

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΕΛΕΥΘΕΡΗΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ ΡΟΗΣ ΥΓΡΟΥ ΜΕΤΑΛΛΟΥ ΣΕ ΚΑΤΑΚΟΡΥΦΟ ΑΓΩΓΟ

Αλκμήνη Λύτρα & Νίκος Πελεκάσης
Εργαστήριο Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας,
Πεδίον Άρεως, 38334, Βόλος
allitra@uth.gr, pel@uth.gr

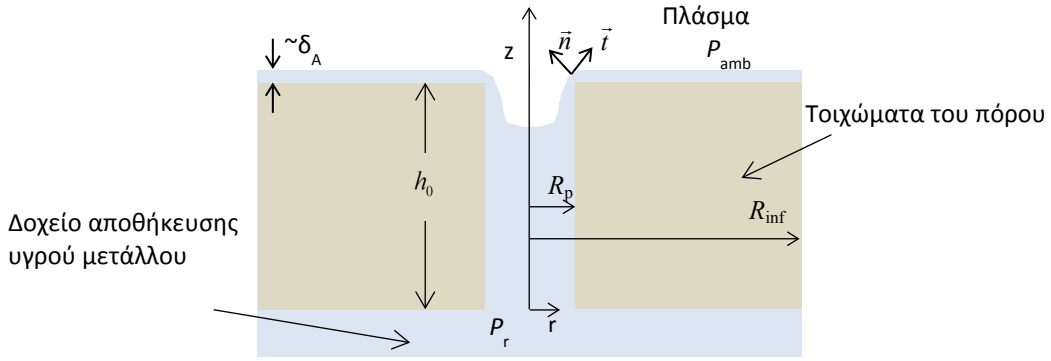
ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα εργασία μελετάται η ροή υγρού μετάλλου σε κατακόρυφο αγωγό και η διαδικασία επικάλυψης των άνω οριζοντίων τοιχωμάτων του αγωγού. Το υδροδυναμικό μέρος μοντελοποιείται μέσω των εξισώσεων Navier-Stokes και της εξίσωσης συνέχειας, ενώ στην ελεύθερη επιφάνεια επιβάλλεται η κινηματική και η δυναμική συνθήκη. Στην τελευταία σχέση, πέρα των όρων της πίεσης, των ιξωδών τάσεων και της επιφανειακής τάσης, έχει συμπεριληφθεί και η επίδραση των διαμοριακών δυνάμεων, καθώς το υγρό φιλμ έχει πάχος τάξεως μm ή και λιγότερο. Η επίλυση των εξισώσεων γίνεται με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων, θεωρώντας ένα πλήρως άρρητο σχήμα (Euler) για τις χρονικές παραγώγους. Στις προσομοιώσεις που διεξήχθησαν μια λύση της στατικής ισορροπίας διαταράσσεται με μεγαλύτερη υπερπίεση και μελετάται η εξέλιξη της στο χρόνο. Στην περιοχή των υπερπίεσεων που υπάρχει στατική λύση οι παραπάνω προσομοιώσεις οδηγούνται πάντα στη νέα στατική ισορροπία. Σε περιοχές που έχει παρατηρηθεί πολλαπλότητα στατικών λύσεων από μία αρχική σειρά προσομοιώσεων, οι λύσεις με σταθερό μήκος επαφής φαίνεται να επιλέγονται ως τελική κατάσταση ισορροπίας. Τέλος προσομοιώσεις διεξάγονται και σε περιοχές πιέσεων που δεν υπάρχει στατική ισορροπία, αλλά η σύγκλιση του μοντέλου συνήθως σταματάει μετά από μερικά χρονικά βήματα. Στην παρούσα φάση δοκιμάζονται διαφορετικά δυναμικά αλληλεπίδρασης, ώστε να διευκολυνθεί η κίνηση του υγρού.

Λέξεις Κλειδιά: Ροή ελεύθερης επιφάνειας, Μέθοδος των Πεπερασμένων Στοιχείων, Διαβροχή στερεών επιφανειών

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

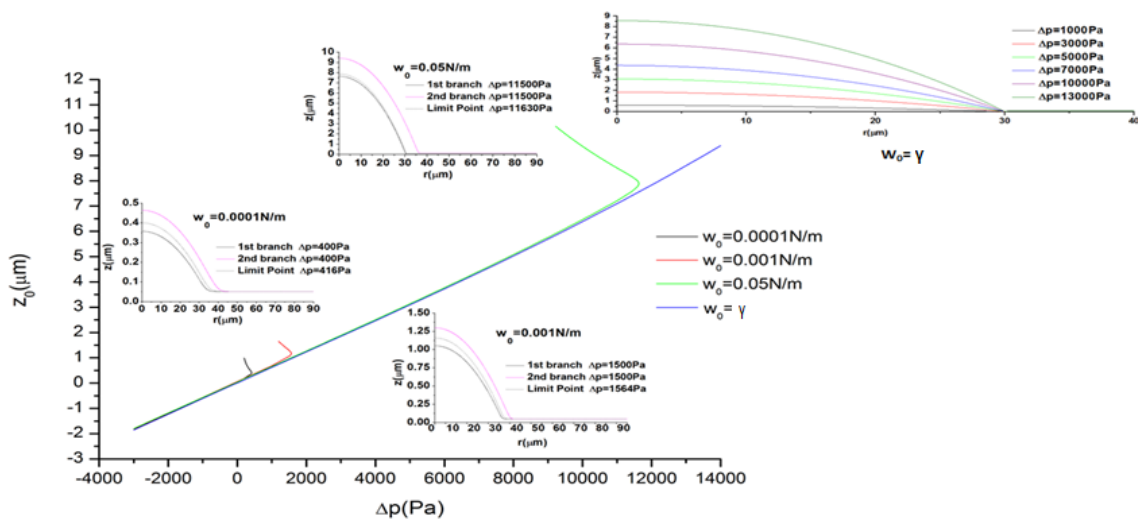
Η ολοένα και αυξανόμενη απαίτηση για ενέργεια στις σύγχρονες κοινωνίες έχει οδηγήσει στην ανάπτυξη τεχνολογιών για την παραγωγή ενέργειας, που πρέπει ταυτόχρονα να είναι όσο το δυνατόν πιο αποδοτικές, αλλά και φιλικές προς το περιβάλλον. Η παραγωγή ενέργειας μέσω σύντηξης έχει προταθεί ως μία εναλλακτική λύση, καθώς τα καύσιμα της είναι άφθονα στην φύση και τα απόβλητα της μη ραδιενεργά. Παραμένει ωστόσο μεγάλη πρόκληση στο να γίνει αποδοτική ως τεχνολογία και να παράγει περισσότερη ενέργεια από αυτή που καταναλώνει. Ένα από τα σημαντικά προβλήματα που καλείται να λύσει η επιστήμη είναι η θερμική θωράκιση των μεταλλικών τοιχωμάτων των δωματίων της σύντηξης. Για το σκοπό αυτό έχει προταθεί η διάταξη CPS (Capillary Porous System), στην οποία υγρό μέταλλο κινείται μέσω κατακόρυφων αγωγών και καλύπτει τα εξωτερικά τοιχώματα δημιουργώντας ένα λεπτό προστατευτικό φιλμ, σχήμα 1. Το υγρό μέταλλο είναι ικανό να απορροφήσει υψηλά ποσά της εκλυόμενης θερμότητας, να προστατεύσει το στερεό υπόστρωμα από την προσπίπτουσα ακτινοβολία, και τελικά να ψύξει την επιφάνεια μέσω εξάτμισης, Mirnov & Lazarev (2011). Η διάταξη CPS μελετάται διεθνώς για ερευνητικούς σκοπούς, όπου αναφέρεται πως είναι δυνατόν να γίνει ψύξη μέσω ενός υγρού φιλμ μετάλλου, Mirnov & Lazarev (2011), Mazzitelli et al. (2011). Γίνεται κατανοητό, πως για την βέλτιστη προστασία των τοιχωμάτων είναι απαραίτητο το



