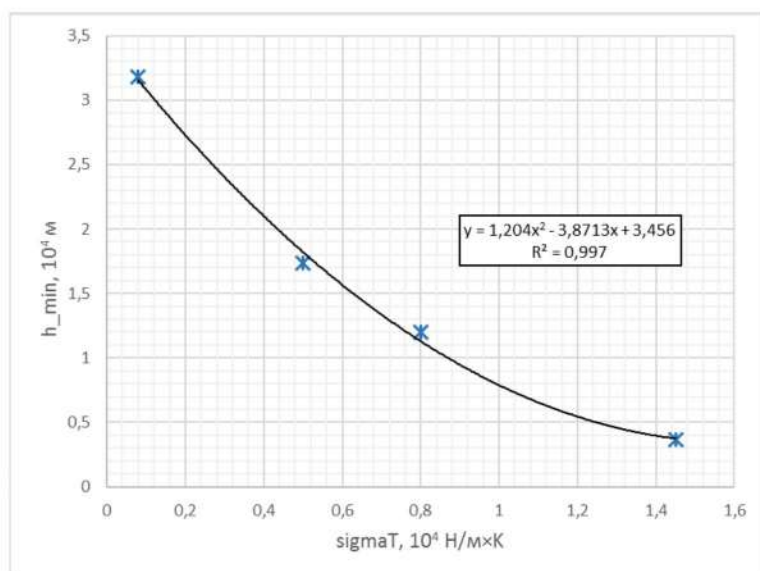


Рисунок 11. Зависимость максимальной деформации от различных σ_T

ВЫВОДЫ

Анализ существующих способов применения ансамблей частиц, состоящих из микрокапель показал, что данная область исследований является одной из наиболее перспективных в современном мире. Причиной устойчивого существования микрокапельных ансамблей является отсутствие термокапиллярных течений.

В работе выполнено математическое описание и численное моделирование процесса локального нагрева тонкого горизонтально расположенного слоя воды. Были выделены основные явления, позволяющие адекватно моделировать такое воздействие. К ним относятся:

- Термокапиллярная конвекция
- Локальные нагрев
- Конвективный перенос тепла
- Кондуктивный перенос тепла

Так же был произведен анализ процессов, происходящих при возникновении эффекта Марангони, который показал, что достаточно учесть равенство между силами вязкого трения и силами поверхностного натяжения на свободной границе и зависимость коэффициента поверхностного натяжения от температуры.

На основе выделенных процессов и допущений была составлена математическая модель, описывающая поставленную задачу – (2.1) с учетом граничных условий (2.2) - (2.7), (2.11), (2.12).

Далее полученная система уравнений была расписана с помощью методов численного дифференцирования. Выбранный способ – метод конечных разностей является наиболее приемлемым в данном случае, поскольку рассматриваемая геометрия имеет простую прямолинейную форму и из-за ламинарности потока достаточно построения регулярной сетки.

Следующим шагом в рассмотрении поставленной задачи было использование итерационного метода Зейделя-Гаусса. Полученная с помощью него система уравнений (5.2), (5.3) и (5.6) с граничными условиями (5.8) - (5.13), (5.15) - (5.18), (5.20) - (5.22) и условиями в углах (5.23) - (5.34) была использована для дальнейшего численного моделирования.

В итоге работы были сделаны следующие выводы:

1. Локальный характер нагрева горизонтально расположенного слоя жидкости вызывает деформацию его поверхности и поток, который образуется за счет действия термокапиллярных сил и сил тяжести
2. Жидкость имеет максимальную скорость на свободной поверхности в области максимального градиента температуры
3. С ростом температурного коэффициента поверхностного натяжения, то есть с повышением поверхностного натяжения на границе вода-воздух происходит увеличение деформации приповерхностного слоя воды, даже до образования «сухого пятна» – разрыва приповерхностного слоя
4. Модель прогнозирует поведение жидкости при локальном нагреве и может быть использована для расчета условий образования «сухих пятен» и термокапиллярных течений.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

