

**BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO**

**VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM**

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



PHẠM DUY BÌNH

**NGHIÊN CỨU TÍNH TOÁN ĐỘNG LỰC HỌC HẠT LƯU CHẤT
ĐA THÀNH PHẦN CÓ TRUYỀN NHIỆT, CHUYỂN PHA**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ CƠ HỌC

Hà Nội - 2023

BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



PHẠM DUY BÌNH

NGHIÊN CỨU TÍNH TOÁN ĐỘNG LỰC HỌC HẠT LƯU CHẤT
ĐA THÀNH PHẦN CÓ TRUYỀN NHIỆT, CHUYỂN PHA

LUẬN ÁN TIẾN SĨ CƠ HỌC

Chuyên ngành: Cơ học chất lỏng và chất khí

Mã số: 9 44 01 08

Xác nhận của Học viện

Thầy hướng dẫn 1

Cô hướng dẫn 2

Khoa học và Công nghệ



PGS. TS. Vũ Văn Trường

PGS. TS. Nguyễn Thị Việt Liên

Nguyễn Thị Trung

Hà Nội - 2023

LỜI CAM ĐOAN

Tôi, **Phạm Duy Bính**, xin cam đoan luận án: “*Nghiên cứu tính toán động lực học hạt lưu chất đa thành phần có truyền nhiệt, chuyển pha*” là công trình nghiên cứu của tôi, dưới sự hướng dẫn của PGS. TS. Vũ Văn Trường và PGS. TS. Nguyễn Thị Việt Liên. Các kết quả nghiên cứu và nội dung nghiên cứu trong đề tài này hoàn toàn trung thực. Các kết quả và số liệu nghiên cứu trong đề tài này đã được công bố trong các tạp chí uy tín trong nước và quốc tế. Các thông tin trích dẫn trong luận án này đều được trích dẫn nguồn gốc rõ ràng. Tôi xin hoàn toàn chịu trách nhiệm về sự cam đoan này.

Hà Nội, ngày 05 tháng 06 năm 2023

Nghiên cứu sinh



Phạm Duy Bính

LỜI CẢM ƠN

Tôi xin trân trọng gửi lời cảm ơn sâu sắc đến **PGS. TS. Vũ Văn Trường** và **PGS. TS. Nguyễn Thị Việt Liên**. Thầy, cô là những người tận tâm hướng dẫn, giúp đỡ và đã dạy cho tôi những kiến thức quý báu để tôi hoàn thành luận án này.

Tôi xin chân thành cảm ơn các thầy giáo, cô giáo đã tham gia giảng dạy và đào tạo tôi trong quá trình học tập tại Viện Cơ học – Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam. Xin chân thành cảm ơn Học viện Khoa học và Công nghệ và Viện Cơ học (Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam) đã tạo những điều kiện thuận lợi để tôi nghiên cứu và hoàn thành luận án này.

Tôi xin chân thành cảm ơn các thành viên trong nhóm nghiên cứu “Cơ học lưu chất ứng dụng” – Khoa Kỹ thuật Ô tô và Năng lượng – Trường Đại học Phenikaa với trường nhóm là PGS. TS. Vũ Văn Trường đã giúp đỡ tôi trong nghiên cứu cũng như chia sẻ các kinh nghiệm quý báu trong nghiên cứu khoa học.

Tôi xin chân thành cảm ơn Quỹ đổi mới sáng tạo Vingroup (VinIF) đã tài trợ học bổng tiến sĩ cho tôi để tôi có kinh phí hoàn thành luận án này. Các nghiên cứu trong luận án này cũng nằm trong đề tài “Nghiên cứu tính toán động lực học hạt lưu chất đa lớp với truyền nhiệt và chuyển pha” mã số 107.03-2019.307 do Quỹ Khoa học và Công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) tài trợ.

Cuối cùng, tôi xin gửi lời cảm ơn sâu sắc đến ông bà, bố mẹ cùng anh, em trong gia đình tôi đã động viên tinh thần cũng như hỗ trợ vật chất trong giai đoạn tôi nghiên cứu khoa học để thực hiện luận án. Đặc biệt cảm ơn gia đình nhỏ của tôi gồm vợ và con gái nhỏ đã giúp tôi thêm động lực vượt qua mọi khó khăn để hoàn thành luận án tiến sĩ này.

Hà Nội, ngày 05 tháng 06 năm 2023

Nghiên cứu sinh



Phạm Duy Bình

MỤC LỤC

| | |
|--|------|
| LỜI CAM ĐOAN | i |
| LỜI CẢM ƠN | ii |
| MỤC LỤC..... | iii |
| DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU, CÁC CHỮ CÁI VIẾT TẮT | vi |
| DANH MỤC CÁC BẢNG..... | xiii |
| DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ, ĐỒ THỊ | xiv |
| MỞ ĐẦU..... | 1 |
| CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN..... | 6 |
| 1.1. Một số khái niệm, định nghĩa cơ bản..... | 6 |
| 1.2. Tổng quan về sự hình thành hạt lưu chất đa thành phần | 8 |
| 1.2.1. Sự tách hạt của tia lưu chất..... | 8 |
| 1.2.2. Sự co lại của sợi lưu chất đa thành phần | 10 |
| 1.3. Tổng quan về tình hình nghiên cứu | 11 |
| 1.3.1. Ứng dụng của hạt đa thành phần | 11 |
| 1.3.2. Các công trình nghiên cứu hóa rắn hạt lưu chất | 14 |
| 1.4. Các phương pháp dùng trong mô phỏng số..... | 20 |
| 1.5. Kết luận Chương 1 | 24 |
| CHƯƠNG 2. NGHIÊN CỨU VÀ XÂY DỰNG CHƯƠNG TRÌNH TÍNH TOÁN CHO BÀI TOÁN CÓ TRUYỀN NHIỆT, CHUYỂN PHA..... | 26 |
| 2.1. Cơ sở khoa học | 26 |
| 2.2. Xây dựng chương trình tính toán..... | 31 |
| 2.3. Kiểm chứng chương trình tính toán vừa xây dựng..... | 47 |
| 2.3.1. Hạt nước với góc ướt nhỏ hơn 90° | 47 |
| 2.3.2. Hạt nước với góc ướt lớn hơn 90° | 50 |
| 2.4. Kết luận Chương 2..... | 52 |

| | |
|---|----|
| CHƯƠNG 3. NGHIÊN CỨU QUÁ TRÌNH TRUYỀN NHIỆT, CHUYỂN PHA CỦA HẠT LƯU CHẤT RỖNG TRÊN MỘT BỀ MẶT LẠNH..... | 54 |
| 3.1. Mô hình bài toán và chọn độ phân giải lưới..... | 54 |
| 3.2. Kết quả và thảo luận | 58 |
| 3.2.1. Ảnh hưởng của số Bond | 60 |
| 3.2.2. Ảnh hưởng của số Prandtl | 61 |
| 3.2.3. Ảnh hưởng của số Stefan..... | 63 |
| 3.2.4. Ảnh hưởng của tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng | 64 |
| 3.2.5. Ảnh hưởng của tỉ số bán kính..... | 65 |
| 3.2.6. Quá trình hóa rắn với góc ướt ngoài và trong bằng nhau..... | 66 |
| 3.2.7. Ảnh hưởng của góc ướt trong..... | 69 |
| 3.2.8. Ảnh hưởng của góc ướt ngoài | 70 |
| 3.2.9. Ảnh hưởng của góc phát triển..... | 73 |
| 3.2.10. Sự hình thành đỉnh chóp và thời gian hóa rắn của hạt lưu chất rỗng | 75 |
| 3.3. Kết luận Chương 3..... | 76 |
| CHƯƠNG 4. NGHIÊN CỨU QUÁ TRÌNH TRUYỀN NHIỆT, CHUYỂN PHA CỦA HẠT LƯU CHẤT RỖNG CHỊU ẢNH HƯỞNG CỦA ĐỐI LƯU CƯỜNG BỨC..... | 78 |
| 4.1. Mô hình bài toán và chọn độ phân giải lưới | 78 |
| 4.2. Kết quả và thảo luận | 81 |
| 4.2.1. Ảnh hưởng của số Reynolds..... | 83 |
| 4.2.2. Ảnh hưởng của số Stefan..... | 84 |
| 4.2.3. Ảnh hưởng tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng..... | 86 |
| 4.2.4. Ảnh hưởng của kích thước nhân hóa rắn..... | 87 |
| 4.2.5. Ảnh hưởng của độ lệch tâm ban đầu | 88 |
| 4.2.6. Ảnh hưởng của tỉ số bán kính..... | 89 |

| | |
|--|----|
| 4.2.7. Ảnh hưởng của góc phát triển..... | 90 |
| 4.3. Kết luận Chương 4..... | 92 |
| KẾT LUẬN CHUNG..... | 93 |
| HƯỚNG PHÁT TRIỂN TRONG TƯƠNG LAI | 95 |
| DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA NGHIÊN CỨU SINH..... | 96 |
| TÀI LIỆU THAM KHẢO..... | 97 |

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU, CÁC CHỮ CÁI VIẾT TẮT

| Ký hiệu | Ý nghĩa | Đơn vị |
|-----------|--|------------------|
| Ar_o | Tỉ số hình dạng ngoài | |
| Ar_i | Tỉ số hình dạng trong | |
| A | Thành phần đối lưu | |
| B | Thành phần chứa thông lượng nhiệt | |
| Bo | Số Bond | |
| C_p | Nhiệt dung riêng đẳng áp | J/K |
| C_{ps} | Nhiệt dung riêng đẳng áp pha rắn | J/K |
| C_{pg} | Nhiệt dung riêng đẳng áp pha khí | J/K |
| C_{psl} | Tỉ số nhiệt dung riêng đẳng áp giữa pha rắn và pha lỏng | |
| C_{pgl} | Tỉ số nhiệt dung riêng đẳng áp giữa pha khí và pha lỏng | |
| C | Hàm color dùng trong phương pháp VOF | |
| Ca | Số Capillary | |
| C, F, K | Các thành phần con trong phương trình năng lượng | |
| D_i | Đường kính tương đương của hạt lưu chất | m |
| D | Thành phần khuếch tán | |
| d_{os} | Đường kính lớn nhất của hạt ngoài | m |
| d_{is} | Đường kính lớn nhất của hạt bóng khí | m |
| E | Thành phần liên quan đến sức căng bề mặt | |
| $error$ | Sai số cho phép khi giải phương trình áp suất | |
| f | Véc tơ lực áp đặt điều kiện biên không trượt tại pha rắn | N |
| g | Véc tơ gia tốc trọng trường | m/s ² |
| g^k | Véc tơ gia tốc trọng trường không thứ nguyên | |
| H | Chiều cao miền tính toán | m |
| H_d | Chiều cao của hạt lưu chất tại thời điểm τ | m |
| H_s | Chiều cao biên hóa rắn | m |

| | | |
|----------------------------------|---|--------|
| H_{s-theo} | Chiều cao biên hóa rắn theo lý thuyết | m |
| H_{in} | Chiều cao hạt bóng khí khi quá trình hóa rắn kết thúc | m |
| H_{out} | Chiều cao hạt ngoài khi quá trình hóa rắn kết thúc | m |
| $H_{out-theo}$ | Chiều cao hạt ngoài khi quá trình hóa rắn kết thúc theo lý thuyết | m |
| h | Bề rộng một mắt lưới | m |
| h_{0i} | Chiều cao ban đầu của hạt bóng khí | m |
| h_{0o} | Chiều cao ban đầu của hạt ngoài | m |
| h_n | Thành phần áp đặt nhiệt độ T_c tại nhân hóa rắn | |
| I | Hàm chỉ thị | |
| I_1, I_2 (hoặc I_s, I_l) | Các hàm chỉ thị để phân biệt giữa các pha rắn, lỏng và khí | |
| k | Hệ số dẫn nhiệt | W(m.K) |
| k_s | Hệ số dẫn nhiệt pha rắn | W(m.K) |
| k_l | Hệ số dẫn nhiệt pha lỏng | W(m.K) |
| k_g | Hệ số dẫn nhiệt pha khí | W(m.K) |
| k_{sl} | Tỉ số hệ số dẫn nhiệt giữa pha rắn và pha lỏng | |
| k_{gl} | Tỉ số hệ số dẫn nhiệt giữa pha khí và pha lỏng | |
| L | Chiều dài tham chiếu | m |
| L_{os} | Chiều dài hạt ngoài khi quá trình hóa rắn kết thúc | m |
| L_{is} | Chiều dài hạt bóng khí khi quá trình hóa rắn kết thúc | m |
| L_h | Nhiệt ẩn chuyển pha | J/kg |
| $M(x,y,t)$ | Hàm đại diện cho biên hóa rắn theo phương pháp lưới Boltzmann | |
| N_s | Tổng số điểm của biên hóa rắn | |
| N_{eu} | Tổng số điểm lưới Euler | |
| \mathbf{n}_f | Véc tơ pháp tuyến đơn vị tại biên phân cách | |
| Oh | Số Ohnesorge | |

| | | |
|-------------------|---|------------------|
| Pr | Số Prandtl | |
| p | Áp suất | Pa |
| p^k | Áp suất không thứ nguyên | |
| p^α | Áp suất tại vòng lặp α | Pa |
| $p^{\alpha+1}$ | Áp suất tại vòng lặp $\alpha + 1$ | Pa |
| p_{re} | Áp suất tham chiếu | Pa |
| p_n | Áp suất không thứ nguyên | |
| \dot{q} | Thông lượng nhiệt tại biên chuyển pha | W/m ² |
| Re | Số Reynolds | |
| R (hoặc R_o) | Bán kính tương đương của hạt lưu chất đơn hoặc bán kính tương đương của hạt ngoài của hạt lưu chất rỗng | m |
| R_i | Bán kính tương đương của hạt bóng khí bên trong của hạt lưu chất rỗng | m |
| R_{io} | Tỉ số bán kính của hạt bóng khí với hạt ngoài | |
| R_w | Bán kính ướt của hạt lưu chất trên bề mặt lạnh | m |
| R_a | Tọa độ hướng tâm biên hóa rắn | m |
| St | Số Stefan | |
| S | Diện tích | m ² |
| S^k | Diện tích không thứ nguyên | |
| T | Nhiệt độ | °K |
| T^k | Nhiệt độ không thứ nguyên | |
| T_t | Nhiệt độ tham chiếu | °K |
| T_c | Nhiệt độ của bề mặt lạnh hoặc của nhân hóa rắn | °K |
| T_0 | Nhiệt độ ban đầu của pha khí | °K |
| T_m | Nhiệt độ chuyển pha | °K |
| T_f | Nhiệt độ tại biên hóa rắn | °K |
| $T_l(x,y,t)$ | Hàm đại diện cho nhiệt độ pha lỏng theo phương pháp lưới Boltzmann | °K |

| | | |
|--------------------|--|----------------|
| $T_s(x,y,t)$ | Hàm đại diện cho nhiệt độ pha rắn theo phương pháp lưới Boltzmann | °K |
| t | Thời gian | s |
| t_s | Thời gian hóa rắn | s |
| t^k | Thời gian không thứ nguyên | |
| t_t | Thời gian tham chiếu | s |
| t_{max} | Thời gian tối đa cho phép trong chương trình lặp | |
| \mathbf{t} | Véc tơ tiếp tuyến của bề mặt phân cách | |
| tx | Độ lớn của véc tơ tiếp tuyến tại bề mặt phân cách chiếu theo phương x | |
| ty | Độ lớn của véc tơ tiếp tuyến tại bề mặt phân cách chiếu theo phương y | |
| U_t | Vận tốc tham chiếu | m/s |
| U_{in} | Vận tốc đầu vào của miền tính toán | m/s |
| \mathbf{u} | Véc tơ vận tốc | m/s |
| \mathbf{u}^k | Véc tơ vận tốc không thứ nguyên | |
| \mathbf{u}^T | Chuyển vị của véc tơ vận tốc \mathbf{u} | m/s |
| $(\mathbf{u}^k)^T$ | Chuyển vị của véc tơ vận tốc \mathbf{u}^k | |
| \mathbf{u}^* | Véc tơ vận tốc trung gian | m/s |
| \mathbf{u}_F | Véc tơ vận tốc áp đặt | m/s |
| $\hat{\mathbf{u}}$ | Véc tơ vận tốc ước tính ở bước thời gian $n + 1$ | m/s |
| \mathbf{u}_s | Véc tơ vận tốc trong pha rắn | m/s |
| \mathbf{V}_f | Véc tơ vận tốc vuông góc với biên phân cách | m/s |
| V_n | Vận tốc của biên hóa rắn | m/s |
| V_v | Vận tốc trượt theo phương thẳng đứng của điểm chấp ba pha theo Anderson và cộng sự | m/s |
| V_s | Vận tốc trượt theo phương nằm ngang của điểm chấp ba pha theo Anderson và cộng sự | m/s |
| V | Thể tích của hạt lưu chất tại thời điểm τ | m ³ |

| | | |
|----------------------|--|----------|
| V_0 | Thể tích ban đầu của hạt lưu chất đơn hoặc thể tích ban đầu của hạt ngoài của hạt lưu chất rỗng | m^3 |
| V_i | Thể tích ban đầu của hạt bóng khí | m^3 |
| V_l | Thể tích pha lỏng | m^3 |
| V_d | Thể tích của hạt tại thời điểm τ | m^3 |
| We | Số Weber | |
| W | Bề rộng của miền tính toán | m |
| w | Hàm trọng số diện tích | |
| $Y(x), X(y)$ | Hai hàm một biến để xác định độ nghiêng của đoạn thẳng xấp xỉ theo phương pháp thể tích lưu chất | |
| \mathbf{x} | Véc tơ vị trí | m |
| \mathbf{x}^k | Véc tơ vị trí không thứ nguyên | |
| \mathbf{x}_f | Véc tơ vị trí tại các biên phân cách giữa các pha | m |
| \mathbf{x}_f^n | Véc tơ vị trí của biên phân cách tại bước n | m |
| \mathbf{x}_f^{n+1} | Véc tơ vị trí của biên phân cách tại bước $n + 1$ | m |
| z_{c-in} | Tọa độ trọng tâm của hạt bóng khí | m |
| z_{c-out} | Tọa độ trọng tâm của hạt ngoài | m |
| z_{c0} | Tọa độ trọng tâm của hạt lưu chất đơn | m |
| z_{sfi} | Tọa độ trục của biên hóa rắn tại điểm i | m |
| z_{co0} | Tọa độ trọng tâm ban đầu của hạt ngoài | m |
| z_{ci0} | Tọa độ trọng tâm ban đầu của hạt bóng khí | m |
| Δx | Khoảng cách giữa hai điểm lưới liền kề theo phương x | m |
| Δy | Khoảng cách giữa hai điểm lưới liền kề theo phương y | m |
| ρ | Khối lượng riêng | Kg/m^3 |
| ρ_s | Khối lượng riêng pha rắn | Kg/m^3 |
| ρ_l | Khối lượng riêng pha lỏng | Kg/m^3 |
| ρ_g | Khối lượng riêng pha khí | Kg/m^3 |

| | | |
|--------------|--|----------|
| ρ_{sl} | Tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng | |
| ρ_{gl} | Tỉ số khối lượng riêng giữa pha khí và pha lỏng | |
| ν | Tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng theo lý thuyết của Snoijer và Brunet | |
| ν_c | Tỉ số khối lượng riêng đặc biệt theo lý thuyết Snoijer và Brunet, có giá trị là 3/4 | |
| μ | Độ nhớt động lực | Kg/(m.s) |
| μ_g | Độ nhớt động lực của pha khí | Kg/(m.s) |
| μ_l | Độ nhớt động lực của pha lỏng | Kg/(m.s) |
| μ_{gl} | Tỉ số độ nhớt động lực giữa pha khí và pha lỏng | |
| σ | Hệ số sức căng bề mặt | N/m |
| σ^k | Hệ số sức căng bề mặt không thứ nguyên | |
| σ_i | Hệ số sức căng bề mặt tại biên trong | N/m |
| σ_o | Hệ số sức căng bề mặt tại biên ngoài | N/m |
| θ_0 | Nhiệt độ không thứ nguyên ban đầu | |
| θ | Nhiệt độ không thứ nguyên | |
| θ_h | Kí hiệu góc ướt của hạt nước trên bề mặt lạnh theo Huang và cộng sự | ° |
| Δt | Khoảng thời gian giữa bước n và $n + 1$ | s |
| τ | Thời gian không thứ nguyên | |
| τ_s | Thời gian hóa rắn không thứ nguyên | |
| τ_A | Thời gian không thứ nguyên tại điểm gián đoạn A | |
| ϕ_o | Góc ướt của hạt lưu chất đơn | ° |
| ϕ_{o_o} | Góc ướt của hạt ngoài | ° |
| ϕ_{o_i} | Góc ướt của hạt bóng khí | ° |
| ϕ_{gr} | Góc phát triển của hạt lưu chất | ° |
| ϕ_l | Góc tạo bởi tiếp tuyến bề mặt lỏng-khí với bề mặt ngang tại điểm chấp ba pha | ° |

| | | |
|---------------------------------------|---|------------------|
| ϕ_s | Góc tạo bởi tiếp tuyến bề mặt rắn-khí với bề mặt ngang tại điểm chập ba pha | o |
| ϕ_i | Kí hiệu góc phát triển theo Anderson và cộng sự | o |
| ϕ_a | Kí hiệu góc tiếp xúc tại điểm chập ba pha theo Anderson và cộng sự | o |
| ϕ | Đường tập mức của hạt theo phương pháp tập mức | |
| ψ | Đường tập mức của biên hóa rắn theo phương pháp tập mức | |
| Γ_ϕ^l | Hàm đại diện cho biên lỏng-khí theo phương pháp tập mức | |
| Γ_ϕ^s | Hàm đại diện cho biên rắn-khí theo phương pháp tập mức | |
| Γ_ψ^a | Hàm đại diện cho biên hóa rắn bên trong hạt theo phương pháp tập mức | |
| Γ_ψ^p | Hàm đại diện cho biên hóa rắn ảo bên ngoài hạt theo phương pháp tập mức | |
| Ω_g | Hàm đại diện cho đặc tính pha khí theo phương pháp tập mức | |
| Ω_l | Hàm đại diện cho đặc tính pha lỏng theo phương pháp tập mức | |
| Ω_s | Hàm đại diện cho đặc tính pha rắn theo phương pháp tập mức | |
| κ | Độ cong trung bình của biên phân cách | 1/m |
| κ^k | Độ cong không thứ nguyên trung bình của biên phân cách | |
| $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)$ | Hàm delta Dirac | 1/m ³ |
| $\delta^k(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)$ | Hàm delta Dirac không thứ nguyên | |

DANH MỤC CÁC BẢNG

| | |
|---|----|
| <i>Bảng 3.1. Sai số trung bình của lưới 128×256 so với độ phân giải lưới 256×512</i> | 57 |
| <i>Bảng 4.1. Sai số trung bình của các lưới khác nhau so với độ phân giải lưới 384×1536</i> | 81 |

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ, ĐỒ THỊ

| | |
|--|----|
| Hình 1.1. Một số hình dạng của hạt đa thành phần [15]..... | 6 |
| Hình 1.2. Hạt đa thành phần hình thành nhờ sự tách hạt của tia lưu chất khi lưu chất đi qua các vòi phun đồng trục [16]..... | 9 |
| Hình 1.3. Sự hình thành hạt đa thành phần khi cho lưu chất đi qua các kênh cắt nhau [17]..... | 9 |
| Hình 1.4. Sự hình thành hạt đa thành phần từ một cặp vòi phun đồng trục [19].... | 10 |
| Hình 1.5. Sự hình thành hạt đa thành phần do sự co lại của sợi lưu chất đa thành phần với các số Oh khác nhau [20]..... | 11 |
| Hình 1.6. Hạt bán dẫn trong chế tạo pin năng lượng mặt trời [5]..... | 13 |
| Hình 1.7. Băng đá hình thành trên cánh tuabin gió [12]..... | 14 |
| Hình 1.8. Kết quả mô hình lý thuyết của Snoijer và Brunet [30]. Tỉ số khối lượng riêng $\nu = 0,65; 0,75; 0,85; 1; 1,2$ (từ trên xuống dưới)..... | 15 |
| Hình 1.9. Kết quả thực nghiệm của Huang và cộng sự [34] với góc ướt thay đổi trong dải $76,0^\circ - 154,9^\circ$ | 17 |
| Hình 1.10. Hình dạng chóp nhọn tại đỉnh hạt hóa rắn với tỉ số khối lượng riêng khác nhau theo công trình nghiên cứu của Shetabivash và cộng sự [45]..... | 18 |
| Hình 1.11. Mô hình phương pháp tập mức trong giải quyết bài toán chuyển pha [45]..... | 21 |
| Hình 1.12. Biên xấp xỉ trong phương pháp thể tích lưu chất (VOF)..... | 21 |
| Hình 1.13. Mô hình phương pháp lưới Boltzmann trong giải quyết bài toán chuyển pha [63]..... | 22 |
| Hình 1.14. Các điểm liên kết trong bài toán chuyển pha của hạt đa thành phần | 23 |
| Hình 1.15. Giá trị của hàm chỉ thị..... | 24 |
| Hình 2.1. Sự hóa rắn của một hạt lưu chất trên bề mặt phẳng lạnh với miền tính toán $W \times H$ và bán kính ướt R_w | 26 |
| Hình 2.2. Bố trí các biến trong lưới so le [73]..... | 33 |
| Hình 2.3. Ký hiệu được sử dụng với lưới so le [73] cho áp suất và vận tốc..... | 34 |
| Hình 2.4. Hàm trọng số diện tích dùng trong nghiên cứu..... | 35 |
| Hình 2.5. Mô hình tính toán của hạt lưu chất hóa rắn trên bề mặt phẳng lạnh..... | 36 |
| Hình 2.6. Miền tính toán được sử dụng cho lưới MAC so le chuẩn..... | 40 |
| Hình 2.7. Thêm nút mới..... | 43 |
| Hình 2.8. Loại bỏ nút cũ..... | 44 |

| | |
|--|----|
| Hình 2.9. Cấu trúc của hàm chỉ thị trong lưới so le | 45 |
| Hình 2.10. Lược đồ giải | 46 |
| Hình 2.11. Quá trình hóa rắn của hạt nước trên một bề mặt lạnh theo thời gian với góc ướt $\phi_0 = 78^\circ$ | 48 |
| Hình 2.12. So sánh kết quả mô phỏng bằng phương pháp theo dấu biên [78] với kết quả thực nghiệm của Zhang và cộng sự [72] với góc ướt $\phi_0 = 85^\circ$ | 49 |
| Hình 2.13. Sự tiến triển theo thời gian của hạt nước hóa rắn trên một bề mặt lạnh với góc ướt $\phi_0 = 124^\circ$ | 51 |
| Hình 2.14. Sự tiến triển theo thời gian của hạt nước được đặt trên một bề mặt lạnh với góc ướt $\phi_0 = 155^\circ$ | 52 |
| Hình 3.1. Hạt lưu chất rỗng đối xứng hóa rắn trên một bề mặt lạnh được giữ tại nhiệt độ T_c | 54 |
| Hình 3.2. Nghiên cứu độ hội tụ lưới đối với hạt lưu chất rỗng hóa rắn trên một bề mặt lạnh | 57 |
| Hình 3.3. Quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng điển hình | 58 |
| Hình 3.4. Ảnh hưởng của số Bo tới quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh | 60 |
| Hình 3.5. Ảnh hưởng của số Pr tới quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh | 62 |
| Hình 3.6. Ảnh hưởng của số St tới quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh | 63 |
| Hình 3.7. Ảnh hưởng của số ρ_{sl} tới quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh | 64 |
| Hình 3.8. Ảnh hưởng của số R_{io} tới quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh | 66 |
| Hình 3.9. Quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh với góc ướt trong và ngoài bằng nhau $\phi_0 = 180^\circ - \phi_{0i} = \phi_{0o}$ | 67 |
| Hình 3.10. Hình dạng của hạt lưu chất rỗng hóa rắn và độ tăng chiều cao của hạt ngoài với $\phi_0 = 180^\circ - \phi_{0i} = \phi_{0o}$ thay đổi trong dải $60^\circ - 130^\circ$ | 68 |
| Hình 3.11. Quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với góc ướt trong (ϕ_{0i}) thay đổi trong dải $50^\circ - 120^\circ$ | 69 |
| Hình 3.12. Hình dạng và độ tăng chiều cao của hạt bóng khí sau khi hoàn thành quá trình hóa rắn với góc ướt trong (ϕ_{0i}) thay đổi trong dải $50^\circ - 120^\circ$ | 70 |
| Hình 3.13. Sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với góc ướt ngoài (ϕ_{0o}) thay đổi trong dải $60^\circ - 130^\circ$ | 71 |

| | |
|--|----|
| Hình 3.14. Hình dạng và độ tăng chiều cao của hạt ngoài sau khi quá trình hóa rắn kết thúc với ϕ_{0o} biến đổi trong dải $60^\circ - 130^\circ$ | 72 |
| Hình 3.15. Sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với góc phát triển (ϕ_{gr}) thay đổi trong dải $0^\circ - 25^\circ$ | 73 |
| Hình 3.16. Hình dạng và độ tăng chiều cao của hạt ngoài và hạt trong sau khi quá trình hóa rắn kết thúc với ϕ_{gr} trong dải $0^\circ - 25^\circ$ | 74 |
| Hình 3.17. Sự thay đổi của thời gian hóa rắn ứng với số St và ρ_{sl} | 75 |
| Hình 4.1. Mô hình bài toán mô phỏng với một nửa hạt lưu chất rỗng đối xứng lơ lửng với dòng cưỡng bức phía đáy của miền tính toán | 78 |
| Hình 4.2. Nghiên cứu độ phân giải lưới | 80 |
| Hình 4.3. Quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng lơ lửng dưới tác động của đối lưu cưỡng bức điển hình | 81 |
| Hình 4.4. Sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng hóa rắn lơ lửng với số Reynolds (Re) thay đổi trong dải $25 - 200$ | 84 |
| Hình 4.5. Hóa rắn hạt lưu chất rỗng lơ lửng với số Stefan (St) thay đổi trong dải $0,025 - 1,6$ | 85 |
| Hình 4.6. Hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng (ρ_{sl}) thay đổi trong dải $0,8 - 1,2$ | 86 |
| Hình 4.7. Sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng lơ lửng với kích thước nhân hóa rắn (r_0/R) thay đổi trong dải $0,05 - 0,3$ | 87 |
| Hình 4.8. Hóa rắn của hạt lưu chất rỗng lơ lửng với độ lệch tâm ban đầu (ϵ_0) biến đổi trong dải $-0,15 - 0,3$ | 88 |
| Hình 4.9. Hóa rắn hạt lơ lửng với tỉ số bán kính (R_{io}) thay đổi trong dải $0,2 - 0,7$ | 90 |
| Hình 4.10. Hóa rắn hạt lưu chất rỗng lơ lửng với góc phát triển (ϕ_{gr}) thay đổi trong dải $0^\circ - 15^\circ$ | 91 |

MỞ ĐẦU

Tính cấp thiết của đề tài

Các lưu chất (chất lỏng hoặc chất khí) khi nhúng vào lưu chất khác mà bề mặt các lưu chất này có xuất hiện sức căng bề mặt sẽ tạo thành các hạt lưu chất. Các hạt lưu chất này có thể xảy ra quá trình hóa rắn trong tự nhiên hoặc trong các quá trình công nghiệp. Ngày nay, quá trình chuyển pha hạt lưu chất như vậy được nhiều nhà nghiên cứu quan tâm và được ứng dụng rộng rãi [1]–[7]. Trong đó, hạt lưu chất đa thành phần (sau đây gọi tắt là hạt đa thành phần) có tiềm năng ứng dụng rất lớn trong việc chế tạo pin năng lượng mặt trời. Có rất nhiều nhà nghiên cứu quan tâm đến nguồn năng lượng có thể tái tạo này vì chúng gần như vô tận và ít gây ra những tác hại tiêu cực đến môi trường như đối với nguồn nhiên liệu hóa thạch. Biancardo và cộng sự [5] đã nghiên cứu các hạt bán dẫn để biến đổi năng lượng ánh sáng mặt trời thành năng lượng điện. Các hạt Silic cầu được đặt trong một tấm lưới. Theo đó, giá trị sử dụng của hạt bán dẫn chỉ chủ yếu là một lớp mỏng bên ngoài hạt. Do đó, việc sử dụng hạt rỗng (hay hạt lưu chất đa thành phần hóa rắn) sẽ giúp tiết kiệm chất bán dẫn hơn là làm cho tấm lưới bán dẫn được nhẹ hơn mà hiệu quả chuyển đổi năng lượng là không đổi. Một số các công trình khác có nghiên cứu việc chế tạo pin mặt trời có thể tham khảo tại [4], [8], [9]. Việc nghiên cứu sự chuyển pha của các hạt đa thành phần bán dẫn như vậy có thể giúp việc chế tạo những tấm pin mặt trời đại trà, rẻ hơn và rộng rãi hơn.

Việc nghiên cứu chuyển pha (trong luận án này là hóa rắn) hạt lưu chất đa thành phần còn giúp tìm ra giải pháp phá băng đá trên bề mặt cánh máy bay [10] và tuabin gió [11], [12] nhằm nâng cao tuổi thọ và hiệu suất máy. Theo đó, hạt nước trong không khí khi tiếp xúc với bề mặt cánh của máy bay hoặc tuabin gió sẽ bị hóa rắn nếu nhiệt độ tại bề mặt cánh nhỏ hơn nhiệt độ hóa rắn của nước. Các hạt nước như vậy có thể lẫn các bóng khí bên trong và chúng cũng bị hóa rắn khi bám vào các bề mặt cánh. Sự hóa rắn của hạt nước trên bề mặt cánh có thể là một nguyên nhân nghiêm trọng giảm hiệu suất và tuổi thọ của máy. Nguy hiểm hơn khi nó là một trong những nguyên nhân trong các vụ tai nạn hàng không nghiêm trọng do ảnh hưởng tới khí động lực học của dòng khí khi qua cánh máy bay [10], [13], [14]. Do đó, việc ứng dụng nghiên cứu sự truyền nhiệt, chuyển pha của hạt lưu chất nói

chung và hạt đa thành phần nói riêng góp phần tìm ra giải pháp, tránh các thiệt hại và nâng cao hiệu suất của máy.

Ngoài ra, hạt lưu chất đa thành phần còn được sử dụng để loại bỏ các hạt nước bẩn [7], trong công nghệ thực phẩm [2], [3] và sản xuất vật liệu hấp thụ âm thanh [6].

Việc nghiên cứu hóa rắn hạt đa thành phần có truyền nhiệt, chuyển pha có tiềm năng ứng dụng rất lớn đặc biệt trong việc chế tạo pin năng lượng mặt trời và loại bỏ băng đá trên bề mặt cánh máy bay, tuabin. Việc hiểu thấu đáo các đặc tính vật lý sâu bên trong của động lực học truyền nhiệt, chuyển pha của hạt lưu chất đa thành phần (điều mà khó có thể đạt được bằng lý thuyết hay thực nghiệm) là cần thiết. Đây cũng là mục đích chính cho sự ra đời của đề tài luận án tiến sĩ “*Nghiên cứu tính toán động lực học hạt lưu chất đa thành phần có truyền nhiệt, chuyển pha*”.

Mục tiêu của đề tài

Mục tiêu tổng quát của đề tài: nghiên cứu quá trình truyền nhiệt, chuyển pha (ở đây là quá trình hóa rắn) của **hạt lưu chất rỗng** (một loại hạt lưu chất đa thành phần có nhân khí bên trong) bằng phương pháp theo dấu biên (front-tracking method).

Mục tiêu cụ thể của đề tài: xây dựng mô hình tính toán hạt lưu chất rỗng hóa rắn và khảo sát ảnh hưởng của các thông số không thứ nguyên đến quá trình hóa rắn **hạt lưu chất rỗng**.

Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề tài

Ý nghĩa khoa học của đề tài: thiết lập một chương trình tính toán mô phỏng số để mô tả các quá trình vật lý động lực học chuyển pha của **hạt lưu chất rỗng**. Các thông số không thứ nguyên được xây dựng để đặc trưng cho các tính chất của lưu chất nghiên cứu và qua đó cho thấy sự ảnh hưởng của chúng đến quá trình chuyển pha của hạt.

Ý nghĩa thực tiễn của đề tài: thông qua việc khảo sát ảnh hưởng của các thông số không thứ nguyên ảnh hưởng đến quá trình hóa rắn và hình dạng của hạt lưu chất rỗng, kết quả nghiên cứu có thể ứng dụng trong quá trình chế tạo pin

mặt trời và giúp các nhà nghiên cứu ứng dụng trong việc đối phó với quá trình hóa rắn của hạt chất lỏng trên bề mặt cánh,...

Đối tượng và phạm vi nghiên cứu của đề tài

Đối tượng nghiên cứu của đề tài: các **hạt lưu chất lỏng** có kích thước nhỏ từ vài trăm micromet đến vài milimet. Chúng được hóa rắn khi tiếp xúc với bề mặt lạnh hoặc ở trong một môi trường lạnh.

Phạm vi nghiên cứu của đề tài: tập trung vào các lưu chất không nén được, không trộn lẫn và là lưu chất Newton. Phương trình Navier-Stokes cùng phương trình năng lượng được sử dụng. Các bài toán trong luận án này được giải quyết trong hệ tọa độ trụ. Các thông số không thứ nguyên được xem xét và chúng được khảo sát qua các dải giá trị khác nhau. Do hạn chế về mặt thời gian nên chỉ một số thông số không thứ nguyên và thông số chính được lựa chọn và khảo sát.

Phương pháp nghiên cứu

Ngôn ngữ lập trình Fortran được sử dụng để xây dựng chương trình tính toán. Phương pháp sai phân hữu hạn được sử dụng để xấp xỉ các phương trình tính toán trên một nền lưới cố định (lưới Euler). Thêm nữa, do có sự xuất hiện của các lưu chất khác nhau nên xuất hiện các biên phân cách giữa các pha. Trong luận án này, phương pháp theo dấu biên (front-tracking method) được sử dụng để theo dõi sự di chuyển các biên phân cách của các pha đó. Cụ thể, các biên phân cách giữa các pha được đại diện bởi các điểm liên kết và các điểm liên kết này di chuyển trên nền lưới cố định.

Điểm mới của luận án

- Đã xây dựng được một mô hình tính toán của **hạt lưu chất lỏng** hóa rắn đặt trên một bề mặt lạnh và **hạt lưu chất lỏng lơ lửng** hóa rắn trong môi trường tự do dưới tác động của đối lưu cưỡng bức. Cụ thể, hạt bóng khí hạt lưu chất được thêm vào bên trong hạt lưu chất tạo thành mô hình một hạt lưu chất lỏng. Từ đó, xuất hiện thêm một điểm chấp ba pha ở biên phía bên trong của hạt;
- Đã phân tích ảnh hưởng của các thông số không thứ nguyên đến **quá trình hóa rắn của hạt lưu chất lỏng** trên bề mặt lạnh. Qua đó, có thể điều chỉnh

được hình dạng và thời gian hóa rắn của **hạt lưu chất rỗng** trên bề mặt lạnh đó bằng cách điều chỉnh các thông số không thứ nguyên;

- Đã phân tích ảnh hưởng của các thông số không thứ nguyên đến quá trình hóa rắn **hạt lưu chất rỗng lơ lửng trong môi trường tự do dưới tác động của đối lưu cưỡng bức**. Điều chỉnh các thông số không thứ nguyên này sẽ gây ra thay đổi về hình dạng và thời gian hóa rắn của **hạt lưu chất rỗng lơ lửng trong môi trường tự do dưới tác động của đối lưu cưỡng bức**.

Cấu trúc của luận án

Nội dung chính của luận án bao gồm:

Chương 1: Tổng quan

Trình bày tổng quan về động lực học hạt đa thành phần bao gồm: một số khái niệm cơ bản, sự hình thành, các ứng dụng, các công trình nghiên cứu và các phương pháp phổ biến dùng trong mô phỏng động lực học chuyển pha của của hạt đa thành phần.

Chương 2: Nghiên cứu và xây dựng chương trình tính toán cho bài toán có truyền nhiệt, chuyển pha

Nghiên cứu xây dựng chương trình tính toán cho bài toán hạt lưu chất hóa rắn. Các phương trình tổng quát Navier-Stokes và phương trình năng lượng được rời rạc hóa và đưa vào các mô đun tính toán. Sau khi xây dựng được chương trình tính toán, để kiểm chứng độ chính xác, kết quả mô phỏng được so sánh với các kết quả thực nghiệm của các nhà nghiên cứu.

Chương 3: Nghiên cứu quá trình truyền nhiệt, chuyển pha của hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh

Chương này giải quyết bài toán hạt lưu chất rỗng hóa rắn trên một bề mặt lạnh. Một loạt các thông số không thứ nguyên và các thông số hình học được xem xét trong chương này. Qua đó, cho thấy được sự ảnh hưởng của chúng lên hình dạng và thời gian hóa rắn của hạt lưu chất rỗng.

Chương 4: Nghiên cứu quá trình truyền nhiệt, chuyển pha của hạt lưu chất rỗng chịu ảnh hưởng của đối lưu cưỡng bức

Chương này xem xét bài toán hạt lưu chất rỗng lơ lửng hóa rắn trong môi trường lạnh dưới sự tác động của một dòng cưỡng bức. Các thông số không thứ nguyên chính và góc phát triển cũng được xem xét để khảo sát ảnh hưởng của chúng lên hình dạng và thời gian hóa rắn của hạt.

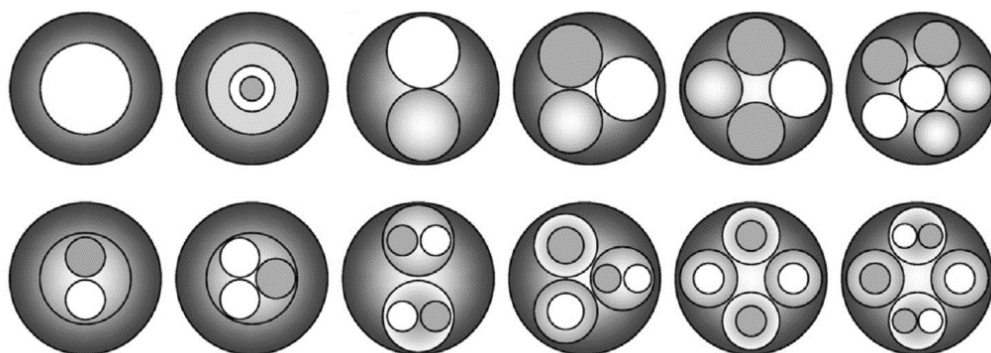
Cuối cùng là phần **kết luận** đưa ra tóm tắt các kết quả đã đạt được và những vấn đề cần giải quyết trong tương lai.

CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN

1.1. Một số khái niệm, định nghĩa cơ bản

Sau đây là một số khái niệm, định nghĩa cơ bản các kí hiệu, thuật ngữ được dùng trong luận án.

- Hạt lưu chất là hạt được tạo thành bởi một hoặc nhiều lưu chất (ở đây là chất lỏng, chất khí) không trộn lẫn và được nhúng trong một lưu chất khác. Với sự có mặt của sức căng bề mặt trên bề mặt lưu chất, các hạt lưu chất được hình thành.
- Hạt lưu chất đa thành phần là hạt lưu chất bên trong có chứa các hạt lưu chất con khác (xem *Hình 1.1*).
- Hạt lưu chất rỗng là hạt lưu chất đa thành phần mà có một hạt bóng khí bên trong.
- Hiện tượng chuyển pha của hạt lưu chất (ở đây là hiện tượng hóa rắn) là hiện tượng hạt lưu chất chuyển từ pha lỏng sang pha rắn khi hạt lưu chất trong một môi trường lạnh hoặc hạt tiếp xúc với các tác nhân khác có nhiệt độ nhỏ hơn nhiệt độ hóa rắn của lưu chất.
- Bề mặt lạnh (ở đây là bề mặt phẳng lạnh) là bề mặt đặt hạt lưu chất được giữ ở một nhiệt độ cố định và nhiệt độ này nhỏ hơn nhiệt độ hóa rắn của lưu chất. Trong nghiên cứu này, hạt đa thành phần đơn nhân là hạt lưu chất rỗng (hạt lưu chất có một hạt bóng khí bên trong). Vì vậy, chỉ có vỏ chất lỏng bao quanh hạt bóng khí của hạt chuyển pha trong quá trình hóa rắn.



Hình 1.1. Một số hình dạng của hạt đa thành phần [15]

- Đối lưu cưỡng bức là dòng được áp đặt chảy bao quanh hạt lưu chất, ở đây, dòng có vận tốc và nhiệt độ được cho sẵn và được giữ nguyên trong quá trình hóa rắn.

Ký hiệu các số không thứ nguyên được sử dụng trong luận án và ý nghĩa của chúng là:

- Re - số Reynolds, đặc trưng cho sự ảnh hưởng giữa lực quán tính với lực nhớt của lưu chất. Số Reynolds được tính toán là:

$$Re = \frac{\rho L U_t}{\mu} \quad (1.1)$$

- St - số Stefan, biểu thị mối quan hệ giữa nhiệt cảm với nhiệt ẩn chuyển pha. Số Stefan được tính toán như sau:

$$St = \frac{C_p (T_m - T_c)}{L_h} \quad (1.2)$$

- Bo - số Bond, đặc trưng cho sự ảnh hưởng của lực hấp dẫn và lực căng bề mặt của lưu chất. Số Bond được tính toán như sau:

$$Bo = \frac{\rho g L^2}{\sigma_o} \quad (1.3)$$

- We - số Weber, đại diện cho lực quán tính so với lực căng bề mặt của lưu chất. Số Weber được tính như sau:

$$We = \frac{\rho L U_t^2}{\sigma_o} \quad (1.4)$$

- Pr - số Prandtl, biểu thị mối quan hệ giữa khuếch tán động lượng với khuếch tán nhiệt. Số Prandtl được tính là:

$$Pr = \frac{C_p \mu}{k} \quad (1.5)$$

- Oh - số Ohnesorge, biểu thị mối quan hệ của lực nhớt với lực quán tính và lực căng bề mặt. Số Ohnesorge được tính là:

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho L \sigma_o}} \quad (1.6)$$

Trong các công thức (1.1) - (1.6), ta có:

ρ : khối lượng riêng (Kg/m³)

L : chiều dài tham chiếu (m)

U_t : vận tốc tham chiếu (m/s)

μ : độ nhớt động lực (Kg/(m.s))

C_p : nhiệt dung riêng đẳng áp (J/K)

T_m : nhiệt độ chuyển pha (°K)

T_c : nhiệt độ tác nhân gây hóa rắn (°K)

L_h : nhiệt ẩn chuyển pha (J/kg)

g : gia tốc trọng trường (m/s²)

σ_o : hệ số sức căng bề mặt tham chiếu (N/m)

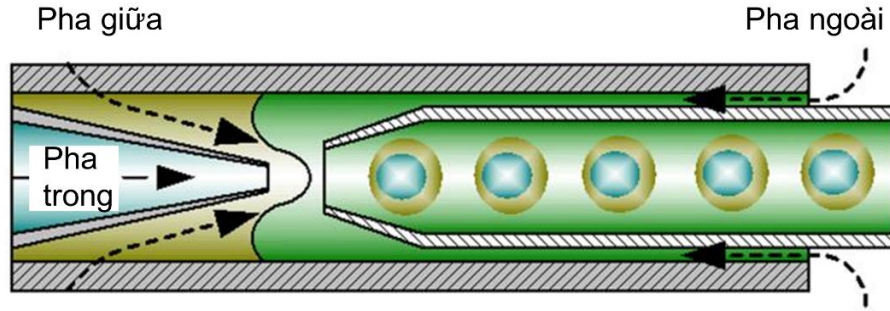
k : hệ số dẫn nhiệt (W(m.K))

1.2. Tổng quan về sự hình thành hạt lưu chất đa thành phần

Hạt lưu chất đa thành phần (gọi tắt là hạt đa thành phần) có nhiều ứng dụng trong đời sống và công nghiệp. Vậy hạt đa thành phần được tạo ra như thế nào? Sau đây là một số phương pháp tạo ra chúng.