Σχήμα 1: Σχηματική αναπαράσταση της ροής υγρού μετάλλου σε κατακόρυφο αγωγό (πόρο).

υγρό μέταλλο πέρα από υψηλή θερμική αγωγιμότητα, να παρουσιάζει και καλές ιδιότητες επικάλυψης. Έτσι ώστε καθώς αυτό θα αναδύεται μέσω του πόρου να καλύπτει τα τοιχώματα σε ικανό μήκος χωρίς να εμφανίζονται «οπές», που θα αφήνουν γυμνό το τοίχωμα. Τέτοια μελέτη που αφορά την επικάλυψη των τοιχωμάτων έχει γίνει μέσω υπολογιστικού μοντέλου από τους Pelekasis & Benos (2017). Πιο συγκεκριμένα, μελετήθηκε η στατική ισορροπία υγρού μετάλλου πάνω από ένα πόρο για ένα μεγάλο εύρος υπερπίεσεων και διερευνήθηκε το τελικό σχήμα της διεπιφάνειας. Σε αυτό το πλαίσιο η στατική ισορροπία επιτυγχάνεται μέσα από την γενικευμένη Young-Laplace εξίσωση, όπου η διαφορά πίεσης εξισορροπείται πέραν της επιφανειακής τάσης και από τις διαμοριακές δυνάμεις, οι οποίες για σχετικά μικρά μήκη έχουν σημαντική συνεισφορά. Διαπιστώθηκε πως η πλειοψηφία των λύσεων χαρακτηρίζεται από σταθερό μήκος επαφής στο στόμιο του πόρου (fixed contact point), ενώ η γωνία επαφής σταδιακά αυξάνεται καθώς αυξάνει η πίεση του δοχείου αποθήκευσης (reservoir). Ωστόσο, σε σχετικά μεγάλες υπερπίεσεις παρατηρήθηκε ένας νέος κλάδος λύσεων που αντιστοιχεί σε σταθερή γωνία επαφής (fixed contact angle) και το πάχος του φιλμ είναι μεγαλύτερο από τις λύσεις που έχουν σταθερό μήκος επαφής, σχήμα 2. Επιπλέον, διαπιστώθηκε πως δεν ήταν δυνατό να επιτευχθεί στατική ισορροπία για σχετικά μεγάλες υπερπίεσεις, Benos (2018).

Σε αυτό το πλαίσιο, η παρούσα εργασία μελετά την δυναμική συμπεριφορά μέσω της κίνησης του υγρού μετάλλου σε ένα κατακόρυφο αγωγό αναπτύσσοντας ένα υπολογιστικό μοντέλο και σκοπός της είναι να μελετηθεί η ροή σε περιοχές πίεσεων για τις οποίες δεν κατέστη δυνατό να επιτευχθεί στατική ισορροπία, καθώς και σε περιοχές που παρατηρήθηκε πολλαπλότητα λύσεων (fixed contact point vs fixed contact angle).



Σχήμα 2: Διάγραμμα διακλάδωσης της θέσης της διεπιφάνειας πάνω στον άξονα συμμετρίας συναρτήσει της υπερπίεσης. (Το σχήμα παρατίθεται στην Διατριβή του Ε. Μπένου (2018)).

2. ΜΟΡΦΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

2.1 Διέπουσες εξισώσεις

Το υγρό μέταλλο, που κινείται στον κατακόρυφο αγωγό εξαιτίας της διαφοράς πίεσης μεταξύ του δοχείου αποθήκευσης και του περιβάλλοντος χώρου, θεωρείται ασυμπίεστο και ως εκ τούτου το φαινόμενο μπορεί να περιγραφεί από τις εξισώσεις Navier-Stokes και την εξίσωση συνέχειας:

$$We \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \cdot \vec{u} \right] = -\nabla \varphi + Ca \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \text{ με } \vec{u} = u_r \vec{e}_r + u_z \vec{e}_z, \underline{\underline{\tau}} = \nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T \text{ και } \varphi = P - P_r + Bo z, \text{ ενώ } \begin{cases} \varphi = 0, & \text{στατική ισορροπία} \\ \varphi \neq 0, & \text{δυναμική ισορροπία} \end{cases}$$

όπου θεωρούμε αξονική συμμετρία και ισοθερμοκρασιακές συνθήκες.

