

УДК 681.2

СПОСОБИ АПРОКСИМАЦІЇ МЕРИДІОНАЛЬНИХ ПЕРЕРІЗІВ КАПІЛЯРНИХ ПОВЕРХОНЬ ПРИ ВИЗНАЧЕННІ ПОВЕРХНЕВОГО НАТЯГУ МЕТОДОМ ЛЕЖАЧОЇ КРАПЛІ

© Горєлов В. О., 2001

Івано-Франківський державний технічний університет нафти і газу

Розглянуто фактори, які впливають на точність опису ділянок меридіонального перерізу капілярної поверхні аналітичними залежностями, способи знаходження таких залежностей, а також дано рекомендації щодо їх практичного застосування.

Переважає більшість методів дослідження капілярних властивостей речовин ґрунтується на застосуванні оптичних систем. Досягнення високої точності при визначенні поверхневого натягу методом лежачої краплі можливе тільки за умови визначення координат точок профілю краплі телевізійною системою [1], оскільки велику кількість точок (сотні, тисячі) отримати і обробити вручну традиційними способами (при використанні мікроскопа і фотографії) практично неможливо.

Призначення телевізійної оптичної системи – отримання збільшеного зображення краплі на чутливому елементі відеоприймача (далі – відеокамери), що дає можливість перевести інформаційний сигнал у цифрову форму, зручну для обробки. Наступний етап – сегментація отриманого зображення, тобто розділення його на ділянки, що належать краплі і, відповідно, на ті, що належать фонові. Існує численна група алгоритмів сегментації зображень. Об'єднує їх відсутність загального підходу до вирішення даної задачі. Окремі випадки застосування одного і того ж алгоритму можуть мати протилежні яскраво виражені недоліки і переваги. Хоча вплив досконалості алгоритму сегментації зображення краплі на точність визначення поверхневого натягу методом лежачої краплі досить високий, існує ще один етап, нехтування яким зводить нанівець результати попереднього. Особливо важливим він є у випадку визначення поверхневого натягу методом, запропонованим у [2], який полягає у визначенні радіусів кривизни капілярної поверхні у двох взаємно-перпендикулярних напрямках для довільної точки цієї поверхні. Даний підхід передбачає знаходження аналітичних залежностей, якими описуються невеликі ділянки поверхні краплі, після чого за відомими формулами аналітичної геометрії [3] визначають радіуси кривизни R_1 , R_2 та b (де b – радіус кривизни у так званій омболічній точці – вершині краплі). Після цього значення поверхневого

натягу σ обчислюється за такою формулою:

$$\sigma = \Delta\rho g z / \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - \frac{2}{b} \right), \quad (1)$$

де $\Delta\rho$ – різниця густин контактуючих фаз (наприклад, повітря і досліджуваної рідини); g – прискорення вільного падіння; z – вертикальна координата точки, що належить профілеві краплі і площинам, у яких проведені радіуси R_1 , R_2 .

Наведемо формули для визначення R_1 , R_2 :

$$\frac{1}{R} = \frac{d_2 z(x)}{dx^2} / \left(1 + \left(\frac{dz}{dx} \right)^2 \right)^{3/2},$$

$$\frac{1}{R_2} = \frac{dz(x)}{dx} / x \left(1 + \left(\frac{dz}{dx} \right)^2 \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Неважко помітити, що точність визначення R_1 та R_2 в значній мірі залежить від правильності задання залежності $z = z(x)$. Існує кілька способів задання $z(x)$: апроксимація вхідного набору точок спеціальними функціями, звичайними поліномами, сплайн-функціями (у цьому випадку важливе значення має правильне задання краєвих умов), згладжуючими сплайн-функціями.

Поліноміальна інтерполяція і апроксимація не забезпечують неперервності похідних функції $z(x)$. Наслідком цього можуть бути значні похибки на проміжках між вузлами. Крім того, часто із збільшенням числа вузлів похибка такої інтерполяції не тільки не зменшується, а й починає зростати [4].

Позбавлена цих недоліків апроксимація та

інтерполяція за допомогою сплайн-функцій. Відомо, що сплайн можна трактувати як лінію, яку утворює гнучка лінійка, що зафіксована в ряді точок – вузлах інтерполяції. Фізичний зміст сплайна – це стан мінімально можливого напруження такої лінійки, якого система лінійка-вузли набуває самостійно. Математично сплайн – це спеціальний многочлен, що приймає у вузлах значення $z(x) = z_i = z(x_i)$ і забезпечує у них неперервність похідних. Як правило, достатньо забезпечити неперервність першої і другої похідних. Даній вимозі відповідають сплайн-многочлени третього порядку (кубічні сплайни).

