

Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

L. B. Direktor, V. Zaitchenko, I. L. Maikov, An improved method of sessile drop for determining the surface tension of liquids, *TVT*, 2010, Volume 48, Issue 2, 193–197

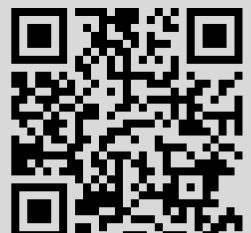
Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 18.97.14.80

December 1, 2024, 23:44:01



ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА

УДК 532.6:004.932

УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫЙ МЕТОД ЛЕЖАЩЕЙ КАПЛИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ

© 2010 г. Л. Б. Директор, В. М. Зайченко, И. Л. Майков

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва

Поступила в редакцию 25.05.2009 г.

Разработана усовершенствованная методика обработки изображений меридионального сечения капли жидкости, полученных при реализации метода лежащей капли для определения поверхностного натяжения жидкости. Методика обеспечивает сканирование цифрового изображения капли, численное решение уравнения Юнга–Лапласа, а также расчет поверхностного натяжения, краевого угла смачивания и объема капли.

ВВЕДЕНИЕ

Метод лежащей (висящей) или неподвижной капли считается наиболее надежным статическим методом для изучения поверхностного натяжения металлических расплавов, солевых, полимерных и других жидкостей [1–3].

Статические методы основаны на решении дифференциального уравнения Юнга–Лапласа. Приближенные решения этого уравнения получены многими авторами, и наиболее распространенный способ определения коэффициента поверхностного натяжения основан на использовании таблиц Башфорта и Адамса [1]. Существующие эмпирические зависимости по своей сути являются аппроксимацией этих таблиц. Недостатками таких методов являются невысокая точность, а также ограничения, связанные с размерами капли. Геометрические параметры капли определяются путем обмера ее фотографического изображения с помощью измерительного микроскопа. Процесс обмера достаточно трудоемок, а его результаты содержат погрешность, связанную с индивидуальными особенностями наблюдателя.

Целью настоящей работы является создание быстродействующего программного комплекса, позволяющего обрабатывать цифровое изображение капли и проводить оптимизационную процедуру для определения коэффициента поверхностного натяжения жидкости с использованием как метода лежащей, так и метода отрыва капли (висящей капли). В основе методики лежит идеология численного интегрирования уравнения Юнга–Лапласа, представленная в работе [4].

МЕТОДИКА ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЯ КАПЛИ

Исходная информация представляет собой графический файл в стандартном точечном фор-

мате BitMap (BMP), который содержит изображение меридионального сечения капли. Изображение имеет черно-белую палитру с градацией серого цвета от белого до черного (в шестнадцатеричном представлении от 000000 до FFFFFFFF) в RGB-цвете (рис. 1).

Определение точной границы изображения представляет собой отдельную задачу. Имеются достаточно сложные алгоритмы, основанные на методе функции уровня (level set function) [5] и требующие решения уравнений гиперболического типа в частных производных. В настоящей работе для упрощения численных расчетов используется простой алгоритм, описанный ниже, и оценивается его точность.

На первом этапе обработки серое изображение переводится в черно-белое монохромное следующим образом. Выбирается среднее значение цвета из палитры цветов (в шестнадцатеричном представлении это соответствует цвету 888888). Дальнейший процесс обработки заключается в

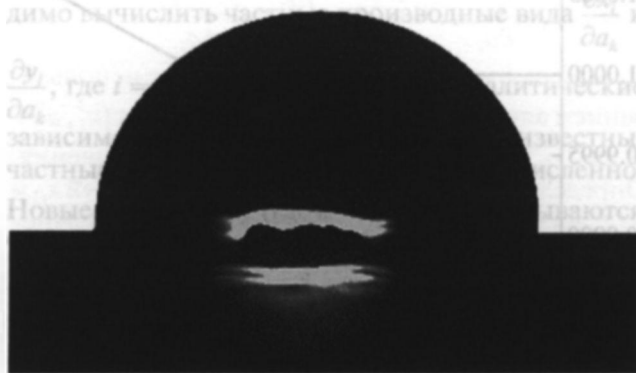


Рис. 1. Изображение капли на подложке (формат BMP).



