

悬浮颗粒运动的数值模拟方法进展

张淑君¹, 王惠民¹, 吴锤结²

(1. 河海大学环境科学与工程学院, 江苏 南京 210098; 2. 中国人民解放军理工大学理学院, 江苏 南京 211101)

摘要 :从研究悬浮颗粒在流体中运动的不同层次出发,分别回顾以有限元为代表的传统流体力学及近年来广泛应用的 Lattice-Boltzmann 方法的原理,并重点介绍两种方法在悬浮颗粒数值模拟方面所取得的成果.

关键词 :悬浮颗粒;数值模拟;连续介质;Lattice-Boltzmann

中图分类号 :TV142 **文献标识码** :A **文章编号** :1000-1980(2005)06-0612-04

悬浮颗粒在流体中的输运过程在许多工业应用和自然现象中存在,例如沙尘暴中沙粒的运动轨迹,生态系统中花粉的输运传播,化学工业中颗粒的结晶生长,化学反应物的沉积等.因此,了解及掌握悬浮颗粒的运动过程、运动规律是非常必要的.采用理论分析方法研究悬浮颗粒在流体中的运动是复杂且困难的.随着计算机技术的发展和普及,数值模拟已成为研究其运动规律的主要手段并取得了令人瞩目的成就.对悬浮颗粒的数值模拟,根据问题的需要可在不同层次上加以研究:(a)用传统流体力学数值方法来描述的宏观层次;(b)分子层次;(c)介观层次.

1 传统流体力学方法

采用连续介质途径研究两相流时,描述流体的控制方程可采用单流体模型或双流体模型.将粒子与流体混合的流场看作一种充满整个流场的连续介质,用一组连续分布的密度场、速度场、应力场和温度场来描述整个流场,这就是单流体模型.该模型具有统一界面的能力,便于界面上的边界条件的数值模拟,因此目前被大量采用.

单流体模型的控制方程组如下:

不可压缩流体满足质量守恒定律
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

不可压缩牛顿流体的动量方程为
$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}\mathbf{u}) + \frac{1}{\rho} \nabla p = \frac{1}{\rho} \nabla \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \mathbf{f} \quad (2)$$

其中 $\mathbf{f}$ 为单位质量力.

设 f_k 为表征第 k 种流体的特征函数,则对每一种流体均满足

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f_k = 0 \quad (k = 1, \dots, m) \quad (3)$$

采用单流体模型模拟悬浮粒子的运动时,首先建立每一项瞬时的、局部的守恒方程和相界面的间断关系,然后采用某种平均方法得到基本方程并采用参数化方法得到固体和液体间相互作用项的表达式. Hinch^[1]提出了采用系综平均方法研究黏性悬浮粒子之间相互作用的方法,但随之而来的是非线性项无法用平均速度表示和这种平均必须考虑粒子的时间历史.为了避免该平均方法引起的不足, Kaneda^[2]提出了固定粒子的排列方法并计算了小雷诺数流动中作用在粒子上的拖曳力.另外,完全忽略黏性影响(无黏势流)或惯性项(stokes 流动)可以大大简化流动,但这种方法忽略了尾迹和其他非线性机制. Brady 等^[3]提出了在 stokes 流中模拟大量粒子的算法,这些算法对小雷诺数适用且成功捕捉到粒子之间的作用.然而,控制粒子移动和旋转的非线性惯性机制在 stokes 流动中不存在.

采用 Euler-Langrange 数值模拟方法是将整个流体-粒子系统在欧拉框架下看成一个整体,粒子用

Langrange 方法跟踪,在粒子低密度情况下可以认为粒子的运动对流体的运动未产生扰动,为了考虑粒子运动对流动的影响,Snider 等^[4]最近把颗粒相既看作连续相来模拟粒子之间的应力,又在跟踪粒子时认为其呈现离散状态,然而采用本方法模拟时作用在粒子上的力要采取经验公式。

近年来,直接数值模拟(DNS)方法在模拟悬浮粒子运动方面亦取得了卓越的成果,在单流体模型中描述流体与颗粒的模型在粒子表面通过无滑移边界条件来结合,同时也通过作用在粒子上的力和力矩联系起来。

