Разработка метода LS-STAG для исследования сдвиговых течении ньютоновских и неньютоновских жидкостей

Еламан МАКСУМ

Казахский Национальный университет имени Аль-Фараби

Руководитель: **Мадина ТУНГАТАРОВА**

Со-руководители: **Йоанн ШЕНИ**

Оливье БОТЕЛЛА

17 Октября 2019

Контекст

Эта работа является частью международного исследовательского проекта POWDERREG. Одной из целей которого является получение макроскопической модели потока зерна.

Одним из перспективных путей оптимизации транспортных свойств дисперсий является применение к ним управляемых колебаний.

В лабораторий LEMTA была разработана инновационная реологическая модель:

$$\eta = \eta(\dot{\gamma}, \lambda)$$

где, $\dot{\gamma}$ - скорость сдвига и λ структурный параметр. $\dot{\gamma} = (\nabla \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v}^T)$

Если $\lambda = 0$, мы имеем обобщенную ньютоновскую жидкость. То есть напряжение сдвига является функцией скорости сдвига.

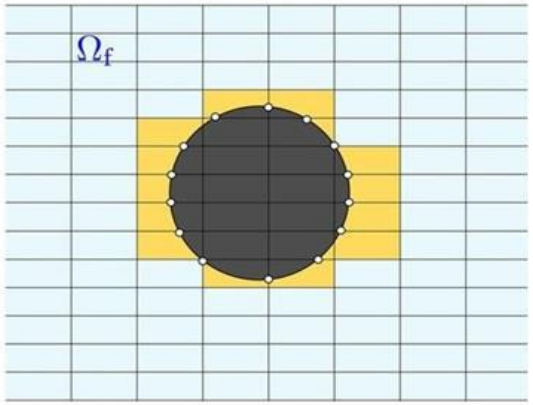
Метод LS-STAG

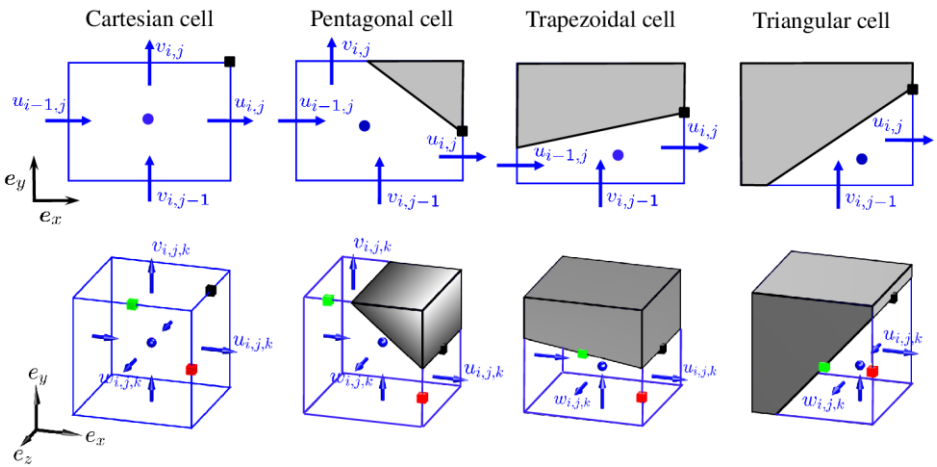
- Внутренний код разрезанная ячейка/погруженная граница (cut-cell/IB): *(Cheny & Botella, JCP 2010)*
  - *LS-STAG* значит *L*evel *S*et-*STAG*gered

    (*Уровень множества - Шахматный*)

Функция Level-Set:
- ❑ $\phi(x, y) < 0$, жидкий регион;
- ❑ $\phi(x, y) > 0$, твердый регион;
- ❑ $\phi(x, y) = 0$, граница.

Шахматное расположение переменных:
- ❑ ϕ_{ij} в вершине ячейки
- ❑ векторы скорости в центрах граней
- ❑ давление на центроиде ячеек





- Текущие возможности:
- Код был проверен для ньютоновских ($\eta = const.$) и неньютоновских ($\eta = \eta(\dot{\gamma})$) потоков жидкости в экструдированной 3D геометрии *(Nikfarjam et al, CPC 2018)*

Пространственная точность метода была улучшена благодаря Методу Алмазных Схем *(Portelenelle et al, 2018)*

- Преимущества относительно других кодов ВГ :
  - Декартовые сетки: легко генерировать
  - Декартовы методы являются точными
  - Сравнительно быстрое вычисление
  - “Открытый” код на Фортране: любой конституционный закон может быть реализован.

Таким образом, мы ожидаем улучшения в неньютоновских вычислениях !!!