1.2.1. Sự tách hạt của tia lưu chất

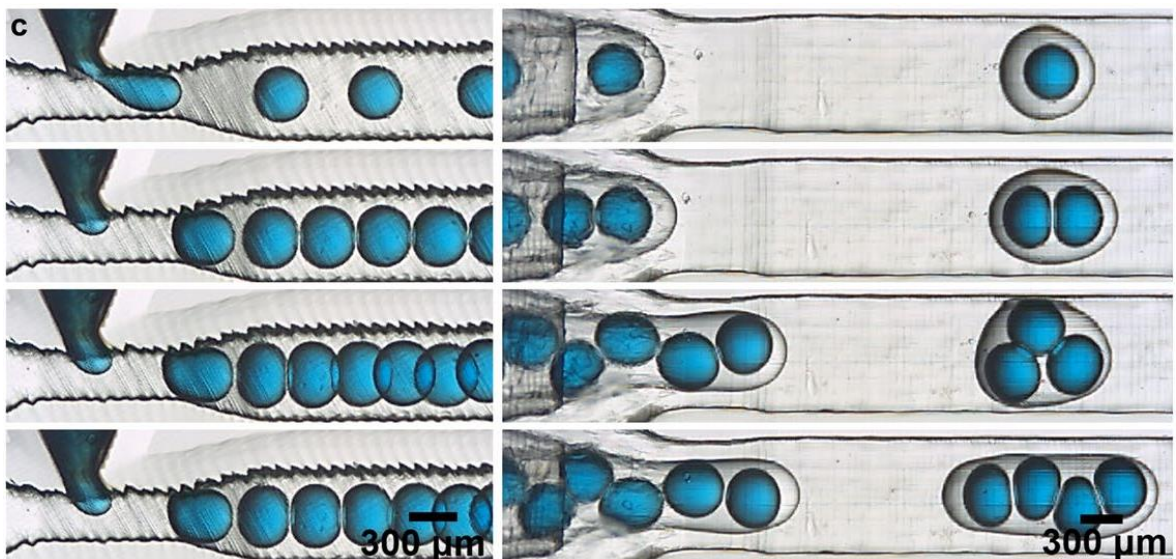
Việc tạo ra hạt đa thành phần có thể xuất hiện do sự tách hạt của tia lưu chất bằng việc cho lưu chất qua một vòi phun co hẹp dẫn đến sự tách hạt của tia lưu chất và hạt này đi qua các môi trường lưu chất khác nhau. Điển hình như công trình nghiên cứu của Chen và cộng sự [16]. Theo đó, một ống thu hẹp cùng một ống loe rộng được đặt đồng tâm với nhau và được lồng trong một ống lớn hơn (Hình 1.2). Một hạt lưu chất đơn trong ống thu hẹp (pha trong) được hình thành nhờ việc cho lưu chất đi qua vòi phun thu hẹp (tạo thành tia lưu chất). Do tia lưu chất tách hạt khi đi qua ống thu hẹp và sau đó, các hạt này đi qua một lưu chất khác trong pha giữa tạo thành một lớp lưu chất khác bao quanh hạt. Hạt và lớp lưu chất bao bọc tiếp tục



Hình 1.2. Hạt đa thành phần hình thành nhờ sự tách hạt của tia lưu chất khi lưu chất đi qua các vòi phun đồng trục [16]

qua pha ngoài (lưu chất ngoài) vào ống loe rộng thứ hai. Việc đi qua ống loe này sẽ làm tách hạt để tạo ra một hạt đa thành phần đơn nhân di chuyển trong môi trường lưu chất khác.

Ji và cộng sự [17] đã trình bày một công trình tương tự để tạo ra các hạt lưu chất đa thành phần. Theo đó, lưu chất được đi qua một ống thu hẹp. Ống thu hẹp này được đặt vuông góc và giao tại điểm co thắt với một ống lưu chất co thắt nằm ngang (Hình 1.3). Lưu chất qua ống thu hẹp và bị một dòng lưu chất khác trong ống co thắt cắt qua tạo thành các hạt đa thành phần (một, hai, ba hoặc bốn nhân). Tiếp tục hạt đa thành phần này lại di chuyển trong một môi trường lưu chất khác sau khi qua đoạn co thắt của ống.

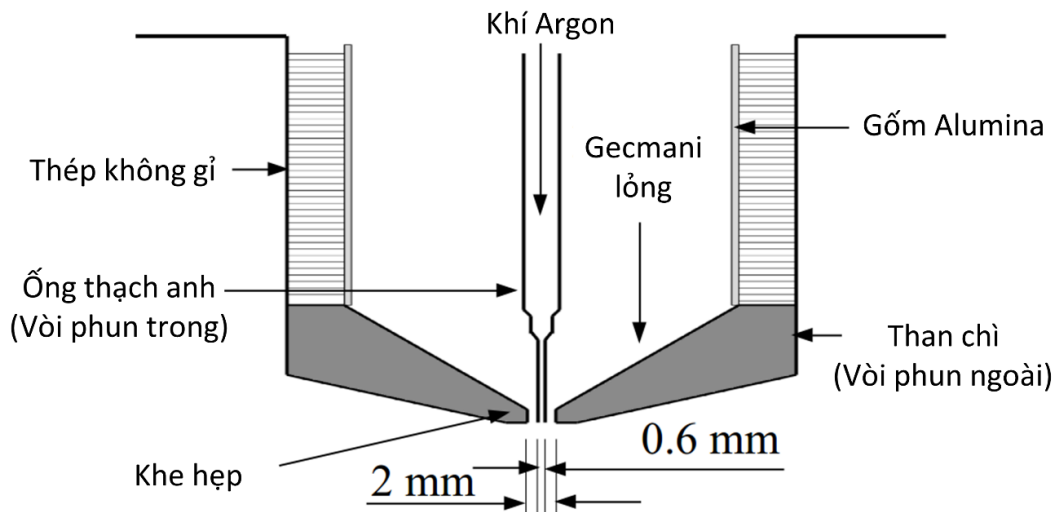


Hình 1.3. Sự hình thành hạt đa thành phần khi cho lưu chất đi qua các kênh cắt nhau [17]

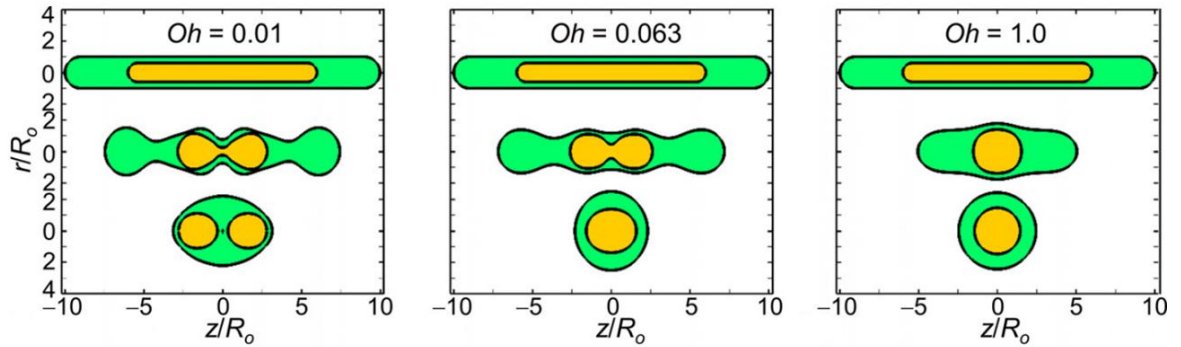
Việc tạo hạt đa thành phần cũng có thể được tạo ra từ một cặp vòi phun đồng trục như công trình thực nghiệm của Vũ và cộng sự [18] và Bhagat và cộng sự [19]. *Hình 1.4* thể hiện kết cấu của một cặp vòi phun đồng trục trong thí nghiệm của Bhagat và cộng sự [19]. Theo đó, lưu chất trong bình được ép chuyển động qua một vòi phun lớn (vòi phun ngoài) mà bên trong có chứa một vòi phun nhỏ (vòi phun trong) đồng trục. Theo đó, lưu chất sẽ được đẩy xuống qua khe giữa vòi phun trong và vòi phun ngoài. Đồng thời khí (hay một lưu chất khác) cũng được đẩy xuống từ vòi phun trong. Sau khi qua một cặp vòi phun đồng trục như vậy sẽ tạo ra một hạt lưu chất rỗng.

1.2.2. Sự co lại của sợi lưu chất đa thành phần

Một sợi lưu chất đa thành phần đang trong quá trình co lại cũng có thể tạo ra các hạt đa thành phần khi quá trình co lại kết thúc. Hồ và cộng sự [20] đã thực hiện mô phỏng một quá trình co lại của một sợi lưu chất đa thành phần như vậy (*Hình 1.5*). Theo đó, một sợi lưu chất đa thành phần bao gồm một sợi lưu chất mà bên trong có chứa một sợi lưu chất khác. Trong quá trình co lại cùng với sự thay đổi của các thông số khảo sát mà sợi lưu chất có thể tách ra thành các hạt con khác nhau hoặc chúng không tách hạt và tạo thành hạt đa thành phần đơn nhân. Các hạt con này có thể là hạt bao gồm một nhân hoặc nhiều nhân hoặc là hạt lưu chất đơn tùy theo sự thay đổi của các thông số chọn để chạy mô phỏng. Các nhân của hạt con này có thể có kích thước tương tự nhau hoặc có kích thước khác nhau.



Hình 1.4. Sự hình thành hạt đa thành phần từ một cặp vòi phun đồng trục [19]



Hình 1.5. Sự hình thành hạt đa thành phần do sự co lại của sợi lưu chất đa thành phần với các số Oh khác nhau [20]

Trên đây là hai cách phổ biến để tạo ra hạt lưu chất đa thành phần. Ngoài ra, còn một số phương pháp khác để tạo ra hạt lưu chất đa thành phần nhưng chúng không được đề cập ở đây.

1.3. Tổng quan về tình hình nghiên cứu

1.3.1. Ứng dụng của hạt đa thành phần

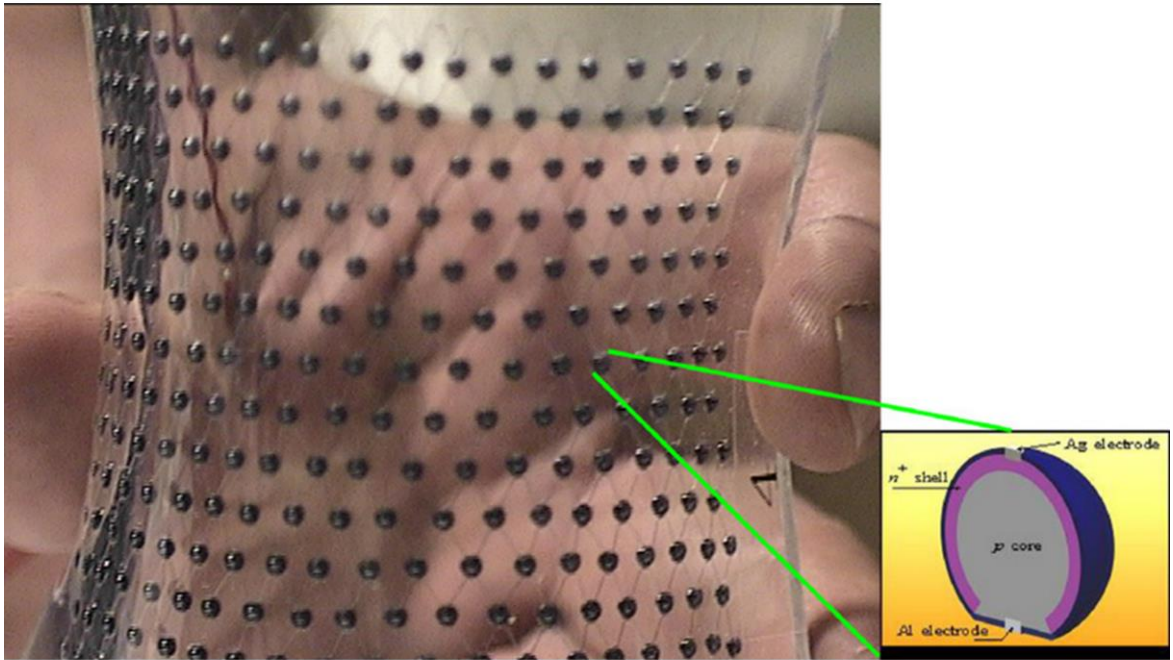
Sự hóa rắn của hạt lưu chất nói chung và hạt lưu chất đa thành phần nói riêng xuất hiện trong rất nhiều ứng dụng của đời sống và công nghiệp. Pulatsü và cộng sự [21] đã nghiên cứu mô hình hạt đa thành phần nước-dầu-nước để sử dụng trong chế biến thực phẩm. Các kích thước hạt, đặc tính lưu chất và điều kiện ổn định cũng được tác giả nghiên cứu. Gần đây, Buyukkestelli và cộng sự [3] đã nghiên cứu việc sử dụng mô hình hạt đa thành phần nước-dầu-nước để tăng độ ngọt và giảm nồng độ đường trong thức ăn. Việc tiêu thụ đường quá mức sẽ gây ra một số bệnh như béo phì, tiểu đường, bệnh tim mạch, gan nhiễm mỡ,... Do đó việc giảm nồng độ đường tiêu thụ là cần thiết. Theo tác giả, hạt đa thành phần có chứa thêm đường Sucrose sẽ tăng độ ngọt của thức ăn. Sử dụng hạt đa thành phần sẽ ngọt hơn việc sử dụng hạt đơn với cùng lượng đường Sucrose. Cụ thể, về mặt cảm quan, hạt đa thành phần sẽ ngọt hơn hạt đơn dầu-nước khoảng 75%. Nghiên cứu này mở ra các hướng mới trong ngành công nghệ thực phẩm, thức ăn sẽ vẫn giữ được mùi vị và độ ngọt ban đầu, hàm lượng đường giảm xuống mà không cần dùng đường hóa học.

Hạt đa thành phần còn được sử dụng trong lĩnh vực mỹ phẩm. Lee và cộng sự [22] đã sử dụng mô hình hạt đa thành phần dầu-nước-dầu để bao bọc Retinol – chất dùng trong mỹ phẩm. Theo tác giả, tính ổn định của hạt đa thành phần là điều

kiện tiên quyết để bao bọc thành công Retinol. Với sự hiện diện của polymer trong pha ban đầu, tính ổn định của hạt đa thành phần tăng cao do độ nhớt tăng. Stasse và cộng sự [23] đã nghiên cứu mô hình hạt đa thành phần dầu-nước-dầu. Theo đó, các hạt chất béo no được xem xét và chúng được quan tâm đặc biệt trong sản xuất mỹ phẩm, đặc biệt trong việc tạo hương thơm do các phản ứng các chất béo gây ra. Paulo và Santos [24] đã sử dụng phương pháp tạo hạt đa thành phần dầu-nước-dầu để bao bọc và giải phóng axit caffeic. Axit caffeic là chất chống oxi hóa, chống vi khuẩn và diệt nấm tốt. Do đó, chất này hay được dùng trong mỹ phẩm với tác dụng chăm sóc da.

Hạt đa thành phần trong lĩnh vực chế biến và vận chuyển thuốc. McClements [1] đã tạo ra nhiều cấu trúc hạt đa thành phần khác nhau. Các hạt đa thành phần này có thể được ứng dụng trong lĩnh vực chế biến và vận chuyển thuốc. Iqbal và cộng sự [25] đã sử dụng một kỹ thuật tạo ra hạt lưu chất đa thành phần để vận chuyển thuốc. Theo tác giả, việc vận chuyển các chất ưa nước như axit nucleic và protein trong y học là một thử thách lớn. Vì tính ưa nước của chúng nên chúng dễ dàng bị hòa tan trong môi trường lưu chất đồng nhất. Việc phát triển một phương pháp để đóng gói các hạt thuốc này trong việc vận chuyển và chế biến là cần thiết. Do đó tác giả đã sử dụng kỹ thuật bay hơi dung môi hạt đa thành phần để giải quyết vấn đề này. Nabi-Meibodi và cộng sự [26] đã làm bay hơi dung môi mà trong dung môi đó có chứa hạt đa thành phần để thu được các hạt nano lipid có chứa thành phần baclofene – chất được dùng trong y học. Peres và cộng sự [27] đã sử dụng một phương pháp tạo hạt đa thành phần để tạo ra vỏ bọc lipid rắn bao bọc lấy các thành phần của thuốc ưa nước – chất dễ dàng bị hòa tan trong nước.

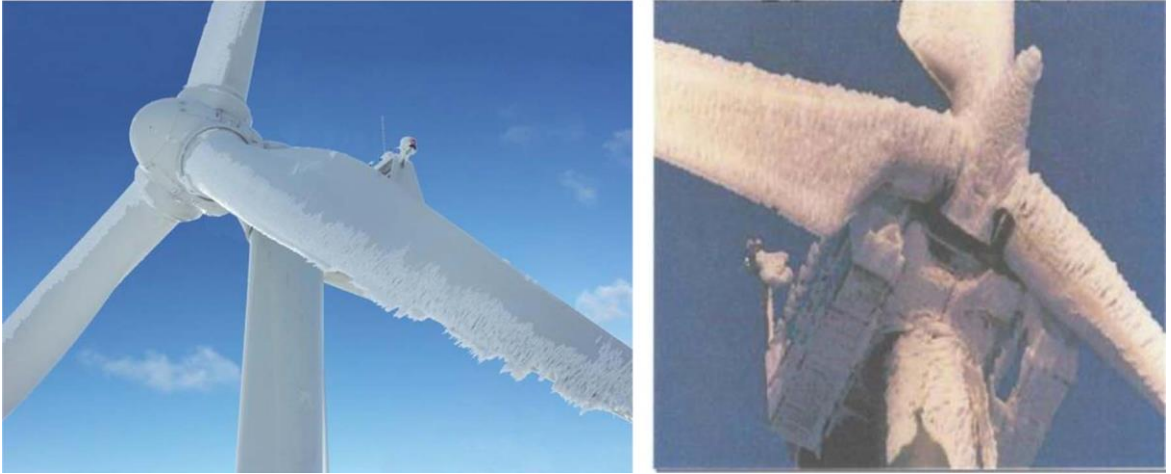
Hạt đa thành phần còn có tiềm năng ứng dụng rất lớn trong ngành năng lượng tái tạo (cụ thể là trong việc chế tạo pin năng lượng mặt trời) (*Hình 1.6*). Biancardo và cộng sự [5] đã nghiên cứu các hạt bán dẫn hình cầu (được đặt trong một tấm lưới) để biến đổi năng lượng ánh sáng mặt trời thành năng lượng điện. Tác giả nghiên cứu để cải thiện hiệu suất của các tấm lưới dùng hạt bán dẫn này bằng cách dùng các thiết bị phản chiếu để tăng hiệu suất chuyển đổi năng lượng. Tác giả tìm ra rằng, nếu không sử dụng các thiết bị phản chiếu thì hiệu suất chuyển đổi chỉ là 13,5% với chế độ chiếu sáng tiêu chuẩn (100 mW cm^{-2} , A.M. 1,5, $25 \text{ }^\circ\text{C}$). Tuy nhiên, chỉ một lớp mỏng bên ngoài các hạt lưu chất trên có giá trị chuyển đổi năng



Hình 1.6. Hạt bán dẫn trong chế tạo pin năng lượng mặt trời [5]

lượng. Việc sử dụng hạt bán dẫn đa thành phần rỗng thay thế sẽ giúp khối lượng tấm nhẹ hơn và tiết kiệm chất bán dẫn hơn (dẫn đến giá thành chế tạo pin mặt trời có thể giảm). Do đó, nghiên cứu chế tạo các hạt đa thành phần rỗng của các hạt bán dẫn là một tiềm năng trong việc sử dụng nguồn năng lượng đó. Một số các công trình khác có nghiên cứu việc chế tạo pin mặt trời có thể tham khảo tại [4], [8], [9]. Việc nghiên cứu sự chuyển pha của các hạt đa thành phần bán dẫn như vậy có thể giúp việc chế tạo những tấm pin mặt trời đại trà, rẻ hơn và rộng rãi hơn.

Một hiện tượng hóa rắn của hạt lưu chất nữa có thể bắt gặp là hiện tượng băng đá trên cánh máy bay [10], trên cánh tuabin gió [11], [12]. Theo đó, hạt nước trong không khí khi tiếp xúc với bề mặt cánh của máy bay hoặc tuabin gió sẽ bị hóa rắn nếu nhiệt độ tại bề mặt cánh nhỏ hơn nhiệt độ hóa rắn của nước (Hình 1.7). Các hạt nước như vậy có thể lẫn các bóng khí bên trong và chúng cũng bị hóa rắn khi bám vào các bề mặt cánh. Sự hóa rắn của hạt nước trên bề mặt cánh có thể là một số nguyên nhân nghiêm trọng dẫn đến giảm hiệu suất và tuổi thọ của máy. Nguy hiểm hơn khi nó là một trong những nguyên nhân trong các vụ tai nạn hàng không nghiêm trọng do ảnh hưởng tới khí động lực học của dòng khí khi qua cánh máy bay [10], [13], [14]. Việc cung cấp năng lượng để loại bỏ đá trên bề mặt cánh là một lựa chọn tốt nhưng nó gây tốn kém và cũng ảnh hưởng tới hiệu suất của máy. Sử dụng hợp chất hóa học là một lựa chọn khác nhưng nó lại gây ảnh hưởng tiêu cực



Hình 1.7. Băng đá hình thành trên cánh tuabin gió [12]

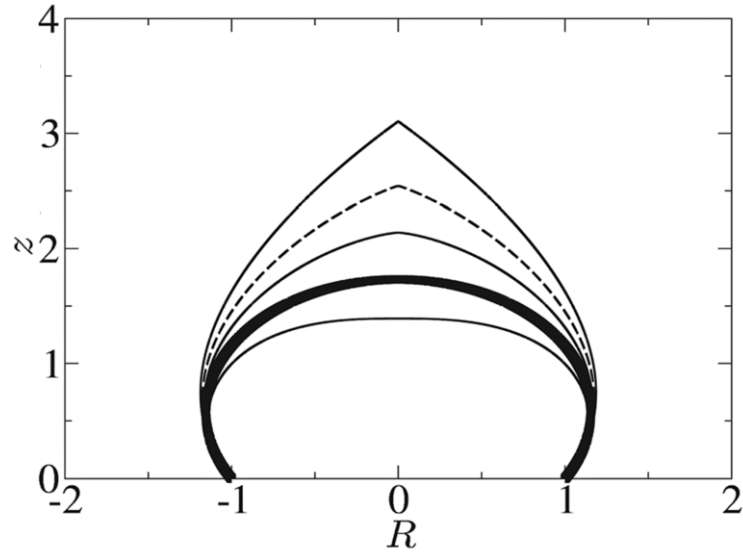
tới môi trường. Do đó, việc ứng dụng nghiên cứu sự chuyển pha của hạt lưu chất nói chung và hạt đa thành phần nói riêng góp phần tìm ra các giải pháp tốt hơn, tránh các thiệt hại và nâng cao hiệu suất của máy.

Ngoài những ứng dụng trên, hạt đa thành phần còn được ứng dụng trong các lĩnh vực khác như lĩnh vực y sinh [28], lĩnh vực vi cơ – lỏng chip [29], làm sạch bụi bẩn trong không khí [7], vật liệu hấp thụ âm thanh [6].

1.3.2. Các công trình nghiên cứu hóa rắn hạt lưu chất

Các công trình lý thuyết

Snoijer và Brunet [30] đã xây dựng một lý thuyết để mô phỏng lại quá trình hóa rắn của một hạt nước đơn trên một bề mặt. Hạt nước ban đầu được giả sử là một phần của hình cầu. Biên hóa rắn của hạt nước được giả sử là đoạn thẳng. Tác giả mô tả di chuyển của đoạn thẳng này và biên phân cách lỏng-khí theo thời gian. Một hình dạng chóp nhọn tại đỉnh của hạt cũng xuất hiện (Hình 1.8). Kết quả mô hình lý thuyết phù hợp với các kết quả thí nghiệm mà các tác giả đã thực hiện. Tác giả đã xem xét các tỉ số về khối lượng riêng (ν) khác nhau. Với $\nu = 1$, do không có sự thay đổi về khối lượng riêng nên hình dạng của hạt được giữ không đổi sau khi quá trình hóa rắn kết thúc. Các giá trị tỉ số khối lượng riêng được so sánh với một giá trị tỉ số khối lượng riêng đặc biệt $\nu_c = 3/4$. Xây dựng một mô hình tương tự, Zhang và cộng sự [31] đã xem xét các ảnh hưởng của nhiệt độ bề mặt hóa rắn và gia tốc trọng trường lên hạt nước trong suốt quá trình hóa rắn của hạt. Các tác giả thực hiện một thí nghiệm tương tự để kiểm chứng lý thuyết của mình. Tác giả tìm ra rằng, với chiều cao của biên hóa rắn được coi là một đoạn thẳng thì chiều cao lý thuyết của



Hình 1.8. Kết quả mô hình lý thuyết của Snoijer và Brunet [30]. Tỷ số khối lượng riêng $\nu = 0,65; 0,75; 0,85; 1; 1,2$ (từ trên xuống dưới)

biên hóa rắn được xác định là 2,16. Trong khi đó, với thực nghiệm là 2. Về thời gian hóa rắn của hạt nước, mô hình lý thuyết cho kết quả khá sát với thực nghiệm với kết quả sai số trong khoảng 2 %. Công trình này cũng xây dựng thành công một chóp nhọn tại đỉnh của hạt hóa rắn bằng cách cho giá trị của góc giữa bề mặt khí-lỏng với bề mặt nằm ngang thay đổi theo thời gian. Góc này giảm trong hầu hết các giai đoạn trong quá trình hóa rắn nhưng nó đột ngột tăng khi gần cuối quá trình. Dẫn đến hình thành một dạng chóp nhọn tại đỉnh của hạt.

Tembely và Dolatabadi [32] đã xây dựng một mô hình lý thuyết toàn diện để dự đoán quá trình hóa rắn hạt nước trên một bề mặt lạnh. Các phương trình Navier-Stokes, phương trình bảo toàn năng lượng và phương trình bảo toàn khối lượng tại bề mặt hóa rắn được sử dụng. Mô hình này dựa trên xấp xỉ một chiều và có tính tới ảnh hưởng của bề mặt lạnh và không khí xung quanh. Mô hình đã dự đoán được sự nở ra về nhiệt trong suốt quá trình hóa rắn cũng như chóp nhọn ở đỉnh của hạt nước. Điều đặc biệt là biên hóa rắn của hạt không còn được giả sử là một đoạn thẳng, thay vào đó, mô hình cho ra được một biên hóa rắn lõm xuống. Điều này phù hợp với thực nghiệm. Tác giả cũng thu được một phương trình để tính toán góc tại đỉnh của hạt nước khi quá trình hóa rắn kết thúc.

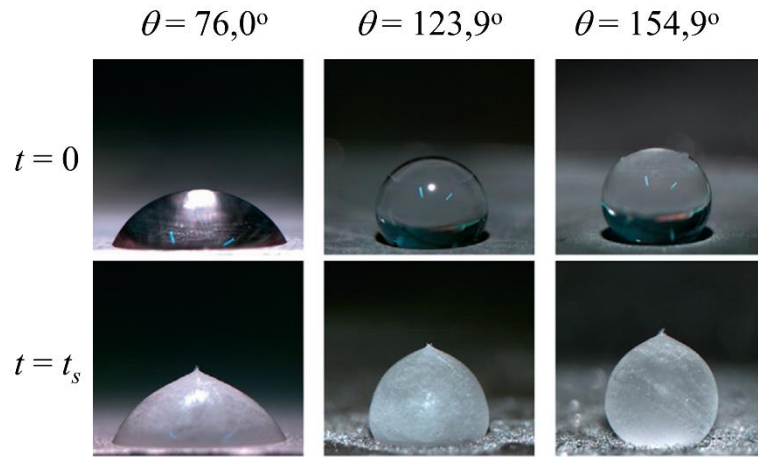
Anderson và cộng sự [33] đã xây dựng một lý thuyết về sự hóa rắn của các hạt lưu chất đặt trên một bề mặt lạnh. Các trường hợp được tác giả xem xét bao

gồm: góc tiếp xúc không đổi, đường tiếp xúc không đổi, góc phát triển không đổi và góc phát triển thay đổi được khảo sát. Tác giả tập trung xây dựng lý thuyết cho hạt lưu chất có góc phát triển thay đổi. Theo đó, góc phát triển (ϕ_i) được xác định qua các vận tốc trượt V_v – theo phương thẳng đứng, V_s – theo phương nằm ngang và góc tiếp xúc (ϕ_a) tại điểm chập ba pha. Tác giả cũng cho thấy rằng chỉ có góc phát triển thay đổi có một điểm uốn có thể dự đoán được. Các tác giả cũng đã thực hiện các thí nghiệm để kiểm chứng mô hình lý thuyết của mình. Kết quả là mô hình lý thuyết xây dựng phù hợp với các thực nghiệm. Dữ liệu thực nghiệm cho thấy rằng góc phát triển không phải là hằng số trong suốt quá trình hóa rắn.

Lý thuyết hóa rắn hạt lưu chất được nhiều tác giả quan tâm. Nhưng các lý thuyết này chủ yếu để xây dựng một mô hình hóa rắn cho hạt lưu chất đơn. Các lý thuyết để xây dựng cho sự hóa rắn của hạt lưu chất đa thành phần còn thiếu. Việc nghiên cứu lý thuyết hạt đa thành phần là tương đối phức tạp. Việc thêm một hay nhiều hạt vào bên trong một hạt lớn sẽ tạo ra nhiều cấu trúc hình học phức tạp mà không phải lý thuyết nào cũng có thể xử lý được.

Các công trình thực nghiệm

Có rất nhiều các công trình thực nghiệm liên quan đến sự chuyển pha của hạt lưu chất. Có thể kể đến như công trình của Huang và cộng sự [34] đã xem xét và phân tích hiện tượng hóa rắn của hạt nước đơn trên một bề mặt lạnh với các góc ướt (θ_i) khác nhau ($76,0^\circ - 154,9^\circ$). Các tác giả đã tìm thấy một hình dạng chóp nhọn tại đỉnh của hạt hóa rắn (xem *Hình 1.9*). Một hạt nước hóa rắn trên một bề mặt lạnh tương tự được Pan và cộng sự [35] thực hiện. Các góc ướt được tác giả thay đổi trong dải $77^\circ - 145^\circ$ và hạt nước hóa rắn được đặt trong một bề mặt phẳng lạnh nghiêng 30° so với bề mặt nằm ngang. Các tác giả cũng tìm ra một hình dạng chóp nhọn xuất hiện trên đỉnh của hạt nước khi quá trình hóa rắn kết thúc. Thực hiện hóa rắn với hạt nước trên một bề mặt cầu khác nhau, Zhang và cộng sự [36] và Ju và cộng sự [37] cũng tìm thấy một hình dạng chóp nhọn tại đỉnh của hạt nước sau khi quá trình hóa rắn kết thúc. Để tìm góc phát triển của các vật liệu Silic, Gecmany và InSb, Satunkin [38] đã thực hiện hóa rắn hạt lưu chất của các vật liệu đó trên một bề mặt lạnh. Tác giả tìm ra rằng mỗi hạt vật liệu đều có một góc phát triển và góc phát



Hình 1.9. Kết quả thực nghiệm của Huang và cộng sự [34] với góc ướt thay đổi trong dải $76,0^\circ - 154,9^\circ$

triển này ảnh hưởng đến quá trình hóa rắn của chúng. Một số công trình liên quan đến hóa rắn hạt lưu chất đơn có thể tìm thấy tại [39]–[42].

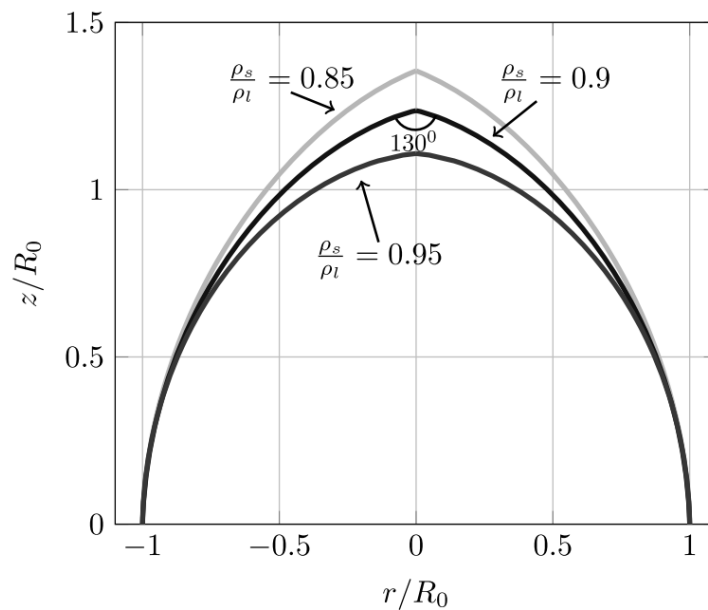
Các công trình thực nghiệm hóa rắn hạt đơn được thực hiện rất nhiều. Ngược lại, đối với hạt đa thành phần thì các công trình thực nghiệm còn khiêm tốn. Có thể kể đến như công trình nghiên cứu của Vũ và cộng sự [18] đã cho lưu chất đi qua một vòi phun đồng trục để tạo ra các hạt lưu chất rỗng. Trong quá trình rơi xuống hạt lưu chất sẽ hóa rắn tạo thành một hạt rắn rỗng hoặc hạt sẽ tiếp xúc với một bề mặt lạnh rồi mới bị hóa rắn. Thực hiện các thí nghiệm tương tự, Bhagat và cộng sự [19] đã tạo ra hạt Gecmani rắn rỗng. Hạt Gecmani được hóa rắn trước khi chạm tới một bề mặt lạnh. Các tác giả cũng đã quan sát được một chóp nhọn xuất hiện trên bề mặt ngoài của hạt hóa rắn giống như hạt lưu chất đơn của Gecmani hóa rắn trên một bề mặt lạnh. Ngược lại, bề mặt phía bên trong của hạt Gecmani rỗng khá là nhẵn. Nadler và cộng sự [43] đã tạo ra được các hạt rỗng bằng một cặp vòi phun đồng trục với thành phần chủ yếu là nhôm. Tác giả làm thí nghiệm với nhôm nguyên chất, hợp chất nhôm cùng Silic và nhôm cùng 2% Canxi (Al-2%Ca). Thí nghiệm cho thấy rằng Al-2%Ca cho ra các hình cầu ổn định và nhất quán. Kendall và cộng sự [44] đã nghiên cứu việc tạo ra các hạt kim loại rỗng nhờ tính bất ổn của tia đa lớp. Theo đó, để hạt hóa rắn được tròn và đối xứng, hạt phải giữ ở trạng thái lỏng cho đến khi sức căng bề mặt và dao động của hạt tắt hẳn.

Các công trình mô phỏng số

Sử dụng phương pháp tập mức (multiple level-set method), Shetabivash và cộng sự [45] đã mô phỏng sự hóa rắn của hạt nước đơn trên bề mặt phẳng lạnh. Theo đó, các tác giả chia biên hóa rắn gồm hai thành phần: dương và âm. Thành phần dương sẽ giải quyết sự truyền nhiệt trong khi đó thành phần âm sẽ được sử dụng để giả định góc phát triển tại điểm chập ba pha là hằng số. Sau khi quá trình hóa rắn kết thúc, các tác giả cùng tìm thấy một hình dạng chóp nhọn xuất hiện ở đỉnh của hạt hóa rắn (xem Hình 1.10).

Trong một nghiên cứu khác, Vahab và cộng sự [46] đã sử dụng phương pháp tập mức và mô men lưu chất (moment of fluid method) để xem xét quá trình hóa rắn của hạt nước đơn trên cánh máy bay. Các tác giả tìm ra rằng, với số Stefan lớn sẽ không thu được hình dạng chóp nhọn tại đỉnh của hạt mà là một hình dạng không thể đoán trước được.

Sử dụng phương pháp lưới Boltzmann (lattice Boltzmann method), Sun và cộng sự [47] đã mô phỏng quá trình hóa rắn của hạt nước đơn trên một bề mặt lạnh. Các tác giả đã khảo sát bề mặt hóa rắn với các nhiệt độ khác nhau. Từ đó cho thấy rằng nhiệt độ bề mặt hóa rắn càng thấp thì lớp băng càng dày trong cùng một thời gian hóa rắn.



Hình 1.10. Hình dạng chóp nhọn tại đỉnh hạt hóa rắn với tỉ số khối lượng riêng khác nhau theo công trình nghiên cứu của Shetabivash và cộng sự [45]

Zhou và cộng sự [48] đã sử dụng phương pháp thể tích lưu chất (VOF) để mô phỏng quá trình hóa rắn của tia kim loại lỏng trong nước. Các tác giả tìm ra rằng tỉ lệ kim loại hóa rắn tăng với độ sâu xâm nhập của tia kim loại lỏng.

Vũ và cộng sự [49], [50] đã thực hiện mô phỏng sự hóa rắn của một hạt lưu chất đơn bị kéo dẫn bởi lực trọng trường. Các tác giả sử dụng phương pháp theo dấu biên để giải quyết bài toán. Theo đó, các biên phân cách được thể hiện bằng liên kết bằng các điểm di chuyển trong một nền lưới cố định (lưới Euler).

Xem xét hạt lưu chất đa thành phần, Hua và cộng sự [51] đã xem xét sự biến dạng của một hạt đa thành phần đơn nhân trong một dòng chảy cắt đơn giản dựa trên phương pháp biên nhúng (immersed boundary method). Các tác giả tìm thấy rằng góc nghiêng của hạt bên trong hạt đa thành phần đơn nhân lúc nào cũng lớn hơn hoặc bằng với góc nghiêng của hạt ngoài.

Cũng với hạt đa thành phần đơn nhân, Vũ và cộng sự [52] đã xem xét các thông số ảnh hưởng tới các chế độ tách hạt hoặc không tách hạt của hạt đa thành phần đơn nhân trong dòng chảy cắt bằng phương pháp theo dấu biên. Từ đó, một biểu đồ giữa thông số Ca và Re được thành lập để cho thấy hai vùng tách hạt và không tách hạt của hạt đa thành phần đơn nhân. Chen và cộng sự [53] đã dùng phương pháp thể tích lưu chất để khảo sát sự tách hạt và không tách hạt của hạt đa thành phần đơn nhân. Các tác giả tìm ra được bốn loại tách hạt trong nghiên cứu này.

Xem xét một hạt đa thành phần hai nhân trong dòng chảy cắt, Vũ và cộng sự [54] cũng đã tìm ra được các chế độ tách hạt khác nhau nhờ vào sự thay đổi các thông số. Các tác giả đã sử dụng phương pháp theo dấu biên để khảo sát quá trình tách hạt đó. Không giống như hạt đa thành phần đơn nhân chỉ bao gồm một chế độ tách hạt và một chế độ không tách hạt, các tác giả tìm thấy bốn chế độ tách hạt và hai chế độ không tách hạt trong nghiên cứu này.

Xem xét các hạt đa thành phần đơn nhân tương tác với nhau, Vũ [55] đã sử dụng phương pháp theo dấu biên để mô phỏng sự tương tác của hai hạt đa thành phần đơn nhân trong một dòng chảy cắt. Tác giả tìm ra rằng, hai hạt khi di chuyển và tiếp xúc với nhau có thể xảy ra ba trường hợp: hai hạt sẽ hợp lại thành hạt lớn hơn, hai hạt bị đẩy ngược lại hoặc hai hạt trượt qua nhau.

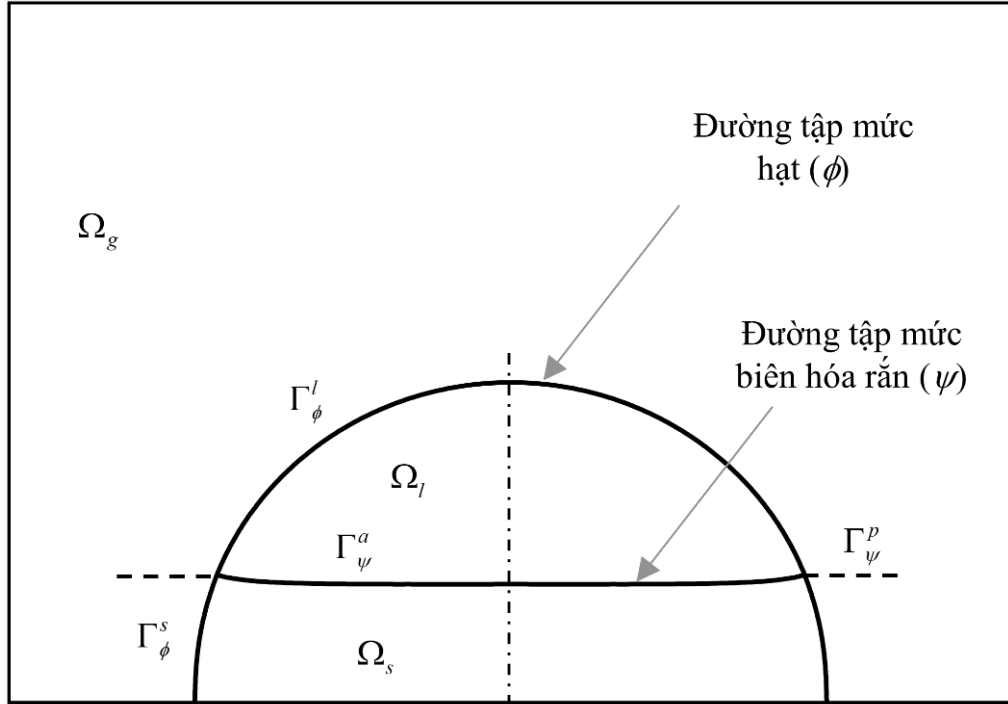
Xem xét sự tương tác của hai hạt đa thành phần hai nhân tương tác trong dòng chảy cắt, Phạm và cộng sự [56] đã sử dụng phương pháp theo dấu biên và xem xét các thông số ảnh hưởng đến nó. Không giống như sự tương tác của hai hạt đa thành phần đơn nhân trong dòng chảy cắt, hai chế độ va chạm của hạt đa thành phần hai nhân được tìm thấy đó là: hai hạt trượt qua nhau và hai hạt bị đẩy ngược lại.

Như vậy có rất nhiều các công trình nghiên cứu số về sự chuyển pha của hạt lưu chất đơn [45]–[50]. Sự tương tác của hạt đa thành phần cũng được quan tâm nhiều [51]–[56]. Tuy nhiên, quá trình truyền nhiệt, chuyển pha của hạt đa thành phần chưa được xem xét tới mặc dù quá trình này xảy ra nhiều trong tự nhiên và các quá trình công nghiệp [1], [3]–[5], [7], [8], [10]–[12], [21]–[29]. Đây chính là lý do đề tài này ra đời.

1.4. Các phương pháp dùng trong mô phỏng số

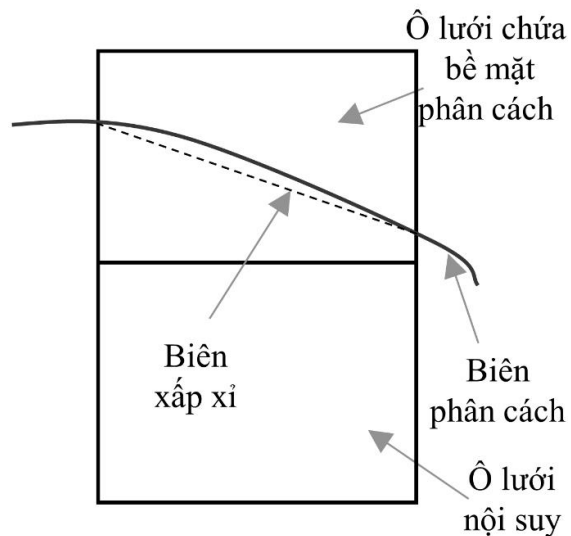
Các phương pháp phổ biến được dùng để mô phỏng bài toán nhiều pha có thể kể đến như phương pháp tập mức, phương pháp thể tích lưu chất, phương pháp lưới Boltzmann và phương pháp theo dấu biên.

Với phương pháp tập mức, các biên phân cách được đại diện một hàm số khoảng cách. Đặc tính các pha được cập nhật bằng một hàm Heaviside (tham khảo công trình nghiên cứu của Sussman và cộng sự [57]). Áp dụng với bài toán chuyển pha, Shetabivash và cộng sự [45] đã sử dụng phương pháp tập mức để nghiên cứu một hạt nước hóa rắn trên một bề mặt lạnh (*Hình 1.11*). Theo đó, các đường tập mức hạt (ϕ) được chia là hai hàm số Γ_ϕ^s - đại diện cho biên rắn-khí và Γ_ϕ^l - đại diện cho biên lỏng-khí. Tương tự với đường tập mức của biên hóa rắn (ψ) của hạt nước cũng sẽ được chia làm hai hàm Γ_ψ^a - đường nét liền trong *Hình 1.11* và Γ_ψ^p - đường nét đứt trong *Hình 1.11*. Các hàm liên quan đến đặc tính của các pha rắn, lỏng và khí lần lượt được kí hiệu là Ω_s , Ω_l và Ω_g . Các hàm này có thể cập nhật bằng một hàm Heaviside. Một số các công trình sử dụng phương pháp tập mức cho nghiên cứu hạt lưu chất chuyển pha [58], [59]. Ưu điểm của phương pháp này là theo dõi khá chính xác các biên phân cách giữa các pha. Tuy nhiên, sức căng bề mặt của biên giữa các pha không dễ dàng tính toán.



Hình 1.11. Mô hình phương pháp tập mức trong giải quyết bài toán chuyển pha [45]

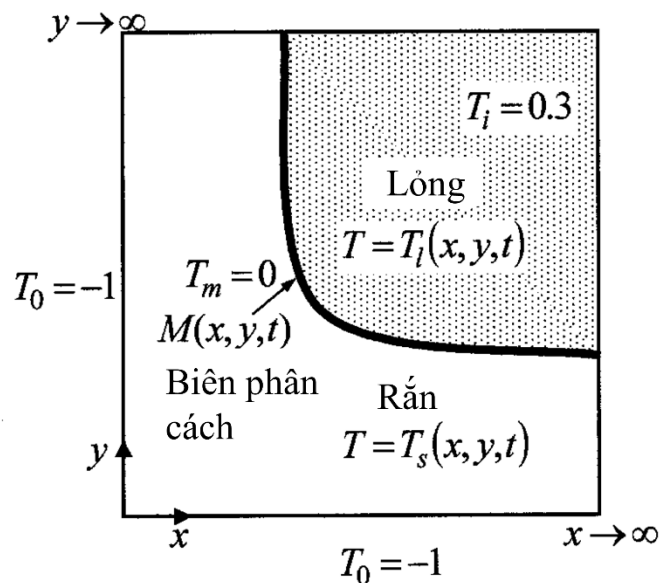
Trong phương pháp thể tích lưu chất (VOF), một hàm color C được xây dựng để mô tả giữa các pha. Giá trị của hàm này có thể bằng 1 trong pha này và bằng 0 trong pha kia. Tại ô có chứa biên phân cách giá trị hàm này sẽ từ 0 – 1 (tham khảo [60]). Tùy vào từng phương pháp VOF khác nhau, mà các đường biên phân cách giữa các pha được phát triển. Ví dụ, một biên phân cách đơn giản được đưa ra trong công trình của Hirt và Nichols [61]. Đường phân cách giữa các pha



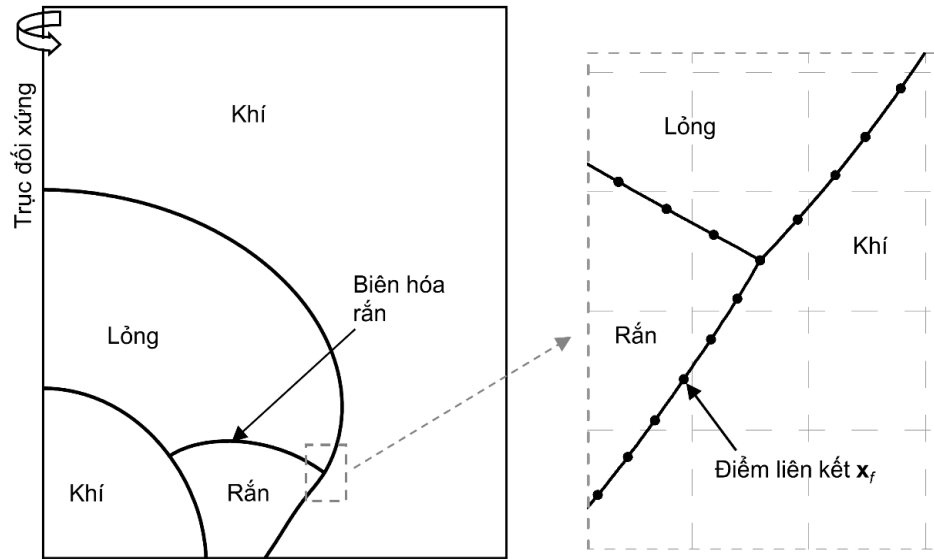
Hình 1.12. Biên xấp xỉ trong phương pháp thể tích lưu chất (VOF)

được xấp xỉ bởi các đoạn thẳng cắt qua các ô lưới (thể hiện bởi đường nét đứt trong *Hình 1.12*). Đầu tiên, phải xác định được độ nghiêng của đoạn thẳng, nó có thể di chuyển trong ô lưới nơi mà biết được lượng lưu chất trong ô. Để xác định độ nghiêng của bề mặt, hai hàm một biến $Y(x)$ hoặc $X(y)$ được sử dụng. Một số công trình sử dụng phương pháp thể tích lưu chất để mô phỏng sự chuyển pha của lưu chất có thể tham khảo tại [48], [62]. Phương pháp thể tích lưu chất (VOF) đơn giản và dễ thực hiện trong cả bài toán hai chiều (2D) và ba chiều (3D). Tuy nhiên, giống như phương pháp tập mức, việc tính được lực căng bề mặt theo phương pháp này là không dễ dàng.

