Научная статья
УДК 519.677

О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ЗНАЧЕНИЙ УГЛОВ СМАЧИВАНИЯ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЛАБОРАТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Светлана Сергеевна Рублева[1], Дарья Васильевна Буденкова[2]
[1, 2] Уральский государственный лесотехнический университет, Екатеринбург, Россия
[1] rublevass@m.usfeu.ru
[2] budenkova2345@mail.ru

Аннотация. Предлагается подход расчета углов смачивания в случае, если верхняя граница капли является эллипсоидальной кривой. Данное предположение приводит к задаче построения эллипса по имеющимся измерениям координат точек на границе капли, которая является некорректной, и расчету угловых коэффициентов секущей и касательных, проведенных в крайних точках.

Ключевые слова: угол смачивания, система линейных алгебраических уравнений, метод Зейделя

Для цитирования: Рублева С. С., Буденкова Д. В. О математическом моделировании значений углов смачивания по результатам лабораторного эксперимента// Цивилизационные перемены в России. 2024. С. 260–265.

Original article

ABOUT MATHEMATICAL MODELING OF ANGLESOF WETTING BASED ON THE RESULTS OF LABORATORY EXPERIMENT

Svetlana S. Rubleva[1], Daria V. Budenkova[2]
[1, 2] Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia
[1] rublevass@m.usfeu.ru
[2] budenkova2345@mail.ru

Abstract. An approach is proposed for calculating wetting angles in the case where the upper boundary of the drop is an ellipsoidal curve. This assumption leads to the problem of constructing an ellipse based on the available measurements of the coordinates of points on the boundary of the drop, which is incorrect, and calculating the angular coefficients of the secant and tangents taken at the extreme points.

Keywords: wetting angle, system of linear algebraic equations, Seidel method

For citation: Rubleva S. S., Budenkova D. V. About mathematical modeling of angles of wetting based on the results of laboratory experiment // Civilizational changes in Russia. 2024. P. 260–265.

Угол смачивания – один из ключевых параметров, характеризующих взаимодействие между поверхностью твердого тела и жидкостью. Этот показатель играет важную роль в различных областях науки и техники, таких как коллоидная химия, биология, медицина, а также в процессах поверхностного смачивания, адгезии и адсорбции. 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). При контакте жидкости с твердым телом возможны два эффекта. Первое – жидкость собирается в каплю за счет того, что молекулы жидкости притягиваются друг к другу сильнее, чем к молекулам твердого тела. Второе – жидкость расплывается по поверхности твердого тела вследствие слабого взаимодействия между молекулами жидкости в сравнении с взаимодействием с твердым телом. Мерой смачивания твердых тел жидкостью является краевой угол смачивания. Чем меньше угол, тем лучше смачивается поверхность. Необходимость определения характеристик смачивания обусловлено широким применением данного явления в технологических процессах и устройствах [1, 2].

Для практического решения задачи по нахождению углов смачивания нужно провести эксперимент, в ходе которого можно измерить углы контакта между жидкостью и поверхностью. Для этого необходимо составить уравнение поверхности капли (рис. 1).

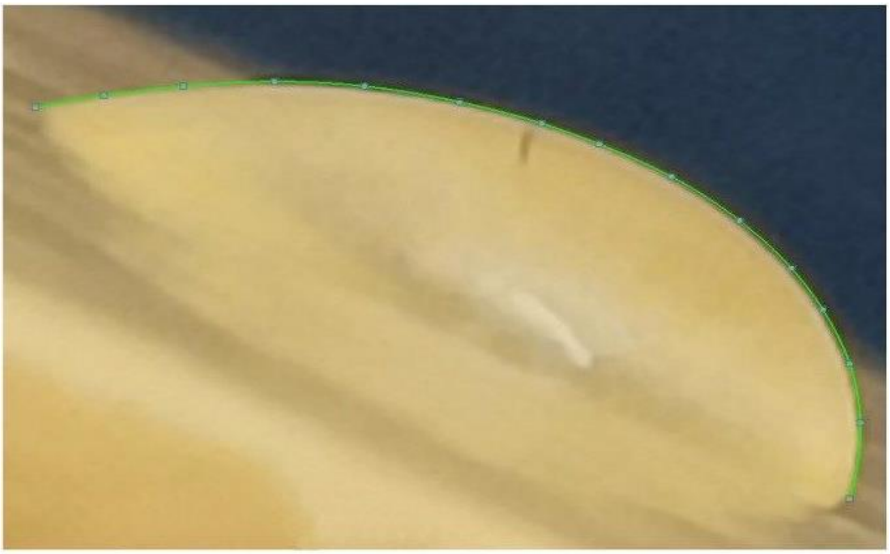

Рис. 1. Фотография капли

С помощью инструментальных средств могут быть получены координаты точек (табл. 1).

