

FEM-Simulation des Erstarrungsvorgangs von Einzeltröpfchen mittels Enthalpie Modell

A. Ouazzi, T. Theis, S. Turek

Institut für angewandte Mathematik, Lehrstuhl 3, TU Dortmund

Kurzfassung

Das Teilprojekt B1 (UP Turek) hat die mathematische Modellierung sowie die numerische Untersuchung des Kontaktvorganges des Tropfens mit dem Substrat zum Ziel. Die Erstarrung wird beschrieben durch das Enthalpie Modell. Die Navier-Slip Randbedingungen werden in der FEM-Bilinearform explizit berücksichtigt.

Stichwörter: Erstarrung, Enthalpie Modell, Kontaktwinkel, Navier-Slip Randbedingungen

1 Einleitung

Im Mittelpunkt des Teilprojekts B1 (UP Turek) steht die Wechselwirkung des Partikels mit dem Substrat. Zunächst wird ein Einzeltröpfchen betrachtet. Der Prozess wird von verschiedenen Parametern bestimmt, unter anderem der Form des Tropfens, dem Impuls, der Kontaktfläche mit dem Substrat, der Rauigkeit der Oberfläche usw. [1, 2]. Von zentraler Bedeutung ist die Erstarrung des Tropfens. Der Erstarrungsvorgang beeinflusst im Wesentlichen die Schichtqualität. Die Zeit und Form der vollständigen Erstarrung bestimmen sowohl die mikro- als auch makroskopischen Eigenschaften der Schicht: Die äußere Begrenzung des Bauteils, die Härte, die Struktur und die Homogenität des Schichtgefüges.

Der im Lichtbogenspritzen verwendete Wolframkarbid-Kobalt WC-12Co besitzt einen sehr hohen Schmelzpunkt von ca. 2500 Grad. Dadurch gewinnt die Schicht eine sehr gute Wärmefestigkeit, aber gleichzeitig erschwert der hohe Schmelzpunkt die genaue Untersuchung der Erstarrung. Für derartig hohe Temperaturen liegen noch keine genauen Messdaten vor. Die numerische Simulation soll helfen, den Prozess zu verstehen und zu optimieren.

Der dynamische Kontaktwinkel beschreibt die Ausbreitung der Flüssigkeit auf der Oberfläche und bestimmt somit die Splatgeometrie. An dieser Stelle kommen die Navier-Slip Randbedingungen zum Einsatz.

Modell:

Zugrunde gelegt ist die inkompressible Navier-Stokes Gleichung

$$\rho_i \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u \right) - \nabla \cdot S_i + \nabla p = \rho_i \vec{g} + f(T)$$

$$\nabla \cdot u = 0$$

mit den folgenden Randbedingungen [9-11]

$$\begin{aligned} (S_l - S_g) \cdot \vec{n}_l = \sigma \kappa \vec{n}_l & \quad u \cdot \vec{n}_s = 0 \\ (S_l - S_g) \cdot \vec{\tau}_l = 0, \forall \vec{\tau}_l & \quad u = -\frac{1}{\beta} (\tau_s \cdot S_l \cdot (I - \vec{n}_s \vec{n}_s)) \end{aligned} \quad \text{auf } \Gamma_l \quad \text{auf } \Gamma_s$$

Die Erstarrung wird beschrieben durch das Enthalpie-Modell [3-8]

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (u \cdot \nabla)T = \alpha_{eff} \nabla^2 T, \quad \alpha_{eff} = \begin{cases} \frac{k}{\rho C_p} \left(1 + \frac{1}{Ste} \right), & T_s \leq T \leq T_l \\ \frac{k}{\rho C_p}, & \text{sonst} \end{cases}$$

Nomenklatur:

