



Introduzione Multifase in COMSOL Multiphysics



Gianni Orsi

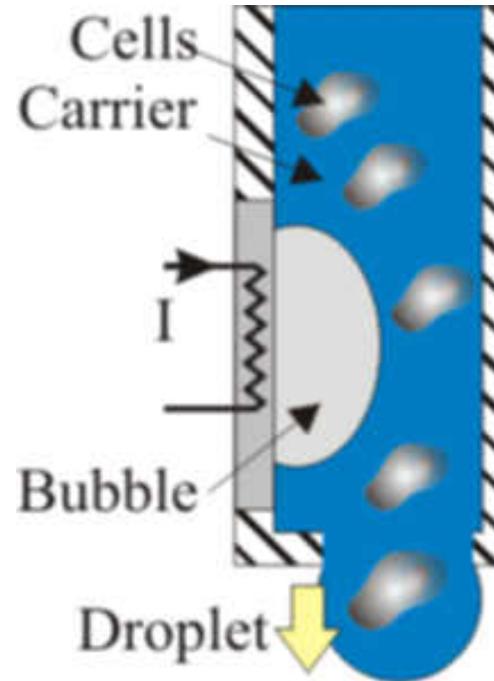
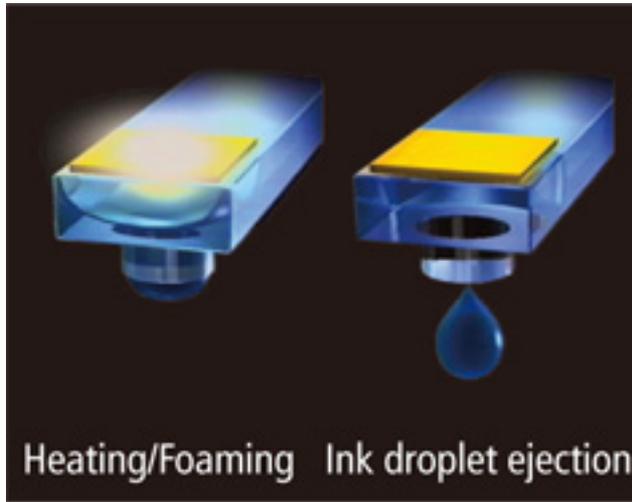
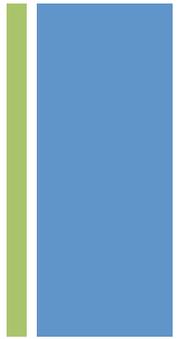
g.orsi@centropiaggio.unipi.it



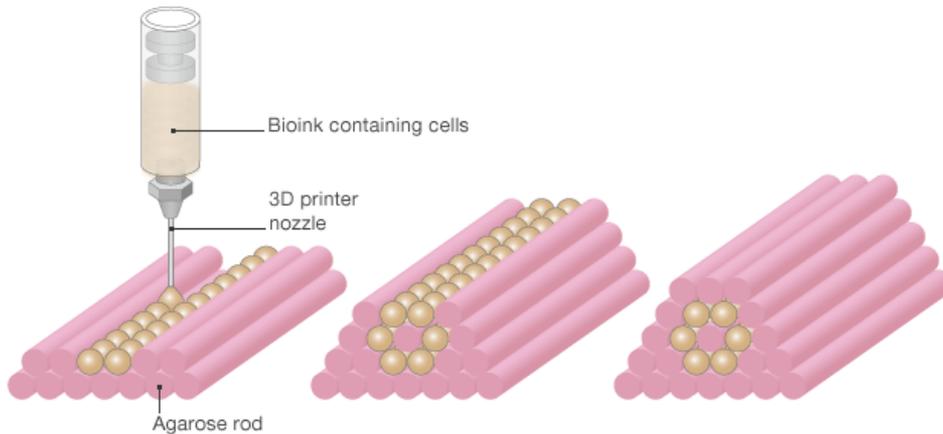
Centro E. Piaggio
bioengineering and robotics research center

+

Bioprinting con stampante inkjet



How bioprinting works

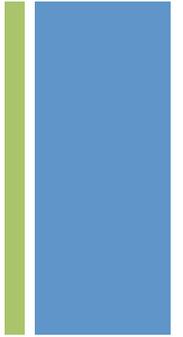


Presenti più fasi: liquido, solido e gas.

