

Модель вязкоэластопластичной жидкости со свободной поверхностью для задачи компрессии клеточных сфероидов

XII КОНФЕРЕНЦИЯ ПО МАТЕМАТИЧЕСКИМ МОДЕЛЯМ И
ЧИСЛЕННЫМ МЕТОДАМ В БИОМАТЕМАТИКЕ

Юрий Ефремов¹, Руслан Янбарисов^{1,2}

¹Сеченовский университет , ²ИВМ РАН

3 ноября 2020 г.

Мотивация

- Задачи биопринтинга (Юрий Ефремов) - изучение свойств клеточных сфероидов из биоматериала с помощью *in vitro* экспериментов: компрессия клеточных сфероидов, слияние двух сфероидов.
- Цель - разработка технологии, корректно предсказывающей экспериментальные результаты для компрессии и слияния.
- Предлагаемый подход - модель вязкоэластопластичной жидкости со свободной поверхностью с поверхностным натяжением (для задач слияния сфероидов).

Компрессия клеточных сфероидов

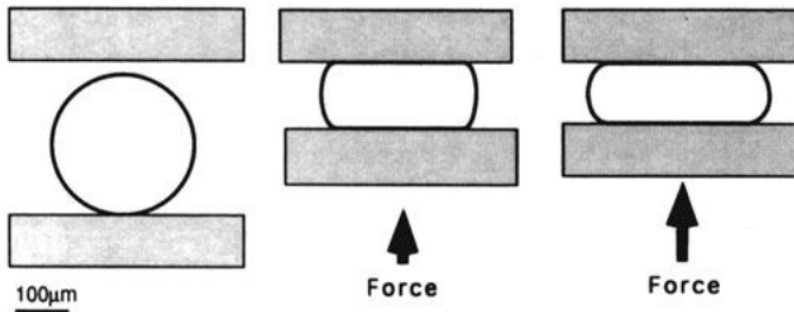


Рис.: Схема эксперимента

Компрессия клеточных сфероидов: постановка эксперимента

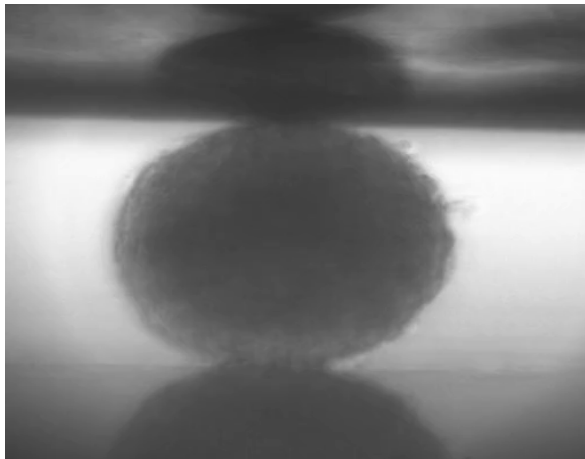
В начальный момент времени сфероид покоится на нижней пластине
Эксперимент содержит три фазы.

- Фаза 1 (сжатие): верхняя пластина движется навстречу нижней с постоянной скоростью от расстояния между ними D (диаметри сфероида) до $0.5D$ в течение 36 с.
- Фаза 2 (удержание): пластины неподвижны в течение 60 с.
- Фаза 3 (восстановление): верхняя пластина движется от нижней с той же скоростью, что и в фазе 1; сфероид частично восстанавливает изначальную форму.

Выходные данные:

- сила, действующая на верхнюю пластину;
- высота сфероида в зависимости от времени.

Компрессия сфероидов: экспериментальные данные (Юрий Ефремов)



Модель вязкоупругого твердого тела (Юрий Ефремов)

- Вязкоупругая модель standard linear solid (программный конечно-элементный комплекс Abaqus);
- Уравнение на модуль эластичности E вида:

$$E(t) = E_{\infty} + (E_0 - E_{\infty}) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right).$$

- Параметры: $E_0 = 9$ кПа (instantaneous modulus), $E_{\infty} = 0.2E_0 = 1.8$ кПа (long-term modulus), $\tau = 10$ секунд (время релаксации).