ρ - Dichte	α - Wärmediffusion	σ - Oberflächenspannung
η - Viskosität	L - latente Wärme	β - Slip-Koeffizient
u - Geschwindigkeit	H - Enthalpie	\vec{n} - äußere Normale
S - Spannungstensor	\dot{Q}_{gen} - Wärmequelle	$\vec{\tau}$ - Tangentialvektor
p - Druck	f_s, f_l - Anteil der festen bzw. flüssigen Phase	Γ_l - freie Grenzfläche zw. Flüssig- und Gas-Phase
\vec{g} - Gravitationsfeld	$f(T)$ - Funktion der Temperatur	Γ_s - Kontaktfläche zw. fester und flüssiger Phase
t - Zeit	Ste - Stefan-Zahl	Ω - gesamte Gebiet
T - Temperatur	Ca - Kapillarzahl	$\partial\Omega$ - Rand
C_p - Wärmekapazität	θ - Kontaktwinkel	φ - Testfunktion
k - Wärmeleitfähigkeit	κ - Krümmung	i - Index

2 Mathematische Modellierung

2.1 Erstarrung

Die Energieerhaltung führt zu der Bilanzgleichung für die Temperatur:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p (u \cdot \nabla) T - \nabla \cdot (k \nabla T) = \dot{Q}_{gen}$$

Der auf der rechten Seite stehende Term \dot{Q}_{gen} bezeichnet die Wärmequelle – die Energie, die man aus dem System entnehmen muss, damit der Phasenübergang stattfinden kann. Der Anteil der festen Phase f_s vergrößert sich auf Kosten der flüssigen Phase $f_l = 1 - f_s$ ohne eine Temperaturänderung. Die latente Wärme L wird an die Umgebung freigesetzt: $\dot{Q}_{gen} = \rho L \dot{f}_l$.

Mit dem Reynoldschen Transporttheorem folgt dann

$$\dot{Q}_{gen} = \frac{d}{dt}(\rho L f_l) = \rho L \left(\frac{\partial f_l}{\partial t} + (u \cdot \nabla) f_l \right).$$

Das Auftreten einer Umwandlungswärme führt zu einem diskontinuierlichen Phasenübergang. Die Enthalpie H ändert sich bei der Übergangstemperatur T_s sprunghaft. Die Enthalpie der festen Phase ist berechnet durch $H_s = C_p T_s$, und die Enthalpie der flüssigen Phase: $H_l = C_p T_l + L$.

Es wird an dieser Stelle angenommen, dass die Enthalpie nur linear von der Temperatur abhängt: $H = C_p T + L$.

Die Erstarrung einer Schmelze mit eutektischer Zusammensetzung findet in einem Temperaturintervall $[T_s, T_l]$ statt. Mit der Temperatur T_l beginnt das Erstarrungsvorgang gleichzeitig in zwei feste Phasen. Die Temperatur T_s ist der Schmelzpunkt, bei dem sich die Flüssigkeit mit beiden festen Phasen im thermodynamischen Gleichgewicht befindet.

Wenn die latente Schmelzwärme L beim Erstarrungsprozess sich gleichmäßig freisetzt, dann gilt

$$f_l = \begin{cases} 1, & H_l \leq H & (\text{liquid - zone}) \\ \frac{H - H_s}{H_l - H_s} & H_s \leq H \leq H_l & (\text{mushy - region}) \\ 0, & H < H_s & (\text{solid - zone}) \end{cases}$$

oder äquivalent

$$f_l = \begin{cases} 1, & T_l \leq T & (\text{liquid - zone}) \\ \frac{C_p T + L - C_p T_s}{C_p T_l + L - C_p T_s} & T_s \leq T \leq T_l & (\text{mushy - region}) \\ 0, & T < T_s & (\text{solid - zone}) \end{cases}$$

Die charakteristische Stefan-Zahl ist definiert durch $Ste = \frac{C_p \Delta T}{L}$, $\Delta T = T_l - T_s$.

$Ste \geq 1$ Der Entzug von Wärme ist nicht erforderlich, um den Prozess der Erstarrung abzuschließen.

$Ste \ll 1$ Wenig Feststoff wird sofort und adiabatisch produziert. Der Wärmeentzug ist für die komplette Erstarrung erforderlich.