Necessaria modellistica multifase.



Flussi Multifase



Flussi bifase:

Solido in gas (particelle)

Solido in liquido (particelle)

Liquido in gas (gocce)

Gas in liquido (bolle)

Flussi trifase:

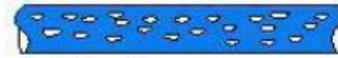
Solido e liquido in gas (particelle+ gocce)

Solido e gas in liquido (particelle e bolle)



Multifase in Ingegneria

Flussi Multifase in Ingegneria si trovano principalmente in Ingegneria Chimica, e sono stati intensivamente utilizzati per caratterizzare il trasporto di petrolio (che è miscela gas-liquido + solido) nelle tubature, o per la caratterizzazione del trasporto di sabbia o bolle in fase liquida.



bubbly flow



wavy flow



plug flow



slug flow



stratified flow



annular flow



bubbly flow



slug flow



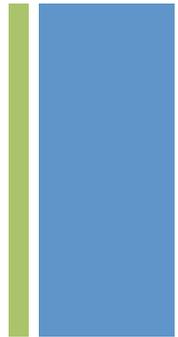
churn flow



annular flow

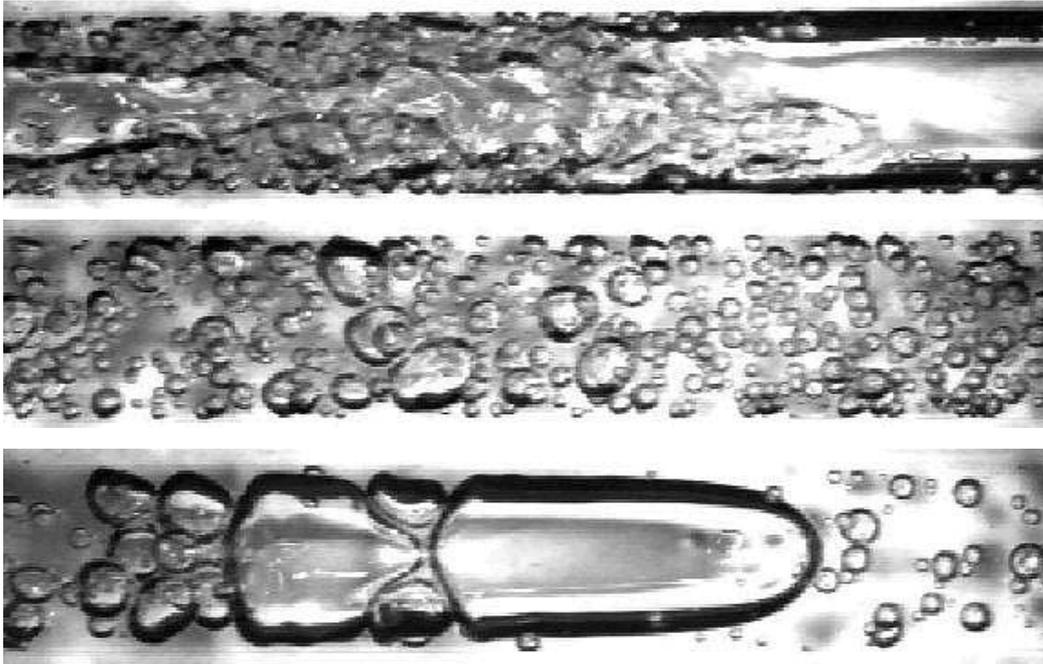
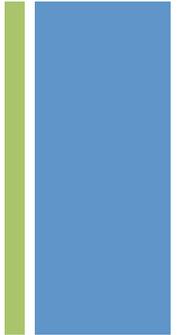


