



Simon van Mourik

Faculteit Elektrotechniek Wiskunde en Informatica
Universiteit Twente
Postbus 217
7500 AE Enschede
s.vanmourik@ewi.utwente.nl

Arthur Veldman

Faculteit der Wiskunde en Natuurwetenschappen
Rijksuniversiteit Groningen
Postbus 800
9700 AV Groningen
veldman@math.rug.nl

Onderzoek

Rollende vloeistof

In 1998 was de NASA ruimtesonde NEAR (Near Earth Asteroid Rendezvous) op weg naar asteroïde 433 Eros toen sensoren aan boord snelheden aangaven die de veiligheidslimiet overschreden. In korte tijd werden de stuwmotoren duizenden keren ingeschakeld en verbruikten ze 29 van de 215 kg brandstof aan boord. De manoeuvre werd afgebroken, NEAR ging over in de veiligheidsstand en de communicatie met aarde werd gestopt. Op dat moment wist niemand wat er aan de hand was, maar later bleek dat naar alle waarschijnlijkheid de brandstof aan boord was gaan klotsen en ervoor had gezorgd dat de satelliet was gaan tollen. Gelukkig kon de communicatie weer worden hersteld. De missie werd voortgezet, maar liep al met al dertien maanden vertraging op [1].

Zodra brandstof in een satelliet gaat klotsen, bestaat het gevaar dat hij uit koers raakt ten gevolge van de traagheidskrachten van de vloeistof. Bijsturen is doorgaans lastig omdat het vanwege de complexe bewegingen die een vloeistof maakt moeilijk is in te schatten hoe er bijgestuurd moet worden. Een verkeerde inschatting van timing, kracht en richting kan juist een averechts effect hebben. Zo is het bijvoorbeeld mogelijk door slechts zachtjes met je hand te bewegen een vol bad

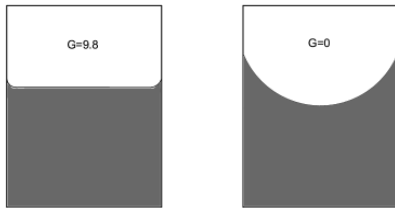
half leeg te laten klotsen. Gooi, om een indruk te krijgen van de onvoorspelbaarheid van vloeistof, een halfvol flesje water in de lucht met een flinke spin. Het flesje laten draaien en opvangen gaat een stuk moeilijker dan wanneer het helemaal leeg of helemaal vol is. Op aarde hebben we dan nog de zwaartekracht die als een corrigerende factor werkt door het flesje en het badwater voortdurend een kant op te trekken, maar in de ruimte is de situatie dramatischer.

Om wat meer inzicht te krijgen in het complexe gedrag van vloeistoffen is er gezocht naar methoden om dit gedrag nauwkeurig

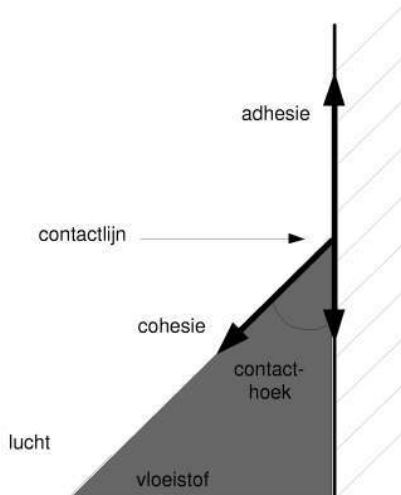
te onderzoeken. Allereerst hebben er diverse experimenten plaatsgevonden, bijvoorbeeld aan boord van het Europese ruimtelaboratorium Spacelab [2]. Verder is in 1992 door het Nationaal Lucht- en Ruimtevaartlaboratorium NLR het Wet Satellite Model (WSM) experiment uitgevoerd, waarbij een ringcylindrische tank met vloeistof, gelanceerd met een sondeerraket, ongeveer zeven minuten vrij door de ruimte tuimelde [3].

