МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2017 год, том 29, номер 9, стр. 77-89

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ГРАНИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДИНАМИКИ КОНТАКТИРУЮЩЕГО С ТВЕРДОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ПУЗЫРЬКА ПРИ МАЛЫХ ЧИСЛАХ РЕЙНОЛЬДСА

© *2017 г.* ***Ю.А. Питюк[1], Н.А. Гумеров[1,2], О.А. Абрамова[1], И.Ш. Ахатов[3]***

[1]Центр микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем, Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
[2]University of Maryland, Institute of Advanced Computer Study, College Park, MD, USA
[3]Центр Сколтеха по проектированию, производственным технологиям и материалам, Москва, Россия
pityukyulia@gmail.com, abramovacmndds@gmail.com, gumerov@umiacs.umd.edu, i.akhatov@skoltech.ru

Работа выполнена при финансовой поддержке Центра Сколтеха по проектированию, производственным технологиям и материалам, гранта РФФИ № 16-31-00029, гранта Президента РФ МК-3503.2017.8, Christian Doppler Research Association (Germany).

Исследуется динамика пузырька, находящегося в контакте с твердой поверхностью, под действием акустического поля при малых числах Рейнольдса. Предложен подход на основе метода граничных элементов (МГЭ) для течений Стокса, который особенно эффективен для численного решения задач в трехмерной постановке. Однако применение стандартного МГЭ при исследовании динамики пузырьков, содержащих сжимаемый газ, сталкивается с проблемой вырожденности алгебраической системы, для решения которой в работе используется дополнительное соотношение, основанное на принципе взаимности Лоренца. Динамика контактной линии описывается полуэмпирическим законом движения, который позволяет обойти известную проблему неинтегрируемости напряжений в движущейся тройной точке. Исследуется поведение пузырька, контактирующего с твердой поверхностью, с закрепленной или движущейся контактной линией. Разработанный метод может быть использован для детального изучения динамики пузырька при контакте с твердой стенкой с целью определения оптимальных технологических режимов и параметров очистки твердых поверхностей.

Ключевые слова: динамика пузырька, твердая поверхность, контактный угол, метод граничных элементов, течение Стокса.

BOUNDARY ELEMENT MODELING OF DYNAMICS OF A BUBBLE CONTACTING WITH A SOLID SURFACE AT LOW REYNOLDS NUMBERS

Yu.A. Pityuk[1], O.A. Abramova[1], N.A. Gumerov[1,2], I.Sh. Akhatov[3]

[1] Center for Micro and Nanoscale Dynamics of Dispersed Systems, Bashkir State University, Ufa, Russia
[2] University of Maryland, Institute of Advanced Computer Study, College Park, MD, USA
[3] Center for Design, Manufacturing & Materials, Skolkovo Institute of Science & Engineering (Skoltech), Moscow, Russia

In the present study the dynamics of surface attached acoustic driven bubble at low Reynolds numbers is considered. The approach is based on the boundary element method (BEM) for Stokes flows, which is especially effective for the numerical solution of problems in three-dimensional case. However computation of compressible bubbles dynamics caused some difficulties in formulation due to the degeneration of conventional BEM for Stokes equations. In the present approach an additional relation based on the Lorenz reciprocity principle is used to resolve the problem. To describe the contact line dynamics a semi-empirical law of motion is used. Such approach allows one to bypass a known issue of nonintegrability stresses in the moving triple point. The behavior of a surface attached bubble in the cases of a pinned or moving contact line is studied. The developed method can be used for detailed study of the bubble dynamics in the contact with a solid wall in order to determine the optimal conditions and parameters of surface cleaning processes.

Key words: bubble dynamics, solid surface, contact angle, boundary element method, Stokes flow.

1. Введение

В настоящее время производство полупроводниковых изделий быстро развивается. Характерной тенденцией современной микроэлектроники является повышение степени интеграции элементов на кристалле [1]. При производстве микроэлектронных изделий осуществляется прохождение полупроводниковых пластин по технологическому маршруту, в котором очистка поверхности микрочипа от различных загрязнений является важным этапом подготовки подложек к последующим технологическим операциям. Известно, что инородные частицы микронного размера, находящиеся в контакте с подложкой, могут быть отделены от нее под воздействием гидродинамических или поверхностных сил, которые связаны с динамикой пузырьков в потоке жидкости. Первый подход заключается в создании гидродинамических течений вдоль поверхности, генерируемых осциллирующими пузырьками, которые расположены на незначительном расстоянии от подложки. Второй подход связан с динамикой пузырька, находящегося в контакте с твердой поверхностью, где возникающие поверхностные силы могут превзойти силу притяжения между частицей и подложкой. Несмотря на важность исследования подобных явлений, особенно в полупроводниковой промышленности, на сегодняшний день существует небольшое количество экспериментальных и теоретических работ в этой области. Настоящая работа посвящена моделированию динамики пузырька, находящегося в контакте с подложкой.

В одной из ранних работ [2], посвященных исследованию динамики пузырька, контактирующего с твердой поверхностью, было обнаружено, что под действием акустического поля изменяется не только объем, но и форма пузырька. Показано, что пузырьки большего размера деформируются значительней. Л. Крам [3] экспериментально исследовал образование струи в периодически осциллирующем пузырьке, находящемся в контакте с твердой поверхностью. Наблюдения показали, что для формирования струи в таком пузырьке требуется значительно больше периодов колебаний по сравнению с пузырьком, расположенным на некотором расстоянии от стенки.

