Modelování proudění na rozhraní tří fází vznikajícím při částečném smáčení povrchu tekutinou

(On a Flow Modelling at a Triple-phase Interface Arising During Partial Wetting)

Jakub Adamec

Vedoucí práce: Ing. Tomáš Hyhlík, Ph.D.

Abstrakt

Studie se zabývá numerickým řešením proudění tekutiny ve 2D mikrooblasti, která vzniká při částečném smáčení povrchu tekutinou. Tato oblast má tvar zahnutého klínu, na jehož konci se nachází rozhraní tří fází (tzv. „gas-liquid-solid contact line“). Úloha je řešena metodou konečných prvků v programu Matlab. Pro zadané okrajové podmínky je zobrazeno výsledné pole rychlosti a tlaku.

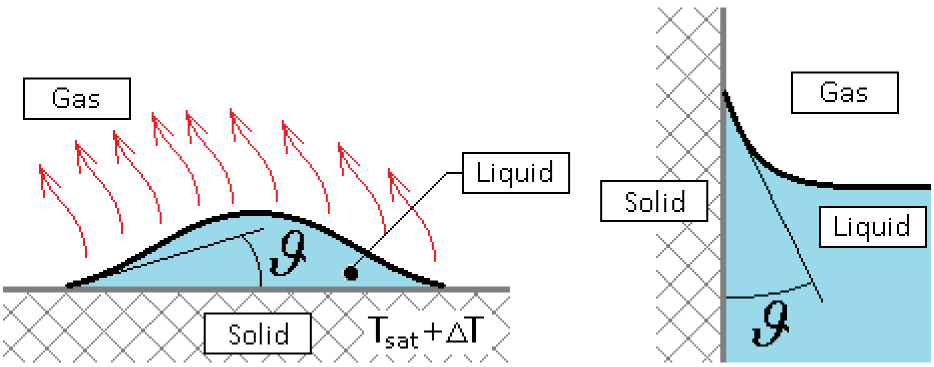
Klíčová slova

metoda konečných prvků, Stokesovo proudění, rozhraní tří fází, contact line, smáčení povrchu tekutinou

---

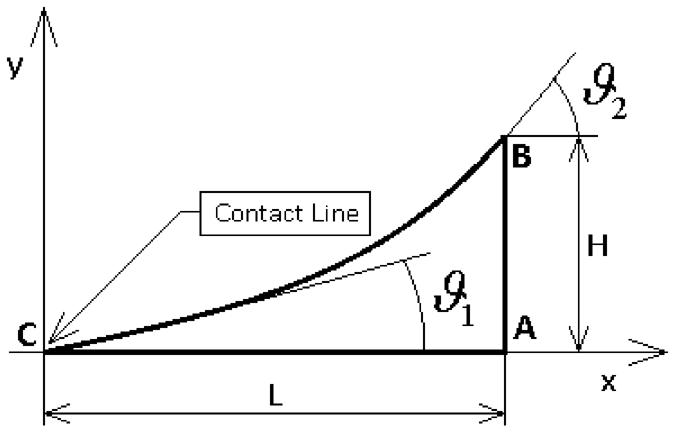
1. Úvod a rozbor úlohy

V tomto článku je ukázáno řešení proudění v mikrooblasti tvaru klínu metodou konečných prvků. V [1] je prezentován výzkum vypařování tekutiny nacházející se na substrátu do atmosféry. Vypařování je v tomto případě vyvoláno zahříváním substrátu nad saturační teplotu (*Obr. 1 vlevo*). Tento jev lze sledovat například při vypařování kapek smáčejících povrch topného tělesa. Při dobrém smáčení povrchu tekutinou (pro malý úhel ϑ) vzniká mikrooblast tvaru klínu na jejímž okraji se nachází tzv. “vapor-liquid-solid contact line”. Tato oblast vzniká také např. při smáčení stěny kapiláry (*Obr. 1 vpravo*). V obou případech nás zajímá tvar a zakřivení hranice mezi kaplinou a plynem. Na *Obr. 2* je zobrazen řešený mikroregion. Zakřivení ve směru paralelním s rozhraním plyn-tekutina je zanedbáno a úloha je tak definována jako dvourozměrná.



Obr. 1. *Vlevo: Ilustrace vypařování tekutiny při smáčení povrchu tekutinou*
Vpravo: Smáčení stěny kapiláry tekutinou

Cílem této práce je příprava CFD modelu, který by mohl být použit při řešení výše zmíněného problému.



Obr. 2. *Mikrooblast v okolí „contact line“*

Výpočetní oblast zobrazená na *Obr.* 2 je definována základními rozměry L, H a úhly ϑ_1 a ϑ_2. Úhly ϑ definují tvar rozhraní mezi body B a C. Délka oblasti je 10^{-6} *m*. Proudění bude definováno jako nestlačitelné, s uvažováním viskozity a bez uvažování setrvačných účinků (*Stokesovo proudění*). Prvním krokem řešení je diskretizace výpočtové oblasti na konečné prvky (elementy).

2. Stokesovo proudění a aplikace Galerkinovy metody

Rovnice popisující proudění tekutiny jsou rovnice kontinuity, rovnice bilance hybnosti a rovnice zachování energie. Doplňujícími rovnicemi pak jsou stavová rovnice a rovnice definující tepelný tok. Uvažujeme-li veličiny vyjadřující vlastnosti tekutiny jako konstantní, lze řešit energetickou rovnici nezávisle na rovnicích kontinuity a bilance hybnosti. Dále, uvažujeme-li proudění pro do značné míry malá *Re*, může být v rovnici bilance hybnosti zanedbán člen zahrnující setrvačné účinky. Získáme tak *Stokesovo rovnice* popisující plíživé proudění

$$-\nabla p_{\mathrm{MOD}} + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = \mathbf{0} \tag{1}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{2}$$

Zde $p_{\mathrm{MOD}} = p - \rho \mathbf{q} \cdot \mathbf{x}$ je tzv. modifikovaný tlak zahrnující vliv gravitace. Rozdělme nyní oblast proudění *D* ohraničenou křivkou (sadou křivek) C na konečné prvky tvořící výpočetní síť. Pole tlaku a rychlosti jsou aproximována dvěma různými sadami tvarových funkcí

$$\mathbf{u} = \sum_{j=1}^{N_G^u} \mathbf{u}_j \phi_j^u \qquad \text{a} \qquad p = \sum_{j=1}^{N_G^p} p_j \phi_j^p \ . \tag{3}$$

$\mathbf{u}_j$ jsou odpovídající uzlové hodnoty rychlosti a p_j odpovídající hodnoty tlaku v uzlech. Pro odvození konečně prvkových rovnic je použita standardní *Galerkinova metoda* (ang. *Galerkin projection*). Rovnici bilance hybnosti promítneme na tvarové funkce pro rychlost

$$\iint_D \phi_i^u \left(-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}\right) \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \mathbf{0}, \text{ pro } i = 1,\ 2,\ \dots,\ N_G^u. \tag{4}$$

