

## **Raport stiintific**

*Titlu proiect: Lattice Boltzmann models for predicting the deposition of inertial particles transported by turbulent flows*

*Cod proiect: PN-II-ID-JRP-2011-2-0060*

*Durata proiect: 01.03.2013 – 30.09.2016*

Activitatea stiintifica desfasurata de echipa romana impreuna cu partenerii francezi a fost cuprinsa in urmatoarele Work Packages (WP):

### **Work Package 1: Coordination & Project management**

Pe langa coordonarea generala a proiectului si a partenerilor, acest pachet de activitati a cuprins intalniri anuale ale membrilor echipelor de cercetare, realizate in cursul unor vizite reciproce de scurta durata (maxim o saptamana) : martie 2013 (Toulouse), octombrie 2014 (Timisoara), octombrie 2015 (Toulouse), aprilie 2016 (Toulouse). Totodata, membri ai echipelor participante au efectuat stagii de cercetare la instituturile partenere, cu o durata totala de 1.5 luni (in 2014 si 2015, la Timisoara) si respectiv 7.5 luni (in 2013, 2014 si 2015, la Toulouse). Diseminarea rezultatelor stiintifice s-a realizat prin trei lucrari publicate, o lucrare trimisa spre publicare la Journal of Computational Physics (septembrie 2016), respectiv un numar de 7 prezentari orale la conferinte internationale si seminarii organizate de universitati.

### **Work Package 2:**

*Hilbert-like Knudsen expansions of far out-of-equilibrium particles flows. Towards theoretical formation of discrete velocity models adapted to turbulence driven particle transport and wall deposition.*

In cursul anului **2013**, a fost pusa la punct o metoda generala de construire a modelelor Lattice Boltzmann de orice ordin  $N$ . Aceste modele sunt bazate pe cuadratura Gauss-Hermite "full range" si au fost notate prin  $HLB(N; Q_x, Q_y, Q_z)$ , in care  $N$  este ordinul modelului (definit ca momentul de ordinul cel mai inalt al functiei de distributie a lui Boltzmann, care poate fi calculat in cadrul modelului, prin discretizarea spatiului impulsurilor), iar  $Q_x, Q_y, Q_z$  reprezinta ordinul cuadraturii Gauss-Hermite utilizate de-a lungul fiecarei axe carteziene din spatiul impulsurilor. O caracteristica a modelelor HLB dezvoltate cu partenerii francezi este aceea ca parametrii  $Q_x, Q_y, Q_z$  nu trebuie sa fie neaparat identici, singura conditie pe care trebuie sa o satisfaca este  $Q_i > N$  ( $i=x,y,z$ ). Acest lucru a permis reducerea substantiala a efortului de calcul prin utilizarea unor cuadraturi de ordin mult superior lui  $N$  doar pe anumite axe carteziene (de exemplu, axa perpendiculara pe peretele domeniului de curgere, unde exista variatii pronuntate ale marimilor de interes).

Evolutia functiilor de distributie din cadrul acestor modele este descrisa de ecuatiile lui Boltzmann, care a fost rezolvata numeric prin implementarea schemelor numerice "corner transport upwind" de ordinul 1 si 2, precum si a conditiilor pe frontiera de tip "diffuse reflection". Deoarece numarul de functii de distributie rezultate prin discretizarea spatiului impulsurilor poate fi foarte mare, ajungand

pana la 8000 in cazul  $Q_x=Q_y=Q_z=20$ , modelele HLB au fost implementate in cadrul unui program de calcul paralel pe sistemul IBM Blue Gene / P de la Universitatea de Vest din Timisoara. Testele efectuate prin simularea curgerii Couette la diferite valori ale numarului lui Knudsen au demonstrat ca aceste modele sunt capabile sa captureze efecte specifice din microfluidica (viteza de alunecare si saltul de temperatura la peretii canalului, respectiv fluxurile de caldura in directiile longitudinala si cea transversala), obtinandu-se rezultate in buna concordanta cu cele obtinute prin metoda DSMC (Direct Simulation Monte Carlo).

