
Erklärung zur Abschlussarbeit gemäß § 22 Abs. 7 APB TU Darmstadt

Hiermit erkläre ich, Jan Kröger, dass ich die vorliegende Arbeit gemäß § 22 Abs. 7 APB der TU Darmstadt selbstständig, ohne Hilfe Dritter und nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt habe. Ich habe mit Ausnahme der zitierten Literatur und anderer in der Arbeit genannter Quellen keine fremden Hilfsmittel benutzt. Die von mir bei der Anfertigung dieser wissenschaftlichen Arbeit wörtlich oder inhaltlich benutzte Literatur und alle anderen Quellen habe ich im Text deutlich gekennzeichnet und gesondert aufgeführt. Dies gilt auch für Quellen oder Hilfsmittel aus dem Internet.

Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Mir ist bekannt, dass im Falle eines Plagiats (§ 38 Abs. 2 APB) ein Täuschungsversuch vorliegt, der dazu führt, dass die Arbeit mit 5,0 bewertet und damit ein Prüfungsversuch verbraucht wird. Abschlussarbeiten dürfen nur einmal wiederholt werden.

Bei einer Thesis des Fachbereichs Architektur entspricht die eingereichte elektronische Fassung dem vorgestellten Modell und den vorgelegten Plänen.

Darmstadt, 8. Oktober 2023

J. Kröger

Contents

1	Introduction	5
2	Wetting Theory	8
2.1	Surface Tension	8
2.2	Wetting Phenomenon	9
2.2.1	Dynamic Weting	10
2.2.2	Capillary Rise	12
3	Phase Field Method	15
3.1	Phase Field Method in the Spirit of Cahn and Hillard	15
3.1.1	Mixing Energy	16
3.1.2	Diffusive Interface	16
3.1.3	Wall Energy	17
3.2	Cahn-Hillard Navier Stokes Equations	17
4	Case Setup	18
4.1	Discretization	19
5	Validation	20
6	Results	21
7	Outlook	22

Todo list

ADD CHAPTER	6
ADD CHAPTER	6
Here a introduction, but probably only after the most is done and the layout of the thesis is set.	6
check if quere1997 is also a source. Probably talked about that. Maybe even Washburn talked about that?	6
rework this regiment.	6
ref chapter	7
ref chapter	7
ref to both chapters	7
chapter	7
chapter	7
mention that we are considering spontaneous cap rise (no pressure or something like that)	8
ref	8
ref	8
ref chapter	8
ref	8
rework	8
possibly ref to corresponding chapters here.	8
ref	9
ref; i think it was butt	9
cite Huh and Scriven; Voinov 1976!	10
cite huh and...	11

cite carlsona, blake2006	11
probably a bad end of the chapter	11
ref chapter PhaseField	11
Wu2017 [24] untersuchte mehrere Modelle der Art, dass der dynamische Kontakt- winkel untersucht wurde.	13
cite papers; dimitrov,... check!!	13
cite papers. look it up you had some.	14
elaborate on this paper!	14
einleitende Worte	15
picture of interfaces	15
check!!!	15
check if right function	16
check if already mentioned	16
cite	16
insert table	18
elaborate	18
ref to chapter ooEBC	19
we used an other geometry. How do i write it then?new image with new text? . . .	19
bodziony2023, Cai2015, woerner2021, Samkhaniani2021, holtzinger, marianna?, hagg?(sogar mit wedge und amr)	20

1 Introduction

Many everyday phenomena that we observe are, contrary to expectations, not yet fully understood. This does not mean that they are not utilized in a variety of technical devices. In the case of wetting, we encounter many different things in everyday life, such as a drop on a window pane that seems to slide down randomly, or the sleeve of a sweater that seems to soak up water when washing hands.

Nature has a head start in this effect and has produced creatures that can walk on water because they take advantage of the water's surface tension. The flora also uses surface tension, whether it's trees that wouldn't reach the size we know without the capillary effect, or the lotus flower, which, with its water-repellent (hydrophobic) surface, ensures that water rolls off and takes dirt with it in the process.

Porous media, through their use in oxygenators, became lifesavers during the Corona pandemic by reoxygenating blood. The potential applications and necessities of this phenomenon could be demonstrated with many more examples. This work aims to describe the dynamics of capillary rise through simulations. A porous medium can be simplified as a collection of many small tubes. Insights from these small tubes can then be extrapolated to determine the behavior of the porous medium. Therefore, experiments with both porous media and individual capillaries are of great interest to understand how the rise in the capillary is designed. Simulations of these processes are also increasingly being carried out, as they have the advantage of fixing certain relevant material properties to examine their influence, or to look into areas that would not be possible with a conventional experimental setup.

In this work, the rise of a liquid column (water) in a capillary is investigated. Specifically, for a two-phase system, the area around the interface in the water phase is examined, and how dissipative processes in this region influence the rise of the water column. Possible phase changes (evaporation, boiling, condensation, etc.) are not taken into account. An isothermal and isobaric system is also assumed. All fluids treated are Newtonian, and the flow can be assumed to be Poiseuille flow. Furthermore, newly implemented boundary conditions of the used solver, which are supposed to better represent the behavior of the contact line and contact angle, will also be checked.

This work will first discuss important findings in the description of capillary rise, the contact line, and the simulation of such problems with phase field methods in Chapter ???. This is followed by an overview of the important influencing factors of wetting and

their influence on the topics discussed in Chapter 2. Chapter 3 provides an introduction to the phase field method and how it is implemented to simulate such problems. Chapter 5 shows that the solver used has already shown in many other simulations that it produces correct results and is applicable to these problems. Validation of the geometries used here is not possible due to their size, as they have a radius of 3 nm. It is not currently known that there are experiments that provide reliable results with a constant cross-section and such small radii. Subsequently, Chapter 4 describes the setup of the simulations with descriptions of the geometry, material properties used, and solver settings. Finally, the results are discussed in Chapter , and an outlook for upcoming investigations is given in Chapter .

