УДК 532.7+532.516.5+532.593

РАЗРУШЕНИЕ ПЛЕНОК ЖИДКОСТИ, НАХОДЯЩИХСЯ НА ТВЕРДОЙ И ЖИДКОЙ ПОДЛОЖКАХ, В ПОЛЕ ДЕЙСТВИЯ ОБЪЕМНЫХ СИЛ

Куперштох А.Л., Гаврилов Н.В., Ерманюк Е.В.

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 13-01-00526), Президента Российской федерации (грант НШ-247.2012.1) и Сибирского отделения РАН (проекты № 38 и № 79).

АННОТАЦИЯ

В данной работе исследовано поведение пленок, находящихся на твердой и жидкой подложках. Приведены результаты экспериментов по разрушению тонких пленок, находящихся на поверхности более тяжелой несмешиваемой жидкости в прямоугольной кювете. Под действием поверхностного натяжения эти отверстия расширялись и при взаимодействии со стенками деформировались, кардинально изменяя свою форму. Выполнены эксперименты как для эволюции одного отверстия, так и при взаимодействии двух отверстий. Для трехмерного компьютерного моделирования использовался метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE), распараллеленный на GPU (Graphics Processing Unit). Для параллельных вычислений использовалась технология программирования CUDA (Compute Unified Device Architecture). Проведено трехмерное компьютерное моделирование разрушения пленок жидкости на поверхности твердых и жидких подложек из-за термокапиллярного эффекта (эффект Марангони). Выполнено моделирование эволюции отверстий в пленке жидкости для двухслойных систем несмешиваемых жидкостей.

ВВЕДЕНИЕ

Ранее в работе [1] было проведено моделирование свободно висящих тонких пленок, к которым прикладывался радиально-симметричный импульс температуры с максимумом в центре. При этом из-за термокапиллярного эффекта происходит разрушение пленки в виде отверстия. В зависимости от распределения температуры вблизи центра возможен разрыв пленки не в максимуме температуры, а по некоторой окружности с образованием центрального диска, трансформирующегося в каплю.

В данной работе исследовано поведение пленок, находящихся на твердой или жидкой подложке. Для трехмерного компьютерного моделирования использовался метод решеточных уравнений Больцмана. Для моделирования фазовых переходов в методе LBE вводятся силы, действующие на вещество в узлах сетки. Этот метод псевдопотенциала [2,3] описывает флюиды с произвольным заданным уравнением состояния в форме $P(\rho,T)$ и моделирует границы раздела фаз жидкость-пар с поверхностным натяжением. Для вещества пленки использовалось модельное уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, для которого поверхностное натяжение уменьшается с увеличением температуры и стремится к нулю при приближении к критической точке. Взаимодействие с твердыми границами моделировалось специальными силами взаимодействия между узлами, принадлежащими твердым границам, и узлами, занятыми жидкостью или паром.

МЕТОД РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

Для компьютерного моделирования использовался метод решеточных уравнений Больцмана. Этот метод рассматривает течение флюида как движение ансамбля псевдочастиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретному набору скоростей. Метод ре-

© Куперштох А.Л., Гаврилов Н.В., Ерманюк Е.В.

шеточных уравнений Больцмана описывает флюиды с произвольным заданным уравнением состояния и моделирует границы раздела фаз жидкость-пар с поверхностным натяжением. Для этой цели вводятся специальные силы, действующие на вещество в узлах расчетной сетки. Для сохранения глобального импульса эти силы являются градиентом некоторого псевдопотенциала, который выражается через заданное уравнение состояния. Метод псевдопотенциала был предложен в [2], а затем был значительно улучшен в работах [3-5]. Для вещества пленки использовалось модельное уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, которое в приведенных переменных $\hat{P} = P / P_{кр}$, $\hat{\rho} = \rho / \rho_{кр}$ и $\hat{T} = T / T_{кр}$ имеет вид

$$\hat{P} = \frac{8\hat{\rho}\hat{T}}{3 - \hat{\rho}} - 3\hat{\rho}^2 .$$

В методе LBE динамика жидкой и газообразной фазы описываются единообразно.

