

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ КОНТАКТНЫХ УГЛОВ ПРИ
ДВИЖЕНИИ КАПЛИ ПО ТВЕРДОЙ ПОВЕРХНОСТИ МЕТОДОМ
РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА НА ГРАФИЧЕСКИХ
СУПЕРКОМПЬЮТЕРАХ**

А.Л. Куперштох

*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН,
630090, Новосибирск, Россия*

Введение. Для статической формы неподвижной капли, лежащей на наклонной твердой поверхности, справедливо уравнение Юнга – Лапласа [1,2]

$$2\sigma_{\text{ср}} = \Delta p_* + (\rho_{\text{ж}} - \rho_{\text{г}})(\mathbf{g} \cdot \mathbf{z} + \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}), \quad \mathbf{z} = n\mathbf{z}, \quad \mathbf{x} = \tau\mathbf{x},$$

где σ – поверхностное натяжение, $\rho_{\text{ж}}$ и $\rho_{\text{г}}$ плотности жидкости и газа, \mathbf{g} – вектор поля тяжести, \mathbf{n} – вектор нормали к поверхности, $\boldsymbol{\tau}$ – вектор касательный к поверхности, z и x – координаты вдоль нормали к поверхности и вниз по поверхности. Средняя кривизна поверхности $\kappa_{\text{ср}} = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$ определяется в каждой точке поверхности по функции $z(x, y)$. Константа Δp_* (“избыток” давления) неизвестна, поэтому замыкающим условием является уравнение для фиксированного объема капли V

$$\int_S z(x, y) dx dy = V,$$

где S – площадь контакта капли с твердой поверхностью.

Статический угол смачивания тесно связан с величиной сил взаимодействия молекул жидкости и твердой поверхности. Однако для трехмерной капли на наклонной поверхности приходится для контактного угла вводить некоторую функцию от азимутального угла в виде кубического полинома [2]. То есть, контактный угол зависит также от радиуса кривизны линии контакта. В целом ряде работ исследовалось явление динамического контактного угла [3-5], которое осложняется сингулярностью на контактной линии. В экспериментах было обнаружено, что при перемещении линии контакта по твердой поверхности наступающий угол контакта больше, чем отступающий. В общем случае контактные углы зависят от скорости перемещения контактной линии по поверхности.

Для нестационарного движения капли задачу приходится моделировать численно. При этом нужно описывать течения флюида с поверхностным натяжением на границе раздела жидкость–газ и взаимодействием с твердой поверхностью.

Метод решеточных уравнений Больцмана

Для такого рода задач хорошо подходит метод решеточных уравнений Больцмана (LBM), который широко используется для компьютерного моделирования двухфазных и многокомпонентных сред [6-8]. Для трехмерного варианта LBM используется дискретный конечный набор скоростей псевдочастиц (рис. 1). Тогда уравнение эволюции для функций распределения N_k можно записать в виде

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

где $\Omega_k = (N_k^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}) - N_k(\mathbf{x}, t)) / \tau$ – оператор столкновений в виде ВГК, τ – характерное

© А.Л. Куперштох, 2015

время релаксации к локальному равновесию. Для учета объемных сил (внутренних и внешних) используется метод точной разности (EDM) [9,10]

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

Гидродинамические переменные: плотность жидкости ρ и скорость \mathbf{u} в узле вычисляются в соответствии с формулами $\rho = \sum_{k=0}^b N_k$ и $\rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k N_k$.

Для описания уравнения состояния $P(\rho, T)$ использована модель псевдопотенциала $U = P(\rho, T) - \rho \theta$, в которой вводятся внутренние силы $\mathbf{F} = -\nabla U$, действующие на вещество в узле решетки. На стенке $z=0$ принимались условия непротекания и непроскальзывания. Кроме этого вводились силы взаимодействия между узлами жидкости и твердой поверхности, описывающие степень смачивания и величину контактных углов.

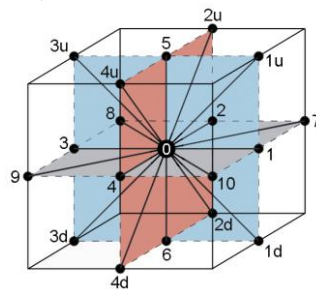


Рис. 1. Возможные вектора скоростей частиц \mathbf{c}_k для трехмерной LBM модели D3Q19.