Таблица 1

Экспериментальные данные

Экспериментальные данные		
	X	*Y*
1	958,5506800	899,7726920
2	970,0559967	922,3233444
3	987,6355760	996,5145590
4	968,1086872	1094,2534765
5	910,6680982	1158,1548889
6	890,0201119	1166,0920062
7	862,9487671	1169,9033302

Капля имеет форму похожую на эллипс. Общее уравнение эллипса имеет вид $Ax^2 + Bxy + Cx + Dy + E = -y^2$, составим систему из 7 линейных уравнений по данным эксперимента

$$\begin{cases} 863675{,}5024A + 025661{,}9897B + 929{,}3414C + 1103{,}6439D + E = -1218029{,}8205; \\ 942714{,}4930A + 75667{,}0401B + 970{,}9349C + 1107{,}8674D + E = -1227370{,}0995; \\ 1032492{,}7428A + 1119524{,}3228B + 1016{,}1165C + 1101{,}7677D + E = -1213892{,}028; \\ 1102834{,}0036A + 1143844{,}6062B + 1050{,}1590C + 1089{,}2108D + E = -1186380{,}252; \\ 1176042{,}47A + 1156405{,}1604B + 1084{,}4549C + 1066{,}3469184D + E = -1137095{,}7504; \\ 1220397{,}8880A + 1148683{,}4861B + 1104{,}7162C + 1039{,}7996D + E = -1081183{,}247; \\ 1240754{,}4128A + 1120458{,}6571B + 1113{,}8916C + 1005{,}8956D + E = -1011826{,}0225. \end{cases}$$

Отметим, что данная система является переопределенной. Перейдем к соответствующей ей нормальной системе:

$$\begin{cases} 8328848501750{,}41A + 8469304012894{,}36B + 7930872031{,}42C + \\ +8107486661{,}43D + 7578911{,}51E = -8682931539525{,}85; \\ 8469304012894{,}36A + 8682931539525{,}85B + 8107486661{,}43C + \\ +8357599852{,}89D + 7790245{,}26E = -8976134715441{,}28; \\ 7930872031{,}42A + 8107486661{,}43B + 7578911{,}51C + \\ +7790245{,}26D + 7269{,}61E = -8357599852{,}89; \\ 8107486661{,}42A + 8357599852{,}89B + 7790245{,}26C + \\ +8075777{,}22D + 7514{,}53E = -8688223530{,}30; \\ 7578911{,}51A + 7790245{,}26B + 7269{,}61C + \\ +7514{,}53D + 7E = -8075777{,}22. \end{cases}$$

Отметим, что ее диагональные элементы и определитель отличны от нуля. Известно [3], что в этом случае нормальная система совместна и примененный к ней метод Зейделя сходится.

Применение метода Зейделя обычно реализуется в тех случаях, когда необходимо получить приближенные решения системы линейных уравнений с высокой точностью, причем точность полученного решения повышается с каждой итерацией. Преимуществами метода Зейделя являются относительная простота реализации и высокая эффективность при решении больших систем уравнений. Кроме того, свойства сходимости метода Зейделя для широкого класса матриц делают его выбор привлекательным для решения многих практических задач в науке, технике и других областях.

В табл. 2 приведены результаты реализации метода Зейделя на последних итерациях, номера которых обозначим *k*.

Тогда после выполнения этого числа итераций получим следующее приближенное значение.

Таблица 2

Приближенные значения неизвестных

Номер итерации	*A*	*C*	*D*	*E*	*F*
k = 62913058	0,54091	–0,10595	–930,37726	–1882,44242	1365608,43745
k = 62913059	0,54091	–0,10595	–930,37726	–1882,44243	1365608,44420

Построим часть эллипса, соответствующую этим значениям и сравним с результатами имеющихся наблюдений (рис. 2).