Phương pháp lưới Boltzmann, các hạt được tạo ra và phân phối theo hàm số theo mạng lưới tinh thể khí (LG automata) [63], chúng mang đặc tính của các pha tạo thành một mạng lưới (lưới tinh thể) (*Hình 1.13*). Ta có thể thấy một mạng lưới hạt trong pha lỏng được thể hiện trong *Hình 1.13*. Biên phân cách giữa các pha cũng được đại diện bởi một hàm số và chúng di chuyển trong hệ tọa độ theo thời gian. Khi các biên phân cách của các pha di chuyển đồng thời các điểm lưới cũng sẽ cập nhật các đặc tính của các pha theo vị trí của chúng. Một số các công trình có sử dụng phương pháp lưới Boltzmann trong việc chuyển pha hạt lưu chất [47], [64]. Phương pháp này được tính toán nhờ sự phân bố giữa các hạt và các pha được quy



Hình 1.13. Mô hình phương pháp lưới Boltzmann trong giải quyết bài toán chuyển pha [63]

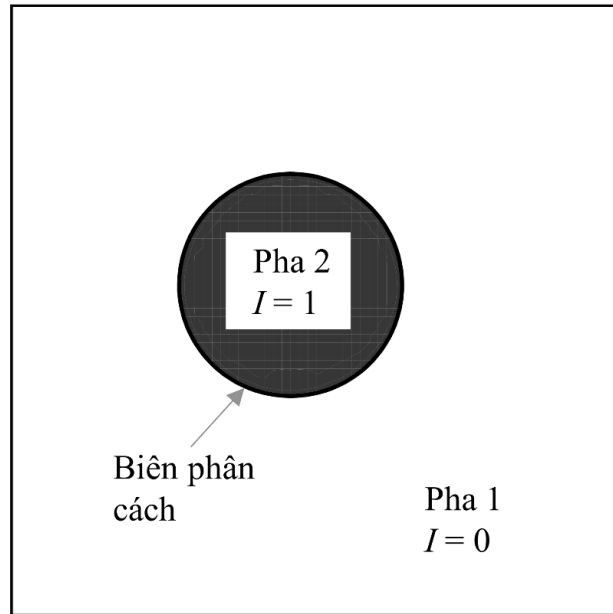


Hình 1.14. Các điểm liên kết trong bài toán chuyển pha của hạt đa thành phần

định bởi đặc tính các hạt này theo thời gian. Từ đây, cho thấy rằng phương pháp này rất linh hoạt. Tuy nhiên biên phân cách giữa các pha theo phương pháp này thường đại diện bởi hàm số, do đó phương pháp này cũng gặp khó khăn trong việc tính toán lực căng bề mặt tại biên phân cách.

Phương pháp theo dấu biên [65], [66], các biên phân cách giữa các pha được đại diện bằng chuỗi các điểm liên kết \mathbf{x}_f (Hình 1.14). Các điểm này được di chuyển trên một nền lưới cố định. Các điểm \mathbf{x}_f sẽ được cập nhật theo thời gian theo vận tốc \mathbf{V}_f được nội suy từ bốn điểm gần nhất trên lưới cố định hoặc điều kiện cân bằng nhiệt tại biên chuyển pha [66]. Một hàm chỉ thị I (Hình 1.15) sẽ được xây dựng để mô tả các pha. Nó sẽ có giá trị bằng 1 ở pha này và bằng 0 ở pha khác. Với sự xuất hiện của ba pha rắn, lỏng và khí thì hai hàm chỉ thị I_1 và I_2 (hoặc I_s và I_l) được sử dụng [67], [68]. Ở phương pháp theo dấu biên này, do các biên được đại diện bởi các điểm liên kết nên phương pháp này dễ dàng trong việc tính lực căng bề mặt tại biên phân cách. Các điểm liên kết theo tuần tự và dễ dàng kiểm soát. Tuy nhiên, đối với các bài toán ba chiều (3D) thì phương pháp này tỏ ra khó khăn hơn so với phương pháp thể tích lưu chất (VOF).

Các phương pháp mô phỏng trên đều có những ưu và nhược điểm riêng trong mô phỏng sự chuyển pha của hạt lưu chất. Trong luận án này, phương pháp theo



Hình 1.15. Giá trị của hàm chỉ thị

dấu biên được lựa chọn và sử dụng để xem xét quá trình truyền nhiệt, chuyển pha của hạt lưu chất rỗng (một loại hạt đa thành phần) vì những ưu điểm của nó so với các phương pháp khác như xấp xỉ biên chính xác, đơn giản và tính được sức căng bề mặt chính xác.

1.5. Kết luận Chương 1

Hạt đa thành phần có thể được hình thành trong tự nhiên hoặc trong quá trình công nghiệp. Trong công nghiệp, người ta có thể tạo ra các hạt đa thành phần bằng nhiều cách khác nhau. Một số cách để tạo ra hạt đa thành phần có thể kể đến như: tạo ra sự tách hạt của tia lưu chất, sự tách hạt do sự co lại của sợi lưu chất.

Những ứng dụng của hạt đa thành phần có thể kể đến như trong các lĩnh vực thực phẩm, mỹ phẩm, chế biến thuốc, y sinh, trong lĩnh vực vi cơ lỏng-chip, đặc biệt trong lĩnh vực năng lượng tái tạo (chế tạo pin mặt trời) và loại bỏ băng đá trên các bề mặt cánh.

Các công trình mô phỏng số quá trình truyền nhiệt, chuyển pha của hạt đa thành phần chưa được thực hiện cho đến thời điểm hiện tại. Trong khi đó, các công trình lý thuyết và công trình mô phỏng số liên quan đến sự chuyển pha của hạt lưu đơn rất nhiều. Sự tương tác của các hạt đa thành phần cũng rất được nhiều nhà khoa

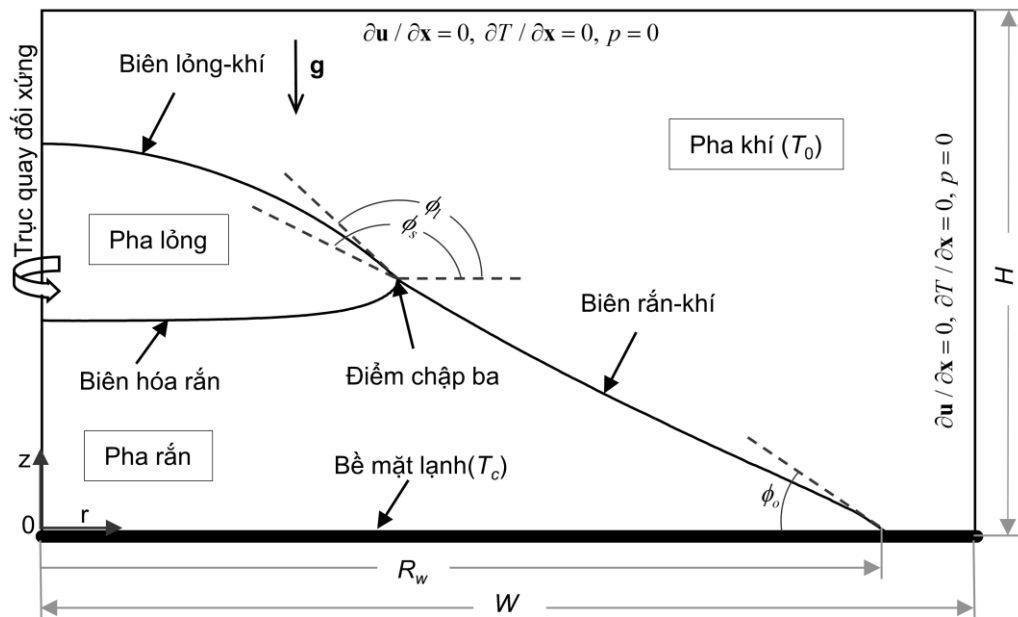
học quan tâm. Về quá trình hóa rắn hạt đa thành phần, đã có một vài công trình thực nghiệm quan sát quá trình hóa rắn của hạt đa thành phần. Đây cũng chính là lý do chính cho sự ra đời của luận án này.

Luận án sử dụng phương pháp theo dấu biên để mô phỏng bài toán chuyển pha (ở đây là hóa rắn) hạt lưu chất rỗng (hạt đa thành phần có một hạt bóng khí bên trong). So với các phương pháp phổ biến được dùng cho bài toán mô phỏng chuyển pha như phương pháp tập mức, phương pháp thể tích lưu chất, phương pháp lưới Boltzmann thì phương pháp theo dấu biên có ưu điểm hơn như xấp xỉ biên chính xác, đơn giản, tính được sức căng bề mặt chính xác.

CHƯƠNG 2. NGHIÊN CỨU VÀ XÂY DỰNG CHƯƠNG TRÌNH TÍNH TOÁN CHO BÀI TOÁN CÓ TRUYỀN NHIỆT, CHUYỂN PHA

2.1. Cơ sở khoa học

Đối tượng nghiên cứu là các hạt lưu chất có kích thước nhỏ từ vài trăm micromet đến vài milimet. Đã có nhiều công trình nghiên cứu hạt lưu chất nhỏ như vậy và ban đầu các hạt lưu chất đã giả sử có dạng hình cầu là có thể chấp nhận được [67], [69]–[71]. Xem xét một hạt lưu chất đơn hóa rắn trên một bề mặt lạnh, *Hình 2.1* mô tả một nửa hạt lưu chất đang trong quá trình hóa rắn. Hạt được giả sử đối xứng qua trục nên ta chỉ cần xem xét một nửa hạt để giảm thời gian tính toán của bài toán. Hạt lưu chất với góc ướt ban đầu (ϕ_0) đặt trên một mặt phẳng lạnh với nhiệt độ được giữ không đổi (T_c) và trong miền tính toán $W \times H$. Các biên bên trên và bên phải của miền tính toán được giả định là điều kiện biên trượt hoàn toàn, biên bên trái được áp dụng điều kiện biên đối xứng và biên ở dưới áp dụng điều kiện biên không trượt cùng điều kiện nhiệt độ đầu vào của bề mặt lạnh. Các điều kiện biên này được chọn để phù hợp hạt hóa rắn trong thực tế như các công trình thực nghiệm đã khảo sát [34], [35], [72]. Để mô phỏng bài toán hạt lưu chất có truyền nhiệt, chuyển pha, các phương trình Navier – Stokes và phương trình năng lượng



Hình 2.1. Sự hóa rắn của một hạt lưu chất trên bề mặt phẳng lạnh với miền tính toán $W \times H$ và bán kính ướt R_w

với phương pháp theo dấu biên [67] được sử dụng. Các chất lỏng và khí ở đây được giả thiết là lưu chất không nén được, không trộn lẫn và là lưu chất Newton. Trong mỗi pha, khối lượng riêng (ρ), độ nhớt (μ), nhiệt dung riêng đẳng áp (C_p), và hệ số dẫn nhiệt (k) được cho là không đổi trong suốt quá trình tính toán. Ta có, phương trình Navier-Stokes [66], [73], [74]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot \rho\mathbf{u}\mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) \right] \\ + \int_f \sigma\kappa\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)\mathbf{n}_f.dS + \rho(\mathbf{f} + \mathbf{g}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Ở đây, $\mathbf{u} = (u, v)$ là véc tơ vận tốc, t là thời gian, p là áp suất, chỉ số trên T là kí hiệu chuyển vị của véc tơ \mathbf{u} , σ và κ lần lượt là hệ số sức căng bề mặt và độ cong của biên lỏng-khí, \mathbf{g} là véc tơ gia tốc trọng trường. Hàm delta Dirac $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)$ có giá trị bằng 0 ở mọi vị trí trừ vị trí biên \mathbf{x}_f , \mathbf{n}_f là véc tơ pháp tuyến đơn vị tại biên phân cách. \mathbf{f} là đại lượng để áp đặt điều kiện biên không trượt tại biên rắn [74]–[76].

$$\mathbf{f}^n = \frac{\mathbf{u}_F - \hat{\mathbf{u}}}{\Delta t} \quad (2.2)$$

Trong đó, $\hat{\mathbf{u}}$ là vận tốc ước tính ở bước thời gian $n + 1$. \mathbf{u}_F là vận tốc có tính đến điều kiện biên không trượt tại biên rắn, có giá trị là \mathbf{u}_s – vận tốc trong pha rắn (với pha rắn không di chuyển $\mathbf{u}_s = 0$) và có giá trị $\hat{\mathbf{u}}$ trong các pha khác.

Trong hệ tọa độ trụ (Orz), phương trình (2.1) sẽ có dạng sau:

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial ru^2}{\partial r} + \frac{\partial uv}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left(2\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + 2\mu \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u}{r} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \int_f \sigma\kappa\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)\mathbf{n}_f.dS.\hat{i}_r + \rho f_r \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial ruv}{\partial r} + \frac{\partial v^2}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \mu r \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(2\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ + \int_f \sigma\kappa\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)\mathbf{n}_f.dS.\hat{i}_z + \rho(f_z + g) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Đối với phương pháp theo dấu biên, các pha được coi là một và được giải cùng bởi phương trình (2.1). Các pha được phân biệt với nhau bằng các hàm chỉ thị (được đề cập phía dưới). Các hàm chỉ thị sẽ quy định đặc tính của các pha và các hàm chỉ thị này sẽ được quy định bởi vị trí của biên phân cách. Do đó, đặc tính của

mỗi pha đều được xác định và được áp vào phương trình (2.1) để giải. Ví dụ, đối với pha lỏng thì các đặc tính của lưu chất sẽ được quy định nhờ hàm chỉ thị như $\mu = \mu_l$ và $\rho = \rho_l$ được áp vào phương trình (2.1). Tương tự, các đặc tính của các pha khác sẽ được xác định như vậy. Đối với các điểm nằm tại biên phân cách giữa hai pha, giá trị của các đặc tính sẽ được nội suy từ bốn điểm lưới gần nhất.

Hạt lưu chất có hiện tượng truyền nhiệt, chuyển pha, do đó phương trình năng lượng [66] được sử dụng là:

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{u}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \int_f \dot{q} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) dS \quad (2.5)$$

Ở đây, T là nhiệt độ. Các pha cũng được coi là một và phương trình (2.5) được sử dụng để giải toàn miền. Các đặc tính nhiệt dung riêng đẳng áp (C_p) và hệ số dẫn nhiệt (k) ở mỗi pha sẽ có giá trị khác nhau và cũng được xác định bởi các hàm chỉ thị (được định nghĩa bên dưới). Thông lượng nhiệt tại biên chuyển pha là:

$$\dot{q} = k_s \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_s - k_l \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_l \quad (2.6)$$

Trong một số trường hợp, ví dụ sự hóa rắn của nước, khối lượng riêng của pha rắn nhỏ hơn khối lượng riêng của pha lỏng. Do có sự chênh lệch khối lượng riêng giữa hai pha như vậy, nên phương trình liên tục [67] là:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{L_h} \left(\frac{1}{\rho_s} - \frac{1}{\rho_l} \right) \int_f \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \dot{q} dS \quad (2.7)$$

Ở đây, L_h là nhiệt ẩn chuyển pha, đối với mỗi vật liệu thì giá trị của nhiệt ẩn chuyển pha có giá trị khác nhau. Các chỉ số dưới trong luận án: s là đại diện cho pha rắn, l là đại diện cho pha lỏng, g là đại diện cho pha khí.

Trong thực tế, mô hình một bài toán có thể rất lớn như trong việc chế tạo máy bay, tàu lửa, đập thủy điện,... hoặc mô hình bài toán có thể rất nhỏ như sự chuyển pha của hạt nước có kích thước rất nhỏ tầm vài micromet. Để giải các bài toán như vậy sẽ mất rất nhiều công sức, tài nguyên tính toán, thời gian và thậm chí không giải được. Cần thiết một mô hình bài toán thay thế có thể dễ dàng giải quyết mà kết quả mô phỏng không sai khác nhiều khi quy đổi ra mô hình bài toán thực tế. Để xây dựng một mô hình tương tự với thực tế thì cần không thứ nguyên hóa các

phương trình mô phỏng. Các thông số không thứ nguyên được sinh ra từ đây và kết quả mô phỏng chỉ phụ thuộc vào giá trị của chúng. Từ đây, có thể thấy kết quả mô phỏng số của mô hình thay thế và thực tế là như nhau nếu chúng cùng bộ thông số không thứ nguyên này.

Tiếp theo, ta xem xét quá trình xây dựng các thông số không thứ nguyên. Theo đó, phương trình Navier-Stokes (2.1) được không thứ nguyên hóa. Các kí hiệu không thứ nguyên được xác định như sau:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^k &= \frac{\mathbf{x}}{L}, \mathbf{u}^k = \frac{\mathbf{u}}{U_t}, (\mathbf{u}^k)^T = \frac{\mathbf{u}^T}{U_t}, t^k = \frac{t}{t_t}, \mathbf{g}^k = \frac{\mathbf{g}}{g}, \nabla^k = L\nabla, \\ p^k &= \frac{p}{\rho U_t^2}, \sigma^k = \frac{\sigma}{\sigma_o}, \kappa^k = L\kappa, \delta^k = L^3\delta, S^k = \frac{S}{L^2}, T^k = \frac{T}{T_t} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Ở đây, \mathbf{x}^k , \mathbf{u}^k , t^k , \mathbf{g}^k , ∇^k , p^k , σ^k , κ^k , δ^k và S^k lần lượt là véc tơ chiều dài không thứ nguyên, véc tơ vận tốc không thứ nguyên, thời gian không thứ nguyên, véc tơ gia tốc trọng trường không thứ nguyên, gradient không thứ nguyên, áp suất không thứ nguyên, hệ số sức căng bề mặt không thứ nguyên, độ cong không thứ nguyên, hàm delta Dirac không thứ nguyên và diện tích không thứ nguyên. L , U_t , $t_t = L/U_t$, σ_o và T_t lần lượt là chiều dài tham chiếu, vận tốc tham chiếu, thời gian tham chiếu, hệ số sức căng bề mặt tham chiếu và nhiệt độ tham chiếu. Phương trình (2.1) có thể được viết lại như sau:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}^k}{\partial t^k} + (\mathbf{u}^k \cdot \nabla^k) \mathbf{u}^k &= -\nabla^k p^k + \frac{1}{Re} \nabla^k \cdot \left[\nabla^k \mathbf{u} + \nabla^k (\mathbf{u}^k)^T \right] \\ &+ \frac{1}{We_f} \int_f \sigma^k \kappa^k \delta^k \mathbf{n}_f \cdot dS^k + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} + \frac{t_t}{U_t} \mathbf{f} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Ở đây, Re , We và Fr lần lượt là các kí hiệu của số Reynold, số Weber và số Froude, ta có:

$$Re = \frac{\rho L U_t}{\mu}, We = \frac{\rho L U_t^2}{\sigma_o}, Fr = \frac{U_t}{\sqrt{gL}} \quad (2.10)$$

Tiếp theo, ta không thứ nguyên hóa phương trình năng lượng (2.5). Ta được:

$$\frac{\partial T^k}{\partial t^k} + \nabla^k (T^k \mathbf{u}^k) = \frac{1}{Pr} \frac{1}{Re} \left[(\nabla^k)^2 T^k \right] + \frac{t_c}{\rho C_p T_c} \int_f \dot{q} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \cdot dS \quad (2.11)$$

Với Pr là số Prandtl. Các số không thứ nguyên khác được sử dụng trong luận án là:

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} = \frac{\mu}{\sqrt{\rho L \sigma_o}}, Bo = \frac{We}{Fr^2} = \frac{\rho g L^2}{\sigma_o}, St = \frac{C_p (T_m - T_c)}{L_h} \quad (2.12)$$

$$\theta_0 = \frac{T_0 - T_c}{T_m - T_c}, \rho_{sl} = \frac{\rho_s}{\rho_l}, \rho_{gl} = \frac{\rho_g}{\rho_l}, \mu_{gl} = \frac{\mu_g}{\mu_l}, R_{io} = \frac{R_i}{R_o} \quad (2.13)$$

$$k_{sl} = \frac{k_s}{k_l}, k_{gl} = \frac{k_g}{k_l}, C_{psl} = \frac{C_{ps}}{C_{pl}}, C_{pgl} = \frac{C_{pg}}{C_{pl}} \quad (2.14)$$

Trong đó Oh , Bo và St lần lượt là các số Ohnesorge, Bond và Stefan. θ_0 là nhiệt độ không thứ nguyên ban đầu. ρ_{sl} , ρ_{gl} là tỷ số khối lượng riêng. μ_{sl} , μ_{gl} là tỷ số độ nhớt, R_{io} là tỉ số bán kính giữa hạt bóng khí bên trong và bên ngoài, k_{sl} , k_{gl} là tỷ số dẫn nhiệt, C_{psl} , C_{pgl} là tỷ số nhiệt dung đẳng áp. Nhiệt độ không thứ nguyên hóa là $\theta = (T - T_c)/(T_m - T_c)$.

Trong luận án này, phương pháp theo dấu biên được sử dụng. Phương pháp này được trình bày trong các công trình [65], [66]. Trong giới hạn luận án, vấn đề được nghiên cứu được xem xét và mô phỏng ở hệ tọa độ trụ. Ở giữa các pha được phân cách với nhau bởi một biên phân cách. Do tồn tại ba pha (rắn, lỏng, khí) nên bài toán này sẽ có sự hiện diện của các biên phân cách: biên rắn-lỏng hay biên chuyển pha (phân cách giữa pha rắn và pha lỏng), biên lỏng-khí (phân cách giữa pha lỏng và pha khí) và biên rắn-khí (phân cách giữa pha rắn và pha khí). Các biên phân cách được mô hình hóa bởi các điểm \mathbf{x}_f được kết nối với nhau. Sau mỗi bước tính toán thì các điểm biên được cập nhật theo phương trình

$$\mathbf{x}_f^{n+1} = \mathbf{x}_f^n + \mathbf{V}_f \Delta t \quad (2.15)$$

Với t và $t + \Delta t$ tương ứng với các bước tính toán n và $n + 1$. Vận tốc của các biên phân cách \mathbf{V}_f được nội suy từ các điểm lưới gần nhất hoặc điều kiện cân bằng năng lượng tại biên hóa rắn [67], [77]. Biên hóa rắn di chuyển với một vận tốc pháp tuyến V_f tại biên chuyển pha được xác định là:

$$V_f = \frac{\dot{q}}{\rho_s L_h} \quad (2.16)$$

Sau khi có các điểm \mathbf{x}_f , chúng ta có thể tính toán được lực căng bề mặt tác động lên biên lỏng-khí và xây dựng các hàm chỉ thị để xác định tính chất từng pha. Hai hàm chỉ thị I_1 và I_2 được tái thiết lại từ vị trí của các biên phân cách các pha. Các hàm chỉ thị sẽ có giá trị bằng 1 trong pha này và bằng 0 ở các pha còn lại. Cụ thể, I_2 có giá trị bằng 1 đối với pha lỏng và pha rắn và bằng 0 đối với pha khí và I_1 sẽ có giá trị bằng 1 đối với pha rắn và bằng 0 đối với pha lỏng [66], [67], ta có:

$$\rho = [\rho_s I_1 + \rho_l (1 - I_1)] I_2 + \rho_g (1 - I_2) \quad (2.17)$$

$$\mu = [\mu_s I_1 + \mu_l (1 - I_1)] I_2 + \mu_g (1 - I_2) \quad (2.18)$$

$$C_p = [C_{ps} I_1 + C_{pl} (1 - I_1)] I_2 + C_{pg} (1 - I_2) \quad (2.19)$$

$$k = [k_s I_1 + k_l (1 - I_1)] I_2 + k_g (1 - I_2) \quad (2.20)$$

Theo công trình nghiên cứu của Satunkin [38], mỗi vật liệu khác nhau thì có một góc phát triển khác nhau. Các điểm chập ba pha được xác định dựa vào góc phát triển. Tổng hợp các điểm chập ba pha qua các bước tính toán là đường biên giữa hai pha rắn và khí. Góc phát triển được xác định theo công thức sau [67]:

$$\phi_{gr} = \phi_s - \phi_l \quad (2.21)$$

Trong đó, ϕ_s và ϕ_l lần lượt là góc tiếp tuyến của biên rắn-khí và của biên lỏng-khí với bề mặt nằm ngang (xem *Hình 2.1*).

Không giống như hạt lưu chất đơn hóa rắn, trong luận án này nghiên cứu hạt lưu chất rỗng hóa rắn. Việc có thêm một hạt bóng khí bên trong sẽ tạo ra thêm một điểm chập ba pha. Mô tả được quá trình hóa rắn của biên bên trong hạt lưu chất rỗng là một thử thách. Thực tế đến hiện tại chưa có một công trình nghiên cứu mô phỏng số nào mô tả chi tiết quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng do tính phức tạp về hình học trong nghiên cứu động lực học chuyển pha của nó. Luận án giả định góc phát triển của điểm chập ba pha bên trong (xem *Hình 2.1*) cũng được áp đặt cách tính như phương trình (2.21).

2.2. Xây dựng chương trình tính toán

Để xây dựng chương trình tính toán, ta phải rời rạc các phương trình để đưa vào các mô đun tính toán. Để đơn giản và dễ hiểu, ở đây các phương trình sẽ được

triển khai trên hệ tọa độ (Oxy). (Mặc dù trong các tính toán thực tế, để bám sát hơn với bài toán cần giải quyết, ví dụ các bài toán kiểm chứng, Chương 3 và 4, chương trình được sử dụng là chương trình được xây dựng trên tọa độ trụ. Các bước tính toán tương tự như dưới đây).

Rời rạc phương trình Navier-Stokes (2.1) theo thời gian, ta được:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{A}^n - \frac{\nabla_h P}{\rho^n} + \frac{1}{\rho^n} \mathbf{D}^n + \frac{1}{\rho^n} \mathbf{E}^n + \mathbf{f}^n + \mathbf{g}^n \quad (2.22)$$

Để đơn giản bài toán, ta tách phương trình (2.22) thành hai phương trình: một phương trình không chứa thành phần áp suất và một phương trình có chứa thành phần áp suất.

- Phương trình không có thành phần áp suất:

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{A}^n + \frac{1}{\rho^n} \mathbf{D}^n + \frac{1}{\rho^n} \mathbf{E}^n + \mathbf{f}^n + \mathbf{g}^n \quad (2.23)$$

- Phương trình có thành phần áp suất:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{\nabla_h P}{\rho^n} \quad (2.24)$$

Trong đó, \mathbf{A} là thành phần đối lưu, \mathbf{D} là thành phần khuếch tán, \mathbf{E} là thành phần liên quan đến sức căng bề mặt. ∇_h biểu thị một xấp xỉ rời rạc của gradient, và \mathbf{u}^* là véc tơ vận tốc trung gian được thêm vào để tách phương trình (2.22) thành hai phương trình riêng biệt.

Ta lấy toán tử phân kỳ (toán tử div) hai phía phương trình (2.24), ta được:

$$\nabla_h \cdot \left(\frac{1}{\rho^n} \nabla_h P \right) = \frac{1}{\Delta t} (\nabla_h \cdot \mathbf{u}^* - \nabla_h \cdot \mathbf{u}^{n+1}) \quad (2.25)$$

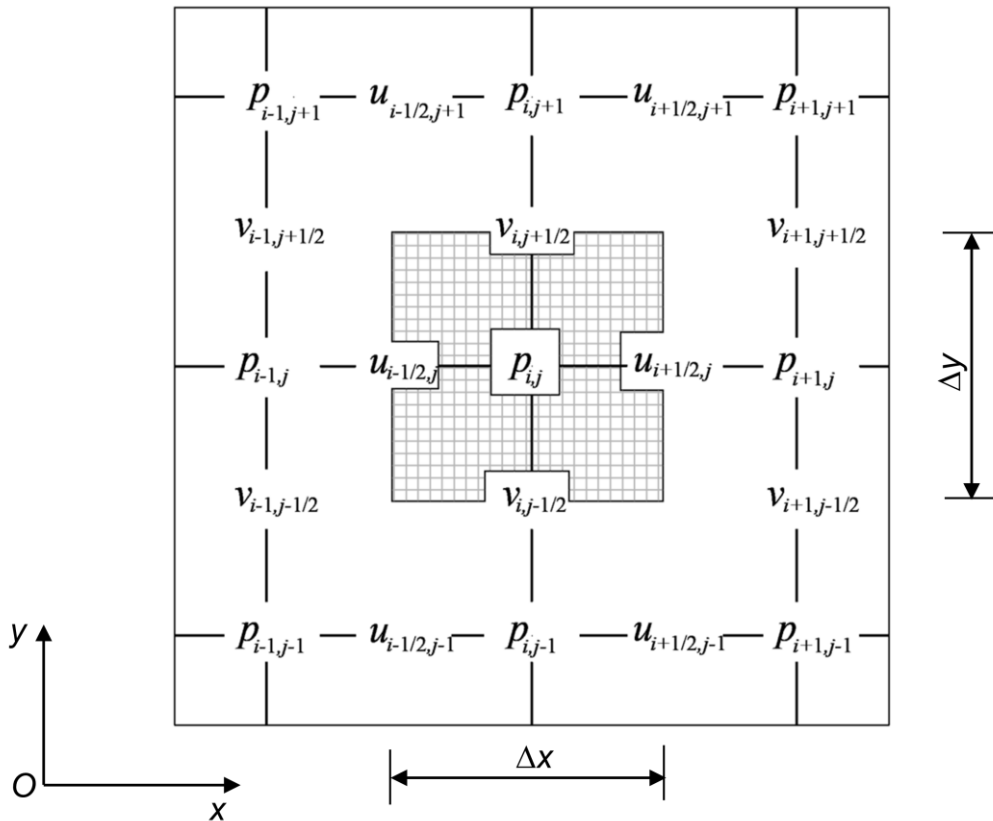
Theo phương trình liên tục thì:

$$\nabla_h \cdot \mathbf{u}^{n+1} = \frac{1}{L_h} \left(\frac{1}{\rho_s} - \frac{1}{\rho_l} \right) \int_f \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \dot{q} dS \quad (2.26)$$

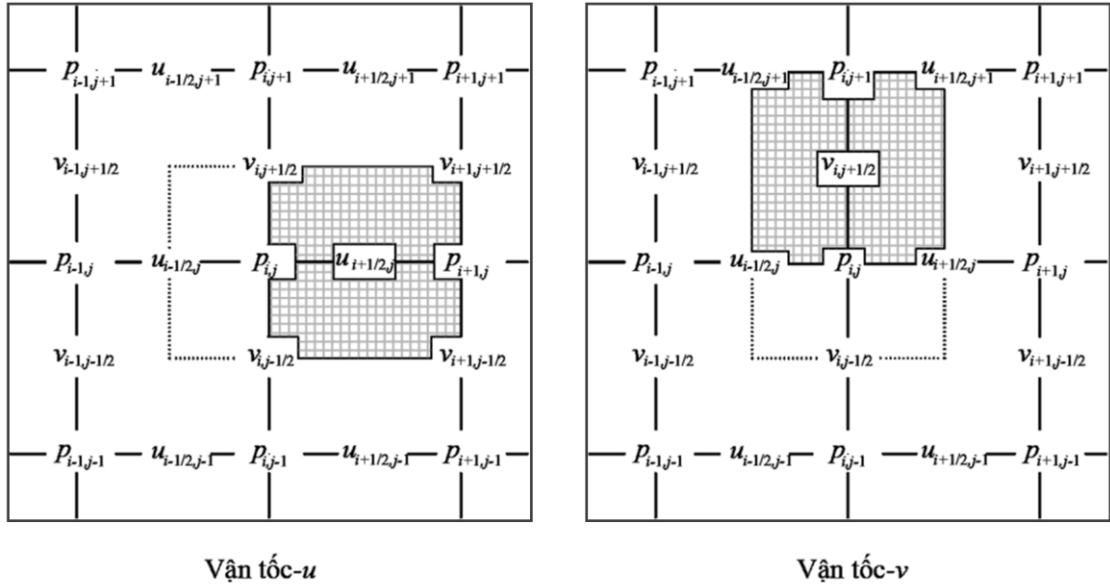
Việc chọn độ phân giải của lưới để mô phỏng bài toán rất quan trọng vì kết quả mô phỏng phụ thuộc vào lưới đã chọn. Độ phân giải lưới nhỏ đến một giá trị nào đó thì các kết quả sẽ không có sự khác biệt nhiều. Tuy vậy, lưới càng mịn thì

thời gian tính toán càng cao và do đó ta cần so sánh các kết quả lưới khác nhau để chọn lưới phù hợp để có thời gian tính toán ngắn nhất mà kết quả mô phỏng vẫn đảm bảo được độ chính xác. Trong luận án này, lưới có cấu trúc được sử dụng. Có hai loại lưới có cấu trúc vẫn hay được dùng trong mô phỏng là lưới xếp chồng và lưới so le. So với lưới xếp chồng thì lưới so le tỏ ra ưu việt hơn trong việc giải quyết bài toán. Vậy nên lưới so le sẽ được sử dụng trong các bài toán mô phỏng của luận án này. Với một lưới so le, áp suất được lưu trữ tại vị trí trung tâm bên trong một ô lưới trong khi vận tốc được đặt ở giữa các cạnh của ô lưới đó. Tức là vận tốc sẽ bao quanh áp suất hay áp suất sẽ ở vị trí trung tâm của ô lưới cần tính toán. Cấu trúc của một ô lưới so le trong tọa độ hai chiều được thể hiện như trong Hình 2.2. Khối lượng riêng, độ nhớt và các tính chất khác được lưu trữ ở nút trung tâm chung với áp suất.

Một số lợi thế đáng chú ý của việc sử dụng lưới so le là kết nối chặt chẽ hơn giữa các biến, đơn giản cho các phương pháp bảo toàn và độ chính xác. Dòng chảy của lưu chất diễn ra do sự chênh lệch áp suất từ các ô lưới. Do đó, lưu trữ áp suất tại



Hình 2.2. Bố trí các biến trong lưới so le [73]



Hình 2.3. Ký hiệu được sử dụng với lưới so le [73] cho áp suất và vận tốc

trung tâm dẫn hướng dòng lưu chất và vận tốc được đặt tại chính giữa các cạnh của ô lưới là hợp lý. Các thành phần vận tốc theo phương ngang (vận tốc ngang) được đặt trên các đường biên dọc trục và các thành phần vận tốc theo phương đứng (vận tốc đứng) được đặt trên các đường biên ngang trục. Lưới thể hiện cho vận tốc theo phương ngang đặt một nửa lưới sang phải từ nút áp suất và lưới vận tốc thẳng đứng được đặt một nửa lưới lên trên (xem Hình 2.3).

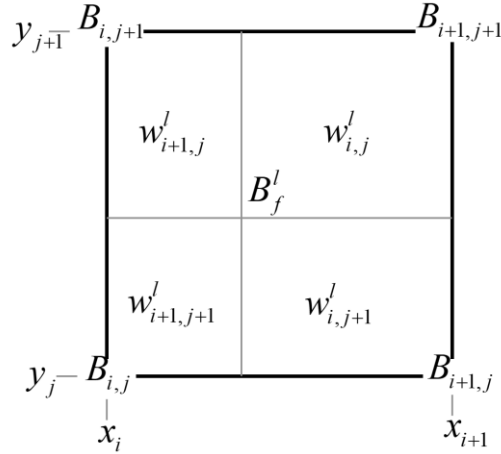
Một ô lưới thành phần áp suất được thể hiện trong Hình 2.2. Diện tích của một ô lưới như thế trong hệ tọa độ hai chiều Oxy là $\Delta x \Delta y$, trong đó Δx và Δy là kích thước của ô lưới thành phần theo trục x và y tương ứng. Với ô lưới dạng vuông, ta có $h = \Delta x = \Delta y$. Xấp xỉ phương trình (2.26) bởi tích phân qua các cạnh của ô lưới trong Hình 2.2, thu được:

$$\frac{(u_{i+1/2,j}^{n+1} - u_{i-1/2,j}^{n+1})}{\Delta x} + \frac{(v_{i,j+1/2}^{n+1} - v_{i,j-1/2}^{n+1})}{\Delta y} = \frac{1}{L_h} \left(\frac{1}{\rho_s} - \frac{1}{\rho_l} \right) B_{i,j} \quad (2.27)$$

Trong đó, $B_{i,j}$ là đại lượng có chứa thông lượng nhiệt tại điểm (i,j) được nội suy từ biên chuyển pha B_f^l nhờ vào các hàm trọng số diện tích w (xem Hình 2.4).

Sử dụng nội suy ta có được:

$$B_f^l = w_{i,j}^l B_{i,j} + w_{i,j+1}^l B_{i,j+1} + w_{i+1,j}^l B_{i+1,j} + w_{i+1,j+1}^l B_{i+1,j+1} \quad (2.28)$$



Hình 2.4. Hàm trọng số diện tích dùng trong nghiên cứu

Hay ta có thể viết gọn lại như sau:

$$B_f^l = \sum_{ij} w_{i,j}^l B_{i,j} \quad (2.29)$$

Ngược lại, nếu biết B_f^l , $B_{i,j}$ được tính là:

$$B_{i,j} = \sum_l \frac{B_f^l w_{i,j}^l}{\Delta x \Delta y} = \sum_l \dot{q}_f^l w_{i,j}^l \frac{\Delta s^l}{\Delta x \Delta y} \quad (2.30)$$

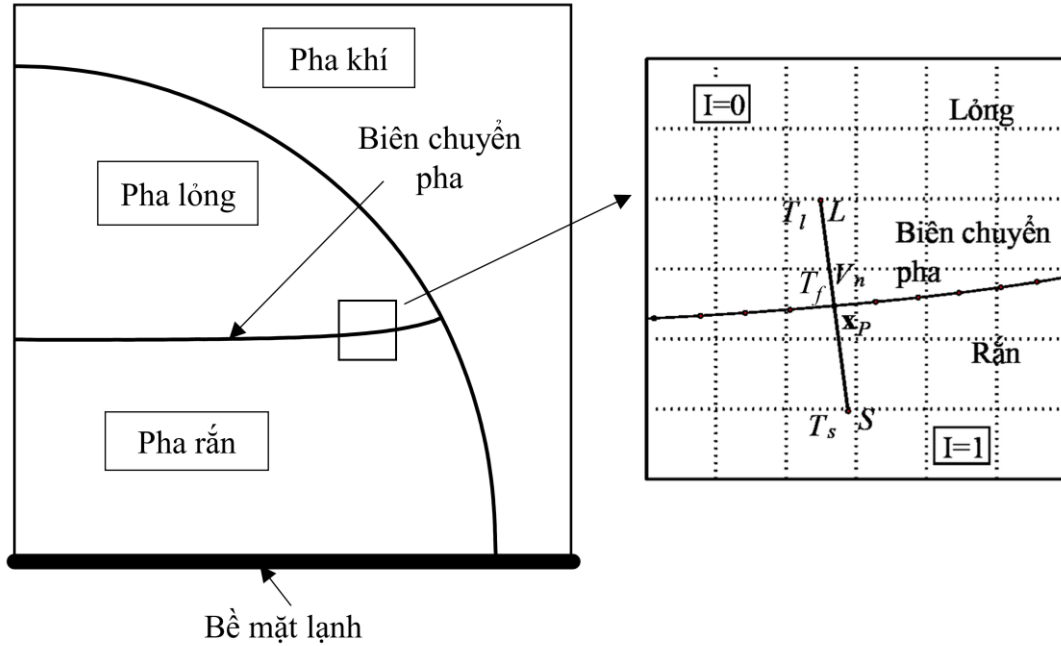
Trong các phương trình trên, chỉ số trên l biểu thị đại lượng được xác định tại biên, với Δs là chiều dài của một phần tử biên. Ta có, \dot{q}_f^l được xấp xỉ bằng phương trình sai phân tuyến tính bậc 1:

$$\dot{q}_f^l = \frac{1}{h} (k_s (T_s - T_f) - k_l (T_f - T_l)) \quad (2.31)$$

Với h là bề rộng 1 mắt lưới (ở đây xem xét lưới có dạng hình vuông), k_s là hệ số dẫn nhiệt pha rắn, k_l là hệ số dẫn nhiệt pha lỏng. T_f là nhiệt độ tại biên chuyển pha. T_s và T_l là nhiệt độ tại các điểm S (tại pha rắn) và L (tại pha lỏng) (Hình 2.5). T_s và T_l được nội suy từ nhiệt độ của các điểm lưới Euler xung quanh sử dụng hàm trọng số diện tích, ví dụ:

$$T_s = w_{i,j}^s T_{i,j} + w_{i,j+1}^s T_{i,j+1} + w_{i+1,j}^s T_{i+1,j} + w_{i+1,j+1}^s T_{i+1,j+1} \quad (2.32)$$

Vị trí của các điểm S và L được xác định như sau. Từ một điểm trên biên, kẻ một đường vuông góc với biên. Trên đường đó, S và L được xác định (về hai phía



Hình 2.5. Mô hình tính toán của hạt lưu chất hóa rắn trên bề mặt phẳng lạnh

của biên) cách vị trí điểm biên một khoảng nhất định. Khoảng cách này thường được chọn có giá trị bằng kích thước của một ô lưới.

Để tính toán các thành phần vận tốc nằm ngang (u) và các thành phần vận tốc thẳng đứng (v), ta cần phải xác định các vận tốc trung gian u^* và v^* trước. Như đề cập ở trên, có thể hình dung rằng ô lưới thành phần cho u và v như được di dời nửa lưới sang phải từ nút áp suất cho vận tốc ngang và di dời nửa lưới lên trên cho vận tốc thẳng đứng (Hình 2.3). Các nút áp suất xác định bởi các chỉ số (i, j) , vị trí của thành phần vận tốc u bằng $(i+1/2; j)$ và vị trí của thành phần vận tốc v bằng $(i; j+1/2)$.

Sử dụng lưới trong các Hình 2.2 và Hình 2.3 cùng với ký hiệu được giới thiệu ở trên, các xấp xỉ rời rạc cho thành phần x và y của vận tốc trung gian.