Hu 等^[5]提出的用有限元方法模拟圆形或椭圆形颗粒在垂直槽道中的二维运动最具有代表性。由图 1 可知,若雷诺数低于一个临界值(25 左右),粒子迅速趋于槽道中心达到平衡状态,随着雷诺数的增大,椭圆颗粒的横向运动振幅越大,振荡现象越明显,达到平衡状态所需时间越长,且在 Newton 流体中,当雷诺数很小时,椭圆颗粒运动的最终状态为其长轴与水平线重合;而当雷诺数较大时,椭圆颗粒运动的最终状态为其长轴与水平线垂直。采用同样方法,Feng 等^[6,7]研究了圆形和椭圆形颗粒在下降过程中的运动和相互作用,Huang 等^[8]研究了槽道中两个椭圆颗粒的旋转,Feng 等^[9]分析了管流中上升或飞行胶囊的运动机制。

此外,Hughes 等^[10]提出了建立在空间和时间基础上的有限元方法,Tezduyar 等^[11]将 DSD/ST(变形空间领域/空间-时间)方法用于有限元计算,在其方法中,有限元的解和测试函数扩展到整个空间和临时坐标,基本函数在空间上是连续的但在时间上不连续,并且在圆柱绕流问题上作了测试。采用同样的方法,关于黏性流体中气泡或液滴的模拟也取得了长足的进展。Ryskin 等^[12]提出了针对每一相采用独立的、适合边界的网格的算法,Dandy 等^[13]采用同样的方法,模拟了有限雷诺数悬浮变形的轴对称气泡的沉降运动,并把该方法推广到了轴对称气泡的不稳定运动,这种方法比较适合简单的边界条件。值得一提的是,锋面跟踪方法在模拟气泡或液滴的运动中发挥了很大的作用,该方法采用固定的欧拉网格,但在界面(或界面附近)设置一些标志点跟踪并标识水滴的表面,再将这些点的速度值插值到原来的固定网格上,文献[14]采用该方法分别计算了单个液滴或气泡在二维及三维剪切流中的运动、液滴的碰撞及多个气泡或液滴的相互作用。

2 Lattice Boltzmann(LB)方法

Lattice Boltzmann(LB)方法是在格子气自动机(LGA)的基础上,于 20 世纪 80 年代中期建立和发展起来的一种流场模拟方法。在 LGA 方法中,从分子运动论和统计力学的观点出发,将流场看成是由许多质量为 1 的粒子组成,这些粒子分布在网格上,在迁移到相邻节点时可能和其他方向到达该点的粒子相互碰撞,但由于计算节点上的粒子数 $n_\alpha(x,t)$ 是 Boolean 变量,即在某个时刻一个方向上只有一个粒子运动或没有粒子运动,因此,虽然该方法存储量小,计算绝对稳定,其缺点是如不满足 Galilei 不变性,压力取决于宏观流速,存在统计噪声等使得其应用受到了限制。最早由 Menamara 和 Zanetti^[15]提出的 LB 方法中采用连续的粒子分布函数代替 LGA 方法中的粒子变量,进而忽略单一粒子与其他粒子之间的相互作用,更加强调大量粒子的平均特性, LB 方程为

$$f_\alpha(x+e_\alpha,t+1)-f_\alpha(x,t)=\Omega_\alpha f_\alpha(x,t) \quad (\alpha=1,2,\dots,N) \tag{4}$$

式中: e_α ——粒子在第 α 个方向上的运动速度; $f_\alpha(x,t)$ —— t 时刻节点 x 处第 α 个方向粒子的分布函数; $\Omega_\alpha f_\alpha(x,t)$ ——碰撞函数,表示粒子碰撞所引起 f_α 的改变量,其在每个节点上满足质量守恒和动量守恒条件:

$$\sum_{\alpha=0}^N \Omega_\alpha = 0 \quad \sum_{\alpha=0}^N \Omega_\alpha e_\alpha = 0 \tag{5}$$