Одним из важных факторов при исследовании динамики пузырька, контактирующего с твердой поверхностью, является характер движения контактной линии и изменение контактного угла, которые тесно связаны друг с другом. Математическому модели-

рованию движения контактной линии посвящено большое число теоретических работ [4-10], где предложены различные подходы решения проблемы неинтегрируемой сингулярности напряжений в движущейся тройной точке. Для решения проблемы с сингулярностью напряжений на контактной линии в [11,12] рассматривалось условие проскальзывания между жидкостью и твердой поверхностью вблизи контактной линии. В этом случае можно рассматривать нулевое касательное напряжение на твердой поверхности вблизи контактной линии и условие прилипания на некотором расстоянии от нее [12], либо задавать касательные скорости на твердой поверхности в несколько раз больше или меньше касательных скоростей в жидкости, контактирующей с ней [11,12].

Другой подход устранения сингулярности в движущейся тройной точке предложен в работе [10], где рассматривалась динамика контактной линии при малых капиллярных числах и числах Рейнольдса. Представленная модель описывает движение свободной поверхности, возникновение градиентов поверхностного напряжения вблизи контактной линии и их влияние на динамику контактного угла и течения жидкости. Предложена аналитическая формула, описывающая динамику контактного угла в зависимости от скорости контактной линии и физических свойств контактирующих сред.

В отличие от теоретических подходов, указанных выше, для описания динамики контактной линии можно использовать полуэмпирический закон движения контактной линии, предложенный в [13], согласно которому скорость контактной линии v_c связана с динамическим контактным углом θ_c как

$$v_c = \frac{\gamma}{\xi}\left(\cos\theta_c - \cos\theta_L\right), \qquad (1)$$

где ξ – коэффициент трения, γ – коэффициент поверхностного натяжения, θ_L – равновесный (или лапласовский) контактный угол [14]. Такой подход позволяет обойти известную проблему неинтегрируемости напряжений в движущейся тройной точке, поскольку условие на контактной линии определяется явно.

Наиболее современные экспериментальные и теоретические исследования динамики осциллирующего пузырька с движущейся контактной линией представлены в [15-17], где также можно найти различные механизмы очистки поверхности от инородных частиц.

Несмотря на то, что существует множество работ, посвященных исследованию динамики пузырька вблизи твердой стенки и при контакте с ней, динамика пузырька в сильновязких жидкостях мало изучена. Для восполнения этого пробела в настоящей работе разработан численный аппарат на основе метода граничных элементов (МГЭ) для уравнений Стокса, дополненного условиями на контактной линии.

Основное преимущество МГЭ по сравнению с другими методами прямого численного моделирования, требующими дискретизации всей области течения (методы конечных разностей, контрольного объема, конечных элементов), заключается в том, что он требует дискретизации только границы области течения, что позволяет уменьшить эффективную размерность задачи на единицу и особенно актуально при решении трехмерных задач. Кроме того, МГЭ применим к случаю бесконечных областей и позволяет рассчитывать поле скоростей только в конкретных точках течения, не требуя искусственно-

го ограничения размера области и расчета течения во всей области. К недостаткам данного подхода можно отнести сложности при моделировании процессов при умеренных числах Рейнольдса (требующих решения нелинейной краевой задачи) и процессов связанных со сложным дроблением или коалесценцией пузырьков (сопровождаемых частым перестроением сетки в связи с изменением топологии рассматриваемых объектов). Ряд методов, например, метод контрольного объема, широко применяемый при моделировании многофазных систем, свободны от упомянутых недостатков, однако имеют свои проблемы, которые не присущи МГЭ. Выбор подходящего метода решения обычно определяется конкретной задачей.

Метод граничных элементов для течений Стокса представлен в [18] и успешно применялся для исследования динамики пузырьков [19-21] при различных профилях скорости на бесконечности. Однако моделирование динамики пузырьков, содержащих сжимаемый газ, при малых числах Рейнольдса стандартным МГЭ приводит к некоторым сложностям в формулировке из-за вырожденности гранично-интегральной формулировки для уравнений Стокса. В настоящей работе для замыкания гранично-интегральных уравнений используется принцип взаимности Лоренца, описанный авторами в [22,23]. Новым является дополнение метода описанной выше моделью движения контактной линии, позволяющее рассчитывать динамику пузырьков на твердой поверхностей в случае медленных течений. На основе такого подхода проведено численного моделирование динамики объема и контактного угла пузырька для случаев движущейся и закрепленной контактной линии.

2. Математическая модель

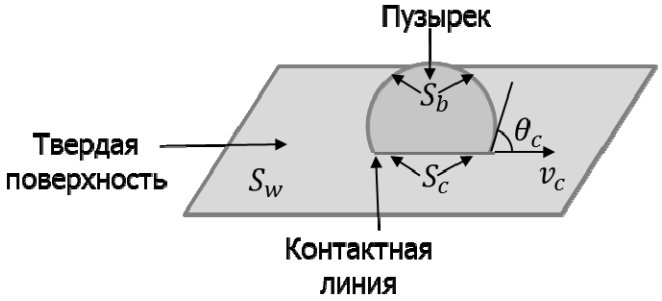

Рис.1. Пузырек, находящийся в контакте с твердой поверхностью.