Dále promítneme rovnici kontinuity na tvarové funkce pro tlak

$$\iint_D \phi_i^p \left(\nabla \cdot \mathbf{u}\right) \mathrm{d}x\mathrm{d}y = 0, \text{ pro } i = 1,\ 2,\ \dots,\ N_G^p. \tag{5}$$

Laplaceho operátor v (4) převedeme dle pravidla pro derivaci součinu na výraz obsahující pouze první derivace, a ten dále upravíme pomocí Gaussovo-Ostrogradského věty. Výsledkem je

$$\iint_D \phi_i^u \left(\nabla^2 \mathbf{u}\right) \mathrm{d}x\mathrm{d}y = -\oint_C \phi_i^u \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \mathrm{d}l - \iint_D \nabla \phi_i^u \cdot \nabla \mathbf{u} \ \mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{6}$$

Podobně upravíme člen s tlakem a získáme

$$\iint_D \phi_i^u \nabla p \mathrm{d}x\mathrm{d}y = -\oint_C \phi_i^u p\mathbf{n}\mathrm{d}l - \iint_D \nabla\phi_i^u p\ \mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{7}$$

Aplikací operátoru nabla na (3) získáme

$$\nabla\mathbf{u} = \sum_{j=1}^{N_G^u}\left(\nabla\phi_j^u\right)\mathbf{u}_j \tag{8}$$

Substitucí výrazů (6), (7) a (8) do (4) získáme

$$\begin{gathered}\sum_{j=1}^{N_G^p} p_j \oint_C \phi_i^u\phi_j^p \mathbf{n}\mathrm{d}l - \mu\sum_{j=1}^{N_G^u}\mathbf{u}_j\oint_C \phi_i^u \mathbf{n}\cdot\nabla\phi_j^u \mathrm{d}l + \ldots \\ \ldots + \sum_{j=1}^{N_G^p} p_j \iint_D \left(\nabla\phi_i^u\right)\phi_j^p \mathrm{d}x\mathrm{d}y - \mu\sum_{j=1}^{N_G^u}\mathbf{u}_j\iint_D \nabla\phi_i^u\cdot\nabla\phi_i^u \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \mathbf{0}\end{gathered} \tag{9}$$

Obdobně upravíme rovnici kontinuity do výsledného tvaru

$$\sum_{j=1}^{N_G^u}\mathbf{u}_j\cdot\iint_D \phi_i^p\nabla\phi_j^u \mathrm{d}x\mathrm{d}y = 0 \tag{10}$$

Rovnice (9) a (10) lze zapsat v kompaktním tvaru jako

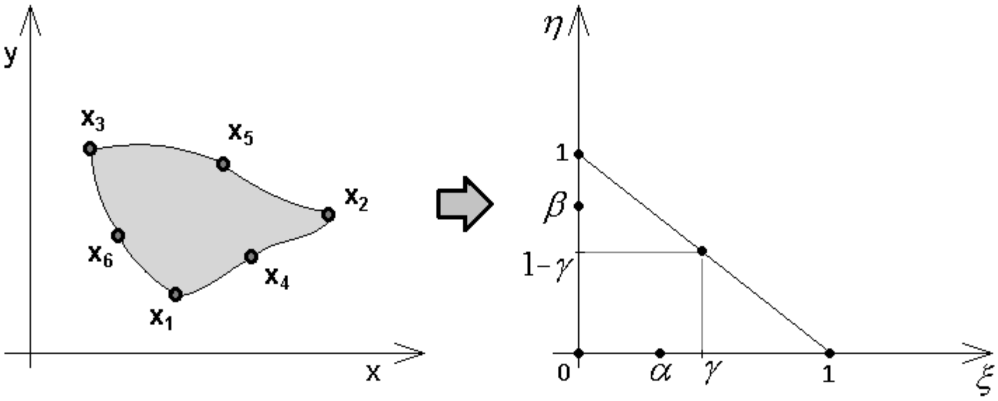
$$\sum_{j=1}^{N_G^p}\mathbf{Q}_{ij}p_j - \mu\sum_{j=1}^{N_G^u}R_{ij}\mathbf{u}_j + \sum_{j=1}^{N_G^p}\mathbf{D}_{ji}p_j - \mu\sum_{j=1}^{N_G^u}D_{ij}^u\mathbf{u}_j = \mathbf{0} \tag{11}$$

$$\sum_{j=1}^{N_G^u}\mathbf{D}_{ij}\cdot\mathbf{u}_j = 0 \tag{12}$$

Tyto rovnice lze zapsat jako lineární systém a řešit pro zadané okrajové podmínky numericky.

3. 6-ti uzlový trojúhelníkový element a integrál nad elementem

Výpočtová síť bude tvořena šestiuzlovými trojúhelníkovými elementy. Obecný trojúhelník tvořený body $\mathbf{x}_1$ až $\mathbf{x}_6$ ve skutečné rovině xy je mapován na rovnoramenný trojúhelník v parametrické rovině $\xi\eta$ (viz. *Obr. 3*).



Obr. 3. *Mapování trojúhelínového elementu z roviny xy do roviny ξη*

Mapování z roviny xy do roviny $\xi\eta$ je zprostředkováno funkcí

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{6}\mathbf{x}_i^E\psi_i\left(\xi,\eta\right) \tag{13}$$

Na bázové funkce $\psi_i(\xi, \eta)$ je kladen požadavek, aby $\psi_i = 1$ na i-tém uzlu elementu a $\psi_j = 0$ na ostatních pěti uzlech, tj.

$$\psi_i\left(\xi_j,\eta_j\right) = \delta_{ij}\ ,\quad i,j = 1,\ 2,\ \ldots,6 \tag{14}$$

Bázové funkce ψ_i hledáme ve tvaru

$$\psi_i(\xi,\eta) = a_i + b_i\xi + c_i\eta + d_i\xi^2 + e_i\xi\eta + f_i\eta^2 \tag{15}$$

Koeficienty $a_i - f_i$ lze získat z podmínek $(\xi_1, \eta_1) = (0, 0)$, $(\xi_2, \eta_2) = (1, 0)$, … , $(\xi_6, \eta_6) = (0, \beta)$. Integrál nějaké funkce $f(x, y)$ nad trojúhelníkem v rovině xy lze poté spočítat jednoduše v parametrické rovině $\xi\eta$ jako

$$\iint f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \iint f(\xi,\eta)\,\mathrm{h_S}\,\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta \tag{16}$$

