УДК 681.2.:532.64

ПІДВИЩЕННЯ ТОЧНОСТІ РОЗРАХУНКУ ГЕОМЕТРИЧНИХ РОЗМІРІВ ГАЗОВОГО ПУХИРЦЯ В МОМЕНТ МАКСИМАЛЬНОГО ТИСКУ В НЬОМУ

I.C. Кісіль¹⁾, Ю.М. Кучірка²⁾

¹⁾ Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу, вул. Карпатська, 15, м. Івано-Франківськ, 76019, тел. (8-03422) 4-60-77

²⁾ Західна державна інспекція ядерної і радіаційної безпеки, офіс 103, вул. С. Бандери, 77, м. Івано-Франківськ, 76014, тел. (8-0342) 71-34-26

Проводится метрологический анализ математической модели определения геометрических размеров газового пузырька в момент максимального давления в нем. Предложено использование более точных алгоритмов решения систем дифференциальных уравнений, которые лежат в основе указанной модели. Это позволит повысить точность измерения величины поверхностного натяжения методом максимального давления в газовом пузырьке.

На сьогоднішній день існує значна кількість методів вимірювання поверхневого натягу (ПН) на границі поділу рідина-газ. При цьому критерії вибору конкретного методу базуються на тих особливостях сфери його застосування, в яких можна максимально ефективно використати той чи інший метод і мінімізувати його недоліки. До найбільш універсальних i популярних методів вимірювання ПН можна віднести і метод максимального тиску в газовому пухирці (MTTT) [1].

Математична модель (MM), що описує газовий пухирець в момент максимального тиску в ньому, базується на розв'язку такої системи безрозмірних диференціальних рівнянь капілярності, детальний опис яких наведений в роботі [2]:

$$\frac{d\varphi}{dl^*} = 2 + \beta z^* - \frac{\sin\varphi}{x^*};$$

$$\frac{dx^*}{dl^*} = \cos\varphi;$$

$$\frac{dz^*}{dl^*} = \sin\varphi,$$
(1)

Description of metrologycal analysis of mathematical model of determining geometrical sizes of gas bubble is conducted in the moment of offensive of maximal pressure in her. The use of more exact algorithms of decision of the systems of differential equalizations which lie in basis of the indicated model is offered. It will allow to promote exactness of measuring of size of superficial natyaga the method of maximal pressure in a gas bubble..

де ф - кут між дотичною до точки на поверхні пухирця і горизонтальною віссю; $\beta = R_0^2/a^2$ параметр, що визначає форму поверхні пухирця; R_0 - радіус кривизни пухирця в омбілічній точці; $a^2 = \sigma/(\Delta \rho g)$ - капілярна стала рідини; σ поверхневий натяг; Др - різниця густини рідини і газу; g - прискорення вільного падіння; l^* , x^* , *z*^{*}- відповідно безрозмірні довжина дуг поверхні, горизонтальна i вертикальна координата точки поверхні пухирця, приведені до радіусу кривизни R_0 . В роботі [2] розв'язок системи рівнянь капілярності (1) здійснювався методом Рунге-Кутта 4-го порядку із сталим кроком інтегрування ($dl^* = 10^{-3}$) в середовищі програмного математичного пакету MATLAB 7.1 за допомогою спеціально розробленої противагу пропонується програми. В алгоритму Рунге-Кутта використання 4-5 порядку (РК45) або Адамса-Бешфорта-Мілтона із змінним кроком інтегрування (АБМ) $(dl^* = 10^{-5})$ [3].

Використання будь-якого із вказаних методів у поєднанні із меншим змінним кроком інтегрування $(dl^* = 10^{-5})$ дає можливість

підвищити точність розв'язку системи рівнянь (1) і визначити допустиму похибку обчислення кожного з вихідних параметрів системи рівнянь (1).

Варто зазначити, що тривалість розв'язку системи рівнянь (1) $t_{posp.} \approx 220$ с за алгоритмом АБМ [4] і є приблизно в 2 рази більшою у порівнянні із тривалістю розв'язку цієї системи методом РК45 [5] ($t_{posp.} \approx 104$ с), проте точність першого алгоритму є вищою. Цю обставину проілюстровано на прикладі розрахунку геометричних розмірів газового пухирця при зміні ϕ від 0 до π (табл. 1).

