

Научная статья
УДК 519.677

О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА ЗЕЙДЕЛЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПОВЕРХНОСТНОГО СМАЧИВАНИЯ

Андрей Юрьевич Вдовин¹, Полина Андреевна Белявина²

^{1,2} Уральский государственный лесотехнический университет,
Екатеринбург, Россия

¹ vdovinau@m.usfeu.ru

² polina_belyavina@mail.ru

Аннотация. Рассматривается процесс взаимодействия жидкости и твердой поверхности. Определение для дальнейших исследований формы капли по результатам экспериментов сводится к решению системы линейных уравнений. Для этого рассматривается и обосновывается применение метода Зейделя, одного из основных численных методов линейной алгебры.

Ключевые слова: смачивание, система линейных алгебраических уравнений, нормальная форма системы, метод Зейделя

Для цитирования: Вдовин А. Ю., Белявина П. А. О применении метода Зейделя для определения характеристик поверхностного смачивания // Цивилизационные переменны в России. 2024. С. 237–243.

Original article

ON THE APPLICATION OF THE SEIDEL METHOD TO DETERMINE THE CHARACTERISTICS OF SURFACE WETTING

Andrey Yu. Vdovin¹, Polina A. Belyavina²

^{1,2} Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia

¹ vdovinau@m.usfeu.ru

² polina_belyavina@mail.ru

Abstract. The process of interaction between a liquid and a solid surface is considered. Determining the shape of a droplet necessary for further research based on the results of experiments comes down to solving a system of linear equations. For this purpose, the use of the Seidel method, one of the main numerical methods of linear algebra, is considered and justified.

Keywords: wetting, system of linear algebraic equations, normal form of the system, Seidel method

For citation: Vdovin A. Yu., Belyavina P. A. On the application of the Seidel method to determine the characteristics of surface wetting // Civilizational changes in Russia. 2024. P. 237–243.

Смачивание – это поверхностное явление, заключающееся во взаимодействии жидкости с твердым или жидким телом при наличии одновременного контакта трех не смачивающихся фаз, одна из которых обычно газ (воздух). Степень смачивания количественно характеризуется краевым углом смачивания [1, 2].

Смачивание бывает двух видов:

– иммерсионное (вся поверхность твердого тела контактирует с жидкостью);

– контактное (состоит из трех фаз – твердая, жидкая, газообразная).

Смачивание зависит от соотношения между силами сцепления молекул жидкости с молекулами (или атомами) смачиваемого тела (адгезия) и силами взаимного сцепления молекул жидкости (когезия). Если жидкость контактирует с твердым телом, то возможны два результата:

1. Молекулы жидкости притягиваются друг к другу сильнее, чем к молекулам твердого тела. В результате силы притяжения между молекулами жидкости собирают ее в капельку. Так ведет себя ртуть на стекле, вода на парафине или «жирной» поверхности. В этом случае говорят, что жидкость не смачивает поверхность;

2. Молекулы жидкости притягиваются друг к другу слабее, чем к молекулам твердого тела. В результате жидкость стремится прижаться к поверхности, расплывается по ней. Так ведет себя ртуть на цинковой пластине, вода на чистом стекле или дереве. В этом случае говорят, что жидкость смачивает поверхность.

На рис. 1 показано смачивание твердой поверхности жидкостью.

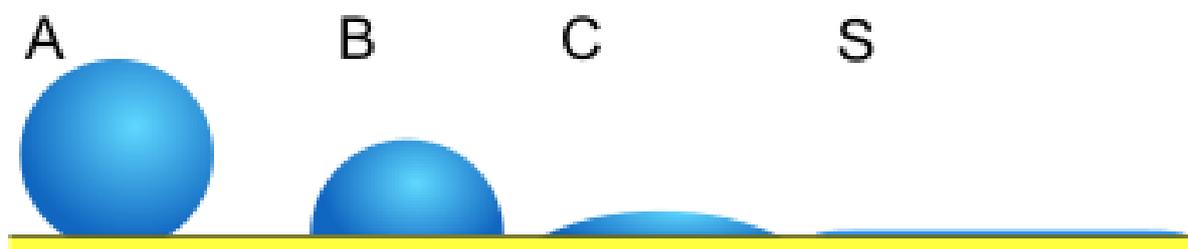


Рис. 1. Варианты смачивания:

A – очень слабое смачивание, капля практически шарообразная;

B и C – смачивание с большей площадью контакта
капли жидкости с твердой поверхностью;

S – полное смачивание, жидкость растекается по поверхности

Равновесное уравнение

$$\gamma_{sv} = \gamma_{sl} + \gamma_{lv} \cos \theta,$$

где γ_{lv} – равновесное состояние между жидкостью и газовой фазой;
 γ_{sv} – равновесное состояние между твердой фазой и газовой фазы;
 γ_{sl} – равновесное состояние между твердой и жидкой фазами (рис. 2).