Побудуємо сплайн-функцію третього порядку на деякому відрізку $[a, b]$, що належать меридіанному перерізові краплі.

Нехай на $[a, b]$ задана неперервна функція $z(x)$. Введемо сітку

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = b$$

і позначимо $z_i = z(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, N$.

Сплайном, що відповідає даній функції $z(x)$ і даним вузлом $\{z_i\}_{i=0}^N$, називається функція $s(x)$, що відповідає наступним вимогам [5]:

а) на кожному сегменті $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 0, 1, \dots, N$ функція $s(x)$ є многочленом третього ступеню;

б) функція $s(x)$, а також її перша $s'(x)$ та друга $s''(x)$ похідні неперервні на $[a, b]$;

в) $s(x_i) = z(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, N$.

Остання умова називається умовою інтерполювання, а сплайн, що визначається умовами а) – в), називається інтерполяційним кубічним сплайном.

Для побудови сплайна на кожному із відрізків $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 0, 1, \dots, N$ будемо шукати функцію $s(x) = s_i(x)$ у вигляді многочлена третього ступеню:

$$s_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + \frac{c_i}{2}(x - x_i)^2 + \frac{d_i}{6}(x - x_i)^3, \quad (3)$$

де a_i, b_i, c_i, d_i – коефіцієнти, що необхідно визначити. У [5] знаходимо зміст даних коефіцієнтів:

$$s'_i(x) = b_i + c_i(x - x_i) + \frac{d_i}{2}(x - x_i)^2,$$

$$s''_i(x) = c_i + d_i(x - x_i), \quad s'''_i(x) = d_i,$$

тому

$$a_i = s_i(x_i), \quad b_i = s'_i(x_i), \quad c_i = s''_i(x_i), \quad d_i = s'''_i(x_i).$$

де $s'''(x)$ – третя похідна по x . Із умов інтерполювання $s(x_i) = z(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, N$ отримуємо:

$$a_i = z(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Визначимо додатково $a_0 = z(x_0)$. Введемо $h_i = x_i - x_{i-1}$. Далі шляхом нескладних перетворень [5] отримаємо систему рівнянь для визначення коефіцієнтів c_i :

$$h_i c_{i-1} + 2(h_i + h_{i+1})c_i + h_{i+1}c_{i+1} = 6 \left(\frac{z_{i+1} - z_i}{h_{i+1}} - \frac{z_i - z_{i-1}}{h_i} \right). \quad (4)$$

Значення $c_0 = c_N = 0$ відповідають накладеним на $s(x)$ краєвим умовам. У даному випадку припускається, що функція $z(x)$ відповідає умовам $z''(a) = z''(b) = 0$. Тоді природно вимагати, щоб $s''(a) = s''(b) = 0$, звідки $c_0 = c_N = 0$.

Система (4) носить діагональний характер, тому має єдиний розв'язок. Оскільки матриця системи тридіагональна, розв'язок легко знайти, скориставшись відомим методом прогонки [5], яка у даному випадку стійка (також можна скористатися і методом виключення змінних Гауса з вибором головного елемента. Критерієм вибору є кількість операцій, необхідних для знаходження розв'язку та час їх виконання). За знайденими коефіцієнтами c_i коефіцієнти b_i та d_i визначаються за допомогою таких явних формул:

$$d_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{h_i}, \quad b_i = \frac{h_i}{2}c_i - \frac{h_i^2}{6}d_i + \frac{z_i - z_{i-1}}{h_i}, \quad (5)$$

$$i = 1, 2, \dots, N.$$

Спробуємо перевірити даний підхід практично. Для цього згенеруємо набір точок, що відповідають профілю краплі із заданими параметрами, після чого апроксимуємо набір сплайном, знайдемо значення R_1, R_2 та b а формулами (2) (причому b знайдеться аналогічно R_1) і за (1) визначимо σ . Нехай у досліді використовується крапля води. Для неї $\Delta\rho = 998.6$ кг/м³, $\sigma = 72.5$ мН/м. Додатково задамося радіусом кривизни в омболічній точці $b = 0.002$ м.

Для розрахунку теоретичного профілю краплі

скористаємося підходом Башфорта і Адамса [6].

Якщо z – вертикальна координата точки капілярної поверхні, g – прискорення вільного падіння, то можна записати, що

$$p = \rho g z + C, \text{ де } C = \text{Const}, \quad (6)$$

де p – тиск.

Нехай вісь z – вісь обертання поверхні, x – горизонтальна координата меридіонального перерізу краплі, R_1 – радіус кривизни меридіональної частини профілю у даній точці, φ – кут, який утворює нормаль до поверхні з віссю обертання.