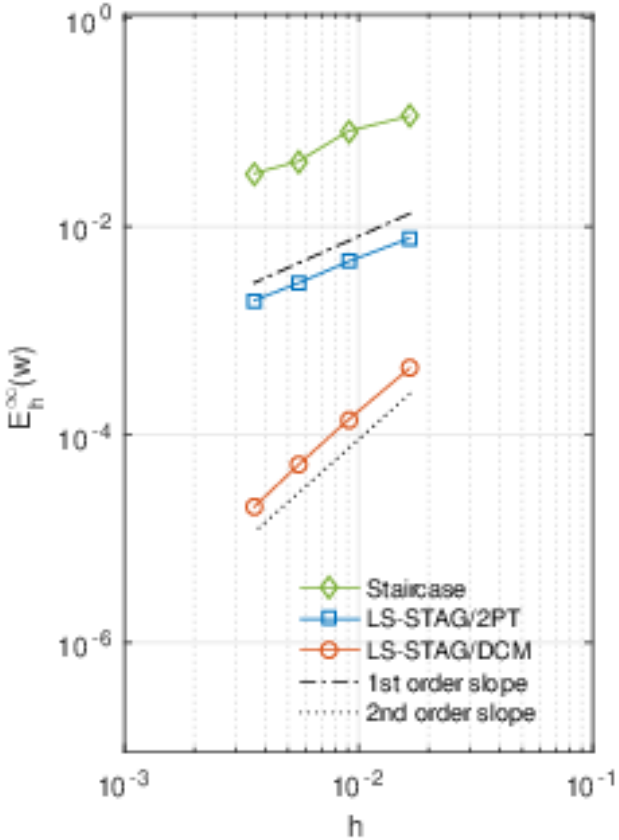
Метод Алмазной схемы

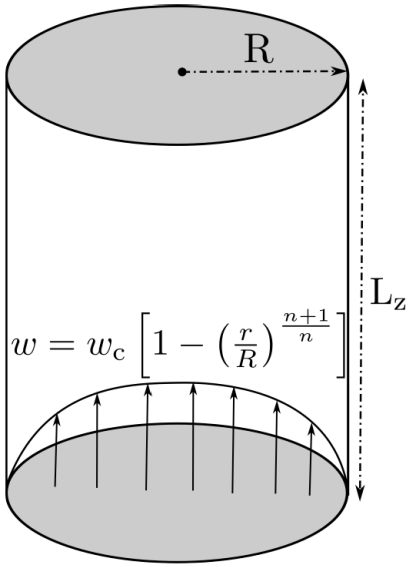
- Brice Portelenelle (защита диссертаций будет в Ноябре 2019) реализовал *Метод Алмазной Схемы*:

Поток Хагена-Пуазейля:

- Степенной закон вязкости : $\eta(\dot{\gamma}) = k\dot{\gamma}^{n-1}$
  (n : степенной индекс)

- Ньютоновская жидкость : $n = 1$



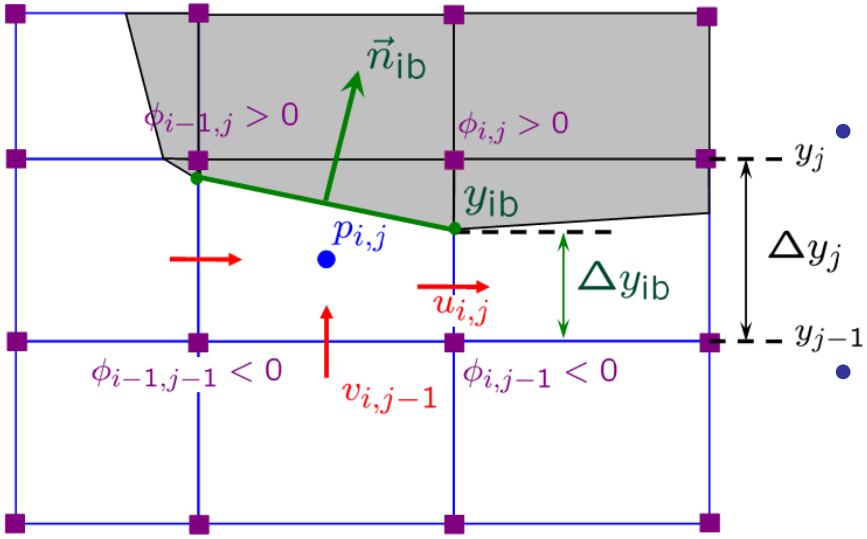


$v_{i,j-1}$ $v_{i,j-1}$

LS-STAG для 2D вычислении

Геометрические параметры для 2D случая

Шахматная сетка рядом с ПГ (погруженная граница)



уровня множества

- Level-set (LS) функция $\phi_{i,j}$ хранится в вершинах ячеек
- Соотношение грани к ячейке $\theta^u_{i,j}$ и $\theta^v_{i,j}$

$$\theta^u_{i,j} = \frac{\phi_{i,j-1}}{\phi_{i,j-1} - \phi_{i,j}} \text{ since } \phi\left(x_i, y^{\text{ib}}_{i,j}\right) = 0$$

- Векторы площади отношения грани к ячейке: $\boldsymbol{n}_{\text{f}}\Delta S$

$$[n_x \Delta S]^{\text{ib}}_{i,j} = \left(\theta^u_{i-1,j} - \theta^u_{i,j}\right)\Delta y_j \qquad [n_y \Delta S]^{\text{ib}}_{i,j} = \left(\theta^v_{i,j-1} - \theta^v_{i,j}\right)\Delta x_i$$

- Площадь поверхности:

$$\Delta y_{\text{ib}} = \theta^u_{i,j}\Delta y_j$$

- Объем ячейки вычисляется формулой Гаусса:

$$V = \frac{1}{N_{\text{dim}}}\sum_{\text{faces}} \boldsymbol{x}_{\text{ib}} \cdot \boldsymbol{n}_{\text{f}}\Delta S$$

- Все формулы действительны для всех вырезанных ячеек
- Только эти геометрические параметры необходимы для выполнения дискретизации LS-STAG

Объем 3D вырезанной ячейки:

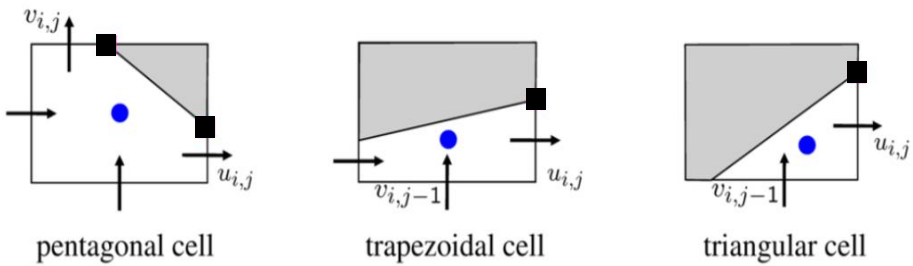
$$V_{i,j,k} = \frac{1}{3}\left[\theta^u_{i-1,j,k}\left(x_{ib} - x_{i-1}\right) + \theta^u_{i,j,k}\left(x_i - x_{ib}\right)\right]\Delta y_j \Delta z_k +$$
$$\frac{1}{3}\left[\theta^v_{i,j-1,k}\left(y_{ib} - y_{j-1}\right) + \theta^v_{i,j,k}\left(y_j - y_{ib}\right)\right]\Delta x_i \Delta z_k +$$
$$\frac{1}{3}\left[\theta^w_{i,j,k-1}\left(z_{ib} - z_{k-1}\right) + \theta^w_{i,j,k}\left(z_k - z_{ib}\right)\right]\Delta x_i \Delta y_j$$