Daarnaast wordt geprobeerd om het vloeistofgedrag theoretisch te bestuderen. Zo werkt de Rijksuniversiteit Groningen sinds 1995 aan numerieke vloeistofsimulatie voor ruimtevaarttoepassingen. Dit heeft geleid tot een rekenmethode (ComFlo) die het klotsen van vloeistof in de ruimte kan simuleren in vrije interactie met de beweging van de satelliet [4–5]. Eerste numerieke resultaten, die vergeleken zijn met de data die tijdens de WSM-vlucht zijn verzameld, blijken in grote lijnen overeen te komen. De simulaties zijn gebaseerd op de aloude Navier-Stokes vergelijkingen voor een incompressibele vloeistof,

Figuur 1 Lancering van de Ariane 5, ECA vlucht 164, Kourou, Frans Guyana, 12 februari 2005. De raket had twee satellieten aan boord, waaronder de *Sloshsat*.



Figuur 2 Met zwaartekracht (links) is de krachtenbalans aan de wand een lokaal verschijnsel. Zonder zwaartekracht (rechts) gaat het vloeistofoppervlak in een bolvorm staan.



Figuur 3 De contacthoek is het gevolg van de krachtenbalans tussen cohesie van de vloeistof en adhesie tussen vloeistof, lucht en wand.

samen met een klassiek mechanisch model voor de satellietdynamica. Er is echter één maar aan verbonden: de Navier-Stokes vergelijkingen hebben een randvoorwaarde nodig die in de buurt van het vrije vloeistofoppervlak het krachten spel met de vaste wand beschrijft, met andere woorden: er is een contactlijnmodel nodig. De algemene aannames hiervoor zijn in bepaalde gevallen te grof, zoals wanneer capillaire effecten belangrijk zijn. In [4] wordt de onzekerheid aangegeven rondom de modellering hiervan: de dynamische contacthoek.

De contacthoek

Vlakbij de wand werken er twee krachten op het vloeistofoppervlak: de cohesiekrachten tussen de vloeistofmoleculen onderling en de adhesie tussen vloeistof en wand (figuur 3). Als gevolg van deze krachtenbalans staat de vloeistof aan de wand onder een hoek die de contacthoek wordt genoemd. Omdat het hier om relatief kleine krachten gaat (de cohesie is evenredig met de oppervlaktespanning) heeft de contactlijndynamica meestal weinig invloed op de overige dynamica. Immers, de zwaartekracht is veel belangrijker dan de oppervlaktespanning en de krachten-

balans aan de wand blijft daarom lokaal. Pas als er geen andere grote krachten aanwezig zijn, wordt het effect van de contacthoek zichtbaar; de oppervlaktespanning is dan dominant en het oppervlak gaat in een (perfecte) bolvorm staan (figuur 2).

Bij situaties waarin de andere krachten klein zijn kan de dynamica van de contactlijn dus veel invloed hebben op het vloeistofgedrag. Dit is het geval onder gewichtsloze omstandigheden, zoals bij het NEAR incident, en bijvoorbeeld bij 'docken', het aankoppelen van het ene aan het andere ruimtevaartuig, hetgeen millimeterprecisie vergt. De versnellingen zijn in deze situaties vaak klein en daarmee ook de kracht op de vloeistof. Wanneer het aan te koppelen vaartuig veel vloeistof aan boord heeft (brandstof, vers drinkwater, etcetera) dan kan het klotsen de dockingmanoeuvres verstoren, hetgeen ongewenst is en gevaar voor de bemanning oplevert.

Behalve bij geklots in de ruimte is onderzoek naar de contacthoek verder nog relevant voor een scala aan aardse toepassingen, zoals bij de vorming van gasbellen in vloeistof aan een wand, bij het coaten met een dunne laag verf of in inkjetprinters.