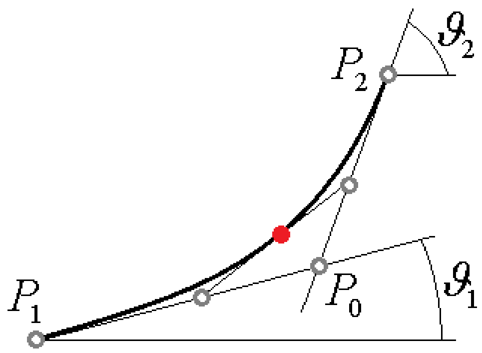
kde koeficient

$$h_S \equiv \det(\mathbf{J}) \tag{17}$$

Jakobián z roviny xy do parametrické roviny $\xi\eta$ je

$$\mathbf{J} \equiv \begin{bmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial \xi} & \dfrac{\partial x}{\partial \eta} \\ \dfrac{\partial y}{\partial \xi} & \dfrac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \tag{18}$$

4. Výpočtová oblast a síť



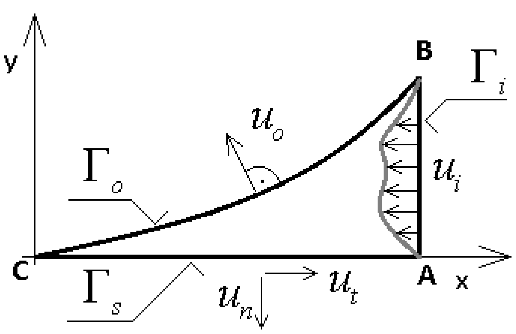
Obr. 4. *Tvar hranice „gas-liquid"*

Tvar oblasti je definován body P_0, P_1 a P_2 Bézierovy kvadratické křivky. Tu jsem zvolil jako počáteční aproximaci předpokládaného tvaru hranice. Body P_1 a P_2 definují délku L a výšku H oblasti. Souřadnicemi bodu P_0 pak lze určit zaoblení hranice „gas-liquid" a tak i velikost úhlů ϑ_1 a ϑ_2 (*Obr. 3*). Parametrická rovnice kvadratické Bézierovy křivky je

$$C(t) = \sum_{i=0}^{2} \binom{2}{i} t^i (1-t)^{2-i} P_i \tag{19}$$

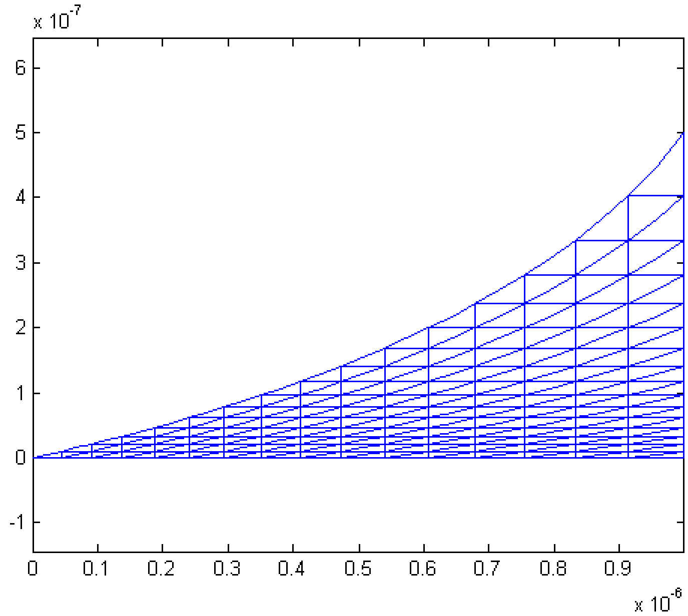
Dále byla na přímkových hranicích oblasti přidána možnost definovat poměr délky prvního a posledního intervalu mezi hraničními body (ratio = $\Delta x_{1st}/\Delta x_{Last}$), lze tak upravit dělení hranice hraničními body. Délku oblasti jsem zvolil jako L = 10^{-6} *m* a výšku jako H = L/2. Příklad sítě s 256 elementy je zobrazen na *Obr. 5*. V 6. Kapitole zabývající se samotným výpočtem je porovnáno řešení na různě jemných sítích.

5. Okrajové podmínky



Obr. 6. *Okrajové podmínky*

Na vstupní hranici Γ_i bude definována vstupní hodnota rychlosti u_i analytickou funkcí. Na hranici Γ_s ,mezi body A a C, bude nastavena nulová tečná a normálová složka rychlosti ($u_t = 0$, $u_n = 0$). Tato podmínka odpovídá neprostupné stěně. Na zakřivené hranici Γ_o , mezi body B a C, je definována volná hranice. Jako tekutinu jsem zvolil vodu při 25 °C. Její vlastnosti při této teplotě jsou uvedeny v *Tabulce 1*. Pro zvolenou hodnotu $Re = 0{,}01$ a $L_{char} = L$ jsem určil odpovídající rychlost proudění v oblasti u (*viz*. (20)).



Obr. 5. *Výpočetní síť s 256 prvky (ratio = 2, ϑ_1 = 36.9°, ϑ_2 = 77.5°)*

$$u \approx \frac{\mathrm{Re} \cdot \nu}{L} = \frac{0,01 \cdot 8,7137 \cdot 10^{-7}}{10^{-6}} = 8,7 \cdot 10^{-3} \; m \cdot s^{-1} \tag{20}$$

Tabulka 1. – *Vlastnosti vody při 25 °C*

Vlastnosti vody (25 °C)	
Hustota ρ [kg·m^{-3}]	997,0979
Dynamická viskozita μ [kg·m^{-1}·s^{-1}]	8.6840·10^{-4}
Kinematická viskozita ν [m^2·s^{-1}]	8.7137·10^{-7}

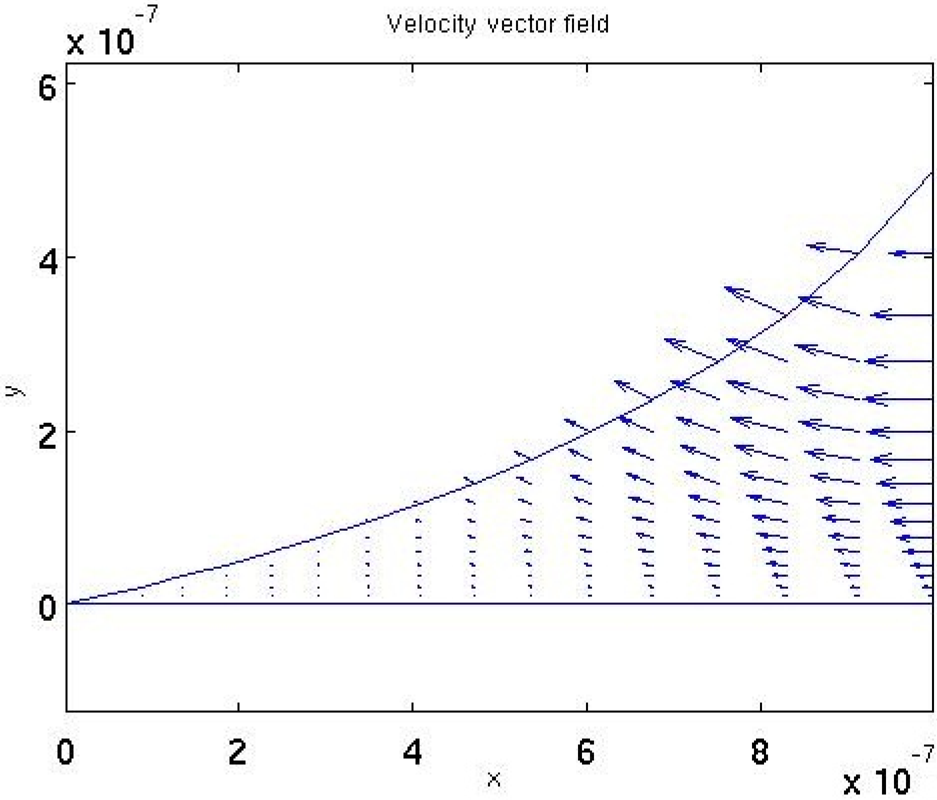
Analytickou funkcí na vstupu Γ_i bude parabola definující velikost rychlosti u v závislosti na souřadnici y, tj. $u = f(y)$. Maximální hodnota je $u_{max} = f(H/2)$ = -0,09 m·s^{-1}. Pro $y = 0$ a $y = H$ je $u = 0$ m·s^{-1}.

