

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΕΟΥ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ ΚΑΙ ΜΑΖΑΣ ΣΕ ΣΥΝΘΗΚΕΣ ΒΡΑΣΜΟΥ

Σταύρος Φωστήροπουλος^{*1,2}, Γιώργος Στρωτός³, Νίκος Νικολόπουλος¹, Εμμανουήλ Κακκαράς¹ και Μανώλης Γκαβαισές²

¹Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης / Ινστιτούτο Χημικών Διεργασιών και Ενεργειακών Πόρων (ΕΚΕΤΑ/ΙΔΕΠ), Αιγιαλείας 52, Μαρούσι, Ελλάδα
(fostirooulos@certh.gr, n.nikolopoulos@certh.gr, ekak@central.ntua.gr)

²City University London, School of Engineering and Mathematical Sciences, Northampton Square, EC1V 0HB London, UK
(M.Gavaises@city.ac.uk)

³Ανώτατο Εκπαιδευτικό Ίδρυμα Θεσσαλίας Τεχνολογικού Τομέα, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών 41110 Λάρισα, Ελλάδα (gstrot@teilar.gr)

Περίληψη

Η αριθμητική προσομοίωση της διαδικασίας αλλαγής φάσης είναι πολύ σημαντική καθώς μπορεί να ερμηνεύσει λεπτομερώς τους φυσικούς μηχανισμούς που συμβαίνουν κατά την διάρκεια του φαινομένου αυτού. Η ένταση του βρασμού (ρυθμός ατμοποίησης) καθορίζεται από δυο αδιάστατους αριθμούς, τον αριθμό Stefan που εκφράζει τον λόγο της αισθητής προς τη λανθάνουσα θερμότητα ατμοποίησης, και τον λόγο πυκνοτήτων υγρού αερίου (ϕ). Παλαιότερες αριθμητικές μελέτες έχουν προβλέψει επιτυχώς το φαινόμενο, ωστόσο μόνο για ένα περιορισμένο εύρος συνθηκών που αντιστοιχούσε σε χαμηλούς ρυθμούς ατμοποίησης (μικρούς αριθμούς St). Η παρούσα μελέτη περιγράφει την ανάπτυξη ενός υπολογιστικού μοντέλου που θα μπορεί να προσομοιώνει με ακρίβεια την μεταφορά θερμότητας και μάζας στην διεπιφάνεια υγρού-ατμού για περιπτώσεις που ο ρυθμός ατμοποίησης είναι έντονος (υψηλοί αριθμοί Stefan). Για το πρώτο στάδιο ανάπτυξης του μοντέλου, έχουν θεωρηθεί ίσες πυκνότητες υγρού-ατμού. Αυτή η παραδοχή περιορίζει την εφαρμογή του μοντέλου για πιέσεις κοντά στην κρίσιμη. Για την επαλήθευση του υπολογιστικού μοντέλου επιλέγεται η αναλυτική λύση του προβλήματος Stefan για την περίπτωση που η φάση του ατμού είναι ισοθερμοκρασιακή σε θερμοκρασία κορεσμού.

Λέξεις Κλειδιά

Βρασμός, μεταφορά θερμότητας, αλλαγή φάσης, υπολογιστικό μοντέλο VOF.

Εισαγωγή

Η διαδικασία αλλαγής φάσης από υγρό σε ατμό έχει πρακτικό ενδιαφέρον σε ένα σύνολο τεχνολογικών εφαρμογών (ακροφύσια σε μηχανές πυραύλων, ατμοηλεκτρικά εργοστάσια). Συνεπώς, η κατανόηση των φυσικών μηχανισμών που καθορίζουν τα φαινόμενα αλλαγής φάσης είναι αναγκαία. Μια από τις βασικές προσεγγίσεις για την πρόβλεψη του ρυθμού ατμοποίησης στο φαινόμενο του βρασμού γίνεται με την χρήση εμπειρικών συντελεστών οι οποίοι εξάγονται από πειράματα. Ωστόσο, αυτοί ισχύουν για ένα μικρό εύρος υλικών, παραμέτρων και συνθηκών, με αποτέλεσμα η χρήση τους πέραν αυτών των ορίων να

οδηγεί σε μη ακριβή συμπεράσματα (Kharangate and Mudawar 2017). Μια άλλη προσέγγιση για την πρόβλεψη της αλλαγής φάσης γίνεται με την χρήση θεωρητικών μοντέλων. Και αυτά όμως έχουν περιορισμένη εφαρμογή καθώς δεν καλύπτουν ευρύ φάσμα φαινομένων με αλλαγή φάσης, λόγω των πολλών παραδοχών στις οποίες στηρίζονται. Η υπολογιστική ρευστομηχανική είναι ένα χρήσιμο εργαλείο και μπορεί να δώσει σημαντικές πληροφορίες για την φυσική των προαναφερθέντων φαινομένων. Συγκεκριμένα για το φαινόμενο του βρασμού, η εφαρμογή υπολογιστικής προσομοίωσης μπορεί να παρέχει πληροφορίες σχετικά με την 1) θερμοκρασιακή κατανομή και των δυο φάσεων αλλά το πώς αλλάζει αυτή στο χρόνο, 2) την μεταφορά μάζας κατά την διάρκεια της αλλαγής φάσης 3) την ταχύτητα της επαγόμενης ροής. Πάραυτα, η σωστή πρόβλεψη των προαναφερθέντων φυσικών μεγεθών εξαρτάται από τους κυρίαρχους φυσικούς μηχανισμούς και τις απαραίτητες παραδοχές που λαμβάνει υπόψη το εκάστοτε υπολογιστικό μοντέλο. Η πιο απλή περίπτωση για την υπολογιστική μελέτη του φαινομένου του βρασμού είναι η μοντελοποίηση ενός προβλήματος όπου η ατμοποίηση συμβαίνει πάνω σε μια επίπεδη διεπιφάνεια υγρού-ατμού με την θερμοκρασία του υγρού να είναι υπέρθερμη ενώ ο ατμός να βρίσκεται σε θερμοκρασία κορεσμού. Κατά την διάρκεια του φαινομένου, η θερμοκρασιακή διαφορά ανάμεσα στα δύο ρευστά δημιουργεί μεταφορά μάζας (ατμοποίηση) προς την φάση του ατμού με αποτέλεσμα την υποχώρηση της διεπιφάνειας προς την πλευρά του υγρού. Το συγκεκριμένο πρόβλημα εμπίπτει στην κατηγορία προβλημάτων Stefan. Η αριθμητική προσομοίωση ωστόσο του παραπάνω προβλήματος είναι πολύπλοκη καθώς, θα πρέπει η θέση της διεπιφάνειας να είναι γνωστή καθ' όλη την διάρκεια του φαινομένου, αλλά και να υπολογίζονται με ακρίβεια οι ιδιότητες και τα φυσικά μεγέθη πάνω σε αυτήν. Η ένταση του βρασμού εκφράζεται από το μέγεθος του ρυθμού ατμοποίησης, όπου οι τιμές του τελευταίου καθορίζονται από τον αδιάστατο αριθμό Stefan ($St = c_{pl}\Delta T/h_{lv}$) και τον λόγο πυκνοτήτων υγρού αερίου (ϕ).