Тоді довжина нормалі, що перетинається віссю обертання, рівна $x/\sin \varphi$ і рівняння (6) можна записати у вигляді:

$$\frac{1}{R_1} + \frac{\sin x}{x} = \frac{C + \rho g z}{\sigma}. \quad (7)$$

Для вершини краплі рівняння (7) набуде вигляду:

$$\frac{C}{\sigma} = \frac{2}{b}, \text{ оскільки } b = R_1. \quad (8)$$

Тепер для довільної точки можна записати:

$$\begin{aligned} \frac{1}{R_1} + \frac{\sin \varphi}{x} &= \frac{z}{b} + \frac{\rho g}{\sigma} \text{ або} \\ \frac{b}{R_1} + \frac{\sin \varphi}{\left(\frac{x}{b}\right)} &= z + \frac{\rho g b^2}{\sigma} \left(\frac{z}{b}\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Позначимо $\beta = \rho g b^2 / \sigma$, де β – безрозмірний параметр. Нехай s – довжина дуги меридіонального перерізу, що вимірюється від основи до даної точки.

Тоді:

$$ds = R_1 d\varphi, \quad dx = R_1 \cos \varphi d\varphi, \quad dz = R_1 \sin \varphi d\varphi,$$

$$\begin{aligned} d\left(\frac{s}{b}\right) &= \left(\frac{R_1}{b}\right) d\varphi, \quad d\left(\frac{x}{b}\right) = \left(\frac{R_1}{b}\right) \cos \varphi d\varphi, \\ d\left(\frac{z}{b}\right) &= \left(\frac{R_1}{b}\right) \sin \varphi d\varphi. \end{aligned} \quad (10)$$

Для спрощення виразу (10) запишемо $X, Z, R_1,$

S замість $\frac{x}{b}, \frac{z}{b}, \frac{R_1}{b}, \frac{s}{b}$.

Спрощене рівняння матиме вигляд:

$$\frac{1}{R_1} + \frac{\sin \varphi}{X} = 2 + \beta \cdot Z. \quad (11)$$

Оскільки $\frac{1}{R_1} = \frac{d_2 Z}{dX^2} / \left(1 + \left(\frac{dZ}{dX}\right)^2\right)^{3/2}$ і

$$\sin \varphi = \frac{dZ}{dX} / \left(1 + \left(\frac{dZ}{dX}\right)^2\right)^{1/2}, \text{ результуючий вираз}$$

буде таким:

$$\frac{d_2 Z}{dX^2} + \frac{dZ}{XdX} \left(1 + \left(\frac{dZ}{dX}\right)^2\right) = (2 + \beta \cdot Z) \left(1 + \left(\frac{dZ}{dX}\right)^2\right)^{3/2}. \quad (12)$$

Задаючись початковими умовами, це рівняння можна розв'язати за допомогою числових методів.

Розв'язком (12) є шуканий набір точок. На рис. 1 наведено профіль краплі, який відповідає заданим умовам.

У межах даної статті неможливо навести усі розрахунки, тому наводяться тільки кінцеві результати.

Знаходимо $b = 0.002$ м. Незаважко помітити, що це значення цілком відповідає заданому. Далі вибираємо кілька довільних точок, знаходимо значення R_1 та R_2 , що відповідають їм і за (1) знаходимо σ :

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= 0.07268 \text{ Н/м}; & \sigma_4 &= 0.07249 \text{ Н/м}; \\ \sigma_2 &= 0.07226 \text{ Н/м}; & \sigma_5 &= 0.07252 \text{ Н/м}; \\ \sigma_3 &= 0.07248 \text{ Н/м}; & \sigma_6 &= 0.07267 \text{ Н/м}. \end{aligned}$$

Звідси, $\bar{\sigma} = 0.0725 \text{ Н/м} = 72.5 \text{ мН/м}$.

Отже, описаний вище підхід має право на застосування.

Однак і він має деякі обмеження. Використання звичайної сплайн-функції при апроксимації профілю краплі справедливе у випадку високоточного вимірювання значень координат точок профілю. У випадку, коли точність вимірювання (z_i, x_i) занижена, сплайн дає значні похибки між вузлами, що унеможливило проведення подальших обчислень.

У такому випадку доцільно скористатися кусочно-поліноміальною апроксимацією із згладжуванням [7].