Στην ελεύθερη επιφάνεια επιβάλλεται η κινηματική συνθήκη:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u_r \frac{\partial f}{\partial r} = u_z, \quad f = f(r, t): \text{ το σχήμα της διεπιφάνειας} \quad (2)$$

καθώς επίσης και η ισορροπία των ορθών τάσεων ως δυναμική συνθήκη:

$$\left(\varphi - Bo f - P_{out} - \frac{\partial w}{\partial n} \right) \underline{\underline{I}} \cdot \vec{n} - Ca \underbrace{\vec{n} \cdot \underline{\underline{\tau}}}_{\tau_n} = \vec{\nabla}_s \cdot \vec{n} (1+w) \vec{n}, \quad \underline{\underline{I}} = \vec{n} \vec{n} \text{ και } P_{out} = P_{amb} - P_r \quad (3)$$

όπου P_{amb} και P_r είναι η πίεση του περιβάλλοντος και του δοχείου αποθήκευσης (reservoir), αντίστοιχα. Επιπλέον, ο όρος w εκφράζει ένα δυναμικό αλληλεπίδρασης των διαμοριακών δυνάμεων μεταξύ της ελεύθερης επιφάνειας και των τοιχωμάτων του πόρου, ενώ ο όρος $-\partial w/\partial n$ δηλώνει την πίεση απόσχισης (disjoining pressure). Στην παρούσα εργασία θεωρείται ένα δυναμικό που είναι ελκτικό σε μεγάλες αποστάσεις ($\delta > \delta_A$) και απωστικό σε σχετικά μικρές ($\delta < \delta_A$), Staron (2010), Pelekasis & Benos (2017).

$$\text{Δυναμικό αλληλεπίδρασης: } w(\delta) = w_0 \left[\left(\frac{\delta_A}{\delta} \right)^4 - 2 \left(\frac{\delta_A}{\delta} \right)^2 \right] \quad (4a)$$

$$\text{Disjoining Pressure: } \Pi = -\frac{\partial w}{\partial n} = \frac{4w_0}{\delta_A} \left[\left(\frac{\delta_A}{\delta} \right)^5 - \left(\frac{\delta_A}{\delta} \right)^3 \right] \frac{\partial \delta}{\partial n} \quad (4b)$$

όπου w_0 είναι η παράμετρος διαβροχής και δ_A είναι το χαρακτηριστικό μήκος, ενώ $\delta = \delta(r, f)$ είναι η ελάχιστη απόσταση μεταξύ της θέσης διεπιφάνειας και των τοιχωμάτων του πόρου, Benos (2018). Αξίζει να σημειωθεί πως το μέγεθος των διαμοριακών δυνάμεων είναι αμελητέο όταν βρισκόμαστε σε μεγάλες αποστάσεις, $\delta \gg \delta_A$. Ωστόσο, σε εφαρμογές λεπτών φιλμ και επικάλυψης οι διαστάσεις γίνονται αρκετά συγκρίσιμες με το χαρακτηριστικό μήκος δ_A με αποτέλεσμα να συνεισφέρουν στην διαμόρφωση της διεπιφάνειας.

Επιπλέον, τυπικές συνθήκες μη-ολίσθησης θεωρούνται στα ακίνητα τοιχώματα των ορίων του πεδίου της ροής και συμμετρίας κατά μήκος του άξονα z. Παράλληλα, το κάθετο και το εφαπτομενικό διάνυσμα πάνω στην διεπιφάνεια έχουν την μορφή:

$$\begin{pmatrix} \vec{n} \\ \vec{t} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1+f_r^2}} \begin{pmatrix} -f_r \vec{e}_r + \vec{e}_z \\ \vec{e}_r + f_r \vec{e}_z \end{pmatrix}; \quad f_r \equiv \frac{\partial f}{\partial r} \quad (5)$$

Τέλος, η αδιαστατοποίηση των εξισώσεων έγινε με την ακτίνα του πόρου, R_p , και την χαρακτηριστική ταχύτητα $U = \sigma R_p / (\mu h_0)$, όπου σ , μ και h_0 είναι η επιφανειακή τάση, το ιξώδες και το ύψος του πόρου, αντίστοιχα. Έτσι, προκύπτουν οι παρακάτω αδιάστατοι αριθμοί του προβλήματος:

$$x_i = \frac{\hat{x}_i}{R_p}, \quad We = \frac{\rho U R_p}{\sigma}, \quad Bo = \frac{\rho g R_p^2}{\sigma}, \quad Ca = \frac{\mu U}{\sigma}, \quad W_0 = \frac{w_0}{\sigma} \quad (6)$$

όπου ρ η πυκνότητα και g η επιτάχυνση της βαρύτητας. Επιπλέον, στην ανάλυση που ακολουθεί έχουν χρησιμοποιηθεί οι ακόλουθες τιμές παραμέτρων, $R_p = 30 \mu\text{m}$, $h_0 = 1 \text{mm}$, $\sigma = 0.3686 \text{N/m}$, $\mu = 2.287 \cdot 10^{-3} \text{Pa}\cdot\text{s}$, $\rho = 500 \text{kg/m}^3$, $\delta_A = 50 \text{nm}$ και $w_0 = 0.05 \text{N/m}$, που αντιστοιχούν σε υγρό λίθιο.

2.2 Αριθμητική μεθοδολογία

Οι παραπάνω εξισώσεις διακριτοποιούνται με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων για την χωρική εξάρτηση, ενώ θεωρείται ένα πλήρως άρρητο σχήμα Euler για τις χρονικές παραγώγους. Πιο συγκεκριμένα, οι ταχύτητες διακριτοποιούνται μέσω των δι-τετραγωνικών Lagrange συναρτήσεων βάσης (Φ^j), η πίεση μέσω των δι-γραμμικών (Ψ^j) και η θέση της διεπιφάνειας μέσω των μονοδιάστατων b-cubic splines (B^j):

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{j=1}^9 \vec{u}^j \Phi^j(\xi, \eta), \varphi(\vec{x}, t) = \sum_{j=1}^4 \varphi^j \Psi^j(\xi, \eta) \ \& \ f(\xi, t) = \sum_{j=1}^4 c_f^j B^j(\xi) \quad (7)$$