ADD
CHAP-
TER

The solver used here is `phaseFieldFoam`, which is an extension of the open-source environment `OpenFOAM-extend`. The version used of `OpenFOAM-extend` is 5.0, and the version of the solver is still in development. The further development and maintenance of the solver are carried out through a cooperation between KIT (Karlsruhe Institute of Technology) and TU Darmstadt, especially by Dr.-Ing. Xuan Cai and Dr.-Ing. Holger Marschall. The simulations for this research were conducted on the Lichtenberg high-performance computer of the TU Darmstadt.

ADD
CHAP-
TER

Here a introduction, but probably only after the most is done and the layout of the thesis is set.

The dynamics of a rising fluid in the capillary is the subject of many processes. In nature, for example, trees would not be able to grow as high as they do without the capillary effect, and in technology many processes with a porous medium exist. Porous media can be simplified as many small tubes through which a fluid travels. Therefore, this process has long been of great interest in science and yet there are many uncertainties in the description of the dynamics.

The Lucas Washburn equation, introduced in 1921 [**lucas_ueber_1918**, **washburn_dynamics_1921**], attempts to describe the height of the propagating fluid column as a function of time. This equation is sufficiently accurate for many applications.

However, due to the assumptions made in the derivation of the equation, it is clear that it cannot be applied to every problem. Therefore, there are many approaches to adapt this equation to problems and simply maintain the behaviour of the equation.

It is shown, that the Lucas Washburn equation has its problems in early stages of the imbibition [**bosanquet_lv_1923**, **quere_inertial_1997**], due to the undefined behaviour for $t = 0$ and neglecting the inertia of the fluid.

check if
quere1997
is also a
source.
Probably
talked
about
that.
Maybe
even
Wash-
burn
talked
about
that?

The early stages of the imbibition process is yet to be understood and in this work we show how the different forces are acting on the meniscus for small time steps with a simulation of the such a problem. This simulations are done with the open source framework of `foam extend`, which is a fork of `open foam`. Here the department of mathmatics of the TU Darmstadt and the KIT developed a solver for a phase field approach.

rework
this reg-
ment.

The developed solver phaseFieldFoam is maintained and developed by the department of MMA at the Tu darmstadt and ... KIT. It is using the Phase field approach to solve the Navier Stokes Equations (NSE).

In this work, first the attempts to describe the imbibition of a fluid in a capillary, especially for the early stages and small capillaries are discussed. Followed by the work, which has been done to simulate such problems with the phase field approach. Important interrelationships and derivations of the process of wetting is discussed, again followed by the equivalent numerical relations. How the simulations are setup and the results are in the chapters and .

Lucas needed to prewet the tube to get the results he predicted

In this work

ref chapter

ref chapter

ref to both chapters

chapter

chapter

2 Wetting Theory

The wetting theory describes the interaction of fluids with solid surfaces. Many processes in nature, as well as in technology, are affected by this phenomenon. In this work, the focus is on the wetting properties in capillaries, which are often used as a simplification for understanding porous media or in other processes, such as the fact that trees would not be as tall as they are today without this effect.

First, an overview of some types of wetting is presented, and the concepts of contact angle and contact line are introduced. Subsequently, the surface tension and its role in wetting are discussed. Since this work considers the dynamic rise of a water column in a capillary, the dynamic contact angle is also examined in Chapter , followed by a description of the capillary effect and its significance for the rise of a fluid in a capillary.

2.1 Surface Tension

Surface tension plays a significant role in the wetting of surfaces or in capillary rise. Therefore, it is essential to first clarify what surface tension is. In general, surface tension is a proportionality constant that depends on temperature, pressure, and the phases involved but is independent of the surface [5]. The interface separates the phases and can be interpreted differently. On a molecular level, molecules attract each other (cohesion). The interaction between two phases is called adhesion. In the case of the interaction between a liquid and a solid, adhesion can usually be neglected. In Figure 2.1, a water droplet surrounded by air is illustrated on the left. The black outer line thus represents the interface between the droplet and the air. If one now magnifies the transition area down to the molecular level (red area), one obtains the schematic representation on the right side. The blue circles are simplified representations of the water molecules, and the gray ones represent the surrounding air. Here, it is evident how, at the interface, the water molecules are no longer surrounded only by other water molecules, which is energetically unfavorable. However, since the system strives to transition into an energetically favorable state, it attempts to minimize the number of molecules lying at the interface [5].

To increase the surface area, molecules must be transported to the surface, and energy must be supplied to the system. Therefore, surface tension is also interpreted as the

mention that we are considering spontaneous cap rise (no pressure or something like that)

ref

ref

ref chapter

ref

rework

possibly ref to corresponding chapters here.

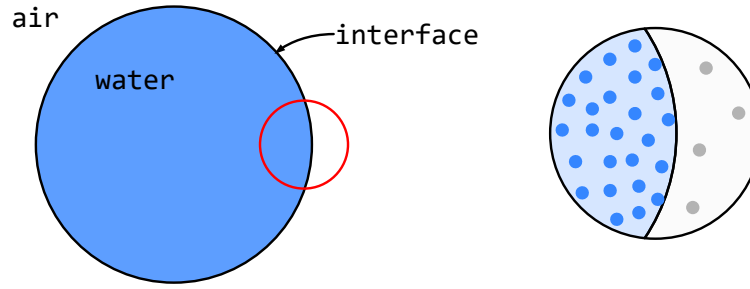


Figure 2.1: Schematic of interacting molecules in a liquid droplet and its interaction with a vapor

necessary energy required to carry a molecule to the surface.

$$dE = \sigma \cdot dA \quad (2.1)$$

with dE as the supplied energy and dA as the change in surface area.

2.2 Wetting Phenomenon

Despite the fact that the wetting of droplets is not considered in this work, it is appropriate to describe the fundamentals of wetting using this example. The concepts are the same, and many initial studies are based on this example.

In the case where the system is in equilibrium, Young derived an equation relating surface tensions to the contact angle:

$$\sigma_{LV} \cdot \cos \theta_e = \sigma_{SV} - \sigma_{SL} \quad (2.2)$$

Where σ_{LV} is the surface tension between the liquid and the gas, σ_{SV} is from the solid to the gas, and σ_{SL} is between the solid and the liquid (see Figure 2.2). If $(\sigma_{SV} > \sigma_{SL})$ holds true, a contact angle less than 90 follows; otherwise, $90 \leq \theta_e < 180$. In the case where $\sigma_{SV} = \sigma_{SL} + \sigma_{LV}$, complete wetting of the surface occurs [5].