6. Výpočet

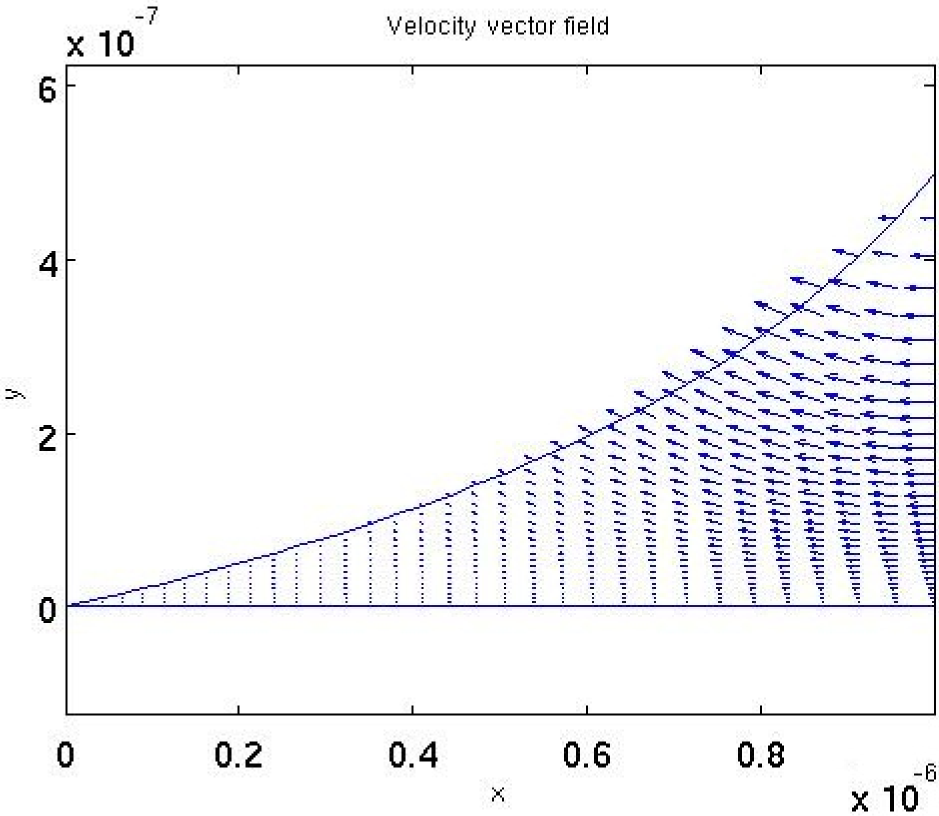
Tvar mikrooblast je definován nastavením parametrů ϑ_1 = *36.9°*, ϑ_2 = *77.5°* a *ratio = 2*. Po zadání výše zmíněných okrajových podmínek byl spuštěn samotný výpočet, jehož výsledkem je pole tlaků a pole vektorů rychlostí v uzlech sítě. Výpočet jsem pro porovnání provedl na několika sítích s různým počtem elementů. V *Tabulce 2* je uveden počet elementů a uzlů použitých sítí, a rozměr matice **A** řešeného lineárního systému rovnic, obecně zapsaného jako **A**·**X** = **B**. Na obrázcích *7*, *8* a *9* jsou zobrazena pole vektorů rychlosti pro tři řešené sítě.Na obrázcích *10*, *11* a *12* jsou pak zobrazena pole tlaku. Na obrázcích *13*, *14* a *15* je zobrazeno rozložení odchylek polí tlaku mezi řešeními na různých sítích. Na obrázcích *16*, *17* a *18* jsou pak zobrazeny odchylky polí velikosti rychlosti. Barevná škála je upravena pro rozsah (f_{max} , f_{min}) => (0, 1).

Tabulka 2. – *Použité sítě*

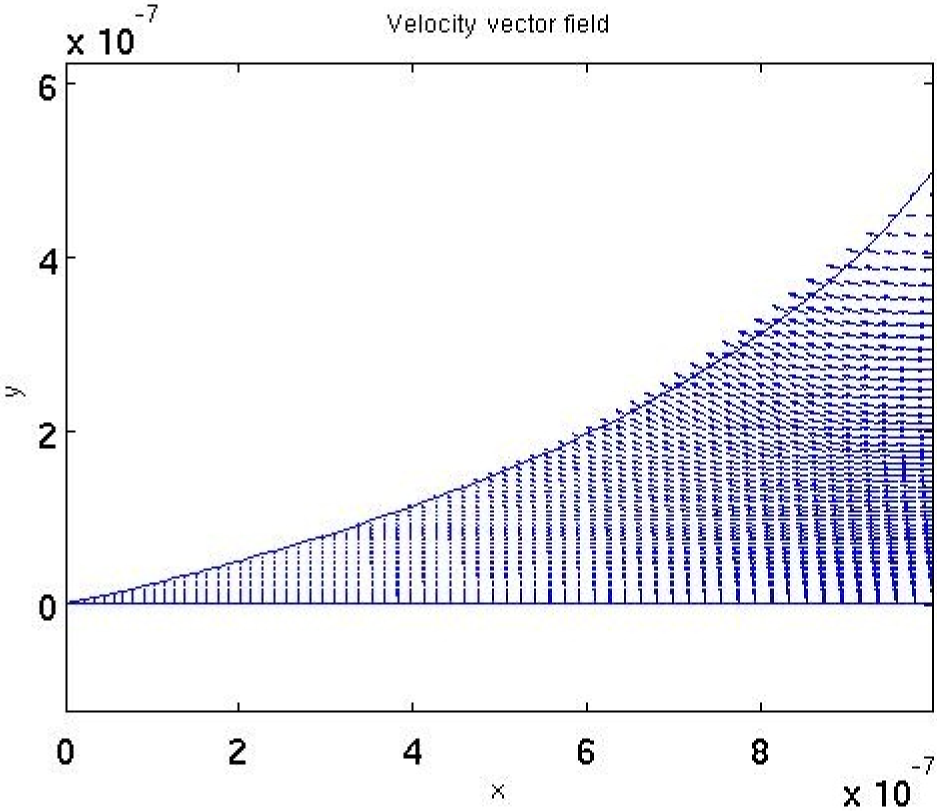
Síť	*Počet elementů*	*Počet uzlů*	*Rozměr matice* **A**
1	64	153	369 x 369
2	256	561	1 377 x 1 377
3	1024	2145	5 313 x 5 313



