ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΛΑΣΤΟΙΞΩΔΟΠΛΑΣΤΙΚΗΣ ΡΟΗΣ ΣΕ ΚΛΕΙΣΤΗ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ ΜΕ ΚΙΝΟΥΜΕΝΟ ΤΟΙΧΩΜΑ

Αλέξανδρος Συράκος, Ιωάννης Δημακόπουλος, Ιωάννης Τσαμόπουλος

Εργαστήριο Μηχανικής Ρευστών και Ρεολογίας, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών syrakos@upatras.gr, dimako@chemeng.upatras.gr, tsamo@chemeng.upatras.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην εργασία αυτή προτείνεται μια μέθοδος Πεπερασμένω Όγκων για την προσομοίωση ελαστοιζωδοπλαστικών ροών, μοντελοποιημένων σύμφωνα με το καταστατικό μοντέλο του Saramito (2009). Η μέθοδος συγγενεύει με αντίστοιχες μεθόδους για ιζωδοελαστικές ροές. Είναι εφαρμόσιμοη σε συντοπισμένα πλέγματα, δομημένα και μη-δομημένα, και περιλαμβάνει μια καινούρια μέθοδο σταθεροποίησης της πίεσης, τύπου «παρεμβολής ορμής». Η σταθεροποίηση των ταχυτήτων και των τάσεων επιτυγχάνεται μέσω μιας τεχνικής προσθαφαίρεσης τεχνητών όρων διάχυσης στην εξίσωση ορμής, και της χρήσης του σχήματος υψηλής ανάλυσης CUBISTA στην καταστατική εξίσωση. Για τη χρονική διακριτοποίηση χρησιμοποιείται ένα σχήμα ακρίβειας 2^{ης} τάξης με μεταβλητό χρονικό βήμα. Η μέθοδος χρησιμοποιείται για την προσομοίωση της ροής ενός πηκτώματος τύπου Carbopol σε μια τετράγωνη κλειστή κοιλότητα, και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με αυτά που δίνει το κλασικό ιζωδοπλαστικό μοντέλο Herschel-Bulkley. Πραγματοποιούνται προσομοιώσεις για διάφορες ταχύτητες του άνω τοιχώματος, με συνθήκες ολίσθησης και μη-ολίσθησης στο τοίχωμα, και με διαφορετικές αρχικές συνθήκες όσον αφορά τις τάσεις, Επίσης, εξετάζεται η παύση της ροής μετά από απότομη ακινητοποίηση του άνω τοιχώματος.

Λέξεις Κλειδιά: Ελαστο-ιξωδοπλαστικότητα, μη-Νευτώνια ρευστομηχανική, αριθμητική προσομοίωση, μέθοδος πεπερασμένων όγκων.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα ιξωδοπλαστικά ρευστά είναι υλικά τα οποία ρέουν εφόσον οι ασκούμενες σε αυτά τάσεις υπερβαίνουν σε μέγεθος μια κρίσιμη τιμή, την τάση διαρροής (yield stress), ενώ σε διαφορετική περίπτωση συμπεριφέρονται ως στερεά. Τα υλικά αυτά χαρακτηρίζονται από πλήρη αντιστρεψιμότητα των δομικών αλλαγών που προκαλούνται από την πλαστική παραμόρφωση (Coussot (2017, 2018)), σε αντίθεση με τα κοινά στερεά τα οποία επίσης μπορούν να υποστούν πλαστική παραμόρφωση η οποία όμως προκαλεί μόνιμες αλλαγές σε αυτά. Στην κατηγορία των ιξωδοπλαστικών υλικών ανήκουν υλικά όπως αφροί, γαλακτώματα, κολλοειδή και φυσικά πηκτώματα, και ο μηχανισμός μέσω του οποίου εκδηλώνεται η ύπαρξη τάσης διαρροής μπορεί να διαφέρει σε κάθε κατηγορία υλικού (Bonn et al. (2017)), αν και σε κάθε περίπτωση σχετίζεται με την πολύπλοκη μικροσκοπική δομή του υλικού. Τα υλικά αυτά παρουσιάζουν ενδιαφέρον σε αρκετές βιομηχανίες (πετρελαιοειδών, κατασκευών, καλλυντικών, τροφίμων κ.α.).

Ο πρώτος ο οποίος μελέτησε σε βάθος αυτήν την κατηγορία υλικών ήταν ο Eugene Bingham (1922), ο οποίος πρότεινε και την γνωστή καταστατική εξίσωση που φέρει το όνομά του για την περιγραφή της συμπεριφοράς τους. Στον περίπου ένα αιώνα που μεσολάβησε από τότε έχουν προταθεί και άλλες καταστατικές εξισώσεις, με πιο πετυχημένη αυτή των Herschel & Bulkley (1926) και την τριδιάστατη γενίκευσή της (Hohenemser & Prager (1932)), όμως μέχρι πολύ πρόσφατα η επικρατούσα υπόθεση στην οποία βασίζονταν αυτές οι καταστατικές εξισώσεις ήταν ότι το υλικό, και στην στερεή και στην ρευστή μορφή του, συμπεριφέρεται ανελαστικά, με κάποιες εξαιρέσεις (π.χ. Oldroyd (1947)). Η θεώρηση αυτή οδηγεί σε ασυνεχείς καταστατικές εξισώσεις όπου η κατάσταση της στερεής φάσης δεν είναι καλώς ορισμένη, και η επίλυση των οποίων για την πραγματοποίηση διδιάστατων και τριδιάστατων προσομοιώσεων απαιτεί εξειδικευμένες τεχνικές (Mitsoulis & Tsamopoulos (2017), Saramito & Wachs (2017)).