When a droplet impacts a solid surface, different states can arise depending on the fluid-solid combination. At the point where the interface of the two fluids (droplet and surrounding fluid) meets the solid surface, the contact line is formed (see 2.2; red line). Depending on the fluid-fluid-solid combination, a contact angle θ_e is established, where the suffix e stands for equilibrium. In the case of complete wetting, the fluid spreads over the entire surface (see Figure 2.3 a)). This effect, however, is challenging to reproduce as it can be hindered by surface irregularities . As seen in Figure 2.3(b-d)), states where a droplet forms on the surface are further subdivided. For a contact angle $\theta_e < 90$, it is

ref

ref; i think it was butt

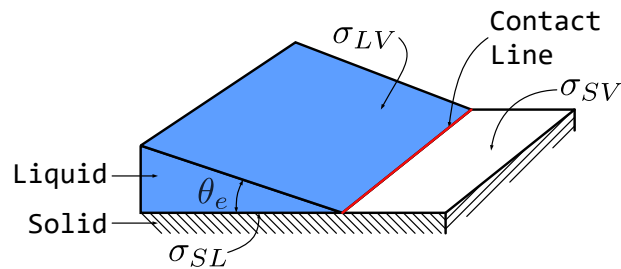


Figure 2.2: Three Phase Contact Line

termed hydrophilic (see 2.3b)), for $\theta_e > 90$ it's hydrophobic (see 2.3c)), and for a contact angle $\theta_e > 120$, it's superhydrophobic surfaces (see 2.3d)). Developing superhydrophobic surfaces is also challenging. To curve the surface of the liquid, a pressure difference must

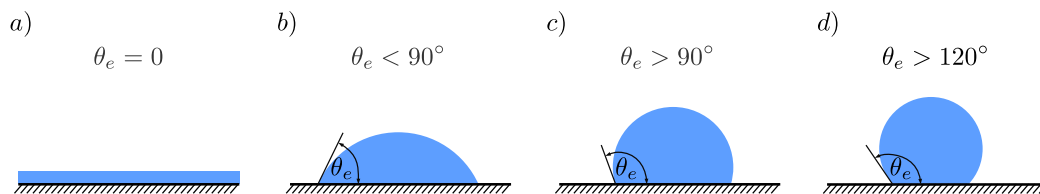


Figure 2.3: Wetting of a surface

exist. In the case of a sphere, Young and Laplace developed a relationship for the pressure difference in terms of the surface tension and radius as:

$$P_i - P_o = \Delta P = \frac{2\sigma}{R} \quad (2.3)$$

With ΔP being the pressure difference at the interface, P_i as the pressure inside the droplet, P_o the ambient pressure, and R as the radius of the sphere. For a derivation, refer to [5].

2.2.1 Dynamic Weting

Bisher wurden nur Zustände betrachtet, die Systeme im Gleichgewicht betrachten. Üblicherweise ist die Kontaktlinie jedoch in bewegung. Ist die Kontaklinie in Bewegung unterscheidet sich der Kontaktwinkel (dynamischer Kontaktwinkel θ_D) von dem im Gleichgewichtszustand[3]. Zur Beschreibung der Kontaktlinien dynamik wird der dynamische Kontaktwinkel, die relative geschwindigkeit der Kontaktlinie und der Gleichgewichtskontaktwinkel benötigt [18, 3, 8]. Die beschreibung der Kontaktlinie ist jedoch aufgrund der tatsache schwierig, dass sich die Mikroskopische Ebene bis auf die makroskopische

cite Huh and Scriven; Voinov 1976!

Ebene auswirkt. Daher ist es auch notwendig für die Phasenfeldmethode sowohl hydrodynamische Ansätze als auch Ansätze der Molekular Kinetik Theorie zu verwenden [3, 7]. In Abbildung 2.4 sind verschiedene Ansichten auf die Kontaktklinie illustriert. Der rote Kreis in a) weist auf den betrachteten Bereich im rechts daneben stehenden bild hin und kann als eine Lupe verstanden werden. Vergrößern wir den Bereich in a) sieht man die interpretation der Kontaktklinie aus sicht der Hydrodynamischen Theorie. Mit einem mikroskopischen Kontaktwinkel θ_m und dem dynamischen Kontaktwinkel θ_D (Abbildung 2.4 b)). Wird wieder auf die Kontaktklinie fokussiert, sieht man die interpretation der molekularen Kinetik Theorie (Abbildung 2.4 c)). Die illustrierten Punkte sollen auch hier wieder moleküle in vereinfachter Form darstellen.

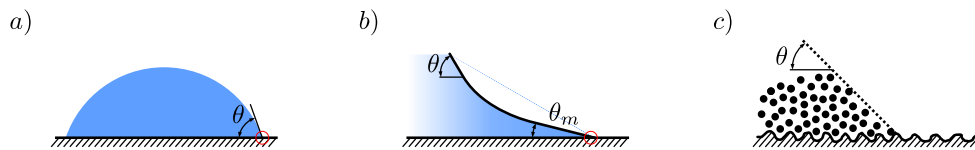


Figure 2.4: Hydrodynamic and Molecular Kinetic description of the Contact angle. Abbildung b) entspricht dem Rot umkreisten Bereich in a), bzw. c) dem aus Bild b).

Hydrodynamic Theory Der Hydrodynamische Ansatz löst die Physik der Strömung mit Hilfe der Navier Stokes Gleichungen, bekommt jedoch bei angewandter Haftbedingung an der Kontaktklinie eine Singularität an der Kontaktklinie. Um dieses Problem zu lösen wurde zum einen die Haftbedingung nahe der Wand gelockert oder die Lösung auf molekularer Ebene beschnitten [3]. In beiden Fällen wird eine kleine capillary number angenommen, was bedeutet, dass weit von der Kontaktklinie entfernt der Meniskus seine Gleichgewichtsform annimmt.

cite huh and...