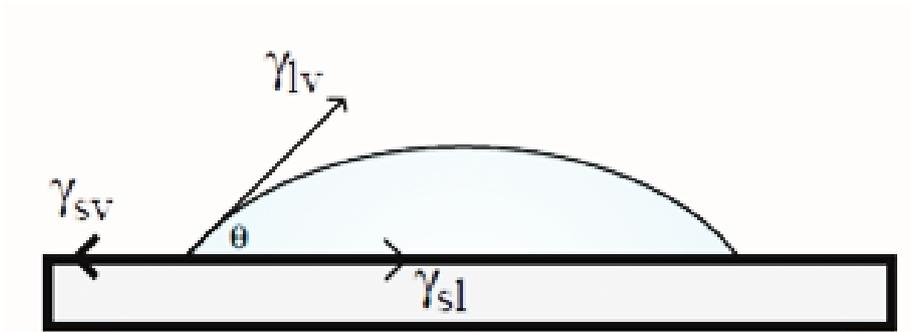


Рис. 2. Равновесное состояние

Фотографические наблюдения показывают, что верхняя граница капли представляет собой часть эллипсоидальной кривой (рис. 3).

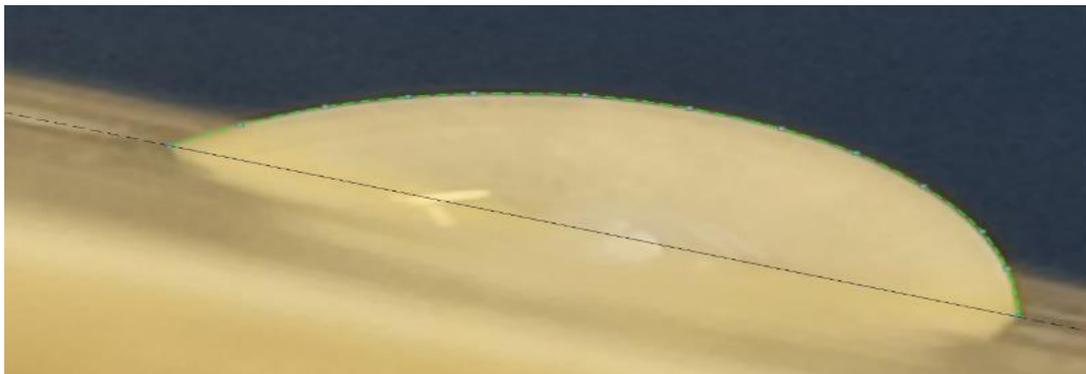


Рис. 3. Фотография объекта

Известно, что уравнение эллипса может быть представлено в виде:

$$\tilde{a}x^2 + \tilde{b}xy + \tilde{c}y^2 + \tilde{d}x + \tilde{e}y + \tilde{f} = 0,$$

где $\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}$ – числовые коэффициенты, требующие определения.

В действительности количество неизвестных коэффициентов можно сократить до 5. Поскольку произведение коэффициентов эллипса $\tilde{a}\tilde{c} > 0$, разделив на ненулевой коэффициент \tilde{c} , будем искать уравнение в виде $ax^2 + bxy + y^2 + cx + dy + e = 0$ или

$$ax^2 + bxy + cx + dy + e = -y^2. \quad (1)$$

Поставим задачу нахождения коэффициентов уравнения (1) по имеющимся семи приближенным измерениям точек на координатной плоскости. Если эти точки действительно принадлежат эллипсу, то подстановка их координат в (1) приводит к переопределенной системе из 7 линейных уравнений с пятью неизвестными.

$$ax_i^2 + bx_i y_i + cx_i + dy_i + e = -y_i^2; \quad i = 1, \dots, 7. \quad (2)$$

Возникает вопрос о совместности системы (2). В действительности может оказаться, что эллипса, которому принадлежат все экспериментальные точки, не существует. Поэтому трансформируем задачу к нахождению эллипса (рис. 4), который наиболее близко в некотором смысле расположен по отношению к этим точкам.