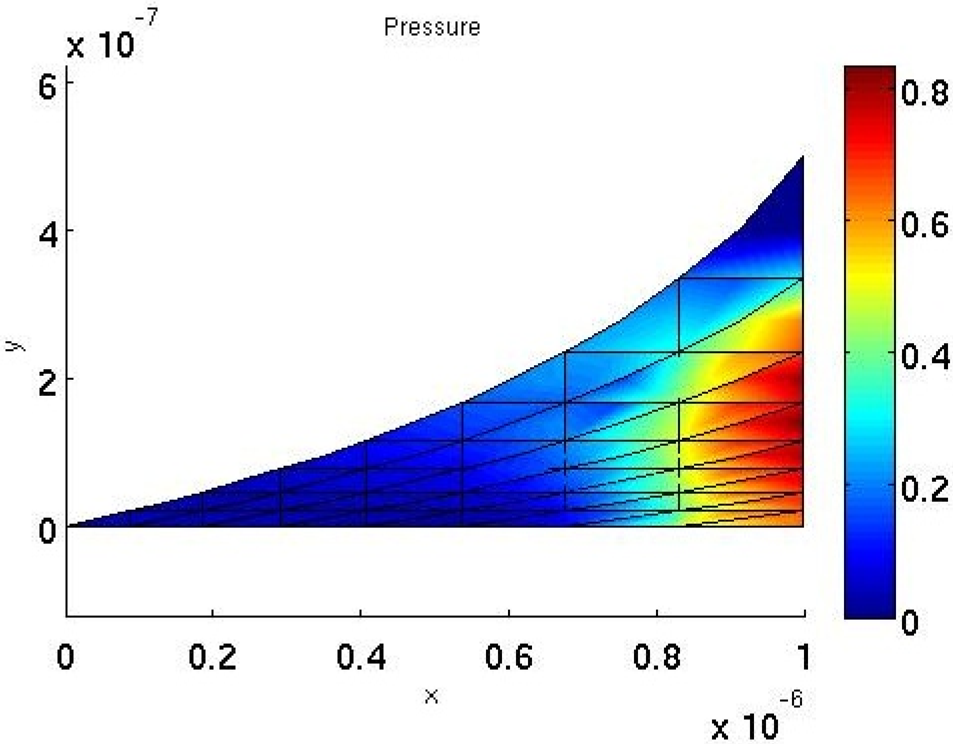
***Obr.** 7. Pole vektorů rychlosti, síť 1, 64 prvků, u_{max}= 0.00897* m·s^{-1}



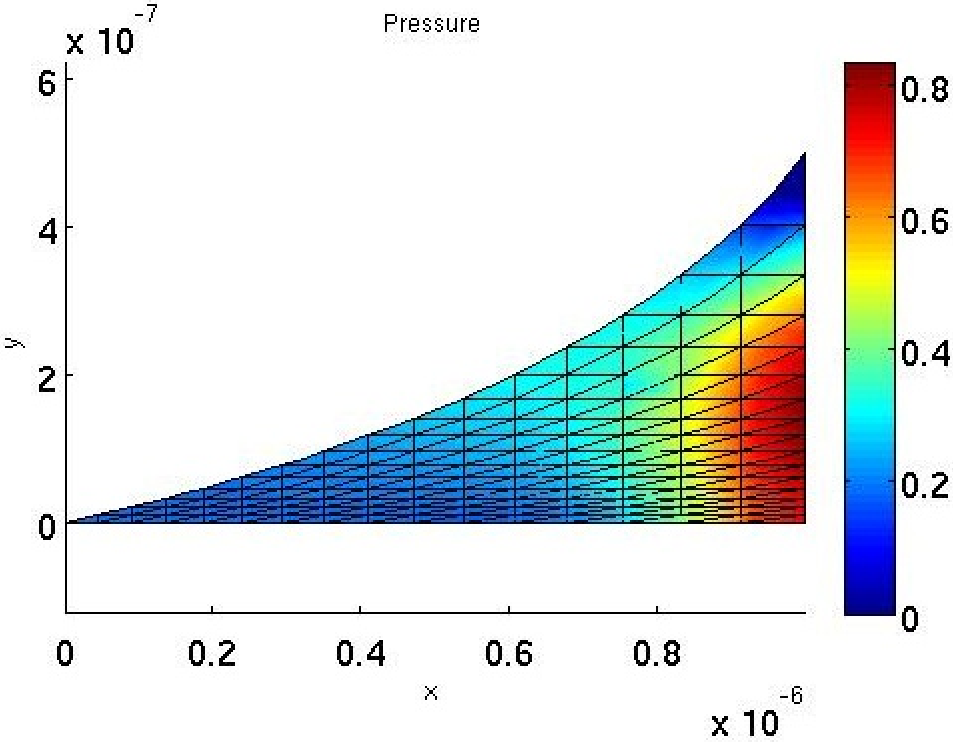
***Obr.** 8. Pole vektorů rychlosti, síť 2, 256 prvků, u_{max}= 0.00899* m·s^{-1}