Từ phương trình (2.23), ta có:

$$u_{i+1/2,j}^* = u_{i+1/2,j}^n + \Delta t \left\{ \begin{aligned} & \left(-A_x \right)_{i+1/2,j}^n + (g_x)_{i+1/2,j}^{n+1} + \frac{1}{\frac{1}{2}(\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n)} (E_x)_{i+1/2,j}^n \\ & + \frac{1}{\frac{1}{2}(\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n)} (D_x)_{i+1/2,j}^n \end{aligned} \right\} + \Delta t (f_x)_{i+1/2,j}^{n+1} \quad (2.33)$$

Từ phương trình (2.2), ta có:

$$u_{i+1/2,j}^* = \hat{u}_{i+1/2,j}^{n+1} + \Delta t (f_x)_{i+1/2,j}^n \quad (2.34)$$

$$v_{i,j+1/2}^* = v_{i,j+1/2}^n + \Delta t \left\{ \begin{aligned} & \left(-A_y \right)_{i,j+1/2}^n + \left(g_y \right)_{i,j+1/2}^n + \frac{1}{\frac{1}{2}(\rho_{i,j+1}^n + \rho_{i,j}^n)} \left(E_y \right)_{i,j+1/2}^n \\ & + \frac{1}{\frac{1}{2}(\rho_{i,j+1}^n + \rho_{i,j}^n)} \left(D_y \right)_{i,j+1/2}^n \end{aligned} \right\} + \Delta t (f_y)_{i,j+1/2}^{n+1} \quad (2.35)$$

Tương tự, từ phương trình (2.2), ta có:

$$v_{i,j+1/2}^* = \hat{v}_{i,j+1/2}^{n+1} + \Delta t (f_y)_{i,j+1/2}^{n+1} \quad (2.36)$$

Các phương trình cho vận tốc tại $t + \Delta t$, từ phương trình (2.24), ta có:

$$u_{i+1/2,j}^{n+1} = u_{i+1/2,j}^* - \frac{\Delta t}{\frac{1}{2}(\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n)} \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x} \quad (2.37)$$

$$v_{i,j+1/2}^{n+1} = v_{i,j+1/2}^* - \frac{\Delta t}{\frac{1}{2}(\rho_{i,j+1}^n + \rho_{i,j}^n)} \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y} \quad (2.38)$$

Một số đại lượng trong các phương trình trên như là khối lượng riêng tại các vị trí không được xác định sẽ được nội suy. Sử dụng phép nội suy tuyến tính (bằng cách lấy giá trị trung bình), ta thu được:

$$\rho_{i+1/2,j} = \frac{1}{2}(\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n) \quad (2.39)$$

Đối với các thành phần đối lưu:

$$(A_x)_{i+1/2,j} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left\{ \begin{aligned} & \left[(uu)_{i+1,j} - (uu)_{i,j} \right] \Delta y + \\ & \left[(uv)_{i+1/2,j+1/2} - (uv)_{i+1/2,j-1/2} \right] \Delta x \end{aligned} \right\} \quad (2.40)$$

$$(A_y)_{i,j+1/2} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left\{ \left[(uv)_{i+1/2,j+1/2} - (uv)_{i-1/2,j+1/2} \right] \Delta y + \left[(v\nu)_{i,j+1} - (v\nu)_{i,j} \right] \Delta x \right\} \quad (2.41)$$

Tại trung tâm vận tốc tại các đường biên của vận tốc của ô lưới thành phần được tính toán bởi nội suy tuyến tính. Thành phần x tại $(i+1/2; j)$ là:

$$(A_x)_{i+1/2,j}^n = \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{u_{i+3/2,j}^n - u_{i+1/2,j}^n}{2} \right)^2 - \left(\frac{u_{i+1/2,j}^n - u_{i-1/2,j}^n}{2} \right)^2 \right] + \frac{1}{\Delta y} \left[\left(\frac{u_{i+1/2,j+1}^n + u_{i+1/2,j}^n}{2} \right) \left(\frac{v_{i+1,j+1/2}^n + v_{i,j+1/2}^n}{2} \right) - \left(\frac{u_{i+1/2,j}^n + u_{i+1/2,j-1}^n}{2} \right) \left(\frac{v_{i+1,j-1/2}^n + v_{i,j-1/2}^n}{2} \right) \right] \quad (2.42)$$

Thành phần y , tại điểm $(i; j + 1/2)$, là:

$$(A_y)_{i,j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{u_{i+1/2,j}^n + u_{i+1/2,j+1}^n}{2} \right) \left(\frac{v_{i,j+1/2}^n + v_{i+1,j+1/2}^n}{2} \right) - \left(\frac{u_{i-1/2,j+1}^n + u_{i-1/2,j}^n}{2} \right) \left(\frac{v_{i,j+1/2}^n + v_{i-1,j+1/2}^n}{2} \right) \right] + \frac{1}{\Delta y} \left[\left(\frac{v_{i,j+3/2}^n - v_{i,j+1/2}^n}{2} \right)^2 - \left(\frac{v_{i,j+1/2}^n - v_{i,j-1/2}^n}{2} \right)^2 \right] \quad (2.43)$$

Đối với thành phần khuếch tán, ta có:

$$(D_x)_{i+1/2,j}^n = \frac{1}{\Delta x} \left\{ \left(2\mu_{i+1,j}^n \frac{u_{i+3/2,j}^n - u_{i+1/2,j}^n}{\Delta x} \right) - 2\mu_{i,j}^n \left(\frac{u_{i+1/2,j}^n - u_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} \right) \right\} + \frac{1}{\Delta y} \left\{ \mu_{i+1/2,j+1/2}^n \left(\frac{u_{i+1/2,j+1}^n - u_{i+1/2,j}^n}{\Delta y} + \frac{v_{i+1,j+1/2}^n - v_{i,j+1/2}^n}{\Delta x} \right) - \mu_{i+1/2,j-1/2}^n \left(\frac{u_{i+1/2,j}^n - u_{i+1/2,j-1}^n}{\Delta y} + \frac{v_{i+1,j-1/2}^n - v_{i,j-1/2}^n}{\Delta x} \right) \right\} \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned}
(D_y)^n_{i,j+1/2} = \frac{1}{\Delta x} & \left\{ \mu_{i+1/2,j+1/2}^n \left(\frac{u_{i+1/2,j+1}^n - u_{i+1/2,j}^n}{\Delta y} + \frac{v_{i+1,j+1/2}^n - v_{i,j+1/2}^n}{\Delta x} \right) \right. \\
& \left. - \mu_{i-1/2,j+1/2}^n \left(\frac{u_{i-1/2,j+1}^n - u_{i-1/2,j}^n}{\Delta y} \right) + \frac{v_{i,j+1/2}^n - v_{i-1,j+1/2}^n}{\Delta x} \right\} \\
& + \frac{1}{\Delta y} \left\{ 2\mu_{i,j+1}^n \left(\frac{v_{i,j+3/2}^n - v_{i,j+1/2}^n}{\Delta y} \right) - 2\mu_{i,j}^n \left(\frac{v_{i,j+1/2}^n - v_{i,j-1/2}^n}{\Delta y} \right) \right\}
\end{aligned} \quad (2.45)$$

Đổi thành phân lực áp đặt tại biên chuyển pha, từ phương trình (2.2), ta có:

$$(f_x)_{i+1/2,j}^{n+1} = \frac{(u_F)_{i+1/2,j}^{n+1} - \hat{u}_{i+1/2,j}^{n+1}}{\Delta t} \quad (2.46)$$

Và

$$(f_y)_{i,j+1/2}^{n+1} = \frac{(v_F)_{i,j+1/2}^{n+1} - \hat{v}_{i,j+1/2}^{n+1}}{\Delta t} \quad (2.47)$$

Ta dùng phép nội suy đơn giản để tìm các thành phần độ nhớt:

$$\mu_{i+1/2,j+1/2}^n = \frac{1}{4} (\mu_{i+1,j}^n + \mu_{i+1,j+1}^n + \mu_{i,j+1}^n + \mu_{i,j}^n) \quad (2.48)$$

$$\mu_{i+1/2,j-1/2}^n = \frac{1}{4} (\mu_{i+1,j-1}^n + \mu_{i+1,j}^n + \mu_{i,j}^n + \mu_{i,j-1}^n) \quad (2.49)$$

$$\mu_{i-1/2,j+1/2}^n = \frac{1}{4} (\mu_{i,j}^n + \mu_{i,j+1}^n + \mu_{i-1,j+1}^n + \mu_{i-1,j}^n) \quad (2.50)$$

Tiếp theo, ta tính thành phần lực căng bề mặt \mathbf{E} . Lực này được tính như sau:

Kí hiệu \mathbf{t} là véc tơ tiếp tuyến với bề mặt phân cách. Để xây dựng lực trên mỗi điểm lưới cố định, cần tính lực trên một phần tử biên phân cách:

$$\delta \mathbf{E}^l = \sigma (\mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_1) \quad (2.51)$$

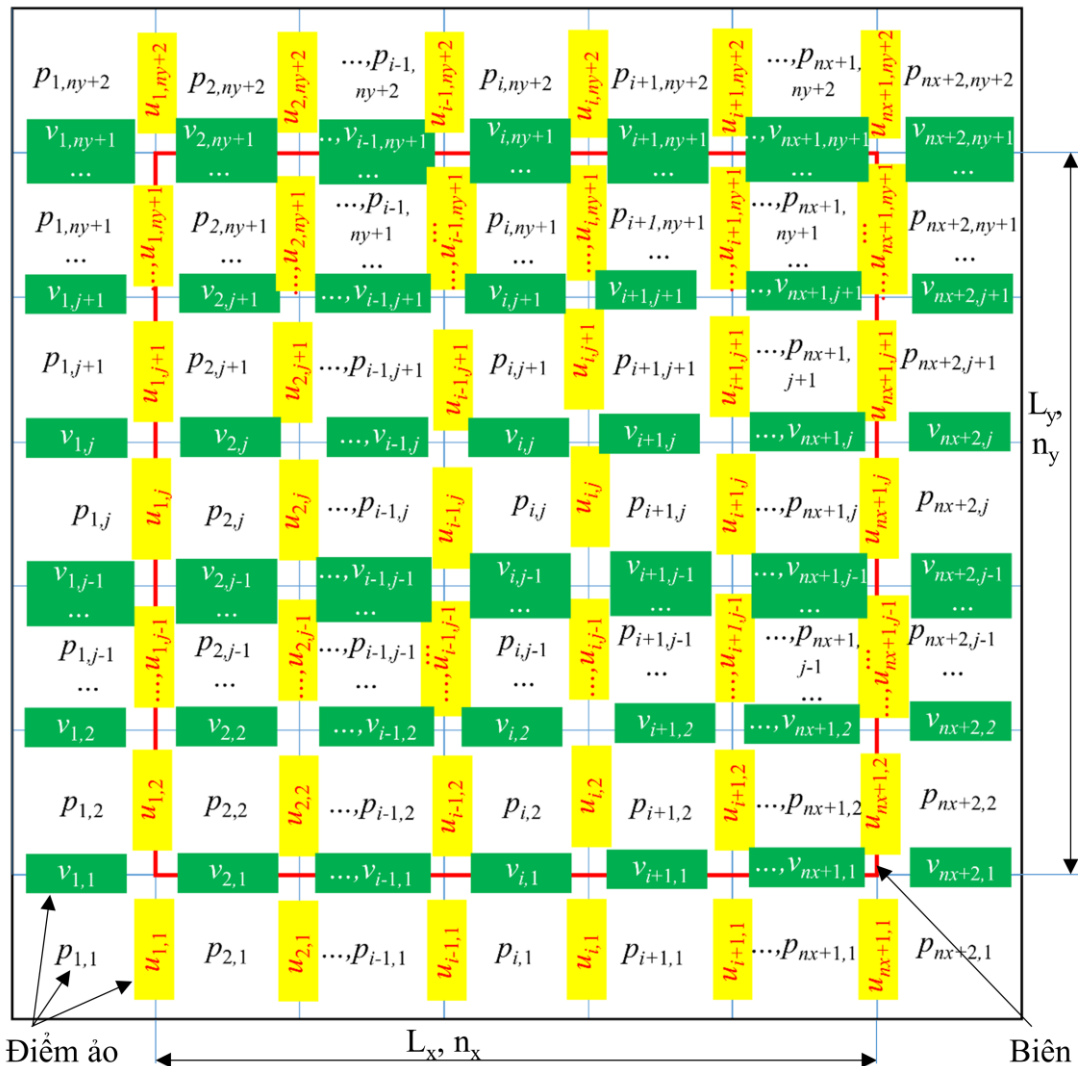
Ở đây, \mathbf{t}_1 và \mathbf{t}_2 lần lượt là tiếp tuyến tại điểm đầu (1) và điểm cuối (2) của một phần tử biên. Sử dụng hàm trọng số diện tích w để nội suy lực căng bề mặt trong các điểm lưới:

$$\mathbf{E}_{i,j} = \sum_l \frac{\delta \mathbf{E}^l w_{i,j}^l}{\Delta x \Delta y} \quad (2.52)$$

Sau khi có vận tốc trung gian và theo phương trình bảo toàn khối lượng ta bắt đầu rời rạc phương trình (2.25) để tính áp suất trên toàn miền:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x^2} \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\rho_{i+1,j}^n + \rho_{i,j}^n} - \frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\rho_{i,j}^n + \rho_{i-1,j}^n} \right) + \frac{1}{\Delta y^2} \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\rho_{i,j+1}^n + \rho_{i,j}^n} - \frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{\rho_{i,j}^n + \rho_{i,j-1}^n} \right) \\ & = \frac{1}{2\Delta t} \left(\frac{u_{i+1/2,j}^* - u_{i-1/2,j}^*}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1/2}^* - v_{i,j-1/2}^*}{\Delta y} - \frac{1}{L_h} \left(\frac{1}{\rho_s} - \frac{1}{\rho_l} \right) B_{i,j}^n \right) \end{aligned} \quad (2.53)$$

Để giải phương trình này, bộ giải SOR (Successive Over Relaxation) có thể được sử dụng vì thời gian tính toán cũng như hội tụ nhanh của bộ giải này. Phép lặp sẽ được thực hiện bằng cách quét qua các cột và hàng sao cho khi cập nhật điểm lưới $(i; j)$ (xem Hình 2.6), giá trị của p tại các điểm lưới $(i-1; j)$ và $(i; j-1)$ đã được cập nhật trước đó. Để đánh giá độ hội tụ, giá trị áp suất của hai lần tính toán liên



Hình 2.6. Miền tính toán được sử dụng cho lưới MAC so le chuẩn

tiếp được so sánh với nhau. Nếu chúng nhỏ hơn giá trị sai số cho phép thì phép lặp sẽ được dừng lại.

Sau khi tính toán được hết các giá trị vận tốc và áp suất ta tiến hành giải phương trình năng lượng. Ta có thể viết lại phương trình năng lượng (2.5) như sau:

$$\frac{(\rho C_p)_{i,j} (T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n)}{\Delta t} = C_{i,j}^n - F_{i,j}^n + B_{i,j}^n \quad (2.54)$$

Sử dụng các phương pháp rời rạc tương tự với phương trình Navier-Stokes. Các thành phần C và F được tính là:

$$C_{i,j}^n = k_{i,j} \left(\frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \quad (2.55)$$

Và

$$F_{i,j}^n = (\rho C_p)_{i,j} \left[\frac{(T_{i+1,j}^n + T_{i,j}^n) u_{i+1/2,j}^n - (T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n) u_{i-1/2,j}^n}{2\Delta x} + \frac{(T_{i,j+1}^n + T_{i,j}^n) v_{i,j+1/2}^n - (T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n) v_{i,j-1/2}^n}{2\Delta y} \right] \quad (2.56)$$

Sau khi tính được các thành phần C và F , theo phương trình (2.54), ta có:

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{(\rho C_p)_{i,j}} (C_{i,j}^n - F_{i,j}^n + B_{i,j}^n) \quad (2.57)$$

Tùy thuộc điều kiện bài toán ban đầu mà phương trình năng lượng sẽ có thêm một vài thành phần khác. Ví dụ, với bài toán hạt hóa rắn tại nhân hóa rắn thì phương trình (2.57) được viết lại là:

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{(\rho C_p)_{i,j}} (C_{i,j}^n - F_{i,j}^n + B_{i,j}^n + K_{i,j}^n) \quad (2.58)$$

Thành phần K được tính là:

$$K_{i,j}^n = (\rho C_p h_n)_{i,j} \quad (2.59)$$

Trong đó, h_n là thành phần áp đặt nhiệt độ T_c tại nhân hóa rắn.

Để bài toán được hội tụ thì bước thời gian Δt phải được lựa chọn phù hợp để đảm bảo sự ổn định của tính toán. Để bài toán được hội tụ, giá trị của Δt thỏa mãn điều kiện sau [73]:

$$\frac{v_{\max} \Delta t}{h_{\min}^2} \leq \frac{1}{4} \quad \text{và} \quad \frac{(|u|^2 + |v|^2)_{\max} \Delta t}{v_{\min}} \leq 2 \quad (2.60)$$

Từ (2.60) cho thấy rằng các giá trị tối đa v_{\max} và tối thiểu v_{\min} của độ nhớt động học, giá trị nhỏ nhất của mắt lưới và vận tốc có tác động đến việc quyết định giá trị ổn định. Các giá trị này được tính theo từng bước tính toán và giá trị của Δt được cập nhật tương ứng.

Điều kiện biên được áp đặt vào bài toán cũng rất quan trọng. Nó được xem như là thước đo của bài toán mô phỏng với bài toán thực tế. Trong quá trình mô phỏng, các điểm ảo (ghost), xem *Hình 2.6*, được sử dụng để áp đặt các điều kiện biên như vậy. Các đặc tính như áp suất và vận tốc trong các điểm ảo này được bắt nguồn từ các giả định cho trước của bài toán thực tế đặt ra. Trong thực tế sự hóa rắn của hạt lưu chất diễn ra ở trong một môi trường tự do dưới tác động của đối lưu cưỡng bức hoặc khi hạt tiếp xúc với một tác nhân lạnh gây hóa rắn.

Trong luận án này, đối với bài toán hạt lưu chất rỗng đặt trên một bề mặt lạnh, điều kiện biên trượt hoàn toàn được áp đặt lên biên phải và biên trên của miền tính toán. Biên bên trái áp dụng điều kiện biên đối xứng và biên bên dưới là điều kiện biên không trượt cùng nhiệt độ (T_c) cho bài toán hạt hóa rắn của bề mặt lạnh chuyển pha (xem *Hình 3.1*). Đối với bài toán hạt lưu chất rỗng hóa rắn trong môi trường lạnh, điều kiện biên trượt hoàn toàn được áp đặt cho biên bên phải và bên trên của miền tính toán. Điều kiện đối xứng và điều kiện áp đặt dòng cưỡng bức cho bài toán lần lượt được sử dụng cho biên bên trái và biên dưới cùng của miền tính toán (xem *Hình 4.1*).

Trong quá trình chuyển pha của hạt lưu chất, các biên chuyển pha của hạt và biên lỏng-khí có thay đổi theo thời gian. Để cập nhật vị trí của các điểm đó theo phương trình (2.15), ta có:

$$x_f^{n+1} = x_f^n + V_f^x \Delta t \quad (2.61)$$

$$y_f^{n+1} = y_f^n + V_f^y \Delta t \quad (2.62)$$

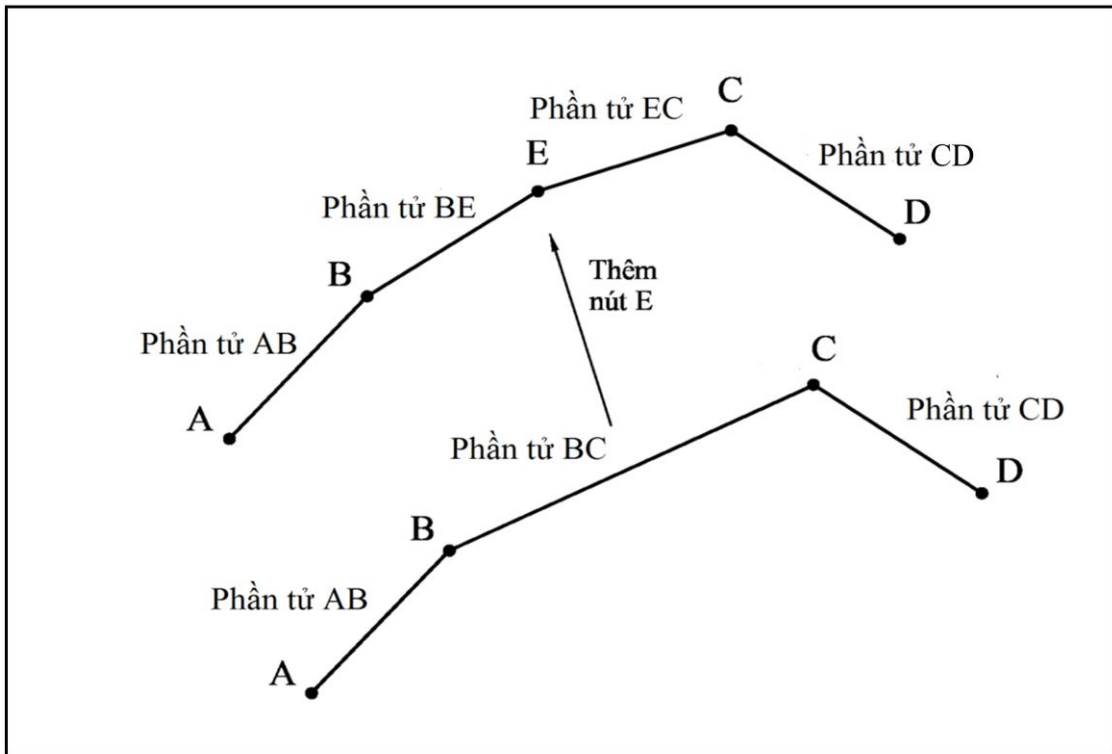
Trong đó, V_f^x và V_f^y lần lượt là vận tốc của điểm trên biên phân cách theo trục x và y . Đối với biên lỏng-khí thì các vận tốc này được nội suy từ vận tốc 4 điểm gần nhất trên lưới. Tức là:

$$V_f^x = w_{i,j}^l u_{i,j} + w_{i,j+1}^l u_{i,j+1} + w_{i+1,j}^l u_{i+1,j} + w_{i+1,j+1}^l u_{i+1,j+1} \quad (2.63)$$

$$V_f^y = w_{i,j}^l v_{i,j} + w_{i,j+1}^l v_{i,j+1} + w_{i+1,j}^l v_{i+1,j} + w_{i+1,j+1}^l v_{i+1,j+1} \quad (2.64)$$

Đối với biên chuyển pha (biên rắn-lỏng), V_f^x và V_f^y là giá trị hình chiếu của véc tơ pháp tuyến \mathbf{V}_f với giá trị được tính theo phương trình (2.16) lên các phương x và y . Tại các điểm chấp ba pha, góc phát triển sẽ được áp dụng (xem phương trình (2.21)).

Sau mỗi bước tính toán, khoảng cách của các điểm liên kết liền kề (hay độ dài của một phân tử) của biên phân cách sẽ thay đổi. Các khoảng cách này có thể được tăng lên hoặc giảm đi theo thời gian. Nếu để chúng quá dài hoặc quá ngắn thì dễ gây ra sai số tính toán như sai số của lực căng bề mặt. Vậy nên khi chúng quá dài



Hình 2.7. Thêm nút mới

thì ta cần tạo thêm các điểm mới xen giữa (Hình 2.7) hoặc chúng quá ngắn ta phải loại bỏ điểm cũ đi (Hình 2.8). Các khoảng cách giữa các điểm liên kết liền kề này được đánh giá là dài hay ngắn thông qua việc so sánh với khoảng cách giữa các điểm lưới.

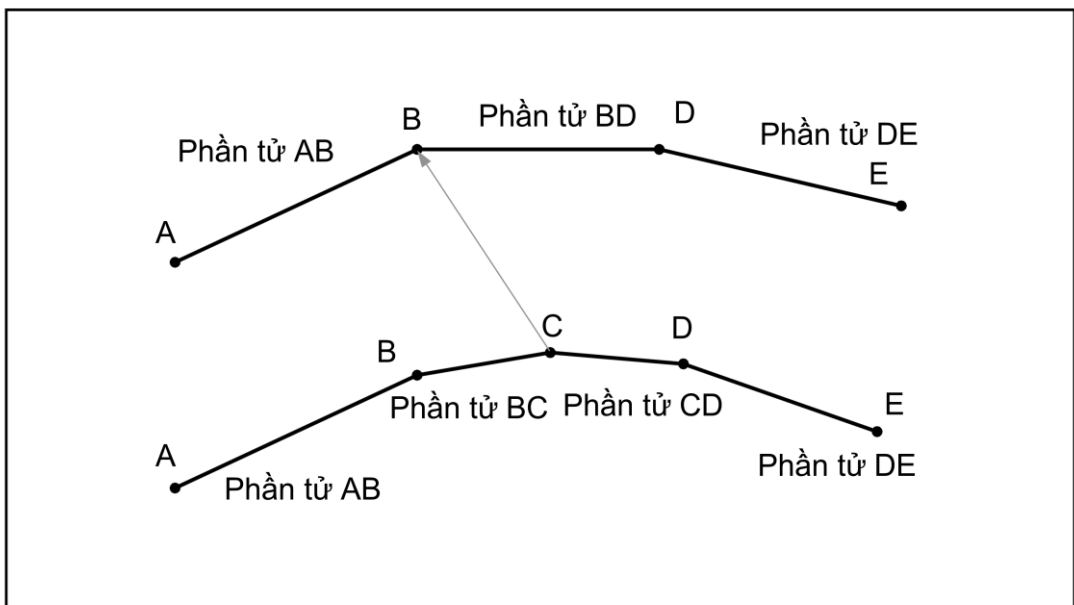
Trong nghiên cứu này, các hàm chỉ thị được sử dụng để phân tách các pha (xem các phương trình (2.17), (2.18), (2.19) và (2.20)). Xem xét một hàm chỉ thị I (xem Hình 2.9), ta có:

$$\left(\frac{\partial I}{\partial x}\right)_{i-1/2,j} = \frac{I_{i,j} - I_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (2.65)$$

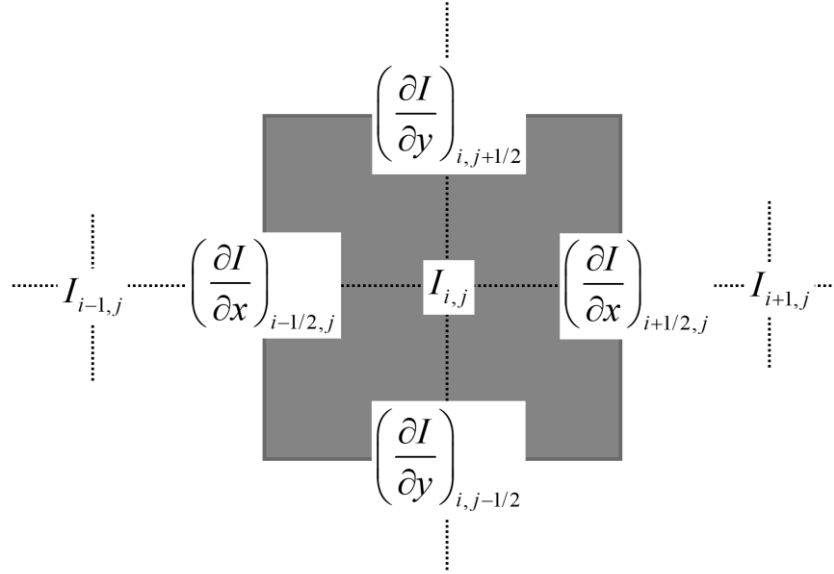
Và

$$\begin{aligned} & \frac{I_{i+1,j} + I_{i-1,j} - 2I_{i,j}}{\Delta x^2} + \frac{I_{i,j+1} + I_{i,j-1} - 2I_{i,j}}{\Delta y^2} \\ &= \frac{(\partial I/\partial x)_{i+1/2,j} - (\partial I/\partial x)_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \frac{(\partial I/\partial y)_{i,j+1/2} - (\partial I/\partial y)_{i,j-1/2}}{\Delta y} \end{aligned} \quad (2.66)$$

Sử dụng bộ giải SOR để tìm giá trị hàm chỉ thị ở mỗi bước tính toán, ta có:



Hình 2.8. Loại bỏ nút cũ



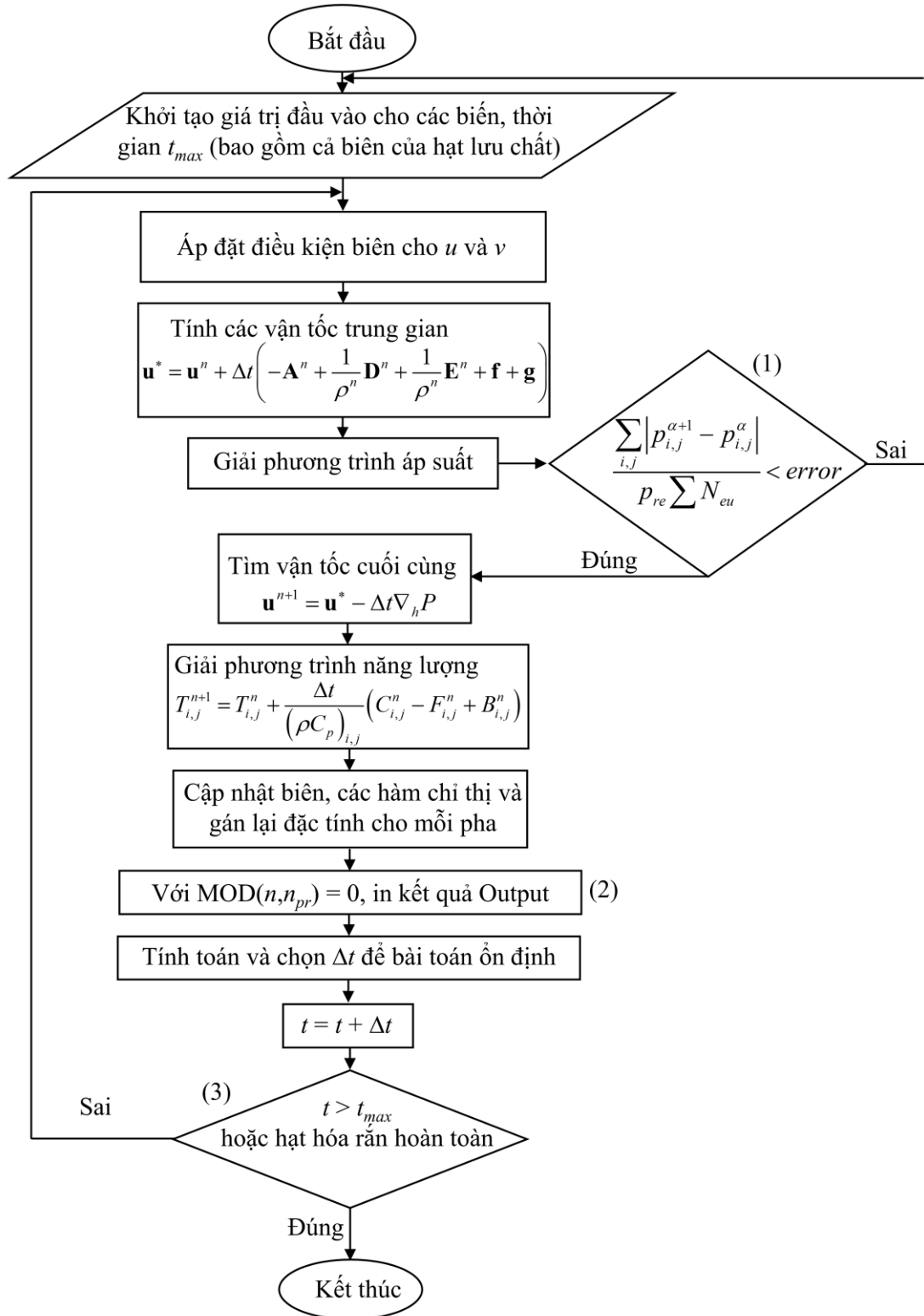
Hình 2.9. Cấu trúc của hàm chỉ thị trong lưới so le

$$\begin{aligned}
 I_{i,j}^{\alpha+1} = & \\
 (1-\beta)I_{i,j}^{\alpha} + \beta \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} \right)^{-1} & \left[\frac{I_{i+1,j}^n + I_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{I_{i,j+1}^n + I_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right. \\
 & \left. - \frac{(\partial I / \partial x)_{i+1/2,j}^n - (\partial I / \partial x)_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} + \frac{(\partial I / \partial y)_{i,j+1/2}^n - (\partial I / \partial y)_{i,j-1/2}^n}{\Delta y} \right]
 \end{aligned} \quad (2.67)$$

Sau khi hàm chỉ thị được cập nhật, ta dùng hàm này để xác định các đặc tính của các pha như khối lượng riêng (ρ), độ nhớt (μ), nhiệt dung riêng đẳng áp (C_p) và hệ số dẫn nhiệt (k), như đã được đề cập ở phía trên.

Như trên đã đề cập, hạt lưu chất lỏng xuất hiện hai điểm chập ba pha trong quá trình hóa rắn. Đây là điểm khác biệt so với hóa rắn hạt lưu chất đơn. Góc phát triển của các điểm chập pha này sẽ được áp dụng cách tính như phương trình (2.21).

Để hình dung rõ hơn về các bước tính toán, thuật giải của toàn bộ bài toán được thể hiện tại Hình 2.10.



Hình 2.10. Lược đồ giải

Tại giải phương trình áp suất ta có điều kiện hội tụ (1) (xem Hình 2.10) với áp suất vòng lặp α so sánh với vòng lặp $\alpha + 1$, p_{re} là áp suất tham chiếu, N_{eu} là tổng số điểm lưới Euler và $error$ là sai số cho phép khi giải phương trình áp suất. Nếu

điều kiện áp suất này không hội tụ thì lập tức kết thúc chương trình và điều chỉnh lại các thông số đầu vào ví dụ như sai số cho phép, độ nhớt,... để chạy lại chương trình.

Tại (2) trong *Hình 2.10* mô tả quá trình in ra kết quả (output) của chương trình tính toán. Với n_{pr} bước chạy thì chương trình mới in ra kết quả một lần.

Tại (3) ta thấy rằng chương trình tính toán sẽ dừng khi thể tích pha lỏng V_l nhỏ hơn một giá trị cho trước (≈ 0 , trong thực tế tính toán, chương trình dừng khi chất lỏng nằm gọn trong một ô lưới tính toán) hoặc thời gian tính toán vượt quá thời gian tính toán cho phép. Trong trường hợp thời gian tính toán vượt quá thời gian tính toán cho phép thì ta phải điều chỉnh sao cho các thông số đầu vào để sao cho Δt không quá bé hoặc ta tăng thời gian tính toán cho phép.

2.3. Kiểm chứng chương trình tính toán vừa xây dựng

Ở đây, để kiểm chứng chương trình tính toán vừa xây dựng và độ tin cậy của phương pháp theo dấu biên, kết quả mô phỏng của hạt nước đặt trên một bề mặt lạnh (xem *Hình 2.1*) được so sánh với các kết quả thí nghiệm của các tác giả Pan và cộng sự [35] và Huang và cộng sự [34]. Góc ướt nhỏ hơn 90° được khảo sát là $\phi_o = 78^\circ$ ứng với thí nghiệm của Pan và cộng sự [35]. Các góc ướt lớn hơn 90° được khảo sát là $\phi_o = 124^\circ$ và $\phi_o = 155^\circ$ ứng với thí nghiệm của Huang và cộng sự [34].

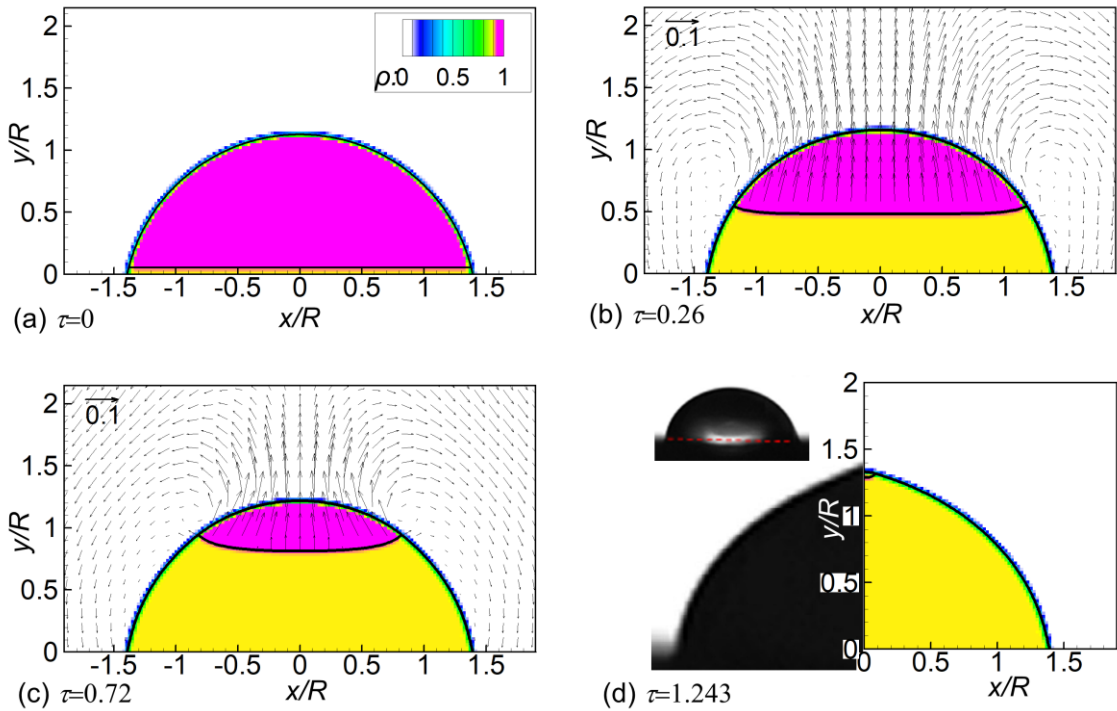
2.3.1. Hạt nước với góc ướt nhỏ hơn 90°

Hình 2.11 thể hiện quá trình hóa rắn của hạt nước được đặt trên một bề mặt lạnh với góc ướt $\phi_o = 78^\circ$. Với $R = 1,41$ mm ($D_i = 2,82$ mm [35]), các thông số mô phỏng là $Pr = 7$, $St = 0,1$, $Bo = 0,27$, $We = 0,005$, $\theta_o = 1$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\rho_{gl} = 0,05$, $\mu_{gl} = 0,05$, $k_{sl} = 4$, $k_{gl} = 0,05$, $C_{psl} = 0,5$, và $C_{pgl} = 0,2$. Tại thời điểm $\tau = 0$ (*Hình 2.11(a)*), hạt nước được cho là một phần của hình cầu. Toàn bộ hạt nước ở trong trạng thái lỏng và khối lượng riêng của hạt nước có giá trị cao nhất. Tại thời điểm $\tau = 0,26$ (*Hình 2.11(b)*), hai vùng riêng biệt (rắn và lỏng) được phân tách bởi biên hóa rắn giữa chúng. Sự khác biệt khối lượng riêng giữa nước đá và nước trạng thái lỏng có thể nhìn thấy trong *Hình 2.11(b)*, khối lượng riêng của nước đá (phần bên dưới biên hóa rắn *Hình 2.11(b)*) nhỏ hơn của nước trạng thái lỏng (phần bên trên biên hóa rắn *Hình 2.11(b)*). Bên cạnh đó, chúng ta cũng có thể thấy được trường vận tốc được trình bày trong *Hình 2.11(b)*). Ở giai đoạn thời gian tiếp theo, tại $\tau = 0,72$ (*Hình*

2.11(c)), phần hóa rắn của hạt nước tăng lên, và ngược lại phần trạng thái lỏng (hay pha lỏng) của hạt nước giảm xuống, điều này là do nhiệt độ hóa rắn của bề mặt hóa rắn được giữ dưới nhiệt độ hóa rắn của nước. Biên hóa rắn của hạt nước sẽ di chuyển lên trên. Cuối cùng, tại $\tau = 1,243$ (Hình 2.11(d)), quá trình hóa rắn của hạt nước kết thúc, một hình dạng nhô lên tại phía đỉnh của hạt nước hóa rắn; điều này có thể được giải thích bởi sự nở ra của thể tích của nước.

Kết quả mô phỏng số nhận được đã được so sánh với kết quả thực nghiệm của tác giả Pan và cộng sự [35] với góc ướt là $\phi_0 = 78^\circ$. Trong Hình 2.11(d), kết quả mô phỏng hạt nước ở phía bên phải và kết quả thí nghiệm của Pan và cộng sự [35] ở bên trái. Hình 2.11(d) cho thấy rằng các kết quả mô phỏng số đạt được sự trùng khớp tốt với thí nghiệm được thực hiện bởi Pan và cộng sự [35].

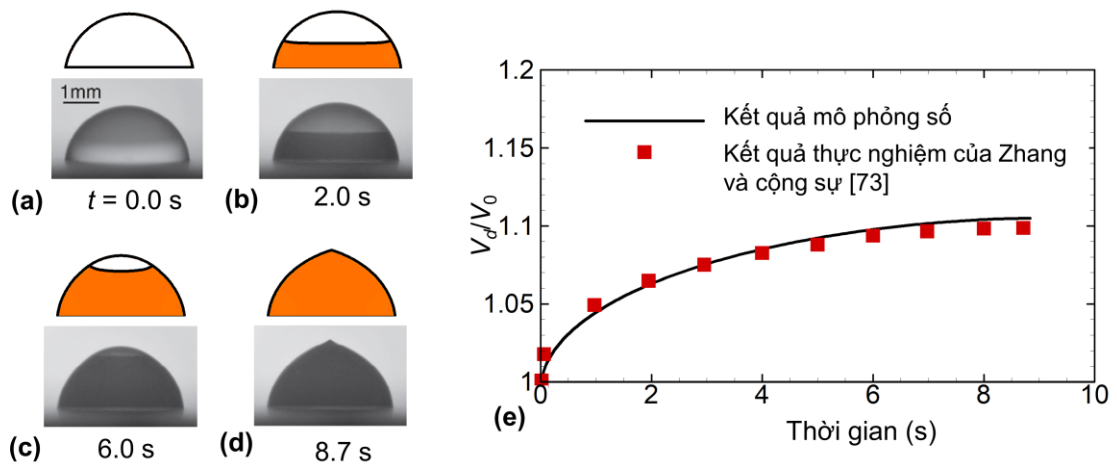
Điểm khác biệt giữa chương trình mô phỏng quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng và hạt lưu chất đơn ở đây chính là có sự xuất hiện hạt bóng khí bên trong. Vì các công trình thực nghiệm hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên bề mặt lạnh còn thiếu nên ta lấy kết quả chương trình vừa xây dựng với tỉ số bán kính $R_{io} = 0$ (hay hạt lưu chất



Hình 2.11. Quá trình hóa rắn của hạt nước trên một bề mặt lạnh theo thời gian với góc ướt $\phi_0 = 78^\circ$

không có hạt bóng khí) để so sánh với các kết quả thực nghiệm [34], [35]. Phương pháp theo dấu biên cũng đã được chứng minh được độ tin cậy cao trong mô phỏng hạt lưu chất đơn hóa rắn trên bề mặt lạnh. Có thể kể đến công trình của Duy và Vũ [78] đã sử dụng phương pháp theo dấu biên để xây dựng một chương trình mô phỏng cho một hạt lưu chất đơn hóa rắn trên một bề mặt tường lạnh dựng đứng. Trong công trình này, các tác giả cũng so sánh kết quả mô phỏng một hạt nước đơn hóa rắn trên bề mặt lạnh với kết quả công trình thực nghiệm của Zhang và cộng sự [72] (xem Hình 2.12). Theo đó, hạt nước đơn được đặt trên một bề mặt lạnh với góc ướt $\phi_0 = 85^\circ$, quá trình hóa rắn của hạt được thể hiện như trong Hình 2.12(a), (b), (c) và (d). Có thể thấy rằng kết quả mô phỏng (phía trên Hình 2.12(a), (b), (c) và (d)) theo thời gian ($\tau = 0$ s, $\tau = 2,0$ s, $\tau = 6,0$ s và $\tau = 8,7$ s) phù hợp với các kết quả thực nghiệm của Zhang và cộng sự [72] (phía dưới Hình 2.12(a), (b), (c) và (d)). Khi hạt hóa rắn hoàn toàn (tại $\tau = 8,7$ s, Hình 2.12(d)), kết quả mô phỏng sử dụng phương pháp theo dấu biên và kết quả thực nghiệm đều cho thấy một góc chóp nhọn tại đỉnh của hạt. Góc nhọn tại đỉnh của hạt này có giá trị xấp xỉ 140° đối với cả kết quả thực nghiệm và mô phỏng.

Hình 2.12(e) thể hiện sự so sánh thể tích hạt theo thời gian giữa kết quả mô phỏng (đường liền) và kết quả thực nghiệm của Zhang và cộng sự [72] (các điểm kí hiệu ô vuông). Có thể thấy rằng, tuy có sự sai khác giữa kết quả mô phỏng và thực nghiệm nhưng sự sai khác này không nhiều và có thể chấp nhận được. Từ đó cho



Hình 2.12. So sánh kết quả mô phỏng bằng phương pháp theo dấu biên [78] với kết quả thực nghiệm của Zhang và cộng sự [72] với góc ướt $\phi_0 = 85^\circ$

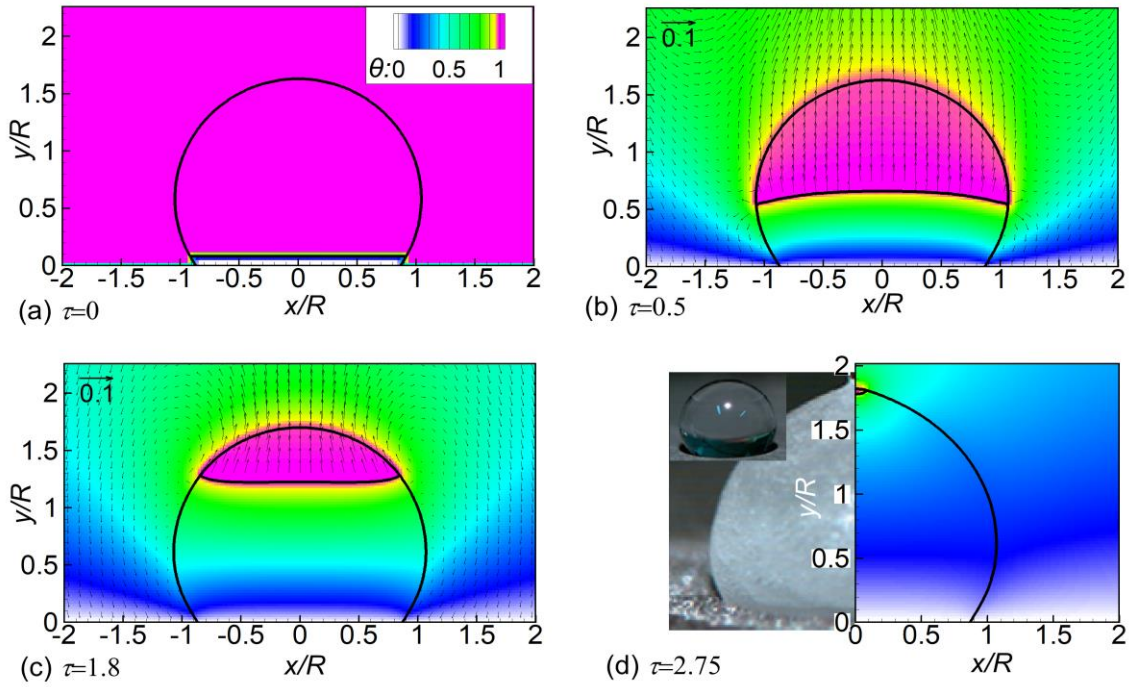
thấy độ tin cậy của phương pháp theo dấu biên trong việc mô phỏng chuyển pha của hạt lưu chất.

Từ các kết quả so sánh giữa mô phỏng và thực nghiệm với hạt nước hóa rắn trên một bề mặt lạnh với góc ướt nhỏ hơn 90° , phương pháp theo dấu biên cho độ tin cậy cao và chương trình mô phỏng vừa xây dựng mô tả tốt quá trình động lực học chuyển pha của hạt lưu chất.

2.3.2. Hạt nước với góc ướt lớn hơn 90°

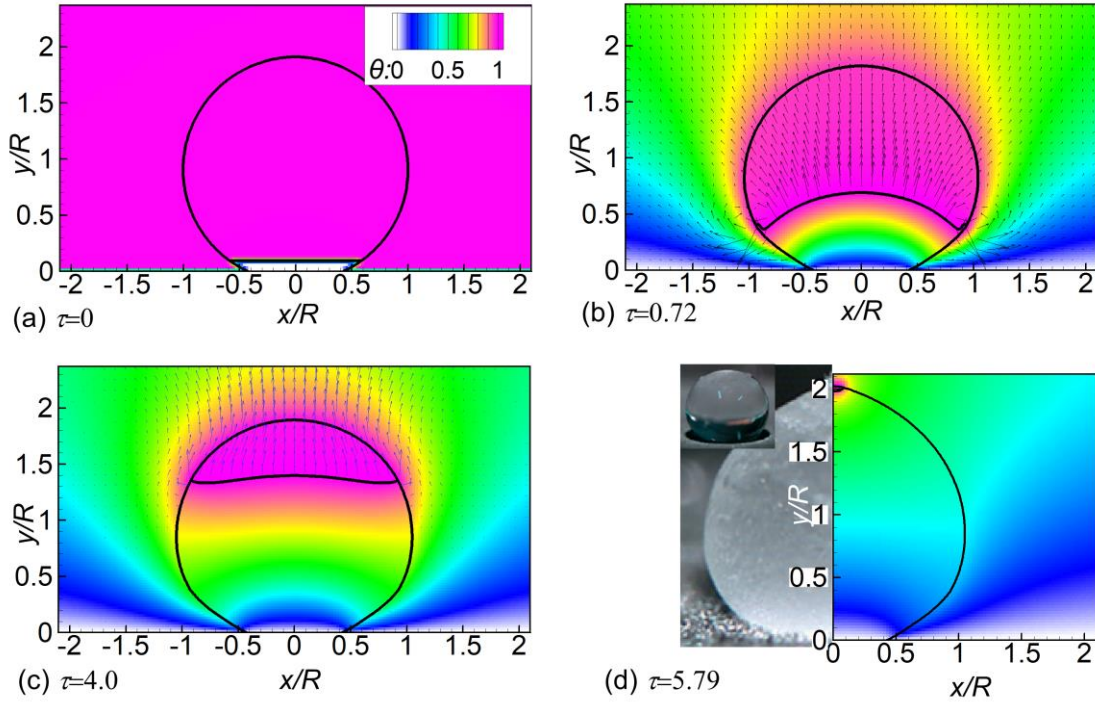
Hình 2.13 thể hiện quá trình hóa rắn của hạt nước đặt trên một bề mặt lạnh có góc ướt $\phi_o = 124^\circ$ với $Pr = 7,5$, $St = 0,1$, $Bo = 0,18$, $We = 0,005$, $\theta_o = 1$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\rho_{gl} = 0,05$, $\mu_{gl} = 0,05$, $k_{sl} = 4$, $k_{gl} = 0,05$, $C_{psl} = 0,5$, và $C_{pgl} = 0,2$ (thể tích ban đầu của hạt nước $V_0 = 6 \mu\text{l}$ [34]). Tương tự như trường hợp trước, hạt nước cũng được giả sử là một phần của hình cầu đặt trên bề mặt lạnh. Bề mặt lạnh được giữ ở nhiệt độ hóa rắn của hạt nước T_c . Tại thời điểm $\tau = 0$ (Hình 2.13(a)), nhiệt độ θ có giá trị cao nhất tại toàn miền tính toán trừ các vị trí gần với bề mặt lạnh. Tại thời điểm $\tau = 0,5$ (Hình 2.13(b)), bề mặt phân cách giữa nước đá và nước di chuyển từ đáy của hạt nước về phía đỉnh của hạt nước. Dọc theo sự di chuyển của bề mặt phân cách, qua thời gian, nhiệt độ xung quanh hạt nước giảm xuống từ từ do ảnh hưởng từ nhiệt độ của bề mặt hóa rắn. Qua thời gian, tại $\tau = 1,8$ (Hình 2.13(c)), vùng có nhiệt độ hóa rắn của nước tăng dần từ bề mặt phẳng lạnh lên phía trên của miền tính toán, do vậy biên hóa rắn cũng di chuyển từ dưới lên trên làm thành phần đá (hay pha rắn) tăng dần và giảm dần ở thành phần nước (hay pha lỏng). Cuối cùng là tại thời điểm $\tau = 2,75$ (Hình 2.13(d)), quá trình hóa rắn của hạt nước hoàn thành.

Tương tự như trường hợp trước, ta thấy một hình dạng chóp nhọn tại đỉnh của hạt nước khi hoàn thành hóa rắn. Đặc điểm này có thể được giải thích bởi sự nở ra của thể tích khi chuyển pha của nước. Trường hợp này sẽ được so sánh với kết quả thí nghiệm của Huang và cộng sự [34] với góc ướt khảo sát là $\phi_o = 124^\circ$. Trong Hình 2.13(d), kết quả mô phỏng số của bài toán ở phía bên phải, trong khi đó kết quả thí nghiệm của Huang và cộng sự [34] ở bên trái. Có thể thấy rằng, chương trình vừa xây dựng cho kết quả mô phỏng số hạt nước hóa rắn đạt mức trùng khớp tốt so với kết quả thí nghiệm được thực hiện bởi Huang và cộng sự [34].



Hình 2.13. Sự tiến triển theo thời gian của hạt nước hóa rắn trên một bề mặt lạnh với góc ướt $\phi_0 = 124^\circ$

Tiếp theo, ta xem xét quá trình hóa rắn của hạt nước đặt trên một bề mặt lạnh với góc ướt $\phi_0 = 155^\circ$ (Hình 2.14). Các thông số được sử dụng là $Pr = 7,5$, $St = 0,1$, $Bo = 0,18$, $We = 0,005$, $\theta_0 = 1$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\rho_{gl} = 0,05$, $\mu_{gl} = 0,05$, $k_{sl} = 4$, $k_{gl} = 0,05$, $C_{psl} = 0,5$, và $C_{pgl} = 0,2$ (thể tích ban đầu của hạt $V_0 = 6 \mu\text{l}$ [34]). Ban đầu, tại $\tau = 0$ (Hình 2.14(a)), hình dạng ban đầu của hạt nước với trường nhiệt độ không thứ nguyên được mô tả. Toàn bộ miền tính toán có nhiệt độ cao nhất ngoại trừ những vùng gần bề mặt hóa rắn. Tiếp theo, tại $\tau = 0,72$ (Hình 2.14(b)), bề mặt hóa rắn của hạt đã di chuyển từ từ theo chiều từ đáy lên đỉnh hạt. Dọc theo chuyển động đó, nhiệt độ không thứ nguyên sẽ có giá trị từ thấp lên giá trị cao, sự hóa rắn diễn ra tại vị trí mà nơi đó có nhiệt độ hóa rắn của nước. Sau đó, tại $\tau = 4,0$ (Hình 2.14(c)), nhiệt độ không thứ nguyên mở rộng từ đáy lên đỉnh của miền tính toán, ngày càng nhiều vùng của hạt bị hóa rắn, do đó, vùng chất lỏng (pha lỏng) của hạt giảm dần, điều này trái ngược với sự tăng lên của vùng hóa rắn (pha rắn) theo sự phát triển của thời gian. Cuối cùng, tại thời điểm $\tau = 5,79$, chúng ta có thể thấy quá trình hóa rắn của hạt nước đã kết thúc (hạt nước đã hóa rắn hoàn toàn). Một hình dạng chóp nhọn được hình thành trên đỉnh của hạt.