όπου \vec{u}^j και φ^j οι τιμές της ταχύτητας και της πίεσης στους κόμβους του στοιχείου, ενώ c_f^j οι συντελεστές της αναπαράστασης spline. Αξίζει να σημειωθεί πως οι c_f^j δεν ταυτίζονται με τις τιμές της διεπιφάνειας, ενώ απαιτούνται δύο φανταστικοί κόμβοι εκατέρωθεν αυτής για τους οποίους εφαρμόζονται συνοριακές συνθήκες της μορφής $\partial f / \partial \xi = 0$. Αρχικά, η διακριτοποιημένη μορφή των Navier-Stokes εξισώσεων και της εξίσωσης συνέχειας είναι:

$$-\int_V \Phi_i We \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \cdot \vec{u} \right] \cdot \vec{e}_k dV - \int_V \Phi_i \bar{\nabla} \cdot \varphi \cdot \vec{e}_k dV + \int_V \Phi_i Ca \bar{\nabla} \cdot \underline{\underline{\tau}} \cdot \vec{e}_k dV = 0 \quad (8\alpha-\beta)$$

$$\int_V \Psi_i \bar{\nabla} \cdot \vec{u} dV = 0 \quad (8\gamma)$$

όπου $dV = r dr dz d\varphi$ είναι ο διαφορικός όγκος και $\vec{e}_k = \vec{e}_r$ ή \vec{e}_z . Ολοκληρώνοντας κατά παράγοντες τις εξισώσεις (8α-β), προκύπτει η ασθενής μορφή των Navier-Stokes, ενώ η εξίσωση συνέχειας (8γ) παραμένει ως έχει:

$$-We \int_A \Phi_i \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \cdot \vec{u} \right] \cdot \vec{e}_k dA + \int_A \varphi \bar{\nabla} \cdot (\Phi_i \vec{e}_k) dA - Ca \int_A \underline{\underline{\tau}} : \bar{\nabla} (\Phi_i \vec{e}_k) dA + \oint_s \vec{n} \cdot (\underline{\underline{\tau}} - \varphi \underline{\underline{I}}) \cdot \vec{e}_k r ds = 0 \quad (9\alpha-\beta)$$

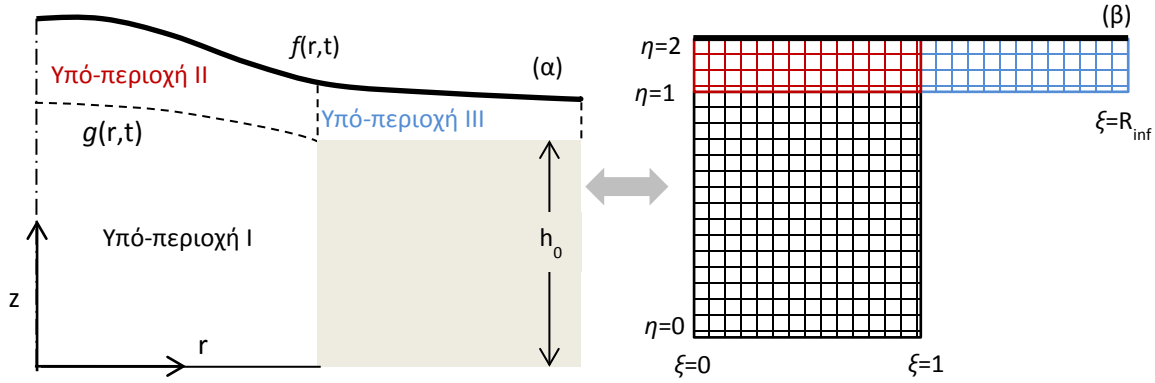
όπου λόγω αξονικής συμμετρίας η ολοκλήρωση στην φ διεύθυνση απαλείφεται. Επιπλέον, το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα στην εξίσωση (9α-β) αναφέρεται στα όρια του πεδίου ροής. Ωστόσο, στα στερεά τοιχώματα και κατά μήκος του άξονα συμμετρίας επιβάλλονται Dirichlet συνοριακές συνθήκες ($\vec{u} = 0$) που αντικαθιστούν τις Navier-Stokes. Τέλος, εξαιτίας της επιλογής να χρησιμοποιηθούν οι κυβικές splines για την περιγραφή της διεπιφάνειας, η δυναμική συνθήκη δεν αντικαθιστά τους όρους του επικαμπύλιου ολοκληρώματος, όπως γίνεται συνήθως για ισοπαραμετρικά προβλήματα. Αντ' αυτού, η δυναμική συνθήκη χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της διεπιφάνειας. Η κινηματική επιβάλλεται στους κόμβους της διεπιφάνειας για την ανανέωση της αξονικής ταχύτητας και για την εγκάρσια στην διεπιφάνεια θεωρούμε την εφαπτομενική συνιστώσα των Navier-Stokes, Saito and Scriven (1981):

$$-We \int_A \Phi_i \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \cdot \vec{u} \right] \cdot \vec{t} dA + \int_A \varphi \bar{\nabla} \cdot (\Phi_i \vec{t}) dA - Ca \int_A \underline{\underline{\tau}} : \bar{\nabla} (\Phi_i \vec{t}) dA = 0 \quad (10\alpha-\beta)$$

όπου το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα $\oint_s \vec{n} \cdot (\underline{\underline{\tau}} - \varphi \underline{\underline{I}}) \cdot \vec{t} r ds$ μηδενίζεται καθώς δεν υπάρχουν τάσεις στην εφαπτομενική διεύθυνση, όπως πχ Marangoni ή ελαστικές.

Επιπλέον, η ασθενής μορφή της κινηματικής συνθήκης είναι:

$$\int_A B_i \left(\frac{\partial f}{\partial t} + u_r \frac{\partial f}{\partial r} - u_z \right) r ds = 0 \quad (11)$$



Σχήμα 3: Αναπαράσταση (α) του φυσικού πεδίου και (β) του υπολογιστικού πεδίου ροής. Η αναπαράσταση των υπό-περιοχών αποτυπώνεται με το ίδιο χρώμα.

όπου δεν απαιτείται ολοκλήρωση κατά παράγοντες, καθώς οι κυβικές splines εγγυώνται συνέχεια μέχρι και την δεύτερη παράγωγο. Το μήκος τόξου πάνω στην διεπιφάνεια είναι $ds = (1 + f_r^2)^{0.5}$.

Οι χρονικές παράγωγοι του προβλήματος υπολογίζονται με κατάντη διαφορές:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = \frac{\bar{u}^N - \bar{u}^{N-1}}{\Delta t} \quad \text{και} \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f^N - f^{N-1}}{\Delta t} \quad (12)$$

όπου N και $N-1$ είναι η τρέχουσα και η προηγούμενη χρονική στιγμή, αντίστοιχα. Στις παραπάνω εξισώσεις όλοι οι υπόλοιποι όροι πέραν των χρονικών παραγώγων έχουν υπολογισθεί στην τρέχουσα χρονική στιγμή, καθιστώντας το σχήμα πλήρως άρρητο, ενώ ο συμβολισμός έχει παραλειφθεί για λόγους απλότητας.