Модель вязкоупругого твердого тела (Юрий Ефремов)

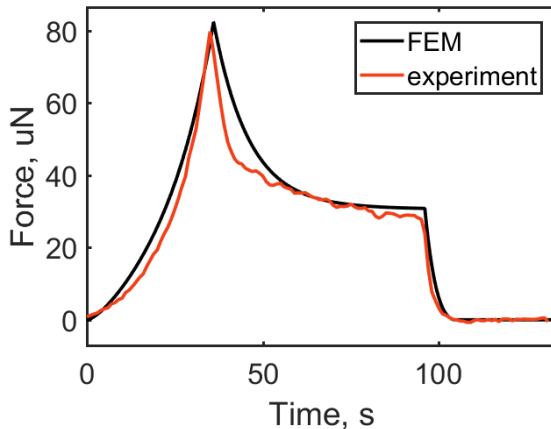


Рис.: Сила реакции со стороны сфероида на верхнюю пластину

Модель вязкоупругого твердого тела (Юрий Ефремов)

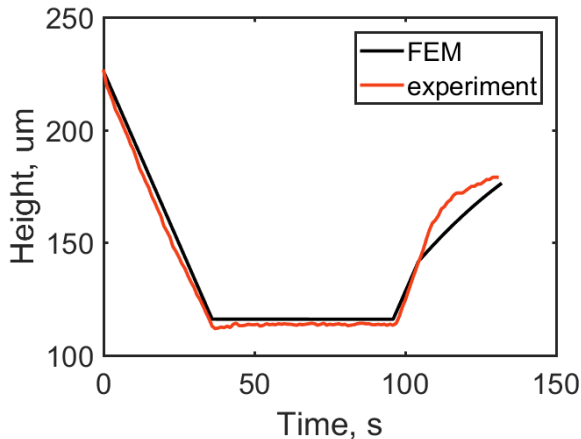


Рис.: Высота сфероида в зависимости от времени

Модель вязкоэластопластичной жидкости

Основные уравнения ¹:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) - \mu_f \Delta \mathbf{u} - \mu_e \nabla \cdot \epsilon = -\nabla p \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \epsilon + \epsilon \mathbf{W} - \mathbf{W} \epsilon = \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2} - \alpha \epsilon_d \max \left(0, 1 - \frac{\gamma}{\|\epsilon_d\|} \right) \quad (3)$$

¹Goktekin, T. G. (2011). Animating viscoelastic fluids (Doctoral dissertation, UC Berkeley).

Обозначения

$$\mathbf{u} = (u \quad v \quad w)^T$$

$$\epsilon = \epsilon^T = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}$$

$$\nabla \mathbf{u} = (\nabla u \quad \nabla v \quad \nabla w)$$

$$\mathbf{W} = \frac{\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T}{2}$$

$$\|\epsilon^n\| = (tr(\epsilon^T \epsilon) + \delta)^{1/2}$$

$$\sigma = -p\mathbb{I} + \mu_f (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \mu_e \epsilon$$

Параметры модели:

- μ_e - модуль эластичности;
- ϵ - тензор эластичных деформаций;
- $\tau = \mu_e \epsilon$ - изотропный эластичный материал;
- $\epsilon_d = \epsilon - \frac{tr(\epsilon)}{3}\mathbb{I}$; $tr(\epsilon_d) = 0$ - девиаторная часть тензора деформаций²;
- γ - пороговая деформация (определяет переход от эластичного в пластичный режим по критерию фон Мизеса)

² $\epsilon_d = \epsilon$ для несжимаемой жидкости

Граничные условия

- Условия согласования на твердой (подвижной) поверхности:

- $\mathbf{n}^T \mathbf{u} = \mathbf{g}(t);$
- $\frac{\partial((\mathbb{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T)\mathbf{u})}{\partial \mathbf{n}} = 0;$
- $\frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{0}.$

