

ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΡΟΗΣ ΜΗ ΝΕΥΤΩΝΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ ΣΕ ΠΟΡΩΔΗ ΜΕΣΑ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ LATTICE-BOLTZMANN

Ιωάννης Γ. Ψυχογιός

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, 15780, Αθήνα

Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «Δημόκριτος», 15310, Αγία Παρασκευή, Αθήνα

Μιχαήλ Ε. Καινουργιάκης, Αθανάσιος Κ. Στούμπος

Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «Δημόκριτος», 15310, Αγία Παρασκευή, Αθήνα

Άγγελος Παπαϊωάννου

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, 15780, Αθήνα

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα εργασία παρουσιάζουμε ένα μοντέλο lattice-Boltzmann, πολλαπλών χρόνων χαλάρωσης για την προσομοίωση ροής μη Νευτωνικών ρευστών (εκθετικού νόμου) σε ψηφιακά ανακατασκευασμένη κιμωλία. Τα αρχικά αποτελέσματα που παρουσιάζουμε δείχνουν ότι ο συνδιασμός της μεθόδου lattice-Boltzmann με την τεχνική της ψηφιακής ανακατασκευής μπορούν να αποτελέσουν ισχυρό εργαλείο για την μελέτη περίπλοκων ροών σε πορώδη μέσα.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η μέθοδος lattice-Boltzmann αποτελεί μια μεσοσκοπικής κλίμακας μεθοδολογία για την επίλυση προβλημάτων της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής. Η ροή μη Νευτωνικών ρευστών με τη μέθοδο lattice-Boltzmann μελετήθηκε αρχικά από τους Aharonov και Rothman [1]. Εν συνεχεία οι Rakotomalala et al. [2] εισήγαγαν ένα μοντέλο lattice-Boltzmann πολλαπλών χρόνων χαλάρωσης και προσομοίωσαν επιτυχώς διδιάστατη ροή μεταξύ παράλληλων πλακών και ροή σε διδιάστατο τυχαίο υλικό. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούμε το μοντέλο αυτό για την προσομοίωση ροής σε τριδιάστατη ψηφιακά ανακατασκευασμένη κιμωλία.

ΨΗΦΙΑΚΗ ΑΝΑΚΑΤΑΣΚΕΥΗ

Ένα τυχαίο υλικό μπορεί να περιγραφεί πλήρως από την δείκτρια της πορώδους φάσης:

$$I(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in P \\ 0, & \mathbf{x} \notin P \end{cases}$$

όπου $P \subset \mathbb{R}^3$ είναι το σύνολο των πόρων.

Η πρώτη ροπή της I δίνει το πορώδες του υλικού (με $\langle \cdot \rangle$ συμβολίζουμε χωρική μέση τιμή):

$$\varepsilon = \langle I(\mathbf{x}) \rangle$$

Η δεύτερη ροπή της I είναι η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης του υλικού:

$$R_z(\mathbf{r}) = \frac{\langle (I(\mathbf{x}) - \varepsilon) \cdot (I(\mathbf{x} + \mathbf{r}) - \varepsilon) \rangle}{\varepsilon - \varepsilon^2}$$

Η ψηφιακή ανακατασκευή του δείγματος κλωβίας της Βόρειας θάλασσας επιτυγχάνεται με την μεθοδολογία που περιγράφεται στο [3]. Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης που χρησιμοποιούμε έχει ληφθεί από την βιβλιογραφία [4]. Η ανακατασκευή οδηγεί στην δημιουργία ψηφιοποιημένων πεδίων πορώδους 0.384 και χαρακτηριστικού μήκους $\ell=0.2 \mu\text{m}$. Όλα τα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν είναι διαστάσεων 80x80x80.

ΜΕΘΟΔΟΣ LATTICE-BOLTZMANN

Η διακριτοποιημένη (στο χώρο ταχύτητας και στο χρόνο) εξίσωση Boltzmann με την απλοποίηση BGK (Bhatnagar–Gross–Krook) για τον τελεστή σύγκρουσης, έχει τη μορφή:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t)]$$

όπου \mathbf{x} η θέση, \mathbf{e}_i η σωματιδιακή ταχύτητα, t ο χρόνος, Δt το χρονικό βήμα, και τ ο αδιάστατος χρόνος χαλάρωσης.