Знову розглядаємо задачу про гладке відтворення функції, яка визначена на сітці, тобто

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = b.$$

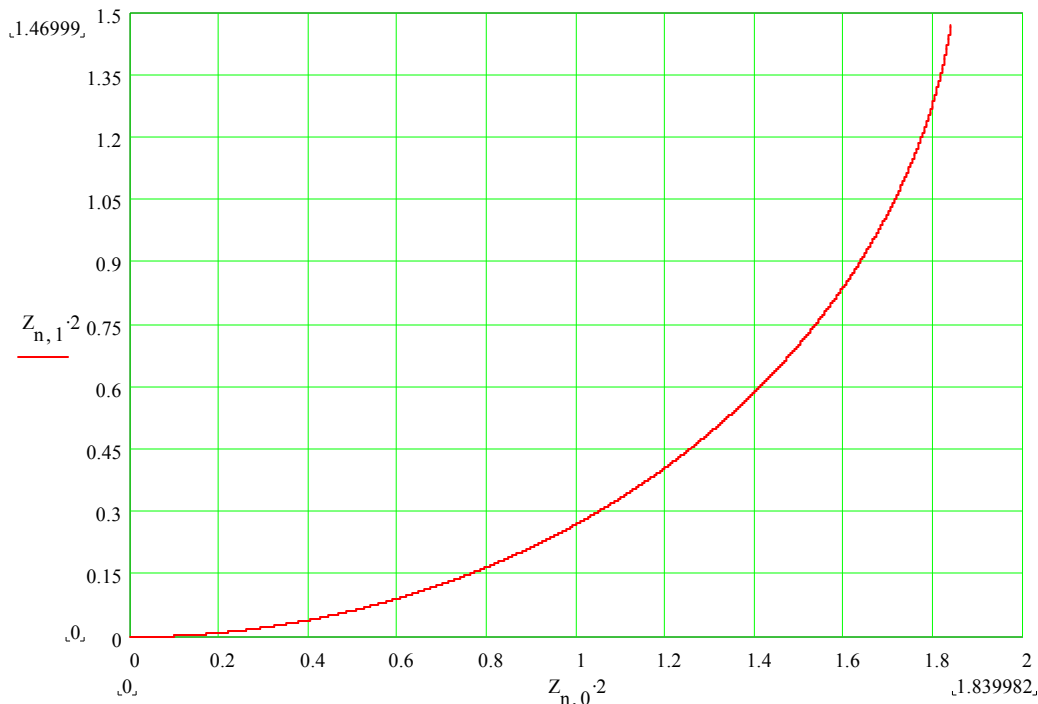


Рис. 1. Теоретичний профіль краплі із $\Delta\rho = 998.6 \text{ кг/м}^3$, $\sigma = 72.5 \text{ мН/м}$, $b = 0.002 \text{ м}$.

Однак, тепер значення функції z_i у вузлах сітки збурене деякою похибкою. Тому немає сенсу будувати інтерполяційну функцію, котра у вузлах співпадає із заданими значеннями. Більше того, необхідно побудувати функцію, котра проходила би поблизу заданих значень більш плавно, ніж інтерполяційна. Такі функції називають згладжуючими.

Вимагатимемо, щоб шукана згладжуюча функція $g(x)$ мінімізувала на класі $W_2^2[a, b]$ функціонал

$$\Phi_1(u) = \int_a^b [u'']^2 dx + \sum_{k=0}^n p_k [u(x_k) - z_k]^2, \quad (13)$$

де p_k – деякі додатні числа. У функціоналі $\Phi_1(u)$ скомбіновані інтерполяційні умови проходження кривої поблизу заданих значень і умова “мінімальності” вигинання функції. Чим більші вагові коефіцієнти p_k , тим більший вклад у функціонал вносять інтерполяційні умови, тим ближче до заданих значень проходить згладжуюча функція.

У [7] показано, яким чином можна розв’язати дану задачу.

Важливими факторами, що впливають на точність визначення σ , є точність вимірювання

координат точок профілю та вибір апроксимуючої залежності, що описує відрізок, який належить профілеві краплі. Поєднання високоточних вимірювань геометрії краплі та ефективного алгоритму апроксимації забезпечують прийнятні результати визначення поверхневого натягу на межі розділу фаз.

1. Межфазная тензиометрия / А. И. Русанов, В. А. Прохоров. — СПб: Химия, 1994. — 400 с.
2. 1. Горелов В. О., Кісіль І. С. Вибір методу для вимірювання динамічного поверхневого натягу // Методи та прилади контролю якості.-2000.-№5.- С.92-99.
3. Адамсон А. Физическая химия поверхностей: Пер. с. англ./ Под ред. З. М. Зорина, В. М. Муллера. — М.: Мир., 1979. — 568 с.
4. Дьяконов В. П. Справочник по алгоритмам и программам на языке бейсик для персональных ЭВМ: Справочник. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. — 240с.
5. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы: Учеб. пособие для вузов. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. — 432с.
6. Bashfort F., Adams J. C. An attempt to test the theories of capillary action. Cambridge: University Press, 1883.
7. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики: Учеб. пособие. — 3-е изд., перераб. и доп. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. — 608с.