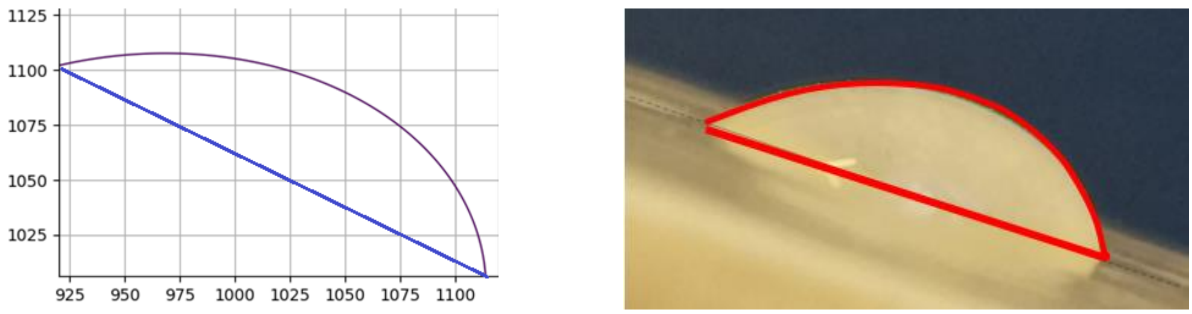

Рис. 2. Сравнение теоретических и экспериментальных данных

Приступим к нахождению углов смачивания по полученному уравнению (рис. 3).

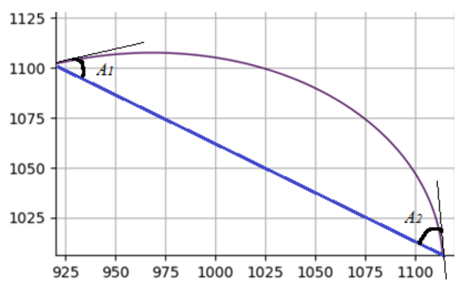

Рис. 3. Углы смачивания на найденном участке эллипса

Воспользуемся формулой

$$\mathrm{tg}(\alpha) = \frac{k_2 - k_1}{1 + k_1 k_2},$$

где k_1 – угловой коэффициент секущей $k_1 = \dfrac{y_п - y_л}{x_п - x_л}$,

$y_п$, $y_л$, $x_п$, $x_л$ – координаты крайних точек участка эллипса.

k_2 – угловой коэффициент касательной к эллипсу в точке с координатами (x; y) может быть определен из его уравнения следующим образом:

$$\begin{gathered} Ax^2 + By^2 + Cxy + Dx + Ey + F = 0 \\ 2Ax + 2yy' + C(y + xy') + D + Ey' = 0 \\ 2yy' + Cxy' + Ey' = -D - Cy - 2Ax. \end{gathered}$$

Тогда $y' = -\dfrac{D - Cy + 2Ax}{2y + Cx + E} = k_2.$

Результаты вычислений приведены в табл. 3.

Таблица 3

Результаты вычислений искомых углов

k_1	k_2	tg (A_i)	A_i
–0,529656914	0,185213582	0,792626923	A_1≈38,4°
–0,529656914	–14,83668545	–1,615089001	A_2≈58,23°

Таким образом, искомые углы смачивания определены. Результаты численного моделирования совпадают с результатами эксперимента. Использование метода Зейделя подтверждает его устойчивость, но на данном примере скорость сходимости не высока.

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 // Natureprotocols. 2018. Т. 13, №. 7. С. 1521–1538.

3. Вдовин А. Ю., Рублева С. С. Методические рекомендации для обучающихся в техническом вузе по преобразованию СЛАУ для решения методом Зейделя // Сборник статей VII Всероссийской (с международным участием) научно-практической конференции «Актуальные проблемы теории и практики обучения физико-математическим и техническим дисциплинам в современном образовательном пространстве». Курск, 2023. С 37–43.

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. Vdovin A. Yu., Rubleva S. S. Methodological recommendations for students at a technical university on transforming SLAEs for solving by the Seidel method // Collection of articles of the VII All-Russian (with international participation) scientific and practical conference “Current problems of the theory and practice of teaching physical, mathematical and technical disciplines in the modern educational space”. Kursk, 2023. P. 37–43.