Принципы дискретизации LS-STAG : Производные скорости

- Вычисление производных скорости имеет первостепенное значение для общей точности метода
- Важнейшая часть численного моделирования неньютоновских эффектов. $\eta(\dot{\gamma})$, где $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = (\nabla \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v}^T)$

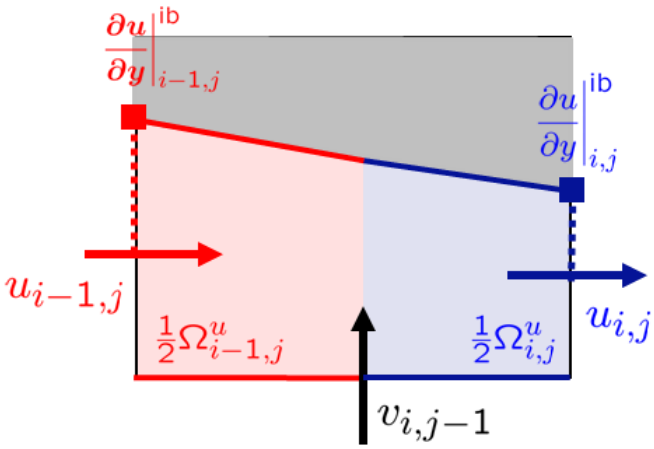
$$\nabla \boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial u}{\partial x} & \dfrac{\partial v}{\partial x} \\ \dfrac{\partial u}{\partial y} & \dfrac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}$$

▶ Distinct locations for diagonal (●) and off-diagonal (■) velocity gradient components.

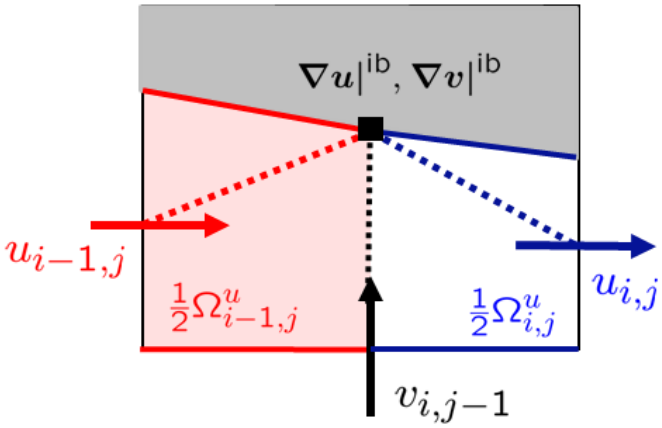


➢ Теперь в MAC все градиенты скорости вычисляются в центре погруженной границы!

LS-STAG/2PT



LS-STAG/DCM

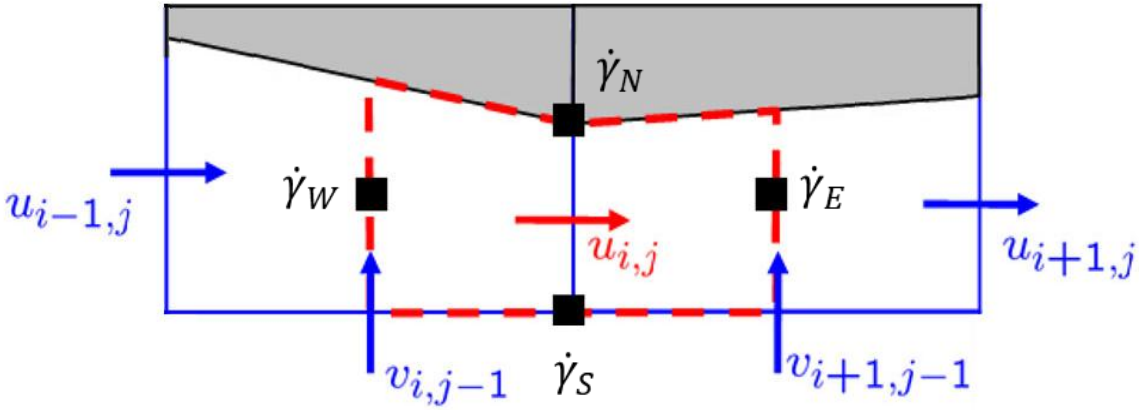


Вычисление скорости сдвига

Из-за шахматного расположения $\dot{\gamma}$ должно быть рассчитаны в разных местах на сетке LS-STAG

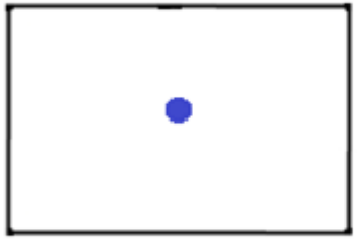
Для этого есть 3 опции:

i. Первичное вычисление в центре ячейки, а затем интерполяция в вершинах

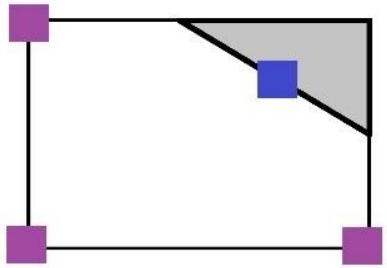


ii. Первичное вычисление в вершинах, а затем интерполяция в центр ячейки

iii. Фактические вычисления в центроиде и вершинах *(Nikfarjam et al, CPC 2018)*



— $\dot{\gamma}$ at cell centroid



— $\dot{\gamma}$ at cell corners

— $\dot{\gamma}$ at the center of IB

Первичное вычисление в центре (1ая опция)

- В центре ячейки:

$$\dot{\gamma}_w|_{i,j} = \sqrt{[\dot{\gamma}_{xx}]^2_{i,j} + [\dot{\gamma}_{yy}]^2_{i,j} + [\overline{\dot{\gamma}}_{xy}]^2_{i,j}}$$