Hình 2.14. Sự tiến triển theo thời gian của hạt nước được đặt trên một bề mặt lạnh với góc ướt $\phi_0 = 155^\circ$

Tương tự như trường hợp trước, kết quả mô phỏng của mô hình số được so sánh với kết quả thí nghiệm của Huang và cộng sự [34] nhưng với góc ướt là $\phi_0 = 155^\circ$. Trong Hình 2.14(d), kết quả mô phỏng của hạt nước khi quá trình hóa rắn kết thúc được trình bày ở phía bên phải, trong khi ở phía bên trái là kết quả thí nghiệm của Huang và cộng sự [34]. Một lần nữa, có thể thấy rằng kết quả mô phỏng của chương trình vừa xây dựng được sử dụng trong bài toán phù hợp với các kết quả thực nghiệm được thực hiện bởi Huang và cộng sự [34].

Kết quả so sánh giữa mô phỏng số và thực nghiệm, chương trình tính toán vừa xây dựng cũng cho kết quả mô phỏng tốt quá trình động lực học chuyển pha của hạt lưu chất trên bề mặt lạnh với góc ướt lớn hơn 90° .

2.4. Kết luận Chương 2

Trong chương này, chương trình tính toán cho một hạt lưu chất có truyền nhiệt, chuyển pha được xây dựng. Theo đó, hai phương trình Navier-Stokes và phương trình năng lượng đã được rời rạc hóa để đưa vào chương trình tính toán.

Phương pháp theo dấu biên được sử dụng để nghiên cứu bài toán truyền nhiệt, chuyển pha của một hạt lưu chất. Theo đó, các biên phân cách giữa các pha được mô hình hóa bằng một chuỗi các điểm. Mỗi bước tính toán các điểm này di chuyển và được cập nhật lại. Hai hàm chỉ thị I_1 và I_2 được sử dụng để xác định các đặc tính pha tại mọi điểm trên miền tính toán.

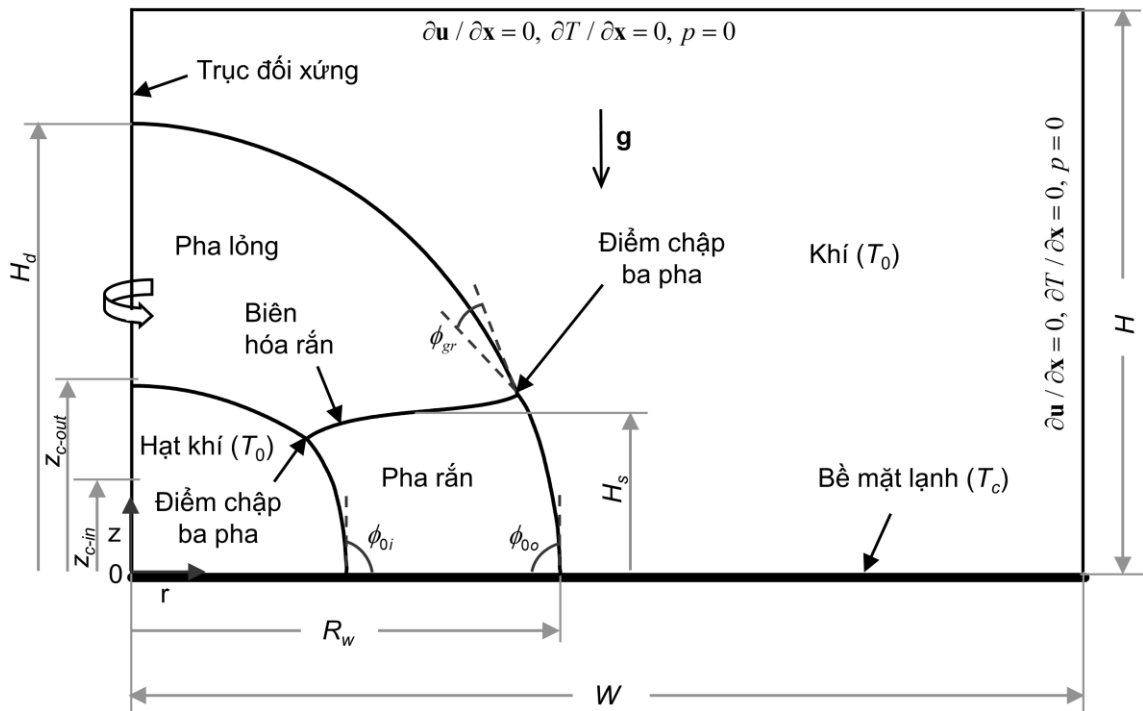
Các kết quả mô phỏng số đã có sự trùng khớp tốt với các kết quả thực nghiệm. Từ đó cho thấy rằng chương trình tính toán vừa xây dựng có độ tin cậy cao, có thể sử dụng làm công cụ để nghiên cứu quá trình truyền nhiệt, chuyển pha của hạt lưu chất rỗng.

CHƯƠNG 3. NGHIÊN CỨU QUÁ TRÌNH TRUYỀN NHIỆT, CHUYỂN PHA CỦA HẠT LƯU CHẤT RỖNG TRÊN MỘT BỀ MẶT LẠNH

Một số các công trình thực nghiệm đã theo dõi quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng như công trình của Vũ và cộng sự [18], và Bahgat và cộng sự [19]. Các công trình thực nghiệm này đều sử dụng một cặp vòi phun đồng trục để tạo ra một hạt lưu chất đơn nhân rỗng lỏng. Hạt đơn nhân rỗng lỏng này có thể hóa rắn trong quá trình rơi xuống (hay hạt chưa tiếp xúc với bề mặt lạnh) hoặc sau khi tiếp xúc với một bề mặt lạnh nào đó. Chương này tập trung mô phỏng trường hợp thứ 2 đó là “*hạt lưu chất rỗng hóa rắn sau khi tiếp xúc với bề mặt lạnh*”.

3.1. Mô hình bài toán và chọn độ phân giải lưới

Hình 3.1 mô tả một nửa của một hạt lưu chất rỗng đối xứng qua trục được hóa rắn trên một bề mặt lạnh được giữ ở nhiệt độ cố định T_c . Bài toán bao gồm ba pha không nén được, không trộn lẫn và có tính chất Newton là: rắn (với khối lượng riêng ρ_s), lỏng (với khối lượng riêng ρ_l và độ nhớt μ_l) và khí (với khối lượng riêng ρ_g và độ nhớt μ_g). Ban đầu, hạt lưu chất rỗng bao gồm một hạt lưu chất mà bên



Hình 3.1. Hạt lưu chất rỗng đối xứng hóa rắn trên một bề mặt lạnh được giữ tại nhiệt độ T_c

trong chứa một hạt bóng khí được giả sử là bán cầu. Khí bao quanh hạt được giả sử có tính chất giống với khí của hạt bóng khí. Do đó, pha lỏng của hạt lưu chất rỗng là lớp vỏ lỏng ngoài nằm giữa lớp khí bên trong và bên ngoài, và do vậy quá trình chuyển pha xảy ra chỉ ở lớp vỏ lỏng bên ngoài của hạt lưu chất rỗng [18], [19], [79]. Một số công trình nghiên cứu đi trước đã khảo sát và mô phỏng của hạt lưu chất đơn hóa rắn trên một bề mặt lạnh cho thấy rằng hình dạng của hạt được giả sử là một phần của hình cầu tại lúc bắt đầu mô phỏng [67], [69]–[71]. Do đó, tại thời điểm $t = 0$, hạt lưu chất rỗng ban đầu được giả sử có hình dạng cầu trong nghiên cứu này có thể chấp nhận được [80]. Bán kính ban đầu của hạt ngoài và trong lần lượt là R_o và R_i . Z_{c-in} và Z_{c-out} là tọa độ trọng tâm của hạt bóng khí bên trong và hạt lưu chất ngoài. Pha lỏng có nhiệt độ hóa lỏng hay nhiệt độ chuyển pha T_m lớn hơn nhiệt độ T_c . Do đó, sự hóa rắn bắt đầu tại bề mặt của bề mặt lạnh và phát triển lên phía trên của hạt [33]. Trong suốt quá trình hóa rắn, pha rắn (được kí hiệu bởi chỉ số dưới s), pha lỏng (được kí hiệu bởi chỉ số dưới l) và pha khí (được kí hiệu bởi chỉ số dưới g) giao nhau tại đường chập ba pha, trong nghiên cứu này là điểm chập ba pha. Không giống như công trình trước đó [67], ở đây xuất hiện 2 điểm chập ba pha: một ở biên phân cách phía trong và một ở biên phân cách phía ngoài.

Để giải bài toán này, các điều kiện biên và điều kiện ban đầu được áp đặt như sau. Tại $t = 0$, hạt có dạng một phần hình cầu, và nhiệt độ tại tất cả các pha được giả sử bằng T_0 . Tại biên đáy, điều kiện biên không trượt được áp dụng, và T_c được giữ cố định trong suốt quá trình tính toán. Điều kiện trượt hoàn toàn được áp dụng tại biên ở đỉnh và bên phải của miền tính toán, và điều kiện đối xứng trục được áp dụng tại biên phía bên trái.

Để giải các phương trình năng lượng và phương trình động lượng, toàn bộ miền tính toán được chia lưới bởi một lưới vuông so le. Những phương trình này được rời rạc bởi một lược đồ sai phân hữu hạn, và tích phân thời gian được thực hiện bởi phương pháp tham chiếu bậc hai [81]. Hạt cùng biên chuyển pha và sự di chuyển của chúng được giải quyết bởi phương pháp theo dấu biên [65]–[67]. Theo đó, biên phân cách giữa các pha được mô hình hóa bằng các điểm kết nối trên nền lưới cố định (lưới Euler). Kích thước miền tính toán được chọn là $3R \times 6R$ (ở đây R được định nghĩa bên dưới), được chia bởi lưới có độ phân giải 256×512 (quá trình nghiên cứu hội tụ lưới được trình bày ở phần tiếp theo).

Động lực học của bài toán được đặc trưng bởi các thông số không thứ nguyên dưới đây

$$Pr = \frac{C_{pl}\mu_l}{k_l}, St = \frac{C_{pl}(T_m - T_c)}{L_h}, Bo = \frac{\rho_l g R^2}{\sigma}, Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l R \sigma}} \quad (3.1)$$

$$R_{io} = \frac{R_i}{R_o}, \theta_0 = \frac{T_0 - T_c}{T_m - T_c}, \rho_{sl} = \frac{\rho_s}{\rho_l}, \rho_{gl} = \frac{\rho_g}{\rho_l}, \mu_{gl} = \frac{\mu_g}{\mu_l} \quad (3.2)$$

$$k_{sl} = \frac{k_s}{k_l}, k_{gl} = \frac{k_g}{k_l}, C_{psl} = \frac{C_{ps}}{C_{pl}}, C_{pgl} = \frac{C_{pg}}{C_{pl}} \quad (3.3)$$

Ở đây, R là bán kính tương đương của hạt ngoài của hạt lưu chất rỗng, $R = R_o = (0,75V_0/\pi)^{1/3}$, với V_0 là thể tích ban đầu của hạt ngoài của hạt lưu chất rỗng. R_{io} là tỉ số bán kính của hạt bóng khí với hạt ngoài. Trong bài toán hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên bề mặt lạnh, đối tượng là các hạt có kích thước nhỏ (từ vài trăm microm đến vài mm) và vật liệu chuyển pha như là kim loại, Silic hoặc Gecmani,...(tham khảo [18], [19], [33], [38], [43]). Do đó các thông số chọn mô phỏng sao cho phù hợp với vật liệu và thuận tiện cho quá trình tính toán để thể hiện được tác động của các thông số đó đến quá trình hóa rắn. Các thông số được chọn là Bo trong dải 0,18 – 3,16, Pr trong dải 0,01 – 1,0, St trong dải 0,032 – 1,0, ρ_{sl} trong dải 0,8 – 1,2 và góc phát triển ϕ_{gr} trong dải $0^\circ - 25^\circ$. Ngoài ra, các thông số khác liên quan đến hình học của hạt như R_{io} trong dải 0,2 – 0,7, góc ướt trong ϕ_{oi} trong dải $50^\circ - 120^\circ$ và góc ướt ngoài ϕ_{oo} trong dải $60^\circ - 130^\circ$. Bởi vì có rất nhiều các thông số ảnh hưởng tới bài toán nên trong luận án này chỉ tập trung vào các dải thông số trên. Các thông số khác được giữ cố định: $Oh = 0,01$, $\theta_0 = 1,0$, $k_{gl} = 0,005$, $\rho_{gl} = \mu_{gl} = 0,05$, $k_{sl} = C_{psl} = 1,0$ và $C_{pgl} = 0,24$. Thời gian không thứ nguyên được kí hiệu là τ , $\tau = t/t_t$, ở đây $t_t = R^2 \rho_l C_{pl} / k_l$ là thời gian tham chiếu đặc trưng cho tốc độ truyền nhiệt [82]. Trong tất cả các thông số nghiên cứu này, vận tốc được không thứ nguyên hóa bởi U_t , $U_t = R/t_t = k_l / (\rho_l C_{pl} R)$, và áp suất không thứ nguyên p_n được định nghĩa là $p_n = p / (0.5 \rho_l U_c^2)$.

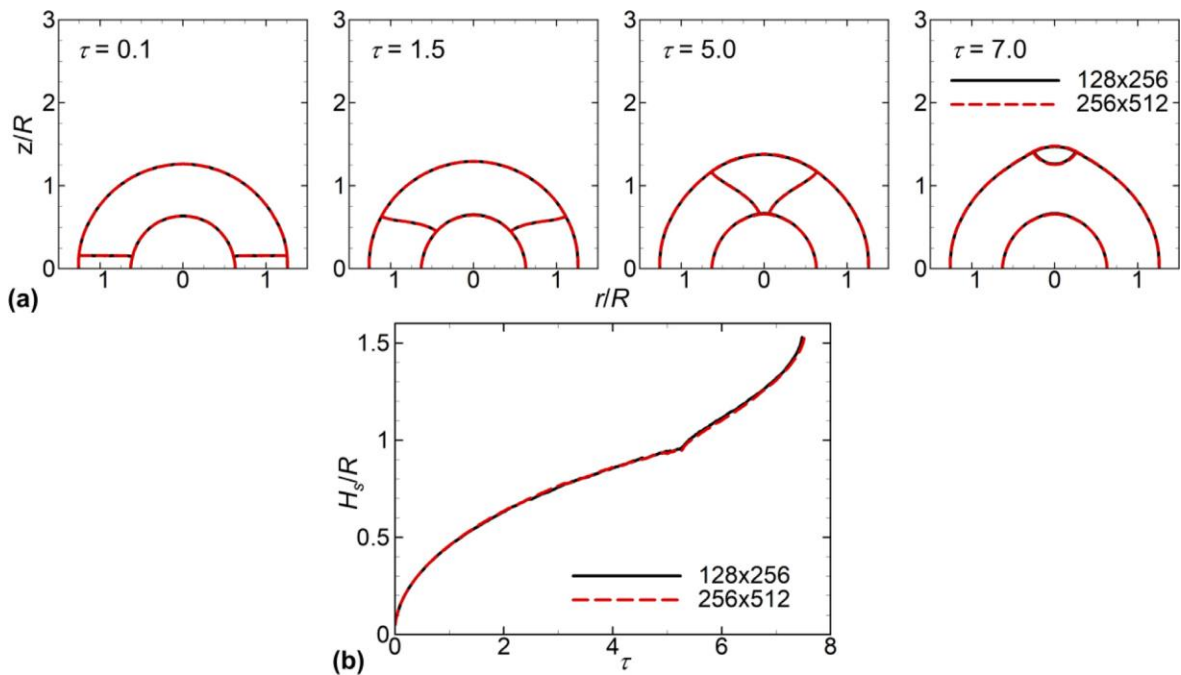
Để kiểm chứng phương pháp với nghiên cứu hội tụ lưới, một trường hợp mô phỏng số hạt lưu chất rỗng hóa rắn trên một bề mặt lạnh được thực hiện với các

Bảng 3.1. Sai số trung bình của lưới 128×256 so với độ phân giải lưới 256×512

| Sai số trung bình (%) | Độ phân giải lưới 128×256 so với độ phân giải lưới 256×512 | |
|-----------------------|--|---------------|
| | Chiều cao biên hóa rắn | Chiều cao hạt |
| | 0,54% | 0,22% |

thông số $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $Bo = 0,1$, $R_{io} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\phi_{oi} = \phi_{oo} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$.

Hình 3.2 mô tả kết quả thu được bởi hai lưới 128×256 và 256×512 cho miền tính toán $3R \times 6R$. Hình 3.2(a) cho thấy rằng độ phân giải lưới không có sự khác biệt giữa chiều cao của hạt lưu chất rỗng và biên hóa rắn tại các thời điểm khác nhau của quá trình hóa rắn. Hình 3.2(b) minh họa thời gian phát triển của H_s (định nghĩa trong Hình 3.1) được xác định là chiều cao biên hóa rắn (nghĩa là chiều cao trung bình dọc trục của tất cả các điểm trên biên hóa rắn), thu được từ lưới 128×256 so sánh với chiều cao biên hóa rắn với lưới mịn hơn. Ta thấy hai đường đại diện cho hai lưới gần như là trùng khớp và có rất ít sự khác biệt. Thêm nữa, Bảng 3.1 cũng cho thấy được sự sai số trung bình rất nhỏ của chiều cao biên hóa rắn và chiều cao hạt giữa hai lưới. Do hai lưới chọn để mô phỏng đạt độ trùng khớp cao, về mặt lý thuyết, ta có thể lựa chọn lưới 128×256 . Tuy nhiên, để cho kết quả mô phỏng chính xác hơn ở cuối quá trình hóa rắn của hạt (xem Hình 3.2(b)), ta chọn lưới với độ phân giải 256×512 để mô phỏng bài toán.

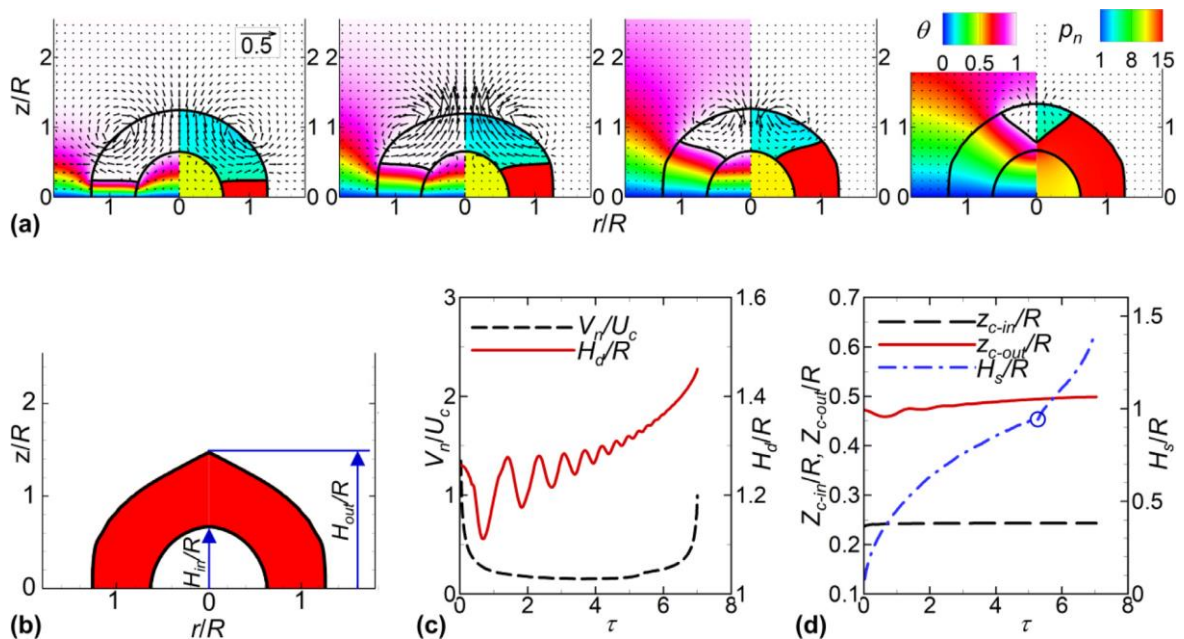


Hình 3.2. Nghiên cứu độ hội tụ lưới đối với hạt lưu chất rỗng hóa rắn trên một bề mặt lạnh

3.2. Kết quả và thảo luận

Hình 3.3 mô tả trường hợp điển hình của quá trình hóa rắn của một hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh. Các thông số là $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $Bo = 1,0$, $R_{i0} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\phi_{0i} = \phi_{0o} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Hình 3.3(a) thể hiện hạt lưu chất rỗng đang trong quá trình hóa rắn tương ứng với các thời gian $\tau = 0,25$; 1,0; 2,45 và 5,45. Từ hình dạng một bán cầu, do tác dụng trọng lực, pha lỏng bị kéo xuống khi quá trình hóa rắn bắt đầu. Điều đó dẫn đến một dòng tuần hoàn di chuyển xuống dưới gần trục đối xứng và hướng tăng lên trên cạnh bên phía hạt ($\tau = 0,25$, Hình 3.3(a)). Điều này dẫn đến chiều cao của hạt lưu chất rỗng (H_d) (được định nghĩa trong Hình 3.1) giảm (đường liền trong Hình 3.3(c)). Tuy nhiên, hạt bóng khí được bao bọc bởi hạt lưu chất, các vòng tuần hoàn yếu hơn di chuyển ngược chiều để ngăn cản lưu chất rơi xuống. Do đó, hạt bóng khí vẫn giữ được một hình dạng gần như là bán cầu, và áp suất của nó thì cao hơn áp suất trong pha lỏng. Thêm vào đó, trong suốt trạng thái đầu này, biên chuyển pha hầu như bằng phẳng khi di chuyển lên phía trên. Do tác động của lực trọng trường kéo hạt đi xuống và sức căng bề mặt kéo hạt đi lên nên xuất hiện những dao động tại biên lỏng-khí (Hình 3.3(c)). Những dao động này làm biên hóa rắn gần biên ngoài di chuyển nhanh hơn so với vùng gần biên trong.

Pha lỏng di chuyển lên phía trên và lại xuống phía dưới dẫn đến một sự dao



Hình 3.3. Quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng điển hình

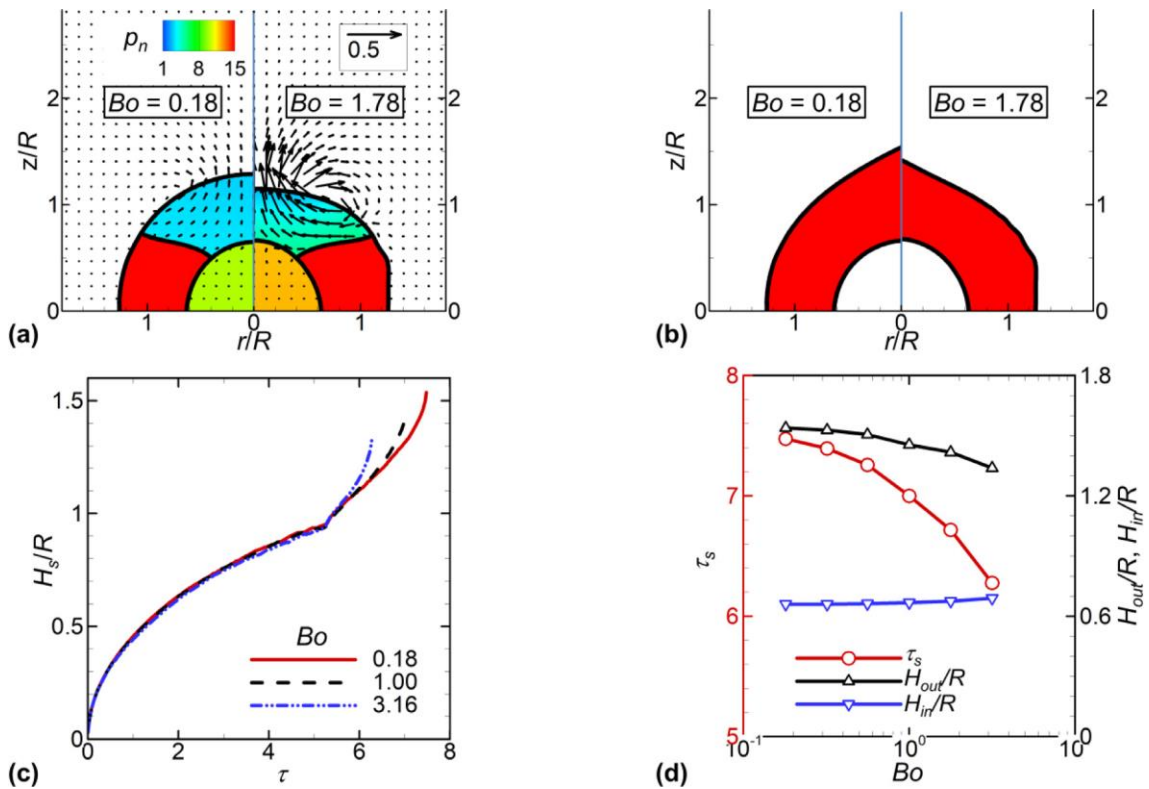
động của hạt đến tận $\tau = 5,45$ (*Hình 3.3(a)*). Kết quả là các gợn sóng lặn dần được tạo ở bề mặt ngoài [78] của hạt hóa rắn (*Hình 3.3(b)*). Hiện tượng này giống như các chuyển động nhấp nhô trên bề mặt của hạt lưu chất đơn cũng đã được khảo sát trong công trình nghiên cứu của Haferi và cộng sự [83]. Sau đó, hạt lưu chất chỉ di chuyển lên phía trên dưới ảnh hưởng của giãn nở thể tích (gây ra bởi sự khác nhau về khối lượng riêng của pha lỏng và pha rắn) (*Hình 3.3(c)*) [67], [84]. Như kết quả đã trình bày, hạt lưu chất rỗng hình thành một hình dạng nón tại đỉnh của bề mặt ngoài sau khi quá trình hóa rắn kết thúc (*Hình 3.3(b)*). *Hình 3.3(b)* cũng chỉ ra rằng mặc dù hạt ngoài bị ảnh hưởng mạnh mẽ bởi sự tương tác giữa sức căng bề mặt, trọng lực và sự thay đổi thể tích, nhưng nhân khí bên trong (hay hạt bóng khí) hầu như không thay đổi và dường như không phụ thuộc vào các nhân tố trên. Do vậy, hạt bóng khí bên trong gần như có hình dạng một bán cầu trong suốt quá trình hóa rắn. Từ đó có xuất hiện một chóp nhọn trên đỉnh hạt, tâm của hạt ngoài sau khi hóa rắn kết thúc tăng lên một chút (*Hình 3.3(d)*). Tương tự với các công trình hóa rắn hạt lưu chất đơn trước [66], [67], [78], biên chuyển pha di chuyển nhanh trong giai đoạn đầu và giai đoạn cuối của quá trình hóa rắn, trong khi đó nó gần như di chuyển ổn định trong suốt giai đoạn giữa của quá trình hóa rắn, như được mô tả trong *Hình 3.3(c)* (xem V_n , được xác định là vận tốc của biên hóa rắn).

Một kết quả có thể nhìn thấy từ *Hình 3.3(a)* rằng với một hạt bóng khí nhỏ so với hạt ngoài, điểm chập ba pha của biên bên trong sẽ hoàn thành hành trình trước so với điểm chập ba pha trên biên bên ngoài. Sau khi kết thúc quá trình hóa rắn quanh hạt bóng khí, biên hóa rắn di chuyển nhanh hơn bởi vì nhiệt được truyền qua biên nhiều hơn (do không còn lớp không khí bên trong bao quanh). Điều này tạo nên một độ dốc của đường $H_s(\tau)$ (đường chấm gạch, *Hình 3.3(d)*) trong suốt giai đoạn này. Kết quả, một điểm gấp khúc xuất hiện trên $H_s(\tau)$, được kí hiệu bởi một vòng tròn trên *Hình 3.3(d)*. Điều này khiến quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng khác so với quá trình hóa rắn của hạt lưu chất đơn (đường $H_s(\tau)$ của hạt đơn không xuất hiện điểm gấp khúc [49]).

Sau đây, ta sẽ xem xét sự ảnh hưởng của một vài thông số chính.

3.2.1. Ảnh hưởng của số Bond

Xem xét ảnh hưởng của số Bond lên quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trên bề mặt lạnh, các giá trị của số Bond được khảo sát là 0,18; 0,32; 0,56; 1,0; 1,78 và 3,16. Các thông số khác là $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $R_{io} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\phi_{oi} = \phi_{oo} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Hình 3.4(a) so sánh hình dạng hạt, trường áp suất và trường vận tốc trong hình được thể hiện với $Bo = 0,18$ (bên trái) và $Bo = 1,78$ (bên phải) tại $\tau = 2,0$. Dễ dàng có thể nhìn thấy các hạt bóng khí bên trong với hai số Bond gần như là như nhau. Tuy nhiên, các hạt ngoài lại có những biến đổi khác nhau. Cụ thể, đối với hạt có số Bond nhỏ ($Bo = 0,18$), lực căng bề mặt chi phối nhiều hơn so với trọng lực, và do vậy hạt ngoài giữ được hình dạng gần như là bán cầu trong khoảng thời gian này. Điều này được minh chứng bởi sự phân tán đồng đều của trường áp suất trong pha lỏng với $Bo = 0,18$. Việc tăng giá trị của Bo lên khoảng 10 lần, $Bo = 1,78$, trọng lực đóng vai trò chi phối đáng kể so với lực căng bề mặt, và nó là nguyên nhân làm hạt có dao động mạnh hơn. Do đó, tại $\tau = 2,0$, đỉnh của hạt ngoài đối với $Bo = 1,78$ di chuyển xuống dưới với một vận tốc mạnh hơn so với vận tốc của hạt với $Bo = 0,18$.



Hình 3.4. Ảnh hưởng của số Bo tới quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh

Kết quả, sau khi quá trình hóa rắn kết thúc, chiều cao hạt hóa rắn với $Bo = 0,18$ cao hơn so với chiều cao của hạt có $Bo = 1,78$. Trong khi đó, các hạt bóng khí bên trong gần như là như nhau, được mô tả trong *Hình 3.4(b)*. *Hình 3.4(a)* cũng chỉ ra rằng các vị trí của biên chuyển pha đối với $Bo = 0,18$ và $Bo = 1,78$ tại $\tau = 2,0$ không quá khác. Nói cách khác, sự biến đổi của Bo trong khoảng $0,18 - 1,78$ không ảnh hưởng quá nhiều đến tốc độ hóa rắn khi pha rắn đang hình thành xung quanh hạt bóng khí (*Hình 3.4(c)*). Tuy nhiên, việc tăng giá trị của Bo làm cho quá trình hóa rắn xảy ra nhanh hơn và chiều cao của hạt lưu chất rỗng giảm sau khi quá trình hóa rắn kết thúc, như được thể hiện trong *Hình 3.4(c)*. Dẫn đến là, việc tăng giá trị của Bo trong khoảng $0,18 - 3,16$ giảm thời gian hóa rắn (τ_s) (tức là, thời gian hoàn thành toàn bộ quá trình hóa rắn, *Hình 3.4(d)*), và chiều cao (H_{out}) (được định nghĩa trong *Hình 3.3(b)*) của hạt lưu chất rỗng hóa rắn hoàn toàn (tức là, chiều cao của hạt ngoài, đường kí hiệu delta trong *Hình 3.4(d)*). Một hàm số mũ thể hiện sự biến đổi của thời gian hóa rắn ứng với số Bo được đưa ra $\tau_s = 7,5\exp(-0,058Bo)$ với sai số lớn nhất là 1,1%. Tương tự, sự biến đổi của H_{out} ứng với số Bo có thể được thể hiện bởi một hàm số mũ $H_{out}/R = 1,544\exp(-0,047Bo)$ với sai số lớn nhất là 1,2%. Tuy nhiên, việc thay đổi Bo từ 0,18 đến 3,2 có ảnh hưởng rất nhỏ lên chiều cao (H_{in}) (được định nghĩa trong *Hình 3.3(b)*) của hạt bóng khí bên trong, như được chỉ ra bởi các đường có kí hiệu tam giác ngược trong *Hình 3.4(d)*. Thêm nữa là, việc tăng giá trị của Bo cũng tăng sự biến dạng của những sự nhấp nhô hóa rắn của làn sóng mao dẫn trên bề mặt ngoài của hạt lưu chất rỗng, xem *Hình 3.4(b)*.

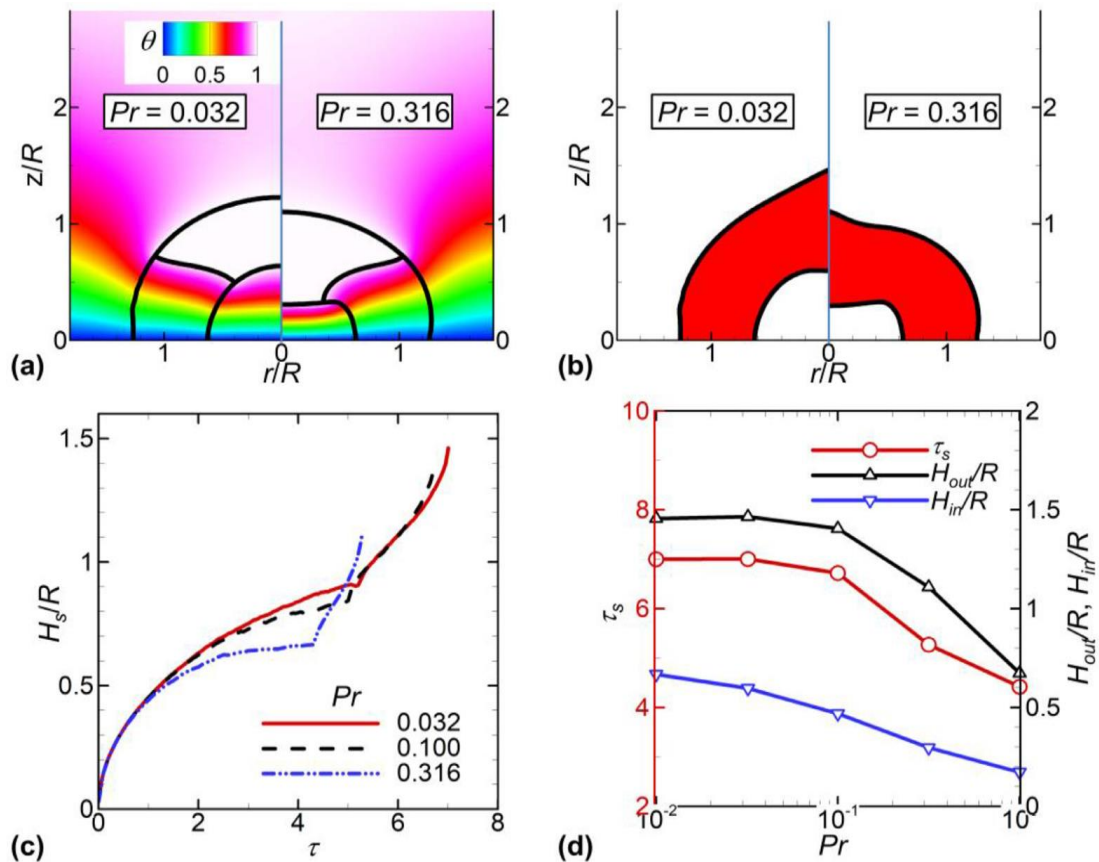
3.2.2. Ảnh hưởng của số Prandtl

Các công trình nghiên cứu hóa rắn những hạt lưu chất đơn trước cho thấy rằng việc tăng giá trị của số Prandtl (Pr) làm giảm chiều cao hóa rắn của hạt [67], [85]. Tình huống tương tự cũng xảy ra với hạt lưu chất rỗng như được minh họa trong *Hình 3.5* ($St = 0,1$, $Bo = 1,0$, $R_{io} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\phi_{0i} = \phi_{0o} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$). Ở đây, giá trị số Pr được xem xét là 0,01; 0,32; 0,1; 0,316 và 1,0. Đối với một số Pr thấp, $Pr = 0,032$, hạt bóng khí bên trong và hạt ngoài giữ được hình dạng gần như là bán cầu trong suốt quá trình hóa rắn trừ trạng thái hóa rắn cuối cùng (khung hình bên trái của *Hình 3.5(a)* và *Hình 3.5(b)*).

Thay đổi giá trị của Pr đến 0,316 (tức là, lớn hơn khoảng 10 lần) sẽ giảm lớp nhiệt xung quanh biên chuyển pha (*Hình 3.5(a)*). Kết quả là, $Pr = 0,316$ tăng tốc độ

hóa rắn và do đó giảm thời gian τ_s (thời gian hoàn thành quá trình hóa rắn được thể hiện bởi đường kí hiệu vòng tròn trên Hình 3.5(d)). Đa thức bậc hai phù hợp với sự thay đổi τ_s ứng với Pr được đưa ra là $\tau_s = 4,536Pr^2 - 7,34Pr + 7,214$ với sai số tối đa là 2,9%.

Về hình dạng của hạt, việc tăng giá trị của số Pr dẫn đến hạt biến dạng nhiều hơn cùng với việc giảm chiều cao của cả hạt khí bên trong và hạt ngoài sau khi quá trình hóa rắn kết thúc, như được thể hiện trong Hình 3.5(b) và Hình 3.5(d). Để giải thích cho sự ảnh hưởng này, ta có, phương trình (3.1) định nghĩa số Pr và một vài thông số khác. Việc tăng Pr sẽ làm cho các lưu chất nhớt hơn. Do Bo và Oh được giữ cố định, việc tăng nhớt lưu chất tương ứng với lưu chất nặng hơn (hay nâng cao lực quán tính của lưu chất). Do đó, tương tự như nghiên cứu [86], nâng cao lực quán tính dẫn đến hạt trải ra nhiều hơn. Kết quả là, các số Pr cao hơn gây ra các bề mặt lõm hơn của các hạt bóng khí bên trong và hạt ngoài, như được thể hiện trong Hình 3.5(b). Một hàm số mũ phù hợp với đường H_{out} ứng với số Pr là $H_{out}/R =$

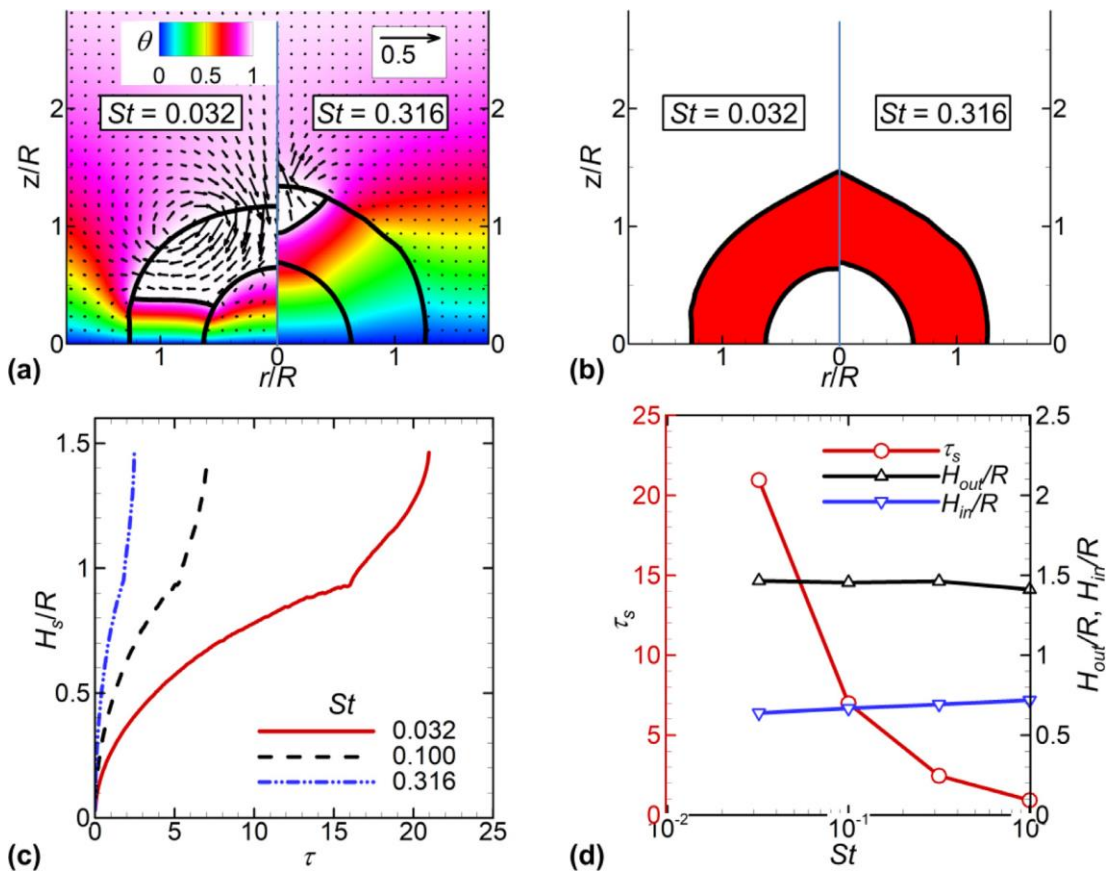


Hình 3.5. Ảnh hưởng của số Pr tới quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh

$1,483\exp(-0,8Pr)$. Hàm mũ này có sai số lớn nhất là 3,8%. Tuy nhiên, như được thể hiện trong Hình 3.5(d), sự ảnh hưởng của số Pr rõ ràng hơn khi giá trị của nó lớn hơn 0,1.

3.2.3. Ảnh hưởng của số Stefan

Hình 3.6 thể hiện sự ảnh hưởng của St lên quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với $Pr = 0,01$, $Bo = 1,0$, $R_{io} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\phi_{oi} = \phi_{oo} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Các giá trị số St được khảo sát là 0,032; 0,1; 0,316 và 1,0. Việc tăng St đồng nghĩa với việc giảm nhiệt ẩn của quá trình hóa rắn hay tăng nhiệt độ hóa rắn (phương trình (3.1)), và do đó sẽ tăng tốc độ hóa rắn lên, như được minh họa trong Hình 3.6(c). Theo đó, tại thời điểm $\tau = 2,0$ (Hình 3.6(a)), pha rắn đã hình thành xung quanh hạt bóng khí đối với $St = 0,316$ trong khi đó chỉ một phần nhỏ pha lỏng bị hóa rắn đối với $St = 0,032$. Như kết quả đã cho thấy, việc tăng St trong dải từ 0,032 – 1,0 sẽ làm tăng tốc độ hóa rắn (Hình 3.6(c)) và do đó làm giảm thời gian hóa rắn (τ_s) cho việc hoàn thành toàn bộ quá trình hóa rắn (đường kí hiệu tròn, Hình 3.6(d)). Tuy nhiên, sự

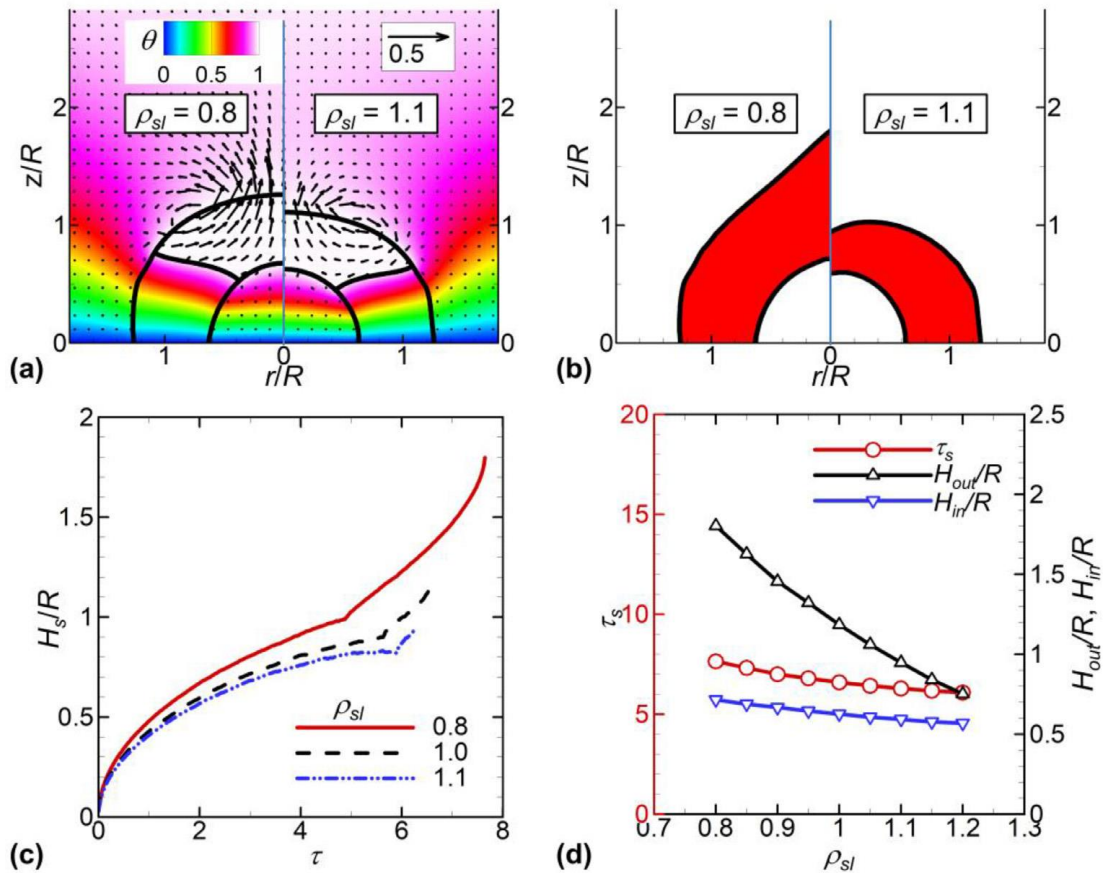


Hình 3.6. Ảnh hưởng của số St tới quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh

thay đổi của St trong dải này có ảnh hưởng nhỏ lên chiều cao của hạt bóng khí và hạt ngoài sau khi quá trình hóa rắn kết thúc như đã được thể hiện trong *Hình 3.6(b)* và *Hình 3.6(d)*. Có thể thấy rằng việc tăng St từ 0,032 đến 1,0 dẫn đến một sự tăng nhẹ chiều cao của hạt ngoài nhưng lại có một sự giảm nhẹ chiều cao của hạt bóng khí. Điều đó thể hiện rõ ràng rằng là số St có ảnh hưởng chủ yếu đến thời gian hóa rắn. Sự ảnh hưởng mạnh mẽ này có thể được thể hiện bởi hàm số mũ $\tau_s = 0,9St - 0,9$ với sai số lớn nhất là 4,9%.