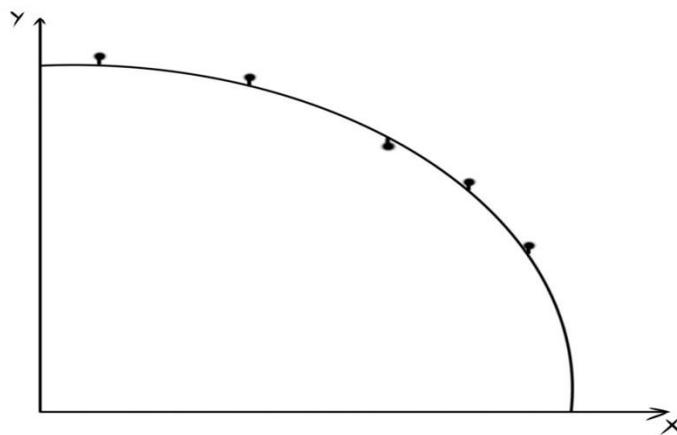


Рис. 4. Искомый эллипс и результаты наблюдений

Далее используются следующие обозначения: вектор-столбец $Z = (a; b; c; d; e)^T$, где индекс T означает транспонирование, A – матрица коэффициентов при неизвестных системы (2), B – столбец свободных членов.

Тогда (2) принимает следующий вид: $AZ = B$. В статистике принято в качестве коэффициентов искомого уравнения (в нашем случае эллипса) рассматривать те, которые минимизируют сумму квадратов разностей ординат

$$\sum_{i=1}^7 (y_i - \bar{y}_i)^2, \quad (3)$$

где \bar{y}_i – ордината точки этого уравнения с абсциссой x_i .

При этом $\sum_{i=1}^7 (y_i - \bar{y}_i)^2 = (B - AZ)^T (B - AZ)$. Таким образом, столбец Z минимизирует сумму (3). Следуя [3], рассмотрим дифференциал этой суммы:

$$d[(B - AZ)^T (B - AZ)] = -dZ^T A^T (B - AZ) - (B - AZ)^T A dZ = -2dZ^T A^T (B - AZ).$$

Поскольку в точке минимума (3) он равен нулю, то

$$A^T A Z = A^T B. \quad (4)$$

Полученная система называется нормальной по отношению к системе (2).

Станем получать приближение решения этой системы с помощью итерационного метода Зейделя. Известно, что нормальная система совместна и имеет единственное решение, если столбы матрицы A линейно независимы, то есть когда определитель матрицы $A^T A$ отличен от нуля. В этом случае гарантируется сходимость [4] численного метода Зейделя, примененного к системе (4). При этом (4) удобно представить в виде

$$A^T A Z = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ z_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \end{pmatrix} = A^T F,$$

где матрица $A^T A = (a_{ij})$, $1 \leq i, j \leq n$ невырожденная и имеет ненулевые диагональные элементы, т. е. $a_{ii} \neq 0$ для всех i .

В силу сделанных предположений неизвестное z_i из каждого ее i -го уравнения может быть выражено следующим образом:

$$\begin{cases} z_1 = \beta_{12}z_2 + \beta_{13}z_3 + \beta_{14}z_4 + \beta_{15}z_5 + c_1, \\ z_2 = \beta_{21}z_1 + \beta_{23}z_3 + \beta_{24}z_4 + \beta_{25}z_5 + c_2, \\ z_3 = \beta_{31}z_1 + \beta_{32}z_2 + \beta_{34}z_4 + \beta_{35}z_5 + c_3, \\ z_4 = \beta_{41}z_1 + \beta_{42}z_2 + \beta_{43}z_3 + \beta_{45}z_5 + c_4, \\ z_5 = \beta_{51}z_1 + \beta_{52}z_2 + \beta_{53}z_3 + \beta_{54}z_4 + c_5, \end{cases}$$

где $\beta_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{ii}}$; $c_i = \frac{f_i}{a_{ii}}$.