Higuera 等^[16]假定流场的分布接近于局部平衡状态,进而将粒子分布函数分为两部分,并将碰撞操作过程进行线性化处理,用单一松弛时间使流场达到局部平衡状态并且线性稳定,从而奠定了 LB 方法的初步模型:

$$f_\alpha = f_\alpha^{\text{eq}} + \epsilon f_\alpha^{\text{neq}} \tag{6}$$

式中: f_α^{neq} ——非局部平衡分布函数; f_α^{eq} ——局部平衡分布函数,依赖于宏观变量 $\rho, \rho u$,且满足

$$\sum_{\alpha=0}^N f_\alpha^{\text{eq}} = \rho \quad \sum_{\alpha=0}^N f_\alpha^{\text{eq}} e_\alpha = \rho u \tag{7}$$

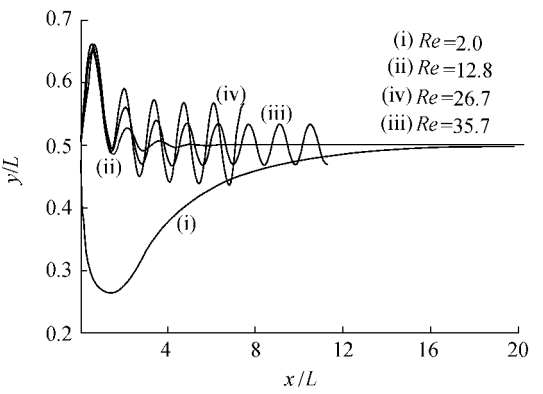


图 1 椭圆颗粒在垂直槽道内的运动轨迹
Fig.1 Moving track of elliptical particles in vertical channel

在此基础上, Qian 和 Chen 等^[17,18]提出将松弛形式采用 Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) 形式, 即

$$\Omega_a f(x, t) = -\frac{1}{\tau}(f_a - f_a^{eq}) \quad (8)$$

式中 τ 为松弛时间, 则得 LBGK 模型:

$$f_a(x + e_a \delta t, t + \delta t) - f_a(x, t) = -\frac{1}{\tau}(f_a - f_a^{eq}) \quad (\alpha = 0, 1, \dots, N) \quad (9)$$

这就是至今应用最广泛和最有效的模型. 与传统方法不同, LB 方法避开了偏微分方程直接从离散模型入手, 在分子运动论的基础上构造出简单的动力学模型. 主要特征是: 在速度空间中 LB 方法的对流项是线性项, 可以推导出不可压缩 N-S 的方程且利用了相空间最少的速度信息, 因此该方法具有程序简单、内在并行性好以及特别适用于具有复杂几何边界条件的流场计算等优点.

Ladd^[19~21]首先使用 LB 方法开展了对颗粒悬浮问题的研究, 在其模型中, 他提出了能够统一处理静止边界和动边界的算法. 若定义固体颗粒表面为边界, 形状任意, 当悬浮颗粒位于格点之间时, 格点连线穿过固体-流体边界表面, 流体粒子沿着连线运动并与悬浮固体颗粒发生碰撞和相互作用, 据此可以得到固体-流体边界的离散模型. 模型中虽在固体内部出现“虚拟流体”, 但是由于在固体和流体间的局部动量交换过程中保证了动量守恒, 所以可以得到合理的固体-流体边界条件. 边界格点速度 u_b 由悬浮固体颗粒速度 U 、角速度 Ω 和颗粒合力中心半径 R 决定,

$$u_b = U + \Omega \left(x + \frac{1}{2} e_i - R \right) \quad (10)$$

边界处分布函数为

$$f'_i(x) = f_i(x) \pm B e_i u_b \quad (11)$$

式中 B 为系数, 视网格模型和质量密度而定; “ $\pm$ ”分别代表悬浮颗粒朝向或背离流体运动.

Aidun 等^[22]对 Ladd 模型作了一些改进, 在增加了一项源项后使得颗粒内部的“虚拟流体”质量也守恒, 这主要针对不规则边界表面形状或由于颗粒生长、溶解等导致的边界形状发生变化等情况.