Рассматривается динамика газового пузырька (g) в несжимаемой ньютоновской жидкости (l), находящегося в контакте с твердой поверхностью (рис.1). Предполагается, что динамической вязкостью и плотностью газа можно пренебречь по сравнению с соответствующими параметрами жидкости. В этом случае рассматриваются модели идеального газа и вязкой жидкости, тензоры напряжений $\boldsymbol{\sigma}$ которых определяются как

$$\boldsymbol{\sigma}_l = -p_l\mathbf{I} + \mu_l\left(\nabla\mathbf{v}_l + \left(\nabla\mathbf{v}_l\right)^T\right), \quad \boldsymbol{\sigma}_g = -p_g\mathbf{I}, \tag{2}$$

где p – давление, $\mathbf{v}$ – скорость, μ – динамическая вязкость, $\mathbf{I}$ – единичный тензор. Предполагается, что течение жидкости происходит при малых числах Рейнольдса и умеренных числах Струхаля и может быть описано уравнениями Стокса

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_l + \rho_l \mathbf{g} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{v}_l = 0, \tag{3}$$

где ρ – плотность, $\mathbf{g}$ – вектор ускорения свободного падения. Уравнения (3) удовлетворяют граничным условиям на бесконечности (∞) и на межфазной границе пузырек-жидкость S_b. Граничные условия для жидкости вдали от пузырька определяются как

$$\mathbf{v}_l\big|_{|\mathbf{x}|\to\infty} \to \mathbf{v}_{l\infty}, \quad p_l\big|_{|\mathbf{x}|\to\infty} \to p_{l\infty}, \quad \boldsymbol{\sigma}_l\big|_{|\mathbf{x}|\to\infty} \to \boldsymbol{\sigma}_{l\infty}, \tag{4}$$

где $\mathbf{x}$ – радиус-вектор рассматриваемой точки. На межфазной границе S_b выполняется следующее граничное условие:

$$\boldsymbol{\sigma}_l(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\sigma}_g(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = 2\gamma k(\mathbf{x}) \mathbf{n}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in S_b, \tag{5}$$

где $\mathbf{n}$ – нормаль к поверхности S_b, направленная в сторону жидкости, γ – коэффициент поверхностного натяжения, k – средняя кривизна поверхности пузырька.

Отметим, что гранично-интегральные уравнения, которые будут использоваться далее, определены для уравнений Стокса в форме

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mu\left(\nabla \mathbf{v} + \left(\nabla \mathbf{v}\right)^T\right), \tag{6}$$

с граничными условиями

$$\mathbf{v}\big|_{|\mathbf{x}|\to\infty} \to \mathbf{v}_\infty, \quad \boldsymbol{\sigma}\big|_{|\mathbf{x}|\to\infty} \to \boldsymbol{\sigma}_\infty. \tag{7}$$

Перепишем уравнения (3) и (4) в виде (6) и (7), введя следующие обозначения:

$$\begin{gathered} \mathbf{v} = \mathbf{v}_l, \quad p = p_l - p_\infty - p_{lh}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_l + (p_\infty + p_{lh})\mathbf{I}, \\ p_{lh} = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}, \quad \rho = \rho_l, \quad \mu = \mu_l, \end{gathered} \tag{8}$$

где $p_\infty + p_{lh}$ – гидростатическое давление.

Ввиду введенных обозначений (8) граничное условие (5) для $\boldsymbol{\sigma}$ примет вид

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = (p_\infty + p_{lh}) \mathbf{n}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\sigma}_g(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) + 2\gamma k(\mathbf{x}) \mathbf{n}(\mathbf{x}). \tag{9}$$

С учетом соотношений для тензоров напряжений (2) и гидростатического давления (8) граничное условие (9) на межфазной границе S_b можно записать

$$\begin{aligned} &\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) \mathbf{n}(\mathbf{x}), \\ &f(\mathbf{x}) = p_\infty - p_g + 2\gamma k(\mathbf{x}) + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}, \qquad \mathbf{x} \in S_b, \end{aligned} \tag{10}$$

где $\mathbf{f}$ – вектор нормальных напряжений.

В приближении Стокса в системах типа вода–воздух кинематическая вязкость жидкости меньше, чем температуропроводность газа. Таким образом, толщина теплового

пограничного слоя в газе больше толщины динамического пограничного слоя в жидкости, которая в свою очередь больше, чем размер пузырька. В этом случае давление в газе определяется по изотермическому закону

$$p_g(t) = p_{g0}\frac{V_0}{V(t)}, \qquad p_{g0} = p_0 + \frac{2\gamma}{a_0}, \tag{11}$$

где V_0 – начальный объем пузырька, p_{g0} – начальное давление в пузырьке, p_0 – начальное давление в жидкости, a_0 – начальный радиус пузырька (соответствует радиусу полного сферического пузырька), $V(t)$ – объем пузырька в момент времени t, $p_g(t)$ – давление в пузырьке в момент времени t.

Давление в жидкости p_∞ на бесконечности изменяется согласно действующему акустическому полю и в момент времени t определяется как

$$p_\infty(t) = p_0 + p_a(t), \qquad p_a(t) = P_a \sin(\omega t + \varphi), \tag{12}$$

где $p_a(t)$ – давление акустического поля в момент времени t, P_a – амплитуда акустического поля, ω – циклическая частота акустического поля, φ – сдвиг по фазе колебаний акустического поля.