3.2.4. Ảnh hưởng của tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng

Ảnh hưởng của sự thay đổi thể tích vì sự khác nhau của khối lượng riêng trong quá trình hóa rắn được thể hiện trong *Hình 3.7*. Các thông số là $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $Bo = 1,0$, $R_{io} = 0,5$, $\phi_{0i} = \phi_{0o} = 90^\circ$, $\phi_{gr} = 0^\circ$ và ρ_{sl} thay đổi trong khoảng 0,8 – 1,2 với bước nhảy $\Delta\rho_{sl} = 0,5$. Đối với tỉ số khối lượng riêng của pha rắn đối với pha lỏng $\rho_{sl} < 1,0$ ($\rho_{sl} = 0,8$, khung hình bên trái của *Hình 3.7(a)*), pha lỏng có xu hướng đi ra từ biên hóa rắn bởi vì sự nở ra của thể tích. Theo đó, tại $\tau = 2,0$, pha lỏng



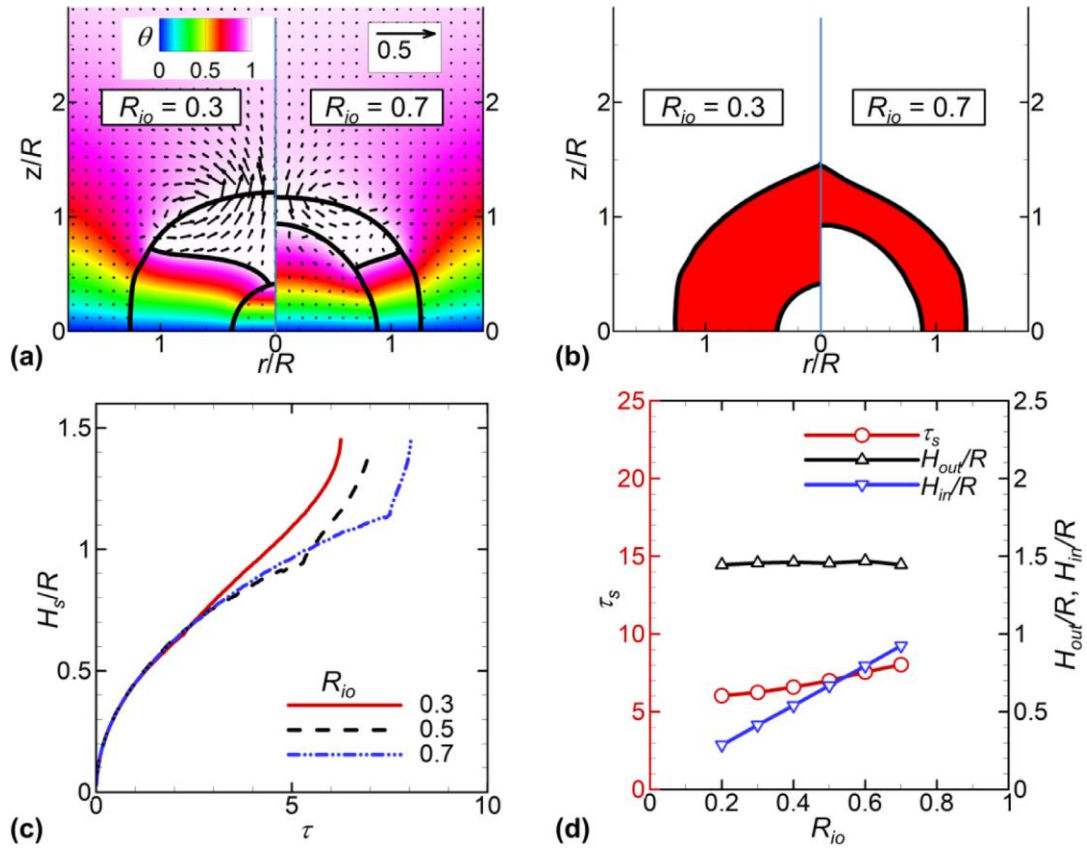
Hình 3.7. Ảnh hưởng của số ρ_{sl} tới quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh

đường như đang chảy ra gần bề mặt hóa rắn. Ngược lại, tại thời điểm này, pha lỏng đường như chảy về biên chuyển pha đối với $\rho_{sl} > 1,0$ ($\rho_{sl} = 1,1$, khung bên phải *Hình 3.7(a)*) [84], [87]. Như kết quả đã thể hiện, việc giảm tỉ số khối lượng riêng này từ 1,1 đến 0,8 sẽ làm tăng tốc độ hóa rắn. Do đó, điểm chấp ba pha của biên trong mất ít thời gian hơn để đi từ dưới lên trên khi ρ_{sl} tăng trong dải 0,8 – 1,2, như được thể hiện trong *Hình 3.7(c)*.

Tuy nhiên, bởi sự tăng thể tích khi hóa rắn ứng với $\rho_{sl} < 1,0$ và sự co lại của thể tích ứng với $\rho_{sl} > 1,0$, hạt lưu chất rỗng mất nhiều thời gian hơn để hoàn thành toàn bộ quá trình hóa rắn khi ρ_{sl} giảm trong dải 0,8 – 1,2 như được thể hiện trong *Hình 3.7(d)*. Thêm nữa việc giảm thời gian hóa rắn, tăng tỉ số khối lượng riêng này khiến hạt hóa rắn nhỏ hơn và giảm chiều cao của hạt bóng khí và hạt ngoài của nó như được thể hiện trong *Hình 3.7(b)* và (d). Hàm số cho sự thay đổi chiều cao và thời gian hóa rắn của hạt lưu chất rỗng ứng với tỉ số khối lượng riêng được đưa ra là: $H_{out}/R = -2,614\rho_{sl} + 3,835$ và $\tau_s = -3,812\rho_{sl} + 10,517$. Các sai số tối đa của các hàm số này là 7,1% đối với H_{out}/R và 2,4% đối với τ_s .

3.2.5. Ảnh hưởng của tỉ số bán kính

Hình 3.8 thể hiện ảnh hưởng của hình dạng của hạt bóng khí, thông qua tỉ số R_{io} , lên quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng. Tỉ số bán kính của hạt lưu chất rỗng thay đổi trong dải 0,2 – 0,7 với bước nhảy $\Delta R_{io} = 0,1$. Các thông số khác đối với các quá trình tính toán là $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $Bo = 1,0$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\phi_{oi} = \phi_{oo} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Ta thấy trong *Hình 3.8(a)* rằng, tại thời điểm $\tau = 2,0$, pha lỏng sắp kết thúc hóa rắn xung quanh hạt bóng khí đối với $R_{io} = 0,3$ trong khi đó điểm chấp ba pha của biên bên trong đối với $R_{io} = 0,7$ sắp đi được nửa đường để đến đỉnh. Kết quả là, việc tăng kích cỡ hạt bóng khí bên trong sẽ làm tăng thời gian hóa rắn (*Hình 3.8(d)*). Điều này có thể hiểu được vì sự giảm kích thước hạt bóng khí bên trong hạt lưu chất rỗng tương ứng với việc tăng diện tích tiếp xúc của bề mặt lạnh. Do đó, việc tăng tỉ số R_{io} dẫn đến nhiều nhiệt được truyền qua từ hạt và tăng quá trình hóa rắn của hạt lên. Một hàm để tính thời gian hóa rắn của hạt dựa trên tỉ số bán kính hạt bóng khí và hạt ngoài R_{io} được đưa ra là $\tau_s = 4,09R_{io} + 5,07$. Hàm này có sai số lớn nhất là 2,5%. Ảnh hưởng của R_{io} lên tốc độ hóa rắn trở nên rõ ràng khi pha lỏng hoàn thành quá trình hóa rắn xung quanh hạt bóng khí, như thể hiện trong *Hình 3.8(c)*. Ngược



Hình 3.8. Ảnh hưởng của số R_{io} tới quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh

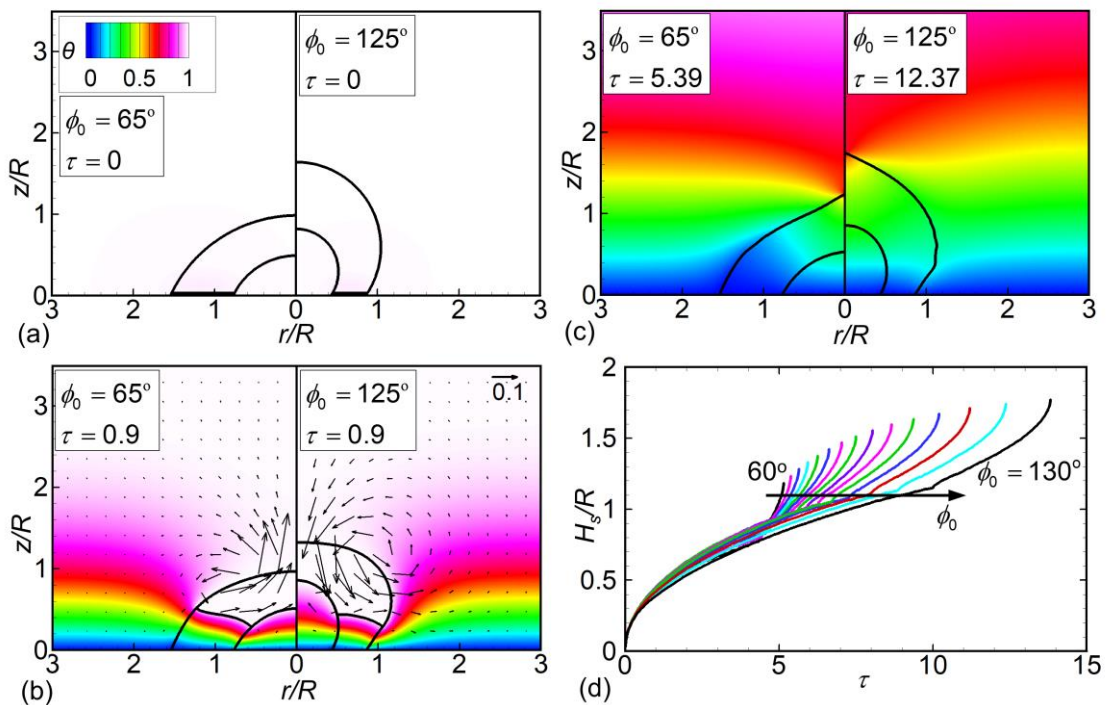
lại với ảnh hưởng của thời gian hóa rắn, chiều cao của hạt ngoài hầu như không phụ thuộc vào sự thay đổi của tỉ số R_{io} trong dải 0,2 – 0,7 mặc dù chiều cao hạt bóng khí tăng, như được chỉ ra trong Hình 3.8(d).

3.2.6. Quá trình hóa rắn với góc ướt ngoài và trong bằng nhau

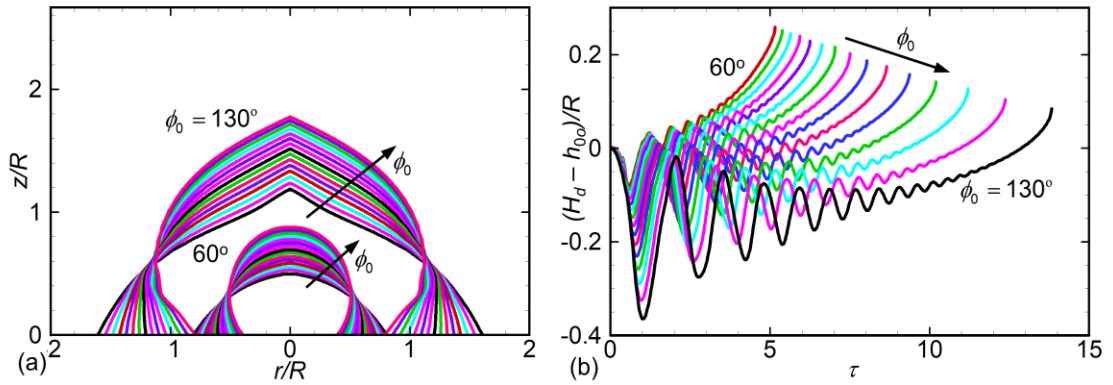
Hình dạng ban đầu của hạt bóng khí và hạt ngoài được xác định bởi hai góc ướt $180^\circ - \phi_{oi}$ và ϕ_{oo} . Ta xem xét sự thay đổi của hình dạng ban đầu hạt hóa rắn bao gồm hạt bóng khí bên trong và hạt ngoài với các góc ướt bằng nhau tức là, $\phi_o = 180^\circ - \phi_{oi} = \phi_{oo}$. Giá trị của ϕ_o được thay đổi trong dải $60^\circ - 130^\circ$ với bước nhảy $\Delta\phi_o = 5^\circ$ (Hình 3.9). Các thông số được giữ không đổi như là $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $Bo = 1,0$, $R_{io} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Ban đầu, $\tau = 0$ (Hình 3.9(a)), hạt lưu chất rỗng được giả sử là một phần của hình cầu. Ta thấy rằng, bởi vì các góc ướt có giá trị cao hơn, chiều cao của hạt bóng khí và hạt ngoài với $\phi_o = 125^\circ$ cao hơn so với các hạt của hạt lưu chất rỗng với $\phi_o = 65^\circ$. Tại $\tau = 0,9$ (Hình 3.9(b)), biên hóa rắn ngăn cách pha rắn và pha lỏng di chuyển lên phía trên từ bề mặt lạnh. Qua thời gian, nhiệt độ có xu hướng giảm dần trên mọi vị trí của miền tính toán. Tại một thời điểm cụ thể, giá trị

của nhiệt độ có xu hướng giảm dần từ đỉnh của miền tính toán xuống bề mặt lạnh. Có thể nhìn thấy trong *Hình 3.9(c)* là hạt lưu chất rỗng với $\phi_0 = 65^\circ$ hoàn thành hóa rắn tại $\tau_s = 5,39$ trong khi đó hạt với $\phi_0 = 125^\circ$ cần thời gian hóa rắn là $\tau_s = 12,37$ để kết thúc quá trình hóa rắn. Điều đó chỉ ra rằng tốc độ hóa rắn của hạt với $\phi_0 = 65^\circ$ nhanh hơn tốc độ hóa rắn của hạt $\phi_0 = 125^\circ$. Điều này có thể giải thích rằng hạt với $\phi_0 = 65^\circ$ có diện tích ướt tiếp xúc ban đầu (diện tích phần lưu chất tiếp xúc với bề mặt lạnh ban đầu) lớn hơn hạt với $\phi_0 = 125^\circ$. Do đó, nhiệt độ sẽ được phân tán qua biên phân cách của hạt với $\phi_0 = 65^\circ$ nhiều hơn với hạt ứng với $\phi_0 = 125^\circ$. Kết quả là hạt với góc ướt ϕ_0 càng nhỏ thì hạt hóa rắn càng nhanh. *Hình 3.9(d)* thể hiện sự phát triển theo thời gian của chiều cao biên hóa rắn trung bình của hạt lưu chất rỗng với ϕ_0 thay đổi trong dải từ 60° đến 130° . *Hình 3.9(d)* lại một lần nữa khẳng định rằng với góc ướt ϕ_0 càng nhỏ thì quá trình hóa rắn càng nhanh. Bên cạnh đó, chiều cao của hạt lưu chất rỗng cũng là một nhân tố khác góp phần vào thời gian hóa rắn [67]. Điều đó có nghĩa là một hạt ngắn hơn tương ứng với ϕ_0 nhỏ hơn dẫn tới thời gian hóa rắn nhỏ hơn.

Sau khi hoàn thành hóa rắn, hình dạng của các hạt lưu chất rỗng thể hiện



Hình 3.9. Quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh với góc ướt trong và ngoài bằng nhau $\phi_0 = 180^\circ - \phi_{0i} = \phi_{0o}$



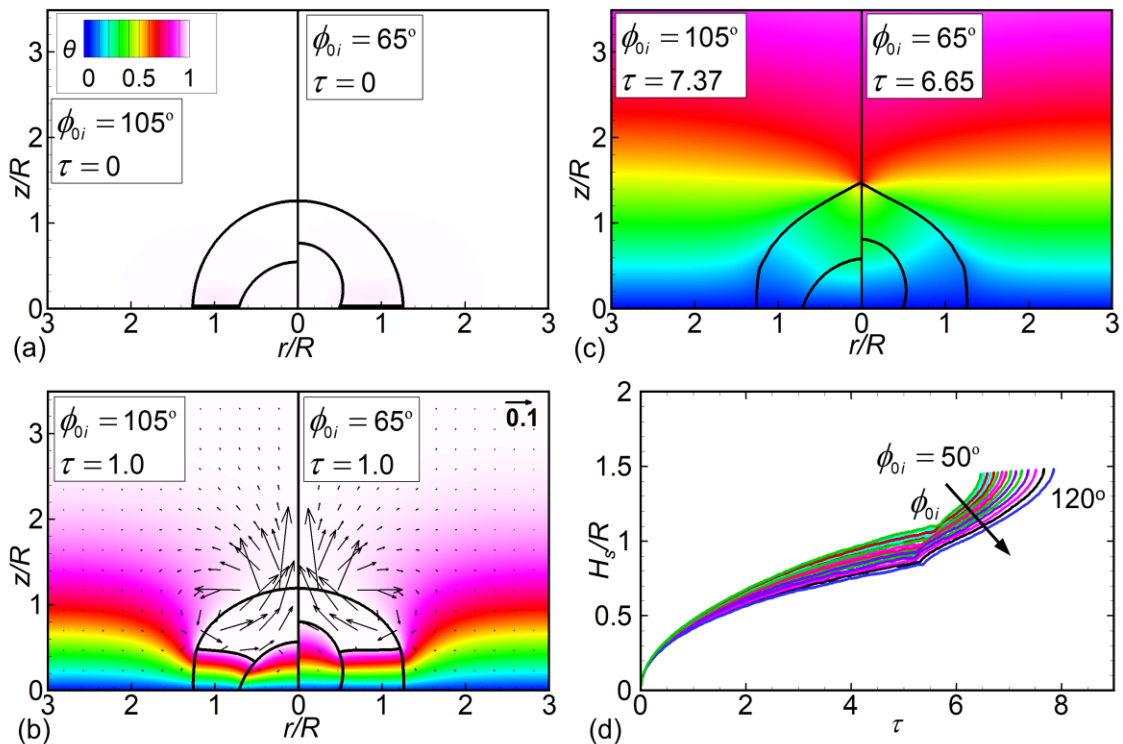
Hình 3.10. Hình dạng của hạt lưu chất rỗng hóa rắn và độ tăng chiều cao của hạt ngoài với $\phi_0 = 180^\circ - \phi_{0i} = \phi_{0o}$ thay đổi trong dải $60^\circ - 130^\circ$

trong Hình 3.10(a). Chiều cao của hạt (bao gồm chiều cao của hạt bóng khí và hạt ngoài) tăng khi góc ướt ϕ_0 tăng. Bởi vì sự giãn nở của thể tích gây ra bởi sự giảm của khối lượng riêng khi pha lỏng chuyển hóa thành pha rắn ($\rho_{sl} = 0,9$), một chóp nhọn xuất hiện tại đỉnh của biên phía ngoài [33], [38], [67]. Nhưng một bề mặt chóp nhọn như vậy không xuất hiện tại biên của mặt bên trong. Điều này phù hợp với thí nghiệm được thực hiện bởi Bhagat và cộng sự [19], trong thí nghiệm đó biên bên trong của hạt tinh thể Gecmani rỗng tron nhẵn. Điều này có thể hiểu được bởi vì biên chuyển pha giữa pha lỏng-rắn đi từ đáy lên đỉnh, bề mặt trong của vỏ lưu chất hoàn thành hóa rắn trước trong khi khu vực đầu của vỏ vẫn ở trạng thái lỏng. Do đó, phần nở ra diễn ra tại đỉnh của hạt ngoài hơn là bề mặt phía bên trong [38]. Cùng với đó, góc phát triển $\phi_{gr} = 0^\circ$, quá trình hóa rắn của vỏ lưu chất không ảnh hưởng tới hạt bóng khí.

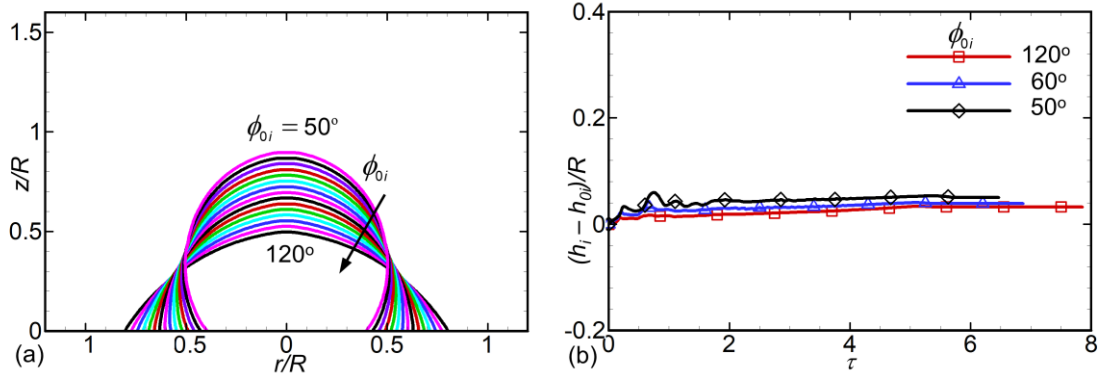
Hình 3.10(a) cũng chỉ ra rằng việc thay đổi hình dạng ban đầu của hạt không ảnh hưởng tới góc côn tại đỉnh hạt. Nói cách khác, góc tại đỉnh của hạt ngoài gần như không thay đổi với sự thay đổi của góc ướt ϕ_0 [41]. Trong Hình 3.10(b), sự phát triển theo thời gian của độ tăng chiều cao của hạt ngoài, $H_d - h_{0o}$ (ở đây, H_d và h_{0o} lần lượt là chiều cao tại thời điểm τ và chiều cao ban đầu của hạt ngoài) được trình bày. Trong giai đoạn đầu của quá trình hóa rắn, độ tăng chiều cao của hạt ngoài có một dao động lớn, bởi vì gia tốc trọng trường, nhưng dao động này bị tắt dần theo thời gian. Trong Hình 3.10(a), chiều cao của hạt ngoài tăng khi góc ướt tăng, nhưng điều này không đúng với độ tăng chiều cao của nó. Điều này dường như là ngược lại với chiều cao của hạt ngoài, độ tăng chiều cao của hạt có xu hướng giảm với sự tăng góc ướt ϕ_0 trong dải từ $60^\circ - 130^\circ$.

3.2.7. Ảnh hưởng của góc ướt trong

Tiếp theo, ta xem xét góc ướt trong ϕ_{0i} ảnh hưởng lên quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng. Các thông số được giữ không đổi: $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $Bo = 1,0$, $R_{io} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\phi_{0o} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$, trong khi, ϕ_{0i} được thay đổi từ 50° đến 120° với bước nhảy $\Delta\phi_{0i} = 5^\circ$. Hạt lưu chất rỗng với góc ướt trong $\phi_{0i} = 105^\circ$ được thể hiện một nửa phía bên trái của Hình 3.11(a)-(c) và một nửa bên phải của Hình 3.11(a)-(c) tương ứng là hạt với $\phi_{0i} = 65^\circ$. Tại $\tau = 0$ (Hình 3.11(a)), hạt lưu chất rỗng được đặt trên một bề mặt lạnh. Nhưng không giống như trường hợp trước, bởi vì với cùng góc ướt ngoài, chiều cao của hạt ngoài là không đổi khi ϕ_{0i} thay đổi giá trị của nó từ 65° đến 105° . Tuy nhiên, chiều cao ban đầu của hạt bóng khí giảm khi ϕ_{0i} tăng. Như minh chứng trong Hình 3.11(b), tại $\tau = 1,0$, biên rắn lỏng tương ứng với $\phi_{0i} = 65^\circ$ dường như xa bề mặt lạnh hơn so với hạt với $\phi_{0i} = 105^\circ$. Điều này chỉ ra rằng tốc độ hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với $\phi_{0i} = 65^\circ$ (phải) nhanh hơn hạt có $\phi_{0i} = 105^\circ$ (trái). Do đó, hạt lưu chất rỗng với $\phi_{0i} = 65^\circ$ chỉ mất khoảng thời gian là 6,65 để hoàn thành hóa rắn trong khi đó hạt còn lại mất khoảng thời gian 7,37 (Hình 3.11(c)). Điều này có thể hiểu được vì diện tích tiếp xúc giữa hạt và bề mặt lạnh của



Hình 3.11. Quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với góc ướt trong (ϕ_{0i}) thay đổi trong dải $50^\circ - 120^\circ$



Hình 3.12. Hình dạng và độ tăng chiều cao của hạt bóng khí sau khi hoàn thành quá trình hóa rắn với góc ướt trong (ϕ_{oi}) thay đổi trong dải $50^\circ - 120^\circ$

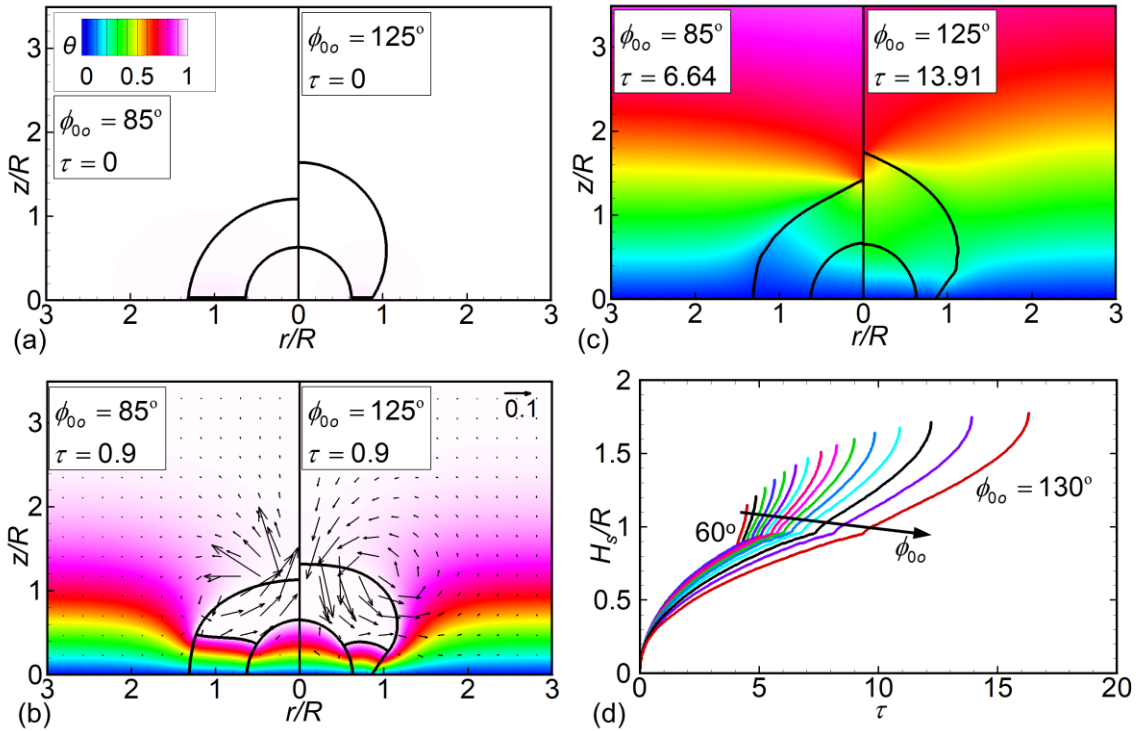
hạt $\phi_{oi} = 65^\circ$ lớn hơn hạt với $\phi_{oi} = 105^\circ$ và do đó hạt với $\phi_{oi} = 65^\circ$ dẫn tới nhiệt được giải phóng qua pha lỏng nhiều hơn so với của hạt với $\phi_{oi} = 105^\circ$.

Hình 3.11(d) thể hiện sự phát triển theo thời gian của chiều cao biên hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với góc ướt trong biến đổi trong dải $50^\circ - 120^\circ$. Có thể dễ dàng nhìn thấy rằng với góc ướt trong ϕ_{oi} càng cao, quá trình hóa rắn của hạt diễn ra càng lâu. Nói cách khác, việc giảm góc ướt trong sẽ làm nhanh quá trình hóa rắn của hạt. Tuy nhiên, thay đổi góc ướt trong trong dải $50^\circ - 120^\circ$ không ảnh hưởng đến chiều cao của hạt hóa rắn, được thể hiện trong Hình 3.11(c) và (d).

Hình 3.12 thể hiện sự biến đổi của hạt bóng khí sau khi quá trình hóa rắn hoàn thành. Hình dạng của hạt bóng khí được thể hiện trong Hình 3.12(a). Chiều cao của hạt bóng khí tăng khi góc ướt trong giảm sau khi hoàn thành hóa rắn bởi vì chiều cao ban đầu giảm với sự tăng ϕ_{oi} . Bên cạnh đó, hạt bóng khí sau khi hoàn thành hóa rắn hầu như không thay đổi so với hình dạng ban đầu của chúng. Hình 3.12(b) thể hiện độ tăng chiều cao, $h_i - h_{0i}$ (ở đây, h_i và h_{0i} tương ứng là chiều cao tại thời điểm τ và chiều cao ban đầu của hạt bóng khí) của hạt bóng khí trong. Như được trình bày, độ tăng chiều cao của hạt bóng khí giảm nhẹ khi góc ướt trong tăng. Tuy nhiên, ảnh hưởng này là rất nhỏ.

3.2.8. Ảnh hưởng của góc ướt ngoài

Với thông số được giữ không đổi như là $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $Bo = 1,0$, $R_{io} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\phi_{oi} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$, ta tiếp tục xem xét sự ảnh hưởng của góc ướt ngoài (ϕ_{0o}) lên quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng. Giá trị của góc ướt ngoài



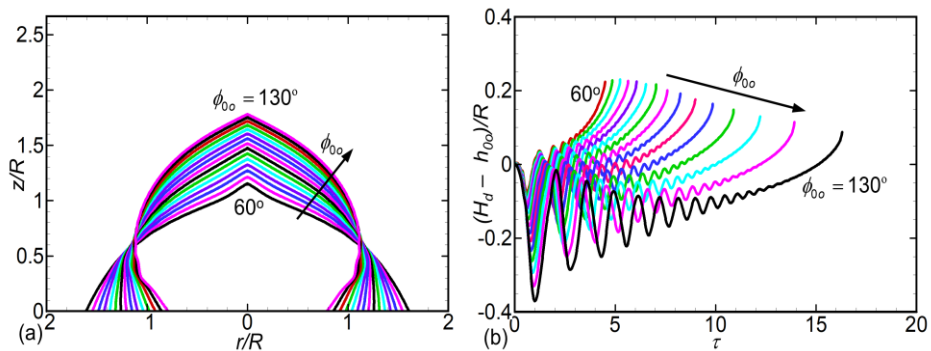
Hình 3.13. Sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với góc ướt ngoài (ϕ_{0o}) thay đổi trong dải $60^\circ - 130^\circ$

nằm trong dải $60^\circ - 130^\circ$ với bước nhảy $\Delta\phi_{0o} = 5^\circ$. Góc ướt ngoài $\phi_{0o} = 85^\circ$ được trình bày ở bên trái của các Hình 3.13(a)-(c), và góc ướt ngoài $\phi_{0o} = 125^\circ$ được thể hiện ở phía bên phải của các Hình 3.13(a)-(c). Với một góc ướt ngoài lớn, chiều cao ban đầu của hạt ngoài với góc ướt $\phi_{0o} = 125^\circ$ thì cao hơn hạt ngoài còn lại, như được thể hiện trong Hình 3.13(a). Tại $\tau = 0,9$ (Hình 3.13(b)), bởi vì ảnh hưởng của bề mặt lạnh, biên hóa rắn giữa pha lỏng và rắn di chuyển lên phía trên, lượng lưu chất bị hóa rắn tăng nhưng có sự khác biệt giữa $\phi_{0o} = 85^\circ$ và $\phi_{0o} = 125^\circ$. Một góc ướt ngoài lớn hơn tương ứng một lượng lưu chất tại đỉnh hạt lớn hơn. Điều này có thể hiểu được bởi vì diện tích lưu chất tiếp xúc với bề mặt lạnh của hạt với $\phi_{0o} = 85^\circ$ lớn hơn so với hạt với $\phi_{0o} = 125^\circ$. Do đó, tốc độ hóa rắn của hạt với $\phi_{0o} = 85^\circ$ cao hơn hạt với $\phi_{0o} = 125^\circ$. Như kết quả đã thể hiện, góc ướt ngoài $\phi_{0o} = 85^\circ$ dẫn tới hạt kết thúc quá trình hóa rắn sớm hơn hạt còn lại, tức thời gian hóa rắn tương ứng với $\phi_{0o} = 85^\circ$ là 6,64 trong khi đó đối với $\phi_{0o} = 125^\circ$ là 13,91 (Hình 3.13(c)).

Hình 3.13(d) thể hiện sự phát triển theo thời gian của chiều cao biên hóa rắn với góc ướt ngoài biến đổi trong dải $60^\circ - 130^\circ$. Điều này củng cố lại rằng việc tăng

góc ướt ngoài sẽ làm chậm quá trình hóa rắn và do đó dẫn đến quá trình hóa rắn diễn ra lâu hơn. Không giống ảnh hưởng của góc ướt trong, góc ướt ngoài có một ảnh hưởng mạnh mẽ lên quá trình hóa rắn và chiều cao hạt hóa rắn.

Như được minh chứng trong *Hình 3.13(c)*, việc biến đổi hình dạng của hạt ngoài không làm ảnh hưởng đến hạt bóng khí. Tuy nhiên, việc thay đổi ϕ_{0o} ảnh hưởng mạnh mẽ tới hình dạng và độ tăng chiều cao của hạt ngoài sau khi quá trình hóa rắn kết thúc, như được thể hiện trong *Hình 3.14*. Hình dạng của hạt ngoài được thể hiện trong *Hình 3.14(a)* cho thấy rằng chiều cao của hạt ngoài tăng khi góc ướt ngoài tăng. Tuy nhiên, giống như những trường hợp trước, góc tại đỉnh được hình thành ở đỉnh của hạt không ảnh hưởng bởi hình dạng hạt ngoài [41]. *Hình 3.14(b)* thể hiện sự phát triển theo thời gian của độ tăng chiều cao, $H_d - h_{0o}$, của hạt ngoài. Tại trạng thái ban đầu của quá trình hóa rắn, đỉnh của hạt ngoài có một sự dao động mạnh. Dao động này sẽ giảm dần qua thời gian. Tuy nhiên, việc tăng góc ướt ngoài từ 60° đến 130° dẫn đến dao động trở nên mạnh hơn và kéo dài hơn. Điều này có thể hiểu bởi vì việc tăng ϕ_{0o} trong khi giữ hạt bóng khí không đổi dẫn đến tăng lượng lưu chất tại khu vực đỉnh với sự tăng của $h_{0o} - h_{0i}$. Như kết quả đã cho thấy, bề mặt hạt có nhiều thời gian và khoảng không để dao động hơn trước khi dao động biến mất bởi biên chuyển pha. Bên cạnh đó, trong *Hình 3.14(a)*, chiều cao của hạt ngoài



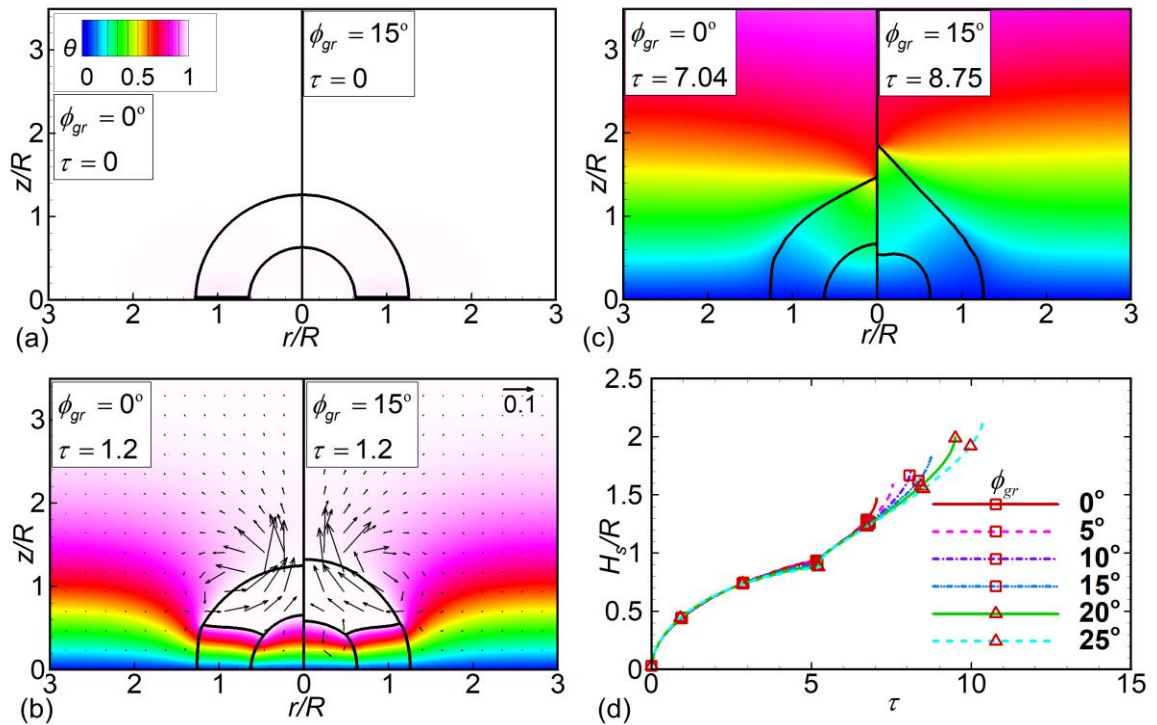
Hình 3.14. Hình dạng và độ tăng chiều cao của hạt ngoài sau khi quá trình hóa rắn kết thúc với ϕ_{0o} biến đổi trong dải $60^\circ - 130^\circ$

tăng khi góc ướt ngoài tăng, nhưng điều này không đúng với độ tăng chiều cao được thể hiện trong *Hình 3.14(b)*. Điều này dường như là ngược lại với chiều cao của hạt, độ tăng chiều cao có xu hướng giảm khi chiều cao của hạt tăng.

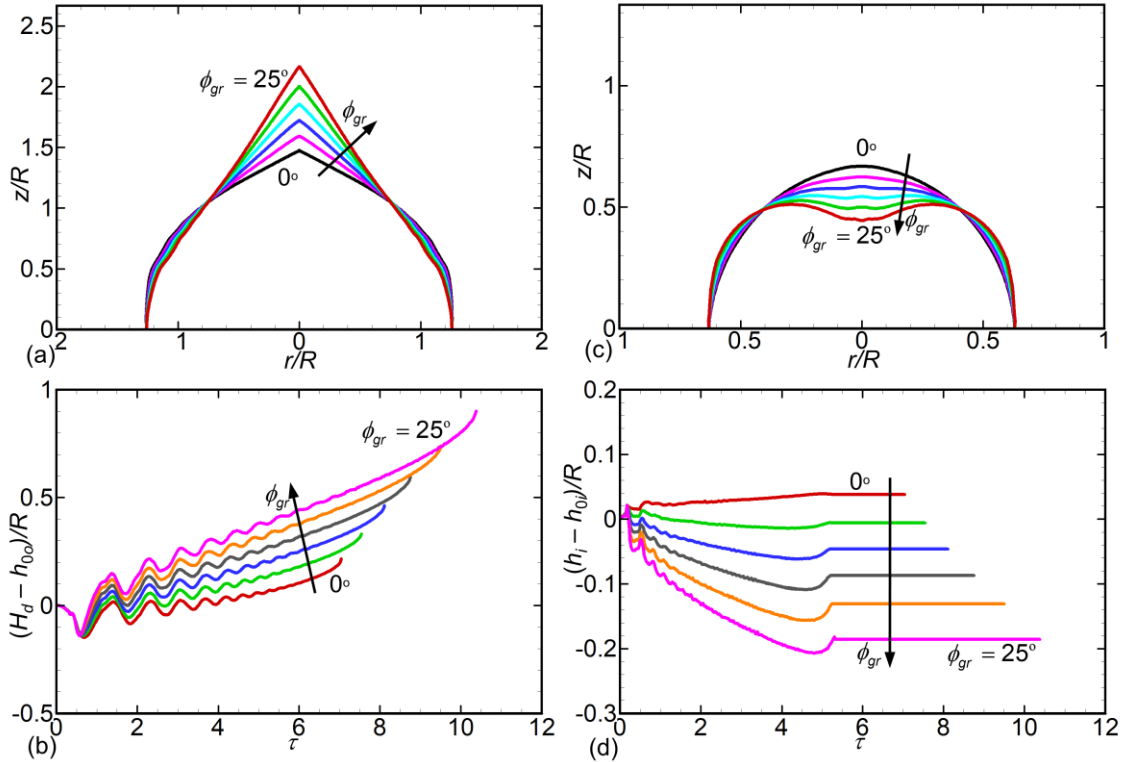
3.2.9. Ảnh hưởng của góc phát triển

Cuối cùng, ta xem xét sự ảnh hưởng của góc phát triển lên quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng. Để làm vậy, góc phát triển được thay đổi trong dải $0^\circ - 25^\circ$ với bước nhảy $\Delta\phi_{gr} = 5^\circ$, trong khi, các thông số được giữ không đổi trong suốt quá trình hóa rắn như là $Pr = 0,01$, $St = 0,1$, $Bo = 1,0$, $R_{io} = 0,5$, $\rho_{sl} = 0,9$ và $\phi_{oi} = \phi_{oo} = 90^\circ$. Hình 3.15(a), (b) và (c) thể hiện sự so sánh giữa hai góc phát triển $\phi_{gr} = 0^\circ$ (trái) và $\phi_{gr} = 15^\circ$ (phải). Ban đầu (Hình 3.15(a)), hai hạt hóa rắn có hình dạng giống nhau. Tại $\tau = 1,2$ (Hình 3.15(b)), biên hóa rắn di chuyển được khoảng một nửa hạt bóng khí trong. Chiều cao của hạt ngoài ở phía bên phải ($\phi_{gr} = 15^\circ$) dường như cao hơn hạt ở phía bên trái ($\phi_{gr} = 0^\circ$). Ngược lại, hạt bóng khí tương ứng với góc phát triển lớn ($\phi_{gr} = 15^\circ$) ngắn hơn với góc nhỏ ($\phi_{gr} = 0^\circ$). Điều này có thể giải thích rằng, tại đường chấp ba pha, biên hóa rắn có xu hướng vuông góc với biên giữa hai pha rắn–khí trong suốt quá trình hóa rắn [38], [41] và do đó góc phát triển đã thay đổi biên lỏng–khí để thỏa mãn điều kiện đó [38].

Như kết quả đã cho thấy, việc tăng giá trị của góc phát triển làm cho hạt ngoài còn hơn và hạt bóng khí sẽ bị lõm xuống nhiều hơn trong quá trình hóa rắn.



Hình 3.15. Sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với góc phát triển (ϕ_{gr}) thay đổi trong dải $0^\circ - 25^\circ$



Hình 3.16. Hình dạng và độ tăng chiều cao của hạt ngoài và hạt trong sau khi quá trình hóa rắn kết thúc với ϕ_{gr} trong dải $0^\circ - 25^\circ$

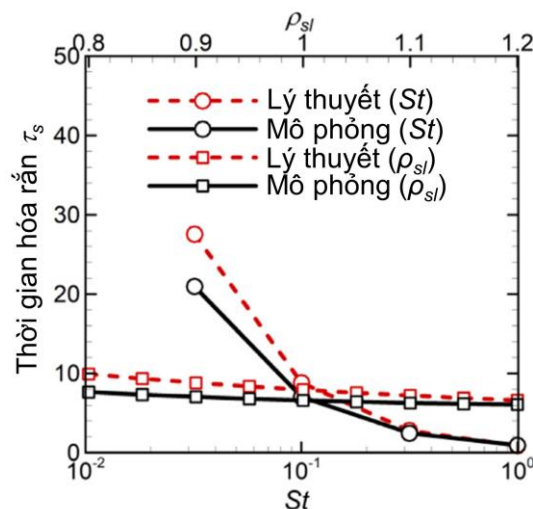
Thậm chí, hạt hóa rắn trở lên còn hơn ở mặt ngoài với một hạt bóng khí ngắn hơn (Hình 3.15(c)). Bên cạnh đó, hạt lưu chất rỗng với $\phi_{gr} = 0^\circ$ hoàn thành hóa rắn sau thời gian $\tau = 7,04$ trong khi nó cần thời gian hóa rắn là $8,75$ đối với hạt có $\phi_{gr} = 15^\circ$ (Hình 3.15(c)). Hình 3.15(d) thể hiện sự phát triển theo thời gian của chiều cao biên hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với góc phát triển trong dải $0^\circ - 25^\circ$. Điều này xác nhận rằng hạt với góc phát triển càng nhỏ, quá trình hóa rắn xảy ra càng nhanh. Bên cạnh đó, chiều cao hóa rắn của hạt sau khi quá trình hóa rắn kết thúc khi góc phát triển tăng từ 0° đến 25° , được minh chứng trong Hình 3.16(a).

Sau khi quá trình hóa rắn kết thúc, hình dạng của hạt ngoài với các góc phát triển được thể hiện trong Hình 3.16(a). Điều đó chứng minh rằng việc tăng góc phát triển trong dải $0^\circ - 25^\circ$ làm giảm giá trị của góc tại đỉnh hạt tức là, đỉnh của biên ngoài sẽ còn hơn. Điều này phù hợp đối với các hạt lưu chất đơn đã khảo sát trong các thí nghiệm [38] hay trong mô phỏng [67], [88], [89]. Như kết quả đã thể hiện một biên ngoài còn hơn, việc tăng ϕ_{gr} từ 0° đến 25° dẫn đến việc tăng của độ tăng chiều cao, $H_d - h_{0o}$, của hạt ngoài, như được thể hiện trong Hình 3.16(b). Không giống như hạt ngoài, ta thấy rằng đỉnh của bề mặt hạt bóng khí chuyển từ bề mặt lõm

sang bề mặt lõm khi góc phát triển thay đổi từ 0° đến 25° , như được thể hiện trong Hình 3.16(c). Do đó, chiều cao của hạt bóng khí giảm với việc tăng góc phát triển ϕ_{gr} . Như kết quả thể hiện, độ tăng chiều cao, $h_i - h_{0i}$, giảm với việc tăng góc phát triển ϕ_{gr} trong dải $0^\circ - 25^\circ$, xem Hình 3.16(d).

3.2.10. Sự hình thành đỉnh chóp và thời gian hóa rắn của hạt lưu chất rỗng

Như được thể hiện ở các hình trước từ Hình 3.3 đến Hình 3.8, hạt lưu chất rỗng hình thành một hình dạng côn tại cuối quá trình hóa rắn. Như hình dạng côn tại đỉnh hạt đã được công bố trong các công trình trước về hạt lưu chất đơn hóa rắn trên một bề mặt lạnh [41], [67], [90]. Nguyên nhân gây ra sự hình thành này là sự nở ra của thể tích [33], [38], [67]. Marin và cộng sự [41] đã tìm ra rằng góc nhọn tại đỉnh của hạt nằm trong dải $131^\circ - 147^\circ$ đối với các hạt nước đối xứng. Ismail và Waghmare [90] đã tìm ra góc ở đỉnh khoảng $130^\circ \pm 8^\circ$ đối với những hạt nước không đối xứng. Anderson và cộng sự [33] và Satunkin [38] đã tìm ra rằng một hạt nước có tỉ số khối lượng riêng vào khoảng 0,91 (tức là, $\rho_{sl} = 0,91$) và một góc phát triển gần bằng 0. Trong mô phỏng này sử dụng với những điều kiện tương tự (tức là, $\rho_{sl} = 0,91$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$) đối với hạt lưu chất rỗng đã thu được hạt hóa rắn với góc ở đỉnh vào khoảng 131° đối với trường hợp điển hình, xem Hình 3.3. Như được thể hiện trong Hình 3.7 và được báo cáo bởi công trình [67], việc tăng ρ_{sl} tăng giá trị của góc tại đỉnh và do đó các kết quả hiện tại cho góc nhọn tại đỉnh của hạt lưu chất đơn hóa rắn bám sát khá tốt với sự hình thành của góc được tìm thấy bởi các nghiên cứu đi trước [41], [90].



Hình 3.17. Sự thay đổi của thời gian hóa rắn ứng với số St và ρ_{sl}

Luận án phát triển một mô hình đơn giản để dự đoán thời gian hóa rắn liên quan tới chiều cao của hạt hóa rắn. Giả sử rằng hệ số dẫn nhiệt hầu như là không đổi trong pha rắn với sự phân tán tuyến tính của nhiệt độ theo chiều thẳng đứng, ta có [71].

$$\frac{k_s (T_m - T_c)}{H_{s-theo}} = \rho_s L_h \frac{dH_{s-theo}}{dt} \quad (3.4)$$

Tích phân phương trình (3.4) cho quá trình hóa rắn hoàn thành thu được thời gian hóa rắn t_{s-theo}

$$t_{s-theo} = \frac{\rho_s L_h H_{out-theo}^2}{2k_s (T_m - T_c)} \quad (3.5)$$

Trong phương trình (3.4)-(3.5), H_{s-theo} và $H_{out-theo}$ tương ứng là chiều cao của lớp hóa rắn tại thời gian t và tại lúc kết thúc quá trình hóa rắn theo lý thuyết. Theo lý thuyết, $H_{out-theo}$ có thể được cho là R_o/ρ_{sl} [87] khi hạt ban đầu có hình bán cầu. Phương trình (3.5) chỉ ra rằng quá trình hóa rắn phụ thuộc vào nhiệt độ làm lạnh liên quan trực tiếp đến số Stefan (St) và khối lượng riêng (ρ_s) của pha rắn. Do vậy, ở đây chỉ thể hiện sự biến đổi của thời gian hóa rắn tương ứng với số St và ρ_s (tương ứng là ρ_{sl}), như được thể hiện trong Hình 3.17. Hình 3.17 cũng cố thêm rằng thời gian hóa rắn thu được qua phương pháp số bám sát khá tốt với tính toán của phương trình (3.5). Điểm khác lớn nhất giữa lý thuyết và mô phỏng xuất hiện khi số Stefan nhỏ, tức là, $St = 0,032$, có thể hiểu được khi phương trình (3.5) thu được đơn giản hóa bằng xấp xỉ một chiều. Khi giá trị của St nhỏ, tốc độ hóa rắn chậm. Theo đó, hình dạng hạt (tức là, sự xuất hiện của hạt bóng khí bên trong hạt lưu chất và hình dạng hai chiều) đóng một vai trò quan trọng hơn trong quá trình hóa rắn, và do đó phương trình (3.5) thu được kết quả khác hơn so với kết quả mô phỏng. Tuy nhiên, Hình 3.17 chỉ ra rằng các kết quả có thể chấp nhận được.