Μια από τις πρώτες προσπάθειες για υπολογιστική προσομοίωση του βρασμού έγινε από τους (Welch and Wilson 2000) στο φυσικό πρόβλημα του Stefan και στην περίπτωση ανάπτυξης φυσαλίδας σε υπέρθερμο υγρό, όπου και για τα δύο αυτά προβλήματα υπάρχουν θεωρητικές λύσεις υπό συγκεκριμένες παραδοχές. Για τον υπολογισμό του ρυθμού εξάτμισης εφαρμόσαν το μοντέλο των θερμοροών ($\dot{m} = (k_l \nabla T_l - k_g \nabla T_g) \cdot \vec{n}/h_{lv}$) (Gibou et al. 2007), το οποίο βασίζεται στο ρυθμό μεταφοράς θερμότητας και στην λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης. Οι παραπάνω χρησιμοποίησαν την μέθοδο VOF για τον εντοπισμό της διεπιφάνειας υγρού-ατμού. Αντίστοιχες μελέτες είναι αυτές των (Son and Dhir 1998) και (Juric and Tryggvason 1998) οι οποίοι εφαρμόσαν τις μεθόδους Level Set (LS) και Front Tracking (FT) αντίστοιχα, για τον εντοπισμό της διεπιφάνειας υγρού-ατμού. Άλλες μελέτες είναι αυτές των (Sato and Ničeno 2013) και (Perez-Raya and Kandlikar 2018) οι οποίοι χρησιμοποίησαν τεχνικές παρεμβολής για να υπολογίσουν με ακρίβεια την βαθμίδα της θερμοκρασίας πάνω στην διεπιφάνεια. Διαφορετική προσέγγιση στον υπολογισμό του ρυθμού εξάτμισης ακλούθησαν οι (Kunkelmann and Stephan 2009) εφαρμόζοντας το μοντέλο της κινητικής θεωρίας, το οποίο έχει το μειονέκτημα ότι βασίζεται σε έναν εμπειρικό συντελεστή (thermal accommodation coefficient) που μπορεί να αλλάζει ανάλογα με τις συνθήκες του πειράματος. Στην παραπάνω εργασία το υπολογιστικό μοντέλο εφαρμόζεται για την περίπτωση της ανάπτυξης μιας φυσαλίδας σε υπέρθερμο υγρό και η σύγκριση των αποτελεσμάτων του υπολογιστικού κώδικα με αυτά της θεωρητικής λύσης είναι σε συμφωνία. Παρόμοιο υπολογιστικό μοντέλο, με κάποιες τροποποιήσεις στον αλγόριθμο επίλυσης σε σχέση με το παραπάνω, είναι αυτό των (Magnini, Pulvirenti, and Thome 2013) και τα αποτελέσματα τους είναι ικανοποιητικά. Στις προαναφερθείσες αριθμητικές μελέτες, παρότι στην πλειοψηφία αυτών τα αποτελέσματα είναι σε συμφωνία σε σχέση με αυτά των αντίστοιχων θεωρητικών λύσεων, έχει εξεταστεί μόνο ένα μικρό εύρος συνθηκών (St, ϕ). Στην περίπτωση του εκρηκτικού βρασμού (explosive boiling) (Shusser and Weihs 1999) όπου ο St είναι αυξημένος ($St \sim 0.2$) η κλίση στην διεπιφάνεια είναι απότομη με αποτέλεσμα ο ρυθμός μεταφοράς θερμότητας και καθ' επέκταση ο ρυθμός μεταφοράς μάζας να μην υπολογίζεται σωστά από τα παραπάνω μοντέλα.