- Условие на свободной поверхности

$\mathbf{n}^T(-p\mathbf{n} + \mu_f(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)\mathbf{n} + \mu_e \epsilon \mathbf{n}) = \kappa \eta \mathbf{n}$ разбито по компонентам:

- $\epsilon = 0$
- $p = \kappa \eta$
- $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = 0$

Расположение степеней свободы u, p, ϵ

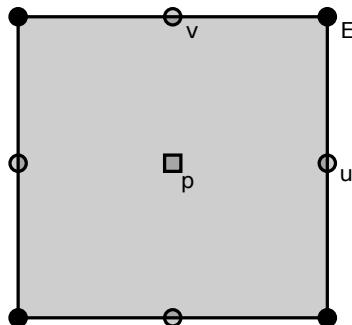


Рис.: Степени свободы определены в центрах ячеек (p), центрах граней (u, v, w), узлах (ϵ).

Проекционный метод во FlocTree для вязкоэластопластичной жидкости

- Проекционный метод для u, p вязкой несжимаемой жидкости со свободной поверхностью ³⁴ :
- Явный метод для ϵ :

$$\frac{\epsilon^{n+1} - \epsilon^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla) \epsilon^n + \epsilon^n \cdot \mathbf{W}^{n+1} - \mathbf{W}^{n+1} \cdot \epsilon^n =$$

$$\frac{(\nabla \mathbf{u}^{n+1} + (\nabla \mathbf{u}^{n+1})^T)}{2} - \alpha \max \left(0, 1 - \frac{\gamma}{\|\epsilon_d^n\|} \right) \epsilon_d^n$$

³М.А.Олшанский, К.М.Терехов, Ю.В.Вассильевский. "An octree-based solver for the incompressible Navier-Stokes equations with enhanced stability and low dissipation" // Computers and Fluids, (2013).

⁴К. Nikitin, К.Терехов, Ю.Вассильевский, "Two methods of surface tension treatment in free surface flow simulations" // Applied Mathematics Letters, Vol. 86, (December 2018), pp. 236-242.

Ограничения

- Ограничение на шаг по времени (явный метод для ϵ):

$$\Delta t < \Delta x \sqrt{\frac{\rho}{\mu_e}}$$

- Ограничение (явный метод для сил пов. натяжения):

$$\Delta t < \Delta x^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{\rho}{2\pi\eta}}$$

Ограничения ($\rho = 1 \frac{\text{г}}{\text{мм}^3}$) приводят к $\Delta t \sim 10^{-3} \Delta x \sim 10^{-5}$ с для задачи с $T = 100 \div 150$ с (большие η и μ_e).

Полностью неявный метод для $\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}, \epsilon^{n+1}$

$$\rho \left(\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n+1} \right) - \mu_f \Delta_h \mathbf{u}^{n+1} - \mu_e \nabla \cdot \epsilon^{n+1} = -\nabla p^{n+1} \quad (4)$$

$$\nabla_h \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\epsilon^{n+1} - \epsilon^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \epsilon^{n+1} + \epsilon^{n+1} \mathbf{W}^n - \mathbf{W}^n \epsilon^{n+1} = \frac{\nabla \mathbf{u}^{n+1} + (\nabla \mathbf{u}^{n+1})^T}{2} - \alpha \epsilon_d^{n+1} \quad (6)$$

Полностью неявный метод для $\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}, \epsilon^{n+1}$

- Противопотоковая аппроксимация для конвективного слагаемого второго порядка.
- Неявная интерполяция $\nabla \cdot \epsilon$ из узлов в центры граней.
- Неявное вычисление тензора скоростей деформации в узлах.
- Решение большой системы линейных уравнений для неизвестных $\mathbf{u}, p, \epsilon$ с перестраивающейся сеткой типа восьмидерево.