Modellering

Tenslotte het dynamische aspect. De krachtenbalans is hierboven gerepresenteerd in termen van de contacthoek. Als de balans in evenwicht is, wordt deze contacthoek statisch met evenwichtshoek θ_0 . Zodra de vloeistof gaat bewegen en de balans verstoord wordt, zal de contactlijn (zie figuur 3) zich naar de evenwichtspositie bewegen, zodat de dyna-

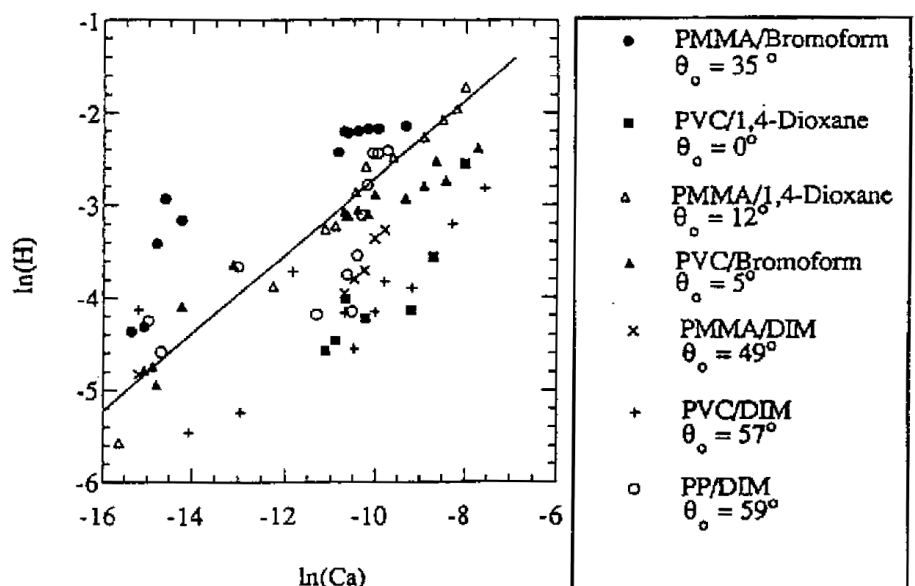
mische contacthoek naar zijn statische waarde toe gaat. Nu is de grote vraag wat het verband is tussen de contactlijnsnelheid v_{cl} en de dynamische contacthoek $\theta(t)$. Een voor de hand liggend model is $v_{cl} = \alpha(\theta(t) - \theta_0)$ met α een evenredigheidsconstante. Als $\theta(t) = \theta_0$ stopt de contactlijn met bewegen, en hoe verder de balans uit evenwicht is, hoe hoger de contactlijnsnelheid zal zijn. De eenvoudigste variant van dit model is om te veronderstellen dat $\theta(t) = \theta_0$; dit komt overeen met $\alpha \rightarrow \infty$ hierboven. Dit model heet het statische model en belooft fysisch gezien niet veel goeds, want een klein verschil tussen $\theta(t)$ en θ_0 impliceert een oneindig hoge contactlijnsnelheid.

Het capillair-getal $Ca = \mu v_{cl}/\gamma$, met μ de viscositeit en γ de oppervlaktespanning, geeft de verhouding aan tussen viskeuze krachten en oppervlaktespanning, en blijkt een kenmerkende factor te zijn voor de contactlijnsnelheid. Figuur 5 toont het experimenteel gevonden verband tussen de contactlijnsnelheid en de afwijking met de statische contacthoek voor verschillende vloeistoffen. Wat opvalt is dat er een grote spreiding bestaat van de data als het type vloeistof wordt gevarieerd. Een poging om deze data met één kromme te fitten, zoals het model van Seeberg [6]

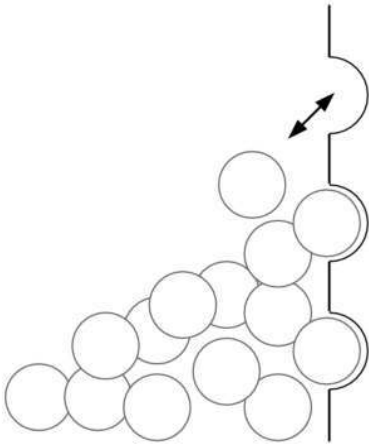
$$\frac{\cos \theta_0 - \cos \theta(t)}{\cos \theta_0 + 1} = 4.47 Ca^{0.42}, \quad (1)$$

voor $Ca \leq 10^{-3}$, dat in figuur 4 is aangegeven, is daarom maar beperkt waardevol.