Рис. 2. Фрагмент контура изображения лежащей капли: (а) – до преобразования; (б) – после преобразования.

сканировании изображения по каждому пикселю. Все пиксели со значением цвета меньше граничного изменяют свое значение на белый цвет, больше граничного – на черный, в результате чего определяется граница белого и черного цветов и, соответственно, координаты точек контура изображения (рис. 2).

Выбор граничного цвета при переводе изображения из серого в монохромное вносит определенную ошибку в результат, что иллюстрирует кривая зависимости относительного объема эталона (калиброванного стального шарика) от выбора граничного цвета (рис. 3).

При выборе пятой части полной палитры (цвета палитры от 666666 до АААААА в шестнадцатеричном представлении соответствуют цветам от 1 до 4 на рис. 3) относительная погрешность определения объема составляет 0.2%. Цвету палитры 888888 (середина полной палитры) соответствует значение 3 по оси абсцисс и относительный объем, равный 1.

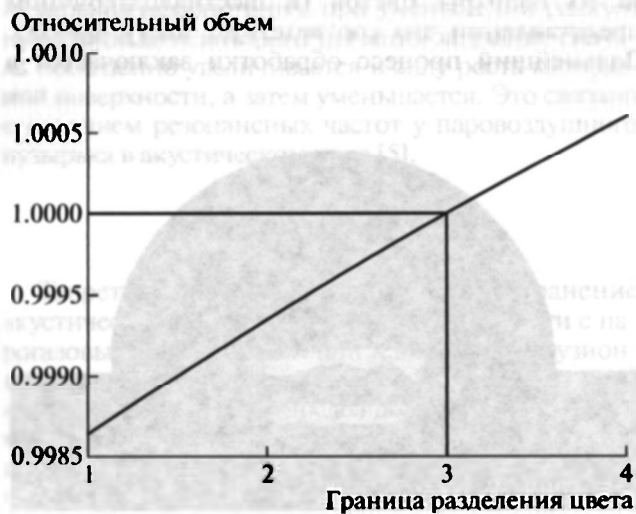


Рис. 3. Зависимость относительного объема эталона от выбора граничного цвета.

ЧИСЛЕННАЯ ПРОЦЕДУРА ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЯ КАПЛИ

Форма капли, лежащей на подложке (рис. 4), удовлетворяет уравнению Юнга–Лапласа

$$-\frac{y''}{(1+y'^2)^{3/2}} + \frac{1}{y(1+y'^2)^{1/2}} = \frac{H-x}{a^2} + \frac{2}{R_0}, \quad (1)$$

где $a^2 = \frac{\sigma}{\Delta\rho g}$ – капиллярная постоянная; σ – коэффициент поверхностного натяжения; H – высота капли; $[x, y(x)]$ – координаты границы меридионального сечения капли (см. рис. 4); R_0 – радиус кривизны в верхней точке капли; $\Delta\rho$ – разность плотностей жидкости и окружающего газа.

Для численного решения уравнения (1) проведем его параметризацию [4]

$$\begin{aligned} x &= x(t), \\ y &= y(t), \end{aligned}$$

Здесь t – длина дуги кривой от вершины капли до точки с координатами $x(t), y(t)$. Тогда уравнение Юнга–Лапласа в параметрической форме запишется в виде

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= -\dot{y} \left(\frac{H-x}{a^2} + \frac{\dot{x}}{y} + \frac{2}{R_0} \right), \\ \ddot{y} &= \dot{x} \left(\frac{H-x}{a^2} + \frac{\dot{x}}{y} + \frac{2}{R_0} \right) \quad (2) \end{aligned}$$

с начальными условиями $x(0) = H, y(0) = 0, \dot{x}(0) = 0, \dot{y}(0) = -1$.