Не нужна интерполяция для диагональных компонентов. Среднее арифметическое для недиагональных компонентов:

$$\left[\overline{\dot{\gamma}}_{xy}\right]_{i,j} = \frac{1}{4}\,\dot{\gamma}_{xy}|_{i,j} + \frac{1}{4}\,\dot{\gamma}_{xy}|_{i-1,j} + \frac{1}{4}\,\dot{\gamma}_{xy}|_{i-1,j-1} + \frac{1}{4}\,\dot{\gamma}_{xy}|_{i,j-1}$$

- Интерполяция в вершинах ячеек

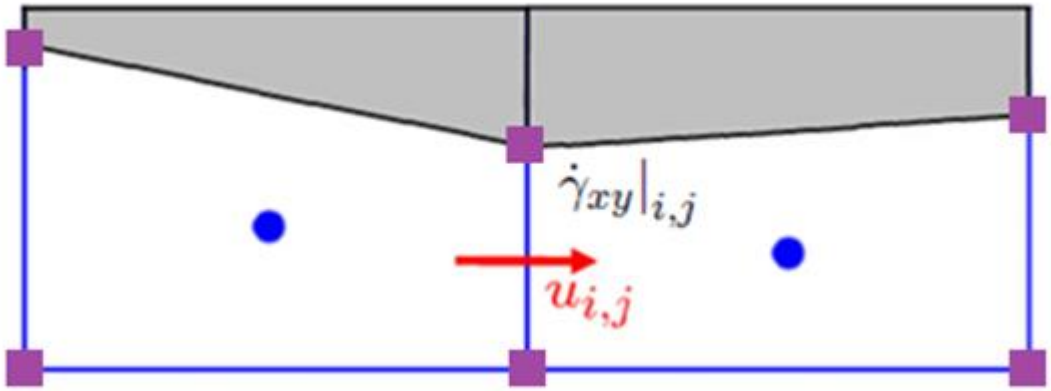
Когда нам нужна скорость сдвига в вершинах, мы используем объемно-взвешенную интерполяцию:

$$\dot{\gamma}_{\mathrm{n}} = \Big([\beta\ V\ \dot{\gamma}]_{i,j} + [\beta\ V\ \dot{\gamma}]_{i+1,j} + [\beta\ V\ \dot{\gamma}]_{i+1,j+1} + [\beta\ V\ \dot{\gamma}]_{i,j+1}\Big)/\widetilde{V}_{i,j}$$

Где,

$\beta_{i,j}$ представляет собой весовой коэф: $\beta_{i,j,k} = \begin{cases} 0 & \text{Solid cells,} \\ 1/3 & \text{Triangular cells,} \\ 1/4 & \text{Otherwise,} \end{cases}$

$\tilde{V}_{i,j}$ это средний объем : $\widetilde{V}_{i,j} = \beta_{i,j}V_{i,j} + \beta_{i+1,j}V_{i+1,j} + \beta_{i+1,j+1}V_{i+1,j+1} + \beta_{i,j+1}V_{i,j+1}$



Первичное вычисление в вершинах (2ая опция)

• В вершинах ячеек : $\dot{\gamma}_s|_{i,j} = \sqrt{[\dot{\gamma}_{xx}]^2_{i,j} + [\dot{\gamma}_{yy}]^2_{i,j} + [\overline{\dot{\gamma}}_{xy}]^2_{i,j}}$

Не нужна интерполяция для недиагональных компонентов. Для диагональных компонентов мы проверили два метода:

• Объемно-взвешенную интерполяцию

$$\dot{\gamma}_{xx}|_{i,j} = \frac{[\beta\ V\ \dot{\gamma}_{xx}]_{i,j} + [\beta\ V\ \dot{\gamma}_{xx}]_{i+1,j} + [\beta\ V\ \dot{\gamma}_{xx}]_{i+1,j+1} + [\beta\ V\ \dot{\gamma}_{xx}]_{i,j+1}}{\widetilde{V}_{i,j}}$$

• Правило Рычага

$$\dot{\gamma}_{xx}|_{i,j} = \frac{[\beta\ V\ ]_{i+1,j+1}\,[\dot{\gamma}_{xx}]_{i,j} + [\beta\ V\ ]_{i,j+1}\,[\dot{\gamma}_{xx}]_{i+1,j} + [\beta\ V\ ]_{i+1,j}\,[\dot{\gamma}_{xx}]_{i,j+1} + [\beta\ V\ ]_{i,j}\,[\dot{\gamma}_{xx}]_{i+1,j+1}}{\widetilde{V}_{i,j}}$$

Правило рычага отличается от объемно-взвешенной интерполяции использованием противоположного контрольного объема.

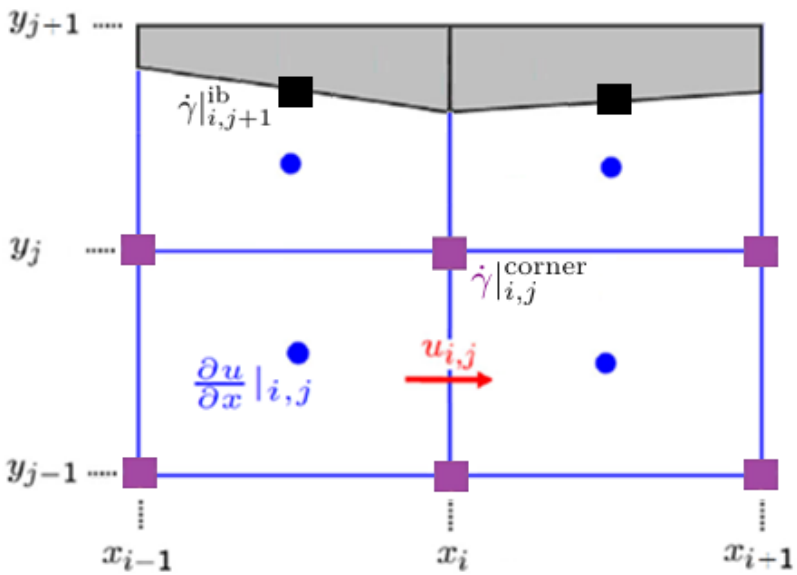
•Интерполяция в центр. Среднее арифметическое зна