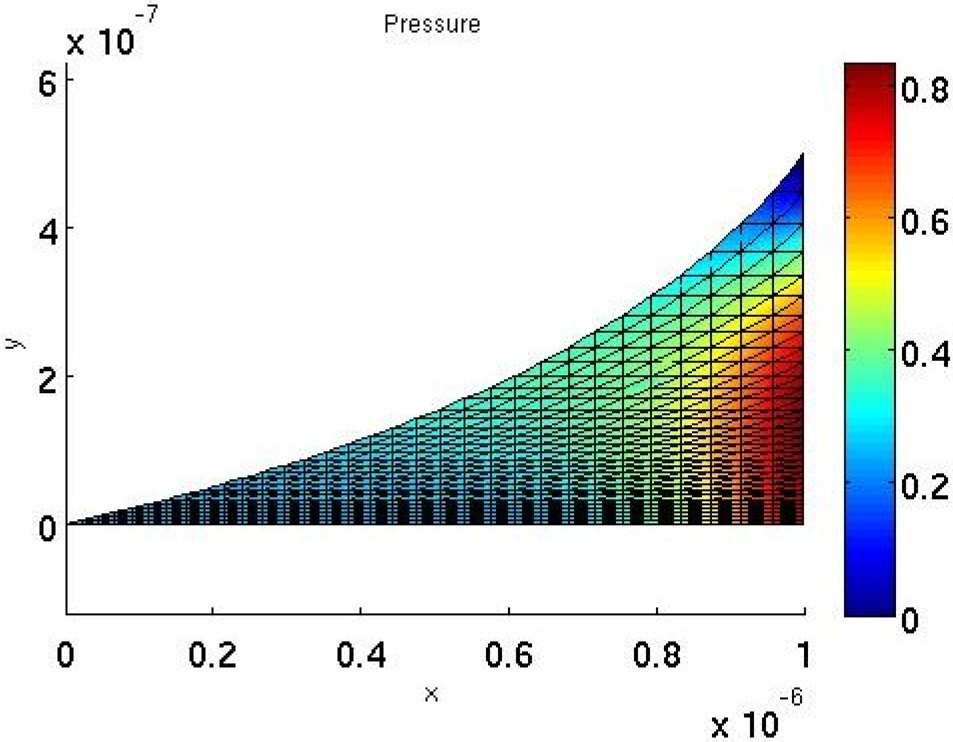
Obr. 9. *Pole vektorů rychlosti, síť 3, 1024 prvků,* u_{max}*= 0.00899* $\mathrm{m \cdot s^{-1}}$



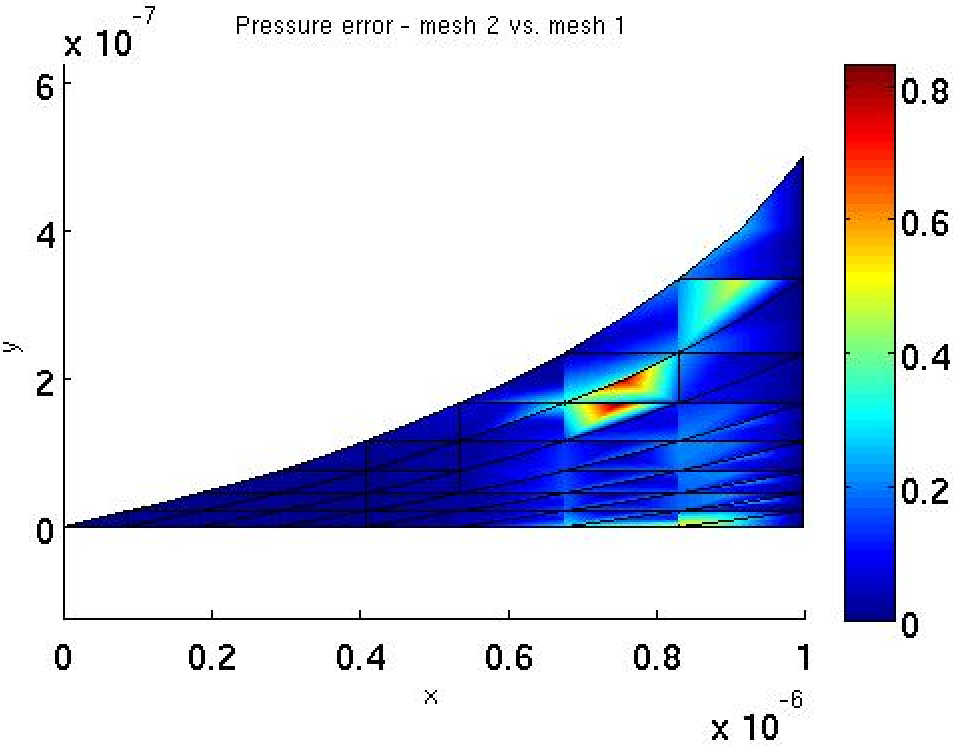
Obr. 10. *Pole tlaku, síť 1, 64 prvků,* p_{max} = 53.602 *Pa,* p_{min} = -1.846 *Pa*



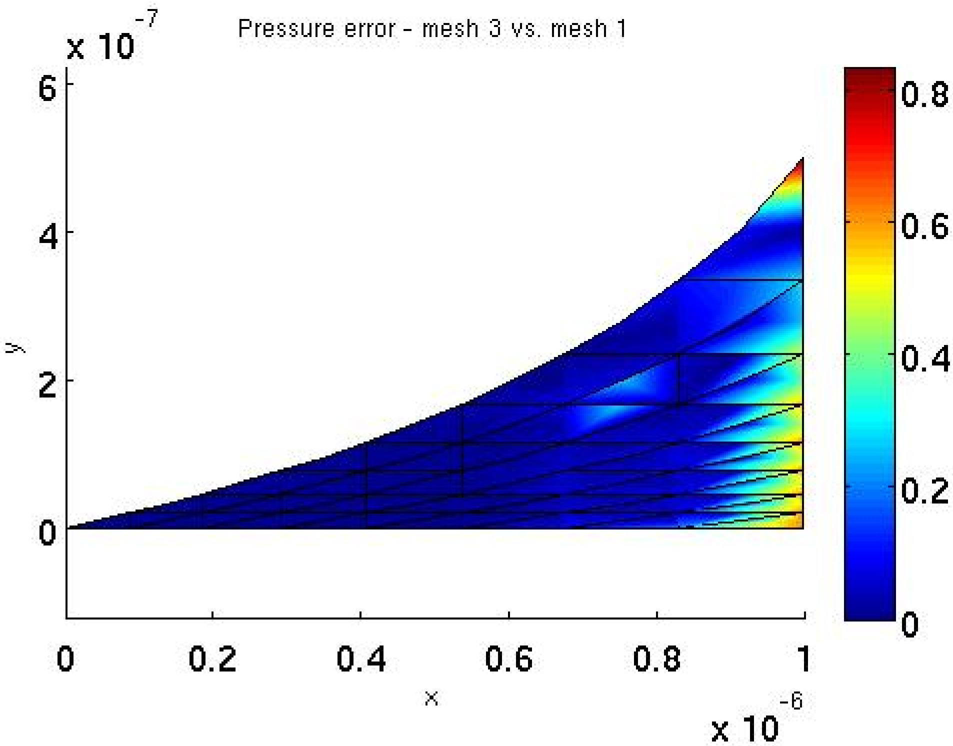
Obr. 11. *Pole tlaku, síť 2, 256 prvků,* $p_{\max}$ = 64.574 *Pa,* $p_{\min}$ = -18.888 *Pa*