Η συνάρτηση κατανομής ισορροπίας $f_i^{(eq)}$ μπορεί να ληφθεί από τη συνάρτηση κατανομής Maxwell-Boltzmann εκφράζοντας τον εκθετικό παράγοντα με σειρά Taylor, και στην γενική περίπτωση μπορεί να τεθεί στην μορφή [5]:

$$f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho(\mathbf{x}, t) \left[1 + 3\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2 \right]$$

Ο συντελεστής βαρύτητας w_i εξαρτάται από το επιλεγέν σύνολο διακριτών ταχυτήτων $\{\mathbf{e}_i\}$ στον D-διάστατο χώρο. Για το μοντέλο D3Q19 (3 διαστάσεις, 19 διακριτές σωματιδιακές ταχύτητες), που εδώ χρησιμοποιούμε, είναι: $w_i = 1/3$, $i = 0$, $w_i = 1/18$, $1 \leq i \leq 6$ και $w_i = 1/36$, $7 \leq i \leq 18$.

Η μακροσκοπική πυκνότητα και ταχύτητα του ρευστού λαμβάνονται από τις δύο πρώτες ροπές της συνάρτησης κατανομής ως:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i \mathbf{e}_i$$

Το ανώτερο μοντέλο, στα όρια της ασυμπίεστότητας $\|\mathbf{u}\|/c_s \ll 1$, αναπαράγει την εξίσωση συνεχείας και την εξίσωση Navier-Stokes:

$$\frac{\partial u_a}{\partial x_a} = 0$$

$$\frac{\partial u_a}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_a}{\partial x_\beta} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_a} + \nu \nabla^2 u_a$$

όπου το κινηματικό ιξώδες δίνεται από την εξίσωση $\nu = c_s^2 (\tau - 1/2)$ και η πίεση $p = c_s^2 \rho$.

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΗ ΝΕΥΤΩΝΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ

Εξ' ορισμού για ένα μη Νευτώνικό ρευστό η σχέση που συνδέει τον δυαδικό παραμόρφωσης $\dot{\gamma} \equiv \partial u_a / \partial x_\beta + \partial u_\beta / \partial x_a$ με τον δυαδικό τάσης $\boldsymbol{\tau}$ δεν είναι γραμμική. Για την προσομοίωση ενός μη Νευτώνικού ρευστού απαιτείται η αναλυτική μορφή της συναρτησιακής σχέσης $\boldsymbol{\tau} = f(\dot{\gamma})$. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται το μοντέλο Ostwald-de Waele. Για να επιτευχθεί η προσομοίωση του μη Νευτώνικού ρευστού οι Rakotomalala et al [2] εισήγαγαν ένα τροποποιημένο τοπικό χρόνο χαλάρωσης, ο οποίος λαμβάνει υπόψιν την χωρική μεταβολή του ιξώδους, από την εξίσωση:

$$\tilde{\tau} = \frac{1}{2} + \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \left(\sqrt{\frac{1}{2} (\boldsymbol{\gamma} : \boldsymbol{\gamma})} \right)^{n-1}$$

όπου n είναι ο δείκτης ιξώδους και μ το δυναμικό ιξώδες του αντίστοιχου Νευτώνικού ρευστού.

ΣΥΝΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ

Περιοδικές συνοριακές συνθήκες εφαρμόζονται και στις τρεις κατευθύνσεις. Για να μπορέσει η ροή να οδηγηθεί προς μια κατεύθυνση χρησιμοποιείται εξωτερική δύναμη, η οποία εφαρμόζεται μετά την σύγκρουση και σαν αποτέλεσμα έχει την προσφορά ορμής. Για να επιτευχθεί αυτό η συνάρτηση κατανομής ανακατανέμεται ως εξής:

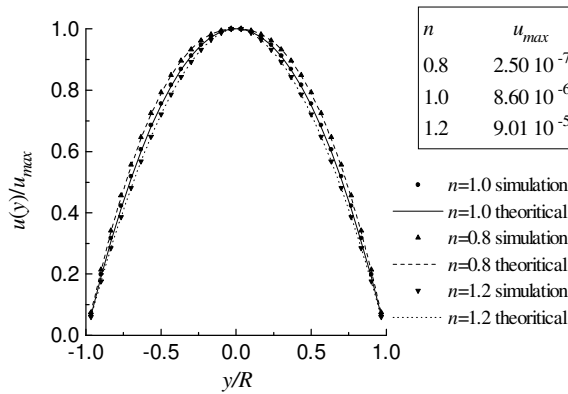
$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) + 3w_i \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{F}$$

όπου $\mathbf{F} = F_z \hat{\mathbf{z}}$ και $\hat{\mathbf{z}}$ το μοναδιαίο διάνυσμα στην διεύθυνση z .