Далее, после выбора произвольного начального приближения z_i^0 расчетные формулы для последовательности приближений z_i^{k+1} строятся по правилу:

$$\begin{cases} z_1^{k+1} = \beta_{12}z_2^k + \beta_{13}z_3^k + \beta_{14}z_4^k + \beta_{15}z_5^k + c_1, \\ z_2^{k+1} = \beta_{21}z_1^{k+1} + \beta_{23}z_3^k + \beta_{24}z_4^k + \beta_{25}z_5^k + c_2, \\ z_3^{k+1} = \beta_{31}z_1^{k+1} + \beta_{32}z_2^{k+1} + \beta_{34}z_4^k + \beta_{35}z_5^k + c_3, \\ z_4^{k+1} = \beta_{41}z_1^{k+1} + \beta_{42}z_2^{k+1} + \beta_{43}z_3^{k+1} + \beta_{45}z_5^k + c_4, \\ z_5^{k+1} = \beta_{51}z_1^{k+1} + \beta_{52}z_2^{k+1} + \beta_{53}z_3^{k+1} + \beta_{54}z_4^{k+1} + c_5. \end{cases}$$

Таким образом, предложен и обоснован сходящийся численный алгоритм построения коэффициентов уравнения эллипса, который и будет приниматься за приближение искомого.

Пример. В таблице приведены результаты экспериментальных данных.

Данные эксперимента

X	Y
958,550680	899,772692
980,294336	949,319116
987,635576	996,514559
979,488541	1065,050619
954,381486	1118,134610
910,668098	1158,154889
862,948767	1169,903330

Согласно описанной процедуре, получено уравнение эллипса $0,4079x^2 - 0,840411xy + y^2 + 415,710089x - 1206,652985y + 227693,190995 = 0$.

На плоскости эллипс имеет вид как на рис. 5.

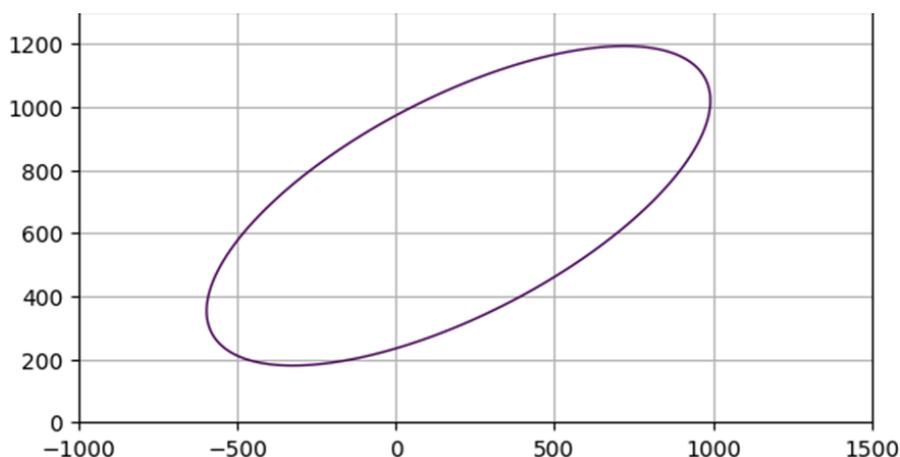


Рис. 5. График эллипса

Результаты моделирования эллипсоидальной формы границы капли хорошо аппроксимируют данные наблюдений, поэтому могут быть использованы в дальнейших аналитических исследованиях.

Список источников

1. Фролов Ю. Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы : учебник для вузов. М. : Альянс, 2014. 464 с.
2. Определение характеристик смачивания поверхности с использованием измерений угла смачивания / Т. Хухтамяки, С. Тянь, Дж. Т. Корхонен, Р. Х. А. Рас // Nature protocols. 2018. Т. 13, №. 7. С. 1521–1538.

3. Беклемишев Д. В. Дополнительные главы линейной алгебры : учебное пособие. 2-е изд., перераб. и доп. СПб. : Лань, 2008. 490 с.

4. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы : учебное пособие для вузов. М. : Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. 432 с.

References

1. Frolov Yu. G. Colloid chemistry course. Surface phenomena and disperse systems : a textbook for universities. M. : Alliance, 2014. 464 p.

2. Surface-wetting characterization using contact-angle measurements / T. Huhtamäki, X. Tian, Ju. T. Korhonen, R. H. A. Ras // Nature protocols. 2018. Vol. 13, №. 7. P. 1521–1538.

3. Beklemishev D. V. Additional chapters of linear algebra : textbook. 2th ed., revised and additional. St. Petersburg : Lan, 2008. 490 p.

4. Samarsky A. A., Gulin A. V. Numerical methods : textbook manual for universities. M. : Science. Ch. ed. physical-mat. lit., 1989. 432 p.