Molekular Kinetik Theory Das Molekular Kinetik Modell beschreibt die Bewegung der Kontaktklinie mit einer statistischen Beschreibung der Molekularbewegung an der Kontaktklinie [2]. Im Gegensatz zum hydrodynamischen Modell beeinflussen die molekularen Prozesse an der Kontaktklinie die der großen Skalen. In dieser Betrachtung springen die Moleküle an der Kontaktklinie vor und zurück an Adsorptionsstellen auf dem festen Untergrund. Ist das System im Gleichgewicht, ist das Vor- und Zurückspringen im Gleichgewicht und die Kontaktklinie kommt zum Stehen. Ein Problem dieser Betrachtung ist es jedoch, dass dieses Modell eher qualitativ und rechenintensiv ist.

cite carlsona, blake2006

Phase Field Theory Die Phasenfeldtheorie verwendet Ansätze beider Modelle unter Verwendung der Beschreibung der freien Energie des Systems.

probably a bad end of the chapter

ref chapter Phase-Field

2.2.2 Capillary Rise

Eine Kapillare ist ein sehr dünnes Rohr in denen durch Oberflächeneffekte eine Flüssigkeit ohne äußere Krafteinwirkung auf oder absteigt. In 2.5 ist eine Kapillare mit bereits aufgestiegener Flüssigkeitssäule dargestellt. Darin sind ebenfalls die bereits bekannten Oberflächenspannungen an ihren jeweiligen Stellen markiert, sowie die wesentlichen Geometrischen parameter, wie Durchmesser ($2R$) oder höhe des entstandenen Meniskus z . Ebenfalls ist der resultierende Kontaktwinkel nach Erreichen des Gleichgewichts gezeigt θ_e . Das System in dieser Darstellung unterliegt auch Schwerkraften.

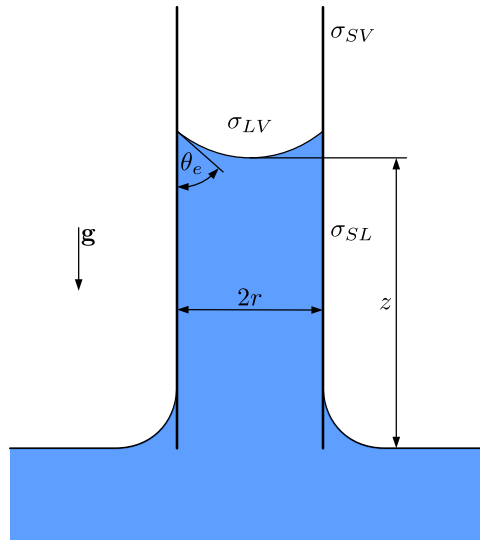


Figure 2.5: schematische Darstellung einer Kapillare in einer Flüssigkeit nachdem diese in die Kapillare eingedrungen ist

In dieser Arbeit wird ein solches System verwendet. Dabei gelten jedoch weitere Bedingungen. Es wird angenommen, dass das System isobar, isotherm und die Flüssigkeit Newtonsch ist. Weiter gilt, dass während die Wassersäule in der Kapillare aufsteigt eine Poiseuille Strömung vorliegt und kein Phasenwechsel stattfindet. Weiter wird angenommen, dass die Viskosität der Gasphase vernachlässigbar ist. Mit diesen Annahmen und Randbedingungen kann die Newtondynamik in einer Kapillare als Gleichgewicht zwischen den Trägheitskräften zur Summe der Kapillaren Kräften, der Viskosen Kräfte und Hydrostatischen Kräfte [11]

$$\frac{d}{dt}M(z, \dot{z}) = F_w - F_\eta - F_g \quad (2.4)$$

Mit $M(z, \dot{z}) = \pi r^2 \rho z \dot{z}$ als das Moment, $F_g = \pi r^2 \rho g z$ als Gewichtskraft und F_η als viskosen Widerstand, der sich aus der Annahme der mittleren Geschwindigkeit und vorliegenden

Poiseuille Strömung zu $F_\eta = 8\pi\eta z\dot{z}$ ergibt. Mit \dot{z} als mittlere Geschwindigkeit. Die Kapillaren Kräfte folgen aus der vorherigen Beschreibung der Oberflächenspannung und der Änderung der Oberfläche des Meniskus bei Änderung der aktuellen Höhe zu:

$$F_W = \sigma \frac{dA}{dz} = \sigma 2\pi r \quad (2.5)$$

Die Oberflächenspannung σ ist hierbei der Zuwachs der Oberflächenenergie durch das Benetzen der festen Wand der Kapillare. Damit gilt $\sigma = \sigma_{SV} - \sigma_{SL}$. Diese Beschreibung ist bereits aus der Young Gleichung (2.2) bekannt. Damit folgt nach einsetzen für die Kapillaren Kräfte

$$F_W = \sigma_{LV} \cdot \cos \theta_e 2\pi r. \quad (2.6)$$

Damit folgt weiter für Gleichung 2.4 nach einsetzen [11]

$$\pi r^2 \rho \frac{d}{dt}(z\dot{z}) = \sigma_{LV} \cdot \cos \theta_e 2\pi r - 8\pi\eta z\dot{z} - \pi r^2 \rho g z. \quad (2.7)$$

Erste Beschreibungen von Bell und Cameron [1] haben die Aufstiegsdynamik nicht anhand von Gleichung 2.7 beschrieben. Sie entwickelten anhand von Experimenten die Aufstiegsdynamik nach

$$z(t)^n = K \cdot t. \quad (2.8)$$

Darin sind sowohl n als auch K von der Temperatur abhängige Konstanten. 1918 entwickelte Lucas [17] und 1921 Washburn [23] unter Vernachlässigung der Trägheits- und Gravitationsterme die Lucas Washburn Gleichung wie folgt:

$$z(t) = \sqrt{\frac{r\sigma \cos \theta_e}{2\eta}} t \quad (2.9)$$

Damit entwickelten sie unabhängig voneinander eine Gleichung mit der der Kapillare Aufstieg anhand von Stoffwerten und Messgrößen beschrieben werden kann. Daher entwickelte sie über die Jahre große Popularität. Durch die Vernachlässigung einzelner Terme und Vereinfachungen im System ist diese Gleichung jedoch nicht immer präzise. Washburn selbst wies darauf hin, dass er, um die Vorhersage der Gleichung zu treffen die erfolgten Experimente so aufbauen musste, dass die Kapillare präwetted wurden. Daher wurden für verschiedene Probleme Anpassungen an diese Gleichung vorgenommen

Wu2017 [24] untersuchte mehrere Modelle der Art, dass der dynamische Kontaktwinkel untersucht wurde.