Εντούτοις, τα τελευταία χρόνια έχει αναγνωριστεί ότι σε πολλές περιπτώσεις αυτές οι κλασικές ιξωδοελαστικές καταστατικές εξισώσεις δεν περιγράφουν επαρκώς την συμπεριφορά πραγματικών υλικών, των οποίων η στερεή φάση συμπεριφέρεται ελαστικά, αλλά και η ρευστή φάση συμπεριφέρεται ιξωδοελαστικά. Για το λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί ελαστοϊζωδοπλαστικές καταστατικές εξισώσεις οι οποίες περιγράφουν ταυτόχρονα ελαστική, ιξώδη, και πλαστική συμπεριφορά. Μια επιτυχημένη τέτοια εξίσωση είναι αυτή που προτάθηκε από τον Saramito (2009) η οποία εισάγει ελαστικότητα στο κλασικό μοντέλο Herschel-Bulkley, και η οποία έχει αξιολογηθεί θετικά για την προσομοίωση ροών αφρών (Cheddadi et al., 2012) και πηκτωμάτων τύπου Carbopol (Lacaze et al., 2015).

Προς το παρόν οι καταστατικές αυτές εξισώσεις έχουν δοκιμαστεί κυρίως σε ρεομετρικές ροές. Για να δοκιμαστούν σε προσομοιώσεις πολύπλοκων ροών, ώστε να αξιολογηθεί η ικανότητά τους να αναπαριστούν την συμπεριφορά πραγματικών υλικών, απαιτούνται αποδοτικοί αριθμητικοί λύτες. Οι λιγοστές πολυδιάστατες προσομοιώσεις τέτοιων ροών που υπάρχουν στην βιβλιογραφία έχουν πραγματοποιηθεί κυρίως με μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων. Στην παρούσα εργασία προτείνουμε μια μέθοδο πεπερασμένων όγκων, και την εφαρμόζουμε για την προσομοίωση της ροής σε κλειστή τετράγωνη κοιλότητα, που αποτελεί σύνηθες πρόβλημα αναφοράς για αριθμητικές μεθόδους υπολογιστικής ρευστομηχανικής.

2. ΟΙ ΔΙΕΠΟΥΣΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ

Η ελαστο-ιξωδοπλαστική ροή διέπεται από τις εξισώσεις συνέχειας και ορμής,

$$\nabla \cdot \left(\rho \underline{u}\right) = 0 \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial(\rho\underline{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\underline{u}\underline{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}$$
(2.2)

όπου ρ είναι η πυκνότητα (θεωρείται σταθερή), <u>u</u> το διάνυσμα της ταχύτητας, p η πίεση, και <u>r</u> ο τανυστής των ελαστο-ιξωδοπλαστικών τάσεων. Αυτές ορίζονται από το ελαστο-ιξωδοπλαστικό μοντέλο του Saramito (2009):

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_e + \kappa \dot{\underline{\gamma}} \tag{2.3}$$

όπου $\gamma = \nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T$ είναι ο τανυστής του ρυθμού παραμόρφωσης, κ είναι ένα Νευτωνικό ιξώδες, και <u>τ</u>_e είναι η συνιστώσα που περιλαμβάνει τα ελαστικά και πλαστικά φαινόμενα και ορίζεται από την εξίσωση:

$$\frac{1}{G} \frac{\underline{\tau}}{\underline{\tau}_{e}} + \left(\frac{\max\left(0, \tau_{e,d} - \tau_{y}\right)}{k}\right)^{1/n} \frac{1}{\tau_{e,d}} \underline{\underline{\tau}}_{e} = \dot{\underline{\gamma}}$$
(2.4)

όπου k και n είναι ο δείκτης συνοχής και ο εκθέτης του μοντέλου Herschel-Bulkley, G είναι το μέτρο ελαστικότητας, και τ_ν είναι η τάση διαρροής. Η άνω-συναγόμενη παράγωγος ορίζεται ως

$$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}_{e} \equiv \frac{\partial \underline{\underline{\tau}}}{\partial t} + \underline{\underline{u}} \cdot \nabla \underline{\underline{\tau}}_{e} - \underline{\underline{\tau}}_{e} \cdot \nabla \underline{\underline{u}} - \left(\nabla \underline{\underline{u}}\right)^{\mathrm{T}} \cdot \underline{\underline{\tau}}_{e}$$
(2.5)

Επίσης, στην εξίσωση (2.4) εμφανίζεται το μέτρο του τανυστή των αποκλινουσών τάσεων (deviatoric stress tensor),

$$\tau_{e,d} = \sqrt{\frac{1}{2} \underline{\underline{\tau}}_{e,d} : \underline{\underline{\tau}}_{e,d}} \qquad \text{``arov} \qquad \underline{\underline{\tau}}_{e,d} = \underline{\underline{\tau}}_{e} - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\underline{\underline{\tau}}_{e}) \underline{\underline{I}} \qquad (2.6)$$