Op zoek naar een meer gefundeerd mo-



Figuur 4 Experimentele data van de relatie tussen contactlijnsnelheid en de afwijking van de statische contacthoek voor verschillende vloeistoffen (H is het linkertlid van (1)). De getrokken lijn geeft het model van Seeberg weer.



Figuur 5 Moleculen bewegen tussen wand en vloeistof.

del moeten we onderzoek doen naar de fysica. Een puur macroscopisch model werkt niet of nauwelijks en dat komt door de modellering van de Navier-Stokes vergelijkingen. Deze hebben als uitgangspunt dat vloeistofelementjes oneindig klein zijn, wat macroscopisch gezien een heel redelijke aanname is, maar microscopisch gezien niet. Uit de aanname dat een vloeistof een continuüm is, volgt dat tegen de wand de vloeistof niet mag bewegen (no-slip conditie) omdat anders de wrijving daar oneindig groot wordt. De contactlijn mag dus niet bewegen! Er zijn relatief veel artikelen waarin met een no-slip conditie of een aangepaste slip-conditie wordt geprobeerd om de dynamica van de contactlijn te modelleren zonder dat er dingen 'exploderen', maar dit blijft op zijn minst een moeilijke (of uitdagende) bezigheid; zie bijvoorbeeld [7–8].

In werkelijkheid bewegen de vloeistofmoleculen van de wand af en ernaar toe. Deze moleculaire dynamica bepaalt hoe snel en in welke richting de contactlijn beweegt. Voor een vloeistof in evenwicht geldt $\kappa^+ = \kappa^- = \kappa^0$, met κ^+ de deeltjesflux in positieve richting (naar de wand toe) en κ^- die in negatieve richting. Verder geldt de Arrhenius relatie

$$\kappa^0 = \frac{kT}{h} \exp \frac{-G_w^*}{NkT} \quad (2)$$

met N het getal van Avogadro, k de constante van Boltzmann, h de constante van Planck, G_w^* de activatie-energie voor het aanhechten van een molecuul en T de temperatuur.

Een model gebaseerd op deze theorie is ontwikkeld door Blake [9]. Hij neemt aan dat het aantal adsorptieplaatsen in de wand een belangrijke rol speelt bij een bewegende contactlijn (figuur 5). Voor een vloeistof die niet in evenwicht is, geldt dat $\kappa^+ \neq \kappa^-$; de betref-

fende waarden worden gegeven door

$$\kappa^\pm = \kappa^0 \exp \pm \frac{w}{2nkT}. \quad (3)$$

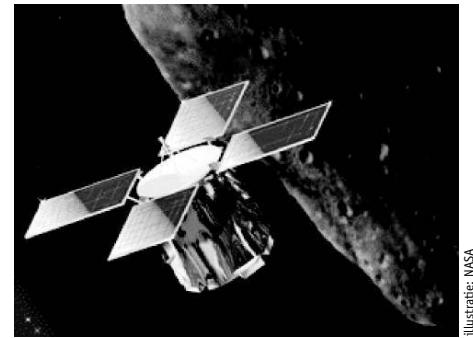
Hier is w de verrichte arbeid bij hechting aan de wand en n het aantal adsorptieplaatsen in de wand. De netto deeltjesflux is $\kappa^+ - \kappa^-$. Verder maakt Blake de aanname dat de moleculen aan de wand van de ene adsorptieplaats naar de andere springen en zo de bewegende contactlijn vormen. Een moleculair model voor v_{cl} wordt daarmee

$$\begin{aligned} v_{cl} &= (\kappa^+ - \kappa^-) \lambda \\ &= 2\kappa^0 \lambda \sinh(w/2nkT) \end{aligned} \quad (4)$$

met λ de gemiddelde afstand tussen de adsorptieplaatsen. Blake stelt verder dat de verrichte arbeid wordt gegeven door $w = \gamma(\cos \theta_0 - \cos \theta(t))$. Alles ingevuld levert dit

$$v_{cl} = 2\kappa^0 \lambda \sinh \frac{\gamma(\cos \theta_0 - \cos \theta(t))}{2nkT}. \quad (5)$$