Движение точек на поверхности пузырька S_b и контактной линии S_c описывается кинематическим уравнением

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in S_b \cup S_c. \tag{13}$$

На твердой стенке S_w задается условие прилипания $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0$.

Скорость движения контактной линии $\mathbf{v}_c$ определяется полуэмпирическим законом движения контактной линии (1), который можно записать как

$$\mathbf{v}_c = v_c \mathbf{n}_c, \qquad \tau_0 v_c = \frac{a_0}{2}\left(\cos\theta_c - \cos\theta_L\right), \tag{14}$$

где v_c – скорость движения контактной линии вдоль твердой поверхности, $\mathbf{n}_c$ – нормаль к контактной линии в плоскости твердой поверхности, τ_0 – время релаксации контактного угла, a_0 – начальный радиус пузырька (соответствует радиусу полного сферического пузырька). ξ из (1) и τ_0 из (14) соотносятся как $\tau_0 = \xi / P_0$, где $P_0 = 2\gamma / a_0$ – лапласовское давление. Время релаксации контактного угла τ_0 – это характерное время, за которое отклоненный от равновесного состояния контактный угол θ_c возвращается к своему равновесному значению θ_L (введено для удобства последующего анализа).

3. Гранично-интегральная формулировка

Уравнения Стокса (6) могут быть переписаны в интегральной форме

$$\left.\begin{array}{l}\mathbf{y}\notin S,\quad \mathbf{y}\notin V,\quad \mathbf{v}(\mathbf{y})-2\mathbf{v}_\infty(\mathbf{y})\\ \mathbf{y}\in S,\quad \dfrac{\Omega(\mathbf{y})}{4\pi}\mathbf{v}(\mathbf{y})-\mathbf{v}_\infty(\mathbf{y})\\ \mathbf{y}\in V,\quad 0\end{array}\right\}=-\int_S\mathbf{K}(\mathbf{y},\mathbf{x})\cdot\mathbf{v}(\mathbf{x})dS(\mathbf{x})-\frac{1}{\mu}\int_S\mathbf{G}(\mathbf{y},\mathbf{x})\cdot\mathbf{f}(\mathbf{x})dS(\mathbf{x}).\quad(15)$$

Здесь $\Omega(\mathbf{y})$ – телесный угол, под которым точка $\mathbf{y}$ «видит» жидкость. Он равен 2π для гладкой части поверхности S (поверхность твердой стенки S_w или поверхность пузырька S_b) и $4\theta_c$ для точек, принадлежащих контактной линии S_c (θ_c – соответствующий контактный угол), $\mathbf{v}_\infty$ – скорость, определенная на бесконечности, $\mathbf{G}$ и $\mathbf{K}$ – тензоры второго и третьего ранга, компоненты которых в прямоугольной декартовой системе координат имеют вид

$$\begin{array}{l}G_{ij}(\mathbf{y},\mathbf{x})=\dfrac{1}{8\pi}\left(\dfrac{\delta_{ij}}{r}+\dfrac{r_i r_j}{r^3}\right),\quad T_{ijk}(\mathbf{y},\mathbf{x})=-\dfrac{3}{4\pi}\dfrac{r_i r_j r_k}{r^5},\\ K_{ij}(\mathbf{y},\mathbf{x})=T_{ijk}(\mathbf{y},\mathbf{x})\cdot n_k(\mathbf{x}),\qquad r_i=y_i-x_i,\quad r=|\mathbf{y}-\mathbf{x}|\quad i,j,k=1,2,3,\end{array}\qquad(16)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера. Однако скорость, определяемая из уравнений (15), не зависит от перепада давления $p_\infty-p_g$ ввиду тождества $\int_S\mathbf{G}(\mathbf{y},\mathbf{x})\cdot\mathbf{ny}(\mathbf{x})dS(\mathbf{x})=0$. Влияние параметра $p_\infty-p_g$ на динамику пузырька можно учесть, применяя принцип взаимности Лоренца для пробного потенциального течения, создаваемого источником единичной интенсивности, который расположен внутри пузырька $\mathbf{x}_0$ [22,23]

$$\int_S v_i(\mathbf{x})s'_{ij}(\mathbf{x})n_j(\mathbf{x})dS(\mathbf{x})=\frac{1}{2\mu}\int_S f(\mathbf{x})v'_i(\mathbf{x})n_i(\mathbf{x})dS(\mathbf{x}),\quad s'_{ij}(\mathbf{x})=\frac{\partial v'_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}),\qquad(17)$$

$$\begin{array}{l}\varphi'(\mathbf{y})=\dfrac{1}{4\pi r},\quad v'_i(\mathbf{y})=-\dfrac{r_i}{4\pi r^3},\quad s'_{ij}(\mathbf{y})=-\dfrac{1}{4\pi}\left(\dfrac{\delta_{ij}}{r^3}-\dfrac{3r_i r_j}{r^5}\right),\\ r_i=y_i-x_{0i},\quad r=|\mathbf{y}-\mathbf{x}_0|,\quad i=1,2,3.\end{array}\qquad(18)$$

Поверхность пузырька дискретизируется треугольной сеткой. Используя метод коллокаций в вершинах треугольников, второе граничное уравнение (15) можно записать в дискретном виде

$$\frac{\Omega_j}{4\pi}\mathbf{v}_j+\sum_{i=1}^{N}\mathbf{I}_{ji}^{(\mathbf{K})}\cdot\mathbf{v}_i=-\frac{1}{\mu}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{I}_{ji}^{(\mathbf{G})}\cdot\mathbf{f}_i,\quad j=1,...,N,\qquad(19)$$

где N – количество вершин, $\mathbf{I}_{ji}^{(\mathbf{G})}$ и $\mathbf{I}_{ji}^{(\mathbf{K})}$ – элементы, соответствующие ядрам $\mathbf{G}$ и $\mathbf{K}$, которые определяются согласно квадратурным формулам.