όπου tr(\underline{r}) = $\tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz}$ είναι το ίχνος του τανυστή \underline{r} . Η συνάρτηση "max" στην εξίσωση (2.4) επιβάλλει ροή μόνο όταν το μέτρο του τανυστή $\underline{r}_{e,d}$ είναι μεγαλύτερο από την τάση διαρροής. Αυτό ακριβώς είναι το κριτήριο διαρροής του von Mises, που υποθέτει ότι μια ισότροπη κατάσταση τάσεων, $\underline{r}_e = c\underline{I}$, που η αποκλίνουσα συνιστώσα της, $\underline{r}_{e,d}$, είναι μηδέν, δεν μπορεί να προκαλέσει διαρροή. Το μοντέλο του Saramito (2009) μπορεί να αναπαρασταθεί με το μηχανικό ανάλογο του Σχήματος 1.



Σχήμα 1: Μηχανικό ανάλογο του ελαστοϊξωδοπλαστικού μοντέλου του Saramito (2009).

3. ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΟΓΚΩΝ

Η μέθοδος βασίζεται στην αντίστοιχη μέθοδο πεπερασμένων όγκων για ιξωδοελαστικές ροές που παρουσιάστηκε στο προηγούμενο συνέδριο (Συράκος & Δημακόπουλος, 2016): χρησιμοποιεί συντοπισμένα (δομημένα ή μη δομημένα) πλέγματα, με τις εξισώσεις συνέχειας και ορμής διακριτοποιημένες με κεντρικές διαφορές, και τους όρους συναγωγής της καταστατικής εξίσωσης με το σχήμα υψηλής ανάλυσης CUBISTA (Alves et al., 2003). Το προκύπτον σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων επιλύεται με τον αλγόριθμο SIMPLE με έναν επιταχυντή πολλαπλών πλεγμάτων. Για περισσότερες λεπτομέρειες ο αναγνώστης παραπέμπεται στην εργασία των Συράκου και Δημακόπουλου (2016). Η παρούσα εργασία θα επικεντρωθεί σε μια σειρά καινοτόμων χαρακτηριστικών που εισήχθησαν για να επιτρέψουν την υλοποίηση του μοντέλου του Saramito.

Κατ'αρχήν, με βάση επιλεγμένες χαρακτηριστικές κλίμακες μήκους και ταχύτητας L και U (π.χ. το μήκος και η ταχύτητα του άνω τοιχώματος, για το πρόβλημα της ροής σε τετράγωνη κοιλότητα), ορίζουμε μια χαρακτηριστική τάση S και ένα χαρακτηριστικό ιξώδες η ως

$$S = \tau_{y} + k \left(\frac{U}{L}\right)^{n}, \qquad \eta = \eta_{y} + \frac{S}{U/L}$$
(2.7)

Οι κυριότερες καινοτομίες της μεθόδου είναι οι εξής:

Καινούρια «παρεμβολή ορμής»

Η πρώτη καινοτομία της μεθόδου είναι μια τεχνική τύπου «παρεμβολής ορμής» (Rhie & Chow, 1983). Αυτή η οικογένεια τεχνικών έχει καθιερωθεί σε συντοπισμένα πλέγματα, για την καταστολή

ψευδών ταλαντώσεων πίεσης. Η νέα παραλλαγή έχει το πλεονέκτημα έναντι της συντριπτικής πλειοψηφίας των προηγουμένως προταθεισών παραλλαγών ότι δεν εξαρτάται από τον αλγόριθμο αλγεβρικής επίλυσης SIMPLE και επομένως κατ 'αρχήν μπορεί να χρησιμοποιηθεί με οποιονδήποτε άλλο επιλύτη, π.χ. έναν επιλύτη Newton. Εδώ δεν γίνεται χρήση αυτού του πλεονεκτήματος, καθώς ο χρησιμοποιούμενος λύτης είναι πράγματι ο SIMPLE, αλλά η νέα τεχνική είναι πιο διαφανής και προσαρμόσιμη, και χρησιμοποιείται ευκολότερα σε συνδυασμό με τον επιταχυντή πολλαπλών πλεγμάτων. Με τη νέα τεχνική, η ροή μάζας μέσω μιας επιφάνειας f ενός πεπερασμένου όγκου P (βλ. Σχήμα 2) προσεγγίζεται ως

$$\dot{M}_f = \rho s_f \left[\underline{u}_{c_f} \cdot \underline{n}_f + u_f^{p_+} - u_f^{p_-} \right]$$
(2.8)

όπου s_f είναι το εμβαδό της πλευράς f, \underline{n}_f είναι το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμά της με φορά προς τα έξω του P, \underline{u}_{cf} είναι το διάνυσμα της ταχύτητας υπολογισμένο με κεντρικές διαφορές στο κέντρο της πλευράς, \underline{c}_f , και οι σταθεροποιητικοί όροι $u_f^{p^+}$ και $u_f^{p^-}$ ορίζονται ως:

$$u_f^{p+} = a_f^{mi} \left(p_P - p_{N_f} \right), \qquad u_f^{p-} = a_f^{mi} \left. \nabla p \right|_{m_f} \cdot \left(\underline{P} - \underline{N}_f \right)$$
(2.9)