In cursul anului **2014** a fost elaborat un formalism de implementare al termenului de forta in modelele Lattice Boltzmann (LB) bazate pe cuadraturi Gauss utilizand polinoame ortogonale (half-range Hermite si Laguerre) definite pe semiaxele sistemului de coordonate cartezian din spatial vitezelor. In cadrul acestui formalism, functia de distributie a particulelor este proiectata pe o baza formata din aceste polinoame ortogonale. Proiectarea a permis ca termenul de forta sa fie exprimat printr-o dezvoltare in serie care cuprinde derivatele polinomului ortogonal. Aceasta procedura a fost testata in cazul curgerii Poiseuille, utilizand schema numerica *corner transport upwind* asociata cu o implementare adecvata a conditiilor de reflexie difuza pe peretii domeniului de curgere. Simularile pe calculator au aratat ca prin aceasta metoda se poate obtine profilul corect al temperaturii fluidului, atunci cand starea acestuia este departe de echilibru (respectiv, atunci cand valoarea numarului lui Knudsen nu mai este neglijabila,  $Kn > 0.1$ ). Utilizarea polinoamelor *half range Hermite*, respectiv a polinoamelor Laguerre in cadrul modelelor Lattice Boltzmann a permis totodata calculul mai precis al fluxurilor de masa si energie la peretii canalului de curgere, comparativ cu cazul cand se utilizeaza polinoamele Hermite obisnuite, definite pe axa carteziana completa. Rezultatele au fost prezentate la doua conferinte internationale.

In anul **2015** s-au aprofundat rezultatele preliminare obtinute in cursul anului 2014, vizand metodologia de construire a modelelor Lattice Boltzmann bazate pe polinoame ortogonale. A fost pusa la punct metodologia generala de dezvoltare a functiei de distributie pana la un ordin  $N$  in raport cu polinoamele ortogonale half-range Hermite deoarece, atunci cand fluidul este mai departe de starea de echilibru si numarul lui Knudsen are o valoare mai mare, este necesara utilizarea unui model Lattice Boltzmann in care ordinul  $N$  al dezvoltarii functiei de distributie, si respectiv ordinul de cuadratura, sunt mai ridicate .

Folosind aceasta metodologie, a fost facut un studiu comparativ al acuratetei rezultatelor obtinute pe calculator cu cele 3 familii de modele Lattice Boltzmann (LB) bazate pe polinoame ortogonale definite pe axele sistemului cartezian de coordonate. Aceste modele sunt: modelul HLB, bazat pe polinoamele Hermite "full range" (definite pe intregul domeniu al fiecarei axa carteziene), modelul LLB, bazat pe polinoamele Laguerre si modelul HHLB, bazat pe polinoamele Hermite "half range" (definite pe semiaxele carteziene). Constructia riguroasa a modelului HHLB a necesitat o atentie particulara pentru calculul cu precizie sporita a valorilor coeficientilor polinoamelor Hermite "half range" de ordin superior, dat fiind ca in cazul acestor polinoame, coeficientii pot fi determinati doar printr-o metoda numerica recursiva, pe cand in cazul modelelor HLB si LLB, coeficientii polinoamelor se pot calcula analitic.

Studiul comparativ al celor trei familii de modele LB a fost realizat urmarind eficienta, convergenta si acuratetea acestor modele in cazul simularii curgerii Couette in cazul tri-dimensional (3D), la diferite valori ale numarului lui Knudsen, cuprinse in intervalul  $[0.01, 100000]$ , corespunzator tranzitiei dintre regimul de curgere continuu si cel balistic. Rezultatele acestui studiu au aratat ca in regimul de curgere continuu, caracterizat prin valori foarte mici ale numarului lui Knudsen, efortul de calcul necesar pen-

tru a obtine rezultate in marja de eroare de 1% este mai redus atunci cand se utilizeaza un model HLB deoarece setul discret de viteze are un numar mai mic de elemente atunci cand ordinul  $N$  este mic. In schimb, la valori mari ale numarului lui Knudsen ( $Kn > 0.5$ ), cand fluidul este departe de echilibru, modelul HHLB este mult mai eficient decat celelalte doua (HLB si LLB) dat fiind ca acesta asigura implementarea corecta a conditiilor pe frontiera (peretii) canalului de curgere prin utilizarea unei functii de pondere mai convenabile si a unui set mai mic de viteze. Rezultatele obtinute in cursul acestui au fost incluse intr-o prezentare orala la conferinta DSFD (Discrete Simulation of Fluid Dynamics) organizata la Edinburgh (Marea Britanie) in perioada 13 – 17 iulie si constituie obiectul unei lucrari care a aparut in *Journal of Computational Physics* (2016).

