ПРИМЕНЕНИЕ СПЛАЙН-СХЕМЫ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О КАПЛЕ, СВИСАЮЩЕЙ С КРОМКИ КАПИЛЛЯРА

Ю. Н. Горбачева

В работе рассмотрено использование схемы сплайн-аппроксимации для численного решения осесимметричной задачи о равновесных формах и устойчивости свисающей капли, контур которой совпадает с кромкой цилиндрического капилляра в поле силы тяжести [1]. Основная сложность при численном анализе данной задачи связана с моделированием равновесных капиллярных поверхностей, при которых свободная поверхность опирается на линию излома твердой стенки.

Рассмотрим каплю объемом V, свисающую с кромки капилляра радиуса R_0. Примем радиус R_0 за единицу длины и сформулируем осесимметричную задачу о равновесной форме свободной поверхности жидкости, форма которой определяется равновесной линией меридиана, в безразмерных переменных. Для этого введем безразмерные цилиндрические координаты z и r так, чтобы ось z совпала с осью симметрии капилляра, и направим её противоположно вектору ускорения свободного падения $\mathbf{g}$. Выберем начало координат в центре основания капилляра. Обозначим через s безразмерную длину дуги искомой равновесной линии, изменяющуюся от $s=0$ в точке контакта меридиана с плоскостью $r=0$ до $s=L$ в точке контакта меридиана с кромкой капилляра в плоскости $z=0$. Форму равновесной линии меридиана будем описывать параметрическими функциями $r(s)$, $z(s)$, удовлетворяющими нелинейным дифференциальным уравнениям Юнга-Лапласа [1]:

$$z''=r'F, \quad r''=-z'F, \quad F=f+C, \quad f=-\mathrm{Bo}\,z-z'/r, \quad 0\le s\le L, \qquad (1)$$

где $'=d/ds$, $\mathrm{Bo}=\rho g R_0^2/\sigma$ – число Бонда, характеризующее отношение гравитационных сил к капиллярным, C – неопределенная константа, ρ – плотность жидкости, σ – коэффициент поверхностного натяжения.

Уравнения (1) дополняются краевыми условиями, образующимися из условий симметрии при $s=0$ и условий контакта с твердой стенкой при $s=L$: $r(0)=0$, $r'(0)=1$, $z'(0)=0$, $r(L)=1$, $z(L)=0$. Считая безразмерный объем капли U заданным, определяем его как объем тела вращения $U=-2\pi\int_0^L zrr'ds$ ($U=V/R_0^3$). Еще одним уравнением служит естественное условие $(r')^2+(z')^2=1$. Чтобы оно не нарушалось, его следует удовлетворить, хотя бы при одном значении s.

Следуя стратегии [2], сделаем замену переменных: $\bar{s} = s/L$, $\bar{z} = z/L$, $\bar{r} = r/L$, которая позволяет получить явную формулу для безразмерной длины L и проводить вычисления на фиксированном промежутке [0, 1].

Запишем задачу в новых переменных в матричной форме, опустив для удобства верхнюю черту в обозначениях переменных:

$$\begin{gathered}\boldsymbol{x}'' = F\boldsymbol{I}\boldsymbol{x}', \quad \boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{x}' = 1, \quad F = f + C, \quad 0 \le s \le 1, \\ \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} r(s) \\ z(s) \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{I} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}'(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}(1) = \begin{bmatrix} 1/L \\ 0 \end{bmatrix}, \\ r(0) = 0, \quad f = -BoL^2 z - z'/r, \quad L = \left[-U\Big/\left(2\pi\int_0^1 zrr'ds\right)\right]^{1/3},\end{gathered} \tag{2}$$

где C – неопределенная константа. Определяющими параметрами задачи являются число Bo и безразмерный объем U.

Построение схемы сплайнового типа основано на аппроксимации функций $r(s)$, $z(s)$ параметрическими кубическими сплайнами, удовлетворяющими уравнениям дифференциальной задачи (2) в узлах сетки $\{s_i = ih \mid i = \overline{0, N};\, h = 1/N\}$. Кубические сплайны, построенные по значениям функций $r(s)$, $z(s)$ в узлах сетки, можно записать в векторном виде [2]:

$$\boldsymbol{x}(s) \approx \mathbf{P}(s) = \left\{ \boldsymbol{m}_{i-1}\frac{(s_i - s)^3}{6h} + \boldsymbol{m}_i\frac{(s - s_{i-1})^3}{6h} + \left(\boldsymbol{x}_{i-1} - \frac{h^2}{6}\boldsymbol{m}_{i-1}\right)\frac{s_i - s}{h} + \right.$$

$$\left. + \left(\boldsymbol{x}_i - \frac{h^2}{6}\boldsymbol{m}_i\right)\frac{s - s_{i-1}}{h} \;\Big|\; s \in [s_{i-1}, s_i], \quad i = \overline{1, N} \right\},$$