Ein industrieller Erstarrungsprozess ist typischerweise mit $Ste \ll 1$ gekennzeichnet.

Man kann nun die partiellen Ableitungen nach der Zeit und Ort ausrechnen:

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} = \frac{\partial f_l}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{C_p}{L + C_p(T_l - T_s)} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{C_p}{L(1 + Ste)} \frac{\partial T}{\partial t},$$

$$\nabla f_l = \frac{C_p \nabla T}{H_l - H_s} = \frac{C_p \nabla T}{L + C_p(T_l - T_s)} = \frac{C_p \nabla T}{L(1 + Ste)}.$$

Damit ist \dot{Q}_{gen} gegeben und die Energie-Erhaltungsgleichung lautet:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p (u \cdot \nabla) T - \nabla \cdot (k \nabla T) = \dot{Q}_{gen} = \rho L \frac{df_l}{dt} = \rho L \left(\frac{C_p}{L(1 + Ste)} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{C_p}{L(1 + Ste)} (u \cdot \nabla) T \right)$$

Man kann die Terme wieder zusammenfassen:

$$\rho C_p \left(1 - \frac{1}{1 + Ste} \right) \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \left(1 - \frac{1}{1 + Ste} \right) (u \cdot \nabla) T = \nabla \cdot (k \nabla T)$$

Wegen konstanter Wärmeleitfähigkeit $k \neq k(x, y, z)$ wird üblicherweise der

Wärmediffusionskoeffizient eingeführt: $\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$.

Für die gemischte Region wird nun ein modifizierter Wärmediffusionskoeffizient α_{eff} definiert:

$$\alpha_{eff} = \begin{cases} \frac{k}{\rho C_p} \left(1 + \frac{1}{Ste} \right), & T_s \leq T \leq T_l \\ \frac{k}{\rho C_p}, & \text{sonst} \end{cases}$$

Die grundlegende Bilanzgleichung für die Temperatur somit lautet:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (u \cdot \nabla) T = \alpha_{eff} \nabla^2 T$$

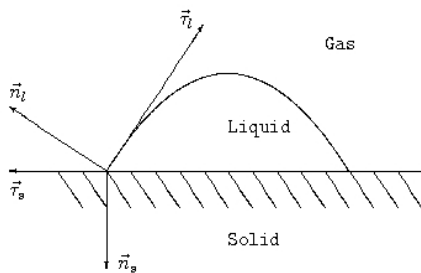
2.2 Navier-Slip Randbedingungen

Die Entwicklung des Fluides sowie des Gases wird mit der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichung beschrieben ($i \in \{l, g\}$):

$$\rho_i \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) u \right) - \nabla \cdot S_i + \nabla p = \rho_i \vec{g}$$

$$\nabla \cdot u = 0$$

Abbildung 1: Normal- bzw. Tangentialeinheitsvektoren zu der Tropfen- bzw. Festkörper-Grenzfläche



Die Randbedingung auf der freien Oberfläche liest sich wie folgt:

$$\begin{aligned} (S_l - S_g) \cdot \vec{n}_l &= \sigma \kappa \vec{n}_l \\ (S_l - S_g) \cdot \vec{\tau}_l &= 0, \forall \vec{\tau}_l \end{aligned} \quad \text{auf } \Gamma_l$$

Die Navier-Slip Randbedingung auf der Kontaktfläche des Tropfens lautet:

$$\begin{aligned} u \cdot \vec{n}_s &= 0 \\ u &= -\frac{1}{\beta} (\tau_s \cdot S_l \cdot (I - \vec{n}_s \vec{n}_s)) \end{aligned} \quad \text{auf } \Gamma_s$$

Dabei bezeichnet S den Spannungstensor: $S = \eta(\nabla u + \nabla u^T)$. Der Tensor $(I - \vec{n}_s \vec{n}_s)$ erzeugt eine Metrik auf der Kontaktfläche des Tropfens. Das bedeutet $S_l \cdot (I - \vec{n}_s \vec{n}_s)$ wirkt nur auf Γ_s . Für jeden beliebigen Vektor $\vec{a} = a_n \cdot \vec{n} + \vec{a}_\tau$ bleibt nur der tangentielle Anteil erhalten: $(I - \vec{n}_s \vec{n}_s) \cdot \vec{a} = \vec{a}_\tau$.