όπου ο δείκτης κάθε μεταβλητής υποδηλώνει το σημείο όπου λαμβάνεται η τιμή της μεταβλητής (Σχ. 2), και η κλίση πίεσης στον όρο u_f^{p-} υπολογίζεται ως το ημιάθροισμα των κλισεων στα σημεία <u>P</u> και <u>N</u>_f, οι οποίες με τη σειρά τους υπολογίζονται με ένα σχήμα ελαχίστων τετραγώνων. Ο συντελεστής a_f^{mi} ορίστηκε ως εξής, με βάση το ισοζύγιο ορμής στην περιοχή της πλευράς f:

$$a_f^{mi} = \left[\rho \left(\left\| \underline{u}_{N_f} - \underline{u}_P \right\| + \frac{h_f}{\Delta t} \right) + \frac{2\eta}{h_f} \right]^{-1}, \qquad h_f = \left[\frac{1}{2} \left(\Omega_P + \Omega_{N_f} \right) \right]^{1/D}$$
(2.10)

όπου Δt είναι το χρονικό βήμα, η είναι το ιξώδες που δίνεται από την Εξ. (2.7), Ω_P , Ω_{Nf} είναι οι όγκοι των κελιών εκατέρωθεν της πλευράς, και D = 2 ή 3, για διδιάστατα και τριδιάστατα προβλήματα αντιστοίχως. Αυτή η τεχνική διαπιστώθηκε ότι καταστέλλει εντελώς τις ψευδείς ταλαντώσεις πίεσης.



Σχήμα 2: Ο πεπερασμένος όγκος P και οι γείτονές του, N_f . Ορίζονται τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που σχετίζονται με την πλευρά f=1.

Καινούρια τεχνική «προσθαφαίρεσης διάχυσης»

Ένα παρόμοιο ζήτημα ψευδών ταλαντώσεων προκύπτει και ως προς τις ταχύτητες επειδή, αντίθετα με την Νευτωνική περίπτωση, η εξίσωση ορμής (2.2) δεν περιλαμβάνει δεύτερες παραγώγους ταχύτητας. Αυτό το ζήτημα προκύπτει και στην ιξωδοελαστικότητα, όπου μια δημοφιλής τεχνική αντιμετώπισής του είναι αυτή της "προσθαφαίρεσης διάχυσης» (both sides diffusion) όπου τεχνητοί όροι διάχυσης προστίθενται καί στα δύο μέλη της εξίσωσης ορμής, αλλά διακριτοποιούνται με διαφορετικό τρόπο (π.χ. Pimenta & Alves (2017), Fernandes et al. (2017)). Πρόκειται για μια τεχνική που είναι συγγενής με την «παρεμβολή ορμής». Απαιτείται η χρήση κάποιου αντιπροσωπευτικού ιξώδους, που συνήθως σε μεθόδους για ιξωδοελαστικές ροές τίθεται ίσο με το πολυμερικό ιξώδες. Στην παρούσε περίπτωση, καθώς ένα τέτοιο ιξώδες δεν είναι διαθέσιμο, χρησιμοποιήσαμε το ιξώδες η που ορίζεται από την εξίσωση (2.7). Η παρούσα τεχνική λοιπόν συνίσταται στον υπολογισμό της ελαστο-ιξωδοπλαστικής δύναμης πάνω στην πλευρά f του κελιού P ως

$$F_f^r = s_f \left[\underline{n}_f \cdot \underline{\tau}_{c_f} + D_f^{r+} - D_f^{r-} \right]$$
(2.11)

όπου και πάλι οι όροι Df είναι σταθεροποιητικοί όροι, και ορίζονται ως

$$D_{f,i}^{\tau+} = -\eta \frac{u_{i,N_f} - u_{i,P}}{\left\|\underline{N}_f - \underline{P}\right\|}, \qquad D_{f,i}^{\tau-} = -\eta \nabla u_i \Big|_{m_f} \cdot \underline{d}_f$$
(2.12)

Πρέπει να σημειωθεί ότι η εξίσωση (2.11) είναι μια διανυσματική έκφραση, και επομένως και οι όροι D_f είναι και αυτοί διανύσματα – η εξίσωση (2.12) ορίζει την *i*-συνιστώσα τους. Το μοναδιαίο διάνυσμα d_f έχει κατεύθυνση από το κέντρο του P προς το κέντρο του N_f (Σχ. 2). Και πάλι η τεχνική αυτή βρέθηκε στην πράξη να εξαλείφει την πιθανότητα εμφάνισης αφύσικων ταλαντώσεων ταχύτητας. Ταυτόχρονα, επανεισάγοντας όρους διάχυσης της ταχύτητας στις εξισώσεις ορμής βελτιώνεται η σύγκλιση του επιλύτη SIMPLE.