Дискретный аналог (19) – система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) размером $3N\times3N$ относительно неизвестных компонент скорости на границе пузырька

S_b, вектора напряжений на контактной линии S_c и твердой стенке S_w. Однако полученная СЛАУ имеет неоднозначное решение и для замыкания системы необходимо добавить уравнение, полученное из принципа взаимности Лоренца (17). Таким образом, получаем переопределенную СЛАУ размером $(3N+1)\times 3N$, которая имеет вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & -\mathbf{B}_{12} & -\mathbf{B}_{13} \\ \mathbf{A}_{21} & -\mathbf{B}_{22} & -\mathbf{B}_{23} \\ \mathbf{A}_{31} & -\mathbf{B}_{32} & -\mathbf{B}_{33} \\ \mathbf{A}_{31} & -\mathbf{B}_{32} & -\mathbf{B}_{33} \\ \sim & \sim & \sim \\ \mathbf{A}_1 & -\mathbf{B}_2 & -\mathbf{B}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ \mathbf{f}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{11} & -\mathbf{A}_{12} & -\mathbf{A}_{13} \\ \mathbf{B}_{21} & -\mathbf{A}_{22} & -\mathbf{A}_{23} \\ \mathbf{B}_{31} & -\mathbf{A}_{32} & -\mathbf{A}_{33} \\ \sim & \sim & \sim \\ \mathbf{B}_1 & -\mathbf{A}_2 & -\mathbf{A}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_b \\ 0 \\ \mathbf{v}_c \end{pmatrix}, \tag{20}$$

где вектор нормальных напряжений на поверхности пузырька $\mathbf{f}_b$ СЛАУ (20) определяется согласно (10), скорость движения контактной линии $\mathbf{v}_c$ – из эмпирического закона (14), векторы $\tilde{\mathbf{A}}_m$ и $\tilde{\mathbf{B}}_m$ – из тождества (17), остальные блоки матриц – из соотношения (19). Индексы относятся: 1 – к поверхности пузырька S_b, 2 – к поверхности стенки S_w, 3 – к контактной линии S_c (см. рис.1).

Сингулярные интегралы определяются на основе интегральных тождеств и известных тестовых решений. Для вычисления средней кривизны поверхности в каждом узле сетки применяется метод параболической аппроксимации. На начальных временных шагах кинематическое уравнение (13) решается методом Рунге-Кутты 4-го порядка, а затем – методом Адамса-Башфорта-Моултона 6-го порядка (предиктор–корректор).

4. Результаты численного моделирования

Разработанный программный модуль для исследования динамики пузырька, содержащего сжимаемый газ, под действием акустического поля был протестирован и исследован на предмет сходимости и точности вычислений. Получено хорошее согласование с решением уравнения Рэлея-Плессета для одиночного сферического пузырька в предельном случае сильновязкой жидкости [22,23].

В настоящей работе представлены результаты расчетов динамики воздушного пузырька, расположенного на стекле в модельной водно-глицериновой смеси, со следующими физическими параметрами: $p_0 = P_a = 100$ кПа, $\omega/(2\pi) = 200$ кГц ($T = 5$ мкс), $\varphi=\pi$, $a_0 = 1$ мкм, $\mu = 0.01$ Па·с, ρ = 1000 кг/м^3, $\gamma = 0.05$ н/м, g = 9.8 м/с^2, что отвечает следующим безразмерным параметрам, характеризующим поведение пузырька в акустическом поле в соответствии с уравнением Рэлея-Плессета (см., например, [24])

$$\begin{aligned} &P_a/p_0 = 1, \quad 4\mu\omega/p_0 = 0.5, \quad 2\gamma/(p_0 a_0) = 1, \quad \rho g a_0/p_0 = 10^{-7}, \\ &(3p_0/\rho)^{1/2}/(\omega a_0) = 13.8. \end{aligned} \tag{21}$$

Первые три параметра порядка единицы свидетельствуют о существенной роли нелинейности, вязкости и поверхностного натяжения в динамике пузырька. Четвертый параметр показывает, что влиянием гравитации можно пренебречь. Отметим, что собст-

венная (резонансная) частота пузырька существенно выше, чем частота акустического поля, отношение которых характеризуется последним параметром. Характерные числа Рейнольдса (Re) и Струхаля (St) в этом случае могут быть оценены следующим образом. При указанных параметрах амплитуда колебаний радиуса пузырька порядка самого радиуса, что подтверждается расчетами изменения объема пузырька относительно начального (рис.3). Следовательно, характерная скорость течения, вызванного радиальным движением порядка $U \sim \omega a_0$. Принимая за характерный размер a_0 и за характерное время ω^{-1}, нетрудно видеть, что

$$\mathrm{Re} = \rho a_0 U / \mu \sim 0.1, \quad \mathrm{St} = \omega a_0 / U \sim 1, \tag{22}$$

что соответствует условию применимости приближения Стокса.