mist flow





Multifase in Ingegneria

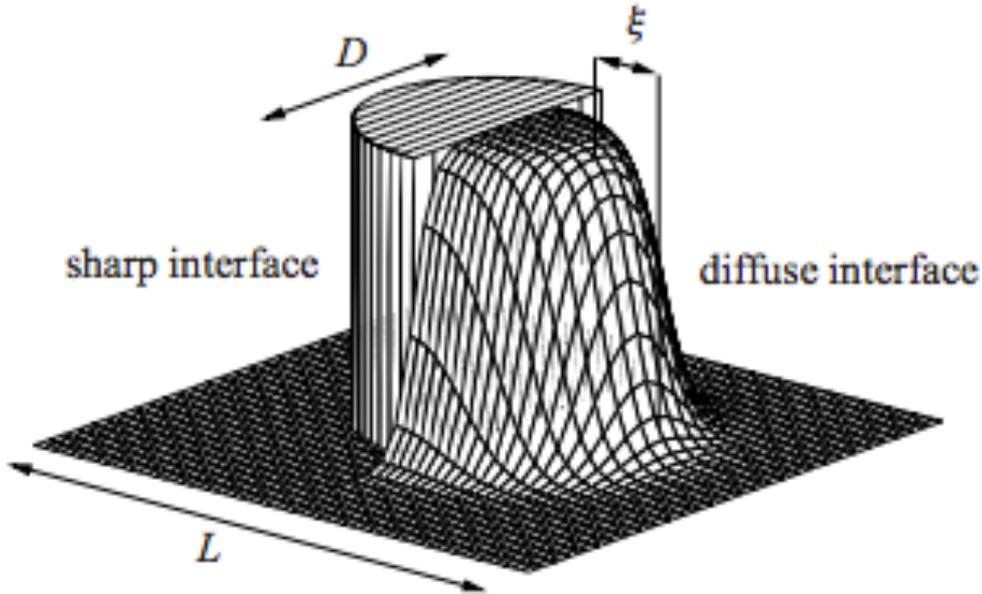


Questi modelli in generale tengono conto del contributo globale della fase, dando una dimensione media o una distribuzione alle bolle dentro il liquido con un approccio Euleriano.

COMSOL Multiphysics tratta questi problemi con Bubbly Flow e Mixture Model, trattando le due fasi come fluidi interpenetrati, calcolandone la composizione media locale.

+

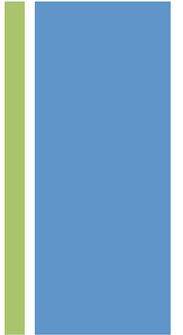
Modellare una singola goccia d'acqua in aria



Si può usare approccio **level set** o **phase field**, utilizzati principalmente in scienza dei materiali per descrivere le separazioni di fase. Utilizzando questi approcci si può modellizzare l'evoluzione delle singole fasi.