(. Darin wird jedoch stets angenommen, dass die Höhe des Meniskus nach $z(t) \sim \sqrt{t}$ anwächst. Bosanquet [4] deutete 1923 in seiner Arbeit darauf hin, dass Gleichung 2.9 für $t \rightarrow 0$ zu unphysikalischem Verhalten führen wird und entwickelte ebenfalls eine Gleichung, die dieses Problem behebt, jedoch nun auch die Trägheit mit einbezog und für frühe Zeitpunkte der Imbibition eine bessere Vorhersage des Aufstiegs geben kann.

cite papers;
dim-
itrov,...
check!!

Siegel [20] untersuchte das Aufstiegsverhalten unter mikrogravitation und stellte ein lineares Wachstum fest. Erreichte dabei jedoch nicht das Lucas-Washburn regime. Zhmud et al. [26] wies ebenfalls auf die Probleme für Zeiten nahe 0 aus Gleichung 2.9 hin und beschrieb einen quadratischen Zusammenhang für die Zeiten, in denen das Fluid in die Kapillare gezogen wird, gefolgt von dem bekannten Lucas-Washburn Regime. Dreyer et al. [10] untersuchte parallele Platten unter mikrogravitation und unterteilte den Aufstieg des Meniskus in drei Regionen. Angefangen mit einem quadratischen Wachstum, gefolgt von einer linearen Region und abschließend dem Lucas-Washburn Wachstum. Quéré [19] zeigte ein lineares Wachstum zu Beginn indem er annahm, dass in diesem Fall nur die Trägheit eine Rolle spielt. Stange [21] bestätigte die drei Regionen von Dreyer et al. [10] und leitete dimensionslose Gleichungen her, um Übergangszeiten zu entwickeln. Fries et al. [12] teilte das Wachstumsgebiet in Bereiche ein, in denen unterschiedliche Kräfte wirken. Zu Beginn dominiert die Trägheit, gefolgt von einem Übergangsgebiet in dem die viskosen Kräfte übernehmen, bis sie schließlich dominieren. Auch sie entwickelten dimensionslose Zeitpunkte an denen der Übergang stattfindet. Dellanoy et al. [9] fokusierte sich auf frühe Zeitpunkte und untersuchte viskose Fluide und bestätigte den Einfluss des prewettings der Kapillare, wie schon Washburn [23].

cite papers.
look it up
you had some.

hat darauf aufbauend experimente durchgeführt, die das lineare Regime zeigen und wiesen ebenfalls auf das von Washburn [23] benannte Problem des prewettings hin. Darüber hinaus wurde der Einfluss der Viskosität der Flüssigkeit auf das Wachstumsverhalten untersucht und mit dissipativen Regionen nahe der Kontaktlinie begründet.

elaborate on this paper!

Hier folgt nach Dellanoy die Arbeit von Ruiz Gutierrez. Darin hat er Gleichung 2.7 erweitert, um die Abweichung vom statischen Kontaktwinkel zu berücksichtigen. Auf unseren Fall Anpassen. (GL 2.7)

$$f(\dot{z}) \equiv \frac{\cos \theta_a - \cos \theta(\dot{z})}{\cos \theta_a} \quad (2.10)$$

$$\pi r^2 \rho z \frac{du}{dt} = 2\pi r \sigma \cos \theta_a + \pi r^2 \rho g z - 8\pi \sigma z \dot{z} - 2\pi r \sigma \cos \theta_a f \quad (2.11)$$

3 Phase Field Method

einleitende Worte

Wie bereits in Kapitel 2.1 beschrieben, gibt es unterschiedliche Möglichkeiten das Interface zu beschreiben. Hydrodynamische Modelle beschreiben das Interface so, dass am Übergang der Phasen die Stoffwerte springen. Ein Diffuses Interface hingegen, beschreibt die Größen anders.

picture
of inter-
faces

3.1 Phase Field Method in the Spirit of Cahn and Hillard

Die Phasenfeld Methode geht zurück auf die Idee von van der Waals [22], der das Interface zwischen zwei nicht mischbaren Fluiden aus Sicht der Thermodynamik beschrieben hat. Darin gehen die Material Eigenschaften kontinuierlich innerhalb einer dünnen Schicht ineinander über. Innerhalb dieser Schicht existieren beide Phasen. Darauf aufbauend haben Cahn und Hillard [16] eine Beschreibung der freien Energie in einem Volumen mit ungleicher Zusammensetzung in Abhängigkeit eines Ordnungsparameters C für Zeitabhängige Probleme abgeleitet. In geschlossener Form lautet diese

$$\partial C + \mathbf{u} \cdot \nabla C = \nabla \cdot (\kappa \nabla \phi(C)). \quad (3.1)$$

Darin ist \mathbf{u} die Geschwindigkeit, κ ein Diffusionskoeffizient, meist mobility genannt, und ϕ ein chemisches Potential. Der ordnungsparameter gibt an welche phase vorliegt und liegt für ein zwei phasen system zwischen -1 und 1 . Die Mobilität kann mit der Péclet Zahl in Verbindung gebracht werden, die eine Verhältnis der advektiven zu diffusiven flüssen mit einer charakteristischen Weglänge (L_{char}) und Geschwindigkeit (u_{char}), sowie einem Charakterischen chemischen Potential abbildet [6, 13]. Das chemische Potential ist als Ableitung der freien Helmholtz Energie bezüglich des Ordnungsparameters definiert [16]. Im behandelten System kann setzt sich die gesamte freie Energie aus der Mischungsenergie und der interfacial density energy zusammen. Nach [25] ist die freie Energie des Systems durch zwei Einflüsse gegeben; definiert über das Volumen Ω und die Oberfläche $\partial\Omega$

check!!!

$$F(C, \nabla C) = \int_{\Omega} f_{mix}(C, \nabla C) d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} f_w(C) dS \quad (3.2)$$

Darin ist das erste integral das der mischungsenergiedichte f_{mix} und das zweite der Wand f_w .