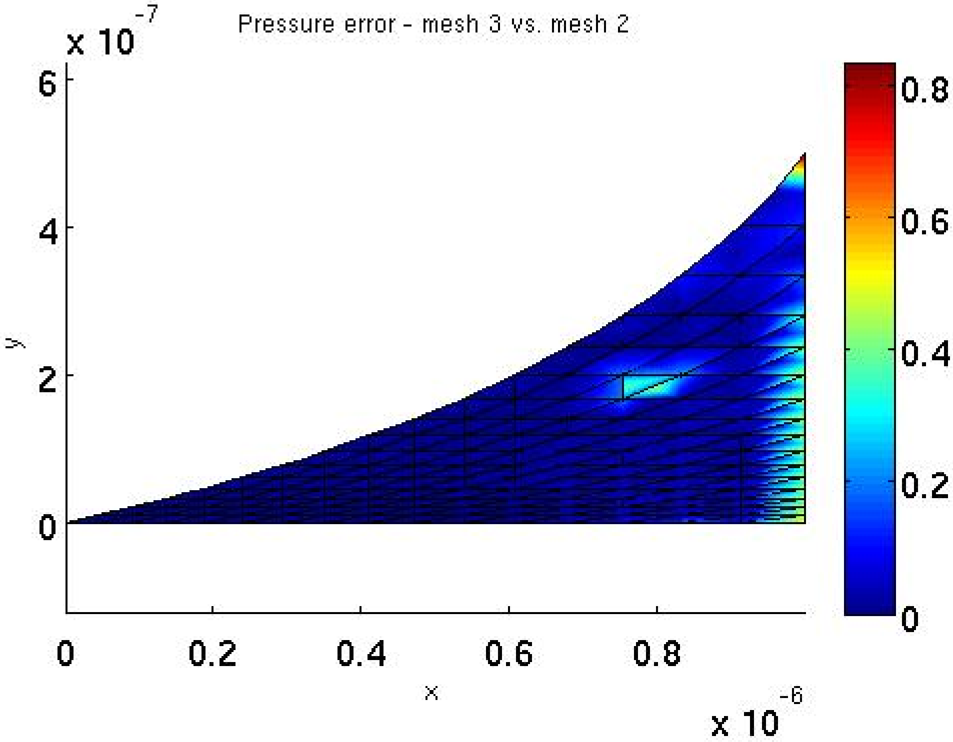
Obr. 12. *Pole tlaku, síť 3, 1024 prvků,* $p_{\max}$ = 70.461 *Pa,* $p_{\min}$ = -30.945 *Pa*



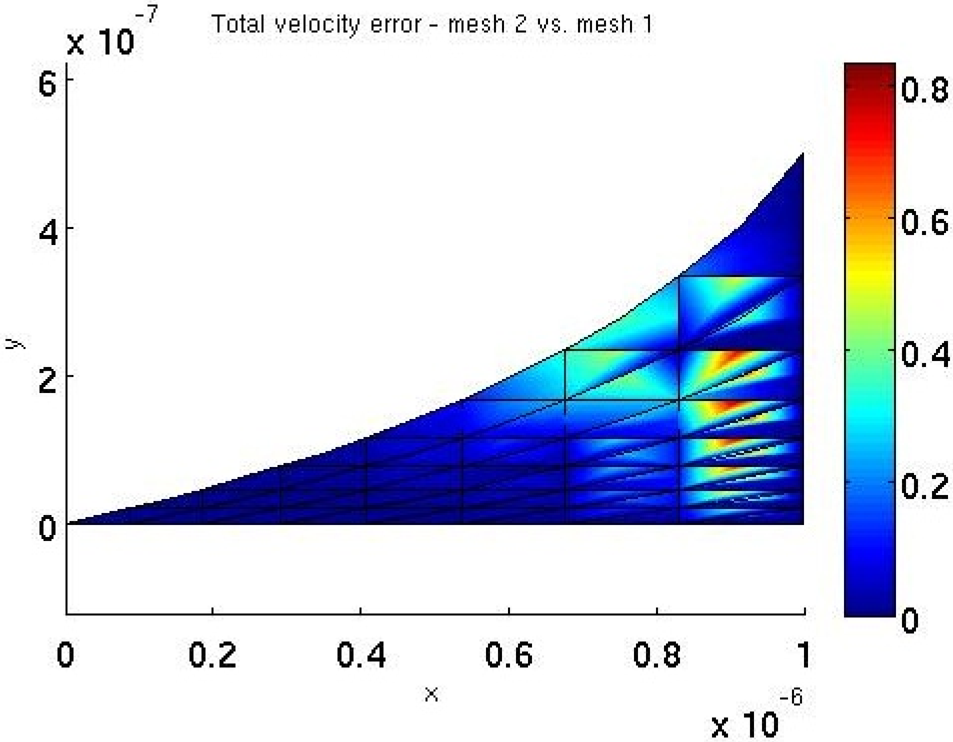
Obr. 13. *Odchylka polí tlaku řešených na sítích 2 a 1,* Δp_{max} = 7.351 *Pa*



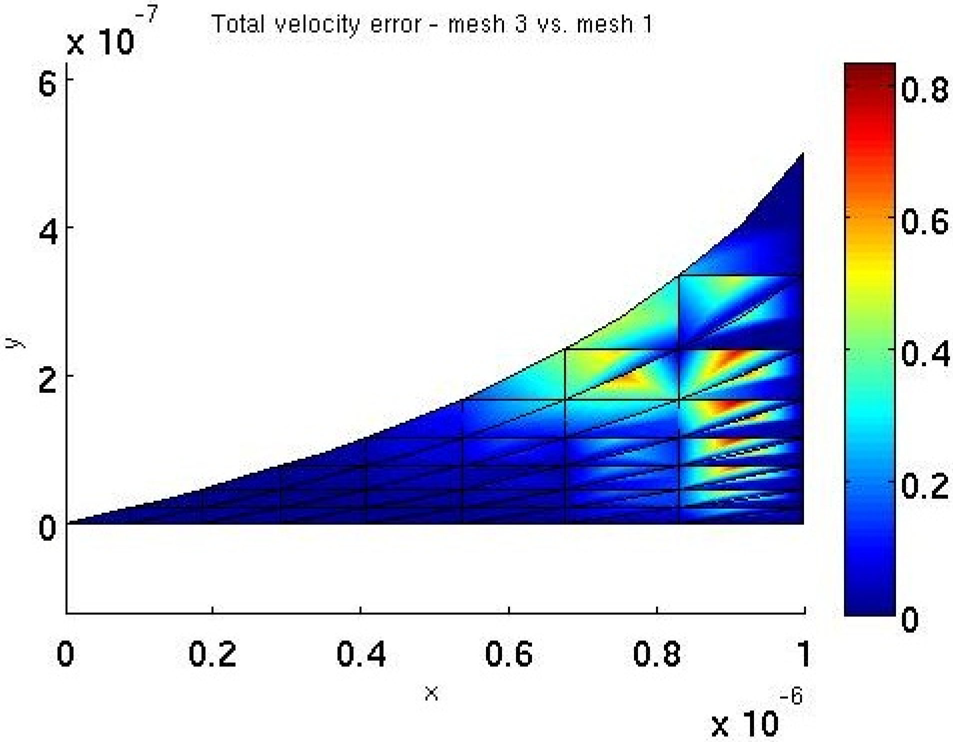
Obr. 14. *Odchylka polí tlaku řešených na sítích 3 a 1,* Δp_{max} = 29.099 *Pa*