Testresultaten in [9] geven aan dat dit model nauwkeuriger is dan empirische modellen zoals (1), figuur 6. Er bestaan echter meer theorieën vanuit verschillende invalshoeken. Zo heeft Shikhmurzaev [10] een nieuwe theorie ontwikkeld die de microdynamica dichtbij de contactlijn relateert aan de macrodynamische hydrodynamica. Zijn theorie voorspelt een rollende beweging die de contactlijn maakt langs de wand. Deze is inderdaad experimenteel waargenomen (en niet in strijd met de no-slip conditie uit de Navier-Stokes vergelij-



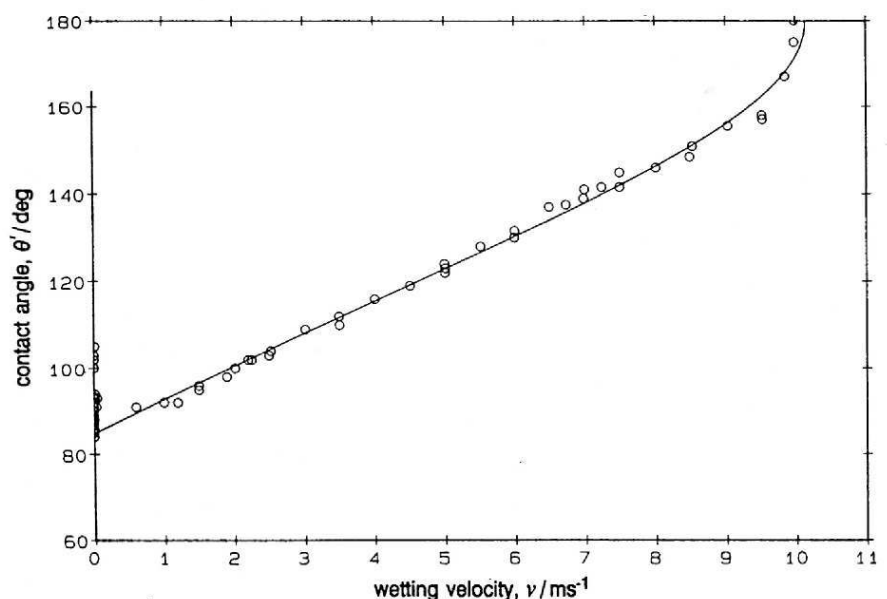
Figuur 7 De ruimtesonde NEAR

kingen). Hoofdstuk 9 in [10] bevat een uitgebreide discussie van diverse soorten contactlijnmodellen.