Μεταβλητή χρονική διακριτοποίηση

Για την διακριτοποίηση των χρονικών παραγώγων των εξισώσεων ορμής και τάσεων χρησιμοποιήσαμε ένα σχήμα τριών επιπέδων, ακρίβειας 2^{ης} τάξης, παρόμοιο με αυτό που χρησιμοποιήθηκε από τους Συράκο και Δημακόπουλο (2016). Αυτή το φορά όμως επετρέψαμε την αυτόματη προσαρμογή του χρονικού βήματος. Συγκεκριμένα, το καινούριο χρονικό βήμα σχετίζεται με το παλιό με έναν παράγοντα $r ως \Delta t_{new} = r\Delta t_{old}$, όπου $r = (g_t/g)^{1/2}$, με την τιμή g_t να είναι ένας προεπιλεγμένος στόχος για το επίπεδο του χρονικού σφάλματος αποκοπής (π.χ. 10⁻³) ενώ g είναι η εκτίμηση του παρόντος σφάλματος αποκοπής που υπολογίζεται ως

$$g = \sqrt{\frac{1}{\Omega} \sum_{P} \Omega_{P} \left(\frac{\phi_{P} - \phi_{P}^{*}}{\Delta t_{old}}\right)^{2}}$$
(2.13)

Στην παραπάνω εξίσωση, Ω είναι ο συνολικός όγκος του υπολογιστικού χωρίου, η άθροιση γίνεται σε όλα τα κελλιά P του πλέγματος, φ είναι οποιαδήποτε από τις εξαρτημένες μεταβλητές (συνιστώσες των ταχυτήτων ή των τάσεων) πλην της πίεσης, όπως υπολογίστηκε στο προηγούμενο χρονικό βήμα, και ϕ^* η τιμή της που εκτιμήθηκε πριν την επίλυση του προηγούμενου χρονικού βήματος, με προεκβολή χρησιμοποιώντας το ίδιο τετραγωνικό πολυώνυμο που χρησιμοποιείται και για την διακριτοποίηση τριών χρονικών επιπέδων. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται για κάθε εξαστημένη μεταβλητή ϕ εκτός από την πίεση, και η μικρότερη τιμή του r μεταξύ όλων αυτών είναι αυτή που εν τέλει χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του μεγέθους του καινούριου χρονικού βήματος. Αυτή η διαδικασία αυτοματοποιημένης μεταβολής του χρονικού βήματος είναι πολύ χρήσιμη για τις ελαστοιζωδοπλαστικές προσομοιώσεις διότι τα χρονικά σφάλματα πρέπει να κρατηθούν σε χαμηλό επίπεδο ακόμα και όταν η προσομοίωση έχει στόχο την τελική χρονικά σταθερή κατάσταση. Αυτό συμβαίνει γιατί το μοντέλο του Saramito προβλέπει μια απειρία σταθερών καταστάσεων ανάλογα με τις αρχικές συνθήκες (Cheddadi et al., 2012), και επομένως μια ανεπαρκής χρονική διακριτοποίηση μπορεί να οδηγήσει σε λανθασμένη σταθερή κατάσταση, κατι που διαπιστώθηκε στις προσομοιώσεις που πραγματοποιήσαμε.

4. ΡΟΗ ΣΕ ΚΛΕΙΣΤΗ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ

Η μέθοδος εφαρμόστηκε στο δημοφιλές πρόβλημα αναφοράς της ροής σε κλειστή τετράγωνη κοιλότητα με κινούμενο άνω τοίχωμα. Οι παράμετροι του μοντέλου Saramito επιλέχθηκαν έτσι ώστε να αντιπροσωπεύουν ένα πήκτωμα τύπου Carbopol, που θεωρείται συνήθως ως πρωτότυπο ιξωδοπλαστικό ρευστό. Συγκεκριμένα, με βάση την προσαρμογή των παραμέτρων του μοντέλου σε πειραματικά ρεομετρικά δεδομένα πηκτώματος Carbopol 0.2% κατά βάρος που πραγματοποίησαν οι Lacaze et al. (2015), ορίσαμε $\kappa = 0$ Pa.s, $\tau_y = 70$ Pa, G = 400 Pa, k = 20 Pa.s^{0.4}, n = 0.40, και $\rho = 1000$ kg/m³. Η κοιλότητα είναι τετράγωνη με πλευρά μήκους L = 0.1 m και ο άνω τοίχος (κάλυμμα) κινείται προς τα δεξιά με ταχύτητα U = 0.025, 0.100 ή 0.400 m/s. Το πλέγμα έχει περίπου 150,000 πεπερασμένους όγκους.

Στο Σχήμα 3 τα πεδία ροής (σχεδόν) σταθερής κατάστασης απεικονίζονται με τις λευκές περιοχές να αντιπροσωπεύουν ρευστοποιημένο υλικό και τις σκιασμένες περιοχές να αντιπροσωπεύουν στερεοποιημένο υλικό, ενώ απεικονίζονται και γραμμές ροής. Απεικονίζονται τόσο τα πεδία ροής που προβλέπει το μοντέλο του Saramito (άνω σειρά διαγραμμάτων) όσο και αυτά που προβλέπονται από το κλασικό μοντέλο Herschel-Bulkley (κάτω σειρά διαγραμμάτων). Είναι ενδιαφέρον να σημειωθεί ότι στην περίπτωση του μοντέλου Saramito οι στερεοποιημένες περιοχές κοντά στον πάτο της κοιλότητας δεν έχουν ακόμη επεκταθεί στην τελική έκτασή τους, αλλά αυτό θα απαιτούσε πολύ μεγάλο (πιθανώς άπειρο) χρόνο, επειδή ο ρυθμός χαλάρωσης των τάσεων μειώνεται καθώς το μέγεθος του τανυστή αποκλινόντων τάσεων προσεγγίζει την τάση διαρροής ($τ_{e,d} \rightarrow τ_y$ στην καταστατική εξίσωση (2.4) και ο όρος "max" τείνει στο μηδέν). Ως εκ τούτου, το ρευστοποιημένο υλικό κοντά στην κάτω στερεοποιημένη ζώνη είναι στα πρόθυρα της στερεοποίησης, αλλά αυτή είναι μια πολύ αργή διαδικασία.