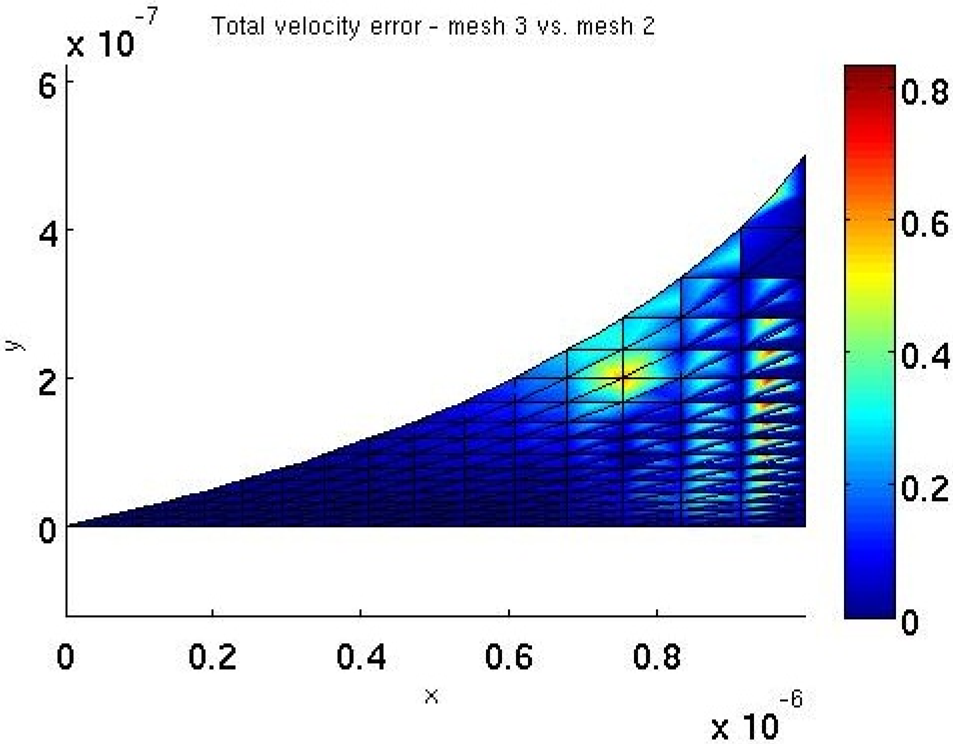
Obr. 15. *Odchylka polí tlaku řešených na sítích 3 a 2,* $\Delta p_{\max}$ = 12.057 *Pa*



Obr. 15. *Odchylka polí velikosti rychlosti řešených na sítích 2 a 1,* $\Delta u_{\max}$ *=6.545* $\cdot 10^{-4}$ m·s^{-1}



Obr. 15. *Odchylka velikosti rychlosti řešených na sítích 3 a 1, ,* Δu_{max} *=6.478* $\cdot 10^{-4}$ m·s^{-1}



Obr. 15. *Odchylka velikosti rychlosti řešených na sítích 3 a 2, ,* Δu_{max} *=2,343* $\cdot 10^{-4}$ m·s^{-1}

7. Závěr.

Tento článek se zabýval primárně přípravou FEM (*finite element method*) modelu proudění v mikrooblasti vznikající při smáčení povrchu tekutinou. Do tohoto modelu byly implementovány požadované okrajové podmínky a proveden výpočet, jehož výsledkem bylo pole tlaku a pole rychlosti proudění. Vytvořený model bude dále použit pro úlohu, jejímž cílem bude stanovení tvaru zaoblené hranice mezi plynem a tekutinou (zde označované jako Γ_o). Číselným výsledkem takové úlohy, porovnatelným s experimentem, pak bude úhel ϑ_2. V [2] je pro tuto úlohu definována diferenciální rovnice, která je následně řešena iteračně. Naším cílem bude řešit takto definovaný problém za účasti tzv. "*Proper Orthogonal Decomposition – Radial Basis Function network*" (*POD-RBF network*).

Použité symboly

ϑ	[°, *rad*]	kontaktní úhel
ϑ_1, ϑ_2	[°, *rad*]	úhly definující tvar oblasti
H	[*m*]	výška oblasti
L	[*m*]	délka oblasti
p_{MOD}	[*Pa*]	modifikovaný tlak
p	[*Pa*]	tlak
u	[$m\cdot s^{-1}$]	rychlost proudění
ν	[$\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$]	kinematická viskozita
μ	[$\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-1}\cdot\mathrm{s}^{-1}$]	dynamická viskozita
ρ	[$\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}$]	hustota
$N_{\mathrm{G}}^{\mathrm{u}}$	[1]	počet globálních uzlů pro rychlost
$N_{\mathrm{G}}^{\mathrm{p}}$	[1]	počet globálních uzlů pro tlak
u_{j}	[$m\cdot s^{-1}$]	rychlosti v *j*-tém uzlu sítě
p_{j}	[*Pa*]	tlak v *j*-tém uzlu sítě
$\phi_{\mathrm{j}}^{\mathrm{u}}$	[-]	*j*-tá tvarová funkce pro rychlost
$\phi_{\mathrm{j}}^{\mathrm{p}}$	[-]	*j*-tá tvarová funkce pro tlak
δ_{ij}	[-]	Kronekerovo delta
$\mathbf{J}$	[-]	Jakobián z roviny *xy* do roviny $\xi\eta$
t	[-]	parametr Bézierovy křivky
C(*t*)	[*m*]	Bézierova křivka
$\mathrm{P_i}$	[*m*]	*i*-tý bod Bézierovy křivky
Γ_{i}	[-]	vstupní hranice výpočtové oblasti
Γ_{o}	[-]	výstupní hranice výpočtové oblasti
Γ_{s}	[-]	neprostupná hranice výpočtové oblasti
ratio	[-]	poměr velikostí prvního a posledního intervalu mezi okrajovými body na hranici Γ_{s}
Re	[-]	Reynoldsovo číslo
Ψ_{i}	[-]	*i*-tá tvarová funkce aproximující nějakou veličinu nad konečně-prvkovým elementem

Použitá literatura

[1] C. Pozridikis, *Introduction to Finite and Spectral Element methods using MATLAB*, Chapman & Hall/CRC, ISBN-10: 1584885297

[2] V. Janeček, V. S. Nikolayev, *Contact line modelling at partial wetting during evaporation driven by substrate heating*, 2012