Верификация: падающая вязкоэластичная капля

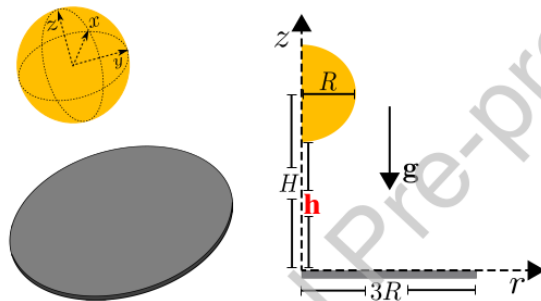


Рис.: Постановка теста⁵

⁵Viezel, C., Tomé, M. F., Pinho, F. T., & McKee, S. (2020). An Oldroyd-B solver for vanishingly small values of the viscosity ratio: Application to unsteady free surface flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 285, 104338.

Верификация: падающая вязкоэластичная капля

$d_0 = 2R$	H	U	λ_1	η_0	ρ
$[m]$	$[m]$	$[ms^{-1}]$	$[s]$	$[Pa.s]$	$[kg\ m^{-3}]$
0.02	0.04	1.0	0.02	4.0	1000.0

Рис.: Параметры теста⁶

⁶Viezel, C., Tomé, M. F., Pinho, F. T., & McKee, S. (2020). An Oldroyd-B solver for vanishingly small values of the viscosity ratio: Application to unsteady free surface flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 285, 104338.

Верификация: падающая вязкоэластичная капля

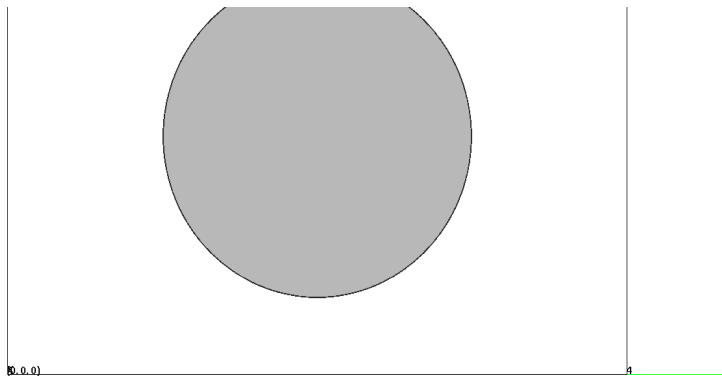


Рис.: Сверху - вязкая несжимаемая жидкость ($\mu_f = 4Pa \cdot s, \mu_e = 0$), снизу - вязкоупругая несжимаемая жидкость ($\mu_f = 0.4Pa \cdot s, \mu_e = 1800Pa, \alpha = 50s^{-1}$); $\gamma = 0$.

Компрессия сфероидов: способ расчета силы реакции

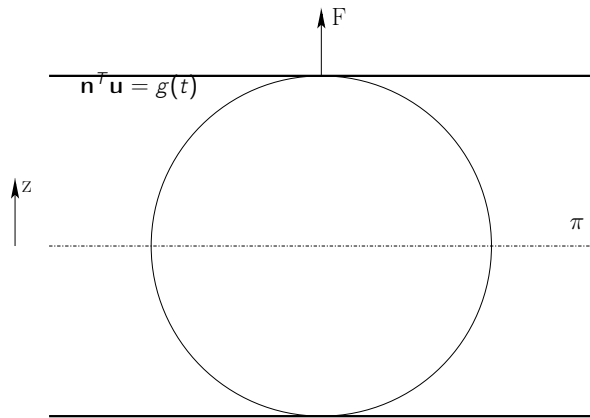


Рис.: $|F| = \int_{\partial\Omega_\pi} \mathbf{n}^T \sigma \mathbf{n} = \int_{\partial\Omega_\pi} (-p + 2\mu_f w_z + \mu_e \epsilon_{zz})$

Модель вязкоупругой жидкости

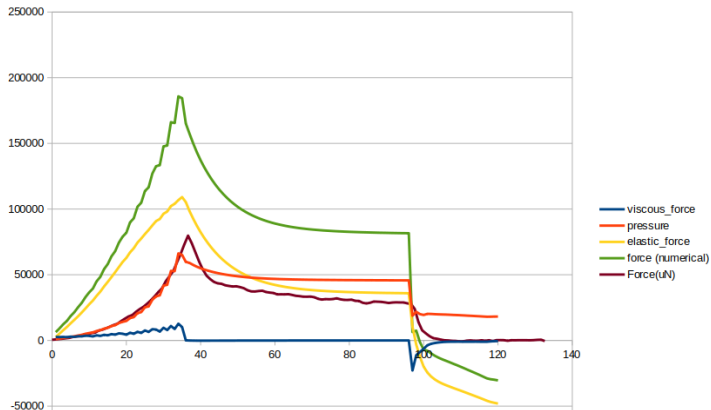


Рис.: Сила реакции на стенку.