Для трехмерных расчетов был реализован трехмерный вариант метода LBE с девятнадцатью векторами скоростей псевдочастиц D3Q19 [6].

Цикл вычислений для однокомпонентной модели LBE с фазовыми переходами организован следующим образом [1]:

1. Перенос значений функций распределения в соседние узлы

$$\widetilde{N}_k(\mathbf{x}, t) = N_k(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k \Delta t, t - \Delta t)$$

2. Вычисление плотности ρ и значений функции $\Phi(\rho)$ в каждом узле с использованием уравнения состояния

$$\rho = \sum_{k=0}^{b} \widetilde{N}_k ,$$

$$\Phi = \sqrt{\rho\theta - P(\rho, T)} .$$

3. Вычисление полной силы, действующей на узел со стороны соседних узлов, с использованием идеи псевдопотенциала $\mathbf{F} = -\nabla U$, впервые предложенной в [2]. В работах [3-5] была введена новая функция $\Phi = \sqrt{-U}$, где $U = P(\rho, T) - \rho\theta$. Вычисление полной силы выполнялось по конечно-разностной аппроксимации следующего выражения

$$\mathbf{F} = A\nabla(\Phi^2) + 2(1 - A)\Phi\nabla\Phi ,$$

где A – свободный параметр, обеспечивающий достаточно точное воспроизведение кривой сосуществования фаз. Для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса он равен –0.152 [3].

4.1. Вычисление значений скорости в узле до и после действия сил

$$\rho\mathbf{u} = \sum_{k=0}^{b} \mathbf{c}_k \widetilde{N}_k ,$$

$$\mathbf{u} + \Delta\mathbf{u} = \mathbf{u} + \mathbf{F}\Delta t / \rho .$$

4.2. Вычисление соответствующих равновесных функций распределения по формуле

$$N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2\theta} \right).$$

4.3. Изменение функций распределения в узлах за счет оператора столкновений Ω_k и за счет действия сил $\Delta\widetilde{N}_k$

$$N_k(\mathbf{x}, t) = \widetilde{N}_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(\widetilde{N}(\mathbf{x}, t) + \Delta\widetilde{N}_k ,$$

где оператор столкновений имеет вид

$$\Omega_k = (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - \widetilde{N}_k(\mathbf{x}, t)) / \tau ,$$

а учет действия объемных сил (внутренних и силы тяжести) в методе LBE выполнялся по методу точной разности, предложенному в [7-9]

$$\Delta\widetilde{N}_k(\mathbf{x}, t) = N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta\mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) .$$

Вычисления по алгоритму LBE [1] распараллеливались на большое количество процессоров, имеющихся в графических ускорителях. Расчеты проводились на многопроцессорных графических картах типа GTX-580 (512 ядер) с архитектурой “Fermi”. Все ядра имеют доступ к относительно быстрой общей внутренней памяти объемом 3 ГБ. Для параллельных вычислений использовалась технология программирования CUDA. Параллельный алгоритм основан на использовании четырех ядерных функций (CUDA kernels) в соответствии с приведенным циклом вычислений.

ПЛЕНКИ ЖИДКОСТИ, НАХОДЯЩИЕСЯ НА ТВЕРДОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Известно, что из-за изменения поверхностного натяжения с температурой в жидкости возникают течения (термокапиллярный эффект, эффект Марангони). Проведено трехмерное моделирование разрыва тонких пленок жидкости, находящихся на плоской несмачиваемой или смачиваемой твердой поверхности из-за эффекта Марангони. Для пленки использовались периодические граничные условия по x и по y.

При расчетах на графических картах GTX-580, имеющих быструю память объемом 3 Гигабайта, удается использовать сетки размерами до 256×256×192.

