

Vliv diskretizace konvekčních členů VoF-Navier-Stokesových rovnic při simulaci kapilaritou řízených dějů



Jakub Smutek

VŠCHT Praha,
Ústav Matematiky



2. Seminář VŠCHT k OpenFOAM,
Praha 13. Prosince



Teoretický úvod



Motivace k výzkumu

Čím se zabýváme?



[Sulzer ChemTech]



Motivace k výzkumu

Proč?



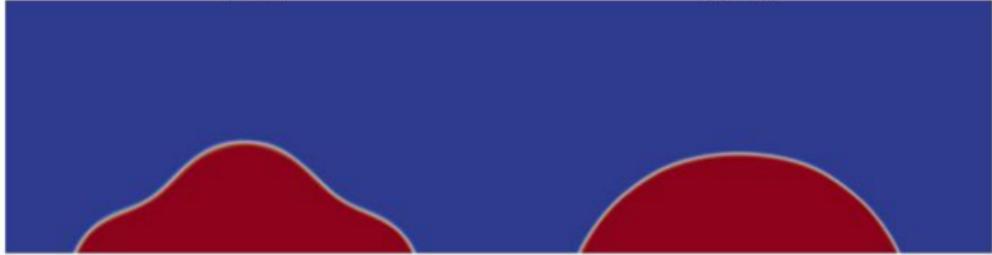
VanLeer



SuperBee



MUSCL



Gamma



Navier-Stokesovy rovnice a metoda Volume of Fluid

$$\nabla \cdot (\mathbf{U}) = 0$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) + \nabla \cdot [\alpha(1-\alpha) \mathbf{U}_r] = 0$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{U}) = -\nabla p_d - \vec{g} \cdot \vec{x} \nabla \rho + \sigma \kappa \nabla \alpha$$

$$\mu = \mu_A \alpha + \mu_B (1 - \alpha)$$

$$\rho = \rho_A \alpha + \rho_B (1 - \alpha)$$



Počáteční podmínky

$$\mathbf{U}(x, y, z, 0) = (0, 0, 0)$$

$$p(x, y, z, 0) = 0$$



Horní okraj domény

$p...totalPressure$

$\mathbf{U}...pressureInletOutletVelocity$

$\alpha...inletOutlet$

Dolní okraj domény

$p...zeroGradient$

$\mathbf{U} = (0, 0, 0)$

$\alpha...zeroGradient$

$\theta = \theta_0 + (\theta_R - \theta_A) \tanh \frac{u_{wall}}{u_\theta}$

Boční okraje domény

$p...zeroGradient$

$\mathbf{U}...inletOutlet$

$\alpha...inletOutlet$

Diskretizace konvekčního členu

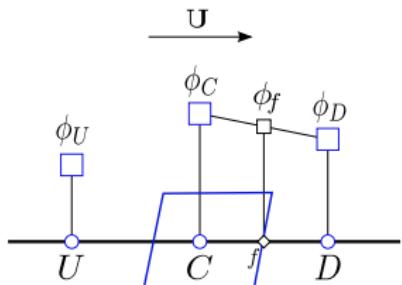


$$\frac{\partial \rho\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi \mathbf{U}) - \nabla \cdot (D\nabla\phi) = S$$

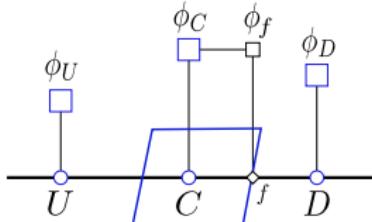
$$\iiint_{V_P} \nabla \cdot (\rho\phi \mathbf{U}) dV = \iint_{S_P} (\rho\phi \mathbf{U}) \cdot d\vec{S}$$

$$\iint_S (\rho\phi \mathbf{U}) d\vec{S} = \sum_f \iint_{f_i} \rho\phi \mathbf{U} \cdot d\vec{S}$$

$$\sum_f \iint_{f_i} \rho\phi \mathbf{U} d\vec{S} \doteq \sum_f \rho\phi_f (\mathbf{U}_f \cdot \vec{S}_f)$$