3.1.1 Mixing Energy

Cahn und Hillard haben eine Mischungsenergie (f_{mix}) definiert, die vom Ordnungsparameter und seinem Gradienten abhängt:

$$F(C, \nabla C) = \int_{\Omega} f_{mix}(C, \nabla C) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \left(\frac{\lambda}{\epsilon^2} \Psi(C) + \frac{\lambda}{2} |\nabla C|^2 \right) d\mathbf{x} \quad (3.3)$$

Die integration der Mischungsenergie über den Bereich ergibt die freie Helmholtz Energie des Fluidsystems und besteht aus zwei Summanden. Der erste Term trennt die Phasen voneinander ab, während der zweite Term die Phasen mischt. λ ist ein Mischungsenergie Parameter, ϵ ein Maß für die Dicke des Interfaces und Ψ ein Potential. Das Potential wird nach Ginzburg und Landau so gewählt, dass es zwei Minima an den Stellen -1 und 1 hat und ist gegeben mit

$$\Psi(C) = \frac{1}{4} (C^2 - 1)^2. \quad (3.4)$$

Daraus folgt die folgende Darstellung für das chemische Potential

$$\Phi(C) := \frac{\partial F(C)}{\partial C} = \frac{\lambda}{\epsilon^2} \Psi'(C) - \lambda \nabla^2 C. \quad (3.5)$$

check
if right
function

check if
already
men-
tioned

cite

3.1.2 Diffusive Interface

Das Cahn Hillard Modell kann Systeme mit mehreren Fluiden beschreiben. In dieser Arbeit wird jedoch nur ein binäres Fluidsystem betrachtet. In Abbildung 3.1 ist die Kontaktilinie

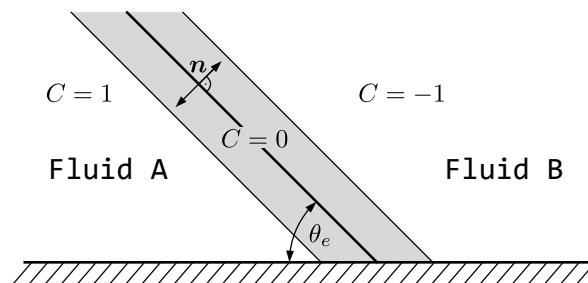


Figure 3.1: Schematische Darstellung eines Diffusiven Interfaces

eines Diffusiven Interfaces dargestellt. Der graue Bereich ist der Übergangsbereich des Ordnungsparameters und damit der Stoffgrößen. Innerhalb dieses Bereichs koexistieren beide Fluide mit ihren jeweiligen Dichten und Viskositäten. Im Gleichgewichtszustand kann das Profil von C normal zum Interface ermittelt werden, in dem die freie Energie (Gleichung 3.5) minimiert wird [6]. Dies führt dann zu einer Beschreibung des Ordnungsparameters normal zum Interface mit

$$C(n) = \tanh \left(\frac{n}{\sqrt{2}\epsilon} \right). \quad (3.6)$$

Darin ist n die normale auf dem Interface. Im Gleichgewicht bleibt die Dicke des diffusen Interfaces gleich in einem Bereich von $3/\sqrt{2}\epsilon$ gilt für den Ordnungsparameter $-0.9 \leq C \leq 0.9$. Ebenfalls im Falle des Gleichgewichts, gleicht die Oberflächenspannung dem Integral der freien Energiedichte am Interface, woraus eine Beschreibung für die Oberflächenspannung abgeleitet werden kann [15].

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \left(\frac{d\varphi}{dn} \right)^2 = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\lambda}{\epsilon} \quad (3.7)$$

3.1.3 Wall Energy

Jaqcmin [14] postulierte eine Wandenergie der Form

$$F_w = \int \sigma g(C) dA, \quad (3.8)$$

womit die Wandenergie nur noch eine Funktion abhängig von der Fluidzusammensetzung direkt an der Wand abhängig ist. Daraus lässt sich eine Funktion für die Wandenergiedichte ableiten[15].

$$f_w(C) = -\sigma \cos \theta_e \frac{C(3 - C^2)}{4} + \frac{\sigma_{SL} + \sigma_{SV}}{2} \quad (3.9)$$

Ist nur eine der Phasen anwesend, gibt diese Gleichung auch nur die jeweilige Oberflächenspannung zurück. Yue et al. weist jedoch darauf hin, dass diese Beschreibung der Wandenergie für Gleichgewichtskontaktwinkel nahe 0° oder 180° nur schwer zu reproduzieren ist und das Modell nicht in der Lage ist precursor films zu handhaben.

3.2 Cahn-Hilliard Navier Stokes Equations

$$\partial_t C + \nabla \cdot (C\mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{J} \quad (3.10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.11)$$

$$\partial_t(\rho\mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \tau - \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{J}) - \phi \nabla C + \mathbf{f}_b \quad (3.12)$$

4 Case Setup

To save computational effort, the axisymmetry is exploited in the simulation of the capillary, and only a wedge is simulated. The angle of the wedge is 5° . Furthermore, water is assumed as the liquid medium and air as the gaseous medium, both at 25° Celsius. The corresponding material properties are listed in the following table.

Table 4.1: Physical properties

fluid	density ($\frac{kg}{m^3}$)	kinematic viscosity $\frac{m^2}{s}$
water	1000	$1.00E - 06$
air	1	$1.00E - 05$

insert table

The surface tension between water and air is $0.072N/m$, and the interface thickness ϵ was chosen to be approximately $1.7nm$, corresponding to the physical interface thickness. Mobility is a factor in the phase-field simulation that is difficult to determine. Jacqmin [14] suggested an asymptotic behavior for κ of

$$\kappa = \mathcal{O}(\epsilon^\delta) \quad (4.1)$$

and showed that $1 \leq \delta < 2$. For this work, a value of $\kappa = 4 \times 10^{-18}$ was used.