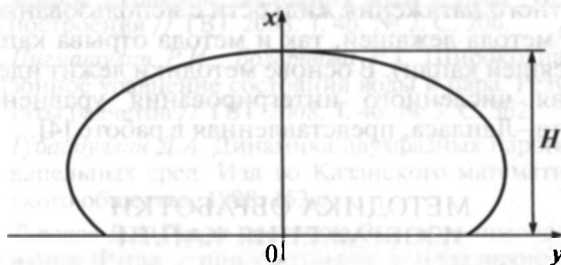


Рис. 4. Меридиональное сечение лежащей капли.

Система двух дифференциальных уравнений второго порядка (2) представима в виде системы четырех уравнений первого порядка

$$\begin{aligned} \dot{x} &= u, \\ \dot{u} &= -v \left(\frac{H-x}{a^2} + \frac{u}{y} + \frac{2}{R_0} \right), \\ \dot{y} &= v, \\ \dot{v} &= u \left(\frac{H-x}{a^2} + \frac{u}{y} + \frac{2}{R_0} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

с начальными условиями $x(0) = H$, $y(0) = 0$, $u(0) = 0$, $v(0) = -1$.

Для интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений (3) использовался численный метод решения жестких дифференциальных уравнений — линейный многошаговый метод с автоматическим выбором шага, реализованный в алгоритме DIFSUB [6].

При обработке данных, полученных в методе лежащей капли (отрыва капли), решается обратная задача определения капиллярной постоянной a^2 , высоты капли H и ее радиуса кривизны R_0 с использованием зависимости радиуса окружности горизонтального сечения капли от расстояния этого сечения до подложки.

Рассмотрим функционал, представляющий сумму квадратов отклонений экспериментальных точек от расчетной кривой

$$L = \sum_{i=1}^N \left((x_{ei} - x_i)^2 + (y_{ei} - y_i)^2 \right) \quad (4)$$

где (x_{ei}, y_{ei}) — координаты экспериментальных точек, (x_i, y_i) — координаты расчетных точек.

Расчетные точки (x_i, y_i) являются функциями параметров $a_1 = a^2$, $a_2 = H$, $a_3 = R_0$:

$$\begin{aligned} x_i &= x_i(t_i, a_1, a_2, a_3), \\ y_i &= y_i(t_i, a_1, a_2, a_3). \end{aligned} \quad (5)$$

Разложим (5) в ряд Тейлора в окрестности точки (a_1^0, a_2^0, a_3^0)

$$\begin{aligned} x_i &= x_i(t_i, a_1^0, a_2^0, a_3^0) + \frac{\partial x_i}{\partial a_1} \Delta a_1 + \frac{\partial x_i}{\partial a_2} \Delta a_2 + \frac{\partial x_i}{\partial a_3} \Delta a_3, \\ y_i &= y_i(t_i, a_1^0, a_2^0, a_3^0) + \frac{\partial y_i}{\partial a_1} \Delta a_1 + \frac{\partial y_i}{\partial a_2} \Delta a_2 + \frac{\partial y_i}{\partial a_3} \Delta a_3. \end{aligned} \quad (6)$$