CD Schéma



Upwind Schéma

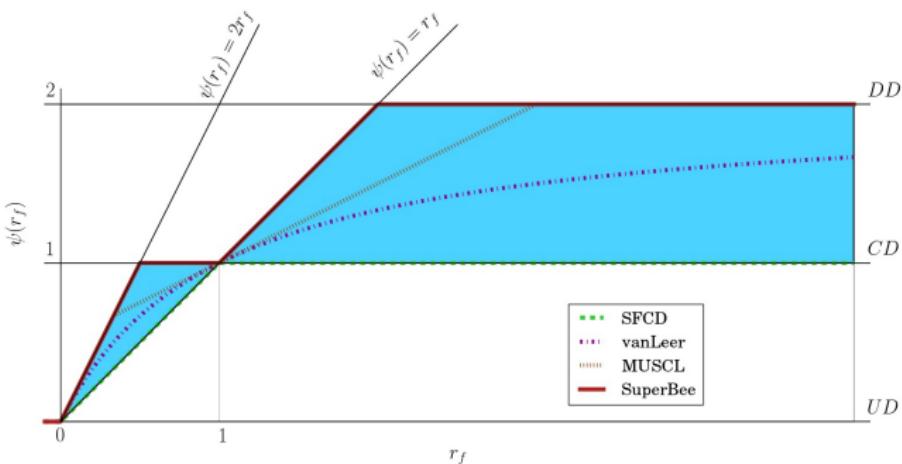
High resolution schémata

Total variations diminishing



- High Resolution schémata kombinují přesnost CD schématu a omezenost upwind schématu

$$\phi_f(TVD) = \phi_C + \frac{1}{2}\psi(r_f)(\phi_D - \phi_C)$$



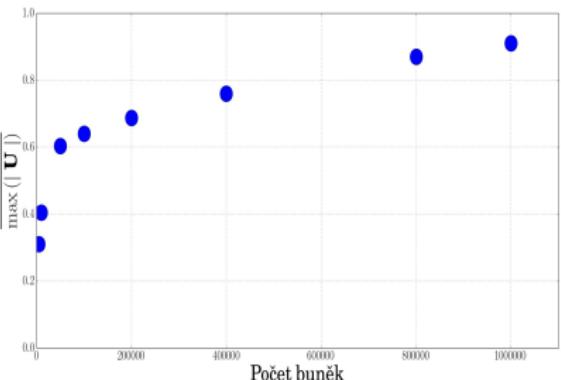
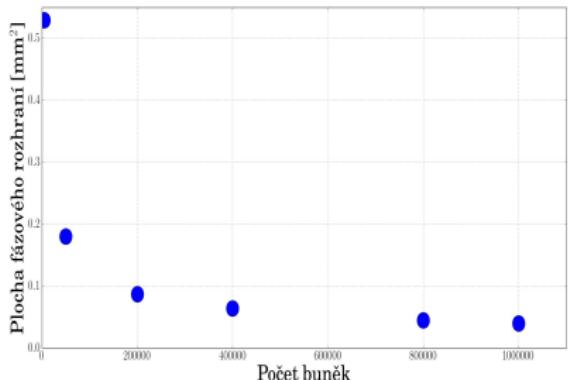
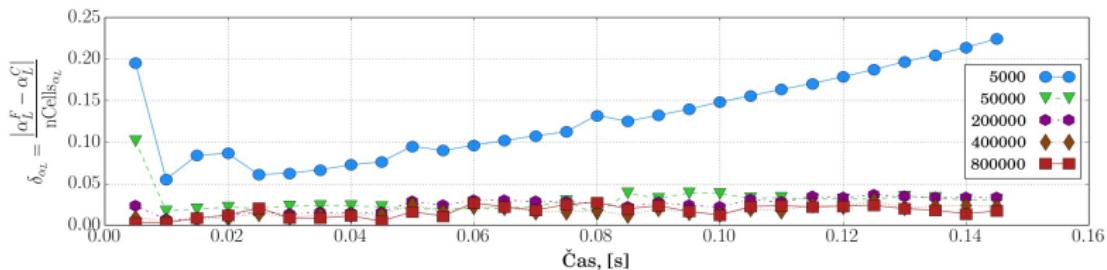