Для осесимметричного распределения температуры по поверхности пленки вида

$T = T_0 + \Delta T(1+\cos(\pi r/R))$, для $r < R$,

$T = T_0$ для $r \geq R$

в окрестности нагретого пятна из-за изменения поверхностного натяжения в пленке возникало расходящееся течение (термокапиллярный эффект, эффект Марангони), приводящее к разрыву пленки в ее центре там, где температура максимальна (рис. 1).

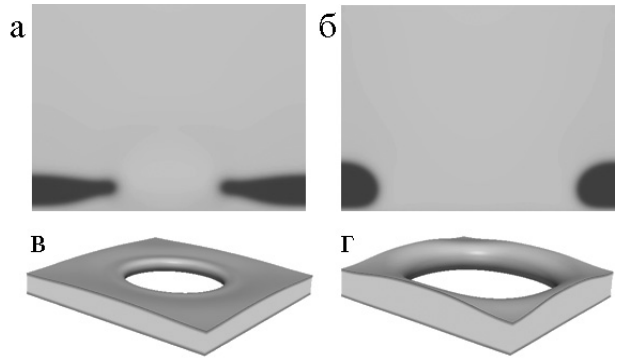

Рис.1 Разрыв пленки на несмачиваемой плоской поверхности. На (а) и (б) – показана плотность в вертикальном сечении. $t =$ 2000 (а,в); 3200 (б,г).

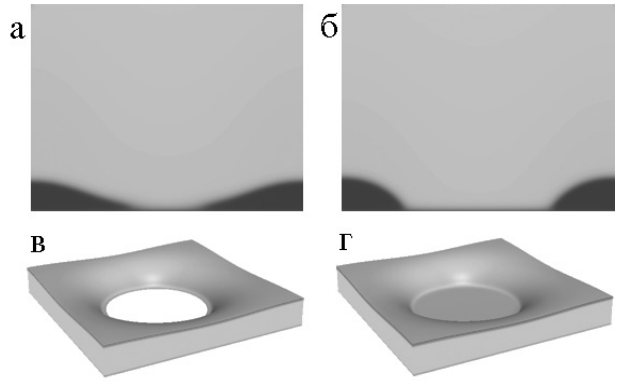

Рис.2 Растяжение (псевдоразрыв) тонкой пленки на твердой смачиваемой подложке. На (а) и (б) показана плотность в вертикальном сечении. На (в) прекурсорная пленка постоянной толщины не показана. $t =$ 3000 (а); 5000 (б,в,г).

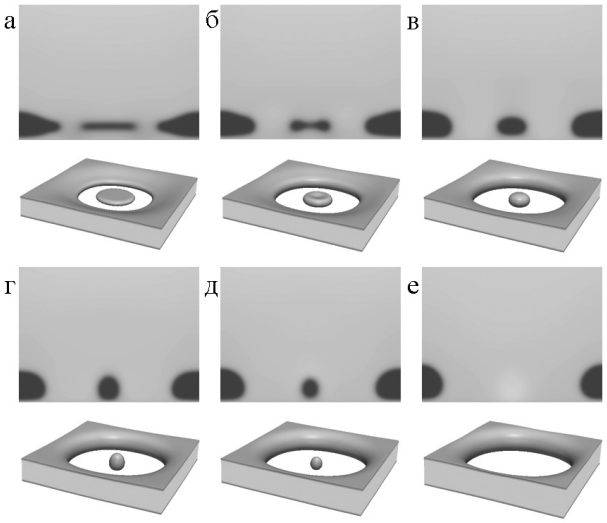

Рис.3 Разрыв пленки на несмачиваемой поверхности. $t =$ 2400 (а); 2600 (б); 2800 (в); 3000 (г); 3200 (д); 3600 (е).

Здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Для несмачиваемой поверхности происходит полный разрыв пленки с образованием в этом месте отверстия (сухого пятна).