Simulations were conducted for various contact angles to investigate the influence of capillary rise depending on the contact angle. The initial conditions for each of these simulations were the same. The computational grid was chosen such that the elements in the axial direction.

elaborate

In Figure 4.1, both the dimensions of the wedge and the names of the surfaces that have been assigned with boundary conditions are shown. Furthermore, it can be seen which part of the capillary is already filled with water (blue area) and which part is filled with air (gray area). The surfaces labeled **front** and **back** represent the opposing faces of the wedge. The surfaces **top** and **bottom** have a zero-gradient boundary condition and a pressure of 0 Pascal . At the wall, the no-slip condition applies, and for the order parameters, an equilibrium boundary condition is used. In this work, the usability and

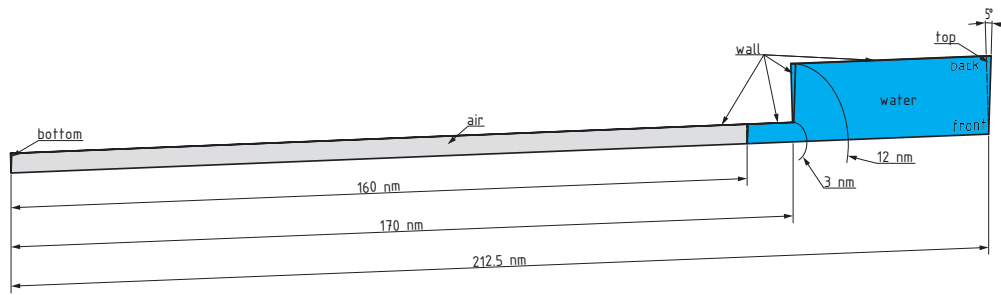


Figure 4.1: Wedge-shaped case setup

effects of the out-of-equilibrium boundary condition are examined as well. Additional simulations were conducted with the same setup as before, but with the activated boundary condition.

ref to
chapter
ooEBC

4.1 Discretization

Da es sich um eine relativ simple geometrie handelt, wurde die Geometrie direkt in der `blockMeshDict`- Datei erstellt. Die Netzdichte wurde so gewählt, dass die Kantenlänge der Kontrollvolumen 0.1nm entsprechen. Dadurch können mögliche Probleme durch geringe Kontaktwinkel minimiert werden. Simulationen mit großem Winkel wurden ebenfalls mit gleichem Rechnetzt simuliert, um eine gute vergleichbarkeit gewährleisten zu können.

One of the significant advantages of simulation is the ability to examine areas that are difficult or impossible to measure in reality. For each of the simulations, several values were extracted to assist in the later evaluation and assessment of the simulation. These include the acting viscous or capillary forces.

we used
an other
geometry.
How do i
write it
then?new
image
with new
text?

5 Validation

The phaseFieldFoam- Solver

src

- Moradi2021 Laplace Test

bodziony2023
Cai2015,
wo-
erner2021,
Samkha-
ni-
ani2021,
holtzinger,
mari-
anna?,
hagg?(sogar
mit
wedge
und amr)



6 Results



7 Outlook

- complex geometry
- temperature dependent capillary rise?
- surfactants and capillary rise?
- more fluids with other viscosities

Bibliography

- [1] J. M. Bell and F. K. Cameron. “The Flow of Liquids through Capillary Spaces”. In: *The Journal of Physical Chemistry* 10.8 (Nov. 1, 1906), pp. 658–674. ISSN: 0092-7325, 1541-5740. DOI: 10.1021/j150080a005. URL: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/j150080a005> (visited on 10/05/2023).
- [2] T.D Blake and J.M Haynes. “Kinetics of Displacement”. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 30.3 (July 1969), pp. 421–423. ISSN: 00219797. DOI: 10.1016/0021-9797(69)90411-1. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0021979769904111> (visited on 10/05/2023).
- [3] Terence D. Blake. “The Physics of Moving Wetting Lines”. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 299.1 (July 2006), pp. 1–13. ISSN: 00219797. DOI: 10.1016/j.jcis.2006.03.051. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021979706002463> (visited on 10/05/2023).
- [4] C.H. Bosanquet. “IV. On the Flow of Liquids into Capillary Tubes”. In: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 45.267 (Mar. 1923), pp. 525–531. ISSN: 1941-5982, 1941-5990. DOI: 10.1080/14786442308634144. URL: <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/14786442308634144> (visited on 10/05/2023).
- [5] Hans-Jürgen Butt, Karlheinz Graf, and Michael Kappl. *Physics and Chemistry of Interfaces*.
- [6] Xuan Cai et al. “Numerical Simulation of Wetting Phenomena with a Phase-Field Method Using OpenFOAM®”. In: *Chemical Engineering & Technology* 38.11 (Nov. 2015), pp. 1985–1992. ISSN: 0930-7516, 1521-4125. DOI: 10.1002/ceat.201500089. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ceat.201500089> (visited on 10/05/2023).
- [7] Andreas Carlson. “Capillarity and Dynamic Wetting”. KTH Royal Institute of Technology, 2012.
- [8] R. G. Cox. “The Dynamics of the Spreading of Liquids on a Solid Surface. Part 1. Viscous Flow”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 168 (-1 July 1986), p. 169. ISSN: 0022-1120, 1469-7645. DOI: 10.1017/S0022112086000332. URL: http://www.journals.cambridge.org/abstract_S0022112086000332 (visited on 10/05/2023).