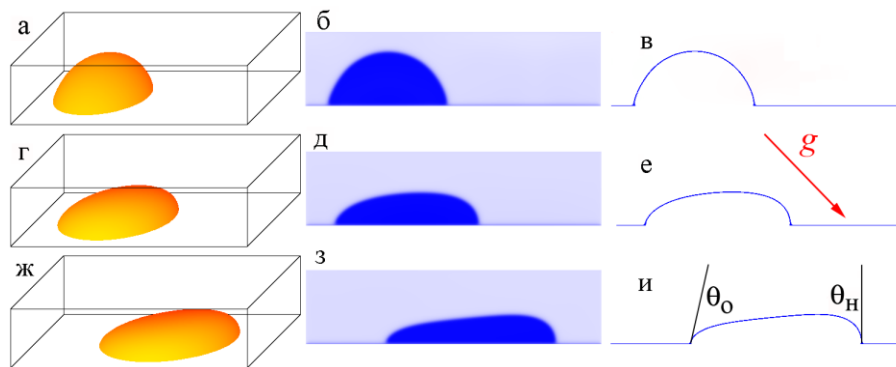


Рис. 2. Стеkanie капли по наклонной твердой поверхности. (а,г,ж) – капля в трехмерной расчетной области. (б,д,з) – распределение плотности жидкости и пара в центральном вертикальном сечении $x-z$. (в,е,и) – граница капли в центральном вертикальном сечении $x-z$. Расчетная сетка $512 \times 288 \times 128$. $t = 1400$ (а,б,в), 4400 (г,д,е), 10000 (ж,з,и).

Параллельные расчеты на GPU

Суть применения графических карт сводится к тому, что параллельные вычисления выполняются одновременно на всех ядрах графического процессора (GPU). Кроме того, внутренняя память GPU на порядок быстрее, чем оперативная память компьютера. Расчеты проводились на вычислительном кластере высокой производительности "Supermicro 4027GR" (5 модулей GTX Titan-Black). Каждый из модулей имеет 2880 потоковых процессоров (ядер) и 6 Гбайт быстрой внутренней памяти (пиковая производительность вычислений с двойной точностью составляет 1,5 ТФлопс).

Результаты компьютерного моделирования

На рис. 2 показан эффект динамического краевого угла, то есть, разные значения угла смачивания при движении линии контакта жидкой капли с твердой поверхностью в сторону газа и в сторону жидкости. Границы капли в центральном вертикальном сечении (рис. 2в,е,и) получены путем компьютерной обработки полей плотности вещества (рис. 2б,д,з). Наблюдается образование прекурсионной пленки жидкости в окрестности линии контакта свободной поверхности капли с твердой частично смачиваемой поверхностью. При использовании метода LBM проблема с сингулярностью не возникает.

На рис. 3 показаны результаты моделирования капли, стекающей по вертикальной смачиваемой стенке. На стенке принимались условия прилипания.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-01-00526 а.

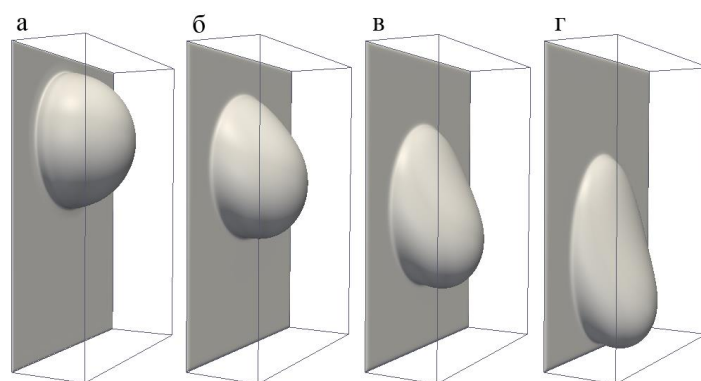


Рис. 3. Капля, стекающая по вертикальной смачиваемой стенке. Начальный радиус полусферической капли $R = 115h$. Расчетная сетка $512 \times 368 \times 128$. $t = 100$ (а), 5000 (б), 8000 (в), 10700 (г).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Pozrikidis C.** Fluid Dynamics: Theory, Computation, and Numerical Simulation, New York: Springer, 2009.
2. **Bhutani G., Muralidhar K., Khandekar S.** Determination of apparent contact angle and shape of a static pendant drop on a physically textured inclined surface // *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*. 2013. Vol. 1, No. 1. P. 29–49.
3. **Пухначев В.В., Солонников В.А.** К вопросу о динамическом краевом угле // *ПММ*. 1982. Т. 46, № 6. С. 961–971.
4. **Bertozzi A.L.** The mathematics of moving contact lines in thin liquid films // *Notices of the AMS*. 1998. Vol. 45, No. 6. P. 689–697.
5. **Воинов О.В.** Динамический краевой угол при смачивании поверхности жидкостью Ван-дер-Ваальса // *ПМТФ*. 2000. Т. 416 № 4. С. 101–105.
6. **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.
7. **Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I.** On equations of state in a lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications*. 2009. Vol. 58, No. 5. P. 965–974.
8. **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.
9. **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.
10. **Kupershtokh A.L.** Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // *Computers and Mathematics with Applications*, 2010, Vol. 59, No. 7. P. 2236–2245.