3.3. Kết luận Chương 3

Các thông số không thứ nguyên ảnh hưởng đến quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh được khảo sát. Cụ thể, việc thay đổi độ dày của vỏ lưu chất bằng cách thay đổi bán kính của hạt khí bên trong ở bên trong thành phần R_{io} , chỉ ra rằng tăng kích cỡ của hạt bóng khí dẫn đến thời gian hoàn thành hóa rắn

dài hơn trong khi nó không ảnh hưởng tới chiều cao của toàn bộ hạt khi quá trình hóa rắn kết thúc.

Chiều cao của hạt bóng khí bên trong của hạt hóa rắn không bị ảnh hưởng nhiều bởi việc tăng số Bo (tức là, lực hấp dẫn đóng vai trò chi phối lớn hơn lực sức căng bề mặt) trong khoảng 0,18 – 3,16 hoặc St (tức là giảm nhiệt ẩn chuyển pha) trong dải từ 0,032 – 1,0. Tuy nhiên, việc tăng Pr (tức là, tăng ảnh hưởng của khuếch tán động lượng so với khuếch tán nhiệt) từ 0,01 – 1,0 làm giảm chiều cao của hạt bóng khí của hạt hóa rắn. Nếu ta tăng Pr và Bo sẽ giảm chiều cao của toàn bộ hạt hóa rắn.

Nghiên cứu về sự thay đổi thể tích hóa rắn bằng cách thay đổi tỉ số khối lượng riêng của pha rắn lên pha lỏng ρ_{sl} , chỉ ra rằng việc tăng giá trị của số ρ_{sl} từ 0,8 đến 1,2 sẽ giảm chiều cao hóa rắn của hạt hóa rắn và chiều cao hạt bóng khí của nó và dẫn đến quá trình hóa rắn kết thúc sớm hơn.

Các ảnh hưởng của các thông số hình học (góc ướt trong (ϕ_{0i}) trong dải $50^\circ - 120^\circ$ và góc ướt ngoài (ϕ_{0o}) trong dải $60^\circ - 130^\circ$) và góc phát triển (ϕ_{gr} trong dải $0^\circ - 25^\circ$) cũng được nghiên cứu. Kết quả mô phỏng số cho thấy rằng khi góc ướt trong giảm và góc ướt ngoài tăng hay là $\phi_0 = 180^\circ - \phi_{0i} = \phi_{0o}$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$, chiều cao của hạt bóng khí và hạt ngoài và thời gian hóa rắn tăng, trong khi, độ tăng chiều cao của hạt lưu chất rỗng giảm sau khi quá trình hóa rắn kết thúc. Các ảnh hưởng tương tự cũng được khảo sát chỉ tăng góc ướt ngoài (tức là, $\phi_{0i} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$). Việc tăng ϕ_{0i} từ 50° đến 120° với $\phi_{0o} = 90^\circ$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$ không ảnh hưởng tới hình dạng hạt ngoài nhưng dẫn đến việc tăng thời gian hóa rắn.

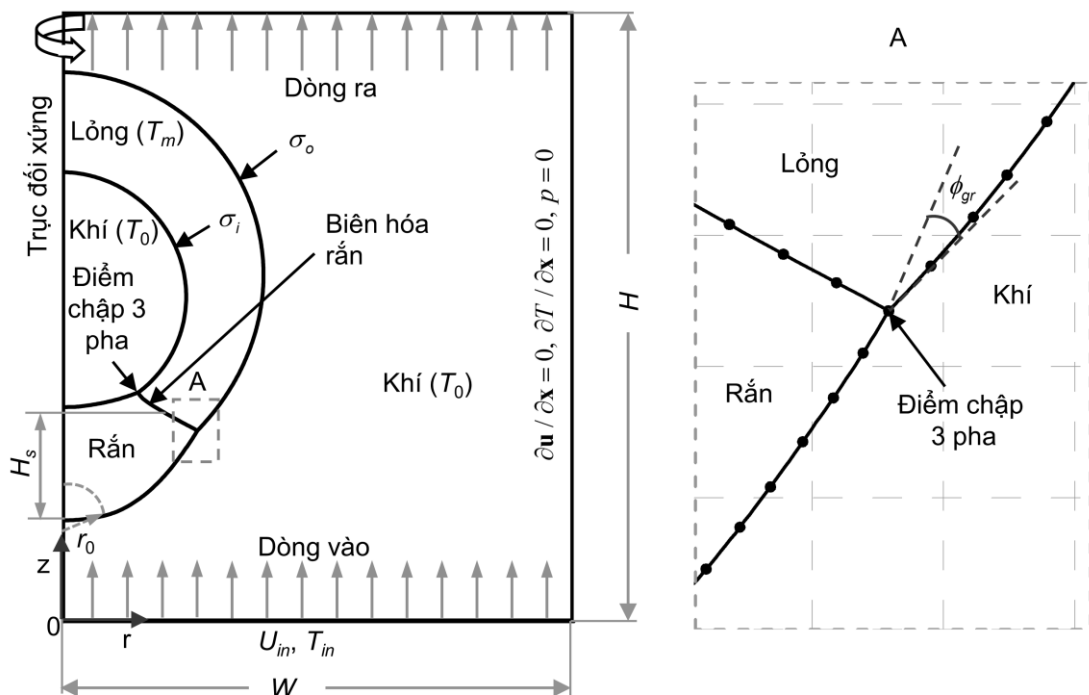
Thời gian hóa rắn, chiều cao của hạt lưu chất rỗng và độ tăng chiều cao tăng khi góc phát triển ϕ_{gr} tăng. Tuy nhiên, việc tăng góc phát triển dẫn đến một sự giảm chiều cao của hạt bóng khí sau khi quá trình hóa rắn kết thúc. Bên cạnh đó, chỉ có ϕ_{gr} ảnh hưởng tới góc côn tại đỉnh của hạt ngoài, tức là, việc tăng ϕ_{gr} dẫn đến biên ngoài côn hơn. Nói cách khác, việc thay đổi góc ướt ngoài và trong, khi giữ ϕ_{gr} không đổi không ảnh hưởng tới góc đỉnh. Phát hiện này phù hợp với các kết quả khảo sát thí nghiệm cho các hạt lưu chất đơn [41], [90].

CHƯƠNG 4. NGHIÊN CỨU QUÁ TRÌNH TRUYỀN NHIỆT, CHUYỂN PHA CỦA HẠT LƯU CHẤT RỖNG CHỊU ẢNH HƯỞNG CỦA ĐỐI LƯU CƯỜNG BỨC

Như chương 3 đã đề cập, các hạt lưu chất rỗng lỏng được tạo ra khi đi qua cặp vòi phun đồng trục có thể bị hóa rắn trước khi chạm tới bề mặt lạnh như trong công trình thực nghiệm [18], [19]. Trong chương này, bài toán mô phỏng hóa rắn của hạt lưu chất rỗng như vậy được thực hiện.

4.1. Mô hình bài toán và chọn độ phân giải lưới

Ban đầu, giả sử hạt lưu chất rỗng có dạng hình cầu và đối xứng lơ lửng trong một môi trường lạnh. Hạt lưu chất rỗng bao gồm một nhân khí (hạt bóng khí) bên trong một vỏ lưu chất (hạt ngoài) bắt đầu hóa rắn tại một nhân hóa rắn với bán kính r_0 được đặt ở phía đáy của hạt [91], [92]. Nhiệt độ của nhân hóa rắn được giữ không đổi là T_c . Trong khi đó, T_m kí hiệu cho nhiệt độ của vỏ lưu chất và là nhiệt độ chuyển pha của lưu chất. Bán kính ban đầu của bóng khí bên trong và hạt ngoài được kí hiệu lần lượt là $R_i = [3V_i/(4\pi)]^{1/3}$ và $R_o = [3V_o/(4\pi)]^{1/3}$, ở đây V_i và V_o lần lượt là thể tích ban đầu của hạt bóng khí bên trong và hạt ngoài. Tại phía đáy của miền tính toán là khí lạnh với nhiệt độ T_{in} và vận tốc U_{in} được đưa vào. Để đơn giản



Hình 4.1. Mô hình bài toán mô phỏng với một nửa hạt lưu chất rỗng đối xứng lơ lửng với dòng cưỡng bức phía đáy của miền tính toán

hóa bài toán, ta giả sử rằng T_{in} bằng với T_0 – nhiệt độ ban đầu của pha khí xung quanh hạt. Không giống quá trình hóa rắn của một hạt lưu chất đơn [91], [92], hạt lưu chất rỗng có hai điểm chạm ba pha (*Hình 4.1*). Ở đây có sự xuất hiện của ba biên phân cách được kí hiệu là biên rắn-lỏng (tức là biên chuyển pha), biên rắn-khí và biên lỏng-khí. Các phương trình năng lượng và Navier-Stokes cũng được sử dụng để giải quyết bài toán, và phương pháp theo dấu biên (front-tracking method) [65], [67] được sử dụng để theo dõi các biên của các pha. Chất lỏng và khí trong nghiên cứu được giả sử là không nén được, không trộn lẫn và là lưu chất Newton. Trong mỗi pha, khối lượng riêng (ρ), độ nhớt (μ), hệ số dẫn nhiệt (k) và nhiệt dung riêng đẳng áp (C_p) được giả sử là không đổi. Các thông số không thứ nguyên được sử dụng trong bài toán này là

$$Pr = \frac{C_{pl}\mu_l}{k_l}, St = \frac{C_{pl}(T_m - T_c)}{L_h}, Re = \frac{\rho_l U_{in} R_o}{\mu_l}, We = \frac{\rho_l U_{in}^2 R_o}{\sigma} \quad (4.1)$$

$$\theta_0 = \frac{T_0 - T_c}{T_m - T_c}, \rho_{sl} = \frac{\rho_s}{\rho_l}, \rho_{gl} = \frac{\rho_g}{\rho_l}, \mu_{gl} = \frac{\mu_g}{\mu_l}, R_{io} = \frac{R_i}{R_o} \quad (4.2)$$

$$k_{sl} = \frac{k_s}{k_l}, k_{gl} = \frac{k_g}{k_l}, C_{psl} = \frac{C_{ps}}{C_{pl}}, C_{pgl} = \frac{C_{pg}}{C_{pl}} \quad (4.3)$$

Ở đây, $U_t = U_{in}$ là vận tốc tham chiếu. Sử dụng kích thước của hạt ngoài làm cơ sở, $R = R_o$. Tỉ số bán kính giữa bóng khí bên trong và hạt ngoài được kí hiệu là R_{io} . Thời gian được không thứ nguyên hóa bởi t_t , tức là, $\tau = t/t_t$. Ở đây, $t_t = R_o / U_t$ là thời gian tham chiếu. Các tỉ số khác trong phương trình (4.2) – (4.3) là các tỉ số nhiệt và tỉ số đặc tính của ba pha.

Điều kiện biên chi tiết được minh họa trong *Hình 4.1*. Dòng vào với một vận tốc đồng nhất ($u = 0, v = U_{in}$) và nhiệt độ $T = T_{in} = T_0$ được đặt ở biên phía đáy của miền tính toán. Điều kiện dòng ra được đặt tại biên phía trên của miền tính toán. Biên bên phải và trái được cho lần lượt là điều kiện trượt hoàn toàn và đối xứng. Tại $t = 0$, tất cả các pha ở trạng thái ban đầu với hạt có nhiệt độ là T_m và xung quanh hạt ở nhiệt độ T_0 .

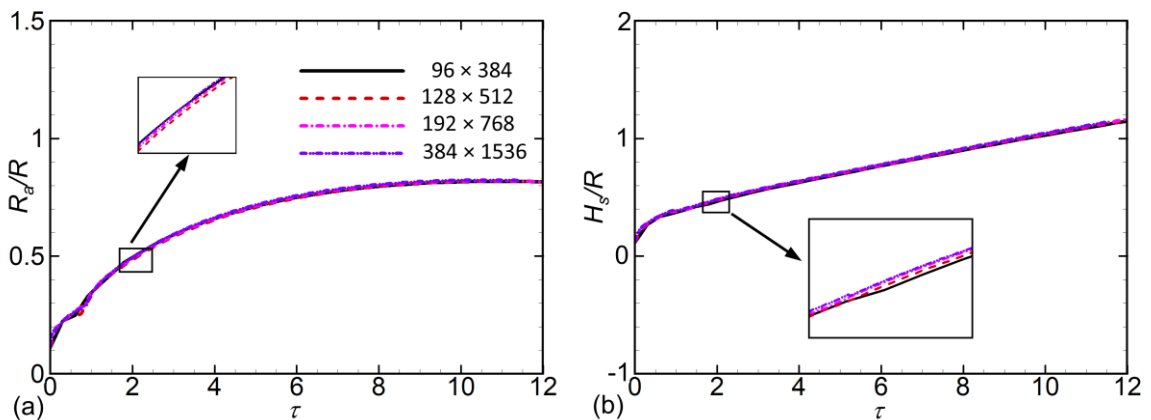
Giống như bài toán hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên bề mặt lạnh, các hạt xem xét ở đây có kích thước nhỏ (từ vài trăm μm đến vài mm) và vật liệu chuyển pha

như là kim loại, Silic hoặc Gecmani,... Tuy nhiên, để tối ưu thời gian chạy bài toán mô phỏng, một số dải giá trị của các thông số thay đổi một chút. Điều này không làm thay đổi xu hướng ảnh hưởng của các thông số này đến quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trong môi trường tự do dưới tác dụng của dòng lưu cưỡng bức. Các thông số được khảo sát trong luận án bao gồm Re trong dải 25 – 200, St trong dải 0,025 – 1,6, ρ_{sl} trong dải 0,8 – 1,2, kích thước nhân hóa rắn r_0/R trong dải 0,05 – 0,3, độ lệch tâm ban đầu ε_0 trong dải -0,15 – 0,3, R_{io} trong dải 0,2 – 0,7 và góc phát triển ϕ_{gr} trong dải 0° – 15° . Các thông số khác được giữ cố định: $Pr = 0,01$, $We = 1$, $\theta_0 = 0$, $\rho_{gl} = 0,05$, $\mu_{gl} = 0,05$, $k_{sl} = 0,5$, $k_{gl} = 0,01$, $C_{psl} = C_{pgl} = 1$.

Tiếp theo, ta sẽ khảo sát độ hội tụ lưới thông qua xem xét 4 lưới với miền tính toán $W \times H = 3R \times 12R$: 096×384 , 128×512 , 192×768 và 384×1536 . Các thông số là $St = 0,1$, $Re = 50$, $\rho_{sl} = 0,9$, $R_{io} = 0,6$, $r_0/R = 0,2$, $\varepsilon_0 = 0$ (ε_0 được định nghĩa phía dưới) và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Chiều cao biên hóa rắn được đưa ra là

$$H_s = \frac{\sum_{i=1}^{N_s} (z_{sfi} - z_{co0} + R)}{N_s} \quad (4.4)$$

Ở đây, z_{sfi} và z_{co0} tương ứng là tọa độ trục của điểm i trên biên hóa rắn và tọa độ tâm của hạt ngoài. N_s là số điểm của biên hóa rắn. Hình 4.2 thể hiện sự thay đổi của tọa độ hướng tâm (R_a) của biên hóa rắn (Hình 4.2(a)) và chiều cao biên hóa rắn (Hình 4.2(b)). Các độ phân giải lưới khác cho kết quả có chút khác biệt. Thêm nữa, Bảng 4.1 thể hiện các sai số trung bình của R_a và H_s thu được của các lưới thưa so với lưới mịn nhất 384×1536 . Độ phân giải lưới 192×768 có kết quả rất sát với



Hình 4.2. Nghiên cứu độ phân giải lưới

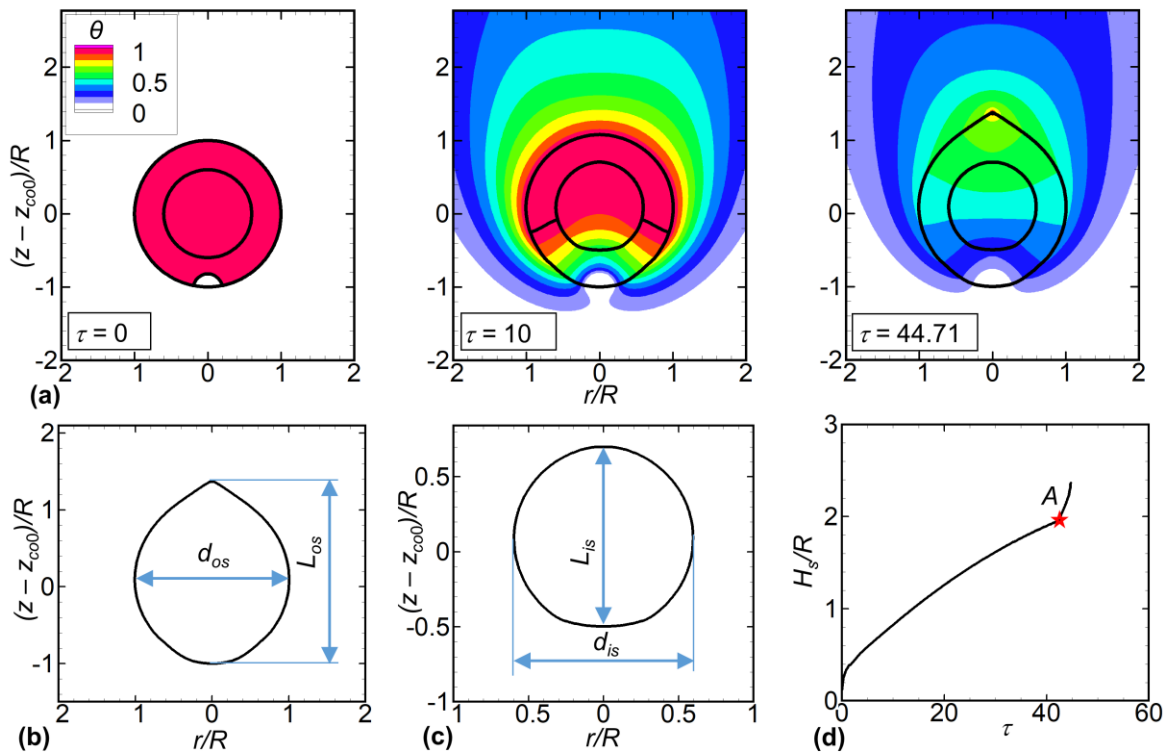
Bảng 4.1. Sai số trung bình của các lưới khác nhau so với độ phân giải lưới 384×1536

| Sai số trung bình (%) | Các độ phân giải lưới so với độ phân giải lưới 384×1536 | | |
|---|--|------------------|------------------|
| | 096×384 | 128×512 | 192×768 |
| Sai số trung bình của tọa độ hướng tâm biên hóa rắn | 3,843% | 2,973% | 1,155% |
| Sai số trung bình của chiều cao biên hóa rắn | 0,549% | 0,410% | 0,128% |

lưới mịn nhất. Rõ ràng, các kết quả thu được bởi độ phân giải lưới 192×768 và 384×1536 gần như trùng khớp. Do đó, để tiết kiệm nguồn tính toán và thời gian trong khi vẫn đảm bảo độ chính xác chấp nhận được, độ phân giải lưới 192×768 được lựa chọn để nghiên cứu bài toán.

4.2. Kết quả và thảo luận

Ta xem xét quá trình hóa rắn của một hạt lưu chất rỗng lơ lửng trong một môi trường lạnh dưới ảnh hưởng của đối lưu cưỡng bức, Hình 4.3. Các thông số là $St = 0,1$, $Re = 75$, $\rho_{sl} = 0,9$, $R_{io} = 0,6$, $r_0/R = 0,2$, $\varepsilon_0 = 0$ (ε_0 được định nghĩa bên dưới) và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Ban đầu, hạt lưu chất rỗng bao gồm một hạt bóng khí bên trong và



Hình 4.3. Quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng lơ lửng dưới tác động của đối lưu cưỡng bức điển hình

một hạt ngoài được giả sử là hình cầu. Độ lệch tâm ban đầu giữa các biên trong và ngoài được kí hiệu bởi ε_0 là

$$\varepsilon_0 = \frac{z_{ci0} - z_{co0}}{R} \quad (4.5)$$

Ở đây, z_{ci0} là tọa độ trọng tâm ban đầu của hạt bóng khí. Tại $\tau = 10$, một nửa hạt lưu chất rỗng bị hóa rắn. So với hạt lưu chất rỗng tại $\tau = 0$, nhiệt độ của hạt lưu chất rỗng giảm bắt đầu từ biên hóa rắn đến đáy của hạt. Cuối cùng, sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng hoàn thành tại $\tau = \tau_s = 44,71$. Giống hạt lưu chất rỗng hóa rắn trên một bề mặt lạnh lạnh [77], [93], một chóp nhọn trên đỉnh của hạt lưu chất rỗng được hình thành sau khi quá trình hóa rắn kết thúc là kết quả của sự nở ra của thể tích [92]. Hình dạng của biên bên ngoài và bóng khí bên trong sau khi quá trình hóa rắn kết thúc lần lượt được trình bày trong Hình 4.3(b) và (c). Theo đó, tỉ số hình dạng ngoài (Ar_o) và tỉ số hình dạng trong (Ar_i) sau khi quá trình hóa rắn kết thúc [91], [92] được tính toán là

$$Ar_o = \frac{L_{os}}{d_{os}} \quad (4.6)$$

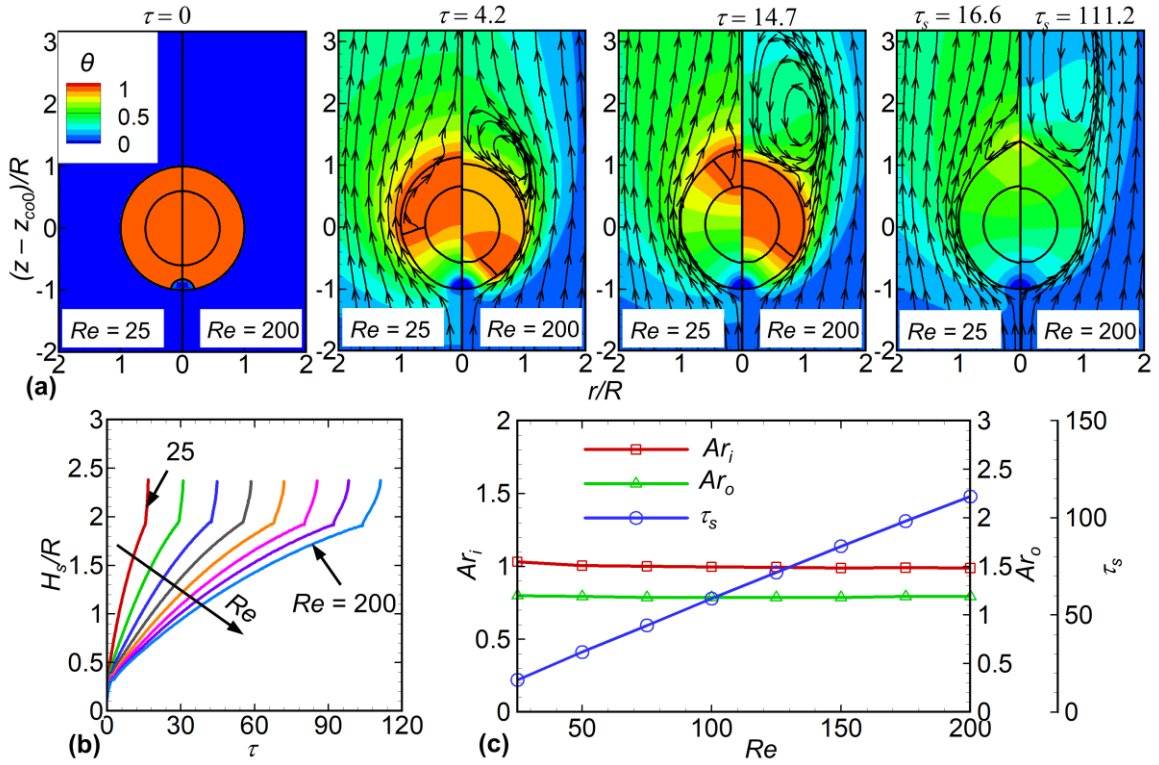
$$Ar_i = \frac{L_{is}}{d_{is}} \quad (4.7)$$

Ở đây, L_{os} và L_{is} lần lượt là chiều dài của hạt ngoài và hạt bóng khí bên trong. d_{os} và d_{is} tương ứng đường kính lớn nhất của hạt ngoài và hạt bóng khí bên trong. Hình 4.3(d) thể hiện chiều cao biên hóa rắn (H_s) theo thời gian (τ). Không giống như hạt lưu chất đơn lơ lửng dưới tác dụng của đối lưu cưỡng bức với một đường H_s khá trơn theo thời gian [91], chiều cao biên hóa rắn theo thời gian của hạt lưu chất rỗng lơ lửng bị gián đoạn tại điểm A được kí hiệu bởi hình sao trong Hình 4.3(d). Tại điểm này (tại $\tau = \tau_A$), biên hạt bóng khí bên trong bị hóa rắn hoàn toàn [77], [93], và lưu chất còn lại chuyển thành trạng thái rắn với tốc độ cao hơn trước. Sự tăng tốc độ hóa rắn này sau điểm này dẫn đến nhiệt được truyền qua pha rắn nhanh hơn pha khí.

4.2.1. Ảnh hưởng của số Reynolds

Hình 4.4 thể hiện sự hóa rắn của các hạt lưu chất rỗng lơ lửng với số Reynolds (Re) biến đổi trong dải 25 – 200 với bước nhảy $\Delta Re = 25$. Các thông số khác được giữ không đổi bao gồm $St = 0,1$, $\rho_{sl} = 0,9$, $R_{io} = 0,6$, $r_0/R = 0,2$, $\varepsilon_0 = 0$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Hình 4.4(a) mô tả quá trình hóa rắn của hai hạt lưu chất rỗng với $Re = 25$ (phía bên trái) và với $Re = 200$ (phía bên phải). Tại thời điểm ban đầu ($\tau = 0$), hai hạt được giả sử là các hình cầu và lơ lửng trong miền tính toán. Dưới tác dụng của dòng cưỡng bức và nhiệt độ nhân hóa rắn được giữ tại $\theta = 0$, biên hóa rắn di chuyển từ đáy lên phía đỉnh của hạt (Hình 4.4(a) tại $\tau = 4,2$). Bởi vì với số Re cao hơn, một dòng ngược chiều kim đồng hồ xuất hiện phía sau hạt bên phải và dẫn đến sự giảm của bề dày lớp nhiệt xung quanh hạt. Tuy nhiên, quá trình hóa rắn của hạt bên phải không nhanh hơn hạt bên trái. Nó được thể hiện bởi biên hóa rắn của hạt phải thấp hơn biên hóa rắn của hạt trái tại cùng một thời điểm τ . Điều này được giải thích là do việc tăng số Re dẫn đến sự giảm độ nhớt trong pha lỏng (các phương trình (4.1)). Bởi vì các số Prandtl (Pr) và Stefan (St) được giữ không đổi, điều này dẫn đến sự tăng của nhiệt dung riêng đẳng áp trong pha lỏng (C_{pl}) và nhiệt ẩn chuyển pha (L_h) (các phương trình (4.1)). Việc tăng nhiệt ẩn chuyển pha làm giảm lượng nhiệt giải phóng qua bề mặt chuyển pha và do đó giảm vận tốc của bề mặt hóa rắn. Tóm lại, tăng số Re dẫn đến quá trình hóa rắn xảy ra lâu hơn. Điều này được xác nhận tại thời điểm $\tau = 14,7$ (Hình 4.4(a)), hạt bên trái hầu như đã kết thúc quá trình hóa rắn trong khi đó hạt phía bên phải đang ở giữa quá trình.

Cuối cùng, quá trình hóa rắn của hạt bên trái kết thúc trước tại $\tau_s = 16,6$ và đến tận $\tau_s = 111,2$, hạt bên phải mới kết thúc quá trình này (Hình 4.4(a)). Sau khi quá trình hóa rắn kết thúc, hình dạng hạt hóa rắn đối với $Re = 25$ và $Re = 200$ là gần như giống nhau. Điều này nghĩa là tốc độ hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với $Re = 25$ cao hơn hạt với $Re = 200$. Nhưng hình dạng của các hạt không ảnh hưởng khi Re thay đổi. Điều này có thể giải thích được bởi vì kích thước hạt với một giá trị nhỏ của số mao dẫn (Ca) (nhỏ hơn 0,05) là nhỏ, và do đó sự chi phối rất lớn của lực căng bề mặt so với lực nhớt hỗ trợ hạt chống lại sự biến dạng được gây ra bởi lực cưỡng bức [91]. Như kết quả đã thể hiện, sự biến đổi của chiều cao biên hóa rắn theo thời gian trở nên thoải hơn khi số Reynolds tăng từ 25 đến 200, như được thể

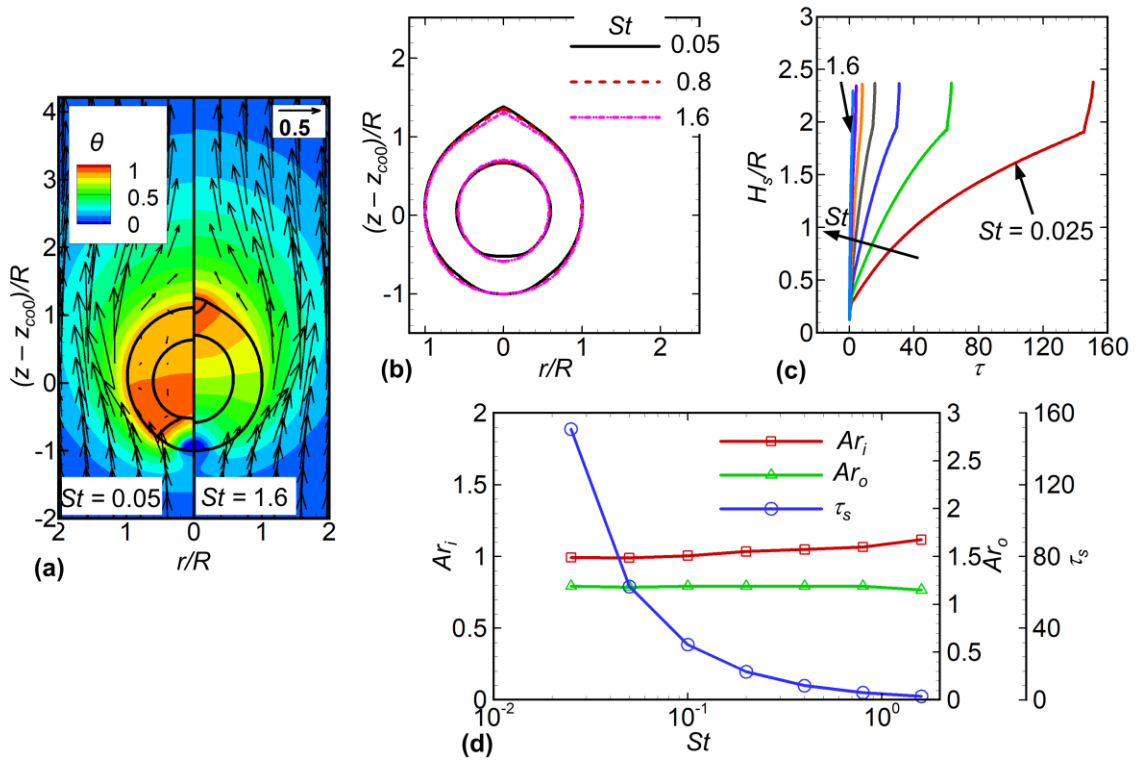


Hình 4.4. Sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng hóa rắn lơ lửng với số Reynolds (Re) thay đổi trong dải 25 – 200

hiện trong Hình 4.4(b). Ta thấy rằng, tăng số Reynolds dẫn đến sự tăng của thời gian hóa rắn không thứ nguyên (τ_s) (Hình 4.4(c)). Điều này có nghĩa là tốc độ hóa rắn của hạt giảm khi số Reynolds tăng. Trong khi đó, chiều cao hóa rắn H_{out} ($H_{out} = H_s(\tau = \tau_s)$) hầu như là không đổi khi số Reynolds thay đổi (Hình 4.4(a)). Do đó, tỉ số hình dạng trong (Ar_i) và tỉ số hình dạng ngoài (Ar_o) hầu như không đổi với số Reynolds thay đổi trong dải 25 – 200 (Hình 4.4(c)). Theo đó, hình dạng hạt hóa rắn được giữ hầu như không đổi khi thay đổi số Reynolds trong dải này (Hình 4.4(c)). Trong khi đó, thời gian hóa rắn tăng gần như là tuyến tính bởi việc tăng số Reynolds trong dải 25 – 200 (Hình 4.4(c)).

4.2.2. Ảnh hưởng của số Stefan

Ảnh hưởng của số Stefan (St) lên quá trình hóa rắn được trình bày trong Hình 4.5. Số Stefan được biến đổi trong dải 0,025 – 1,6. Giá trị của số Stefan là 0,025; 0,05; 0,1; 0,2; 0,4; 0,8 và 1,6. Trong suốt quá trình hóa rắn, các thông số khác được giữ không đổi như là $Re = 50$, $\rho_{sl} = 0,9$, $R_{io} = 0,6$, $r_0/R = 0,2$, $\varepsilon_0 = 0$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Trong Hình 4.5(a), quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với $St = 0,05$ (trái) được so sánh với hạt với $St = 1,6$ (phải). Tại $\tau = 2$, hạt bên trái đang trong trạng thái ban



Hình 4.5. Hóa rắn hạt lưu chất rỗng lơ lửng với số Stefan (St) thay đổi trong dải 0,025 – 1,6

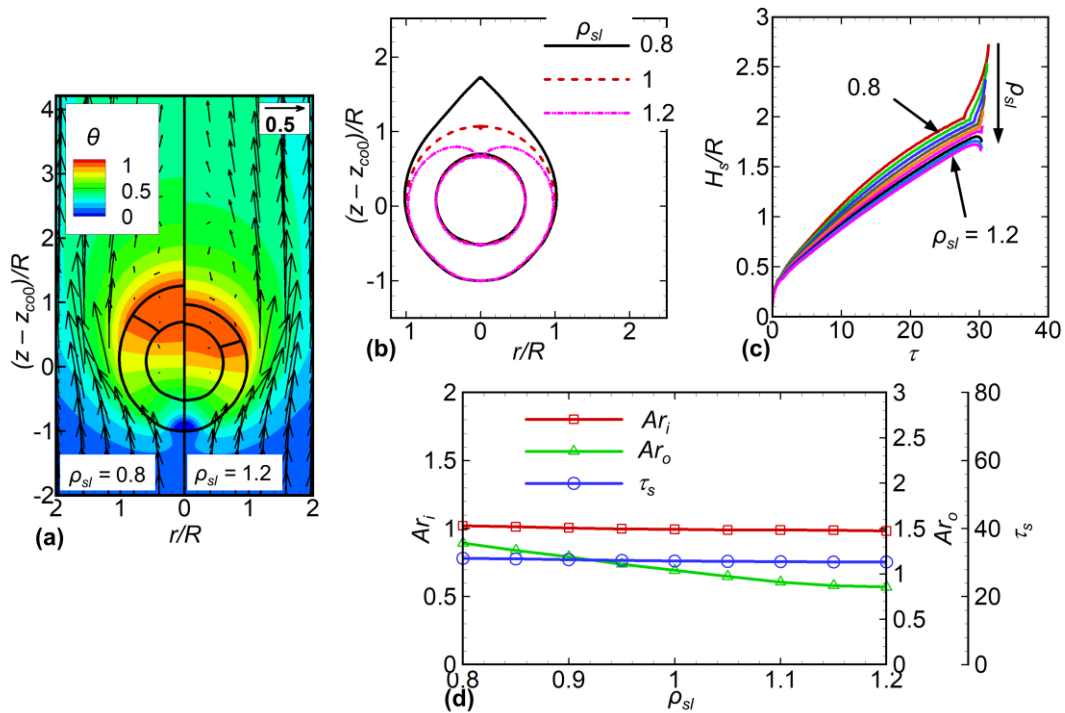
đầu của quá trình hóa rắn, trong khi đó, quá trình hóa rắn của hạt bên phải gần như hoàn thành. Điều này được giải thích rằng việc tăng số Stefan dẫn đến giảm nhiệt ẩn chuyển pha (L_h). Việc giảm nhiệt ẩn chuyển pha này dẫn đến kết quả là cần ít năng lượng và thời gian hơn để hóa rắn hạt. Do đó, tăng số Stefan từ 0,05 đến 1,6 dẫn đến biên chuyển pha di chuyển nhanh hơn lên phía trên và hoàn thành hóa rắn sớm hơn. Cũng chính vì vậy, hạt hóa rắn với $St = 1,6$ cầu hơn nhưng không nhiều so với hạt với $St = 0,05$ (Hình 4.5(b)).

Kết quả, việc tăng số Stefan dẫn đến chiều cao của hạt ngoài giảm một chút và chiều cao hạt bóng khí bên trong tăng lên một chút sau quá trình hóa rắn. Theo đó, việc tăng số Stefan dẫn đến việc giảm của tỉ số hình dạng ngoài (Ar_o) và tăng tỉ số hình dạng trong (Ar_i), như được thể hiện trong Hình 4.5(d). Việc tăng số Stefan từ 0,025 đến 1,6 gây ra thời gian hóa rắn giảm từ 150,88 đến 2,09. Như đã giải thích từ trước, việc tăng số Stefan dẫn đến giảm nhiệt ẩn chuyển pha và do đó nâng cao tốc độ hóa rắn. Kết quả là, việc tăng số Stefan dẫn đến quá trình hóa rắn kết thúc sớm hơn.

4.2.3. Ảnh hưởng tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng

Sự ảnh hưởng của tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng (ρ_{sl}) thay đổi trong dải 0,8 – 1,2 (bước nhảy $\Delta\rho_{sl} = 0,05$) lên quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng được thể hiện trong Hình 4.6. Các thông số khác là $St = 0,1$, $Re = 50$, $R_{io} = 0,6$, $r_0/R = 0,2$, $\varepsilon_0 = 0$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Chiều cao của biên hóa rắn của hạt bên trái với $\rho_{sl} = 0,8$ cao hơn hạt bên phải với $\rho_{sl} = 1,2$ tại $\tau = 20$. Hình dạng hạt hóa rắn với $\rho_{sl} = 0,8$, $\rho_{sl} = 1$ và $\rho_{sl} = 1,2$ có thể được nhìn thấy trong Hình 4.6(b). Điều này có thể hiểu được bởi vì khi khối lượng riêng pha rắn nhỏ hơn của pha lỏng ($\rho_{sl} < 1,0$), chuyển động của biên chuyển pha (tức là, biên hóa rắn) được thúc đẩy [67]. Ngược lại, sự co lại thể tích (hay $\rho_{sl} > 1,0$) có xu hướng làm chậm lại quá trình hóa rắn. Do đó, việc tăng tỉ số khối lượng riêng dẫn đến việc giảm chiều cao biên hóa rắn, như được chỉ ra trong Hình 4.6(b).

Tuy nhiên, bởi vì việc nở ra của thể tích (hoặc sự co lại của thể tích), độ dày của vỏ lưu chất tăng lên (hoặc giảm đi), như được minh chứng trong Hình 4.6(a). Kết quả là, so với không có sự thay đổi về thể tích, hạt hóa rắn có một chóp nhọn trên đỉnh hạt nếu $\rho_{sl} < 1,0$ hoặc một vết lõm tại đỉnh nếu $\rho_{sl} > 1$, như được chỉ ra trong Hình 4.6(b). Việc tăng độ dày của vỏ lỏng trong khi thúc đẩy sự di chuyển của

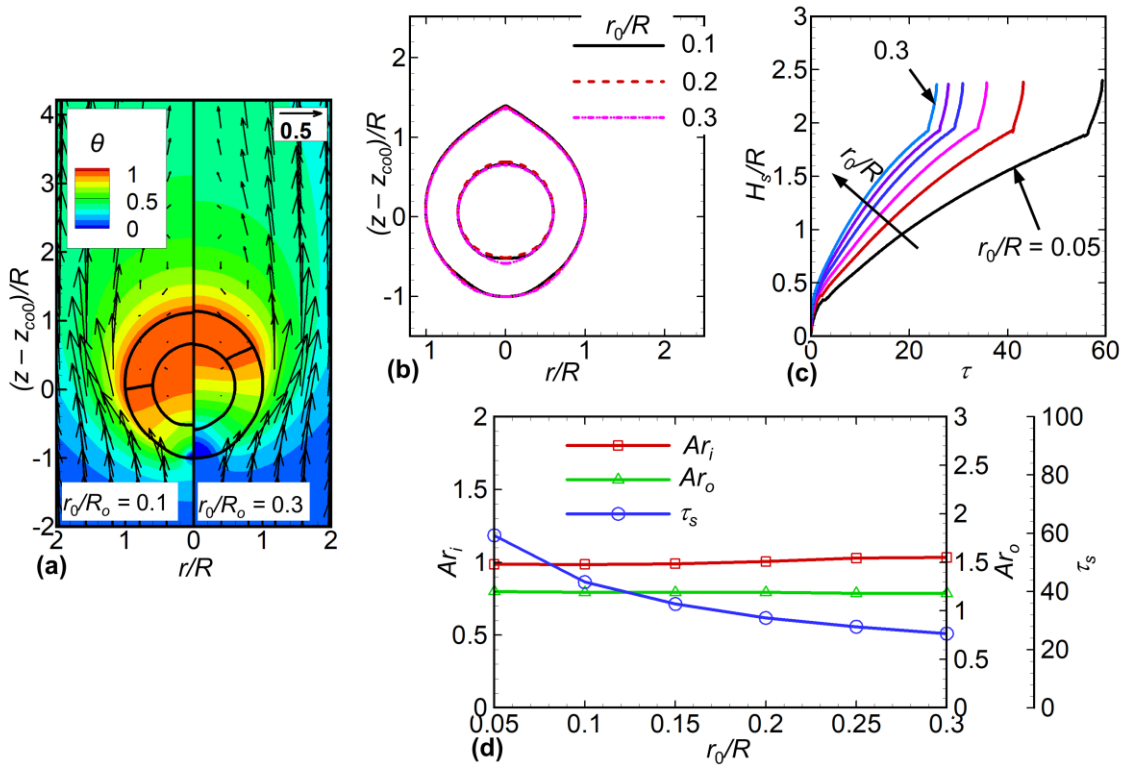


Hình 4.6. Hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng (ρ_{sl}) thay đổi trong dải 0,8 – 1,2

biên hóa rắn dẫn đến việc quá trình hóa rắn của toàn bộ hạt không diễn ra lâu hơn khi giảm ρ_{sl} (Hình 4.6(d)). Tuy nhiên, tỉ số hình dạng ngoài của hạt giảm với việc tăng ρ_{sl} bởi vì những sự thay đổi tại bề mặt ngoài của hạt hóa rắn từ đỉnh nhọn với $\rho_{sl} < 1,0$ tới lõm với $\rho_{sl} > 1$. Trong khi đó, tỉ số hình dạng trong giữ không đổi với sự biến đổi của ρ_{sl} trong dải 0,8 – 1,2 bởi vì nó có ảnh hưởng nhỏ lên hạt nhân khí sau khi quá trình hóa rắn kết thúc [19], [77], xem Hình 4.6(b).

4.2.4. Ảnh hưởng của kích thước nhân hóa rắn

Hình 4.7 thể hiện sự ảnh hưởng của kích thước nhân hóa rắn (r_0/R) lên quá trình hóa rắn của các hạt lưu chất rỗng lơ lửng. Kích thước nhân hóa rắn được thay đổi trong dải 0,05 – 0,3 với bước nhảy $\Delta(r_0/R) = 0,05$ trong khi các thông số khác được giữ không đổi trong suốt quá trình hóa rắn như là $St = 0,1$, $Re = 50$, $\rho_{sl} = 0,9$, $R_{io} = 0,6$, $\varepsilon_0 = 0$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. Trong Hình 4.7(a), quá trình hóa rắn tại $\tau = 15$ của hạt lưu chất rỗng với $r_0/R = 0,1$ (phía bên trái) được so sánh với hạt có $r_0/R = 0,3$ (phía bên phải). Ta thấy rằng chiều cao biên hóa rắn của hạt bên trái ($r_0/R = 0,1$) thấp hơn của hạt bên phải ($r_0/R = 0,3$). Điều đó có nghĩa là tốc độ hóa rắn của hạt bên trái nhỏ

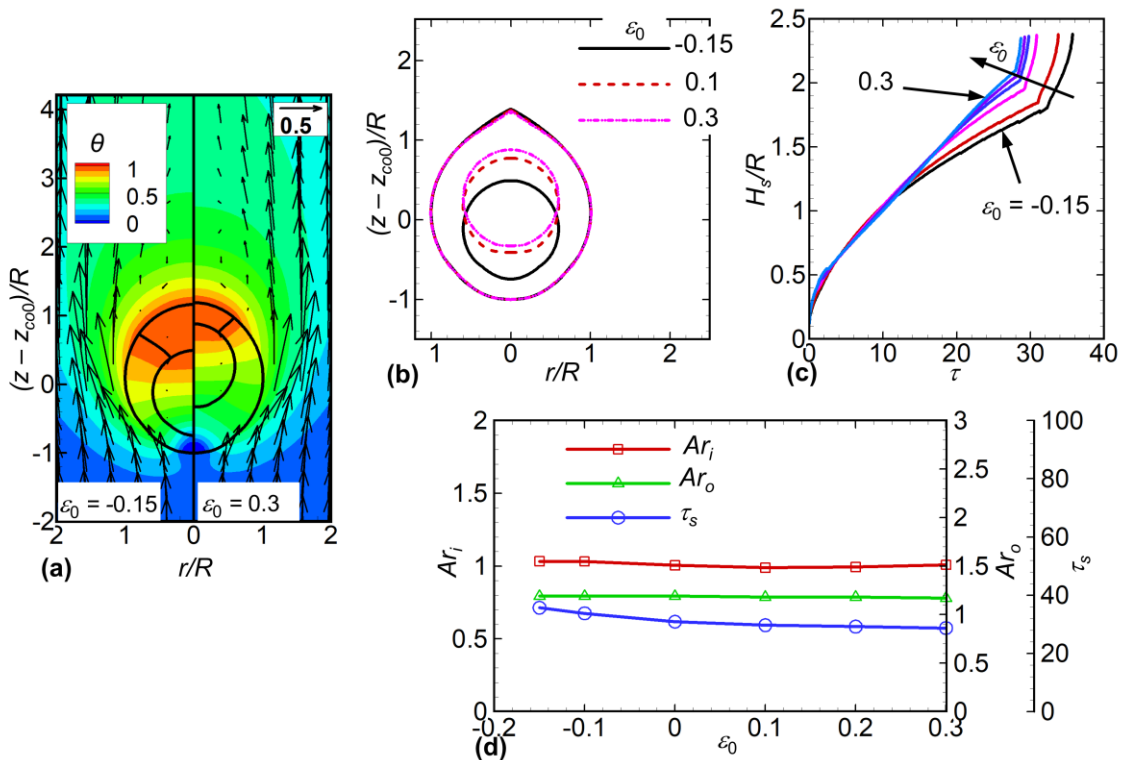


Hình 4.7. Sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng lơ lửng với kích thước nhân hóa rắn (r_0/R) thay đổi trong dải 0,05 – 0,3

hơn của hạt bên phải do hạt bên phải kích thước nhân hóa rắn lớn hơn. Điều này được xác nhận bởi Hình 4.7(c), khi giảm kích thước của nhân hóa rắn khiến cho đường H_s theo thời gian thoải hơn hay là độ dốc của nó (hay tốc độ hóa rắn trung bình) giảm với sự giảm của r_0/R . Kết quả là, thời gian để hoàn thành quá trình hóa rắn sẽ ít hơn khi tăng kích thước nhân hóa rắn (Hình 4.7(c)). Điều này có thể hiểu được bởi vì việc tăng kích thước nhân hóa rắn dẫn đến việc tăng diện tích phân tán năng lượng để hóa rắn vỏ lưu chất. Do đó, việc tăng kích thước hạt hóa rắn làm quá trình hóa rắn xảy ra nhanh hơn. Tuy nhiên, hình dạng hạt hóa rắn và tỉ số hình dạng ngoài và trong của hạt duy trì không đổi và gần như không phụ thuộc và kích thước của nhân hóa rắn biến đổi trong dải 0,05 – 0,3 (Hình 4.7(d)) [91].