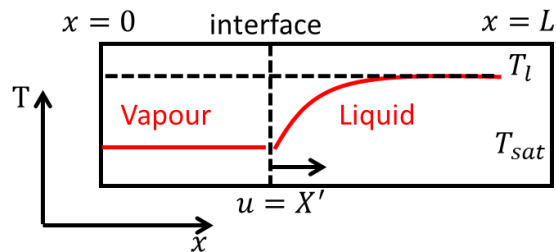
Στην παρούσα μελέτη, το υπολογιστικό μοντέλο που χρησιμοποιείται επιλύει την εξίσωση της ενέργειας για την πρόβλεψη της θερμοκρασίας στο υπολογιστικό χωρίο. Για τον εντοπισμό της διεπιφάνειας υγρού ατμού χρησιμοποιείται η μεθοδολογία VOF (Volume of Fluid) (Hirt and Nichols 1981). Για την

προσομοίωση της αλλαγής φάσης έχει επιλεγθεί το μοντέλο των θερμοροών στο οποίο λαμβάνεται υπόψη η κλίση θερμοκρασίας μόνο από την πλευρά του υγρού. Στην μεθοδολογία της VOF, το πεδίο της θερμοκρασίας είναι συνεχές και δεν μπορεί να προλέξει βηματικές αλλαγές στην κλίση της. Αυτό στην παρούσα εργασία αντιμετωπίζεται με την χρήση κατάλληλων όρων πηγής στην εξίσωση της ενέργειας και αποτελεί την πρωτοτυπία του μοντέλου. Το μοντέλο αλλαγής φάσης εξετάζεται για μονοδιάστατη ροή, προκειμένου να συγκριθούν οι προλέξεις με τα αντίστοιχα αποτελέσματα της θεωρητικής λύσης του Stefan. Το βασικό υπολογιστικό εργαλείο που χρησιμοποιείται εδώ είναι το εμπορικό πακέτο ANSYS/FLUENT, στο οποίο έχει ενσωματωθεί το παραπάνω μοντέλο αλλαγής φάσης που υπολογίζει το ρυθμό εξάτμισης, ταυτόχρονα με κάποιες τροποποιήσεις στον βασικό αλγόριθμο επίλυσης της εξίσωσης ενέργειας. Οι επόμενες παράγραφοι περιλαμβάνουν την περιγραφή του θεωρητικού μοντέλου Stefan, καθώς και την μεθοδολογία για την ανάπτυξη του αριθμητικού μοντέλου. Στην συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την επικύρωση του αριθμητικού μοντέλου, και η τελευταία παράγραφος περιέχει μια σύνοψη της μελέτης.

Μαθηματικά μοντέλα

I. Θεωρητικό μοντέλο εξάτμισης σε επίπεδη διεπιφάνεια (Stefan problem).

Αντικείμενο αυτής της παραγράφου είναι η μαθηματική περιγραφή του μονοδιάστατου προβλήματος Stefan, το οποίο θα χρησιμεύσει σαν αναφορά για το αριθμητικό μοντέλο, για την περίπτωση που η φάση του υγρού είναι υπέρθερμη (T_l) και η φάση του ατμού κορεσμένη (T_{sat}) όπως φαίνεται στο Σχήμα 1. Η διάταξη περιορίζεται από δυο τοίχους ($x = 0, x = L$) οι οποίοι κρατάνε την θερμοκρασία πακτωμένη σε συγκεκριμένες τιμές



Σχήμα 1. Διάταξη προβλήματος Stefan

Επίσης στην περίπτωση αυτή, δημιουργείται ένα θερμικό οριακό στρώμα στην φάση του υγρού το οποίο κινείται μαζί με την διεπιφάνεια με ταχύτητα $X' = dX/dt$. Από την στιγμή που σε όλη την διάρκεια του φαινομένου ο ατμός παραμένει ισοθερμοκρασιακός σε κατάσταση κορεσμού, μεταφορά θερμότητας συμβαίνει μόνο στην φάση του υγρού η οποία εκφράζεται από την εξίσωση της ενέργειας στην παρακάτω μορφή (Εξ. 1).

$$\rho_l c_{p,l} \frac{\partial T}{\partial t} = k_l \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1)$$

όπου T είναι η θερμοκρασία ενώ η πυκνότητα, η θερμοχωρητικότητα και η θερμική αγωγιμότητα συμβολίζονται ως ρ , c_p και k αντίστοιχα. Ο δείκτης του συμβόλου προσδιορίζει το είδος του ρευστού όπου l αντιστοιχεί στο υγρό και v στον ατμό. Οι οριακές συνθήκες που είναι απαραίτητες για την λύση της εξίσωσης είναι:

$$T(X, t) = T_{sat}, T(L, t) = T_l \quad (2)$$

Μια σημαντική παραδοχή στην εξίσωση ενέργειας είναι η απουσία του όρου συναγωγής. Για να ισχύει η συγκεκριμένη υπόθεση θα πρέπει να μην επάγεται ροή στην φάση του υγρού που ισχύει μόνο για την περίπτωση που οι πυκνότητες των δυο φάσεων είναι ίδιες. Η παραδοχή της ίσης πυκνότητας σε υγρό και ατμό ισχύει για περιπτώσεις όπου η πίεση είναι κοντά στην κρίσιμη, και αριθμητικά μπορεί να λειτουργήσει σαν καλό τεστ αναφοράς για να αξιολογηθεί σε πρώτη φάση το υπολογιστικό μοντέλο. Περισσότερα για την συγκεκριμένη παραδοχή θα συζητηθούν αργότερα. Για την λύση της παραπάνω εξίσωσης θα πρέπει να θεωρηθεί και μια συνθήκη για την ενεργειακή ισορροπία πάνω στην διεπιφάνεια η οποία είναι:

$$X' \rho_v h_{lv} = k_l \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_x \quad (3)$$

Όπου το μέγεθος h_{lv} είναι η λανθάνουσα θερμότητα ατμοποίησης. Στο παραπάνω πρόβλημα εφαρμόζεται η λύση Neumann, η οποία υπολογίζει την θέση της διεπιφάνειας (Εξ. 4) και την κατανομή της θερμοκρασίας (Εξ. 5) σαν συνάρτηση του χρόνου.