Декартовые ячейки

$$\dot{\gamma}_w|_{i,j} = \frac{1}{4}(\dot{\gamma}|^{\text{corner}}_{i,j} + \dot{\gamma}|^{\text{corner}}_{i-1,j} + \dot{\gamma}|^{\text{corner}}_{i,j-1} + \dot{\gamma}|^{\text{corner}}_{i-1,j-1})$$

Вырезанные ячейки

$$\dot{\gamma}_w|_{i,j+1} = \frac{1}{3}(\dot{\gamma}|^{\text{corner}}_{i,j} + \dot{\gamma}|^{\text{corner}}_{i-1,j} + \dot{\gamma}|^{\text{ib}}_{i,j+1})$$

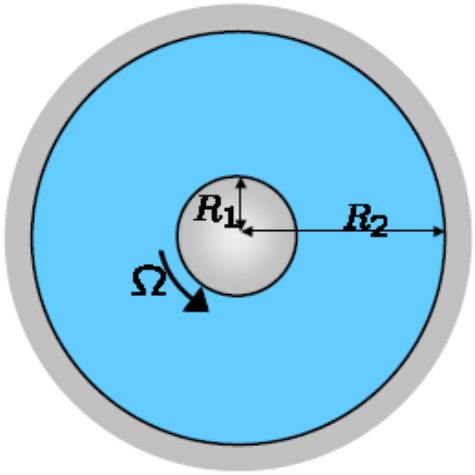


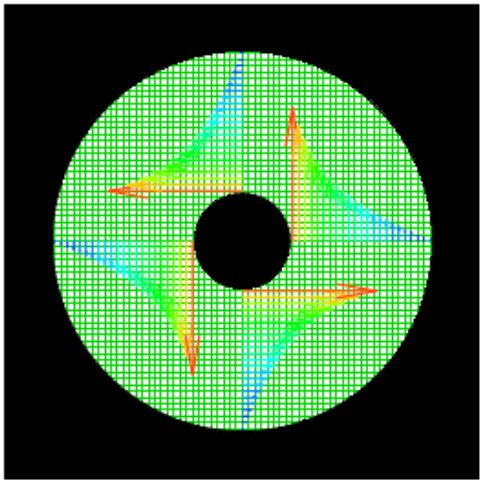
Численные результаты для 2D вычислений

Численная проверка: поток Тейлора-Куэтта

- Концентрический поток Тейлора-Куэтта::
  - Степенной закон вязкости :

$$\eta(\dot{\gamma}) = k\dot{\gamma}^{n-1}$$





•Аналитическое решение доступно для всех моделей :

$$v_\theta(r) = \frac{r^{-2/n} - R_o^{-2/n}}{R_i^{-2/n} - R_o^{-2/n}} r\Omega.$$

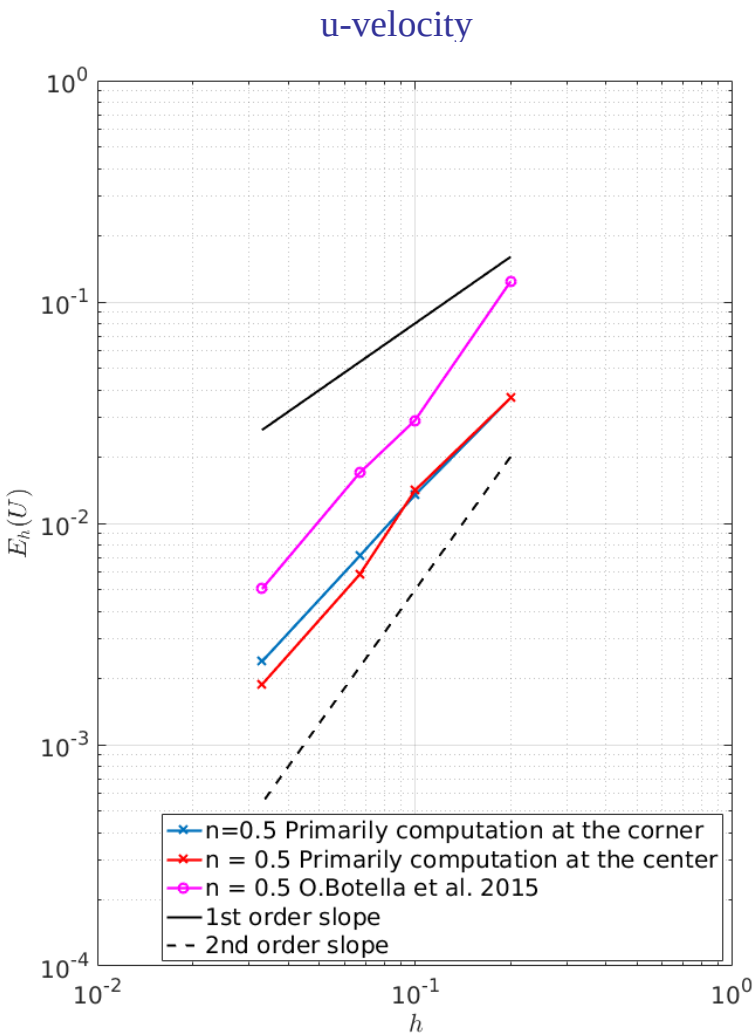
  - Ньютоновская жидкость : $n = 1$
  - Неньютоновская (сдвиговая) жидкость : $n = \frac{1}{2}$

- Численные параметры :
  - 4 равномерных сеток : $50^2, 100^2, 150^2, 300^2.$
  - Число Тейлора *Ta=1000*.