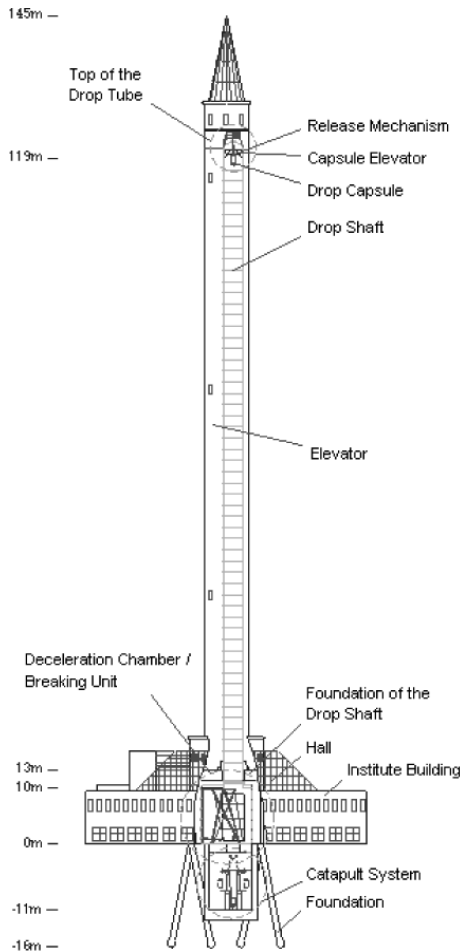
Numerieke implementatie

Als we een dynamisch contacthoekmodel willen samenvoegen met het Navier-Stokes model, hebben we het probleem dat het ene een snelheid aan de wand voorschrijft, en het andere het juist verbiedt, ook na numerieke discretisatie. Toch kan dit probleem omzeild worden door de modellen 'gescheiden' te houden. De Navier-Stokes vergelijkingen worden per rooster cel en per tijdstap door een VOF (Volume of Fluid) methode opgelost.

- Gegeven een snelheidsveld wordt er berekend voor welk deel elke cel gevuld wordt met vloeistof;
- De positie van het vloeistofoppervlak wordt berekend en de kromming ervan bepaald;
- Het drukveld wordt bijgesteld naar aanleiding van de oppervlaktekromming;
- Het snelheidsveld wordt gecorrigeerd naar



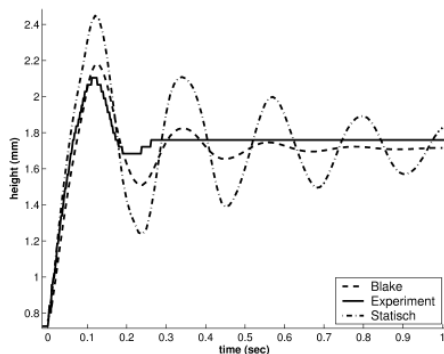
Figuur 6 Experimentele data voor water voor verschillende contacthoeken (verticaal) en contactlijnsnelheden (horizontaal). De doorgetrokken lijn representeert Blake's model (9).



Figuur 8 Schets van de valtoeren in Bremen en een capsule met de registratieapparatuur. De val duurt 4,7 seconden.

aanleiding van de nieuwe drukverschillen, waarna deze stappen geïtereerd worden.

De dynamische contacthoekmodellen berekenen, gegeven een contacthoek, de contactlijnsnelheid en per tijdstap wordt bij de wand de contactlijnhoogte bijgesteld (dit gebeurt in de tweede stap). Dus niet de snelheid aan de wand wordt gecorrigeerd door de contacthoek, maar de positie van het vloeistofoppervlak bij de wand. Dit simuleert, omdat aan de wand de no-slip voorwaarde nog steeds



Figuur 9 Beweging van de contacthoek langs de wand van het buisje. Een vergelijking tussen experiment en twee simulatiemodellen: statische contacthoek en het contactlijnmodel van Blake.



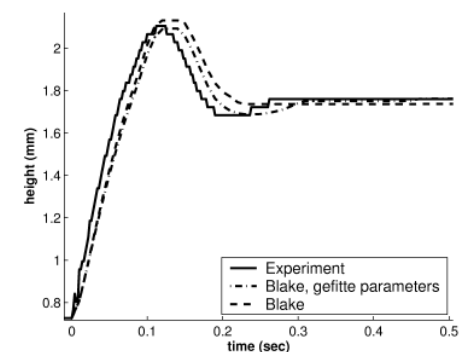
Figuur 10 Contactlijnsnelheid v_{CL} versus contacthoek $\theta(t)$. Zodra $\theta(t)$ tussen de waarden $[\theta_R, \theta_A]$ komt, stopt de contactlijn met bewegen. θ_R en θ_A heten de 'receding' respectievelijk de 'advancing' contacthoek.