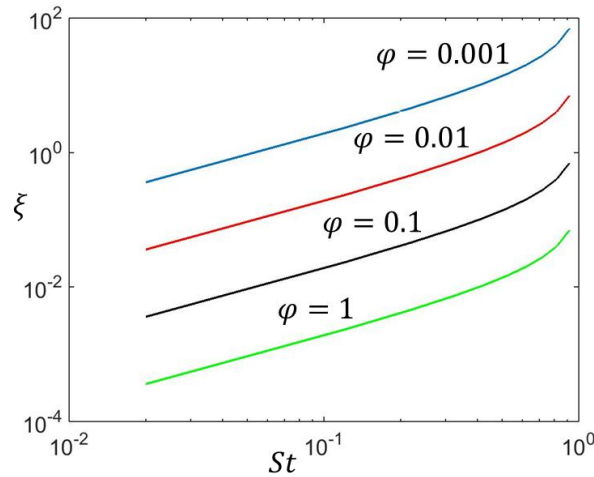
$$X(t) = \xi \sqrt{t} \quad (4)$$

$$T(x, t) = T_l - (T_l - T_{sat}) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_l t}}\right)}{\operatorname{erfc}(\xi)} \quad (5)$$

Η μεταβλητή ξ είναι μεταβλητή ομοιότητας και είναι αδιάστατος συνδυασμός της θέσης και του χρόνου ($\xi = f(x, t)$). Η τιμή της υπολογίζεται από την υπερβατική εξίσωση που ακολουθεί (Εξ. 6)

$$\xi = \frac{2\sqrt{a_l} c_{p,l} (T_l - T_{sat})}{\sqrt{\pi} h_{lv} e^{\frac{\xi^2}{2}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\xi}{2}\right)} \quad (6)$$

όπου a_l είναι η θερμική διάχυση. Από την εξίσωση 4 είναι εμφανές ότι η τιμή του ξ καθορίζει την αλλαγή της θέσης της διεπιφάνειας με το χρόνο επομένως και την ένταση του ρυθμού εξάτμισης στην διεπιφάνεια. Αποτελεί λοιπόν μια ένδειξη της ταχύτητας με την οποία κινείται η διεπιφάνεια. Η μεταβλητή ξ εξαρτάται από τον αριθμό Stefan, που έχει οριστεί προηγουμένως, και τον λόγο των πυκνοτήτων των δύο φάσεων. Στο παρακάτω γράφημα φαίνεται πως συμπεριφέρεται σε συνάρτηση με τους προαναφερθέντες αδιάστατους αριθμούς.



Σχήμα 2. Μεταβολή της τιμής ξ ως προς τον αριθμό Stefan (St) και τον λόγο των πυκνοτήτων (φ)

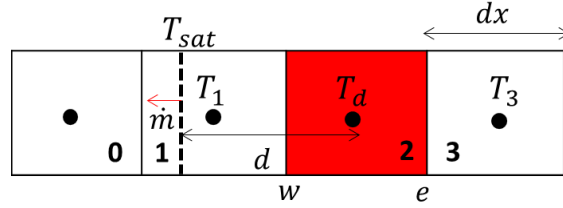
II. Υπολογιστικό μοντέλο (CFD) αλλαγής φάσης σε επίπεδη διεπιφάνεια.

Βασικό αντικείμενο της εργασίας είναι η αριθμητική προσομοίωση του προβλήματος Stefan και η επικύρωση των αποτελεσμάτων με αυτά της αναλυτικής λύσης Stefan. Η αριθμητική προσομοίωση γίνεται με την χρήση του υπολογιστικού εργαλείου ANSYS/Fluent, το οποίο επιλύει την εξίσωση της VOF και την εξίσωση της ενέργειας, ενώ με την χρήση UDF έχει ενσωματωθεί το μοντέλο των θερμοροών για τον υπολογισμό του ρυθμού ατμοποίησης. Το τελευταίο περιγράφεται από την εξίσωση 7.

$$\dot{m} = \frac{k_l \nabla T_l \cdot \vec{n}}{h_{lv}} \approx \frac{k_l \Delta T_l}{d h_{lv}} \quad (7)$$

όπου το $\Delta T_l/d$ είναι η βαθμίδα της θερμοκρασίας προς τη πλευρά του υγρού. Η βαθμίδα θερμοκρασίας ($\Delta T_l = T_d - T_{sat}$) αναπαριστάται στο πλέγμα του σχήματος Σχήμα 3, όπου T_d είναι η θερμοκρασία του

γειτονικού κελιού προς την πλευρά του υγρού (Σχήμα 3, κελί 2/κόκκινο χρώμα), και d είναι η απόσταση μεταξύ του κέντρου του και της διεπιφάνειας. Το μέγεθος του κελιού συμβολίζεται με dx . Είναι εμφανές ότι για την ακριβή πρόβλεψη του ρυθμού εξάτμισης θα πρέπει η εξίσωση της ενέργειας να



Σχήμα 3. Μονοδιάστατο πλέγμα εστιασμένο στην περιοχή της διεπιφάνειας. Οι θερμοκρασίες συμβολίζονται με T .

υπολογίζει σωστά το πεδίο θερμοκρασιών και ιδιαίτερα την θερμοκρασία του κελιού 2. Για την επίτευξη του τελευταίου πρέπει ο υπολογιστικός κώδικας να γνωρίζει την θέση της διεπιφάνειας και να αντιλαμβάνεται ότι η θερμοκρασία εκεί είναι κορεσμένη. Η πληροφορία αυτή ενσωματώνεται στον υπολογιστικό κώδικα σαν όρος πηγής στην εξίσωση της ενέργειας με την χρήση UDF. Η μορφή των όρων πηγής περιγράφεται λεπτομερώς στην συνέχεια.