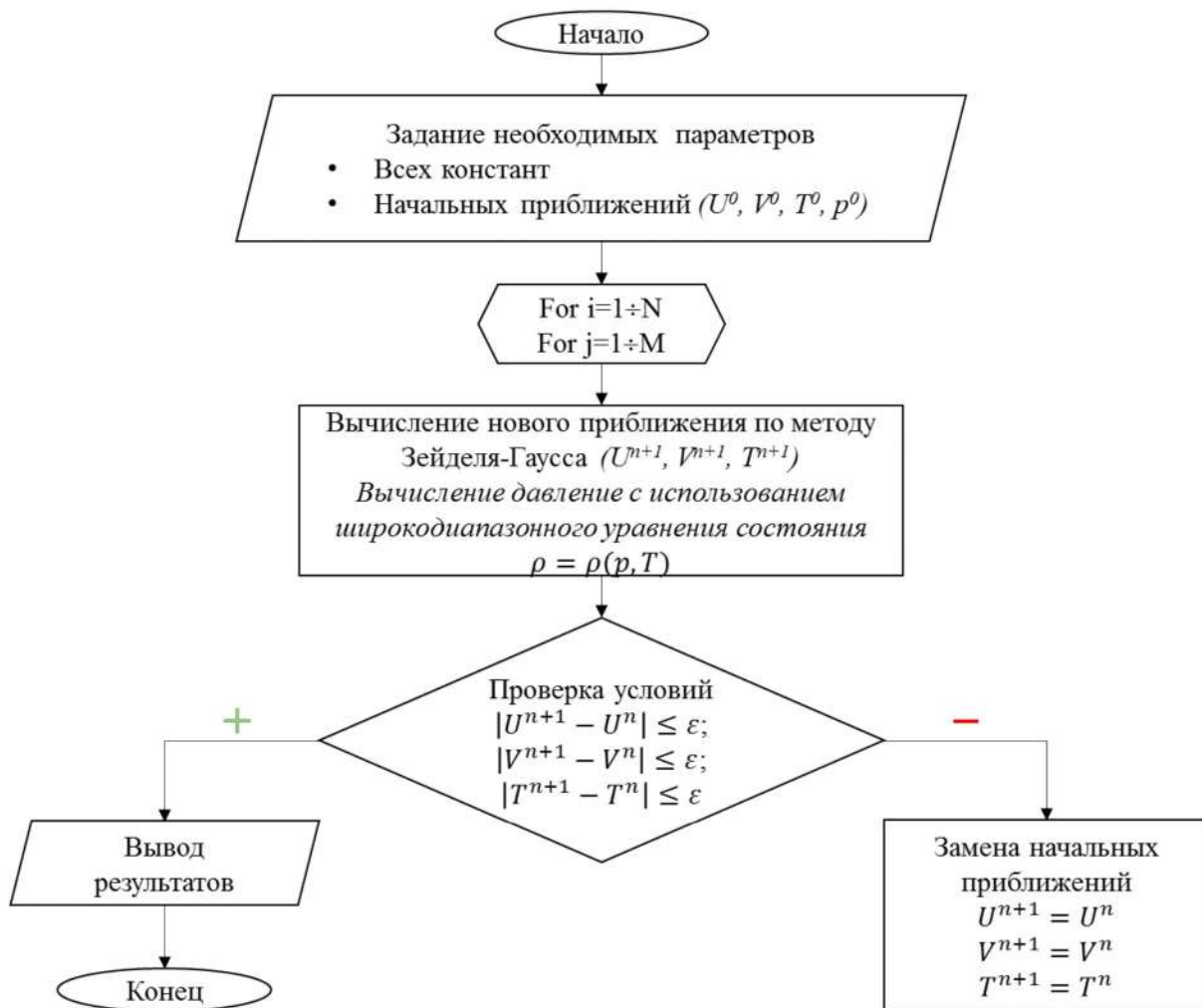
1. Бабичев А. П. Физические величины: Справочник // М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
2. Бобков С.П., Бобкова В.А. Информатика. Информатика. Часть 3. Основы вычислительной математики: Методические указания и контрольные работы для студентов заочного обучения // Сост.: С. П. Бобков, В. А. Бобкова; Иван. Гос. Хим.-технол. Ун-т. – Иваново, 2003. 32 с.
3. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей // М.: Физматгиз, 1972. 720 с.
4. Ермолаева Н. Н. Математическое моделирование нестационарных неизотермических процессов в движущихся многофазных средах // Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, Санкт-Петербургский Государственный Университет, 2017
5. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы // М.: Наука, 1989. — 432 с.
6. Федорец А. А. Капельный кластер // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — № 8. — С .457-459.
7. Яковлев А.Д. Химия и технология лакокрасочных покрытий: Учебник для вузов 3-е изд., перераб. – спб.: ХИМИЗДАТ, 2008. – 448 с.
8. Agresti Jeremy J., Antipov Eugene Ultrahigh-throughput screening in drop-based microfluidics for directed evolution // PNAS USA March 2, 2010 107 (9) 4004-4009.
9. Benard H. Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide transportant de la chaleur par convection en regime permanent // Ann. Chim. Phys. 1901. Ser. 7. V. 23. P. 62–144.