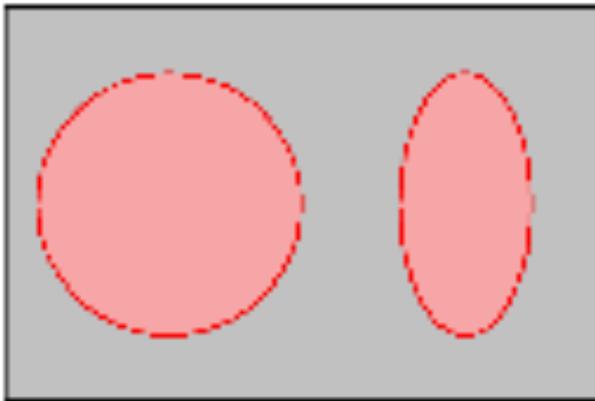


Level Set

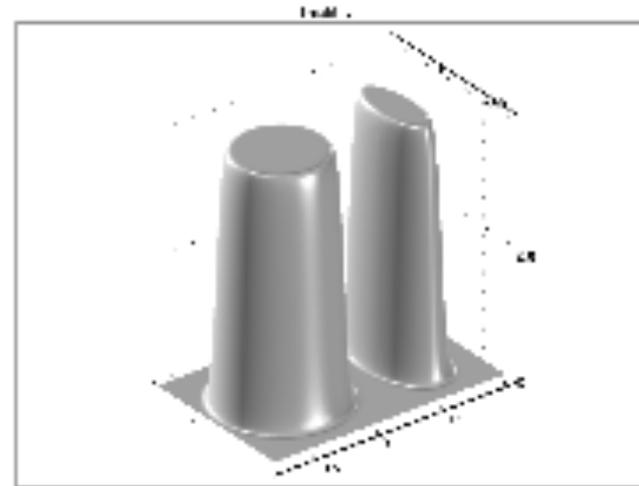


ϕ rappresenta composizione, e passa da 0 a 1 nella zona di interfaccia, in una distanza ε .

Es. domini con diversa composizione



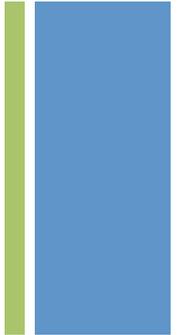
L'interfaccia è dove $\phi=0.5$



Rappresentazione valori f nei diversi sottodomini ($\phi_{\max}=1$, $\phi_{\min}=0$)



Level Set



$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla \cdot \left(\varepsilon \nabla \phi - \phi(1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right)$$

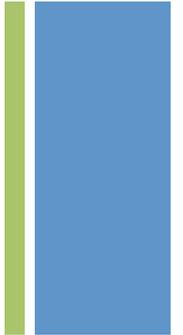
ϕ rappresenta composizione

ε rappresenta ampiezza zona di transizione -> valore tipico: dimensione degli elementi della mesh. In particolare è costante all'interno di ogni dominio, e di default è settato come il massimo valore della mesh size all'interno del dominio.

γ rappresenta parametro stabilizzazione level set -> valore tipico: massimo modulo del campo di velocità \mathbf{u} .



Level Set



Se $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ Il volume si dovrebbe conservare nel caso non ci siano inlet/outlet.

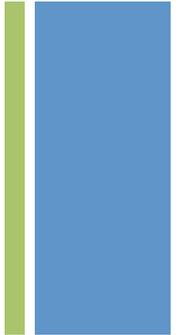
Forma conservativa

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = \gamma \nabla \cdot \left(\varepsilon \nabla \phi - \phi(1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right)$$

Risoluzione numerica più accurata, ma più difficile da far convergere rispetto ad altra forma



Level Set



Inizializzazione

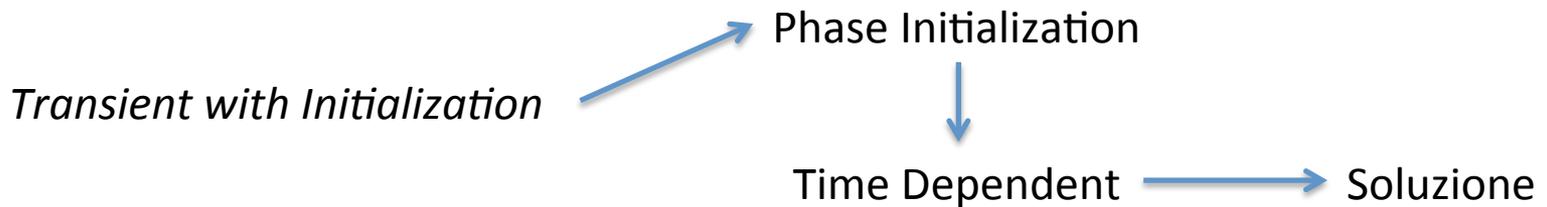
D_{wi} = interfaccia iniziale

$$\phi_0 = \frac{1}{1 + e^{-D_{wi}/\epsilon}}$$

Interno del dominio

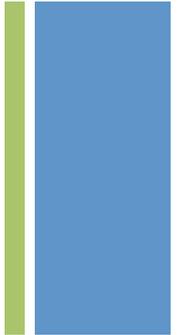
$$\phi_0 = \frac{1}{1 + e^{D_{wi}/\epsilon}}$$

Esterno del dominio



In generale solutori stazionari non si adattano bene al problema.