Основними джерелами виникнення складових сумарної похибки при здійсненні розрахунку геометричних розмірів газового пухирця в момент максимального тиску в ньому є [2]:

1) похибка проведення обчислень на персональному комп'ютері (ПК) чисел з плаваючою крапкою;

2) похибка досягнення кутом φ значення $\pi/2$, оскільки встановлено [6], що при $\varphi = \pi/2$ момент максимального тиску у газовому пухирці не наступить;

3) похибка неспівпадіння « x^* координати» основної (x^*_{ocn}) і пробної поверхні (x^*_{npool}) в момент максимального тиску у газовому пухирці;

4) похибка інтегрування, спричинена «кінечністю» кроку інтегрування;

5) похибка від вибору значення параметру $d\beta$, який визначає різницю між основною і пробною поверхнею в момент максимального тиску у газовому пухирці.

Розглянемо кожну із складових детальніше.

Похибка здійснення обчислень чисел з плаваючою крапкою зумовлена наступними факторами:

- обмеженням апаратних ресурсів ПК (розрядність шини, об'єм пам'яті тощо);

- програмними особливостями операційної системи ПК;

- обмеженням математичного середовища, в якому відбувається процес обчислення.

У нашому випадку розв'язок системи диференціальних рівнянь (1) і пошук моменту максимального тиску у газовому пухирці відбувається в математичному пакеті Matlab 7.1 SP3 в середовищі 32-розрядної операційної системи Windows XP SP3 з встановленою точністю обчислень 2,2204 \times 10⁻¹⁶, тобто дійсне значення результату може відрізнятися від одержаного на дві одиниці в 16-му знаку числа з плаваючою точкою.

Як вже було сказано в роботі [2], пошук моменту настання максимального тиску у газовому пухирці відбувається після досягнення основною і пробною поверхнями кута $\varphi = \pi/2$. Отже точність досягнення обома поверхнями вказаного кута суттєво впливає на точність результату розв'язку системи рівнянь (1) для параметру β в діапазоні від 0,001 до 0,2.

Зважаючи на цю обставину, досягнення кутом φ значення $\pi/2$ відбувається з мінімально можливою похибкою $|\varphi - \pi/2| \le 2,2204 \times 10^{-16}$ рад.

Підбір безрозмірної « x^* координати» відбувається у відповідності до MM [2] основної та пробної поверхонь газових пухирців. Підібрана « x^* координати» представляє собою безрозмірний радіус отвору капіляру, на якому перебуває газовий пухирець. Отже похибка «неспівпадіння» вказаної координати обох поверхонь вносить певний вклад в сумарну похибку MM. З метою її мінімізації відбувається

Метод розв'язку системи рівнянь (1)	dl^*	$\frac{z^*}{x^*}$	$\Delta \left(\frac{z^*}{x^*}\right) = \frac{z^*_{PK45}}{x^*} - \frac{z^*_{ABM}}{x^*}$	$t_{\scriptscriptstyle posp}$, c
РК45	10 ⁻⁵	2,699069228321672	1.9096e-013	104
	10^{-4}	2,69906922832161	2.1760e-014	3,26
	10^{-3}	2,699069228321626	5.1471e-010	0,38
АБМ	10^{-5}	2,699069228321481		220
	10 -4	2,699069228321588	-	5,1
	10^{-3}	2,699069227806915		0,5

Таблиця 1 - Оцінка часу розрахунку і точності методів РК45 і АБМ

підбір « x^* координати» до моменту виконання нерівності $|x^*_{ocv.} - x^*_{noob.}| \le 2,2204 \times 10^{-16}$.

Похибка інтегрування спільною € похибкою всіх чисельних методів розв'язку будь-яких поставлених задач. Дана похибка мінімізується шляхом зменшення кроку інтегрування $(dl^* \rightarrow 0)$, проте це збільшує тривалість обчислення результатів кожної точки. Отже в залежності від наявних обчислювальних потужностей ПК, допустимої похибки результату та «розумної» тривалості обчислень необхідно вибрати оптимальний крок інтегрування.