Начальная форма пузырька соответствует сферическому сегменту с радиусом соответствующего сферического пузырька a_0 и контактным углом θ_L. Период колебаний T выбран в качестве масштаба времени, a_0 – в качестве масштаба длины и начальный объем пузырька V_0 – в качестве масштаба объема. Соответственно, результаты расчетов представлены с использованием безразмерного времени, t/T, объема, V/V_0 и безразмерных координат, $x' = x / a_0$, $y' = y / a_0$, $z' = z / a_0$. Лапласовский контактный угол θ_L, соответствующий равновесному состоянию пузырька на поверхности, равен $96°$. Время релаксации контактного угла в расчетах варьировалось.

На рис.2 показана динамика пузырька с закрепленной контактной линией для одного периода колебаний акустического поля. Изменение объема пузырька при различной дискретизации поверхности показано на рис.3. Из рисунков видно, что пузырек расширяется и сжимается согласно действующему акустическому полю. Максимального объема пузырек достигает в момент времени $t = 0.25T$, соответствующий минимальному давлению акустического поля, и минимального объема пузырек достигает в момент времени $t = 0.75T$, соответствующий максимальному давлению акустического поля.

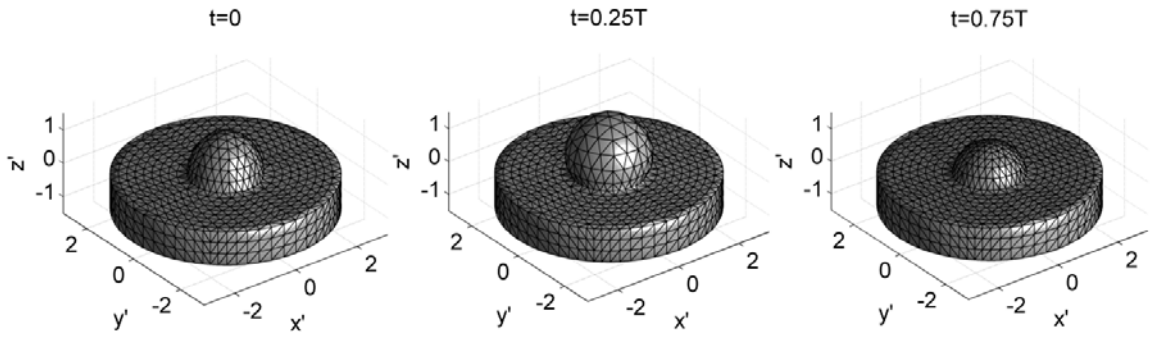

Рис.2. Динамика пузырька, контактирующего с твердой поверхностью, с закрепленной контактной линией.

Исследовалась динамика пузырька с движущейся контактной линией для времен релаксации контактного угла T, $0.1T$, $0.005T$. Изменение формы пузырька за один период колебаний акустического поля для времени релаксации контактного угла $\tau_0 = 0.005T$ представлено на рис.4.

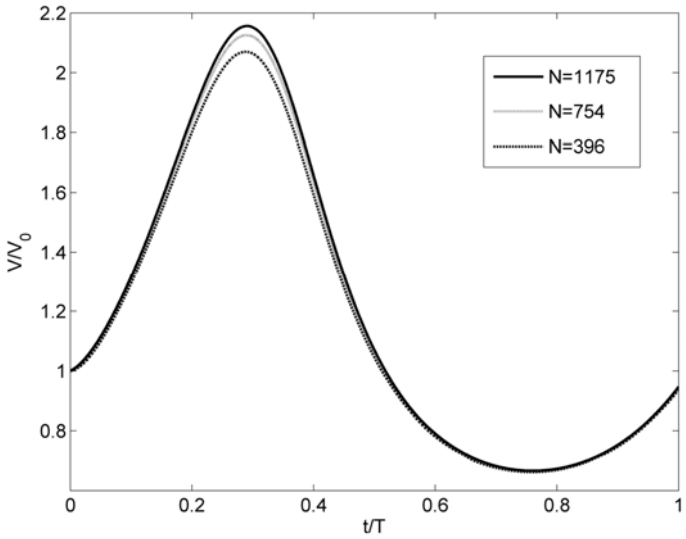

Рис.3. Динамика объема пузырька, контактирующего с твердой поверхностью, с закрепленной контактной линией.

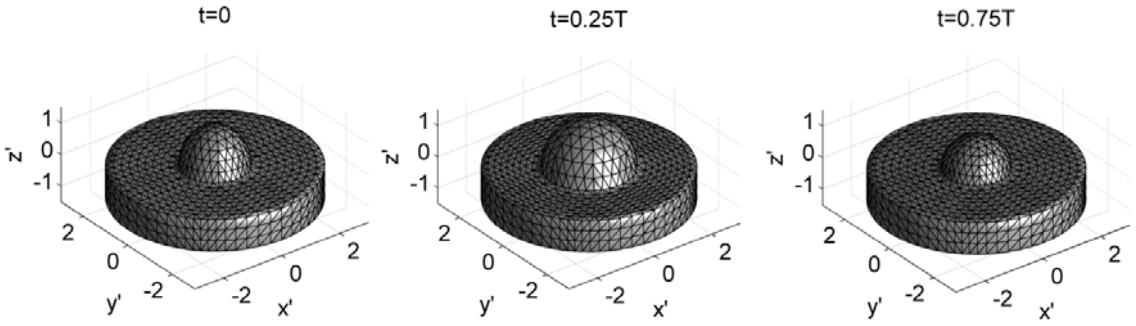

Рис.4. Динамика пузырька, контактирующего с твердой поверхностью, с движущейся контактной линией.