В случае смачиваемой поверхности полного разрыва не наблюдается, так как на твердой поверхности остается тонкая плоская пленка жидкости (прекурсор) (рис. 2).

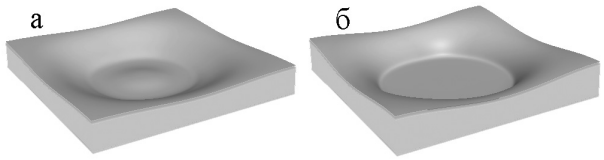

Рис.4 Растяжение (псевдоразрыв) пленки на смачиваемой подложке. $t =$ 3200 (а); 4000 (б).

Для осесимметричного распределения температуры с более плоской вершиной:

$T = T_0 + \Delta T(1+\cos(\pi(r/R)^2))$, для $r < R$,

$T = T_0$ для $r \geq R$.

разрыв пленки на несмачиваемой подложке происходит не в центре, а по некоторой окружности, где градиент температуры более существенен. В результате в центре образуется диск из жидкости (рис. 3*а*), который за счет поверхностного натяжения трансформируется сначала в тороидальное образование

(рис. 3*б*), а затем после осцилляций в каплю (рис. 3*в*,*г*). Позже происходит постепенное испарение капли (рис. 3*д*,*е*). Такая же картина наблюдалась ранее для свободно висящих пленок [1].

На смачиваемой подложке сначала тоже образуется утоньшение по окружности на некотором расстоянии от оси, но образования центральной капли не происходит из-за наличия прекурсорной пленки (рис. 4).

РАЗРЫВ ПЛЕНОК ЖИДКОСТИ, НАХОДЯЩИХСЯ НА ПОВЕРХНОСТИ СЛОЯ ТЯЖЕЛОЙ НЕСМЕШИВАЕМОЙ ЖИДКОСТИ

Были выполнены эксперименты с двухслойной системой несмешивающихся гидкостей (рис. 5). В горизонтальную прямоугольную кювету наливалась тяжелая жидкость (perfluoro-n-octane C_8F_{18}, плотностью 1,76 г/см^3), которая выполняла роль жидкой подложки. Между левой стенкой кюветы и поплавком-разделителем осторожно наливалась подкрашенная вода плотностью 1 г/см^3. Затем поплавок-разделитель перемещался направо, создавая тонкую пленку воды. При этом можно было варьировать отношение размеров пленки и ее толщину.

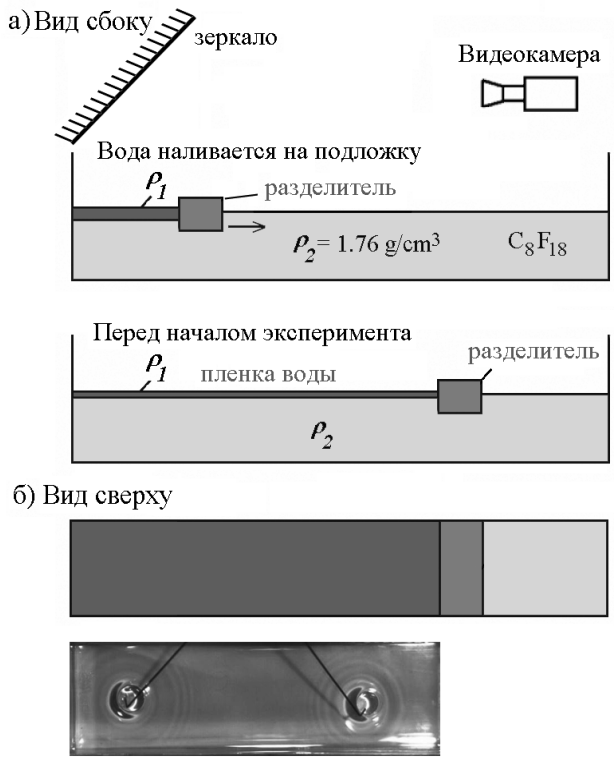

Рис.5 Схема экспериментов.