In der Finite Elemente Formulierung wird jeder Term der Gleichung mit der Testfunktion multipliziert und integriert über das gesamte Gebiet. Im Falle einer Zweiphasenströmung addieren wir noch die beiden Navier-Stokes Gleichungen miteinander:

$$\int_{\Omega_g} \varphi \rho_g \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) u \right) dx + \int_{\Omega_l} \varphi \rho_l \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) u \right) dx - \int_{\Omega_g} \varphi \nabla \cdot S_g dx - \int_{\Omega_l} \varphi \nabla \cdot S_l dx + \int_{\Omega_g \cup \Omega_l} \varphi \nabla p dx =$$

$$= \int_{\Omega_g} \varphi \rho_g \bar{g} dx + \int_{\Omega_l} \varphi \rho_l \bar{g} dx$$

Mit Hilfe der Diracschen Deltafunktion $\delta_l(x) = \begin{cases} 1, & \forall x \in \Omega_l \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$ definiert man nun die physikalischen Parameter für das gesamte Gebiet $\Omega = \Omega_l \cup \Omega_g$, die auf der Oberfläche unstetig sind [12]:

$$\rho = \rho_l \delta_l(\Omega) + \rho_g \delta_g(\Omega)$$

$$\eta = \eta_l \delta_l(\Omega) + \eta_g \delta_g(\Omega) \quad \text{usw.}$$

Die Randbedingungen kann man explizit in der schwachen Formulierung einbauen. Die Divergenz des Spannungstensors ist gleich dem Term mit der auf die Testfunktion verschobenen Ableitung plus das Integral über den Rand $\partial\Omega_l = \Gamma_l \cup \Gamma_s$:

$$\int_{\Omega_l} \varphi \nabla \cdot S_l dx = - \int_{\Omega_l} \nabla \varphi \cdot S_l dx + \int_{\Gamma_l} \varphi \cdot S_l \cdot \bar{n}_l d\gamma + \int_{\Gamma_s} \varphi \cdot S_l \cdot (I - \bar{n}_s \bar{n}_s) \cdot \bar{\tau}_s d\gamma$$

Das entsprechende Gleichung gilt auch für Gas auf dem Gebiet Ω_g :

$$\int_{\Omega_g} \varphi \nabla \cdot S_g dx = - \int_{\Omega_g} \nabla \varphi \cdot S_g dx + \int_{\Gamma_l} \varphi \cdot S_g \cdot (-\bar{n}_l) d\gamma$$

Unter Berücksichtigung der gegengesetzten Richtung der äußeren Normale für die flüssigen und Gas-Phase erhält man für den diffusiven Term folgenden Ausdruck:

$$- \int_{\Omega} \varphi \nabla \cdot S dx = \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot S dx + \underbrace{\int_{\Gamma_l} \varphi (S_l - S_g) \cdot \bar{n}_l d\gamma}_{\text{Free Surface}} + \underbrace{\int_{\Gamma_s} \varphi \cdot S_l \cdot (I - \bar{n}_s \bar{n}_s) \cdot \bar{\tau}_s d\gamma}_{\text{Navier Slip}}$$

$$= \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot S dx + \int_{\Gamma_l} \underbrace{\varphi \sigma \bar{\kappa}_l}_{\text{STF}} d\gamma - \int_{\Gamma_s} \beta (\varphi \cdot \bar{\tau}_s) u d\gamma$$

Die Transformation für den Navier-Slip Term wird gewonnen durch die Zerlegung der Testfunktion auf normale und tangentiale Komponenten

$$\varphi = (\varphi \cdot \bar{\tau}_s) \bar{\tau}_s + (\varphi \cdot \bar{n}_s) \bar{n}_s$$

sowie die Tatsache, dass die normale Komponente verschwindet: $\bar{n}_s \cdot (I - \bar{n}_s \bar{n}_s) = 0$.