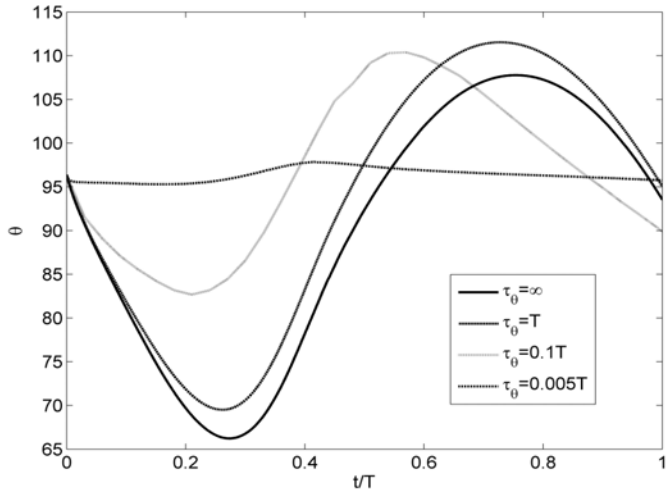

Рис.5. Сравнение динамики контактного угла пузырька, контактирующего с твердой поверхностью, с закрепленной и движущейся контактной линией.

На рис.5 представлена динамика контактного угла пузырька с закрепленной и движущейся контактной линией. Анализ изменения контактного угла показал, что его динамика существенно зависит от времени релаксации. При больших временах релаксации

контактная линия двигается очень медленно, и контактный угол уменьшается при расширении пузырька и увеличивается при сжатии, что и наблюдается в случае с закрепленной контактной линией, который соответствует $\tau_0 = \infty$. Однако при достаточно малых значениях τ_0 (например, $\tau_0 = 0.005T$) угол сохраняется за счет движения контактной линии.

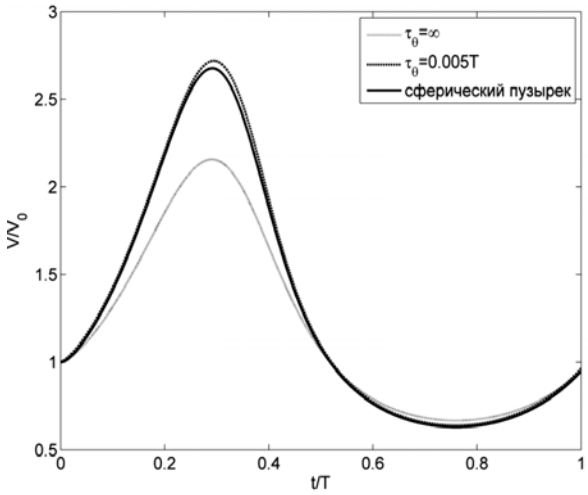

Рис.6. Сравнение динамики объема пузырька при контакте с твердой поверхностью для различных времен релаксации и при отсутствии контакта.

Результаты численного моделирования показали, что объем пузырька с движущейся контактной линией увеличивается при уменьшении давления акустического поля и уменьшается при увеличении давления акустического поля, как и в случае с закрепленной контактной линией. Однако изменение объема пузырьков существенно отличается. На рис.6 представлена динамика объема пузырька при контакте с поверхностью для двух предельных случаев с фиксированной контактной линией ($\tau_0 = \infty$) и со слабо меняющимся контактным углом ($\tau_0 = 0.005T$), а также динамика объема одиночного сферического пузырька в отсутствие стенки, радиус которого равен радиусу пузырька в форме полусферы. Из рисунка видно, что для случая с закрепленной контактной линией объем пузырька относительно начального увеличивается в 2.18 раза, а с движущейся контактной линией – в 2.53 раза. Изменение объема пузырька со слабо меняющимся контактным углом наиболее близко к изменению объема сферического пузырька того же радиуса, что связано с близостью равновесного контактного угла в рассматриваемом случае к 96° и свидетельствует о корректности работы алгоритма. Анализ изменения объема показал, что наличие и характер движения контактной линии оказывает существенное влияние на динамику объема пузырька.

Оценка погрешности вычисления объема пузырька (рис.3) для различной дискретизации поверхности пузырька и пластины показала, что относительная размытость оценки погрешности не превышает единицы [25]

$$\varepsilon = \frac{\max\limits_{t\in(0,T)} (V(N=1175) - V(N=754))}{\max\limits_{t\in(0,T)} (V(N=754) - V(N=396))} = 0.55 < 1, \qquad (23)$$

что говорит о хорошей сходимости численной схемы. Многопараметрический анализ показал, что изменение толщины стенки h не влияет на динамику объема и контактного угла, поэтому во всех расчетах $h = a_0$.