Проаналізувавши розв'язок системи диференціальних рівнянь (1) перед вибором dl^* , слід зауважити, що із збільшенням параметру β довжина дуги l^* зменшується. Отже, необхідно врахувати, що значення dl^* , прийнятне для поверхні з малим β , може бути недостатньо оптимальним для поверхні з більшим значенням параметра β .

Оцінивши вказані критерії вибору кроку інтегрування, dl^* встановлено рівним 10⁻⁵. Вплив кроку dl^* проілюстровано на рис. 1

Для достовірного визначення моменту настання максимального тиску в газовому пухирці використовується основна і пробна поверхні з параметром β і $\beta + d\beta$ відповідно [2].

Рівняння для визначення тиску основної та пробної поверхні запишеться наступним чином [2]:

$$P^*_{_{max_{och.}}} = 2/\beta + z^*_{_{ocH}};$$
(2)

$$P_{max_{npo\delta}}^{*} = \frac{2}{\beta + d\beta} + z_{npo\delta} \cdot \sqrt{\frac{\beta + d\beta}{\beta}}.$$
 (3)

Отже в момент максимального тиску в основній поверхні повинна виконуватися нерівність:

$$P^*_{max_{och.}} - P^*_{max_{npob.}} > 0,$$
 (4)

або

$$\frac{2}{\beta} - \frac{2}{\beta + d\beta} > z_{npo\delta}^* \cdot \sqrt{\frac{\beta + d\beta}{\beta}} - z_{och.}^*$$
 (5)

Як бачимо із (5) величина параметру $d\beta$ має значний вплив на визначення моменту, при якому вважається, що тиск в основному газовому пухирці досяг максимального значення. Параметр $d\beta$ може бути встановлений як абсолютна величина, або як частка β , наприклад, $d\beta = k \cdot \beta$. Зміна β ускладнює вибір оптимального $d\beta$, який би задовольняв весь діапазон зміни β . Крім того, вибране значення $d\beta = const$ при зміні кроку інтегрування dl^* може також виявитися не найкращим. Вплив параметру $d\beta$ на безрозмірний максимальний тиск у газовому пухирці проілюстрований результатами в табл. 2.



Рисунок 1 – Вплив кроку інтегрування dl^{*} на результат розрахунку геометричних параметрів газового пухирця

З вищевказаного можна припустити, що оптимальним є встановлення $d\beta = k \cdot \beta$.

Розглянемо випадок, коли *d*β визначатимуть на основі виразу:

$$d\beta = k \cdot \beta . \tag{6}$$

Тоді (5) можна записати так:

$$\frac{2k}{\beta(1+k)} > z_{npo\delta.}^* \sqrt{1+k} - z_{och.}^* .$$
(7)

Проаналізувавши (7), можна зробити висновок, що при заданому параметрі β зменшення k веде до зменшення лівої і правої частин нерівності (6). Зменшення правої частини (7) при $k \rightarrow 0$ зумовлено тим, що коефіцієнт приведення [2] $\sqrt{1+k}$ при $z_{npo\delta.}^*$ прямує до одиниці. Момент максимального тиску в газовому пухирці при $k \rightarrow 0$ наступає

 $z_{npo\bar{0}}^* \sqrt{1+k} - z_{och}^*$. при меншій різниці Залежність геометричних розмірів газового пухирця від моменту визначення максимального тиску ілюструє рис. 2, звідки видно, що момент максимального тиску в результаті розрахунку при зменшенні k наступає при більших кутах ϕ , *z*^{*}_{осн}, максимальному тиску в координаті основній поверхні $P^*_{max_{och.}}$ та при меншому $x^*_{och.}$. Це викликано тим, що при зменшенні k зменшується різниця між основною і пробною поверхнями, по якій визначається момент настання максимального тиску (7). Тобто при відомій різниці $z_{npob.}^* \sqrt{1 + k - z_{och.}^*}$ параметр k встановлює допустиму різницю між Р* $P^*_{\max_{max_{mod}}}$. На основі аналізу рис. 2 можна дійти до наступних висновків:

зростання *P*^{*}_{тахоси.} на відрізку 0-1
 зумовлено вищевказаними факторами;

2) $P^*_{max_{beck}} = const$ на відрізку 1-2 викликане тим, що різниця між основною і додатковою поверхнями в момент максимального тиску в них є співрозмірною або меншою від кроку інтегрування dl^* обох поверхонь. Отже, на відрізку 1-2 точка основної поверхні, котра визначає момент максимального тиску, не залежить від зміни $d\beta$; 3) поведінка $P^*_{\text{мах}_{ocu.}}$ на відрізку 2-3 може бути пояснена наближенням параметру $d\beta$ до межі точності розв'язку системи диференціальних рівнянь (1) чисельними методами з використанням персонального комп'ютера. Останній, як вже було сказано, характеризується границею точності обчислень чисел з плаваючою крапкою.

Вищезазначені висновки можна вважати справедливими як для $d\beta = const$, так і для $d\beta = k \cdot \beta$.

Отже, оптимальним значенням $d\beta = k \cdot \beta \in$ те, при якому виконується нерівність:

$$z_{npo\delta}^* \sqrt{1+k} - z_{och.}^* \le dl^*.$$
 (8)

Враховуючи нерівності (7) та (8) і задавши, наприклад, таку умову настання моменту максимального тиску, як

$$z_{npo\delta_{.}}^{*}\sqrt{1+k}-z_{och_{.}}^{*}=\frac{dl^{*}}{2},$$
(9)

визначимо вираз для параметра k :

$$k = \frac{dl^*\beta}{4 - dl^*\beta}.$$
 (10)

$d\beta$	0,001	0,1	1	10
β	-	,		
10-1	2000,999602602740	20,963127091981	2,812666006927	0,734791502975
10 ⁻²	2000,999602602740	20,963127091981	2,878050391230	0,734791502975
10 ⁻³	2000,999602602740	20,963127091981	2,884916298470	0,734791502975
10 ⁻⁴	2000,999602602740	20,976126664338	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻⁵	2000,999602602740	20,985125018096	2,885895752110	0,734791502975
10-6	2000,999602602740	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10-7	2000,999602602740	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻⁸	2000,999602602740	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻⁹	2000,999602602740	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻¹⁰	2001,000602602580	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10-11	2001,000602602580	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻¹²	2001,000602602580	20,986124722085	2,884916298470	0,745676498983
10 ⁻¹³	2001,000602602580	20,986124722085	2,898594930349	0,761199583545
10-14	2001,000602602580	20,986124722085	2,998937235370	0,604732997055
10-15	2001,000602602580	20,990123257084	2,766710406609	0,590741513723

Таблиця 2 – Залежність $P^*_{max_{new}}$ від $d\beta$ ($d\beta = const$) при $dl^* = 10^{-3}$ для різних β

Отже, врахувавши (10), *d*β можна записати так:

$$d\beta = \frac{dl^*\beta^2}{4 - dl^*\beta},\tag{11}$$

де dl^* - мінімальне значення змінного кроку інтегрування, який може бути визначений на границях досліджуваного діапазону β .

На відміну від $d\beta = const$, використання параметру $d\beta = k \cdot \beta$ з коефіцієнтом k (10) дає можливість враховувати величину β та крок інтегрування dl^* в момент порівняння величин $P^*_{_{max_{och.}}}$ і $P^*_{_{max_{npob.}}}$ при визначенні моменту максимального тиску в основному газовому пухирці.

Врахувавши істотний вплив параметру $d\beta$

на визначення моменту настання максимального тиску в пухирці, було проведено перерахунок апроксимаційних поліноміальних функцій $R_0/a = f_1(r/a)$ та $z_0/a = f_2(r/a)$ [2].