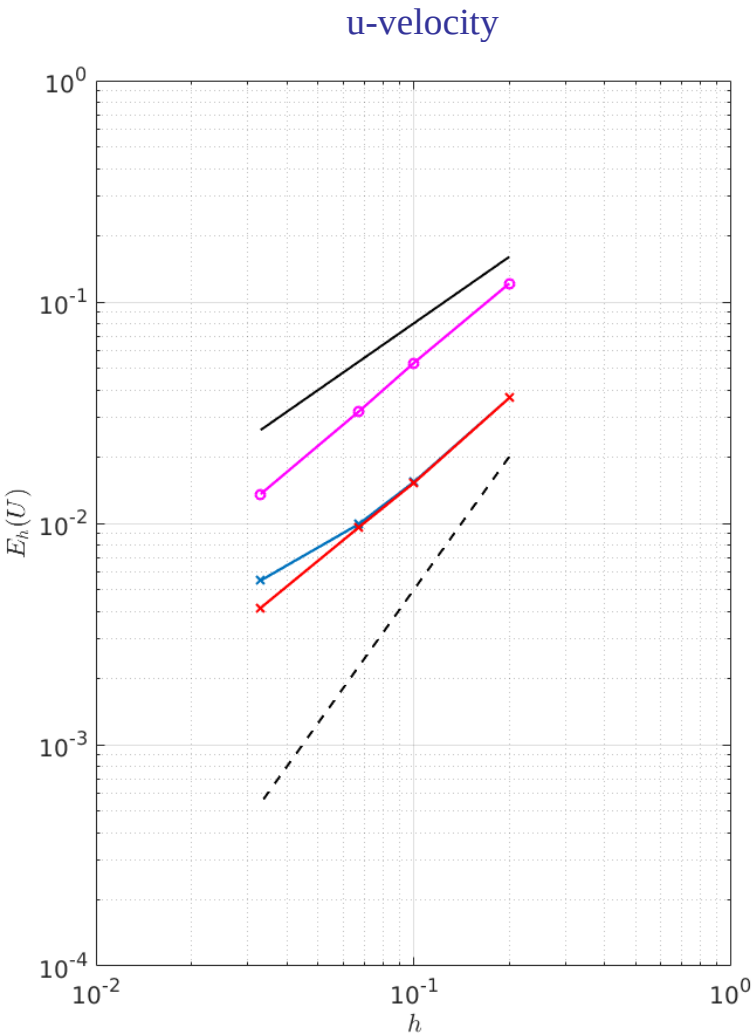
.

Результаты

- Сравнение старой и новой версий метода LS-STAG :



90 % of fluid domain



Whole fluid domain

(i.e. error in the cut-cells)

LS-STAG для 3D вычислений

Геометрические параметры для 3D случая

уровня множества

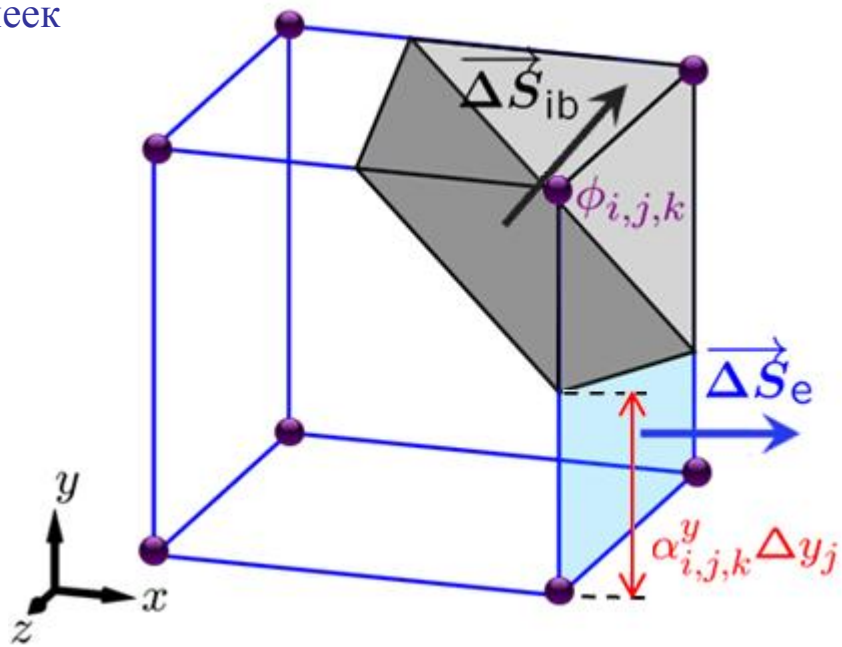
- Функция Level-set (LS) $\phi_{i,j,k}$ хранится в вершинах ячеек

- (1D) Соотношение края:

$$\alpha^{y}_{i,j,k} = \frac{\phi_{i,j-1,k}}{\phi_{i,j-1,k} - \phi_{i,j,k}} \in [0, 1]$$

- (2D) Соотношение поверхности к ячейке:

$$\theta^{w}_{i,j,k}\Delta x_i\,\Delta y_j = \frac{1}{2}\left[\alpha^{y}_{i-1,j,k}(x_{\mathrm{ib}} - x_{i-1}) + \alpha^{y}_{i,j,k}(x_i - x_{\mathrm{ib}})\right]\Delta y_j + \frac{1}{2}\left[\alpha^{x}_{i,j-1,k}(y_{\mathrm{ib}} - y_{j-1}) + \alpha^{x}_{i,j,k}(y_j - y_{\mathrm{ib}})\right]\Delta x_i$$



- Вектор площади поверхности **жидкости** и **твердой границы** :

$$\overrightarrow{\Delta S}_{\mathrm{e}} = \begin{bmatrix} \theta^{u}_{i,j,k}\Delta y_j\,\Delta z_k \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \overrightarrow{\Delta S}_{\mathrm{ib}} = \begin{bmatrix} (\theta^{u}_{i-1,j,k} - \theta^{u}_{i,j,k})\Delta y_j\,\Delta z_k \\ (\theta^{v}_{i,j-1,k} - \theta^{v}_{i,j,k})\Delta x_i\,\Delta z_k \\ (\theta^{w}_{i,j,k-1} - \theta^{w}_{i,j,k})\Delta x_i\,\Delta y_j \end{bmatrix}$$

- Объем ячейки вычисляется по формуле Гаусса:

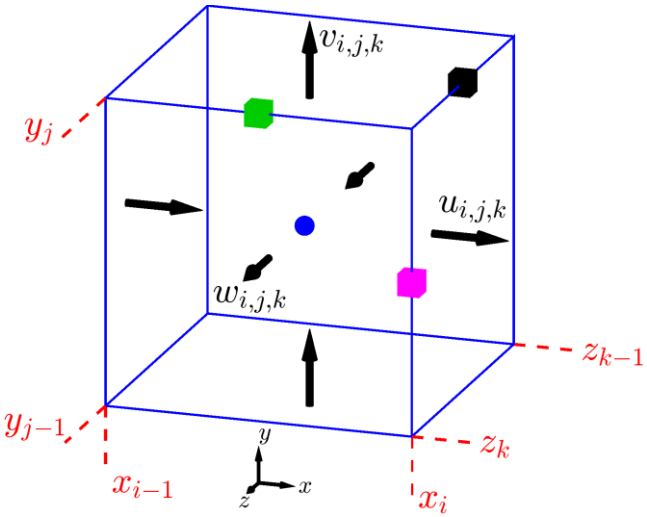
$$V = \frac{1}{N_{\mathrm{dim}}}\sum_{\mathrm{faces}} \boldsymbol{x}_{\mathrm{ib}} \cdot \boldsymbol{n}_{\mathrm{f}}\Delta S$$

Объем 3D вырезанной ячейки :

$$V_{i,j,k} = \frac{1}{3}\left[\theta^{u}_{i-1,j,k}(x_{ib} - x_{i-1}) + \theta^{u}_{i,j,k}(x_i - x_{ib})\right]\Delta y_j\Delta z_k + \frac{1}{3}\left[\theta^{v}_{i,j-1,k}(y_{ib} - y_{j-1}) + \theta^{v}_{i,j,k}(y_j - y_{ib})\right]\Delta x_i\Delta z_k + \frac{1}{3}\left[\theta^{w}_{i,j,k-1}(z_{ib} - z_{k-1}) + \theta^{w}_{i,j,k}(z_k - z_{ib})\right]\Delta x_i\Delta y_j$$

3D вычисления скорости сдвига

➢ Дискретизация производных скорости



- Компоненты скорости, расположенные в центрах граней

- В центрах клеток: давление, температура, нормальные скорости деформации :

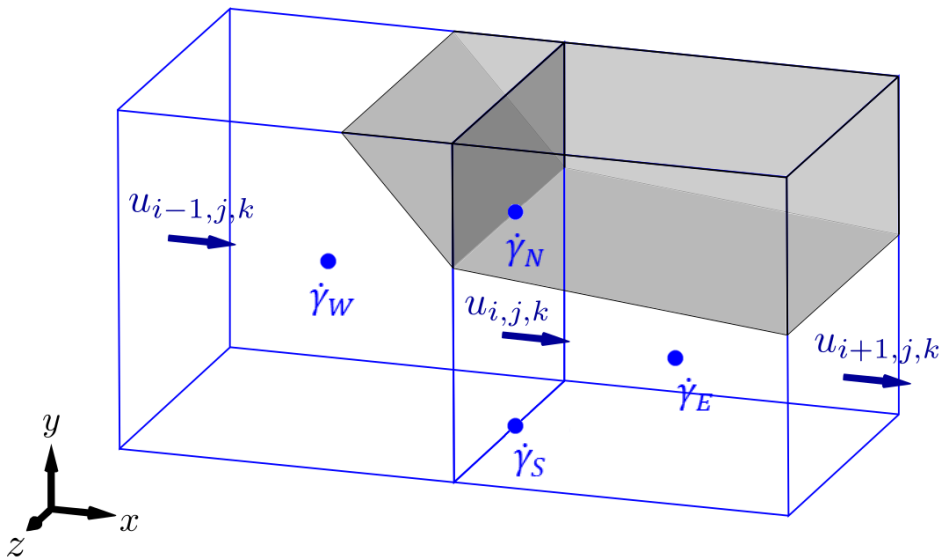
$$\dot{\gamma}_{xx} = 2\frac{\partial u}{\partial x},\ \dot{\gamma}_{yy} = 2\frac{\partial v}{\partial y},\ \dot{\gamma}_{zz} = 2\frac{\partial w}{\partial z}$$

- В средних точках кромки: компоненты деформации сдвига :

$$\dot{\gamma}_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x},\ \dot{\gamma}_{xz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x},\ \dot{\gamma}_{yz} = \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}$$

➢ Расчет скорости сдвига центроидным методом (1ая опция)

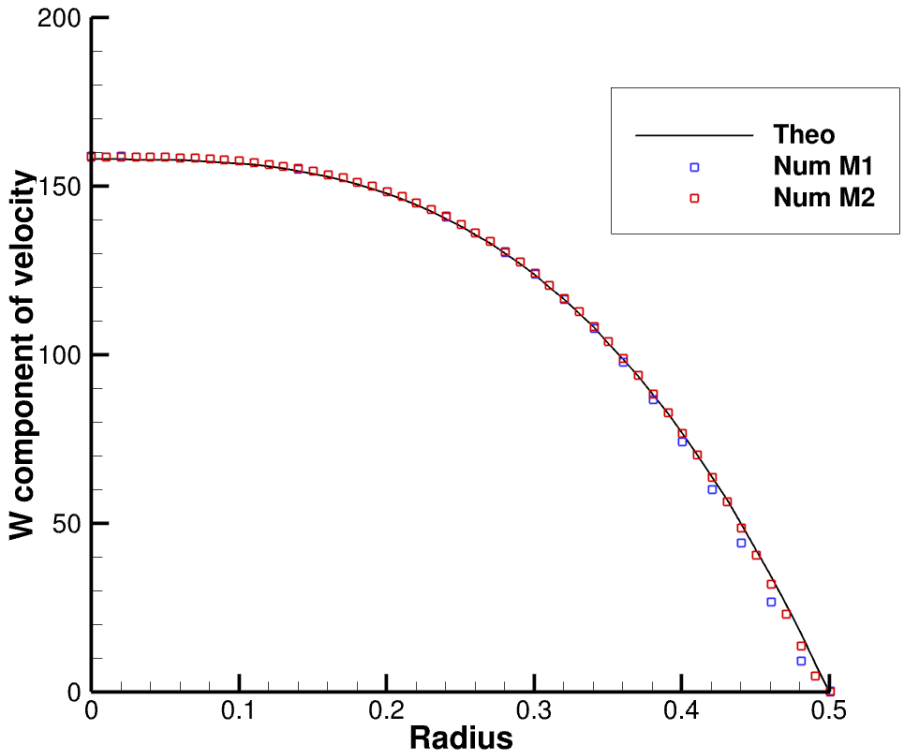
- То же, что и в 2D:
  - Нет интерполяции для диагональных членов.
  - Среднее арифметическое для недиагональных членов
- Скорость сдвига в нормальном направлении ($\dot{\gamma}_W$)
  - Уже вычислено по центроиду
- Интерполяция в средней точке края ($\dot{\gamma}_S$)
  - Мы используем объемно-взвешенную интерполяцию