Заключение

На основе метода граничных элементов для течений Стокса и полуэмпирического закона движения контактной линии разработан подход для моделирования динамики пузырька, находящегося в контакте с твердой поверхностью. Предложенный метод позволяет исследовать поведение пузырька при контакте с твердой подложкой с закрепленной и движущейся контактной линией. Анализ результатов численного моделирования показывает, что динамика объема и контактного угла пузырька существенно зависит от времени релаксации контактного угла. Разработанный подход может быть использован для решения широкого класса задач, связанных с очисткой твердых поверхностей микропузырьками.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Е.П. Прокопьев, С.П. Тимошенков, В.В. Калугин*. Технология КНИ структур // Петербургский журнал электроники, 2000, т.1. с.8-25;
   E.P. Prokopev, S.P. Timoshenkov, V.V. Kalugin. Tekhnologiia KNI struktur // Peterburgskii zhurnal elektroniki, 2000, t.1. s.8-25.
2. *M. Kornfeld, L. Suvorov*. On the destructive action of cavitation // J. Appl. Phys., 1944, v.15, p.495.
3. *L. Crum*. Surface oscillations and jet development in pulsating bubbles // J. Phys., 1979, v.41, p.285-288.
4. *E.B.V. Dussan*. The moving contact line: the slip boundary condition // Journal of Fluid Mechanics, 1976, v.77(4), p.665-684.
5. *E.B.V. Dussan*. On the spreading of liquids on solid surfaces: static and dynamic contact lines // Ann. Rev. Fluid Mech., 1979, v.11, p.371-400.
6. *L.M. Hocking*. The damping of capillary-gravity waves at a rigid boundary // J. Fluid Mech., 1987, v.179, p.253-263.
7. *L.M. Hocking*. Waves produced by a vertically oscillating plate // J. Fluid Mech., 1987, v.179, p.267-281.
8. *L.M. Hocking*. The spreading of drops with intermolecular forces // Physics of Fluids, 1994, v. 6(10), p. 3224-3228.
9. *P.G.D. Gennes*. Wetting: statics and dynamics // Rev Mod Phys., 1985, v.57, p.827-863.
10. *Y.D. Shikhmurzaev*. Moving contact lines in liquid/liquid/solid systems // Journal of Fluid Mechanics, 1997, v.334, p.211-249.
11. *L.M. Hocking*. A moving fluid interface. The removal of the force singularity by a slip flow // J. Fluid Mech., 1977, v.79, p.209-229.
12. *C. Huh, S.G. Mason*. The steady movement of a liquid meniscus in a capillary tube // J. Fluid Mech., 1977, v.81, p.401-419.
13. *H.P. Greenspan*. On the motion of a small viscous droplet that wets a surface // Journal of Fluid Mechanics, 1978, v.84(1), p.125-143.
14. *T. Young*. An essay on the cohesion of fluids // Philos. Trans. R. Soc. London, 1805, v.95, p.65-87.
15. *R. Mettin, P.E. Frommhold, X. Xi, F. Cegla, H. Okorn-Schmidt, A. Lippert, F. Holsteyns*. Acoustic Bubbles: Control and Interaction with Particles Adhered to a Solid Substrate // Ultra Clean Processing of Semiconductor Surfaces XI - Solid State Phenomena, Switzerland, 2013, v.195, p.161-164.

16. *F. Prabowo, C.-D. Ohl*. Surface oscillation and jetting from surface attached acoustic driven bubbles // Ultrasonics Sonochemistry, 2011, v.18, p.431-435.
17. *S. Shklyaev, A.V. Straube*. Linear oscillations of a compressible hemispherical bubble on a solid substrate // Phys. Fluids, 2008, v.20, p.052102.
18. *C. Pozrikidis*. Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow. – New York: Cambridge University Press, 1992, 271 p.
19. *C. Pozrikidis*. Computation of the pressure inside bubbles and pores in Stokes flow // J. Fluid Mech., 2003, v.474, p.319-337.
20. *Y.J. Liu*. A new fast multipole boundary element method for solving 2-D Stokes flow problems based on a dual BIE formulation // Eng. Anal. Bound. Elem., 2008, v.32, p.139-151.
21. *H. Power*. The interaction of a deformable bubble with a rigid wall at small Reynolds number: a general approach via integral equations // Eng. Anal. Bound. Elem., 1997, v.19, p.291-297.
22. *Yu.A. Itkulova, O.A. Abramova, N.A. Gumerov*. Boundary element simulations of compressible bubble dynamics in Stokes flow // ASME 2013 International Mechanical Engineering Congress and Exposition. – American Society of Mechanical Engineers, 2013, no. IMECE2013-63200, p.V07BT08A010.
23. *О.А. Абрамова, И.Ш. Ахатов, Н.А. Гумеров, Ю.А. Иткулова (Питюк)*. Трехмерное численное исследование динамики сжимаемых пузырьков в стоксовом течении методом граничных элементов // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2014, т.54, №9, с.1537-1544;
англ. пер.: *O.A. Abramova, I.S. Akhatov, N.A. Gumerov, Yu.A. Itkulova (Pityuk)*. BEM-based numerical study of three-dimensional compressible bubble dynamics in a Stokes flow // Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2014, v.54, №9, p.1481-1488.
24. *Р.И. Нигматулин.* Динамика многофазных систем. – М.: Наука, 1987;
R.I. Nigmatulin. Dinamika mnogofaznykh sistem. – M.: Nauka, 1987.
25. *В.П. Житников., Н.М. Шерыхалина.* Моделирование течений весомой жидкости с применением методов многокомпонентного анализа. – Уфа: Научное издание, 2009, 336 с.
V.P. Zhitnikov., N.M. Sherykhalina. Modelirovanie techenii vesomoi zhidkosti s primeneniem metodov mnogokomponentnogo analiza. – Ufa: Nauchnoe izdanie, 2009, 336 s.

Поступила в редакцию 30.05.16