Analiza performantei si acuratetei modelelor LB bazate pe polinoamele Hermite “half-range” a fost continuata si in cursul anului **2016**, cand aceste modele au fost testate prin simularea unor probleme test in care intervine o forta derivata dintr-un potential. O deducere mai riguroasa a expresiei termenului de forta, bazata pe teoria distributiilor si care a implicat utilizarea functiei lui Heaviside si a functiei Dirac, a permis calculul corect al momentelor de orice ordin ale termenului de forta cu respectarea ecuatiilor de conservare pentru masa, impuls si energie. Rezultatele numerice obtinute in cazul curgerii unui fluid (gaz) intre doi pereti plan-paraleli avand temperaturi egale sau diferite, s-au dovedit a fi in buna concordanta cu solutia analitica corespunzatoare regimului Navier-Stokes (valori mici ale numarului lui Knudsen). Pentru curgeri departe de echilibru (la valori neneglijabile ale numarului lui Knudsen), a fost facut si un studiu de convergenta in functie de ordinul cuadraturii, punandu-se din nou in evidenta superioritatea modelelor LB bazate pe polinoame Hermite half-range, fata de modelele bazate pe polinoame Hermite full-range, utilizate pana in prezent in literatura. Rezultatele acestui studiu se regasesc intr-un manuscris trimis spre publicare in luna septembrie 2016.

### **Work Package 3:**

*Lattice Boltzmann algorithms for simulation of turbulent particle-laden flows.*

Pentru investigarea depunerii particulelor antrenate de un fluid aflat in curgere turbulenta, in cadrul etapei **2013** a fost elaborat un model Lattice Boltzmann uni-dimensional, cu caracter preliminar.

Actiunea curgerii turbulente asupra particulelor solide a fost luata in considerare prin introducerea unei forte de tip “camp mediu”, care actioneaza asupra acestora. Termenul de forta a fost exprimat folosind derivatele polinoamelor Hermite. Efectul acestui termen a fost acela de a modifica evolutia functiilor de distributie a particulelor, aflate in regim departe de echilibru.

In anul **2014**, impreuna cu partenerii francezi de la Institutul de Mecanica Fluidelor si de la Laboratorul Laplace al Universitatii Paul Sabatier din Toulouse, a fost testat un program de calcul al vitezei de depunere a particulelor solide in vecinatatea unui perete, precum si a distributiei densitatii acestora. Pentru clarificarea functionarii acestui program, a fost analizat si procesul de relaxare omogena a functiilor de distributie utilizand modele LB de ordin  $N < 8$ , urmarindu-se modul in care aceste modele permit calculul corect al momentelor functiei de distributie. Rezultatele au fost prezentate intr-o lucrare care a aparut in *International Journal of Multiphase Flow* (**2015**).

In cursul anului **2016** a fost abordata o problema mai complexa de curgere turbulenta, cand viteza medie a fluidului nu mai are un profil omogen in sectiunea canalului de curgere. In aceasta situatie apare un puternic gradient al vitezei de agitatie a particulelor solide iar sistemul se gaseste foarte departe de starea de echilibru termodinamic, fapt care a ridicat probleme deosebite legate de stabilitatea numerica in cursul simularilor efectuate pe calculator. Rezultatele au aratat ca valorile

obtinute cu modelul LB pentru functia de covarianta fluid - particule turbulente, desi usor mai mici, sunt in bun acord calitativ cu modelul analitic al lui Oesterle si Zaichik, elaborat in anul 2004. La valori mici ale numarului lui Stokes, s-a constatat ca densitatea de particule turbulente este practic constanta pe masura ce ne indepartam de peretele canalului, dar prezinta un maxim pronuntat in vecinatatea peretelui. Acest maxim dispare odata cu cresterea numarului lui Stokes. Prezentarea acestor rezultate a facut obiectul unei expuneri orale (sustinuta de un membru al echipei partenere din Toulouse) la International Conference on Multiphase Fluids, organizata in Mai 2016 la Florenta.