Για την υλοποίηση της μηδενικής ταχύτητας του ρευστού επάνω στους στερεούς κόμβους του πεδίου εφαρμόζεται αναστροφή της συνάρτησης κατανομής (link bounce-back).

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

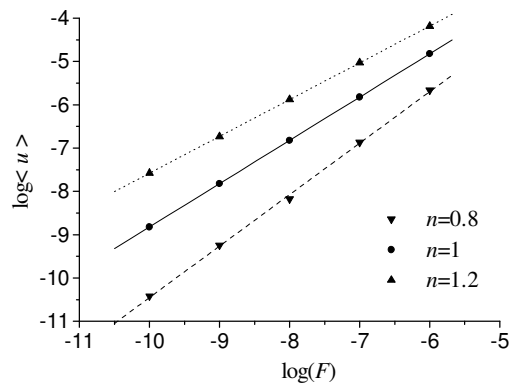
Ο κώδικας ελέγχθηκε ως προς την ορθότητα του σε πρότυπες ροές, όπως η ροή μεταξύ παραλλήλων πλακών και η ροή εντός κυλινδρικού αγωγού. Στο Σχήμα 1 φαίνονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, συγκριτικά με την αναλυτική λύση, για το προφίλ της ταχύτητας σε ροή εντός κυλινδρικού αγωγού για τις περιπτώσεις $n = 0.8, 1.0, 1.2$.



Σχήμα 1: Κανονικοποιημένη (ως προς τη μέγιστη) αξονική ταχύτητα σε ροή εντός κυλινδρικού αγωγού. Οι απόλυτες τιμές δίνονται στο ένθετο υπόμνημα.

Η εξωτερική δύναμη (πίεση πίεσης, ανά μονάδα μήκους, κατα την κατεύθυνση της ροής) είναι $\mathbf{F} = 10^{-9} \hat{\mathbf{z}}$, ο αδιάστατος χρόνος χαλάρωσης $\tau = 0.52$ και η ακτίνα $R = 30$.

Εν συνεχεία μελετήθηκε η ροή σε ψηφιακά ανακατασκευασμένη κιμωλία. Οι παράμετροι της προσομοίωσης είναι ίδιες με αυτές που αναφέρθηκαν προηγουμένα. Στο Σχήμα 2 φαίνεται η μέση ταχύτητα του ρευστού, συναρτήσει της εφαρμοζόμενης δύναμης, για διάφορες τιμές του δείκτη ιξώδους.



Σχήμα 2: Μέση ταχύτητα συναρτήσει της εφαρμοζόμενης δύναμης για διάφορες τιμές του δείκτη ιξώδους n .

Για την περίπτωση του Νευτωνικού ρευστού ($n=1$) η διαπερατότητα (permeability) μπορεί να υπολογισθεί από την εξίσωση Darcy $\langle \mathbf{u} \rangle = -(k/\mu) \nabla P$. Με $\nabla P = \mathbf{F} = 10^{-9} \hat{\mathbf{z}}$ λαμβάνουμε : $k/\ell^2 = 0.1$. Δοθέντως ότι $\ell = 0.2 \mu\text{m}$ η απόλυτη διαπερατότητα είναι 4 mD, το οποίο είναι σε εξαιρετική συμφωνία με την τιμή που αναφέρουν οι [4].

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Aharonov E., Rothman D.H., 1993, Non Newtonian Flow (through Porous Media): A Lattice Boltzmann Method, Geophys. Res. Lett., 20, pp. 679-682.
- [2] Rakotomalala N., Salin D., Watzky P. 1996, Simulations of viscous flows of complex fluids with a Bhatnagar, Gross, and Krook lattice gas, Phys. Fluids, 8, pp.3200-3202.
- [3] Adler P.M., 1992, Porous Media: Geometry and Transports, Butterworth, London.
- [4] S. Bekri, K. Xu, F. Yousefian, P.M. Adler, J.-F. Thovert, J. Muller, K. Iden, A. Psyllos, A.K. Stubos and M.A. Ioannidis, 2000, Pore geometry and transport properties in North Sea chalk, J. Petroleum Science and Engineering, 25, 107.
- [5] Xiaoyi He, Li-Shi Luo, A priori derivation of the lattice Boltzmann equation, Phys. Rev. E, VOLUME 55, NUMBER 6