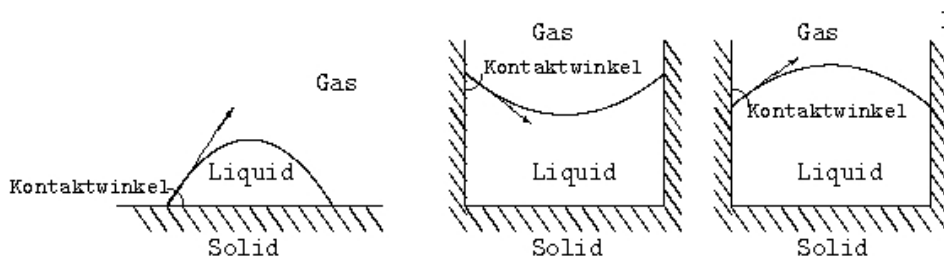
Somit hat die FEM-Bilinearform folgende Gestalt:

$$\int_{\Omega} \varphi \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) u \right) dx + \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot S dx + \int_{\Gamma_l} \varphi \sigma \bar{\kappa}_l d\gamma - \int_{\Gamma_s} \beta (\varphi \cdot \bar{\tau}_s) u d\gamma + \int_{\Omega} \varphi \nabla p dx = \int_{\Omega} \rho \bar{g} dx$$

2.3 Statischer Kontaktwinkel

Wenn der Tropfen die Festkörperoberfläche trifft, bildet der Tropfen mit dem Feststoff einen sogenannten Kontaktwinkel. Beim statischen Kontaktwinkel handelt es sich um ein Tröpfchen im thermodynamischen Gleichgewicht, dessen Größe und Form sich nicht mehr ändern. Der Kontaktwinkel ist der Winkel zwischen beiden Normalen zur Oberfläche des Festkörpers und zur Grenzfläche des Tropfens im Punkt des Kontaktes: $\theta = \angle(\vec{n}_l, \vec{n}_s)$ (Abb. 2).

Abbildung 2: Kontaktwinkel für verschiedene Konfigurationen



Die Youngsche Gleichung stellt einen Zusammenhang zwischen dem statischen Kontaktwinkel θ und der Oberflächenenergie:

$$\sigma \cos \theta = \sigma_l - \sigma_s$$

Es sind drei Kräfte im Gleichgewicht: die viskose Scherspannung σ_l , die Oberflächenspannung σ und die Abgleitungskraft σ_s (engl.: slip force).

Die Abgleitungskraft zusammen mit der Oberflächenspannung kompensiert die steigende Scherspannung:

$$\sigma \leq \sigma_l - \sigma_s$$

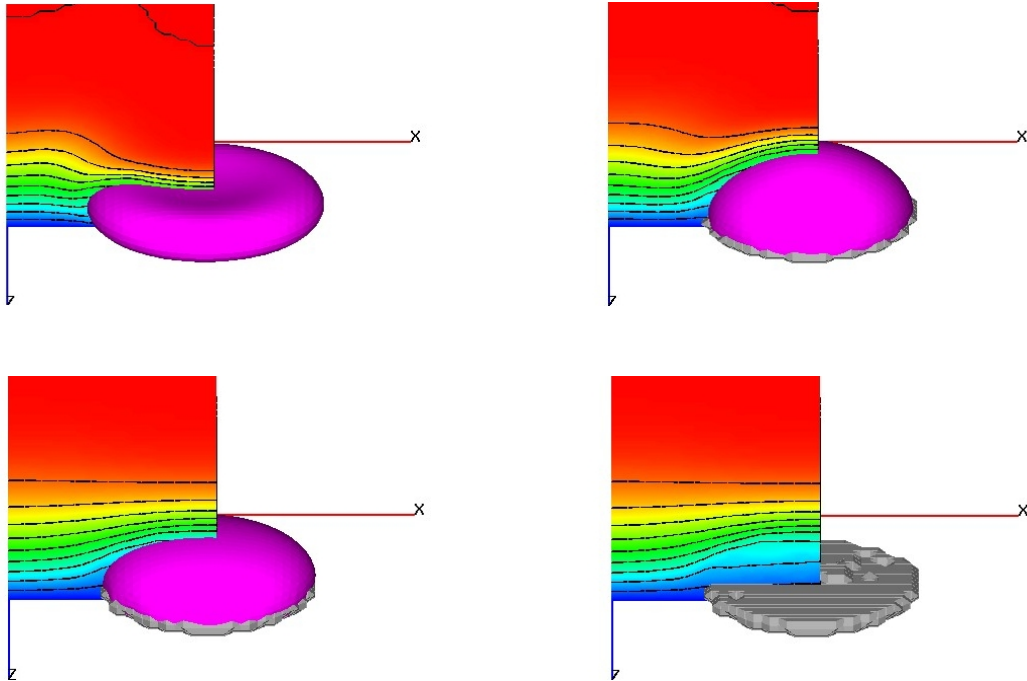
Falls die Flüssigkeit auf die Oberfläche einen Tropfen mit dem Kontaktwinkel $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ bildet, dann benetzt die Flüssigkeit die Oberfläche nur partiell. Eine

Kennzahl für die Benetzung ist die Kapillarzahl $Ca = \frac{\eta U}{\sigma}$. Die Kapillarzahl hängt davon ab, um welche Flüssigkeit und Feststoff es sich handelt und wie rau die Oberfläche ist.

3 Numerische Resultate

3.1 Erstarrung

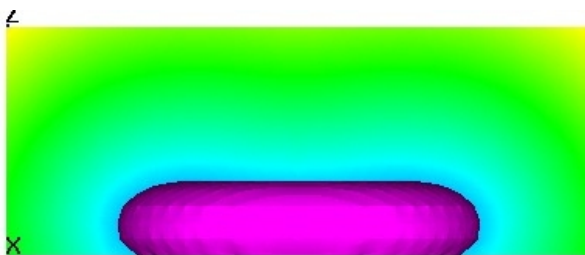
Abbildung 3: Erstarrung des Tropfens auf einer glatten Oberfläche



Das Enthalpie Modell wurde für $Ste = 0.5$ simuliert. Dabei wurde nur der Anteil der festen Phase visualisiert (Abb. 3). Die gemischte Region wird bei der Berechnung berücksichtigt.

3.2 Statischer Kontaktwinkel

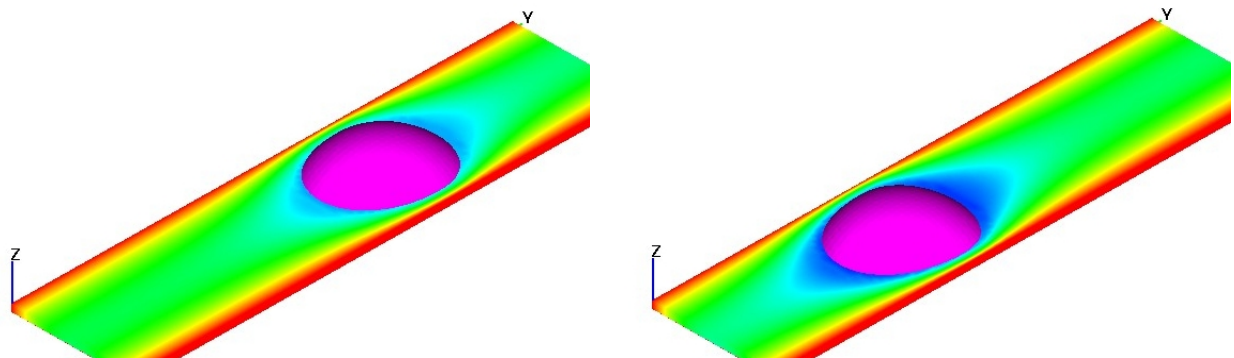
Abbildung 4: Simulation bei vorgegebenem Kontaktwinkel im Gravitationsfeld



Bei der Simulation wurde der Kontaktwinkel $\theta = \frac{3\pi}{4}$ vorgegeben (Abb. 4). Im Falle eines Kontaktwinkels $\theta > \frac{\pi}{2}$ zieht sich die Flüssigkeit zusammen. Es findet keine Benetzung statt.