Σχήμα 3: Πεδία ροής όπως προβλέπονται από το μοντέλο του Saramito (πάνω σειρά, SHB) και από το μοντέλο Herschel-Bulkley (κάτω σειρά, HB), σε χρόνους που αντιστοιχούν περίπου στην σταθερή κατάσταση.

	SHB			HB		
	\tilde{x}_c	\tilde{y}_c	$ ilde{\psi}_c$	\tilde{x}_c	\tilde{y}_c	$ ilde{\psi}_c$
$U=0.025~{\rm m/s}$	0.495	0.935	-0.0211	0.500	0.933	-0.0214
$U=0.100~{\rm m/s}$	0.497	0.917	-0.0266	0.500	0.915	-0.0281
$U=0.400~{\rm m/s}$	0.500	0.899	-0.0333	0.505	0.897	-0.0352
U = 0.100 m/s, slip	0.482	0.846	-0.0125	0.500	0.853	-0.0112

Πίνακας 1: Συντεταγμένες του κέντρου της δίνης, (x_c, y_c) , και ισχύς αυτής, ψ_c , κανονικοποιημένες δια L και LU αντιστοίχως, για διάφορες περιπτώσεις.

Στον Πίνακα 1 αναγράφονται το κέντρο $(x_c/L, y_c/L)$ και η ισχύς $\psi_c/(LU)$ της κεντρικής δίνης για κάθε περίπτωση ("SHB" είναι το μοντέλο Saramito, και "HB" το κλασικό Herschel-Bulkley). Οι δίνες του μοντέλου SHB είναι μετατοπισμένες ελαφρώς προς τα αριστερά, κάτι που είναι χαρακτηριστικό της ελαστικότητας της ροής. Τα πεδία ροής ΗΒ είναι σχεδόν εντελώς συμμετρικά, εκτός από την περίπτωση U = 0.400 m/s όπου η ροή είναι ελαφρώς ασύμμετρη και η δίνη είναι μετατοπισμένη ελαφρώς προς τα δεξιά, πράγμα που οφείλεται σε φαινόμενα αδράνειας τα οποία κάνουν μια ασθενή εμφάνιση σε αυτή την υψηλή ταχύτητα (Syrakos et al., 2014). Είναι αξιοσημείωτο ότι η ασυμμετρία που προκαλείται από την ελαστικότητα, παρατηρούμενη στα αποτελέσματα SHB του Σχήματος 3 και του Πίνακα 1, έχει την αντίθετη φορά από την αδρανειακή ασυμμετρία των αποτελεσμάτων ΗΒ που παρατηρείται στο ίδιο Σγήμα και στον ίδιο Πίνακα. Αυτό δεν προκαλεί έκπληξη, δεδομένης της παρατήρησης ότι η ελαστικότητα και η αδράνεια λειτουργούν ανταγωνιστικά (Syrakos et al., 2018). Τα αποτελέσματα δείχνουν επίσης ότι οι στερεοποιημένες περιοχές είναι κάπως μεγαλύτερες στην περίπτωση SHB και ειδικότερα η διογκωμένη στερεοποιημένη περιοχή του πυθμένα ωθεί την δίνη προς το άνω τοίχωμα σε σύγκριση με την περίπτωση Herschel-Bulkley. Τα πεδία ταγύτητας SHB και ΗΒ είναι αρκετά όμοια, όπως φαίνεται από τη σύγκριση των γραμμών ροής, αλλά οι τα όρια διαρροής (σύνορα ρευστοποιημένου / στερεοποιημένου υλικού) διαφέρουν σημαντικά. Πραγματοποιήσαμε επίσης προσομοιώσεις SHB με αυξημένες τιμές του μέτρου ελαστικότητας G για να δούμε πόσο γρήγορα τα αποτελέσματα SHB συγκλίνουν στα αποτελέσματα HB, και παρατηρήθηκε (τα αποτελέσματα δεν παρατίθενται) ότι το πεδίο ταχύτητας συγκλίνει αρκετά γρήγορα, αλλά οι γραμμές απόδοσης αργούν να συγκλίνουν.



Σχήμα 4: Πεδία ροής με συνθήκη ολίσθησης στα τοιχώματα.

Δεδομένου ότι το πήκτωμα Carbopol (και τα ιξωδοπλαστικά υλικά γενικότερα) είναι αρκετά ολισθηρό, πραγματοποιήσαμε επίσης προσομοιώσεις με συνθήκη ολίσθησης τύπου Navier στα τοιχώματα. Ο συντελεστής ολίσθησης ορίστηκε σε 5×10⁻⁴ m/Pa.s, σύμφωνα με τα πειραματικά αποτελέσματα που αναφέρονται από τους Perez-Gonzalez et al. (2012) για ένα πήκτωμα Carbopol της ίδιας συγκέντρωσης με τη δική μας. Το Σχήμα 4 δείχνει τα αντίστοιχα πεδία ροής SHB και HB. και

πάλι το πεδίο ροής HB είναι πιο συμμετρικό, αλλά είναι ενδιαφέρον ότι τώρα και τα δύο μοντέλα προβλέπουν στερεοποιημένες περιοχές με κινούμενο υλικό σε επαφή με τους τοίχους, κάτι που δεν είναι εφικτό υπό συνθήκες μη-ολίσθησης. Όπως αναμενόταν, η ροή είναι ασθενέστερη από ότι στην περίπτωση μη-ολίσθησης (οι τιμές ψ_c στον Πίνακα 1).