Level Set



Level Set + Navier Stokes

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_{st} + \mathbf{F}_{ext} + \mathbf{F}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla \cdot \left(\epsilon \nabla \phi - \phi (1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right)$$

$$\rho = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1) \phi$$

$$\mu = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1) \phi$$

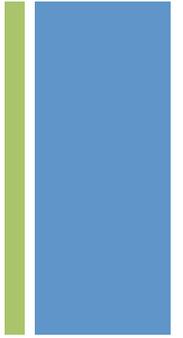
$$\mathbf{F}_{st} = \nabla \cdot (\sigma (\mathbf{I} - (\mathbf{nn}^T)) \delta)$$

$$\delta = 6 |\nabla \phi| |\phi (1 - \phi)|$$

Tensione Superficiale



Phase Field



Chiamato anche “**Interfacce Diffuse**” (Diffuse Interfaces), deriva da teorie di Van der Waals.

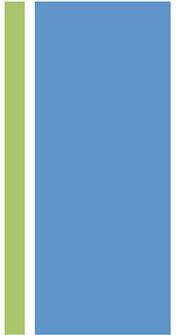
Invece di tracciare direttamente l'interfaccia fra due fluidi, lo strato fra i due domini è regolato da una variabile di **phase field** ϕ . La forza di **tensione superficiale** è inclusa nella Navier-Stokes come forza di volume, moltiplicando il **gradiente di potenziale chimico per il gradiente della variabile di phase field**. L'evoluzione della variabile di phase field è governata dall'equazione di Cahn-Hilliard, che è un'equazione differenziale alle derivate parziali (PDE) del 4 ordine.

Nel level set l'interfaccia fluida è semplicemente trascinata dalla convezione del campo di velocità, la Cahn-Hilliard non solo tiene conto di effetti convettivi, ma inoltre assicura che l'energia libera totale del sistema tenda al suo minimo in maniera corretta.

Il metodo Phase Field quindi include molta più fisica in se stesso rispetto al level set.

+

Phase Field



$$F(\phi, \nabla\phi, T) = \int \left(\frac{1}{2} \varepsilon^2 |\nabla\phi|^2 + f(\phi, T) \right) dV = \int f_{\text{tot}} dV$$

Energia Libera, funzione di variabile adimensionale ϕ . ε è lunghezza caratteristica interfaccia.

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\phi = \nabla \cdot \gamma \nabla \left(\frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial\phi} - \nabla \cdot \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \nabla\phi} \right) \quad f_{\text{tot}} \text{ è densità di energia libera}$$

f_{tot} = energia libera di mixing (f_{mix}) + elastic energy.



Trascuriamo in questa trattazione

Phase Field

+

$$f_{\text{mix}}(\phi, \nabla\phi) = \frac{1}{2}\lambda|\nabla\phi|^2 + \frac{\lambda}{4\epsilon^2}(\phi^2 - 1)^2,$$

Forma di Ginzburg-Landau per energia libera di miscelazione

dove ϕ è la variabile di phase field, definita in maniera tale che le frazioni volumetriche dei due fluidi siano definite come $(1+\phi)/2$ and $(1-\phi)/2$. λ è la densità di energia di miscelazione. I parametri λ e ϵ sono legati alla tensione superficiale σ (misurabile), tramite l'equazione

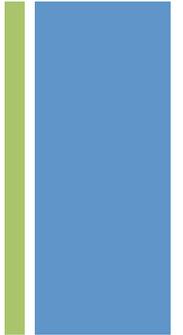
$$\sigma = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\lambda}{\epsilon}.$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = \nabla \cdot \gamma \nabla G$$

Cahn-Hilliard

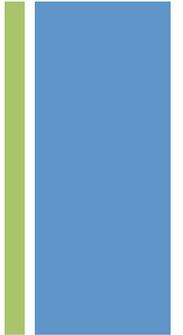
$$G = \frac{\delta \int f_{\text{mix}} d\Omega}{\delta\phi} = \lambda \left[-\nabla^2\phi + \frac{\phi(\phi^2-1)}{\epsilon^2} \right]$$