Далее в центральной части водной пленки тонкими несмачиваемыми иглами делалось одно или одновременно два маленьких круглых отверстия. Временная эволюция жидкой пленки с отверстиями фиксировалась высокоскоростной видеокамерой MotionXtra-HG-100K. Под действием поверхностного натяжения эти отверстия расширялись и при взаимодействии со стенками деформировались, кардинально изменяя свою форму (рис. 6, 7, 8). Указаны номера кадров. Скорость съемки 100 кадров в секунду.

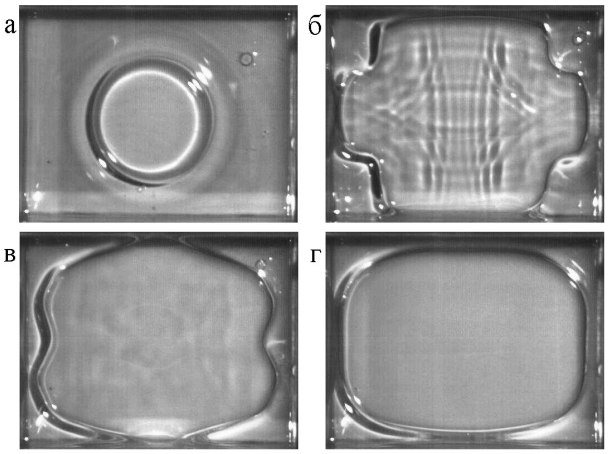

Рис.6 Разрыв тонкой пленки, находящейся на поверхности более тяжелой жидкой подложки. $t = 577$ (а), 639 (б), 730 (в), 1000 (г).

Необходимо отметить, что одни из первых экспериментов по разрыву тонких пленок на жидкой подложке были выполнены в работе [10]. Однако там использовалась круглая кювета, и расширение отверстия в пленке происходило симметричным образом.

В случае двух отверстий возможны два сценария развития событий. В первом сценарии жидкий мостик, разделяющий отверстия, по истечении времени разрывается, после чего форма отверстия в пленке стремится к своему стационарному овальному виду (рис. 7).

Во втором сценарии одно из отверстий постепенно уменьшается в размерах и далее полностью затягивается (рис. 8).