Τέλος, πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις όπου, ξεκινώντας από τα αποτελέσματα της σχεδόν σταθερής κατάστασης που παρουσιάστηκαν προηγουμένως, ξαφνικά η ταχύτητα του άνω τοιχώματος τέθηκε ίση με μηδέν (το κάλυμμα ακινητοποιήθηκε) και παρατηρήσαμε την επιβράδυνση της ροής. Υπό αυτές τις συνθήκες, είναι γνωστό ότι κλασικά μοντέλα όπως το ΗΒ προβλέπουν πλήρη διακοπή της ροής σε πεπερασμένο χρόνο (αντίθετα με τα Νευτονικά ρευστά των οποίων η ροή μειώνεται συνεχώς αλλά ποτέ δεν παύει εντελώς) – βλ. Syrakos et al. (2016). Πράγματι, μπορεί να αποδειχθεί ότι στη ροή SHB ο ρυθμός έργου του τανυστή τάσεων είναι επαρκούς μεγέθους ώστε να μετατρέψει όλη την κινητική ενέργεια του ρευστού σε πεπερασμένο χρόνο. Ωστόσο, σε αντίθεση με την ανελαστική περίπτωση ΗΒ, τώρα δεν μετατρέπεται όλη αυτή η ενέργεια σε θερμότητα, αλλά μέρος αυτής αποθηκεύεται με τη μορφή ελαστικής δυναμικής ενέργειας, η οποία αργότερα μετατρέπεται και πάλι σε κινητική ενέργεια. Όταν στερεοποιηθεί το σύνολο του υλικού, το μοντέλο Saramito δεν προβλέπει πλέον κανένα μηγανισμό σκέδασης της ενέργειας και η παγιδευμένη ενέργεια μετατρέπεται συνεχώς από κινητική σε δυναμική και αντίστροφα, κάτι που εκδηλώνεται με μια σειρά αλλεπάληλων ελαστικών ταλαντώσεων, δεξιόστροφων και αριστερόστροφων, στον όγκο του υλικού. Το σχήμα 5 παρουσιάζει το ιστορικό των κινητικών ενεργειών για τις περιπτώσεις μη ολίσθησης και ολίσθησης όπου αρχικά η ταχύτητα του καλύμματος είναι U = 0.100 m/s (σταματει κατά τη χρονική στιγμή t =0). Η προαναφερθείσα ταλαντωτική κίνηση είναι εμφανής και στις δύο περιπτώσεις, αλλά φθίνει στην περίπτωση ολίσθησης. Αυτό εξηγείται από το γεγονός ότι, ενώ στην περίπτωση μη ολίσθησης η συνολική ενέργεια παγιδεύεται απουσία μηχανισμού διαρροής και μπορεί μόνο να μετασχηματίζεται από κινητική σε ελαστική και αντίστροφα, στην περίπτωση ολίσθησης, αντίθετα, υπάρχει ένας μηχανισμός σκέδασης: είναι η τριβή μεταξύ του υλικού και του τοίχου, καθώς αυτό ολισθαίνει πάνω στε αυτόν.



Σχήμα 5: Ιστορικό της κινητικής ενέργεια του εγκλεισμένου υλικού, κανονικοποιημένης δια την αρχική της τιμή. Ο χρόνος προσμετράται από την στιγμή της ακινητοποίησης του άνω τοιχώματος. Απεικονίζονται αποτελέσματα τόσο για την περίπτωση συνθήκης μη-ολίσθησης στα τοιχώματα (κόκκινο), όσο και για την περίπτωση ολίσθησης (μπλε). Η αρχική ταχύτητα του καλύμματος, για t < 0, είναι U = 0.100 m/s.

4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Παρουσιάστηκε μια μέθοδος πεπερασμένων όγκων για την προσομοίωση ελαστο-ιξωδοπλαστικών ροών. Η μέθοδος αποδείχθηκε επιτυχής για την προσομοίωση τέτοιας ροής σε κλειστή κοιλότητα. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με αυτά του κλασικού ιξωδοπλαστικού μοντέλου Herschel-Bulkley. Όσον αφορά την σταθερή τους κατάσταση, τα πεδία ροής με/χωρίς ελαστικότητα είναι σχετικά όμοια όσον αφορά το πεδίο ταχύτητας, αλλά παρουσιάζουν μεγαλύτερη απόκλιση όσον αφορά τις ρευστοποιημένες / στερεοποιημένες περιοχές. Η ελαστικότητα εισάγει σημαντικές διαφορές όσον αφορά τις προβλέψεις για την παύση της ροής, όπου το κλασικό ιξωδοπλαστικό μοντέλο προβλέπει συνολική παύση της ροής σε πεπερασμένο χρόνο ενώ το ελαστο-ιξωδοπλαστικό προβλέπει διαρκείς ταλαντωτικές κινήσεις. Στα μελλοντικά σχέδια περιλαμβάνεται η ενσωμάτωση στο μοντέλο και επιπρόσθετων ρεολογικών φαινομένων όπως η θιξοτροπία.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Alves M.A., Oliveira P.J., Pinho F.T. (2003), "A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection", Int. J. Numer. Methods Fluids 41, p. 47.