POTENZIALE CHIMICO





Phase Field



Il potenziale chimico

Chiamato anche Energia Libera Molare Parziale

$$dG = -SdT + VdP + \sum_{i=1}^n \mu_i dN_i$$



P, T costanti

$$dG = \sum_{i=1}^n \mu_i dN_i = \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2 + \dots$$

G in questo caso è energia libera, μ potenziale chimico, N numero di moli

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial N_i} \right)_{T, P, N_{j \neq i}}$$

Potenziale chimico i -esima specie

$$\mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2 + \dots = 0$$

Equazione di Gibbs-Duhem

Phase Field

+

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \gamma \nabla G$$

Cahn-Hilliard

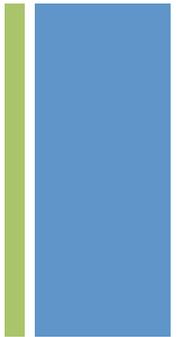
$$G = \frac{\delta \int f_{\text{mix}} d\Omega}{\delta \phi} = \lambda \left[-\nabla^2 \phi + \frac{\phi(\phi^2 - 1)}{\epsilon^2} \right]$$

POTENZIALE CHIMICO

γ è “mobilità”, ed è relativa alla scala temporale di diffusione della Cahn Hilliard. Va scelta in maniera tale da essere grande abbastanza da riuscire a mantenere la larghezza dell’interfaccia costante, ma non troppo grande da smorzare i contributi convettivi.

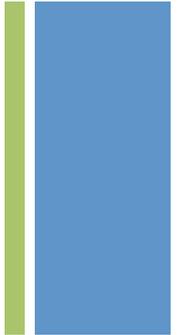
COMSOL utilizza un parametro di mobilità χ che lega γ ed ϵ con la relazione $\gamma = \chi \epsilon^2$.

Nell’interfaccia usualmente χ è settato ad 1 di default, mentre ϵ è preso come la metà della dimensione massima di elemento di mesh passante per l’interfaccia.





Phase Field



Il metodo Phase field decompone Cahn-Hilliard in due PDE del 2 ordine.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\epsilon^2} \nabla \psi$$

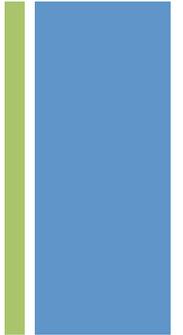
$$\psi = -\nabla \cdot \epsilon^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \phi = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\epsilon^2} \nabla \psi$$

Forma non conservativa



Phase Field



Inizializzazione problema

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \frac{\gamma \lambda}{\epsilon^2} \nabla \psi$$

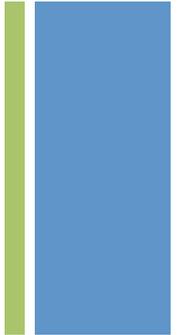
$$\psi = -\nabla \cdot \epsilon^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi + \left(\frac{\epsilon^2}{\lambda}\right) \frac{\partial f}{\partial \phi}$$

Risolve le PDE in maniera tale che ϕ vari in maniera continua fra -1 e +1 in tutti i domini.

Questo processo può richiedere più della simulazione stessa.

+

Phase Field



Legare Phase Field a Navier-Stokes:

$$\boldsymbol{\tau} = \left(\frac{1-\phi}{2} \mu_n + \frac{1+\phi}{2} \mu_s \right) [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T] + \frac{1+\phi}{2} \boldsymbol{\tau}_d,$$

μ equivalente

Energia
Elastica

Tensore sforzi viscosi

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}) + G \nabla \phi + \rho \mathbf{g},$$

Equazione
conservazione
quantità di moto

$$\rho = \frac{1+\phi}{2} \rho_1 + \frac{1-\phi}{2} \rho_2,$$

Forza di Tensione Superficiale

+

Al lavoro!!