Το πεδίο ροής χωρίζεται σε τρεις υπό-περιοχές και το υπολογιστικό πλέγμα παράγεται μέσω της μεθόδου spine, Saito and Scriven (1981), εισάγοντας κατάλληλους μετασχηματισμούς για κάθε υπό-περιοχή, βλ. σχήμα 3(α) και (β). Πιο συγκεκριμένα, η αξονική συντεταγμένη η του υπολογιστικού πεδίου γράφεται:

$$\begin{aligned} \text{Region I: } \eta &= \frac{z}{g} \\ \text{Region II: } \eta &= \frac{z - 2g + f}{f - g} \\ \text{Region III: } \eta &= \frac{z - 2h_0 + f}{f - h_0}, \quad \text{όπου } f = f(r, t) \text{ και } g = f - f(1, t) + h_0 \end{aligned} \quad (13)$$

ενώ δεν απαιτείται μετασχηματισμός της εγκάρσιας συντεταγμένης ($\xi = r$) ή του χρόνου ($\tau = t$). Οι παραπάνω μετασχηματισμοί εισάγουν επιπλέον αλλαγές τόσο στις χωρικές όσο και στις χρονικές παραγώγους, οι οποίες υπολογίζονται μέσω του κανόνα της αλυσίδας, καθώς οι ανεξάρτητες μεταβλητές είναι πλέον οι (τ, ξ, η) .

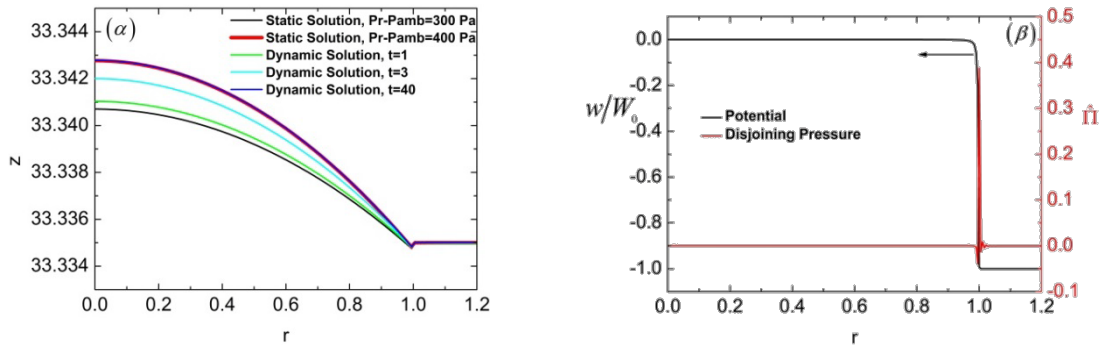
$$\frac{\partial \bullet}{\partial r} = \frac{\partial \bullet}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial r} \frac{\partial \bullet}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial \bullet}{\partial z} = \frac{\partial \eta}{\partial z} \frac{\partial \bullet}{\partial \eta}, \quad \text{και} \quad \frac{\partial \bullet}{\partial t} = \frac{\partial \bullet}{\partial \tau} + \frac{\partial \eta}{\partial t} \frac{\partial \bullet}{\partial \eta} \quad (14)$$

Η επίλυση του μη-γραμμικού συστήματος των εξισώσεων γίνεται με την επαναληπτική μέθοδο Newton-Raphson και το τελικό πρόβλημα παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$\underline{\underline{J}} \cdot \delta \bar{x} = -\bar{R} \quad (15)$$

όπου $\underline{\underline{J}}$ είναι ο πίνακας της ιακωβιανής, το διάνυσμα $\delta \bar{x}$ περιέχει την ανανέωση της λύσης και \bar{R} είναι το διάνυσμα των υπολοίπων.

Ο κώδικας fortran που αναπτύχθηκε για την υλοποίηση του παραπάνω super-parametric μοντέλου έχει ελεγχθεί για την αξιοπιστία του συγκρίνοντας με αποτελέσματα της στατικής ισορροπίας Benos (2018). Αρχικά, θεωρείται μία στατική λύση με $P_r - P_{amb} = 300$ Pa, στην οποία επιβάλλεται διαταραχή

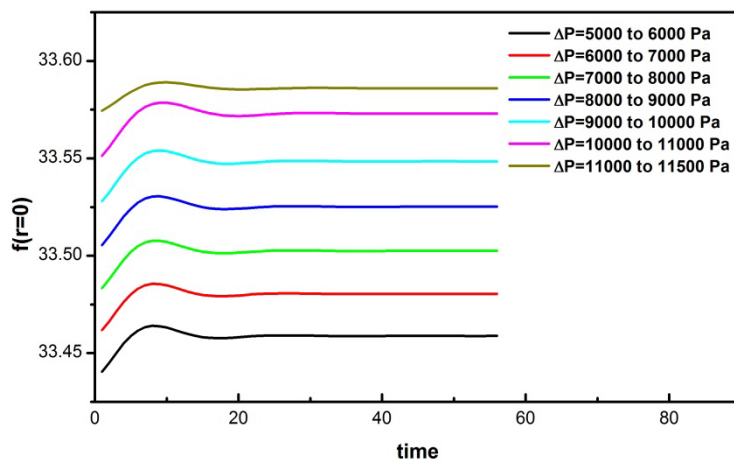


Σχήμα 4: (α) Στιγμιότυπα της εξέλιξης του σχήματος της διεπιφάνειας και (β) Κατανομή του δυναμικού αλληλεπίδρασης, και της πίεσης απόσχισης, $\hat{\Pi} = (-\partial w / \partial n) \delta_A / w_0$, στο $t=40$ κατά μήκος της διεπιφάνειας. Παράμετροι προσομοίωσης: Στοιχεία στην r διεύθυνση 210, στοιχεία στην z 100, $dt=1$, $We=0.95$, $Ca=0.03$, $Bo=10^{-5}$, $W_0=0.14$.