10. Hershey A. V. Ridges in a liquid surface due to the temperature dependence of surface tension // *Phys. Rev.* 1939. V. 56. P. 204.
11. Fedorets A., Dombrovsky L. Generation of levitating droplet clusters above the locally heated water surface: A thermal analysis of modified installation // *International Journal of Heat and Mass Transfer*
12. Indeikina, A.E., Ryazantsev, Yu.S., and Shevtsova, V.M., Unsteady Thermocapillary Convection in a Layer of Nonuniformly Heated Liquid // *Fluid dynamics* 26, 1991, no. 3, pp. 331-337.
13. Joensson HN1, Samuels ML, Brouzes ER, Medkova M, Uhlén M, Link DR, Andersson-Svahn H. Detection and analysis of low-abundance cell-surface biomarkers using enzymatic amplification in microfluidic droplets // *Angew Chem Int Ed Engl.* 2009;48(14):2518-21. Doi: 10.1002/anie.200804326
14. Kuznetsov, V. V., Dynamics of Locally Heated Liquid Films // *Russ. J. Eng. Therm.*, 2000, vol. 10, no. 2, pp. 107–121
15. Song H, Tice JD, Ismagilov RF A microfluidic system for controlling reaction networks in time // *Angew Chem Int Ed Engl.* 2003 Feb 17;42(7):768-72

Электронные ресурсы

16. Comsol blog. Tears of wine and the Marangoni Effect // [электронный ресурс]. Режим доступа <https://www.comsol.ru/blogs/tears-of-wine-and-the-marangoni-effect/>
17. Большая Российская Энциклопедия. Течения Марангони // [электронный ресурс]. Режим доступа <https://bigenc.ru/chemistry/text/2184772>

ПРИЛОЖЕНИЕ 1



ПРИЛОЖЕНИЕ 2

```

clear all
clc

% Задание постоянных
T_0=293.15;
nu=1.006*10^(-6);
sigma_T=1.45*10^(-4);
H/м
a=0.143*10^(-6);
м^2/с
ro0=1000;
h0=4*10^(-6);
g=9.8;
e=10^(-5);
lambda=0.6 ;
h1=5;
границе, Вт/(м^2*К)
h2=50;
границе, Вт/(м^2*К)
R=6*10^(-3);
M=200;
N=40;
dr=R/(M-1);
dz=h0/(N-1);
W=0.2;
rb=0.395*10^(-3);
% Для расчета давлений
a0=0.45724;
b0=0.0778;
a1=0.37464;
a2=1.54226;
a3=0.26992;
omega=0.348;
T_cr=647;
p_cr=22.1*10^5;
R0=8.31446;
m=18*10^(-3);

% Температура окружающей среды, К
% Кинематическая вязкость, м^2/с
% Коэффициент поверхностного натяжения,
% Коэффициент температуропроводности,
% Плотность воды, кг/м^3
% Начальная толщина слоя воды, м
% Ускорение свободного падения, м/с^2
% Задаваемая точность
% Коэффициент теплопроводности, Вт/(м*К)
% Коэффициент теплоотдачи на нижней
% Коэффициент теплоотдачи на верхней
% Радиус рассматриваемой области, м
% Число шагов по оси Or
% Число шагов по оси Oz
% Шаг по оси Or
% Шаг по оси Oz
% Мощность лазера, Вт
% Радиус луча лазера, м