Výsledky



Diskretizační síť

Studie nezávislosti řešení na jemnosti sítě

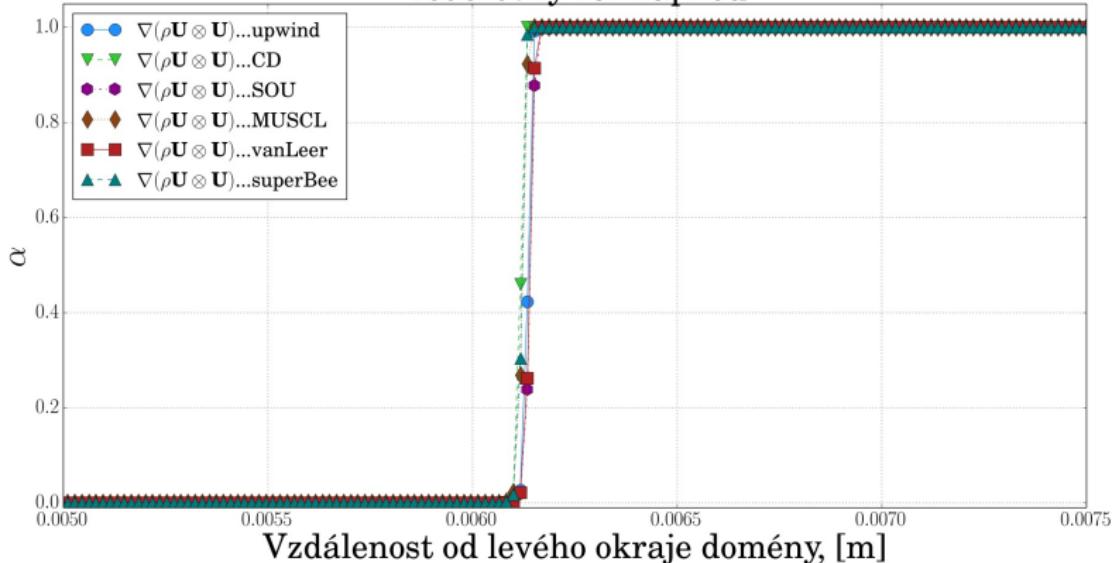


Diskretizace členu $\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U})$

Stacionární kapka



Vodorovný řez kapkou

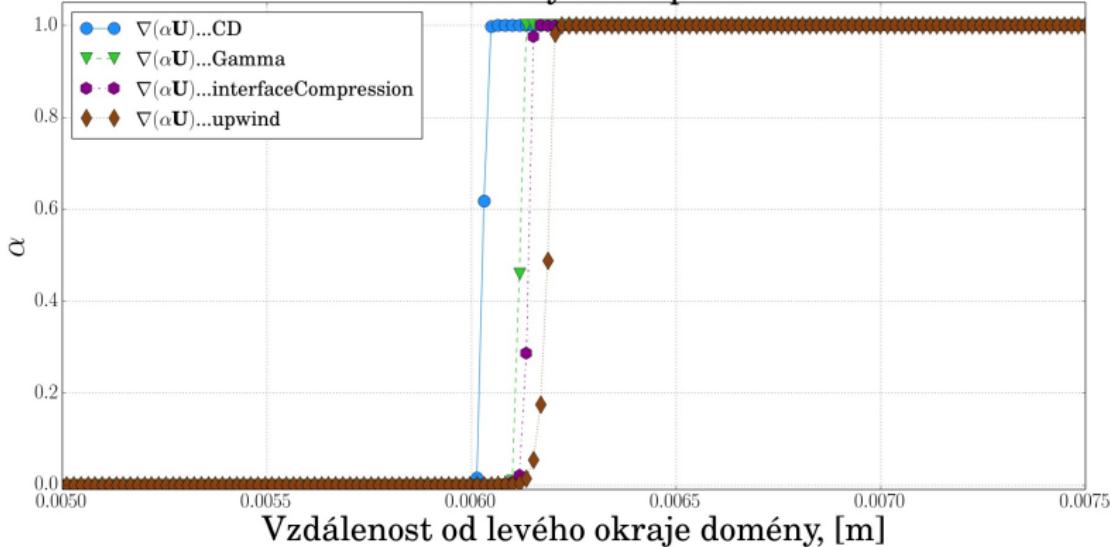


Diskretizace členu $\nabla \cdot (\alpha \mathbf{U})$ a $\nabla \cdot (\alpha(1 - \alpha) \mathbf{U}_r)$