Στην μεθοδολογία VOF λύνεται μια κοινή εξίσωση ενέργειας και για τις δύο φάσεις του ρευστού, όπου η πυκνότητα και θερμική αγωγιμότητα σταθμίζονται με την VOF ενώ η θερμοχωρητικότητα σταθμίζεται με την μάζα. Η εξίσωση γράφεται ως:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (8)$$

Η μεταβλητή F_v συμβολίζει το ποσοστό του ατμού που υπάρχει σε κάθε κελί. Στο κελί της διεπιφάνειας, δημιουργείται μια κλίση στο πεδίο της θερμοκρασίας που δεν λαμβάνεται υπόψη από τον υπολογιστικό κώδικα του Fluent. Αυτό φαίνεται από την αριθμητική διακριτοποίηση (κεντρική διαφοράση) του όρου αγωγής στο κελί 2 (Εξ. 9) όπου η θερμοκρασία της διεπιφάνειας (T_{sat}) δεν υπεισέρχεται στον υπολογισμό του όρου.

$$S_1 = \int \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) dV = k_e \frac{T_3 - T_d}{dx} \frac{1}{dx} - k_w \frac{T_d - T_1}{dx} \frac{1}{dx} \quad (9)$$

Εδώ, e και w είναι οι επιφάνειες του κελιού. Για να ληφθεί υπόψη η θερμοκρασία της διεπιφάνειας γίνεται η εξής τροποποίηση. Ο όρος αγωγής στο κελί 2 ολοκληρώνεται από την διεπιφάνεια (i), η οποία είναι κινούμενη, ως την επιφάνεια e . Με αυτήν την τροποποίηση, ο υπολογιστικός κώδικας, θεωρεί το κελί 2 σαν ένα μεγεθυμένο κελί και αγνοεί το κελί της διεπιφάνειας και καθ' επέκταση την θερμοκρασία T_1 . Η τροποποίηση αυτή φαίνεται στην παρακάτω εξίσωση.

$$S_2 = \int \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) dV = \dots = k_e \frac{T_3 - T_d}{dx} \frac{1}{dx_{ei}} - k_w \frac{T_d - T_{sat}}{d} \frac{1}{dx_{ei}} \quad (10)$$

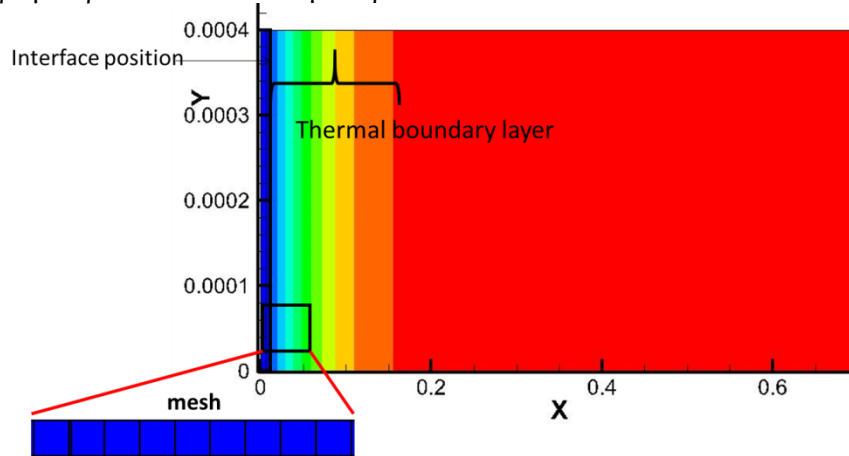
Ο όγκος του κελιού καθώς και η απόσταση του κέντρου του κελιού από την διεπιφάνεια είναι συνάρτηση της VOF και του μεγέθους του κελιού. Η διόρθωση στον όρο της αγωγής μπαίνει σαν όρος πηγής στην εξίσωση ενέργειας που λύνει το Fluent και η τελική μορφή της εξίσωσης είναι:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - S_1 + S_2 \quad (11)$$

Επειδή δεν μπορούμε να επέμβουμε στον υπολογιστικό κώδικα του Fluent και να βάλουμε κατευθείαν τον σωστό όρο αγωγής (S_2), πρέπει πρώτα να αφαιρέσουμε αυτόν του Fluent (S_1). Οι εξισώσεις μεταφοράς στο Fluent συμπεριλαμβανομένου και της εξίσωσης ενέργειας λύνονται πεπλεγμένα, συνεπώς ο τροποποιημένος όρος πηγής θα πρέπει να υπολογίζεται σε κάθε επανάληψη μέσα στο χρονικό βήμα. Στο τέλος της επαναληπτικής διαδικασίας υπολογίζεται ο ρυθμός εξάτμισης από την εξίσωση 7 και μπαίνει σαν όρος πηγής στην εξίσωση της VOF (Εξ. 12) η οποία λύνεται ρητά στην αρχή του χρονικού βήματος. Η χωρική διακριτοποίηση της VOF γίνεται με το σχήμα Geo-Reconstruct. Στην παρακάτω εξίσωση, A είναι το η επιφάνεια της διεπιφάνειας και V όγκος του κελιού, ενώ απουσιάζει ο όρος των ταχυτήτων μιας και οι πυκνότητες των δύο φάσεων είναι ίδιες.