zig zijn, zoals traagheidskrachten ten gevolge van de stroming en zwaartekracht. Het ZARM instituut aan de universiteit van Bremen heeft een valtoeren waarmee gewichtsloosheid kan worden gesimuleerd [13]. Het experiment is simpel: een met vloeistof gevuld buisje wordt boven in de toren losgelaten in een capsule met apparatuur die onder andere de contactlijnhoogte registreert. Tijdens de val werkt er effectief geen zwaartekracht op de vloeistof en daarom zal de contactlijn stijgen totdat het oppervlak in een bolvorm staat: de vorm van het oppervlak verandert van die op het linkerplaatje in figuur 2 naar die op het rechterplaatje.

Het valexperiment is met diverse vloeistoffen uitgevoerd. Wij behandelen hier als voorbeeld de vloeistof Baysilone M3 (een siliconenolie). Voor deze stof zijn alle parameters uit het model (9) van Blake in de literatuur te vinden (hetgeen lang niet van alle vloeistoffen kan worden gezegd). Figuur 9 toont de contactlijnhoogte (verticaal) als functie van tijd (horizontaal). Het statische model reageert veel te heftig op verschillen tussen de dynamische en de statische contacthoek en als gevolg daarvan beweegt de contactlijn veel te wild. Blake's model geeft daarentegen een veel rustiger verloop, maar de contactlijn blijft nog te lang oscilleren in de tijd. Ook de evenwichtshoogte is te laag vergeleken met het experiment.

In praktijk is het zo dat de contactlijn niet alleen stilstaat als $\theta(t) = \theta_0$, maar ook als de contacthoek in de buurt komt van zijn statische waarde. Dit blijven plakken van de contactlijn aan de wand wordt toegeschreven aan de ruwheid van het wandoppervlak; het veroorzaakt hysteresis in het gedrag van de contacthoek (figuur 10).

Tijdens dit onderzoek is voor dit verschijnsel geen toepasbaar theoretisch model gevonden en dit lijkt dus nog een open onderzoeksgebied. Voor M3 is in [13] de statische



Figuur 11 Blake's model met de contacthoekparameters uit [13]. De contacthoekparameters zijn aangepast binnen de foutenmarge voor een betere fit met Blake's model.

contacthoek bepaald op $\theta_0 = 53.6^\circ \pm 1.6^\circ$ en het gebied waarin de contactlijn 'vastplakt', het hysteresegebied, op $[\theta_R, \theta_A] = [46.7^\circ \pm 2.1^\circ, 56.4^\circ \pm 1.0^\circ]$ waarin de meetnauwkeurigheid is aangegeven. Figuur 11 toont het resultaat voor Blake's model als hystereses wordt gemodelleerd. De slinging van de contactlijn komt nu veel eerder tot stilstand dan in het model zonder hysteresis (figuur 9).

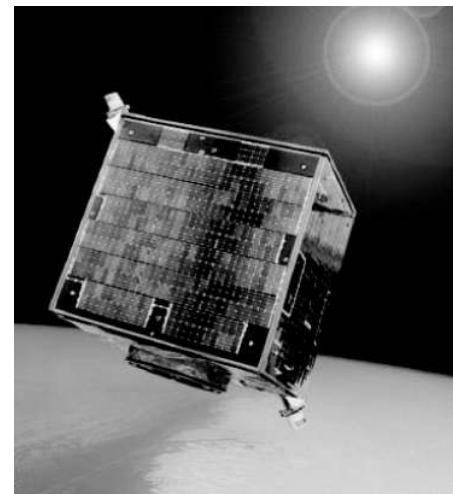
Fitten we de contacthoekparameters dan wordt de overeenkomst tussen het experiment en de uitkomsten van Blake's model nog beter. Het kleine verschil tussen de nominale en gefitte contacthoekparameters en het verschil tussen de twee plots in figuur 11 toont de gevoeligheid voor experimentele meetfouten.