Для нахождения минимума функционала (4) должны выполняться условия

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial (\Delta a_1)} &= 0, \\ \frac{\partial L}{\partial (\Delta a_2)} &= 0, \\ \frac{\partial L}{\partial (\Delta a_3)} &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Подставив (4) в (6) и продифференцировав, систему уравнений (7) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left[\left(x_{ei} - x_i - \frac{\partial x_i}{\partial a_1} \Delta a_1 - \frac{\partial x_i}{\partial a_2} \Delta a_2 - \frac{\partial x_i}{\partial a_3} \Delta a_3 \right) \frac{\partial x_i}{\partial a_1} + \right. \\ \left. + \left(y_{ei} - y_i - \frac{\partial y_i}{\partial a_1} \Delta a_1 - \frac{\partial y_i}{\partial a_2} \Delta a_2 - \frac{\partial y_i}{\partial a_3} \Delta a_3 \right) \frac{\partial y_i}{\partial a_1} \right] &= 0, \\ \sum_{i=1}^N \left[\left(x_{ei} - x_i - \frac{\partial x_i}{\partial a_1} \Delta a_1 - \frac{\partial x_i}{\partial a_2} \Delta a_2 - \frac{\partial x_i}{\partial a_3} \Delta a_3 \right) \frac{\partial x_i}{\partial a_2} + \right. \\ \left. + \left(y_{ei} - y_i - \frac{\partial y_i}{\partial a_1} \Delta a_1 - \frac{\partial y_i}{\partial a_2} \Delta a_2 - \frac{\partial y_i}{\partial a_3} \Delta a_3 \right) \frac{\partial y_i}{\partial a_2} \right] &= 0, \\ \sum_{i=1}^N \left[\left(x_{ei} - x_i - \frac{\partial x_i}{\partial a_1} \Delta a_1 - \frac{\partial x_i}{\partial a_2} \Delta a_2 - \frac{\partial x_i}{\partial a_3} \Delta a_3 \right) \frac{\partial x_i}{\partial a_3} + \right. \\ \left. + \left(y_{ei} - y_i - \frac{\partial y_i}{\partial a_1} \Delta a_1 - \frac{\partial y_i}{\partial a_2} \Delta a_2 - \frac{\partial y_i}{\partial a_3} \Delta a_3 \right) \frac{\partial y_i}{\partial a_3} \right] &= 0, \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^3 \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial x_i}{\partial a_k} \frac{\partial x_i}{\partial a_1} + \frac{\partial y_i}{\partial a_k} \frac{\partial y_i}{\partial a_1} \right) \Delta a_k &= \\ = \sum_{i=1}^N \left((x_{ei} - x_i) \frac{\partial x_i}{\partial a_1} + (y_{ei} - y_i) \frac{\partial y_i}{\partial a_1} \right), \\ \sum_{k=1}^3 \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial x_i}{\partial a_k} \frac{\partial x_i}{\partial a_2} + \frac{\partial y_i}{\partial a_k} \frac{\partial y_i}{\partial a_2} \right) \Delta a_k &= \\ = \sum_{i=1}^N \left((x_{ei} - x_i) \frac{\partial x_i}{\partial a_2} + (y_{ei} - y_i) \frac{\partial y_i}{\partial a_2} \right), \\ \sum_{k=1}^3 \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial x_i}{\partial a_k} \frac{\partial x_i}{\partial a_3} + \frac{\partial y_i}{\partial a_k} \frac{\partial y_i}{\partial a_3} \right) \Delta a_k &= \\ = \sum_{i=1}^N \left((x_{ei} - x_i) \frac{\partial x_i}{\partial a_3} + (y_{ei} - y_i) \frac{\partial y_i}{\partial a_3} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

Для решения системы уравнений (8) необходимо

вычислить частные производные вида $\frac{\partial x_i}{\partial a_k}$ и

$\frac{\partial y_i}{\partial a_k}$, где $i = 1-N$, $k = 1-3$. Так как аналитические зависимости (4) от параметров a_i неизвестны, частные производные определяются численно. Новые значения a_k^0 (где $k = 1-3$) рассчитываются через найденные значения Δa_k по формуле

$$a_k^0 = a_k^0 + \Delta a_k. \quad (9)$$

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ

Для численного решения системы уравнений (8) разработан следующий алгоритм.