Модель вязкоупругой жидкости

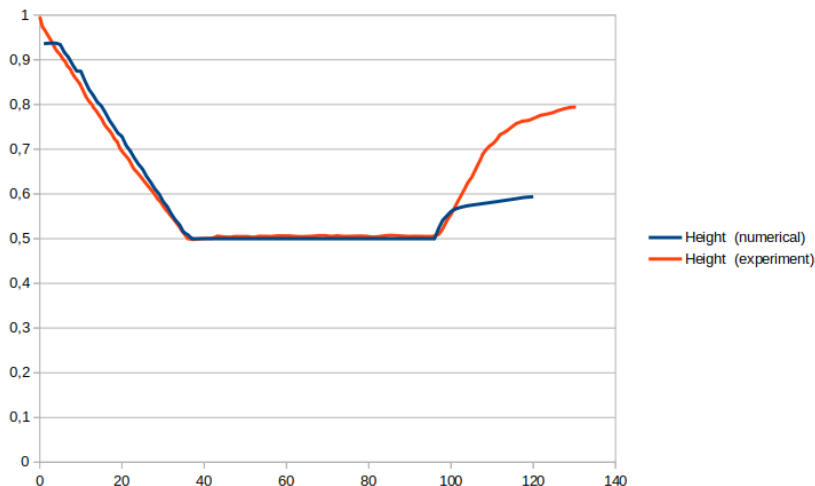
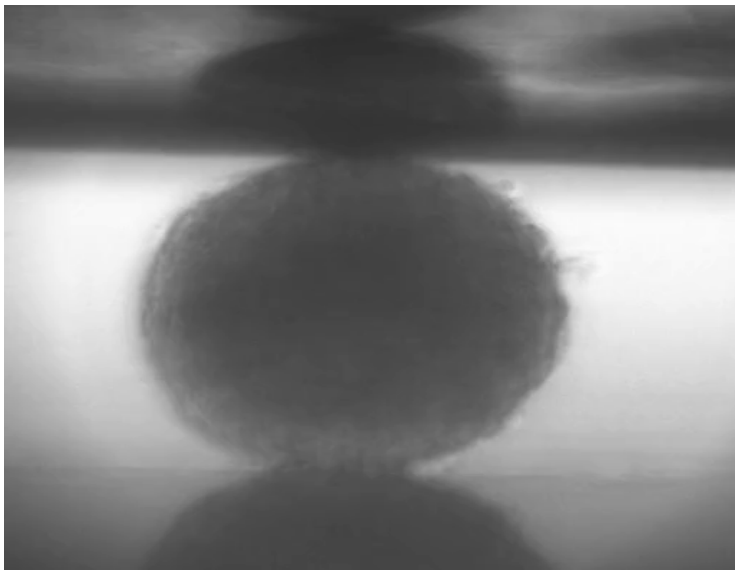


Рис.: Высота сфероида от времени

Модель вязкоупругой жидкости



Спасибо за внимание.

Учет сил поверхностного натяжения

- Конечные разности для вычисления средней кривизны $\kappa(\phi)$ в ячейке со вторым порядком точности (явный метод, ограничение $\Delta t < \sqrt{\frac{\rho}{2\pi\eta}} \Delta x^{\frac{3}{2}}$).
- Решение нестационарной задачи на среднюю кривизну (неявный метод - ограничение по времени незначительно):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \eta \kappa(\phi) |\nabla \phi| = 0 \quad (7)$$