Verder onderzoek

Het is duidelijk geworden dat de modellering van de contactlijndynamica grote invloed kan hebben op vloeistofgedrag en het ziet er dus naar uit dat een fysisch gedetailleerde be-

schrijving van de contactlijn substantieel zou kunnen bijdragen aan vloeistofsimulatie voor de ruimtevaart.

Op dit moment wordt er volop onderzocht welke invloed de contacthoekmodellering heeft onder gewichtloosheid. Op 12 februari 2005 is Sloshsat FLEVO (Facility for Liquid Experimentation and Verification in Orbit) gelanceerd (Figuur 12): in wezen een gedeeltelijk met water gevulde tank, ontworpen om de invloed van vloeistoffen aan boord van ruimtevaartuigen te bestuderen. Deze minisatelliet, die door het NLR is ontworpen en gebouwd (met steun van de Europese ruimtevaartorganisatie ESA), voerde gedurende een week allerlei manoeuvres uit. Behalve de RUG en het NLR, zullen ook ESA en het NASA Glenn Research Center de experimentele gegevens gebruiken om vloeistofdynamische rekenprogramma's te valideren [14–15]. Na verwerking van deze gegevens zal het waarschijnlijk dui-



illustratie: Nationaal Lucht- en Ruimtevaartlaboratorium

Figuur 12 De mini-satelliet Sloshsat

delijker worden welke invloed de contactlijndynamica heeft op de stroming en hoe de modellering ervan numerieke simulaties kan verbeteren.

Referenties

- 1 NEAR home page <http://near.jhuapl.edu>. Het rapport van de NEAR Anomaly Review Board is beschikbaar via <http://near.jhuapl.edu/anom/index.html>.
- 2 Een overzicht van Nederlandse ruimte-experimenten tot 1997 staat op <http://www.nlr-duc.nl/mgcd-db.html>.
- 3 J.P.B. Vreeburg, The Wet Satellite Model experiment. In: O. Minster en B. Kaldeich (eds), *Final reports of sounding rocket experiments in fluid science and materials science*, ESA SP-1132, Vol. 4, 1994.
- 4 J. Gerrits. *Dynamics of Liquid-Filled Spacecraft*. Proefschrift, Rijksuniversiteit Groningen, 2001.
- 5 J. Gerrits and A.E.P. Veldman. *Dynamics of Liquid-Filled spacecraft*. J. Eng. Math. 45, p. 21–38, 2003.
- 6 J.E. Seeberg and J.C. Berg. *Dynamic wetting in the flow of capillary number regime*. Chem. Eng. Sc., 47, p. 4455–4464, 1992.
- 7 L.M. Pismen en B.Y. Rubinstein. *Kinetic slip condition, van der Waals forces, and dynamic contact angle*. Langmuir 17, p. 5265–5270, 2001.
- 8 D. Grubert en J.M. Yeomans. Mesoscale modeling of contact line dynamics. *Computer physics communications*, 121–122, p. 236–239, 1999.
- 9 T.D. Blake. Dynamic Contact Angles and Wetting Kinetics. In: *Wettability*, J.C. Berg (Ed.), Marcel Dekker, New York, p. 251–309, 1993.
- 10 Y.D. Shikhmurzaev. Moving contact lines in liquid/liquid/solid systems. *J. Fluid Mech.*, vol. 334, p. 211–249, 1997.
- 11 S. van Mourik. *Numerical modelling of the dynamic contact angle*. Master's thesis, 2002.
- 12 R.C.W.P. Verstappen and A.E.P. Veldman. *Symmetry-preserving discretisation of turbulent flow*. J. Comput. Physics, vol. 187, p. 343–368, 2003.
- 13 M. Michaelis and M.E. Dryer. *Test-case number 31: reorientation of a free liquid interface in a partly filled right circular cylinder upon gravity step reduction*. Accepted for publication in Multiphase Science and Technology, 2005.
- 14 NLR Sloshsat flyer <http://www.nlr.nl/public/publications/pdf/f183-02.pdf>.
- 15 ESA website <http://www.esa.int/esaCP/SEM02PXEM4E.Netherlands.o.html>.