```

```
alpha=a0*R0^2*T_cr^2/p_cr;  
beta=b0*R0*T_cr/p_cr;  
s1=a1+a2*omega-a3*omega^2;  
s2=1/T_cr;  
s3=m^2;  
s4=2*beta*m;  
s5=beta^2;
```

```
%Замены
```

```
H1=2*h1*dz/lambda;
```

```
H2=2*h2*dz/lambda;
```

```
% Задание двумерных массивов
```

```
A=zeros(M,N);  
A1=zeros(M,N);  
A2=zeros(M,N);  
A3=zeros(M,N);  
A4=zeros(M,N);  
A5=zeros(M,N);  
B=zeros(M,N);  
B1=zeros(M,N);  
B2=zeros(M,N);  
B3=zeros(M,N);  
B4=zeros(M,N);  
C=zeros(M,N);  
C1=zeros(M,N);  
C2=zeros(M,N);  
C3=zeros(M,N);  
C4=zeros(M,N);  
D=zeros(M,N);  
D1=zeros(M,N);  
D2=zeros(M,N);  
D3=zeros(M,N);
```

```
u=zeros(M,N);  
v=zeros(M,N);  
T=zeros(M,N);
```



```

p=zeros(M,N);
q=zeros(M,1);

u_n=zeros(M,N);
v_n=zeros(M,N);
T_n=zeros(M,N);
p_n=zeros(M,N);

% Плотность потока лазера
for i=1:M
    q(i)=(W/(pi*(rb+3.66*10^(-4))^2)*exp((-2*(dr*i)^2)/(rb+3.66*10^(-4))^2))/100;
end

% Задаем начальные приближения
for j=1:N
    for i=1:M
        T_n(i,j)=T_0;
        u_n(i,j)=0;
        v_n(i,j)=0;
        p_n(i,j)=(ro0*R0*T_0)/(m-beta*ro0)-(alpha*ro0^2*(1+s1*(1-(s2*T_0)^(1/2))))^2/(s3+s4*ro0-s5*ro0^2);

        T(i,j)=T_n(i,j);
        u(i,j)=u_n(i,j);
        v(i,j)=v_n(i,j);
        p(i,j)=p_n(i,j);

    end
end

k=0;
kolvo=0;
while (k<10000)&&(kolvo<4*N*M)
for j=1:N
    for i=1:M
        r=dr*(i-1);
        z=dz*(j-1);

```

```

A(i,j)=nu*(dr*dz^2+2*r*(dr^2+dz^2))-r*dr*dz*(u_n(i,j)*dz+v_n(i,j)*dr);
A1(i,j)=dz^2/A(i,j)*(nu*(dr+r)-u_n(i,j)*r*dr);
A2(i,j)=r*dr^2/A(i,j)*(nu-v_n(i,j)*dz);
A3(i,j)=nu*r*dz^2/A(i,j);
A4(i,j)=nu*r*dr^2/A(i,j);
A5(i,j)=r*dr^2*dz^2/A(i,j);