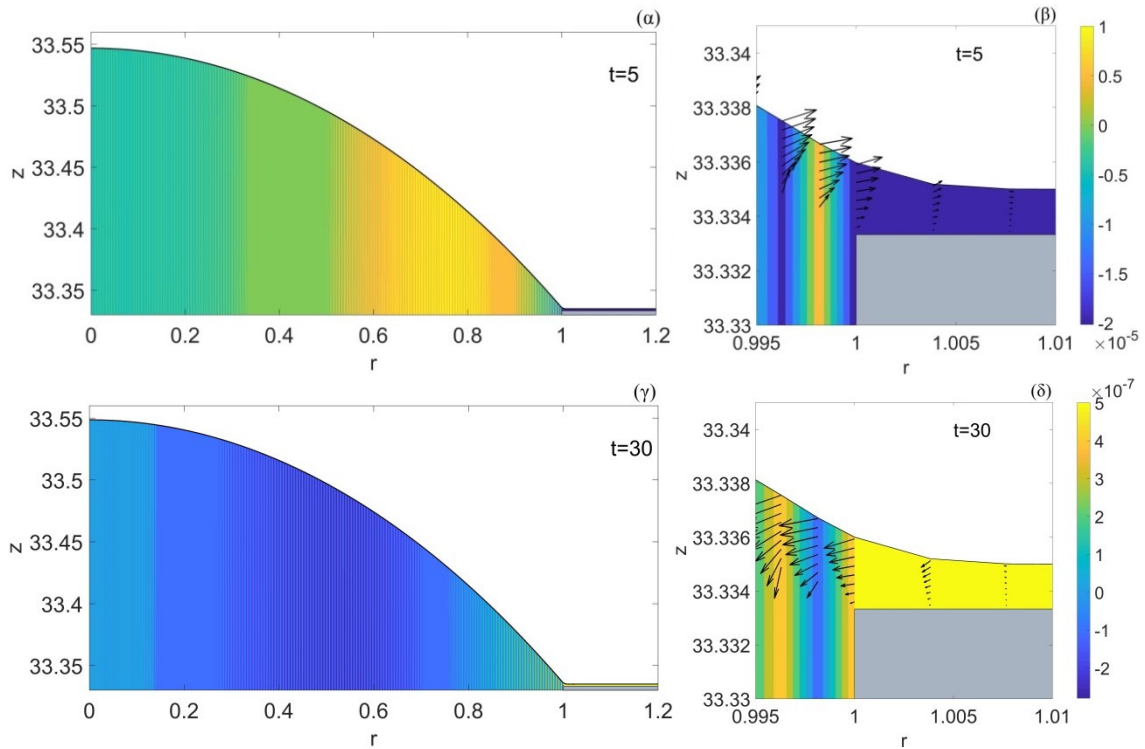
$P_r - P_{amb} = 400$ Pa και μελετάται η εξέλιξή της στον χρόνο, σχήμα 4(α). Έπειτα από μερικά χρονικά βήματα το σχήμα της διεπιφάνειας σταθεροποιείται και είναι το ίδιο με αυτό που προβλέπει η στατική ισορροπία. Στο σχήμα 4(β) αναπαρίσταται η κατανομή του δυναμικού αλληλεπίδρασης και της πίεσης απόσχισης. Στην περιοχή $0 < r < 1$ και οι δύο κατανομές είναι σχεδόν μηδέν λόγω της σχετικά μεγάλης απόστασης της διεπιφάνειας και των τοιχωμάτων του πόρου. Στην περιοχή $1 < r < 1.2$ το δυναμικό παίρνει την χαρακτηριστική τιμή $-W_0$, που δηλώνει ότι το πάχος της επικάλυψης σε αυτή την περιοχή είναι $\sim \delta_A (=50$ nm). Παράλληλα, η πίεση απόσχισης έχει ένα θετικό μέγιστο στο $r=1$ (άπωση), καθώς εκεί το φιλμ έχει ύψος μικρότερο από την τιμή δ_A . Επιπλέον, η πίεση απόσχισης στην περιοχή $1 < r < 1.2$ έχει μια πολύ μικρή και αρνητική τιμή (έλξη), η οποία ωστόσο ικανοποιεί το ισοζύγιο κάθετων τάσεων στην στατική ισορροπία για την επιβαλλόμενη υπερπίεση.

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Αρχικά, μελετάται η συμπεριφορά ξεκινώντας από μία στατική λύση, όπου αλλάζουμε την υπερπίεση και παρατηρούμε την εξέλιξη της ροής στο χρόνο. Στο σχήμα 5 φαίνεται η εξέλιξη της θέσης της διεπιφάνειας πάνω στον άξονα συμμετρίας ($r=0$) για μια σειρά προσομοιώσεων που έγιναν για διαφορετική διαταραχή της πίεσης. Σε όλες τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν φαίνεται μια ομαλή αλλαγή της θέσης, η οποία γρήγορα εξομαλύνεται και τελικά σταθεροποιείται στην νέα στατική λύση.

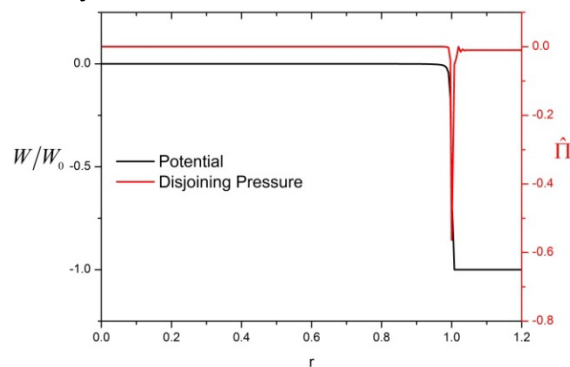


Σχήμα 5: Εξέλιξη της θέσης της διεπιφάνειας πάνω στον άξονα συμμετρίας, $f(r=0)$, για διαφορετικές τιμές της εξωτερικής υπερπίεσης, $\Delta P = P_{amb} - P_r$. Παράμετροι προσομοίωσης: Στοιχεία στην r διεύθυνση 210, στοιχεία στην z 80, $dt=1$, $We=0.95$, $Ca=0.03$, $Bo=10^{-5}$, $W_0=0.14$.