#### **Work Package 4:**

*Validation strategies and prospects.*

Strategiile de validare a modelelor lattice Boltzmann elaborate in cadrul proiectului (Work Packages 2 si 3) s-au bazat pe compararea rezultatelor simularilor cu rezultatele din literature de specialitate, precum si cu rezultate obtinute pe calculator utilizand metoda Monte Carlo, domeniu in care partenerii francezi au o experienta indelungata. Totodata, a fost pusa la punct si o strategie de validare bazata pe efectuarea unor studii de convergenta in care s-a analizat dependenta rezultatelor in functie de ordinul  $N$  al modelului Lattice Boltzmann si de ordinul  $Q$  al cuadraturii utilizate, si respectiv incadrarea intr-o marja de eroare (maxim 1%) a valorilor obtinute pentru marimile macroscopice care caracterizeaza curgerea fluidului si a particulelor (densitatea de masa, viteza, temperatura, fluxurile de energie si functiile de corelatie).

#### **Lista lucrarilor trimise spre publicare**

1. V.E. Ambrus, V. Sofonea, R. Fournier, S. Blanco  
*Application of half-range lattice Boltzmann models to force-driven flow*  
Trimisa la *Journal of Computational Physics* (septembrie 2016)

#### **Lista lucrarilor publicate**

1. P. Fede, V. Sofonea, R. Fournier, S. Blanco, O. Simonin, G. Lepoutere, V.E. Ambrus  
*Lattice Boltzmann models for inertial particles transported by turbulent flows*  
*International Journal of Multiphase Flow* **76** (2015) 187 - 197
2. V.E. Ambrus, V. Sofonea,  
*Lattice Boltzmann models based on half-range Gauss-Hermite quadratures*  
*Journal of Computational Physics* **316** (2016) 760 – 788
3. G. Lepoutere, P. Fede, V. Sofonea, R. Fournier, S. Blanco, O. Simonin  
*Lattice Boltzmann model for predicting the deposition of inertial particles in turbulent channel flows*  
Proceedings of the 9<sup>th</sup> International Conference on Multiphase Flows ICMF 2006, May 22 – 27, 2016, Firenze, Italy

#### **Lista lucrarilor prezentate oral la conferinte internationale**

1. V.E. Ambrus, V. Sofonea

*Lattice Boltzmann models based on half-space quadratures and the corner transport upwind method*

23<sup>rd</sup> International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD), July 28 – August 1, 2014, Paris, France

2. V.E. Ambrus, V. Sofonea

*Implementation of the force term in Lattice Boltzmann models based on half-space quadratures*

Tim-14 Physics Conference, November 21 – 24, 2014, Timisoara, Romania

3. V.E. Ambrus

Quadrature methods in Lattice Boltzmann modeling

School of Mathematics and Statistics (SoMaS), University of Sheffield, UK

December 3, 2014

4. V.E. Ambrus

*Lattice Boltzmann models for microfluidics and multiphase flows*

COST Conference “Flowing Matter 2014”, December 15 – 17, Lisbon, Portugal

5. V.E. Ambrus, V. Sofonea

*Application of Lattice Boltzmann models for the simulation of flows through microchannels*

24th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD) July 13 – 17, 2015, Edinburgh (United Kingdom)

6. V.E. Ambrus, V. Sofonea

*Lattice Boltzmann models for the simulation of flows through microchannels*

COST Conference “Flowing Matter 2014”, January 11 – 15, Porto, Portugal

7. V.E. Ambrus

*Lattice Boltzmann models based on Gauss Quadratures (invited lecture)*

Lattice Boltzmann Workshop, June 9 – 10, Department of Physics, University of Rome “Tor Vergata”, Rome, Italy

Director proiect,

Dr. fiz. Victor Sofonea