Stacionární kapka

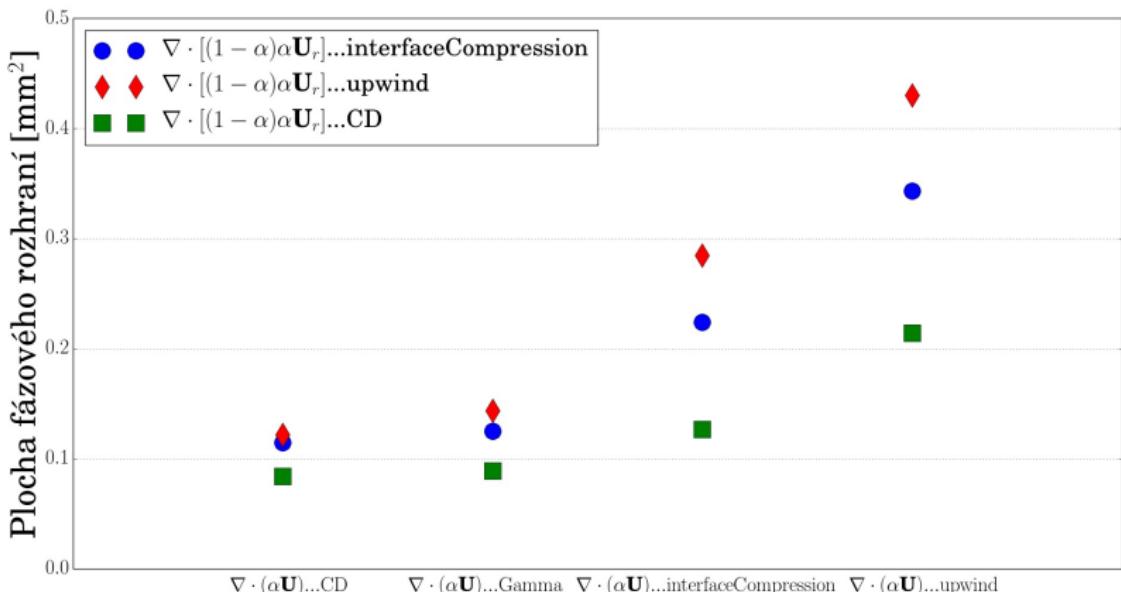


Vodorovný řez kapkou



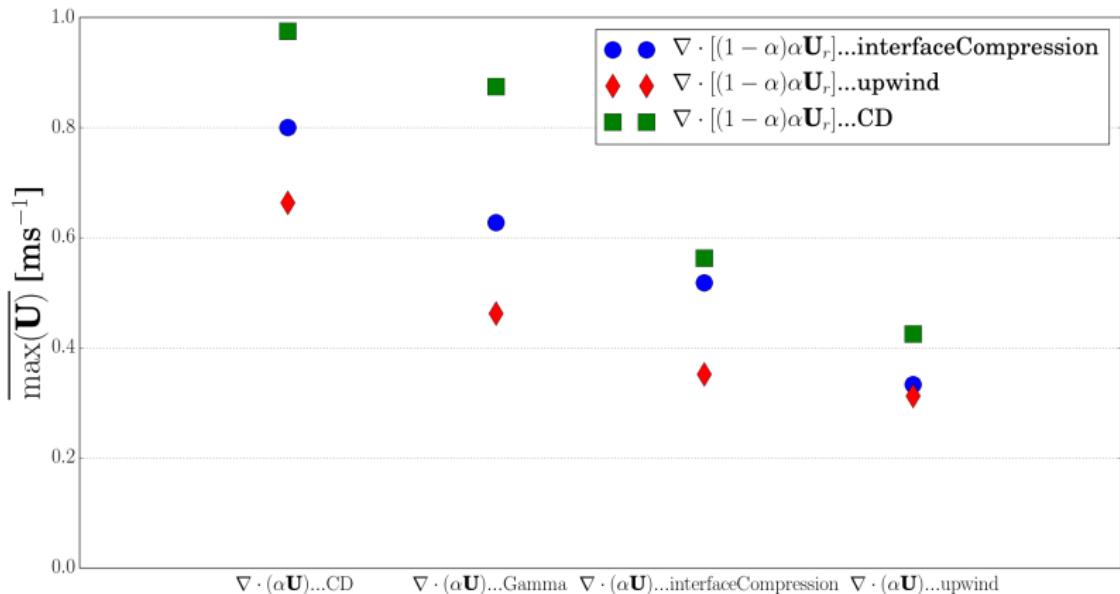
Diskretizace členu $\nabla \cdot (\alpha \mathbf{U})$ a $\nabla \cdot (\alpha(1 - \alpha)\mathbf{U}_r)$

Závislost velikosti fázového rozhraní na diskretizačním schématu



Diskretizace členu $\nabla \cdot (\alpha \mathbf{U})$ a $\nabla \cdot (\alpha(1 - \alpha)\mathbf{U}_r)$

Závislost normy parazitických proudů na diskretizačním schématu





- podařilo se nám provést simulaci kapky na vodorovném substrátu s fyzikálně relevantními výsledky
- porovnali jsme vliv několika diskretizačních schémat a našli jsme ideální kombinaci schémat pro daný případ
- pro případ kapky na nakloněném substrátu stékala kapka několikrát rychleji v porovnání s experimentálními daty
- důvodem může být nevhodný model dynamického kontaktního úhlu použitý v softwaru OpenFOAM



Děkuji za pozornost