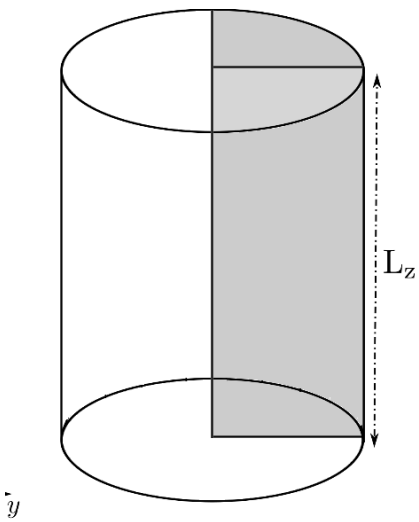


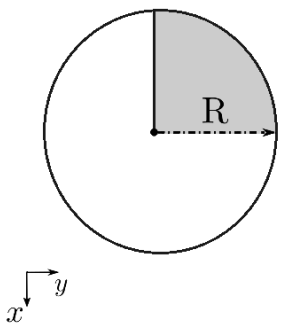
Численные результаты для 3D вычислений

Численная проверка: Поток Хагена-Пуазейля

- Поток Хагена-Пуазейля :
  - Аналитическое решение: $w(r) = w_c \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^{\frac{n+1}{n}}\right],$
  - Степенной закон вязкости : $\eta(\dot{\gamma}) = k\dot{\gamma}^{n-1}$
    (n : степенной индекс)
  - Ньютоновская жидкость : $n = 0{,}5$
  - Режим ламинарного течения с : $Re_D = \rho \frac{w_c^{2-n} D^n}{K} = 2000$
  - Профиль скорости для сеток M1(25x25x256), M2(50x50x256) и для теоретического значения
  - Численные значения соответствуют теоретическим значениям

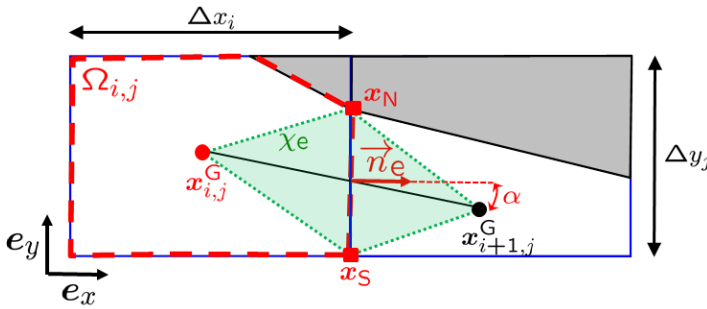


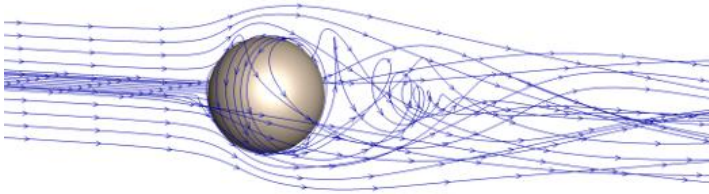


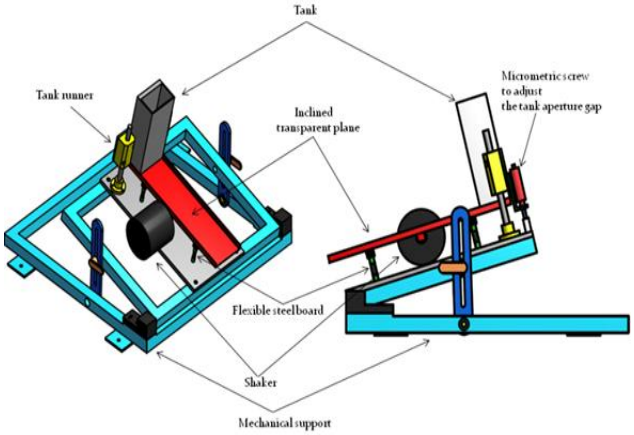


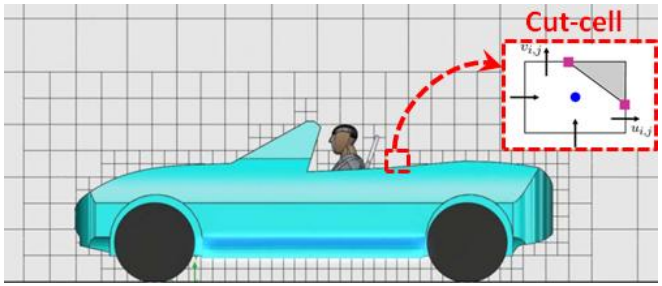
Достижения

- **Расширение LS-STAG/MAC на неньютоновские потоки в 2D.**
  - Были предложены и сопоставлены два различных варианта расчета скорости сдвига.
  - Проведено сравнение численной валидации неньютоновских течений для течения Тейлора-Куэтта с использованием MAC и 2T.
- **LS-STAG/MAC для полностью 3D геометрии**
  - Было выполнено расширение LS-STAG/MAC для неньютоновских потоков для 3D.
  - Первый вариант расчета скорости сдвига был расширен до 3D.
  - Для течения Хагена-Пуазейля были взяты профили скоростей w-компонента скорости для двух грубых сеток и сопоставлены с теоретическим значением.







Перспектива

- Полностью 3D-вычисления LS-STAG/MAC для неньютоновских потоков.
- Приложения к макроскопическому моделированию процессов зернистого течения (Проект “PowderReg”).