$$\frac{\partial F_v}{\partial t} = \frac{\dot{m}A}{\rho_v V} \quad (12)$$

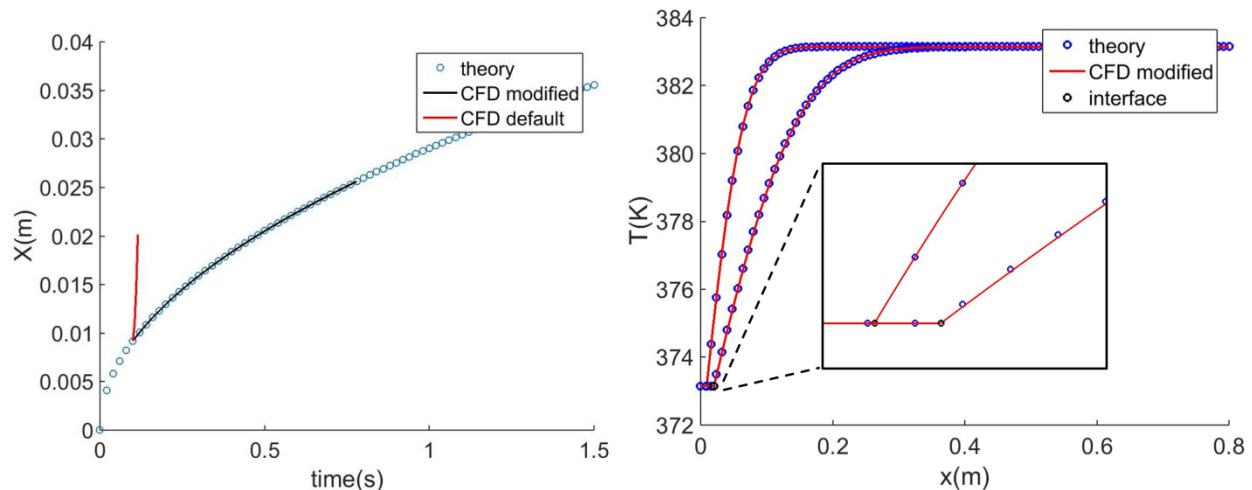
Οι παραπάνω εξισώσεις επιλύονται σε ένα 1-D πλέγμα όπου και από τις δύο πλευρές επιβάλλονται οριακές συνθήκες τοιχώματος (Σχήμα 4). Ο οριακή συνθήκη από την πλευρά της υπέρθερμης φάσης πρέπει να είναι αρκετά μακριά από την διεπιφάνεια για να μην επηρεάζει την επίλυση. Επίσης το μέγεθος της υπολογιστικής κυψέλης πρέπει να είναι αρκετά μικρό ώστε το θερμικό οριακό στρώμα να επιλύεται με ακρίβεια. Στις προσομοιώσεις που θα παρουσιαστούν παρακάτω, το μέγεθος του υπολογιστικού χωρίου είναι $D=0.7$ m ενώ το υπολογιστικό κελί είναι $dx=0.0004$ m. Το κελί πρέπει να είναι αρκετά μικρό ώστε να επιλύεται με ακρίβεια το θερμικό οριακό στρώμα. Στην συγκεκριμένη περίπτωση διαπιστώθηκε ότι το οριακό στρώμα πρέπει να επιλύεται με περίπου 500 κελιά.



Σχήμα 4. Υπολογιστικό πλέγμα με μια αρχικοποιημένη θερμοκρασιακή κατανομή. Η εστίαση γίνεται στην περιοχή της διεπιφάνειας.

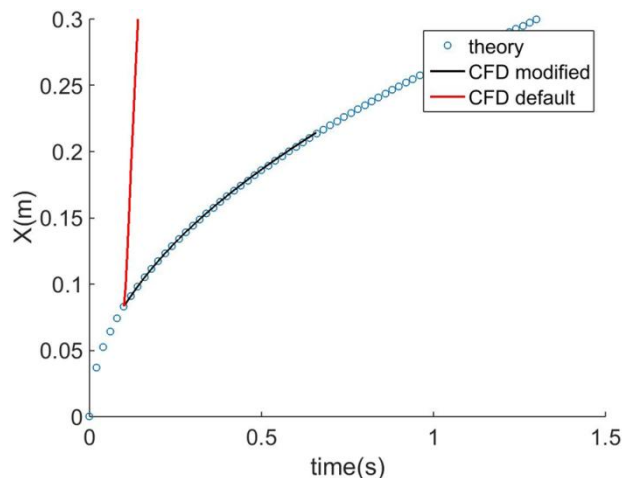
Αποτελέσματα-Συζήτηση

Το παραπάνω μοντέλο εφαρμόζεται αρχικά σε μια περίπτωση αναφοράς όπου οι ιδιότητες στην υπέρθερμη φάση είναι οι ακόλουθες Η θερμοχωρητικότητα (c_p) ισούται με 0.4 kJ/kg K, ενώ η πυκνότητα και η θερμική αγωγιμότητα ισούνται με 0.002 kg/m³ και 0.01 W/m K. Η θερμοκρασία κορεσμού (T_{sat}) είναι 373 K και η υπέρθερμη φάση (T_l) είναι 383 K. Η λανθάνουσα θερμότητα ατμοποίησης είναι 20 kJ/kg. Από τις παραπάνω τιμές προκύπτει ένας αριθμός St που ισούται με 0.2 . Εδώ να σημειωθεί ότι ιδιότητες στην φάση που είναι σε κορεσμό (του ατμού δηλαδή) δεν έχουν καμία επίδραση στον ρυθμό ατμοποίησης, αφού στην φάση κορεσμού δεν υπάρχει μεταφορά θερμότητας. Η προσομοίωση ξεκινάει την χρονική στιγμή $t = 0.1s$ όπου η διεπιφάνεια έχει προχωρήσει λίγο (η θέση της έχει υπολογισθεί από το θεωρητικό μοντέλο, Εξ. 4). Αντίστοιχα υπολογίζεται και το θερμοκρασιακό προφίλ την συγκεκριμένη χρονική στιγμή (Εξ. 5). Στο Σχήμα 5 (αριστερή πλευρά), συγκρίνεται η μετατόπιση της διεπιφάνειας που προβλέπει ο υπολογιστικός κώδικας (μαύρη γραμμή) με την πρόβλεψη της θεωρητικής λύσης (μπλε διασπορά) και τα αποτελέσματα συμφωνούν απόλυτα. Συγκρίνεται επίσης και η πρόβλεψη του υπολογιστικού κώδικα πριν την ενσωμάτωση της τροποποίησης στην εξίσωση της ενέργειας (Εξ. 9, 10,11) (κόκκινη γραμμή) και αποκλίνει πολύ από την θεωρητική λύση. Είναι εμφανές ότι με τον πρόσθετο όρο πηγής το πεδίο 'σπάει' σε δύο φάσεις (όπως στο θεωρητικό μοντέλο) και η έντονη κλίση της θερμοκρασίας στο κελί της διεπιφάνειας υπολογίζεται με ακρίβεια. Στο Σχήμα 5 (δεξιά πλευρά) παριστάνεται η κατανομή της θερμοκρασίας σε δύο διαφορετικά στιγμιότυπα και φαίνεται πως αλλάζει το θερμικό οριακό στρώμα κατά την διάρκεια του φαινομένου, το πάχος του οποίου τείνει να αυξηθεί.