Qi^[23]采用该模型模拟了液体中单个椭圆颗粒、矩形颗粒及颗粒群的悬浮问题, 并将部分结果与采用有限元方法模拟的结果作了比较, 值得一提的是其对矩形颗粒群的模拟及计算结果表明颗粒的运动主要受惯性的影响, 例如颗粒团串结构的形成和演化. 颗粒团串结构有两种基本形式, 分别是 T 型和平行结构, 当一个颗粒被卷入另一颗粒的尾流时就会形成两个颗粒组成的 T 型结构, 在多个颗粒的相互作用中会形成由数个颗粒组成的相对稳定的颗粒团, 它们具有共同的较强尾流, 从而吸引其他颗粒加入以形成更大的颗粒团, 但当颗粒团吸入了其他颗粒或颗粒团后, 其内部相互作用加强, 从而又使得颗粒团产生解散的趋势, 其聚散过程一般经历为相吸、碰触、散开, 这些现象已在实验中得到证实.

吴锺结等^[24]研究发展了一系列处理动网格、不规则颗粒旋转及颗粒生长等问题的数值模拟方法, 结合其首次提出的两种颗粒生长模式(随机生长模式和浓度生长模式)成功地模拟了不动颗粒和运动颗粒群的运输和生长过程, 由于颗粒生长后其形状及大小都发生了变化, 则其运动规律和背景流场等均相应发生了变化, 见图 2.

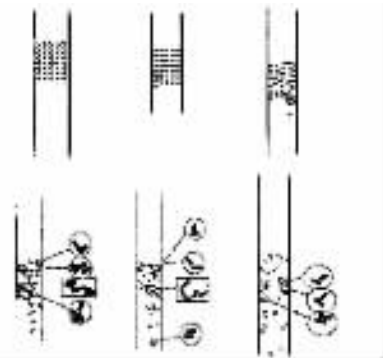


图2 矩形颗粒在不同时刻的运动图像
Fig.2 Snap shot of rectangular particles at different time

3 结 论

本文简要地介绍了悬浮粒子的数值模拟进展, 重点是连续介质方法和 Lattice-Boltzmann 方法. 连续介质理论能充分、合理地描述流体和颗粒的宏观特性, 且以有限元为代表的方法允许空间网格在控制区域改变, 因此在描述及跟踪不规则形状的颗粒和由于颗粒的生长等导致的形状、大小发生变化等方面优势明显. 其不足之处则是无法充分揭示颗粒之间的相互作用及颗粒的微观特性, 在粒子移动时需要重新计算网格使得计算时间过长, 且计算结果不稳定等. Lattice-Boltzmann 方法避开了传统 N-S 的方程, 根据分子运动理论建立简化的动力学模型, 采用均匀固定网格, 其优点是在速度空间中 LB 方法的对流项是线性项, 可以推导出不可压缩的 N-S 方程且利用了相空间最少的速度信息, 因此该方法具有程序简单、内在并行性好且在模拟大量的颗粒群体方面得到了广泛的应用, 但在大雷诺数或粒子变形过程如液滴等方面的模拟有待进一步研究.

直接数值模拟作为研究悬浮粒子运动规律的一种新兴手段有其无法替代的优势, 但如何与传统的多相

流模式相结合,例如为模型参数的标定提供依据等也是值得深入探讨的课题。

参考文献:

- [1] HINCH E J. An averaged-equation approach to particle interactions in a fluid suspension[J]. J Fluid Mech, 1977, 83: 695—720.
- [2] KANEDA Y. The drag on a sparse random array of fixed spheres in flow at small but finite Reynolds number[J]. J Fluid Mech, 1986, 167: 455—63.
- [3] BRADY J F, BOSSIS G. Stokesian dynamics[J]. Annu Rev Fluid Mech, 1988, 20: 111—157.
- [4] SNIDER D M, O'ROURKE P J, ANDREWS M J. Sediment flow in inclined vessels calculated using a multiphase particle-in-cell model for dense particle flow[J]. Int J Multiphase Flow, 1998, 24: 1359—1382.
- [5] HU H H, JOSEPH D D, CROCHET M J. Direct simulation of fluid particle motions[J]. Theoret Comput Fluid Dynam, 1992, 3: 285—306.
- [6] FENG J, HU H H, JOSEPH D D. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid. Part 1: Sedimentation[J]. J Fluid Mech, 1994, 261: 95—134.
- [7] FENG J, HU H H, JOSEPH D D. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid. Part 2: Couette and Poiseuille flows.[J] J Fluid Mech, 1994, 277: 271—301.
- [8] HUANG P Y, FENG J, JOSEPH D D. The turning couples on an elliptic particle settling in a vertical channel[J]. J Fluid Mech, 1994, 271: 1—16.
- [9] FENG J, JOSEPH D D. The unsteady motion of solid bodies in creeping flow[J]. J Fluid Mech, 1995, 303: 83—102.
- [10] HUGHES T J R, FRANCA L P, MALLET M. 7 A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VI. Convergence analysis of the generalized SUPG formulation for linear time-dependent multi-dimensional advective-diffusive systems[J]. Comput Meth Appl Mech Engng, 1987, 63: 97—112.
- [11] TEZDUYAR T E, LIU J, BEHR M. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces-the DSD/ST procedure I. The concept and the preliminary numerical tests[J]. Meth Appl Mech Engng, 1992, 94: 339—351.
- [12] RYSKIN G, LEAL L G. Numerical solution of free-boundary problems in fluid mechanics. Part 2: Buoyancy-driven motion of a gas bubble through a quiescent liquid[J]. J Fluid Mech, 1984, 148: 19—35.
- [13] DANDY D S, LEAL G L. Buoyancy-driven motion of a deformable drop through a quiescent liquid at intermediate Reynolds numbers[J]. J Fluid Mech, 1989, 208: 161—192.
- [14] ESMAEILI A. Numerical simulations of bubbly flows[D]. Michigan: University of Michigan Ann Arbor, 1995.
- [15] MCNAMARA G R, ZANETTI G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata[J]. Phys Rev Lett, 1988, 61: 1505—1508.
- [16] HIGUERA F J, SUCCI S, BENZI R. Lattice gas dynamics with enhanced collision[J]. Europhys Lett, 1989, 9: 345—349.
- [17] QIAN Y H, D'HUMIERES D, LALLEMAND P. Lattice BGK models for N-S equation[J]. Europhys Lett, 1992, 17: 479—484.
- [18] CHEN H, CHEN S, MATTHAEUS W H. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method[J]. Phys Rev A, 1992, 45: 5339—5342.
- [19] LADD A J C. Numerical simulations of particle suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1: Theoretical foundation[J]. J Fluid Mech, 1994, 271: 285—309.
- [20] LADD A J C. Numerical simulations of particle suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2: Numerical results[J]. J Fluid Mech, 1994, 271: 311—339.
- [21] LADD A J C. Sedimentation of homogeneous suspensions of non-Brownian spheres[J]. Phys Fluids, 1997, 9: 491—499.
- [22] AIDUN C K, LU Y N. Lattice Boltzmann simulation of solid suspended in fluid[J]. J Statist Phys, 1995, 81: 49—61.
- [23] QI D W. Lattice Boltzmann simulation of fluidization of rectangular particles[J]. Int J Multiphase Flow, 1999, 26: 421—433.
- [24] 吴锤结, 周菊光. 悬浮颗粒运动及生长的格子波尔兹曼数值模拟[J]. 固体力学学报, 2003(计算力学专辑): 24.

Advances in numerical simulation of motion of suspended particles

ZHANG Shu-jun¹, WANG Hui-min¹, WU Chui-jie²

(1. College of Environmental Science and Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China;
2. Science School, PLA University of Science and Technology, Nanjing 211101, China)

Abstract From the angle of suspended particles moving in different layers of flows, a review was made on the finite element-based conventional method in fluid mechanics and the Lattice-Boltzmann method widely applied in recent years, with emphasis placed on the achievements of the two methods in numerical simulation of motion of suspended particles.

Key words suspended particle; numerical simulation; continuum; Lattice-Boltzmann