где

$$\boldsymbol{P}(s) = \begin{bmatrix} P_1(s) \\ P_2(s) \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_i = \begin{bmatrix} r_i \\ z_i \end{bmatrix} = \boldsymbol{x}(s_i), \quad \boldsymbol{m}_i = \begin{bmatrix} m_{1,i} \\ m_{2,i} \end{bmatrix} = \boldsymbol{P}''(s_i).$$

Считаем, что скалярные сплайны $P_1(s)$ и $P_2(s)$ удовлетворяют первому из уравнений (2) во всех узлах сетки, т.е. справедливо равенство $\boldsymbol{m}_i = F_i\boldsymbol{I}\boldsymbol{P}'(s_i)$ при всех $i = \overline{0, N}$. Записывая это уравнение с учетом непрерывности первой производной сплайна, в каждом внутреннем узле $(i = \overline{1, N-1})$ получаем систему линейных уравнений относительно векторов $\boldsymbol{m}_{i-1}$, $\boldsymbol{m}_i$. Решая ее, находим:

$$\boldsymbol{m}_i = \frac{F_i}{h(c_i^2 + d_i^2)}\boldsymbol{U}_i\boldsymbol{I}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i-1}) = \frac{F_i}{h(c_{i+1}^2 + d_{i+1}^2)}\boldsymbol{V}_{i+1}\boldsymbol{I}(\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i), \tag{3}$$

где $\boldsymbol{U}_i = u_{1,i}\boldsymbol{E} + u_{2,i}\boldsymbol{I}$, $\boldsymbol{V}_i = v_{1,i}\boldsymbol{E} + v_{2,i}\boldsymbol{I}$ – невырожденные матрицы размерности 2×2, $c_i = 2/3(\rho_i - \rho_{i-1})$, $d_i = 1 + 1/3\rho_{i-1}\rho_i$, $\rho_i = 1/2hF_i$, $u_{1,i} = d_i - \rho_{i-1}c_i$, $u_{2,i} = c_i + \rho_{i-1}d_i$, $v_{1,i} = d_i + \rho_i c_i$, $v_{2,i} = c_i - \rho_i d_i$.

Ввиду (3) и граничных условий задачи (2), получаем систему

$$\begin{cases} \left(c_i^2 + d_i^2\right)\boldsymbol{V}_{i+1}(\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i) - \left(c_{i+1}^2 + d_{i+1}^2\right)\boldsymbol{U}_i(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i-1}) = 0, \\ i = \overline{1, N-1}, \quad r_0 = 0, \quad r_N = 1/L, \quad (z_1 - z_0)/h = \rho_0, \quad z_N = 0, \end{cases} \tag{4}$$

где $\boldsymbol{x}_i$ – неизвестные векторы. Краевое условие $z'(0) = 0$ аппроксимировали со вторым порядком, раскрывая неопределенность z_0/r_0 по правилу Лопиталя.

Умножая i-е уравнение системы (4) $(i = \overline{1, N-1})$ на $\left(c_{i+1}^2 + d_{i+1}^2\right)\boldsymbol{U}_i^T + \left(c_i^2 + d_i^2\right)\boldsymbol{V}_{i+1}^T$, получаем эквивалентную систему с трехдиагональной матрицей. Для решения полученной задачи используем итерационный процесс:

$$\begin{cases} A_i^n r_{i-1}^{n+1} - \left(A_i^n + B_i^n\right)r_i^{n+1} + B_i^n r_{i+1}^{n+1} = \Phi_{1,i}^n, \\ i = \overline{1, N-1}, \quad r_0^{n+1} = 0, \quad r_N^{n+1} = 1/L^n, \end{cases} \tag{5}$$

$$\begin{cases} A_i^n z_{i-1}^{n+1} - \left(A_i^n + B_i^n\right)z_i^{n+1} + B_i^n z_{i+1}^{n+1} = \Phi_{2,i}^n, \\ i = \overline{1, N-1}, \quad \left(z_1^{n+1} - z_0^{n+1}\right)/h = \rho_0^n, \quad z_N^{n+1} = 0, \end{cases} \tag{6}$$