Σχήμα 5. Αριστερή πλευρά: Πρόβλεξη της θεωρητικής λύσης Stefan (μπλε διασπορά) με τη χρήση του αρχικού υπολογιστικού κώδικα FLUENT (κόκκινη γραμμή) και του τροποποιημένου (μαύρη γραμμή). Στον κάθετο άξονα είναι η θέση της διεπιφάνειας ενώ στον οριζόντιο ο χρόνος της προσομοίωσης. Δεξιά πλευρά: Πρόβλεψη κατανομής θερμοκρασίας του τροποποιημένου υπολογιστικού κώδικα (κόκκινη γραμμή) και της θεωρητικής λύσης (μπλε διασπορά) για $t = 0.1s$ και $t = 0.5s$. Για τους ίδιους χρόνους φαίνεται και η θέση της διεπιφάνειας (μαύρη διασπορά) στην εστίαση.

Στην συνέχεια εξετάζεται μια παραμετρική προσομοίωση όπου οι ιδιότητες παραμένουν ίδιες με αυτές της προσομοίωσης αναφοράς με μοναδική αλλαγή την θερμοκρασία της υπέρθερμης φάσης που είναι ίση με 413 K που αντιστοιχεί σε έναν αριθμό St ίσο με 0.8. Απ' όσο γνωρίζουμε, στην βιβλιογραφία δεν υπάρχει αριθμητική μελέτη με τόσο υψηλό αριθμό Stefan. Η πλειοψηφία των περιπτώσεων που έχουν εξεταστεί εκφράζονται από St περίπου ίσο με για 0.01 πυκνότητες νερού-ατμού. Ακολουθείται πάλι η ίδια διαδικασία για την αρχικοποίηση της προσομοίωσης και τα αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήμα 6. Και σε αυτήν την περίπτωση όπου ο ρυθμός εξάτμισης είναι αρκετά υψηλός, η πρόβλεψη του τροποποιημένου υπολογιστικού κώδικα (μαύρη γραμμή) βρίσκεται σε συμφωνία με αυτήν της θεωρητικής λύσης (μπλε διασπορά).



Σχήμα 6. Πρόβλεξη της θεωρητικής λύσης Stefan (μπλε διασπορά) με τη χρήση του αρχικού υπολογιστικού κώδικα FLUENT (κόκκινη γραμμή) και του τροποποιημένου (μαύρη γραμμή). Στον κάθετο άξονα είναι η θέση της διεπιφάνειας ενώ στον οριζόντιο ο χρόνος της προσομοίωσης.

Οι αριθμοί Stefan που έχουν δοκιμαστεί είναι ο ελάχιστος και ο μέγιστος του φάσματος που παρουσιάζεται στο Σχήμα 2 για την περίπτωση που ο λόγος πυκνοτήτων είναι μονάδα (πράσινη

καμπύλη), συνεπώς αυτή είναι η περιοχή στην οποία το μοντέλο είναι έγκυρο. Για μεγαλύτερους αριθμούς Stefan η θεωρητική λύση τείνει στο άπειρο και δεν μπορεί να υπάρξει σύγκριση. Όπως αναφέρθηκε στην παράγραφο της περιγραφής του μοντέλου, μια σημαντική παραδοχή που έχει γίνει στις παραπάνω προσομοιώσεις είναι η θεώρηση ίδιας πυκνότητας υγρού και ατμού κάτι το οποίο είναι αληθές σε πιέσεις κοντά στη κρίσιμη. Στην περίπτωση χαμηλών (ως προς την κρίσιμη) πιέσεων, οι πυκνότητες της υγρής και της αέριας φάσης διαφέρουν αρκετά και επάγεται ροή στην φάση του υγρού λόγω διαστολής. Η μεταφορά θερμότητας πλέον δεν οφείλεται μόνο σε αγωγή αλλά και σε συναγωγή, επομένως στην εξίσωση 8 πρέπει να ληφθεί υπόψη ο όρος συναγωγής που ισούται με $\rho \vec{u} \cdot \nabla T$. Ο όρος συναγωγής όπως και της αγωγής χρειάζεται αντίστοιχη τροποποίηση. Αυτό θα είναι αντικείμενο μελλοντικής εργασίας.