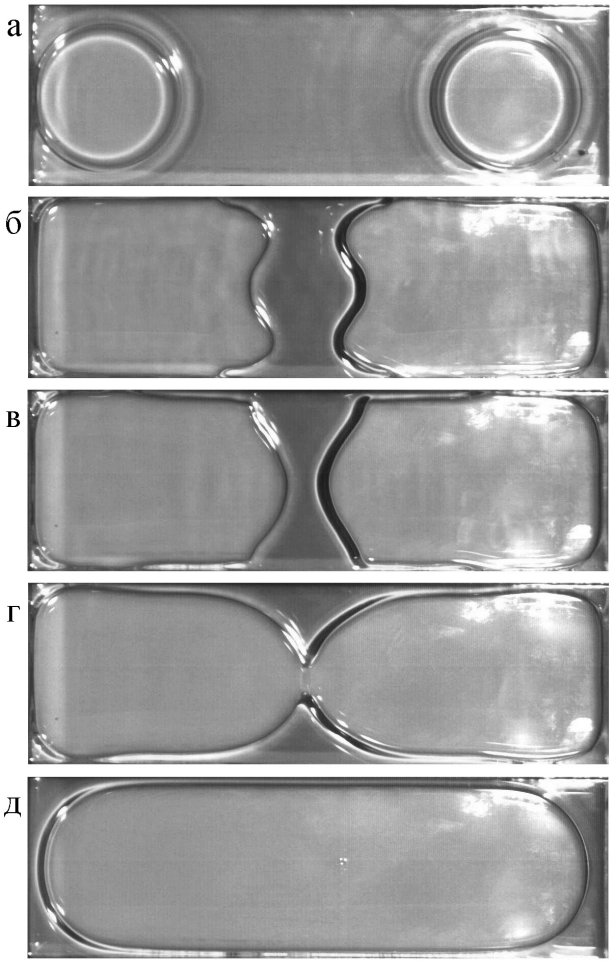

Рис.7 Разрыв тонкой пленки, на поверхности более тяжелой жидкой подложки. $t = 610$ (а), 785 (б), 860 (в), 993 (г), 1999 (д).

На первом этапе компьютерного моделирования в качестве модельной системы рассматривалась одна тонкая пленка жидкости в кювете со смачиваемыми стенками, но с несмачиваемым дном. Взаимодействие со стенками и дном кюветы моделировалось специальными силами взаимодействия между узлами, принадлежащими твердым границам, и узлами, занятыми жидкостью или паром. На границах кюветы использовались условия непротекания и непроскальзывания. Для простоты процесс разрыва жидкой пленки осуществлялся путем повышения на короткое время температуры в маленькой локальной области. В окрестности нагретого пятна из-за изменения поверхностного натяжения в пленке возникало расходящееся течение (эффект Марангони), приводящее к ее разрыву в этом месте.

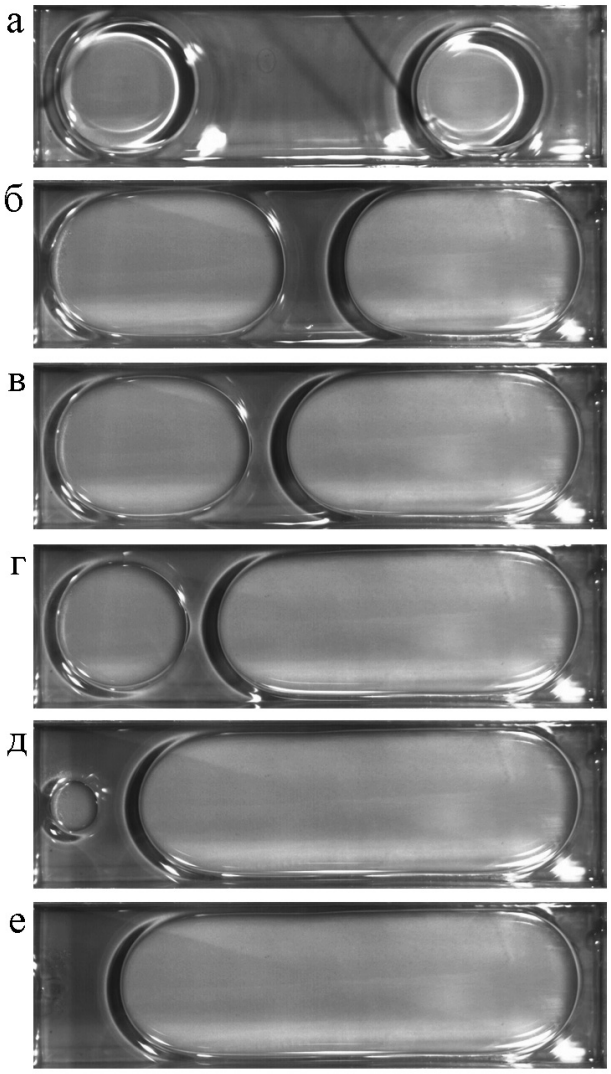

Рис.8 Разрыв тонкой пленки на поверхности более тяжелой жидкой подложки. $t = 600$ (а), 850 (б), 2000 (в), 2500 (г), 2900 (д), 3000 (е).