Bingham E.C., "Fluidity and Plasticity", McGraw-Hill, 1922.

Bonn D., Denn M.M., Berthier L., Divoux T., Manneville S. (2017) "Yield stress materials in soft condensed matter" Rev. Mod. Phys. 89

Cheddadi I., Saramito P., Graner F. (2012) "Steady Couette flows of elastoviscoplastic fluids are nonunique", J. Rheol. 56, p. 213.

Coussot P. (2017) "Bingham's heritage," Rheol. Acta, 56, p. 163.

Coussot P. (2018) "Slow flows of yield stress fluids: yielding liquids or flowing solids?," Rheol. Acta 57, p. 1.

Fernandes C., Araujo M.S.B., Ferras L.L., Nobrega J.M. (2017) "Improved both sides diffusion (iBSD): A new and straightforward stabilization approach for viscoelastic fluid flows", J. Non-Newton. Fluid Mech. 249, p. 63.

Herschel W.H., Bulkley R. (1926) "Konsistenzmessungen von gummi-benzollsungen," Kolloid-Zeitschrift 39, p. 291.

Hohenemser K.V., Prager W. (1932) "Über die ansätze der mechanik isotroper kontinua," ZAMM-Z. Angew. Math. Me. 12, p. 216.

Lacaze L., Filella A., Thual O. (2015) "Steady and unsteady shear flows of a viscoplastic fluid in a cylindrical Couette cell", J. Non-Newton. Fluid Mech. 220, p. 126.

Mitsoulis E., Tsamopoulos J. (2017) "Numerical simulations of complex yield-stress fluid flows," Rheol. Acta 56, p. 231.

Oldroyd J.G. (1947) "A rational formulation of the equations of plastic flow for a Bingham solid", Math. Proc. Cambridge 43, p. 100.

Pérez-González J., López-Durán J.J., Marín-Santibáñez B.M., Rodríguez-González F. (2012) "Rheo-PIV of a yield-stress fluid in a capillary with slip at the wall", Rheol. Acta 51, p. 937.

Pimenta F., Alves M. (2017) "Stabilization of an open-source finite-volume solver for viscoelastic fluid flows", J. Non-Newton. Fluid Mech. 239, p. 85.

Rhie C.M., Chow W.L. (1983) "Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation", AIAA J. 21, p. 1525.

Saramito P. (2009) "A new elastoviscoplastic model based on the Herschel–Bulkley viscoplastic model," J. Non-Newton. Fluid Mech. 158, p. 154.

Saramito P, Wachs A. (2017) "Progress in numerical simulation of yield stress fluid flows," Rheol. Acta 56, p. 211.

Syrakos A., Georgiou G.C., Alexandrou A.N. (2014) "Performance of the finite volume method in solving regularised Bingham flows: inertia effects in the lid-driven cavity flow", J. Non-Newton. Fluid Mech. 208-209, p. 88.

Syrakos A., Georgiou G.C., Alexandrou A.N. (2016) "Cessation of the lid-driven cavity flow of Newtonian and Bingham fluids", Rheol. Acta 55, p. 51.

Syrakos A., Dimakopoulos Y., Tsamopoulos J. (2018) "Theoretical study of the flow in a fluid damper containing high viscosity silicone oil: effects of shear-thinning and viscoelasticity", Phys. Fluids 30: 030708

Συράκος Α., Δημακόπουλος Γ. (2016) "Μέθοδος πεπερασμένων όγκων για την προσομοίωση ιξωδοελαστικών ροών", 10° Πανελλήνιο Συνέδριο για τα Φαινόμενα Ροής Ρευστών (POH 2016), Πάτρα 2-3 Δεκεμβρίου 2016.

SIMULATION OF ELASTOVISCOPLASTIC FLOW IN A LID-DRIVEN CAVITY

SUMMARY: We propose a Finite Volume Method for the simulation of elastoviscoplastic flows, modelled after the extension to the Herschel-Bulkley model by Saramito [J. Non-Newton. Fluid Mech. 158 (2009) 154–161]. The method is akin to methods for viscoelastic flows. It is applicable to cell-centred grids, both structured and unstructured, and includes a novel pressure stabilisation technique of the "momentum interpolation" type. Stabilisation of the velocity and stresses is achieved through a "both sides diffusion" technique and the CUBISTA convection scheme, respectively. A second-order accurate temporal discretisation scheme with adaptive time step is employed. The method is used to obtain benchmark results of lid-driven cavity flow, with the model parameters chosen so as to represent Carbopol. The results are compared against those obtained with the classic Herschel-Bulkley model. Simulations are performed for various lid velocities, with slip and no-slip boundary conditions, and with different initial conditions for stress, while the flow cessation is also studied, i.e. the lid is suddenly halted and the flow is left to cease.