Συμπεράσματα

Σε αυτή την μελέτη παρουσιάζονται τα πρώτα αποτελέσματα ενός υπό ανάπτυξη αριθμητικού μοντέλου που θα προβλέπει με ακρίβεια τον ρυθμό εξάτμισης στην περίπτωση του εκρηκτικού βρασμού. Το αριθμητικό εργαλείο πάνω στο οποίο ενσωματώνεται το μοντέλο του βρασμού είναι το εμπορικό πακέτο ANSYS/FLUENT το οποίο λύνει την εξίσωση της ενέργειας, και την εξίσωση της VOF για τον εντοπισμό της διεπιφάνειας υγρού-ατμού. Με την χρήση User Defined Functions, έχει ενσωματωθεί ένας αλγόριθμος που υπολογίζει τον ρυθμό εξάτμισης πάνω στην διεπιφάνεια, όπως επίσης έχουν ενσωματωθεί και τροποποιήσεις στην εξίσωση της ενέργειας. Το φαινόμενο διερευνάται για την απλή περίπτωση της αλλαγής φάσης σε ένα μονοδιάστατο χωρίο που υπάρχει ατμός σε συνθήκες κορεσμού και υγρό σε υπέρθερμη κατάσταση. Οι δύο φάσεις χωρίζονται από μια επίπεδη διεπιφάνεια η οποία κινείται λόγω της αλλαγής φάσης του υγρού σε ατμό. Το αριθμητικό μοντέλο έχει σαν αναφορά το θεωρητικό πρόβλημα Stefan με τις προβλέψεις του οποίου βρίσκεται σε απόλυτη συμφωνία. Μια σημαντική παραδοχή που έχει γίνει για την αρχική ανάπτυξη του μοντέλου, είναι η θεώρηση ίσων πυκνοτήτων σε υγρό και αέριο που περιορίζει την εφαρμογή του για πιέσεις κοντά στην κρίσιμη. Για την περαιτέρω ανάπτυξη του μοντέλου χρειάζεται να γίνει χειρισμός και στον όρο συναγωγής της εξίσωσης ενέργειας για να εξετάζονται και ρεαλιστικές περιπτώσεις που η πυκνότητα υγρού-ατμού διαφέρει.

- Gibou, Frédéric, Ligu Chen, Duc Nguyen, and Sanjoy Banerjee. 2007. 'A level set based sharp interface method for the multiphase incompressible Navier–Stokes equations with phase change', *Journal of Computational Physics*, 222: 536-55.
- Hirt, C. W., and B. D. Nichols. 1981. 'Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries', *Journal of Computational Physics*, 39: 201-25.
- Juric, Damir, and Grétar Tryggvason. 1998. 'Computations of boiling flows', *International journal of multiphase flow*, 24: 387-410.
- Kharangate, Chirag R, and Issam Mudawar. 2017. 'Review of computational studies on boiling and condensation', *International journal of heat and mass transfer*, 108: 1164-96.
- Kunkelmann, Christian, and Peter Stephan. 2009. 'CFD simulation of boiling flows using the volume-of-fluid method within OpenFOAM', *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 56: 631-46.
- Magnini, Mirco, B Pulvirenti, and John Richard Thome. 2013. 'Numerical investigation of hydrodynamics and heat transfer of elongated bubbles during flow boiling in a microchannel', *International journal of heat and mass transfer*, 59: 451-71.
- Perez-Raya, Isaac, and Satish G Kandlikar. 2018. 'Discretization and implementation of a sharp interface model for interfacial heat and mass transfer during bubble growth', *International journal of heat and mass transfer*, 116: 30-49.
- Sato, Yohei, and Bojan Ničeno. 2013. 'A sharp-interface phase change model for a mass-conservative interface tracking method', *Journal of Computational Physics*, 249: 127-61.
- Shusser, M, and D Weihs. 1999. 'Explosive boiling of a liquid droplet', *International journal of multiphase flow*, 25: 1561-73.

Son, G, and Vijay K Dhir. 1998. 'Numerical simulation of film boiling near critical pressures with a level set method', *Journal of Heat Transfer*, 120: 183-92.

Welch, Samuel W. J., and John Wilson. 2000. 'A Volume of Fluid Based Method for Fluid Flows with Phase Change', *Journal of Computational Physics*, 160: 662-82.

A NEW NUMERICAL MODEL FOR HEAT AND MASS TRANSFER IN EXPLOSIVE BOILING CONDITIONS

The prediction of phase-change processes with the use of CFD simulations is of great interest as they can interpret with detail the physical mechanisms that occur during phase-change phenomena such as boiling. In case of boiling, the vaporization rate and subsequently the intensity of the boiling process is controlled by the Stefan dimensionless number which is expressed as the ratio of the sensible heat to the latent heat, and the liquid-vapor density ratio (ϕ). Previous numerical studies have predicted the phenomenon successfully by using different methodologies, although under a limited range of ambient conditions. This study describes the first steps of development of a numerical model that will be capable of simulating accurately the interfacial evaporation during explosive boiling conditions. The test case for the evaluation of the phase-change model is the simplified Stefan problem, where a planar interface separates a saturated phase (vapor) from a superheated phase (liquid). During the phenomenon the saturated phase expands and the interface moves towards the liquid phase. The Stefan problem is investigated with the ANSYS/FLUENT commercial CFD software that solves the energy equation alongside with the VOF equation for the interface tracking. The phase change model and significant modifications in the energy equation have been incorporated in the CFD model with the use of User Defined Functions (UDF's). The evaporation rate of the model depends on the temperature gradient on the interface and the latent heat of vaporization. Subsequently the temperature gradient should be computed properly in order to predict accurate evaporation rates. For the prediction of heat transfer, the energy equation has been modified, with the implementation of source terms, in order to take into account the discontinuity of the temperature and the saturated conditions at the interface. Two CFD simulations have been performed for different St numbers assuming that vapor and liquid densities are equal. For different densities, further modification in the energy equation is needed (we are currently working on it). Results of CFD simulations are compared against a theoretical solution of Stefan problem and show identical agreement.

Acknowledgements

Financial support from the MSCA-ITN-ETN of the European Union's H2020 programme, under REA grant agreement n. 675676 is acknowledged.