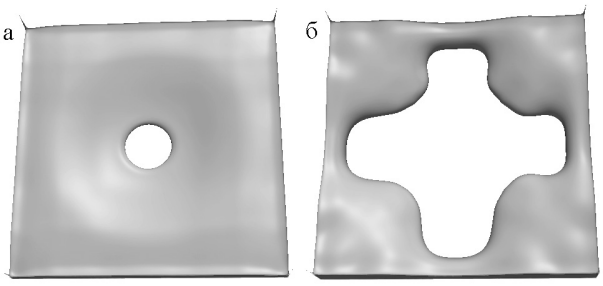

Рис.9 Разрыв тонкой пленки в кювете с несмачиваемым дном. $t = 3200$ (а), 11800 (б). Сетка 368×368×96.

© Куперштох А.Л., Гаврилов Н.В., Ерманюк Е.В.

Затем температура мгновенно приводилась к начальному значению, чтобы не оказывать влияние на последующее течение.

Результаты трехмерного компьютерного моделирования для одного отверстия показаны на (рис. 9). Наблюдается хорошее качественное соответствие с результатами гидродинамических экспериментов (рис. 6*а,б*).

В случае двух отверстий хорошо воспроизводится разрушение жидкого мостика, разделяющего отверстия (рис. 10).

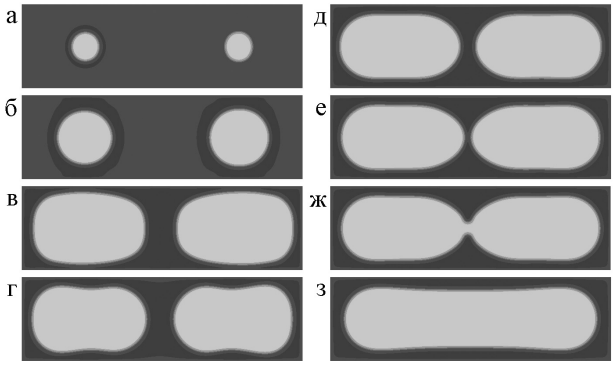

Рис.10 $t = 1920, 2720, 5200, 9540, 15020, 20000, 20720, 50020$. Сетка 640×192×80.

Проведено также компьютерное моделирование разрыва пленки на поверхности жидкой подложки (рис. 11). Для моделирования более сложной двухслойной системы несмешивающихся жидкостей использовался метод LBE с двумя компонентами. Для каждой компоненты использовался свой комплект функций распределения. В двухслойной системе дно кюветы считалось тоже смачиваемым. Вязкость жидкостей приводит к тому, что под действием течения пленки начинает двигаться и жидкость подложки. Показано, что течения в однослойной и в двухслойной постановке качественно похожи.

Граница раздела не остается плоской, а из-за наличия поля тяжести происходит аккомодация поверхности раздела, что хорошо видно на рис. 11.