Апроксимацію здійснено за допомогою додатку до програмного комплексу MatLab7.1 "Curve Fitting Tool". В результаті були отримані такі поліноміальні залежності 10-го порядку для $\beta = 0,001 \div 10$:

$$R_{o}/a = 0.017 \cdot (r/a)^{10} - 0.11 \cdot (r/a)^{9} + 0.27 \cdot (r/a)^{8} - 0.29 \cdot (r/a)^{7} + 0.13 \cdot (r/a)^{6} + 0.066 \cdot (r/a)^{5} - 0.068 \cdot (r/a)^{4} + 0.2 \cdot (r/a)^{3} - 0.0056 \cdot (r/a)^{2} + r/a - 1.1001 \cdot 10^{-5};$$
(12)

$$z_o/a = -0.027887 \cdot (r/a)^{10} + 0.23167 \cdot (r/a)^9 - 0.79424 \cdot (r/a)^8 + 1.4778 \cdot (r/a)^7 - 1.6598 \cdot (r/a)^6 + 1.1574 \cdot (r/a)^5 - 0.49826 \cdot (r/a)^4 + 0.14661 \cdot (r/a)^3 - 0.017918 \cdot (r/a)^2 + 1.0012 \cdot r/a - 2.6688 \cdot 10^{-5}.$$
(13)

β k	0,001	0,1	1	10
10 ⁻¹	2000,999602602740	20,963127091981	2,812666006927	0,731335908809
10^{-2}	2000,999602602740	20,963127091981	2,878050391230	0,734791502975
10^{-3}	2000,999602602740	20,976126664338	2,884916298470	0,734791502975
10 ⁻⁴	2000,999602602740	20,985125018096	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻⁵	2000,999602602740	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻⁶	2000,999602602740	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻⁷	2001,000602602580	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻⁸	2001,000602602580	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻⁹	2001,000602602580	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻¹⁰	2001,000602602580	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10-11	2001,000602602580	20,986124722085	2,885895752110	0,734791502975
10 ⁻¹²	2001,000602602580	20,986124722085	2,884916298470	0,734791502975
10 ⁻¹³	2001,000602602580	20,986124722085	2,900542827102	0,740726396296
10^{-14}	2001,000602602580	20,986124722085	3,044352711557	0,740726396296
10 ⁻¹⁵	2001,000602602580	20,963127091981	2,766710406609	0,591741510689

Таблиця 3 – Залежність $P^*_{max_{norm}}$ від зміни $_{\beta}$ при $dl^* = 10^{-3}$



Рисунок 2 – Залежність $P^*_{\text{max}_{och.}}$, $\varphi_{\text{max}_{och.}}$, $x_{\text{max}_{och.}}$, $z^*_{\text{mod}} \sqrt{1+k} - z^*_{och}$ від k при β =0,1 та dl =10-3

Причому середнє квадратичне відхилення залежностей (12) і (13) відповідно становлять $4,923 \times 10^{-5}$ і $2,541 \times 10^{-5}$ на всьому діапазоні зміни β від 0,001 до 10.

Таким чином, застосування точніших алгоритмів розв'язку системи диференціальних рівнянь (1), зменшення кроку інтегрування та правильний вибір коефіцієнта $d\beta$ дає можливість зменшити похибку розрахунку геометричних параметрів газового пухирця в момент максимального тиску в ньому і тим самим підвищити точність вимірювання поверхневого натягу рідин методом максимального тиску в газовому пухирці.

Література

1. Русанов А.И., Прохоров В.А. Межфазная тензометрия. – СПб.:Химия, 1994. – 400с.

2. Кісіль І.С., Кулиняк А.В., Кучірка Ю.М Удосконалена методика і прилад для вимірювання поверхневого натягу рідин методом максимального тиску в газовій бульбашці // Методи та прилади контролю якості, №17. – 2006. – С.47 – 52.

3. Ануфриев И.Е., Смирнов А.Б., Смирнова Е.Н. Matlab 7. – СПб.:БХВ-Петербург, 2005. – 1104с.

4. Shampine, L. F. and M. K. Gordon, Computer Solution of Ordinary Differential Equations: the Initial Value Problem, W. H. Freeman, San Francisco, 1975.

5. Dormand, J. R. and P. J. Prince, "A family of embedded Runge-Kutta formulae," J. Comp. Appl. Math., Vol. 6, 1980, PP 19 – 26.

6. Кісіль І.С. Визначення поверхневого натягу рідин на основі виміряного максимального тиску в газовому меніску // Методи та прилади контролю якості, №1. – 1997. – С.50 – 55.