```

```

B(i,j)=a*(dr*dz^2+2*r*(dr^2+dz^2))-r*dr*dz*(u_n(i,j)*dz+v_n(i,j)*dr);
B1(i,j)=dz^2/B(i,j)*(a*(dr+r)-u_n(i,j)*r*dr);
B2(i,j)=r*dr^2/B(i,j)*(a-v_n(i,j)*dz);
B3(i,j)=a*r*dz^2/B(i,j);
B4(i,j)=a*r*dr^2/B(i,j);

```

```

C(i,j)=2*nu*(dr^2+dz^2)-dr^2*dz*v_n(i,j);
C1(i,j)=2*nu*dz^2/C(i,j);
C2(i,j)=(nu-v_n(i,j)*dz)*dr^2/C(i,j);
C3(i,j)=nu*dr^2/C(i,j);
C4(i,j)=dr^2*dz^2/C(i,j);

```

```

D(i,j)=2*a*(dr^2+dz^2)-dr^2*dz*v_n(i,j);
D1(i,j)=2*a*dz^2/D(i,j);
D2(i,j)=(a-v_n(i,j)*dz)*dr^2/D(i,j);
D3(i,j)=a*dr^2/D(i,j);

```

```

% Низ
if j==1
    % Нижний левый угол
    if i==1

```

```

T(i,j)=(1/(1+D2(i,j)*H1)*(D1(i,j)*T_n(i+1,j)+D2(i,j)*(2*T_n(i,j+1)+H1*T_0+H
1*q(i)/h1)));

```

```

    u(i,j)=0;
    v(i,j)=0;

```

```

else

```

```

    % Центр

```

```

    if (i>1)&&(i<M)

```

```

        T(i,j)=1/(1+B2(i,j)*H1)*(B1(i,j)*T_n(i+1,j)+2*B3(i,j)*T(i-
1,j)+B2(i,j)*(2*T_n(i,j+1)+H1*(T_0+q(i)/h1)));
        u(i,j)=0;
        v(i,j)=0;
    else
        % Нижний правый угол
        T(i,j)=1/(1-B1(i,j)+B2(i,j)*H1)*(B3(i,j)*T(i-
1,j)+B2(i,j)*(2*T_n(i,j+1)+H1*(T_0+q(i)/h1)));
        u(i,j)=0;
        v(i,j)=0;
    end
end
end

if (j>1)&&(j<N)

    %Левое
    if i==1
        T(i,j)=D1(i,j)*T_n(i+1,j)+D2(i,j)*T_n(i,j+1)+D3(i,j)*T(i,j-1);
        u(i,j)=C1(i,j)*u_n(i+1,j)+C2(i,j)*u_n(i,j+1)+C3(i,j)*u(i,j-1)+C4(i,j)*(-
1/ro0*(p_n(i+1,j)-p(i,j))/dr);
        v(i,j)=C1(i,j)*v_n(i+1,j)+C2(i,j)*v_n(i,j+1)+C3(i,j)*v(i,j-
1)+C4(i,j)*((-1/ro0*(p_n(i,j+1)-p(i,j))/dz)-g);
    else
        %Основные уравнения
        if (i>1)&&(i<M)
            T(i,j)=B1(i,j)*T_n(i+1,j)+B3(i,j)*T(i-
1,j)+B2(i,j)*T_n(i,j+1)+B4(i,j)*T(i,j-1);
            u(i,j)=A1(i,j)*u_n(i+1,j)+A3(i,j)*u(i-
1,j)+A2(i,j)*u_n(i,j+1)+A4(i,j)*u(i,j-1)+A5(i,j)*(-1/ro0*(p_n(i+1,j)-p(i,j))/dr);
            v(i,j)=A1(i,j)*v_n(i+1,j)+A3(i,j)*v(i-
1,j)+A2(i,j)*v_n(i,j+1)+A4(i,j)*v(i,j-1)+A5(i,j)*((-1/ro0*(p_n(i,j+1)-p(i,j))/dz)-
g);
        else
            %Право
            T(i,j)=1/(1-B1(i,j))*(B3(i,j)*T(i-1,j)+B2(i,j)*(T_n(i,j+1)+T(i,j-1)));
            u(i,j)=0;
            v(i,j)=0;
        end
    end
end