4.2.5. Ảnh hưởng của độ lệch tâm ban đầu

Tiếp theo, ta xem xét ảnh hưởng của độ lệch tâm ban đầu (ε_0) giữa hạt bóng khí bên trong và hạt ngoài lên quá trình hóa rắn của các hạt lưu chất rỗng bằng cách thay đổi ε_0 trong dải -0,15 – 0,3 (Hình 4.8). Giá trị của độ lệch tâm ban đầu ε_0 được khảo sát là -0,15; -0,1; 0; 0,1; 0,2 và 0,3. Các thông số khác được giữ không đổi là $St = 0,1$, $Re = 50$, $\rho_{sl} = 0,9$, $\rho_{gl} = 0,05$, $R_{io} = 0,6$, $r_0/R = 0,2$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. $\varepsilon_0 < 0$ tương



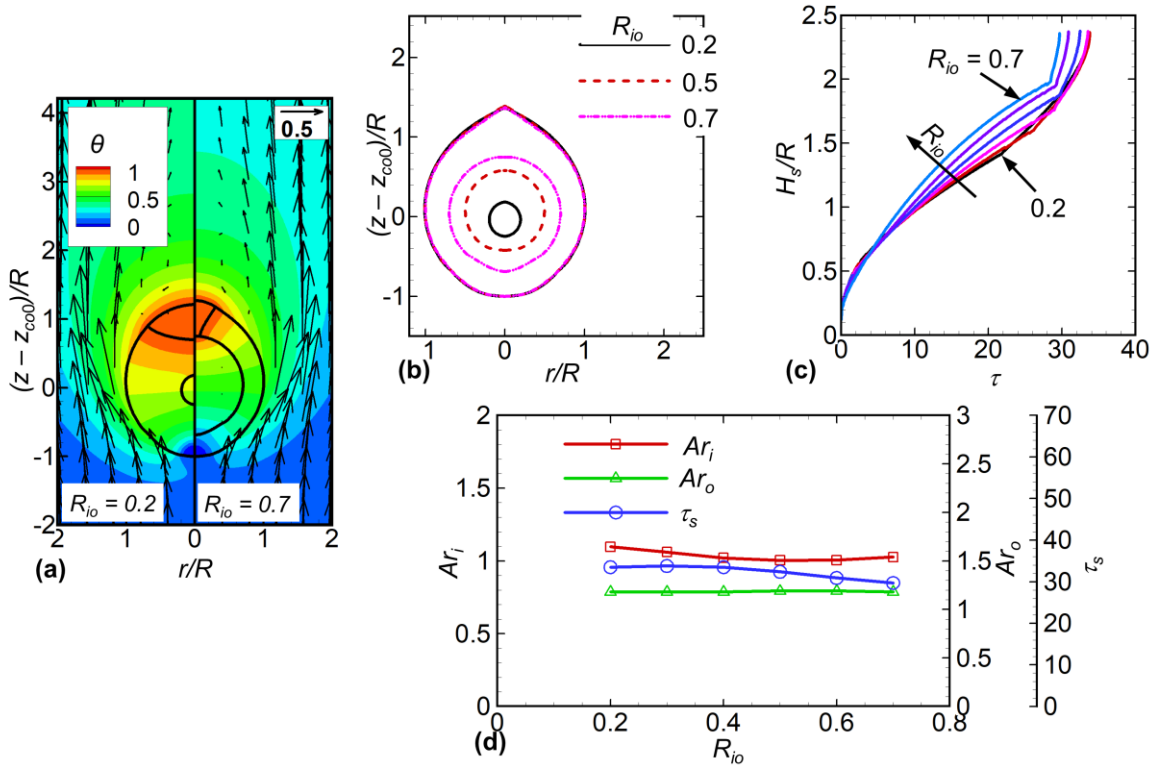
Hình 4.8. Hóa rắn của hạt lưu chất rỗng lơ lửng với độ lệch tâm ban đầu (ε_0) biến đổi trong dải -0,15 – 0,3

ứng với hạt bóng khí bên trong gần với nhân hóa rắn hơn trong khi đó hạt với $\varepsilon_0 > 0$ có hạt bóng khí trong gần phía đỉnh hơn, như được minh họa trong *Hình 4.8(a)*. Tại $\tau = 24$, hơn một nửa hạt với $\varepsilon_0 = -0,15$ đã bị hóa rắn trong khi đó hạt với hạt bóng khí gần đỉnh hơn ($\varepsilon_0 = 0,3$) còn ít lưu chất bị hóa rắn hơn. Tức là, biên hóa rắn tương ứng với $\varepsilon_0 = 0,3$ di chuyển nhanh hơn so với hạt với $\varepsilon_0 = -0,15$ tại cùng một thời điểm. Điều này được xác nhận bởi *Hình 4.8(c)*, khi tăng độ lệch tâm ban đầu của hạt khiến cho đường H_s theo thời gian (τ) dốc hơn. Nói cách khác, khi hạt bóng khí bên trong được đặt gần nhân hóa rắn, tốc độ hóa rắn sẽ giảm. Kết quả, thời gian hóa rắn (τ_s) của hạt tăng khi giảm độ lệch tâm ban đầu (ε_0) như được thể hiện trong *Hình 4.8(d)*. Sự ảnh hưởng này có thể giải thích như sau. Hạt bóng khí bên trong gần với đỉnh của hạt hơn kéo theo lớp lưu chất nhiều hơn ở đáy. Khi quá trình hóa rắn diễn ra, việc tăng ε_0 dẫn đến vùng hóa rắn gần nhân hóa rắn phát triển nhiều hơn. Do đó nhiệt được truyền từ pha rắn sẽ nhiều hơn so với được truyền từ pha khí, một lớp rắn dày hơn tại vị trí đáy của hạt thúc đẩy chuyển động của biên chuyển pha [77]. Do đó, quá trình hóa rắn tốn ít thời gian hơn khi ε_0 tăng.

Tuy nhiên, như được thể hiện trong *Hình 4.8(b)*, hình dạng của hạt bóng khí bên trong và hạt ngoài sau khi hóa rắn kết thúc không ảnh hưởng bởi vị trí của hạt bóng khí bên trong. Như kết quả cho thấy, tỉ lệ hình dạng của hạt ngoài và trong không phụ thuộc vào sự thay đổi của độ lệch tâm ban đầu được thay đổi trong dải $-0,15 - 0,3$, như được thể hiện trong *Hình 4.8(d)*.

4.2.6. Ảnh hưởng của tỉ số bán kính

Hình 4.9 thể hiện sự ảnh hưởng của kích thước của hạt bóng khí bên trong, được thể hiện qua tỉ số bán kính (R_{io}), lên quá trình hóa rắn của hạt. Tỉ số bán kính được biến đổi trong dải $0,2 - 0,7$ với bước nhảy $\Delta R_{io} = 0,1$. Các thông số khác được giữ không đổi, bao gồm $St = 0,1$, $Re = 50$, $\rho_{sl} = 0,9$, $r_0/R = 0,2$, $\varepsilon_0 = 0$ và $\phi_{gr} = 0^\circ$. *Hình 4.9(a)* so sánh quá trình hóa rắn giữa hạt với hạt bóng khí nhỏ ($R_{io} = 0,2$, phía bên trái) và hạt với hạt bóng khí lớn hơn ($R_{io} = 0,7$, phía bên phải) tại $\tau = 28$. Điều này có thể được nhìn thấy tại cùng một thời điểm, biên hóa rắn của hạt có hạt bóng khí lớn hơn gần với đỉnh hạt hơn hạt có bóng khí nhỏ. Điều này có nghĩa là tốc độ hóa rắn của hạt với $R_{io} = 0,2$ nhỏ hơn với hạt $R_{io} = 0,7$.



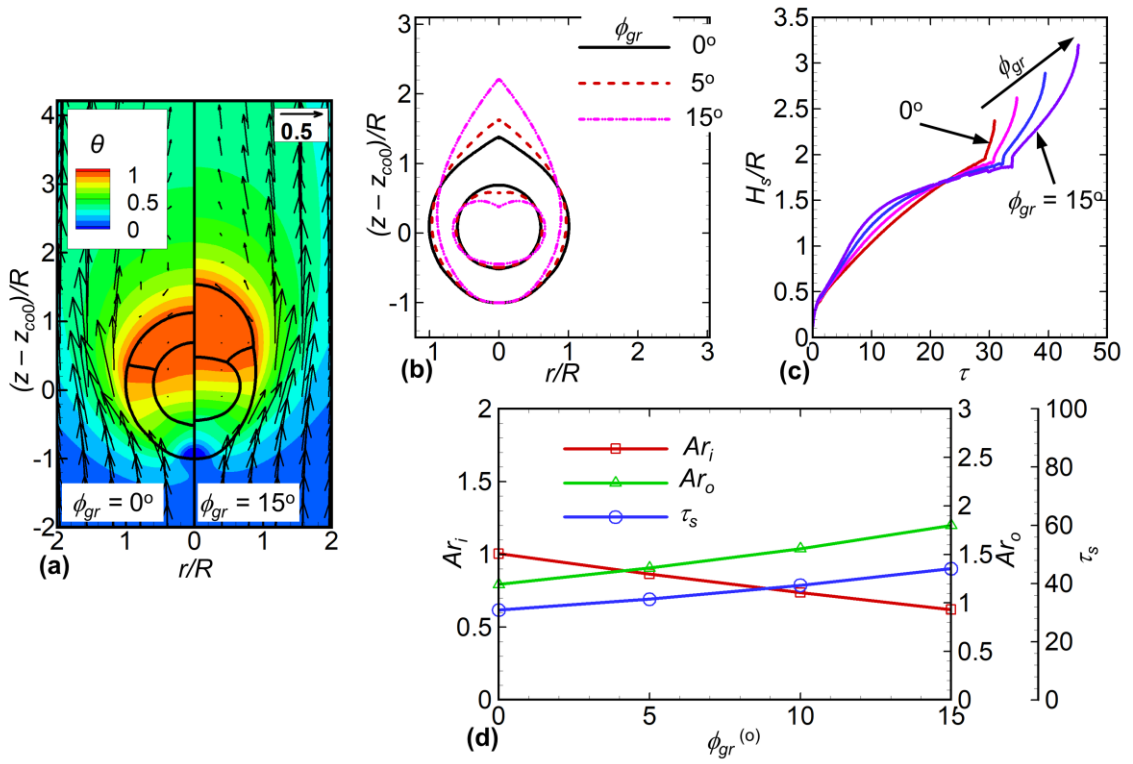
Hình 4.9. Hóa rắn hạt lơ lửng với tỉ số bán kính (R_{io}) thay đổi trong dải 0,2 – 0,7

Điều này được xác nhận trong Hình 4.9(c), trong đó việc tăng kích thước của hạt bóng khí trong dẫn đến độ nghiêng của đường H_s theo thời gian (τ) tăng. Kết quả là, quá trình hóa rắn cần ít thời gian hơn để hoàn thành khi vỏ lỏng bên ngoài trở nên mỏng hơn khi tăng kích cỡ của hạt bóng khí (đường với kí hiệu tròn trong Hình 4.9(d)). Nguyên nhân là bề dày của vỏ lưu chất của hạt lưu chất rỗng với tỉ số bán kính nhỏ hơn sẽ lớn hơn hạt với tỉ số bán kính lớn hơn. Do đó, lượng lưu chất cần hóa rắn tăng lên với việc giảm R_{io} và do đó hạt có tỉ số bán kính càng nhỏ, quá trình hóa rắn càng kéo dài.

Hình 4.9(b) biểu diễn hình dạng hạt với $R_{io} = 0,2$, $R_{io} = 0,5$ và $R_{io} = 0,7$ lúc kết thúc quá trình hóa rắn cho thấy rằng biên bên ngoài của hạt hóa rắn hầu như không phụ thuộc vào sự biến đổi của kích thước hạt bóng khí bên trong. Do đó, tỉ số hạt ngoài được giữ không đổi khi thay đổi R_{io} (Hình 4.9(d)). Ngược lại, tỉ số hạt bóng khí giảm một ít khi tỉ số bán kính thay đổi trong dải 0,2 – 0,7.

4.2.7. Ảnh hưởng của góc phát triển

Cuối cùng, chúng ta sẽ xem xét sự ảnh hưởng của góc phát triển (ϕ_{gr}) lên quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng lơ lửng. Hình 4.10 thể hiện hạt hóa rắn với góc phát triển (ϕ_{gr}) thay đổi trong dải $0^\circ - 15^\circ$ (bước nhảy $\Delta\phi_{gr} = 5^\circ$) và $St = 0,1$, $Re =$



Hình 4.10. Hóa rắn hạt lưu chất rỗng lơ lửng với góc phát triển (ϕ_{gr}) thay đổi trong dải $0^\circ - 15^\circ$

50, $\rho_{sl} = 0,9$, $R_{io} = 0,6$, $r_0/R = 0,2$ và $\varepsilon_0 = 0$. Trong Hình 4.10(a), sự hóa rắn của hạt lưu chất rỗng với $\phi_{gr} = 0^\circ$ (phía bên trái) và hạt với $\phi_{gr} = 15^\circ$ (phía bên phải) được trình bày tại $\tau = 15$. Ta thấy rằng chiều cao của biên hóa rắn hạt bên trái thấp hơn của hạt bên phải.

Hơn nữa, vỏ lưu chất của hạt bên phải thon hơn theo hướng bán kính nhưng cao hơn (hay dài hơn) theo hướng trục so với hạt còn lại. Nguyên nhân là, việc tăng góc phát triển có xu hướng ép hạt phải mỏng hơn và cao hơn trong quá trình hóa rắn [38]. Như kết quả cho thấy, kết thúc quá trình hóa rắn, hình dạng hạt với $\phi_{gr} = 0^\circ$, $\phi_{gr} = 5^\circ$ và $\phi_{gr} = 15^\circ$ được thể hiện trong Hình 4.10(b), chỉ ra rằng bề mặt ngoài hạt trở nên dài hơn theo hướng trục trong khi hạt bóng khí bên trong trở lên ngắn hơn khi góc phát triển tăng. Do đó, chiều cao của hạt hóa rắn với $\phi_{gr} = 15^\circ$ là lớn nhất và chiều cao của hạt với $\phi_{gr} = 0^\circ$ là nhỏ nhất như được thể hiện trong Hình 4.10(c). Nói cách khác, tỉ số hình dạng ngoài (Ar_o) và thời gian hóa rắn (τ_s) của hạt tăng theo sự tăng của góc phát triển trong dải $0^\circ - 15^\circ$, xem Hình 4.10(d). Trong khi đó, tỉ số hình dạng trong (Ar_i) giảm bởi việc tăng góc phát triển trong dải $0^\circ - 15^\circ$ (chi tiết xem Hình 4.10(d)).

4.3. Kết luận Chương 4

Trong chương này, quá trình hóa rắn của một hạt lưu chất rỗng lơ lửng dưới tác dụng của đối lưu cưỡng bức đã được trình bày. Các thông số như số Reynolds (Re), số Stefan (St), tỉ số khối lượng riêng (ρ_{sl}) giữa pha rắn và pha lỏng, kích thước nhân hóa rắn (r_0/R), độ lệch tâm ban đầu (ε_0), tỉ số bán kính (R_{io}) và góc phát triển (ϕ_{gr}) được xem xét.

Việc tăng số Re (tức là, tăng sự ảnh hưởng quán tính so với lực nhớt) trong dải 25 – 200, R_{io} (tức là, tăng kích thước hạt bóng khí bên trong) trong dải 0,2 – 0,7 và ϕ_{gr} trong dải $0^\circ - 15^\circ$ dẫn đến việc tăng thời gian hóa rắn (τ_s). Ngược lại, với sự giảm của số St (tức là, tăng nhiệt ẩn chuyển pha) trong dải 0,05 – 1,6, r_0/R (tức là, giảm kích thước nhân hóa rắn) trong dải 0,05 – 0,3 và ε_0 (tức là, hạt bóng khí gần nhân hóa rắn hơn) trong dải -0,15 – 0,3 dẫn đến quá trình hóa rắn kéo dài hơn. Trong khi đó, việc thay đổi tỉ số khối lượng riêng giữa pha rắn và pha lỏng (ρ_{sl}) trong dải 0,8 – 1,2 có ảnh hưởng nhỏ lên thời gian hóa rắn.

Tỉ số hình dạng trong (Ar_i) không thay đổi nhiều khi các thông số thay đổi ngoại trừ việc thay đổi của ϕ_{gr} . Theo đó, việc tăng góc phát triển (ϕ_{gr}) làm giảm tỉ số hình dạng trong (Ar_i). Liên quan đến tỉ số hình dạng ngoài (Ar_o), việc tăng tỉ số khối lượng riêng (ρ_{sl}) dẫn đến việc giảm tỉ số hình dạng ngoài (Ar_o). Mặt khác, tỉ số hình dạng ngoài (Ar_o) tăng với việc tăng góc phát triển. Các thông số khác như là St , Re , kích thước nhân hóa rắn (r_0/R), độ lệch tâm ban đầu (ε_0) của hạt và kích thước hạt bóng khí (R_{io}) bên trong có ảnh hưởng nhỏ lên hình dạng ngoài của hạt hóa rắn.

KẾT LUẬN CHUNG

Luận án đã trình bày tầm quan trọng của việc nghiên cứu hóa rắn của hạt lưu chất đa thành phần cũng như các ứng dụng, tiềm năng ứng dụng của chúng trong sản xuất công nghiệp. Phương pháp theo dấu biên được sử dụng để theo dõi các biên phân tách giữa các pha khác nhau trong mô phỏng sự chuyển pha của hạt lưu chất đa thành phần (ở đây là hạt lưu chất rỗng). Các phương trình Navier – Stokes và năng lượng được rời rạc hóa và đưa vào mô đun tính toán. Các kết quả nghiên cứu trong luận án đã được công bố trên các tạp chí quốc tế uy tín thuộc danh mục SCIE. Luận án đã đạt được những kết quả nghiên cứu mới sau:

- Đã xây dựng được một mô hình tính toán của hạt lưu chất rỗng hóa rắn trên một bề mặt lạnh và hạt lưu chất rỗng lơ lửng trong môi trường tự do dưới tác dụng của đối lưu cưỡng bức được trình bày. Các mô hình này chưa được khảo sát trong bất kỳ một mô hình mô phỏng số nào khác.
- Các thông số không thứ nguyên được đưa ra để khảo sát quá trình hóa rắn hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh. Ta thấy rằng, việc thay đổi các thông số này có thể dẫn đến hình dạng và thời gian hóa rắn của hạt thay đổi. Qua đó, có thể giúp hiệu chỉnh và điều khiển quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trên một bề mặt lạnh để ứng dụng trong công nghiệp. Cụ thể:

Nghiên cứu chỉ ra rằng thời gian hóa rắn của hạt tăng lên khi tăng kích cỡ hạt bóng khí bên trong R_{io} tăng trong dải 0,2 – 0,7, số Bo giảm trong dải 0,18 – 3,16, số Pr giảm trong dải 0,01 – 1, số St giảm trong dải 0,032 – 1, tỉ số ρ_{sl} giảm trong dải 0,8 – 1,2, góc ướt ϕ_0 tăng trong dải 60° – 130° , góc ướt trong ϕ_{oi} tăng trong dải 50° – 120° , góc ướt ngoài ϕ_{oo} tăng trong dải 60° – 130° và góc phát triển ϕ_{gr} tăng trong dải 0° – 25° .

Cùng với đó, chiều cao của hạt hóa rắn giảm theo chiều tăng của Bo , Pr , ρ_{sl} , góc phát triển ϕ_{gr} , và theo chiều giảm của góc ướt ϕ_0 , góc ướt ngoài ϕ_{oo} . Các thông số cũng ảnh hưởng tới chiều cao của hạt bóng khí bên trong. Cụ thể, chiều cao hạt bóng khí giảm cùng chiều tăng của Pr , ρ_{sl} , ϕ_{gr} và chiều giảm của R_{io} , ϕ_0 , góc ướt trong ϕ_{oi} trong dải 50° – 120° .

- Quá trình hóa rắn của của hạt lưu chất rỗng lơ lửng trong môi trường tự do dưới tác dụng của đối lưu cưỡng bức cũng được khảo sát. Qua đó thấy được hình dạng và thời gian hóa rắn của hạt lưu chất rỗng trong môi trường tự do dưới tác động của đối lưu cưỡng bức cũng bị ảnh hưởng khi các thông số không thứ nguyên thay đổi. Do đó, qua khảo sát ảnh hưởng này có thể giúp hiệu chỉnh và điều khiển quá trình hóa rắn của hạt đơn nhân rỗng lơ lửng trong môi trường lạnh. Cụ thể:

Thời gian hóa rắn của hạt tăng lên khi Re tăng trong dải 25 – 200, St giảm trong dải 0,025 – 1,6, kích thước nhân hóa rắn r_0/R giảm trong dải 0,05 – 0,3, độ lệch tâm ban đầu ε_0 giảm trong dải -0,15 – 0,3, kích thước hạt bóng khí R_{i0} trong giảm trong dải 0,2 – 0,7, góc phát triển ϕ_{gr} tăng trong dải $0^\circ - 15^\circ$.

Chiều dài của hạt hóa rắn (đặc trưng bởi tỉ số hình dạng Ar_0) tăng khi ρ_{sl} giảm trong dải 0,8 – 1,2, góc phát triển ϕ_{gr} tăng trong dải $0^\circ - 15^\circ$. Cùng với đó, tỉ số hình dạng của hạt trong Ar_i chỉ chịu ảnh hưởng bởi góc phát triển. Cụ thể, Ar_i giảm khi góc phát triển ϕ_{gr} tăng.

HƯỚNG PHÁT TRIỂN TRONG TƯƠNG LAI

- Các kết quả nghiên cứu trên chỉ xem xét đến hạt lưu chất rỗng nên cần xem xét thêm các hạt lưu chất đa thành phần có cấu tạo phức tạp hơn, ví dụ, như hạt có nhiều nhân hay nhiều lớp hơn.
- Trong tương lai cần thêm các công trình thực nghiệm đối với hạt lưu chất rỗng. Trong các công trình thực nghiệm có thể có rất nhiều yếu tố ảnh hưởng đến quá trình hóa rắn của hạt lưu chất rỗng như là vị trí nhân hóa rắn, số lượng nhân hóa rắn, độ tinh khiết của lưu chất khảo sát,... cần được xem xét đến.

DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA NGHIÊN CỨU SINH

1. Nang X. Ho, Truong V. Vu, **Binh D. Pham**, *A numerical study of a liquid compound drop solidifying on a horizontal surface*, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 165, nov. 2020, p. 120713 (SCIE, IF2020 = 5.584, Q1).
2. **Binh D. Pham**, Truong V. Vu, Lien V.T. Nguyen, Nang X. Ho, Cuong T. Nguyen, Hoe D. Nguyen, Vinh T. Nguyen and Hung V. Vu, *A numerical study of geometrical effects on solidification of a compound droplet on a cold flat surface*, Acta Mechanica, Vol. 232, jun. 2021, pp. 3767–3779 (SCIE, IF2020 = 2.698, Q1).
3. Truong V. Vu, **Binh D. Pham**, Phuc H. Pham, Hung V. Vu, and Bo X. Tran, *A numerical study of hollow water drop breakup during freezing*, Physics of Fluids, Vol. 33, oct. 2021, p. 112110 (SCIE, IF2021 = 4.98, Q1).
4. Truong V. Vu, **Binh D. Pham**, Nang X. Ho, Hung V. Vu, *Solidification of a hollow sessile droplet under forced convection*, Physics of Fluids, Vol. 34, Feb. 2022, p. 033302 (SCIE, IF2021 = 4.98, Q1).
5. **Binh D. Pham** and T. V. Vu, *A numerical study of a suspended compound droplet solidifying under forced convection*, Int. J. Heat Mass Transf, Vol. 196, p. 123296, Nov. 2022 (SCIE, IF2021 = 5.431, Q1).
6. **Pham Duy Binh**, Vu Van Truong, Nguyen Thi Viet Lien, Nguyen Tien Cuong, Nguyen Dinh Hoe, Nguyen Tuan Vinh, Vu Van Hung, *Direct numerical simulation study of water droplets freezing on a horizontal plate*, Vietnam J. Sci. Technol., vol. 59, no. 3, Art. no. 3, May 2021, doi: 10.15625/2525-2518/59/3/15434.
7. **Binh D. Pham**, Truong V. Vu, Lien V.T. Nguyen, Cuong T. Nguyen, Hoe D. Nguyen, Vinh T. Nguyen, Hung V. Vu, *A numerical study of the solidification process of a retracting fluid filament*, Vietnam J. Mech., Nov. 2021, doi: 10.15625/0866-7136/16393.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] D. J. McClements, “Advances in fabrication of emulsions with enhanced functionality using structural design principles,” *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, vol. 17, no. 5, Art. no. 5, Oct. 2012, doi: 10.1016/j.cocis.2012.06.002.
- [2] A. A. Maan, K. Schroën, and R. Boom, “Spontaneous droplet formation techniques for monodisperse emulsions preparation – Perspectives for food applications,” *Journal of Food Engineering*, vol. 107, no. 3, Art. no. 3, Dec. 2011, doi: 10.1016/j.jfoodeng.2011.07.008.
- [3] H. Ilyasoglu Buyukkestelli and S. N. El, “Enhancing sweetness using double emulsion technology to reduce sugar content in food formulations,” *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, vol. 74, p. 102809, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.ifset.2021.102809.
- [4] M. H. Humayun *et al.*, “Spatial intensity profiling of elastic and inelastic scattering in isotropic and anisotropic liquids by immersion of a spherical silicon photocell,” *Appl. Opt., AO*, vol. 56, no. 34, pp. 9384–9389, Dec. 2017, doi: 10.1364/AO.56.009384.
- [5] M. Biancardo *et al.*, “Characterization of microspherical semi-transparent solar cells and modules,” *Solar Energy*, vol. 81, no. 6, pp. 711–716, Jun. 2007, doi: 10.1016/j.solener.2006.10.009.
- [6] G. Wu, R. Li, Y. Yuan, L. Jiang, and D. Sun, “Sound absorption properties of ceramic hollow sphere structures with micro-sized open cell,” *Materials Letters*, vol. 134, pp. 268–271, Nov. 2014, doi: 10.1016/j.matlet.2014.07.082.
- [7] W. Gao, D. W. Smith, and D. C. Sego, “Freezing behavior of freely suspended industrial wastewater droplets,” *Cold Regions Science and Technology*, vol. 31, no. 1, pp. 13–26, Feb. 2000, doi: 10.1016/S0165-232X(99)00036-1.
- [8] J. Nickel, “Spherical solar cells; Eine runde Sache. Kugelsolarzellen,” *Photon*, Feb. 2004, Accessed: May 12, 2022. [Online]. Available: <https://www.osti.gov/etdeweb/biblio/20456996>
- [9] T. Minemoto and H. Takakura, “Fabrication of Spherical Silicon Crystals by Dropping Method and Their Application to Solar Cells,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 46, no. 7R, Art. no. 7R, Jul. 2007, doi: 10.1143/JJAP.46.4016.
- [10] Y. Cao, Z. Wu, Y. Su, and Z. Xu, “Aircraft flight characteristics in icing conditions,” *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 74, pp. 62–80, Apr. 2015, doi: 10.1016/j.paerosci.2014.12.001.
- [11] N. Dalili, A. Edrissy, and R. Carriveau, “A review of surface engineering issues critical to wind turbine performance,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 13, no. 2, pp. 428–438, Feb. 2009, doi: 10.1016/j.rser.2007.11.009.
- [12] O. Fakorede, Z. Feger, H. Ibrahim, A. Ilinca, J. Perron, and C. Masson, “Ice protection systems for wind turbines in cold climate: characteristics,

- comparisons and analysis,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 65, pp. 662–675, Nov. 2016, doi: 10.1016/j.rser.2016.06.080.
- [13] W. M. Leary, *We Freeze to Please: A History of NASA’s Icing Research Tunnel and the Quest for Flight Safety*. National Aeronautics and Space Administration, 2002.
- [14] F. T. Lynch and A. Khodadoust, “Effects of ice accretions on aircraft aerodynamics,” *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 37, no. 8, pp. 669–767, Nov. 2001, doi: 10.1016/S0376-0421(01)00018-5.
- [15] J. Wang, J. Liu, J. Han, and J. Guan, “Rheology investigation of the globule of multiple emulsions with complex internal structures through a boundary element method,” *Chemical Engineering Science*, vol. 96, pp. 87–97, Jun. 2013, doi: 10.1016/j.ces.2013.02.065.
- [16] H. Chen, J. Li, H. C. Shum, H. A. Stone, and D. A. Weitz, “Breakup of double emulsions in constrictions,” *Soft Matter*, vol. 7, no. 6, pp. 2345–2347, 2011.
- [17] Q. Ji *et al.*, “A Modular Microfluidic Device via Multimaterial 3D Printing for Emulsion Generation,” *Scientific Reports*, vol. 8, no. 1, p. 4791, Mar. 2018, doi: 10.1038/s41598-018-22756-1.
- [18] T. V. Vu, H. Takakura, J. C. Wells, and T. Minemoto, “Production of hollow spheres of eutectic tin-lead solder through a coaxial nozzle,” *J. Solid Mech. Mater. Eng.*, vol. 4, no. 10, pp. 1530–1538, 2010, doi: 10.1299/jmmp.4.1530.
- [19] K. D. Bhagat, T. V. Vu, J. C. Wells, H. Takakura, Y. Kawano, and F. Ogawa, “Production of hollow germanium alloy quasi-spheres through a coaxial nozzle,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 58, no. 6, p. 068001, May 2019, doi: 10.7567/1347-4065/ab1b59.
- [20] N. X. Ho, T. V. Vu, V. T. Nguyen, C. T. Nguyen, and H. V. Vu, “A numerical study of liquid compound filament contraction,” *Physics of Fluids*, vol. 33, no. 2, Art. no. 2, Feb. 2021, doi: 10.1063/5.0040216.
- [21] E. Tekin Pulatsü, S. Sahin, and G. Sumnu, “Characterization of different double-emulsion formulations based on food-grade emulsifiers and stabilizers,” *Journal of Dispersion Science and Technology*, vol. 39, no. 7, pp. 996–1002, Jul. 2018, doi: 10.1080/01932691.2017.1379021.
- [22] M.-H. Lee, S.-G. Oh, S.-K. Moon, and S.-Y. Bae, “Preparation of Silica Particles Encapsulating Retinol Using O/W/O Multiple Emulsions,” *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 240, no. 1, pp. 83–89, Aug. 2001, doi: 10.1006/jcis.2001.7699.
- [23] M. Stasse, T. Ribaut, V. Schmitt, and V. Héroguez, “Encapsulation of lipophilic fragrance by polymerization of the intermediate aqueous phase of an oil-in-water-in-oil (O/W/O) double emulsion,” *Polym. Chem.*, vol. 10, no. 30, pp. 4154–4162, Jul. 2019, doi: 10.1039/C9PY00528E.
- [24] F. Paulo and L. Santos, “Microencapsulation of caffeic acid and its release using a w/o/w double emulsion method: Assessment of formulation parameters,” *Drying Technology*, vol. 37, no. 8, pp. 950–961, Jun. 2019, doi: 10.1080/07373937.2018.1480493.

- [25] M. Iqbal, N. Zafar, H. Fessi, and A. Elaissari, “Double emulsion solvent evaporation techniques used for drug encapsulation,” *International Journal of Pharmaceutics*, vol. 496, no. 2, pp. 173–190, Dec. 2015, doi: 10.1016/j.ijpharm.2015.10.057.
- [26] M. Nabi-Meibodi, B. Navidi, N. Navidi, A. Vatanara, M. Reza Rouini, and V. Ramezani, “Optimized double emulsion-solvent evaporation process for production of solid lipid nanoparticles containing baclofene as a lipid insoluble drug,” *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, vol. 23, no. 3, pp. 225–230, Jan. 2013, doi: 10.1016/S1773-2247(13)50034-7.
- [27] L. Becker Peres, L. Becker Peres, P. H. H. de Araújo, and C. Sayer, “Solid lipid nanoparticles for encapsulation of hydrophilic drugs by an organic solvent free double emulsion technique,” *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, vol. 140, pp. 317–323, Apr. 2016, doi: 10.1016/j.colsurfb.2015.12.033.
- [28] M. Abkarian, M. Faivre, and A. Viallat, “Swinging of red blood cells under shear flow,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, no. 18, p. 188302, Apr. 2007, doi: 10.1103/PhysRevLett.98.188302.
- [29] S.-Y. Teh, R. Lin, L.-H. Hung, and A. P. Lee, “Droplet microfluidics,” *Lab Chip*, vol. 8, no. 2, pp. 198–220, Jan. 2008, doi: 10.1039/B715524G.
- [30] J. H. Snoeijer and P. Brunet, “Pointy ice-drops: How water freezes into a singular shape,” *American Journal of Physics*, vol. 80, no. 9, Art. no. 9, Aug. 2012, doi: 10.1119/1.4726201.
- [31] X. Zhang, X. Liu, J. Min, and X. Wu, “Shape variation and unique tip formation of a sessile water droplet during freezing,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 147, pp. 927–934, Jan. 2019, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2018.09.040.
- [32] M. Tembely and A. Dolatabadi, “A comprehensive model for predicting droplet freezing features on a cold substrate,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 859, pp. 566–585, Jan. 2019, doi: 10.1017/jfm.2018.839.
- [33] D. M. Anderson, M. G. Worster, and S. H. Davis, “The case for a dynamic contact angle in containerless solidification,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 163, no. 3, Art. no. 3, Jun. 1996, doi: 10.1016/0022-0248(95)00970-1.
- [34] L. Huang, Z. Liu, Y. Liu, Y. Gou, and L. Wang, “Effect of contact angle on water droplet freezing process on a cold flat surface,” *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 40, pp. 74–80, Jul. 2012, doi: 10.1016/j.expthermflusci.2012.02.002.
- [35] Y. Pan, K. Shi, X. Duan, and G. F. Naterer, “Experimental investigation of water droplet impact and freezing on micropatterned stainless steel surfaces with varying wettabilities,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 129, pp. 953–964, Feb. 2019, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.10.032.
- [36] H. Zhang, Z. Jin, M. Jiao, and Z. Yang, “Experimental investigation of the impact and freezing processes of a water droplet on different cold

- concave surfaces,” *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 132, pp. 498–508, Oct. 2018, doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2018.06.032.
- [37] J. Ju, Z. Jin, H. Zhang, Z. Yang, and J. Zhang, “The impact and freezing processes of a water droplet on different cold spherical surfaces,” *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 96, pp. 430–440, Sep. 2018, doi: 10.1016/j.expthermflusci.2018.03.037.
- [38] G. A. Satunkin, “Determination of growth angles, wetting angles, interfacial tensions and capillary constant values of melts,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 255, no. 1, pp. 170–189, Jul. 2003, doi: 10.1016/S0022-0248(03)01187-4.
- [39] M. Lu, M. Song, X. Pang, C. Dang, and L. Zhang, “Modeling study on sessile water droplet during freezing with the consideration of gravity, supercooling, and volume expansion effects,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 147, p. 103909, Feb. 2022, doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2021.103909.
- [40] H. Itoh, H. Okamura, C. Nakamura, T. Abe, M. Nakayama, and R. Komatsu, “Growth of spherical Si crystals on porous Si₃N₄ substrate that repels Si melt,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 401, pp. 748–752, Sep. 2014, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2013.12.052.
- [41] A. G. Marín, O. R. Enríquez, P. Brunet, P. Colinet, and J. H. Snoeijer, “Universality of Tip Singularity Formation in Freezing Water Drops,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, no. 5, Art. no. 5, Jul. 2014, doi: 10.1103/PhysRevLett.113.054301.
- [42] Z. Jin, S. Jin, and Z. Yang, “Visualization of icing process of a water droplet impinging onto a frozen cold plate under free and forced convection,” *J Vis*, vol. 16, no. 1, pp. 13–17, Feb. 2013, doi: 10.1007/s12650-012-0154-x.
- [43] J. H. Nadler, T. H. J. Sanders, and J. K. Cochran, “Aluminum Hollow Sphere Processing,” *Materials Science Forum*, vol. 331–337, pp. 495–500, 2000, doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.331-337.495.
- [44] J. M. Kendall, M. C. Lee, and T. G. Wang, “Metal shell technology based upon hollow jet instability,” *Journal of Vacuum Science and Technology*, vol. 20, no. 4, pp. 1091–1093, Apr. 1982, doi: 10.1116/1.571574.
- [45] H. Shetabivash, A. Dolatabadi, and M. Paraschivoiu, “A multiple level-set approach for modelling containerless freezing process,” *Journal of Computational Physics*, vol. 415, p. 109527, Aug. 2020, doi: 10.1016/j.jcp.2020.109527.
- [46] M. Vahab, C. Pei, M. Y. Hussaini, M. Sussman, and Y. Lian, “An Adaptive Coupled Level Set and Moment-of-Fluid Method for Simulating Droplet Impact and Solidification on Solid Surfaces with Application to Aircraft Icing,” in *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, American Institute of Aeronautics and Astronautics. doi: 10.2514/6.2016-1340.
- [47] J. Sun, J. Gong, and G. Li, “A lattice Boltzmann model for solidification of water droplet on cold flat plate,” *International Journal of*

- Refrigeration*, vol. 59, pp. 53–64, Nov. 2015, doi: 10.1016/j.ijrefrig.2015.07.003.
- [48] Y. Zhou, J. Chen, M. Zhong, J. Wang, and M. Lv, “Numerical simulation of metal jet breakup, cooling and solidification in water,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 109, pp. 1100–1109, Jun. 2017, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.02.083.
- [49] T. V. Vu, K. V. Dao, and B. D. Pham, “Numerical simulation of the freezing process of a water drop attached to a cold plate,” *J Mech Sci Technol*, vol. 32, no. 5, Art. no. 5, May 2018, doi: 10.1007/s12206-018-0421-4.
- [50] T. V. Vu, “Deformation and breakup of a pendant drop with solidification,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 122, pp. 341–353, Jul. 2018, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.01.125.
- [51] H. Hua, J. Shin, and J. Kim, “Dynamics of a compound droplet in shear flow,” *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 50, pp. 63–71, Dec. 2014, doi: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2014.05.007.
- [52] T. V. Vu, L. V. Vu, B. D. Pham, and Q. H. Luu, “Numerical investigation of dynamic behavior of a compound drop in shear flow,” *J Mech Sci Technol*, vol. 32, no. 5, Art. no. 5, May 2018, doi: 10.1007/s12206-018-0420-5.
- [53] Y. Chen, X. Liu, and M. Shi, “Hydrodynamics of double emulsion droplet in shear flow,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 102, no. 5, Art. no. 5, Feb. 2013, doi: 10.1063/1.4789865.
- [54] T.-V. Vu, T. V. Vu, and D. T. Bui, “Numerical study of deformation and breakup of a multi-core compound droplet in simple shear flow,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 131, pp. 1083–1094, Mar. 2019, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.11.131.
- [55] T. V. Vu, “Parametric study of the collision modes of compound droplets in simple shear flow,” *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 79, p. 108470, Oct. 2019, doi: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2019.108470.
- [56] B. D. Pham, T. V. Vu, C. T. Nguyen, H. D. Nguyen, and V. T. Nguyen, “Numerical study of collision modes of multi-core compound droplets in simple shear flow,” *J Mech Sci Technol*, vol. 34, no. 5, pp. 2055–2066, May 2020, doi: 10.1007/s12206-020-0427-6.
- [57] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, and S. Osher, “An improved level set method for incompressible two-phase flows,” *Computers & Fluids*, vol. 27, no. 5, pp. 663–680, Jun. 1998, doi: 10.1016/S0045-7930(97)00053-4.
- [58] H. Z. L. L. Zheng, “An Adaptive Level Set Method for Moving-Boundary Problems: Application to Droplet Spreading and Solidification,” *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 37, no. 4, pp. 437–454, Jun. 2000, doi: 10.1080/10407790050051137.
- [59] L. Tan and N. Zabaras, “Modeling the growth and interaction of multiple dendrites in solidification using a level set method,” *Journal of*

- Computational Physics*, vol. 226, no. 1, pp. 131–155, Sep. 2007, doi: 10.1016/j.jcp.2007.03.023.
- [60] M. Renardy, Y. Renardy, and J. Li, “Numerical Simulation of Moving Contact Line Problems Using a Volume-of-Fluid Method,” *Journal of Computational Physics*, vol. 171, no. 1, pp. 243–263, Jul. 2001, doi: 10.1006/jcph.2001.6785.
- [61] C. W. Hirt and B. D. Nichols, “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries,” *Journal of Computational Physics*, vol. 39, no. 1, pp. 201–225, Jan. 1981, doi: 10.1016/0021-9991(81)90145-5.
- [62] S. Thakre, L. Manickam, and W. Ma, “A numerical simulation of jet breakup in melt coolant interactions,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 80, pp. 467–475, Jun. 2015, doi: 10.1016/j.anucene.2015.02.038.
- [63] W.-S. Jiaung, J.-R. Ho, and C.-P. Kuo, “Lattice Boltzmann Method for the Heat Conduction Problem with Phase Change,” *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 39, no. 2, pp. 167–187, Feb. 2001, doi: 10.1080/10407790150503495.
- [64] Q. Li, K. H. Luo, Q. J. Kang, Y. L. He, Q. Chen, and Q. Liu, “Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 52, pp. 62–105, Feb. 2016, doi: 10.1016/j.pecs.2015.10.001.
- [65] G. Tryggvason *et al.*, “A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow,” *Journal of Computational Physics*, vol. 169, no. 2, Art. no. 2, May 2001, doi: 10.1006/jcph.2001.6726.
- [66] T. V. Vu, G. Tryggvason, S. Homma, J. C. Wells, and H. Takakura, “A Front-Tracking Method for Three-Phase Computations of Solidification with Volume Change,” *Journal of Chemical Engineering of Japan*, vol. 46, no. 11, Art. no. 11, 2013, doi: 10.1252/jcej.13we169.
- [67] T. V. Vu, G. Tryggvason, S. Homma, and J. C. Wells, “Numerical investigations of drop solidification on a cold plate in the presence of volume change,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 76, pp. 73–85, Nov. 2015, doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2015.07.005.
- [68] T. V. Vu, “Numerical study of solidification of a drop with a growth angle difference,” *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 84, p. 108599, Aug. 2020, doi: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2020.108599.
- [69] X. Zhang, X. Liu, X. Wu, and J. Min, “Simulation and experiment on supercooled sessile water droplet freezing with special attention to supercooling and volume expansion effects,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 127, pp. 975–985, Dec. 2018, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.07.021.
- [70] C. Zhang, H. Zhang, W. Fang, Y. Zhao, and C. Yang, “Axisymmetric lattice Boltzmann model for simulating the freezing process of a sessile water droplet with volume change,” *Phys. Rev. E*, vol. 101, no. 2, p. 023314, Feb. 2020, doi: 10.1103/PhysRevE.101.023314.
- [71] X. Zhang, X. Wu, J. Min, and X. Liu, “Modelling of sessile water droplet shape evolution during freezing with consideration of supercooling

- effect,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 125, pp. 644–651, Oct. 2017, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2017.07.017.
- [72] X. Zhang, X. Wu, and J. Min, “Freezing and melting of a sessile water droplet on a horizontal cold plate,” *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 88, pp. 1–7, Nov. 2017, doi: 10.1016/j.exptthermflusci.2017.05.009.
- [73] G. Tryggvason, “A front-tracking/finite-volume navier-stokes solver for direct numerical simulations of multiphase flows,” pp. 11–30, Oct. 2012.
- [74] T. V. Vu and J. C. Wells, “Numerical simulations of solidification around two tandemly-arranged circular cylinders under forced convection,” *Int. J. Multiphase Flow*, vol. 89, pp. 331–344, Mar. 2017, doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2016.11.007.
- [75] T. V. Vu, A. V. Truong, N. T. B. Hoang, and D. K. Tran, “Numerical investigations of solidification around a circular cylinder under forced convection,” *J. Mech. Sci. Technol.*, vol. 30, no. 11, pp. 5019–5028, Nov. 2016, doi: 10.1007/s12206-016-1021-9.
- [76] C.-C. Liao, Y.-W. Chang, C.-A. Lin, and J. M. McDonough, “Simulating flows with moving rigid boundary using immersed-boundary method,” *Computers & Fluids*, vol. 39, no. 1, pp. 152–167, Jan. 2010, doi: 10.1016/j.compfluid.2009.07.011.
- [77] N. X. Ho, T. V. Vu, and B. D. Pham, “A numerical study of a liquid compound drop solidifying on a horizontal surface,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 165, p. 120713, Nov. 2020, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120713.
- [78] V. N. Duy and T. V. Vu, “A numerical study of a liquid drop solidifying on a vertical cold wall,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 127, pp. 302–312, Dec. 2018, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.08.031.
- [79] R. Felton, “Hollow metal spheres put Fraunhofer on a roll,” *Metal Powder Report*, vol. 64, no. 10, p. 8, Nov. 2009, doi: 10.1016/S0026-0657(10)70018-7.
- [80] X. Shang, Z. Luo, and B. Bai, “Numerical simulation of dynamic behavior of compound droplets on solid surface in shear flow by front-tracing method,” *Chemical Engineering Science*, vol. 193, pp. 325–335, Jan. 2019, doi: 10.1016/j.ces.2018.09.021.
- [81] G. Tryggvason, R. Scardovelli, and S. Zaleski, *Direct Numerical Simulations of Gas–Liquid Multiphase Flows*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. doi: 10.1017/CBO9780511975264.
- [82] N. Al-Rawahi and G. Tryggvason, “Numerical Simulation of Dendritic Solidification with Convection: Two-Dimensional Geometry,” *Journal of Computational Physics*, vol. 180, no. 2, pp. 471–496, Aug. 2002, doi: 10.1006/jcph.2002.7092.
- [83] S. Haferl *et al.*, “Freezing dynamics of molten solder droplets impacting onto flat substrates in reduced gravity,” *International Journal of*

- Heat and Mass Transfer*, vol. 44, no. 18, pp. 3513–3528, Sep. 2001, doi: 10.1016/S0017-9310(01)00015-1.
- [84] Y. Sun and C. Beckermann, “Effect of solid–liquid density change on dendrite tip velocity and shape selection,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 311, no. 19, pp. 4447–4453, Sep. 2009, doi: 10.1016/j.jcrysgr.2009.07.031.
- [85] T. V. Vu, “Axisymmetric forced convection solidification of a liquid drop on a cold plate,” *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 107, pp. 104–115, Oct. 2018, doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2018.05.023.
- [86] S. Tasoglu, G. Kaynak, A. J. Szeri, U. Demirci, and M. Muradoglu, “Impact of a compound droplet on a flat surface: A model for single cell epitaxy,” *Physics of Fluids*, vol. 22, no. 8, p. 082103, Aug. 2010, doi: 10.1063/1.3475527.
- [87] M. Raessi and J. Mostaghimi, “Three-Dimensional Modelling of Density Variation Due to Phase Change in Complex Free Surface Flows,” *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 47, no. 6, pp. 507–531, Jun. 2005, doi: 10.1080/10407790590928964.
- [88] T. V. Vu, C. T. Nguyen, and D. T. Khanh, “Direct Numerical Study of a Molten Metal Drop Solidifying on a Cold Plate with Different Wettability,” *Metals*, vol. 8, no. 1, Art. no. 1, Jan. 2018, doi: 10.3390/met8010047.
- [89] A. Virozub, I. G. Rasin, and S. Brandon, “Revisiting the constant growth angle: Estimation and verification via rigorous thermal modeling,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 310, no. 24, pp. 5416–5422, Dec. 2008, doi: 10.1016/j.jcrysgr.2008.09.004.
- [90] M. F. Ismail and P. R. Waghmare, “Universality in freezing of an asymmetric drop,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 109, no. 23, p. 234105, Dec. 2016, doi: 10.1063/1.4971995.
- [91] T. V. Vu and Q. H. Luu, “Containerless solidification of a droplet under forced convection,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 143, p. 118498, Nov. 2019, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118498.
- [92] V. S. Ajaev and S. H. Davis, “The effect of tri-junction conditions in droplet solidification,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 264, no. 1–3, pp. 452–462, Mar. 2004, doi: 10.1016/j.jcrysgr.2003.11.119.
- [93] B. D. Pham *et al.*, “A numerical study of geometrical effects on solidification of a compound droplet on a cold flat surface,” *Acta Mech*, vol. 232, no. 10, pp. 3767–3779, Oct. 2021, doi: 10.1007/s00707-021-03024-2.