-
- [9] Joachim Delannoy et al. “The Dual Role of Viscosity in Capillary Rise”. In: *Soft Matter* 15.13 (2019), pp. 2757–2761. ISSN: 1744-683X, 1744-6848. DOI: 10.1039/C8SM02485E. URL: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C8SM02485E> (visited on 10/05/2023).
- [10] Michael Dreyer, Antonio Delgado, and Hans-Joseph Path. “Capillary Rise of Liquid between Parallel Plates under Microgravity”. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 163.1 (Mar. 1994), pp. 158–168. ISSN: 00219797. DOI: 10.1006/jcis.1994.1092. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021979784710927> (visited on 10/05/2023).
- [11] Mathis Fricke et al. “An Analytical Study of Capillary Rise Dynamics: Critical Conditions and Hidden Oscillations”. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 455 (Dec. 2023), p. 133895. ISSN: 01672789. DOI: 10.1016/j.physd.2023.133895. arXiv: 2305.05939 [physics]. URL: <http://arxiv.org/abs/2305.05939> (visited on 10/05/2023).
- [12] N. Fries and M. Dreyer. “The Transition from Inertial to Viscous Flow in Capillary Rise”. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 327.1 (Nov. 2008), pp. 125–128. ISSN: 00219797. DOI: 10.1016/j.jcis.2008.08.018. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021979708009661> (visited on 10/05/2023).
- [13] Michael Holzinger and TU Darmstadt. *Direct Numerical Simulation of Dynamic Droplet Wetting on Superhydrophobic Substrates by Means of a Diffuse-Interface Phase-Field Method Using OpenFOAM*. In collab. with Technical University Of Darmstadt. Technical University of Darmstadt, 2021. DOI: 10.48328/TUDATALIB-473. URL: <https://tudatalib.ulb.tu-darmstadt.de/handle/tudatalib/2689> (visited on 10/05/2023).
- [14] David Jacqmin. “Calculation of Two-Phase Navier–Stokes Flows Using Phase-Field Modeling”. In: *Journal of Computational Physics* 155.1 (Oct. 1999), pp. 96–127. ISSN: 00219991. DOI: 10.1006/jcph.1999.6332. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999199963325> (visited on 10/05/2023).
- [15] David Jacqmin. “Contact-Line Dynamics of a Diffuse Fluid Interface”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 402 (Jan. 10, 2000), pp. 57–88. ISSN: 0022-1120, 1469-7645. DOI: 10.1017/S0022112099006874. URL: https://www.cambridge.org/core/product/identifier/S0022112099006874/type/journal_article (visited on 10/05/2023).
- [16] Cahn John W. and Hillard John E. “Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy”. In: 28.2 (Feb. 1958). DOI: 10.1063/1.1744102.
- [17] Richard Lucas. “Ueber das Zeitgesetz des kapillaren Aufstiegs von Flüssigkeiten”. In: *Kolloid-Zeitschrift* 23.1 (July 1918), pp. 15–22. ISSN: 0303-402X, 1435-1536. DOI: 10.1007/BF01461107. URL: <http://link.springer.com/10.1007/BF01461107> (visited on 10/05/2023).

-
- [18] Alireza Mohammad Karim. “A Review of Physics of Moving Contact Line Dynamics Models and Its Applications in Interfacial Science”. In: *Journal of Applied Physics* 132.8 (Aug. 28, 2022), p. 080701. ISSN: 0021-8979, 1089-7550. DOI: 10.1063/5.0102028. URL: <https://pubs.aip.org/jap/article/132/8/080701/2837259/A-review-of-physics-of-moving-contact-line> (visited on 10/05/2023).
- [19] D Quéré. “Inertial Capillarity”. In: *Europhysics Letters (EPL)* 39.5 (Sept. 1, 1997), pp. 533–538. ISSN: 0295-5075, 1286-4854. DOI: 10.1209/epl/i1997-00389-2. URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1209/epl/i1997-00389-2> (visited on 10/05/2023).
- [20] Robert Siegel. “Transient Capillary Rise in Reduced and Zero-Gravity Fields”. In: *Journal of Applied Mechanics* 28.2 (June 1, 1961), pp. 165–170. ISSN: 0021-8936, 1528-9036. DOI: 10.1115/1.3641647. URL: <https://asmedigitalcollection.asme.org/appliedmechanics/article/28/2/165/385908/Transient-Capillary-Rise-in-Reduced-and> (visited on 10/05/2023).
- [21] Michael Stange, Michael E. Dreyer, and Hans J. Rath. “Capillary Driven Flow in Circular Cylindrical Tubes”. In: *Physics of Fluids* 15.9 (Sept. 1, 2003), pp. 2587–2601. ISSN: 1070-6631, 1089-7666. DOI: 10.1063/1.1596913. URL: <https://pubs.aip.org/pof/article/15/9/2587/450889/Capillary-driven-flow-in-circular-cylindrical> (visited on 10/05/2023).
- [22] J. D. Van Der Waals. “The Thermodynamic Theory of Capillarity under the Hypothesis of a Continuous Variation of Density”. In: *Journal of Statistical Physics* 20.2 (Feb. 1979), pp. 200–244. ISSN: 0022-4715, 1572-9613. DOI: 10.1007/BF01011514. URL: <http://link.springer.com/10.1007/BF01011514> (visited on 10/05/2023).
- [23] Edward W. Washburn. “The Dynamics of Capillary Flow”. In: *Physical Review* 17.3 (Mar. 1, 1921), pp. 273–283. ISSN: 0031-899X. DOI: 10.1103/PhysRev.17.273. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.17.273> (visited on 10/05/2023).
- [24] Pingkeng Wu, Alex D. Nikolov, and Darsh T. Wasan. “Capillary Rise: Validity of the Dynamic Contact Angle Models”. In: *Langmuir* 33.32 (Aug. 15, 2017), pp. 7862–7872. ISSN: 0743-7463, 1520-5827. DOI: 10.1021/acs.langmuir.7b01762. URL: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.langmuir.7b01762> (visited on 10/05/2023).
- [25] Pengtao Yue, Chunfeng Zhou, and James J. Feng. “Sharp-Interface Limit of the Cahn–Hilliard Model for Moving Contact Lines”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 645 (Feb. 25, 2010), pp. 279–294. ISSN: 0022-1120, 1469-7645. DOI: 10.1017/S0022112009992679. URL: https://www.cambridge.org/core/product/identifier/S0022112009992679/type/journal_article (visited on 10/05/2023).

-
- [26] B.V. Zhmud, F. Tiberg, and K. Hallstensson. “Dynamics of Capillary Rise”. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 228.2 (Aug. 2000), pp. 263–269. ISSN: 00219797. DOI: 10.1006/jcis.2000.6951. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021979700969510> (visited on 10/05/2023).