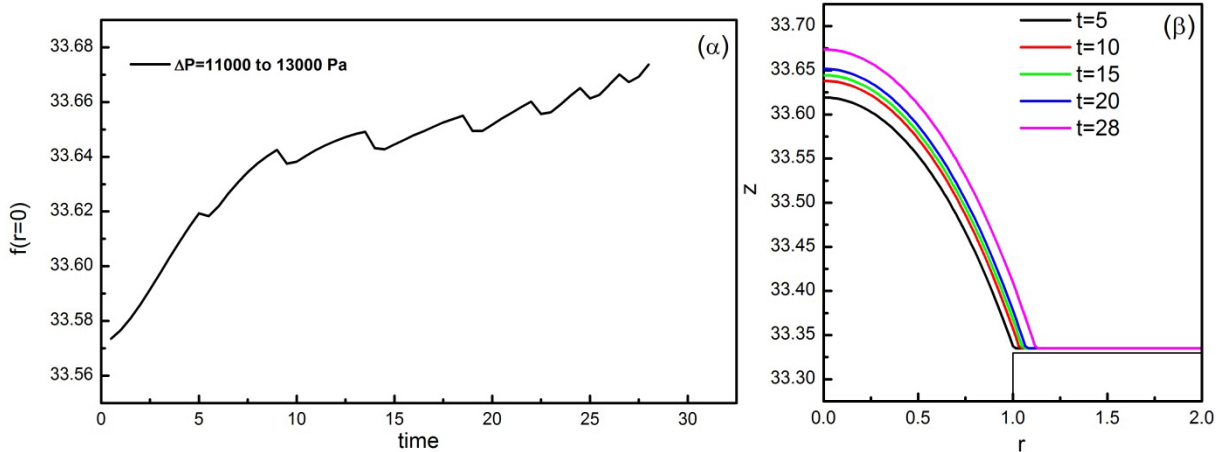


Σχήμα 6: (α)-(δ) Ισοϋψείς της ροϊκής συνάρτησης στο φυσικό πεδίο για τις χρονικές στιγμές $t=5$ και 30 , αντίστοιχα. Τα γραφήματα αναφέρονται στην περίπτωση όπου η υπερπίεση αυξάνεται από 9000 σε 10000 Pa. Στην δεξιά στήλη παρατίθεται η ροϊκή συνάρτηση για τις ίδιες χρονικές στιγμές με έμφαση στην περιοχή των τοιχωμάτων. Το τοίχωμα του πόρου αναπαρίσταται με γκρι χρώμα στην περιοχή $r=1-1.2$.

Η αλλαγή του σχήματος συνοδεύεται, όπως αναμένεται, και από κίνηση του ρευστού στον κύριο όγκο του. Στο σχήμα 6 φαίνεται η ροϊκή συνάρτηση για δύο χρονικές στιγμές. Στα πρώτα χρονικά βήματα παρατηρείται κυρίως αξονική κίνηση στην περιοχή του πόρου και εγκάρσια κίνηση στην μεταβατική περιοχή μεταξύ πόρου και τοιχωμάτων. Στην περιοχή των τοιχωμάτων το ρευστό παραμένει σχεδόν ακίνητο. Στο τέλος της προσομοίωσης οι ταχύτητες πρακτικά μηδενίζονται, αφού η λύση έχει πια σταθεροποιηθεί στην στατική ισορροπία. Επιπλέον, η πίεση απόσχισης και η κατανομή του δυναμικού είναι παρόμοια με το σχήμα 4(β) με την διαφορά πως η πίεση απόσχισης είναι αρνητική (ελκτική) κοντά στο $r=1$ καθώς εκεί η σχετική απόσταση της διεπιφάνειας από το τοίχωμα είναι οριακά μεγαλύτερη από το χαρακτηριστικό μήκος δ_A , σχήμα 7. Η κατανομή τόσο του δυναμικού όσο και της πίεσης απόσχισης στα υπόλοιπα χρονικά βήματα είναι παρόμοιας μορφής, αφού η διεπιφάνεια κοντά στα τοιχώματα δεν αλλάζει σημαντικά με το χρόνο. Αντιθέτως, κοντά στον άξονα συμμετρίας που αλλάζει πιο έντονα, η σχετική απόσταση είναι ήδη πολύ μεγάλη με αποτέλεσμα και οι δύο κατανομές να είναι μηδενικές.



Σχήμα 7: Κατανομή του δυναμικού αλληλεπίδρασης και της πίεσης απόσχισης για την χρονική στιγμή $t=30$. Το γράφημα αναφέρεται στην περίπτωση όπου η υπερπίεση αυξάνεται από 9000 σε 10000 Pa.



Σχήμα 8: (α) Χρονική εξέλιξη της θέσης της διεπιφάνειας στο $r=0$ αυξάνοντας την υπερπίεση από 11000 σε 13000 Pa. (β) Αναπαράσταση του σχήματος της διεπιφάνειας για επιλεγμένες χρονικές στιγμές. Παράμετροι προσομοίωσης: Στοιχεία στην r διεύθυνση 120, στοιχεία στην z 100, $dt=0.5$, $We=0.95$, $Ca=0.03$, $Bo=10^{-5}$, $W_0=0.14$.

Ακόμη, στις προσομοιώσεις που διεξήχθησαν επιβλήθηκε διαταραχή από $\Delta P=11000$ Pa σε 11500, με την αρχική λύση να έχει σταθερό μήκος επαφής. Όπως διαπιστώθηκε, η τελική στατική λύση στα 11500 Pa χαρακτηρίζεται επίσης από το σταθερό μήκος, κίτρινη καμπύλη στο σχήμα 5. Ο έλεγχος έγινε για να παρουσιασθεί μια πρώτη μορφή της σχετικής ευστάθειας των κλάδων που έχει εντοπισθεί στο πλαίσιο της στατικής ισορροπίας από τον Pelekasis & Benos (2017), Benos (2018). Η πολλαπλότητα των λύσεων αποτυπώνεται στο σχήμα 2. Πιο συγκεκριμένα, οι στατικές λύσεις όπου το ρευστό βρίσκεται μέσα στον πόρο (σταθερό μήκος επαφής) αποτυπώνεται στον χαμηλότερο κλάδο πριν το limit point, ενώ μετά από αυτό εντοπίστηκαν λύσεις όπου το ρευστό έχει βγει εκτός πόρου (σταθερή γωνία επαφής). Τέλος, παρόμοια λογική ακολουθήθηκε και για λύσεις με σταθερή γωνία επαφής, ωστόσο εκεί οι προσομοιώσεις διακόπτονταν έπειτα από κάποιο χρονικό βήμα και πριν επιτευχθεί στατική ισορροπία με κατάρρευση της σύγκλισης.

Τέλος, στο σχήμα 8(α) φαίνονται πρώτα αποτελέσματα για εξέλιξη της λύσης σε περιοχή υπερπίεσης πάνω από το οριακό σημείο, $\Delta P=11630$ Pa, όπου δεν μπορεί να επιτευχθεί στατική ισορροπία. Αξίζει να σημειωθεί ότι για αυτή την προσομοίωση θεωρήθηκε $R_{inf}=2$, διότι για $R_{inf}<2$ δεν ήταν δυνατό να επιτευχθεί σύγκλιση. Η λύση είναι επί του παρόντος σε εξέλιξη, αλλά αξίζει να σημειωθεί πως στα πρώτα σχήματα διαπιστώνεται μία τάση του ρευστού να βγει προς τα έξω, σχήμα 8(β).