3.3 Schiefe Ebene

Abbildung 5: Gleitender Tropfen auf einer schiefen Ebene



Auf der Abbildung 5 wird der Tropfen auf der schiefen Ebene dargestellt. Wegen hoher Oberflächenspannung gleitet der Tropfen ohne Formänderung runter. Um den Code zu testen, wurden zunächst fiktive Werte verwendet.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Der bestehende parallelisierte Featflow-Code für die 3D-Simulation wurde mit dem Enthalpie-Modell erweitert. Die Simulation für ein isoliertes Tröpfchen auf der glatten Oberfläche wurde durchgeführt. Es wird beabsichtigt, den Code mittels analytischer Lösungen sowie experimenteller Ergebnissen zu validieren.

Effiziente mathematische Modellierung in Kombination mit moderner Numerik erlauben die einfache Implementierung der Navier-Slip Randbedingungen und die Untersuchung des Konvergenzverhaltens für verschiedene Partikelgrößen.

Weiterhin ist die numerische Behandlung des Kontaktwinkels mit mehreren Kontaktstellen geplant. Die Rauigkeit der Oberfläche soll mit der analytischen Vorgabe des Slip-Koeffizienten β erfasst werden.

5 Danksagung

Diese Arbeit ist im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 708, TP B1, entstanden. Die Autoren danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Förderung.

Alle Rechnungen wurden auf dem LiDOng-Cluster der TU-Dortmund durchgeführt. Wir bedanken uns beim LiDOng-Team der TU-Dortmund für Rechenressourcen und Unterstützung.

Literatur

- [1] Sahm P. R., Egry I., Volkmann T., „Schmelze, Erstarrung, Grenzflächen“, Vieweg, 1999
- [2] Berns H., „Hartlegierungen und Hartverbundwerkstoffe“, Springer, 1998
- [3] Stefanescu D. M., „Science and Engineering of Casting Solidification“, Springer, 2009
- [4] Carslaw H. S., Jaeger J. C., „Conduction of Heat in Solid“, Oxford Clarendon Press, 1959
- [5] Nastas L., „Modeling and Simulation of Microstructure Evolution in Solidifying Alloys“, Kluwer Academic Publishers, 2004
- [6] Glicksman M. E., „Principles of Solidification“, Springer, 2011
- [7] Davis S. H., „Theory of Solidification“, Cambridge University Press, 2001
- [8] Flemings M. C., „Solidification Processing“, McGraw-Hill, New York, 1974
- [9] Shikhmurzaev Y. D., „Capillary Flows with Forming Interfaces“, Chapman & Hall, 2008
- [10] Croce R., Griebel M., Schweitzer M. A., „A Parallel Level-Set Approach for Two-Phase Flow Problems with Surface Tension in Three Space Dimensions“, Band 157, Sonderforschungsbereich 611, Universität Bonn, 2004
- [11] Ganesan S., Tobiska L., „Finite Element Simulation of a Droplet Impinging a Horizontal Surface“, Podbanske, Slovakia, ISBN 80-227-2192-1, 1—11.2005
- [12] Turek S., Mierka O., Hysing S., Kuzmin D., „Numerical study of a high order 3D FEM-Level Set approach for immiscible flow simulation“, Repin, S., Tiihonen, T., Tuovinen, T., Computational Methods in Applied Sciences, Vol. 27, Numerical methods for differential equations, optimization, and technological problems, Springer, ISBN 978-94-007-5287-0, 2012