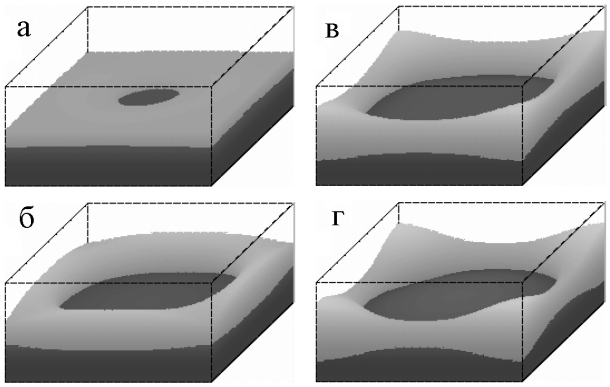

Рис.11 Разрыв пленки на жидкой подложке. $t = 3450$ (а), 4450 (б), 4950 (в), 5550 (г). Сетка 160×160×80.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведены результаты экспериментов по разрушению тонких пленок, находящихся на поверхности более тяжелой несмешиваемой жидкости в прямоугольной кювете. Под действием поверхностного натяжения эти отверстия расширялись и при взаимодействии со стенками деформировались, кардинально изменяя свою форму. В случае двух отверстий наблюдались два сценария эволюции. В первом сценарии жидкий мостик, разделяющий отверстия, по истечении времени разрывается, после чего форма отверстия в пленке стремится к своему стационарному овальному виду. Во втором сценарии одно из отверстий постепенно уменьшается в размерах и далее полностью затягивается. Для трехмерного компьютерного моделирования использовался метод решеточных уравнений Больцмана. Проведено моделирование разрушения пленок жидкости на поверхности твердых и жидких подложек из-за термокапиллярного эффекта (эффект Марангони). Выполнено моделирование эволюции отверстий в пленке жидкости для двухслойных систем несмешиваемых жидкостей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Куперштох А.Л. Трехмерное моделирование двухфазных систем типа жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана на GPU // Вычислительные методы и программирование. – 2012. – Т. 13. – С. 130–138.

Kupershtokh, A.L. (2012). "Three-dimensional simulations of two-phase liquid-vapor systems on GPU using the lattice Boltzmann method", *Numerical Methods and Programming*, Vol. 13, pp. 130–138.
2. Qian, Y.H. and Chen, S. (1997), "Finite size effect in lattice-BGK models", *International Journal of Modern Physics C*, Vol. 8, No. 4, pp. 763–771.
3. Kupershtokh, A.L., Medvedev, D.A. and Karpov, D.I. (2009), "On equations of state in a lattice Boltzmann method", *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. 58, No. 5, pp. 965–974.
4. Куперштох А.Л. Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана // Вестник НГУ: Серия "Математика, механика и информатика". – 2005. – Т. 5, № 3. – С. 29–42. Kupershtokh, A.L. (2005), "Simulation of flows with liquid-vapor interfaces by the lattice Boltzmann method", *Vestnik NGU (Quart. J. of Novosibirsk State Univ.), Series: Math., Mech. and Informatics*, Vol. 5, No. 3, pp. 29–42.
5. Kupershtokh, A.L., Karpov, D.I., Medvedev, D.A., Stamatelatos, C., Charalambakos, V.P., Pyrgioti, E.C. and Agoris, D.P. (2007), "Stochastic models of partial discharge activity in solid and liquid dielectrics", *IET Science, Measurement and Technology*, Vol. 1, No. 6, pp. 303–311.
6. Qian, Y.H. and Orzag, S.A. (1993), "Lattice BGK models for the Navier – Stokes equation: Nonlinear deviation in compressible regimes", *Europhys. Lett.*, Vol. 21, pp. 255–259.
7. Куперштох А.Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // Вестник НГУ: Серия "Математика, механика и информатика". – 2004. – Т. 4, № 2. – С. 75–96. Kupershtokh, A.L. (2004), "Incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation", *Vestnik NGU (Quart. J. of Novosibirsk State Univ.), Series: Math., Mech. and Informatics*, Vol. 4, No. 2, pp. 75–96.
8. Kupershtokh, A.L. (2004), "New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation", *Proc. of the 5th International EHD Workshop*, Poitiers, France, pp. 241–246.
9. Kupershtokh, A.L. (2010), "Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations", *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. 59, No. 7, pp. 2236–2245.
10. Братухин Ю.К., Зуев А.Л., Костарев К.Г., Шмыров А.В. Устойчивость стационарного разрыва жидкого слоя на поверхности несмешивающейся жидкости // Механика жидкости и газа. – 2009. – № 3. – С. 11–22. Bratukhin, Yu.K., Zuev, A.L., Kostarev, K.G. and Shmyrov, A.V. (2009). "Stability of a steady-state discontinuity of a fluid layer on the surface of an immiscible fluid", *Fluid Dynamics*, Vol. 44, No. 3, pp. 340–350.

© Куперштох А.Л., Гаврилов Н.В., Ерманюк Е.В.