где n – номер итерации. Значения коэффициентов A_i, B_i, $\boldsymbol{\Phi}_i$ берутся с предыдущей итерации:

$$A_i = \left(1 + \rho_{i-1}^2\right)\left(c_{i+1}^2 + d_{i+1}^2\right) + \psi_i^+ > 0, \quad B_i = \left(1 + \rho_{i+1}^2\right)\left(c_i^2 + d_i^2\right) + \psi_i^+ > 0,$$

$$\boldsymbol{\Phi}_i = \begin{bmatrix} \Phi_{1,i} \\ \Phi_{2,i} \end{bmatrix}, \; \boldsymbol{\Phi}_i = -\varphi_i \boldsymbol{I}(\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_{i-1}) - \psi_i^- \left(\boldsymbol{x}_{i-1} - 2\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{x}_{i+1}\right),$$

$$\varphi_i = u_{1,i}v_{2,i+1} - u_{2,i}v_{1,i+1}, \quad \psi_i = u_{1,i}v_{1,i+1} + u_{2,i}v_{2,i+1}, \quad \psi_i^{\pm} = 0.5\left(\psi_i \pm |\psi_i|\right).$$

Конструкция сплайн-схемы (5), (6) не обеспечивает выполнение естественного условия $\boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{x}' = 1$. Удовлетворить этому условию можно через вычисление константы C. Проинтегрируем равенство $\boldsymbol{x}' \cdot \boldsymbol{x}' = 1$ на интервале [0, 1] с учетом уравнения и граничных условий задачи (2). В результате приходим к следующей формуле для вычисления константы C:

$$C=\frac{P'_{1,N}/L-\int_0^1 f\left(P_2P_1'-P_1P_2'\right)ds-1}{\int_0^1\left(P_2P_1'-P_1P_2'\right)ds}.$$

Константу L и функцию f определяем с помощью сплайнов P_1, P_2, следуя (2):

$$L=\left[-U\Big/\left(2\pi\int_0^1 P_2P_1P_1'ds\right)\right]^{1/3},\quad f=-\mathrm{Bo}L^2P_2-P_2'/P_1.$$

Реализация схемы на каждой итерации сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений (5), (6) с трехдиагональной матрицей, при этом метод прогонки в этом случае абсолютно устойчив. Для стабилизации сходимости итераций итерационный метод (5), (6) может быть дополнен параметром релаксации. В результате вначале определяются новые итерационные приближения r_i^{n+1}, z_i^{n+1}, с помощью которых затем вычисляются L^{n+1}, f^{n+1}, C^{n+1} и $F^{n+1}=f^{n+1}+C^{n+1}$.

Расчеты осуществлялись на равномерной сетке с шагом 1/500 для различных чисел Бонда из диапазона $0<\mathrm{Bo}<14.6819$, т.к. при больших числах Бонда поверхностное натяжение не удержит жидкость на кромке капилляра и она сразу же прольется [1]. Известно, что существование равновесных состояний ограничено безразмерными значениями объема капли $U\le U_{cr}$, а при $U>U_{cr}$ наступает кризис равновесия – капля отрывается от кромки капилляра. Полагалось, что значение безразмерного объема превышает критическое, если при этом итерации расходились [2]. Критические значения U_{cr} уточнялись по методу дихотомии, пока их погрешность не становилась менее 10^{-4}. Сравнение с известными данными теории устойчивости равновесных капиллярных поверхностей [1] показало, что кризис вычислительного процесса происходит при тех же U_{cr}, что и разрушение равновесных форм. Таким образом, построенная схема сплайн-аппроксимации адекватно реагирует на кризис равновесного состояния и может использоваться не только для моделирования равновесных форм капиллярных поверхностей с нерегулярными условиями контакта, но и как метод исследования их устойчивости.

Литература

1. *Мышкис А. Д., Бабский В. Г., Жуков М. Ю., Копачевский Н. Д., Слобожанин Л. А., Тюпцов А. Д.* Методы решения задач гидромеханики для условий невесомости / Под ред. А. Д. Мышкиса. Киев «Наукова думка», 1992.
2. *Polevikov V. K.* Methods for numerical modeling of two-dimensional capillary surfaces // Computational Methods in Applied Mathematics. 2004. Vol. 4, № 1. P. 66–93.