```

```

        end
    end
end

%Верх
if j==N
    %Верхний левый угол
    if i==1
        T(i,j)=1/(1+D2(i,j)*H2)*(D1(i,j)*T_n(i+1,j)+D2(i,j)*(2*T(i,j-1)+H2*T_0));
        u(i,j)=C1(i,j)*u_n(i+1,j)+C2(i,j)*(-sigma_T*dz/(ro0*nu*dz)*(T_n(i+1,j)-T(i,j)))+C3(i,j)*u(i,j-1)+C4(i,j)*(-1/ro0*(p_n(i+1,j)-p(i,j))/dr);
        v(i,j)=C1(i,j)*v_n(i+1,j)+C2(i,j)*(-sigma_T*dz/(ro0*nu*dz)*(T_n(i+1,j)-T(i,j)))+C3(i,j)*v(i,j-1)+C4(i,j)*((-1/ro0*(p_n(i,j)-p(i,j-1))/dz)-g);
    else
        %Центр
        if (i>1)&&(i<M)
            T(i,j)=1/(1+H2*B2(i,j))*(B1(i,j)*T_n(i+1,j)+B3(i,j)*T(i-1,j)+B2(i,j)*(2*T(i,j-1)+H2*T_0));
            u(i,j)=A1(i,j)*u_n(i+1,j)+A3(i,j)*u(i-1,j)+A4(i,j)*u(i,j-1)+A2(i,j)*(-sigma_T*dz)/(ro0*nu*dr)*(T_n(i+1,j)-T(i,j))+A5(i,j)*(-1/ro0*(p_n(i+1,j)-p(i,j))/dr);
            v(i,j)=A1(i,j)*v_n(i+1,j)+A3(i,j)*v(i-1,j)+A4(i,j)*v(i,j-1)+A2(i,j)*(-sigma_T*dz)/(ro0*nu*dr)*(T_n(i+1,j)-T(i,j))+A5(i,j)*((-1/ro0*(p_n(i,j)-p(i,j-1))/dz)-g);
        else
            %Верхний правый угол
            T(i,j)=1/(1-B1(i,j)+B2(i,j)*H2)*(B3(i,j)*T(i-1,j)+B2(i,j)*(T(i,j-1)+H2*T_0));
            u(i,j)=0;
            v(i,j)=0;
        end
    end
end
%Давление

```

```

    p(i,j)=(ro0*R0*T(i,j))/(m-beta*ro0)-(alpha*ro0^2*(1+s1*(1-
(s2*T(i,j))^(1/2))))^2/(s3+s4*ro0-s5*ro0^2);

```

```

    end
end

```

```

%Проверяем на сходимость

```

```

kolvo=0;

```

```

for j=1:N

```

```

    for i=1:M

```

```

        if (abs(u_n(i,j)-u(i,j))<=e) kolvo=kolvo+1;

```

```

        if (abs(v_n(i,j)-v(i,j))<=e) kolvo=kolvo+1;

```

```

        if (abs(T_n(i,j)-T(i,j))<=e) kolvo=kolvo+1;

```

```

        if (abs(p_n(i,j)-p(i,j))<=e) kolvo=kolvo+1;

```

```

    end

```

```

end

```

```

%Перезаписываем новые в старые

```

```

for j=1:N

```

```

    for i=1:M

```

```

        u_n(i,j)=u(i,j);

```

```

        v_n(i,j)=v(i,j);

```

```

        T_n(i,j)=T(i,j);

```

```

        p_n(i,j)=p(i,j);

```

```

    end

```

```

end

```

```

k=k+1;

```

```

end

```

```

disp(T);

```

```

disp(u);

```

```

disp(v);

```

```

% filename='results.xlsx';

```

```

% wlswrite('results.xlsx',u,1,'A1');

```

```

% wlswrite('results.xlsx',v,2,'A1');

```

```

% wlswrite('results.xlsx',T,3,'A1');

```