4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Το μοντέλο που παρουσιάζεται στην παρούσα εργασία αποτελεί μια πρώτη προσπάθεια για την περιγραφή της διαδικασίας επικάλυψης των τοιχωμάτων μιας CPS συσκευής μέσω ενός δυναμικού μοντέλου. Η αξιοπιστία του μοντέλου έχει επιβεβαιωθεί με την ανάκτηση της στατικής λύσης, ωστόσο χρειάζεται περαιτέρω έλεγχος και με άλλα παρόμοια προβλήματα που αφορούν την εξάπλωση (spreading) υγρών πάνω σε στερεές επιφάνειες, όπως Kalliadasis and Chang (1996) και Miller & Ruckenstein (1974). Το δυναμικό μοντέλο φαίνεται να ανταποκρίνεται σωστά στην περιοχή των πιέσεων όπου έχει επιτευχθεί στατική ισορροπία. Στη σειρά προσομοιώσεων που διεξήχθη σε αυτή την περιοχή η θέση της διεπιφάνειας μετακινείται σε μεγαλύτερη θέση, καθώς αυξάνεται η υπερπίεση. Τελικά όλες καταλήγουν στο σχήμα που προβλέπει η στατική λύση.

Επιπλέον, διαπιστώθηκε πως ξεκινώντας από μία λύση με σταθερό μήκος επαφής και διαταράσσοντάς σε μια περιοχή που υπάρχουν δύο στατικές λύσεις, επιλέχθηκε αυτή με το σταθερό μήκος επαφής έναντι αυτής με την σταθερή γωνία επαφής. Πρέπει να σημειωθεί ωστόσο, ότι εδώ απαιτείται να γίνει ανάλυση ευστάθειας, ώστε να μελετηθεί η φύση των δύο λύσεων.

Τέλος, στις μεγάλες πιέσεις πάνω από το οριακό σημείο της στατικής ισορροπίας, παρατηρείται μια δυσκολία στην επίτευξη λύσης. Από τα πρώτα αποτελέσματα αναμένεται ότι εδώ θα παρουσιαστεί μια δυναμική συμπεριφορά που θα οδηγήσει περισσότερο υγρό μέταλλο στα άνω τοιχώματα του CPS.

Ωστόσο, η επιλογή του κατάλληλου δυναμικού αλληλεπίδρασης είναι κεντρικής σημασίας, καθώς δεν περιγράφει μόνο την φύση των επιφανειών που αλληλεπιδρούν, αλλά τελικά καθορίζει και το σχήμα της διεπιφάνειας. Στην παρούσα φάση, το ερευνητικό ενδιαφέρον επικεντρώνεται στην δοκιμή και άλλων δυναμικών αλληλεπίδρασης, τα οποία θα επιτρέψουν την καλύτερη εξάπλωση του υγρού πάνω στην στερεή επιφάνεια, καθώς και στον έλεγχο της συμπεριφοράς στις μεγαλύτερες πιέσεις.

Ευχαριστίες: Η παρούσα εργασία υλοποιείται στο πλαίσιο του Ευρωπαϊκού Προγράμματος Eurofusion.

Βιβλιογραφία

Mirnov S.V. and Lazarev V.B., (2011), "Li experiments at the tokamak T-11 M in field of steady state PFC investigations", J. Nuclear Materials 415, p. s417-s420.

Mazzitelli G., Apicella M.L., Alexeyev A. and FTU Team (2011), "Heat loads on FTU liquid lithium limiter", Fusion Eng. Des. 86, p. 580-583.

Pelekasis N. and Benos L., (2017), "Static Arrangement of a Capillary Porous System (CPS): Modelling", Fusion Eng. Des. 117, p. 180-187.

Benos L., (2018), "First principles study of the static arrangement of a plasma facing component in the form of a capillary porous system (CPS) ", PhD Thesis, University of Thessaly.

Starov V.M. (2010), "Surface forces action in a vicinity of three phase contact line and other current problems in kinetics of wetting and spreading", Adv. Colloid Interface Sci. 161, p.139-152.

Saito H. and Scriven L., (1981), "Study of coating flow by the finite element method", J. Comput. Phys. 42, p. 53-76.

Kalliadasis S. and Chang H.C., (1996), "Dynamics of Liquid Spreading on Solid Surfaces", Ind. Eng. Chem. Res. 35, p. 2860-2874.

Miller C.A. and Ruckenstein E., (1974), "The origin of Flow during Wetting of Solids", J. Colloid Interface Sci., 48, p. 368-373.

NUMERICAL STUDY OF THE FREE SURFACE FLOW OF A LIQUID METAL IN A VERTICAL TUBE

In the present study the flow of a liquid metal in a vertical tube and the spreading process across the upper walls of the tube are investigated. This type of problem can describe the flow in a Capillary Porous System (CPS) that has been proposed for the thermal isolation of a fusion reactor, Mirnov and Lazarev (2011), Mazzitell et al. (2011). The hydrodynamic problem is governed by the Navier-Stokes equations and the continuity equation, while the kinematic and dynamic conditions are applied on the free surface. The last equation except the pressure, viscosity and surface tension terms contains also the intermolecular forces in order to account their effect, since the height of the liquid film is in the order of sub-microns, Pelekasis and Benos (2017), Benos (2018), Starov (2010). The equations are discretized with the finite element method and a fully implicit scheme (Euler) is considered for time derivatives, Saito and Scriven (1981). A static solution is disturbed with a higher overpressure and the evolution in time is investigated. In the pressure regime, where static solutions have been obtained, the dynamic evolution ends up in the new static configuration. At higher overpressures, a multiplicity of solutions has been previously detected corresponding to fixed contact point or fixed contact length, Pelekasis and Benos (2017). An initial investigation shows that disturbing a static solution to a pressure that both solutions are possible, the preferable was the one with the fixed contact point. Simulations where a static fixed contact angle solution was disturbed failed to converge. Stability analysis is required here to describe the relevant importance of each solution. Finally, simulations at relatively high overpressures are also performed, but the convergence most of the time breaks after some time steps. This overpressure regime is beyond the limit point of the static solution space, thus static equilibrium cannot be obtained, Pelekasis and Benos (2017). However, from preliminary results we expect a dynamic-contact-angle type response, where the liquid metal spreads out across the wall. Currently, we investigate the possibility of using different interaction potentials, Miller & Ruckenstein (1974), in order to facilitate the motion of the liquid metal and describe with the appropriate function the spreading process, see also Kalliadasis and Chang (1996).