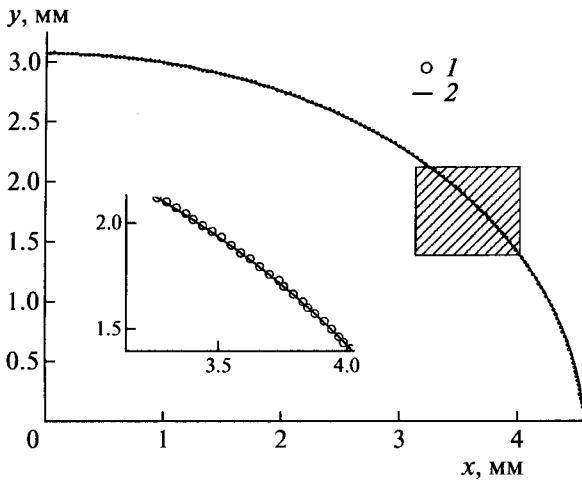


Рис. 5. Форма капли воды в методе лежащей капли: 1 – опытные точки; 2 – расчет с использованием оптимизационной процедуры.

1. Задание начального приближения (a_1^0, a_2^0, a_3^0) в предположении, что форма капли приближенно описывается эллипсом с полуосями, равными высоте капли и максимальному радиусу окружности горизонтального сечения.

2. Задание малых отклонений $(\Delta a_1, \Delta a_2, \Delta a_3)$.

3. Решение системы уравнений (3) с использованием алгоритма DIFSUB при заданных значениях (a_1^0, a_2^0, a_3^0) . Получение 1-го численного решения. Определение функциональных зависимостей x_{i1} и y_{i1} с использованием алгоритма вычисления параметров кубической сплайн-функции SPLINE [7].

4. Решение системы уравнений (3) с использованием алгоритма DIFSUB при заданных значениях $(a_1^0 + \Delta a_1, a_2^0, a_3^0)$. Получение 2-го численного решения. Определение функциональных зависимостей x_{i2} и y_{i2} с использованием алгоритма SPLINE. Вычисление производных с использованием 1-го и 2-го решений

$$\frac{\partial x_i}{\partial a_1} = \frac{x_{i2} - x_{i1}}{\Delta a_1}, \quad \frac{\partial y_i}{\partial a_1} = \frac{y_{i2} - y_{i1}}{\Delta a_1}.$$

5. Решение системы уравнений (3) с использованием алгоритма DIFSUB при заданных $(a_1^0, a_2^0 + \Delta a_2, a_3^0)$. Получение 3-го численного решения. Определение функциональных зависимостей x_{i3} и y_{i3} с использованием алгоритма SPLINE. Вычисление производных с использованием 1-го и 3-го решений

$$\frac{\partial x_i}{\partial a_2} = \frac{x_{i3} - x_{i1}}{\Delta a_2}, \quad \frac{\partial y_i}{\partial a_2} = \frac{y_{i3} - y_{i1}}{\Delta a_2}.$$

6. Решение системы уравнений (3) с использованием алгоритма DIFSUB при заданных $(a_1^0, a_2^0,$

$a_3^0 + \Delta a_3)$. Получение 4-го численного решения. Определение функциональных зависимостей x_{i4} и y_{i4} с использованием алгоритма SPLINE. Вычисление производных с использованием 1-го и 4-го решений

$$\frac{\partial x_i}{\partial a_3} = \frac{x_{i4} - x_{i1}}{\Delta a_3}, \quad \frac{\partial y_i}{\partial a_3} = \frac{y_{i4} - y_{i1}}{\Delta a_3}.$$

7. Вычисление коэффициентов системы (8) и ее решение с использованием алгоритма решения системы линейных уравнений SOLVE [7]. Получение $(\Delta a_1, \Delta a_2, \Delta a_3)$.

8. Вычисление новых значений параметров по формуле (9)

$$a_1^0 = a_1^0 + \beta_1 \Delta a_1$$

$$a_2^0 = a_2^0 + \beta_2 \Delta a_2$$

$$a_3^0 = a_3^0 + \beta_3 \Delta a_3,$$

где β_1, β_2 и β_3 – коэффициенты релаксации.

9. Вычисление функционала ошибки (4) и при необходимости повторение пп. 3–9 до получения сходящегося решения с заданной точностью.

ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Описанные алгоритмы реализованы в пакете программ (Windows-приложение, написанное в среде программирования Delphi), позволяющем определять координаты границ черно-белого изображения меридионального сечения капли исследуемой жидкости, рассчитывать значение коэффициента поверхностного натяжения, краевого угла смачивания жидкости и объем капли. Подпрограмма обработки изображений осуществляет сканирование изображения капли и фиксирует значение координат точки, в которой происходит изменение плотности цветовой гаммы. Результатом обработки является текстовый файл со значениями координат границы меридионального сечения капли. Полученные данные обрабатываются подпрограммой расчета коэффициента поверхностного натяжения. Предварительно необходимо вести значения плотностей исследуемой жидкости и контактирующего с ней газа и давления газа. Перед началом расчета коэффициента поверхностного натяжения предусмотрена возможность оценки качества экспериментальных данных и (при необходимости) исключение точек, выпадающих из регулярной кривой, описывающей границу меридионального сечения капли исследуемой жидкости.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Для тестирования программного комплекса были проведены эксперименты по определению коэффициента поверхностного натяжения дистиллированной воды на границе с воздухом.

Справочное значение $\sigma = 0.0727$ Н/м [8]. Эксперименты проводились при комнатных условиях. Измерительная ячейка установки представляла собой камеру с расположенной внутри нее плоской несмачиваемой подложкой. Ячейка была оборудована дозирующим устройством, с помощью которого капля выдавливалась через капилляр на подложку. Регистрация изображения капли (см. рис. 1) осуществлялась с помощью цифровой фотокамеры Nikon E 4500 с разрешением 4 млн. пикселей. Фотокамера соединена с компьютером для архивирования и обработки изображений.

При обработке изображения в методе лежащей капли потребовалось 120 итераций для достижения заданной точности относительной ошибки функционала ошибок (0.1%). Величина коэффициента поверхностного натяжения составила $\sigma = 0.0738$ Н/м, краевой угол – 87.79° .

Результаты обработки экспериментальных данных представлены на рис. 5.

Анализ погрешности показал, что основной и наиболее значимой погрешностью, оказывающей существенное влияние на точность определения коэффициента поверхностного натяжения, является экспериментальная погрешность определения формы капли (координат границы меридионального сечения капли жидкости). Погрешность обработки изображения составляет менее 0.2%.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленный в работе алгоритм и разработанный на его основе пакет программ позволяют

оперативно проводить обработку изображений, корректировку экспериментальных данных, вычисление теплофизических свойств жидкости с приемлемой точностью и могут быть использованы в статических экспресс-методах определения коэффициента поверхностного натяжения. Разработанный алгоритм может быть использован и в методе висящей капли.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Филиппов С.И., Арсентьев П.П., Яковлев В.В., Крашенинников М.Г. Физико-химические методы исследования металлургических процессов. М.: Металлургия, 1968. 551 с.
2. Понезжев М.Х., Созаева А.Б., Созаев В.А. Политермы углов смачивания индий-натриевыми расплавами стали марки 12Х18Н9Т // ТВТ. 2008. Т. 46. № 2. С. 310.
3. Алчагиров Б.Б., Афаунова Л.Х., Дышекова Ф.Ф. и др. Плотность и поверхностное натяжение жидкого лития при температуре плавления // ТВТ. 2009. Т. 47. № 2. С. 307.
4. Krylov A.S., Vvedensky A.V., Katsnelson A.M., Tugovikov A.E. Software Package for Determination of Surface Tension of Liquid Metals // J. Non-Cryst. Solids. 1993. V. 156–158. Part 2. P. 845.
5. Sethian J.A. Level Set Methods and Fast Marching Methods. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1999. 382 p.
6. Geer C.W. DIFSUB for Solution of Ordinary Differential Equation // Comm. ACM. 1971. V. 14. № 3. P. 193.
7. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980. 280 с.
8. Кухлинг Х. Справочник по физике. М.: Мир, 1985. 520 с.