

悬浮颗粒运动的格子 Boltzmann 数值模拟

吴锤结^{*,**} 周菊光[†]

^{*}(中国人民解放军理工大学理学院流体力学研究中心, 南京 211101)

^{**}(北京大学湍流与复杂系统研究国家重点实验室, 北京 100871)

[†](国防科技大学炮兵学院射击教研室, 长沙 410000)

摘要 将固体颗粒的牛顿力学和格子 Boltzmann 方法相结合, 研究不规则形状悬浮颗粒在流场中的运动. 通过受力分析, 精确求得其所受合力、合力矩、合力作用中心等. 提出了跟随颗粒运动的动网格计算域技术和模拟悬浮颗粒转动运动的局部数组方法及 Euler-Lagrange 两套坐标技术. 通过对椭圆颗粒运动的数值模拟和对照他人对矩形颗粒的研究, 分析了其复杂运动规律, 并提供了合理的物理解释. 结果表明: 运用格子 Boltzmann 方法和上述特殊技术可以得到与有限元方法相同的模拟精度, 且具有计算速度快、对复杂形状边界处理方便灵活、程序简单及特别适合大规模并行计算等优点.

关键词 格子 Boltzmann 方法, 悬浮颗粒运动, 动网格, Navier-Stokes 方程, 并行计算

引 言

悬浮颗粒运动在许多工程和自然现象中起重要作用, 对其进行深入研究具有重要的理论和应用意义, 但研究难度极大. 本文采用格子 Boltzmann 方法 (LBM) 对最基本的悬浮颗粒运动进行细致研究, 为研究大规模悬浮颗粒在湍流等复杂流场中的运动规律打下基础.

对悬浮颗粒的数值模拟已成为研究其运动规律的主要手段. 但是, 目前采用的常规计算流体力学方法, 甚至用超级计算机也难以模拟 100 个以上的颗粒间的相互作用, 更不用说研究其群体运动模式. 将基于固体颗粒的牛顿力学与 LBM 相结合可以有效地模拟成千上万的悬浮颗粒的运动. Aidun^[1,2], Ladd^[3,4] 及 Qi^[5] 等人已在悬浮颗粒运动数值模拟方面进行了许多工作.

1 颗粒运动的格子 Boltzmann 算法

在这一节中, 研究固体 - 流体边界的 LBM 算法、不规则形状悬浮颗粒的受力分析、精确描述悬浮颗粒转动的局部数组方法和 Euler-Lagrange 两套坐标技术和动网格技术.

1.1 格子 Boltzmann 方法简介

LBM 不是从宏观的偏微分方程入手, 而是根据分子运动理论建立简化的动力学模型, 且可由此导

出宏观统计物理量满足的偏微分方程. 陈十一等^[6]提出了 LBGK 模型

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(f_i(\mathbf{x}, t)) \\ (i = 0, 1, \dots, N)$$

其中, f_i 为沿着 i 方向的粒子速度分布函数; $\Omega_i = \Omega_i(f_i(\mathbf{x}, t))$ 为碰撞函数; Δt 和 Δx 分别是时间和空间步长. 本文采用标准的 LBM 方法, 因此有 Δt 和 Δx 均等于 1, 可得

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(f_i(\mathbf{x}, t)) \quad (i = 0, 1, \dots, N)$$

Ω_i 要求在每个格子上满足总质量守恒和总动量守恒, 即 $\sum_i \Omega_i = 0$ 和 $\sum_i \Omega_i \mathbf{e}_i = 0$.

单一粒子分布函数 f_i 可以展开成

$$f_i = f_i^{\text{eq}} + \varepsilon f_i^{(\text{neq})}$$

其中, ε 为一小量, 局部平衡分布函数 f_i^{eq} 依赖于流体密度 ρ 和动量密度 $\rho \mathbf{u}$, 且满足 $\sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho$ 和 $\sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{u}$, 非平衡分布函数 $f_i^{(\text{neq})} = f_i^{(1)} + \varepsilon f_i^{(2)} + O(\varepsilon^2)$. 若设局部粒子分布以单一迟滞时间 τ 趋向平衡态, 则由格子 BGK 碰撞项有

$$\frac{\Omega_i}{\varepsilon} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(\text{neq})} = -\frac{1}{\varepsilon \tau} (f_i^{(1)} + \varepsilon f_i^{(2)})$$

得 LBGK 方程

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} \quad (1)$$

在具体计算中, 必须确定网格的结构和对应的平衡分布关系. 为了得到形式简单又尽量不丢失信息的结果, 将二维矩形网格分为 9 个速度方向

$$\begin{cases} \mathbf{e}_i = \left[\cos \frac{i-1}{2}\pi, \sin \frac{i-1}{2}\pi \right] & (i = 1, 3, 5, 7) \\ \mathbf{e}_i = \left[\sqrt{2} \cos \left(\frac{i-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4} \right), \sqrt{2} \sin \left(\frac{i-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4} \right) \right] & (i = 2, 4, 6, 8) \\ \mathbf{e}_0 = 0, & \text{对应于原点零速度方向} \end{cases}$$

可得 [7]

$$f_i^{eq} = \rho \omega_i \left[1 + 3\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}u^2 \right] \quad (2)$$

其中,

$$\omega_0 = \frac{4}{9}, \omega_1 = \omega_3 = \omega_5 = \omega_7 = \frac{1}{9}$$

$$\omega_2 = \omega_4 = \omega_6 = \omega_8 = \frac{1}{36}$$

在 LBM 中, 压力 $p = \rho/3$, 声速 $c_s = 1/\sqrt{3}$, 运动黏性系数 $\nu = (2\tau - 1)/6$.

在计算中, 固体边界上的无滑移条件采用全反射方法来实现 [8,9]. 即在 t^- 以速度 \mathbf{u} 碰到边界的粒子在 t^+ 时刻正好以 $-\mathbf{u}$ 离开, 平均看来该点速度值为 0, 与无滑移条件一致. 由于在 LBM 中求解的变量是实数, 这种按原路径返回的全反射方法可通过在 LBM 离散方程 (1) 中获得新时间层上的分布函数后, 改变每一分量符号的方式来实现.

1.2 固体 - 流体边界的 LBM 算法

用全反射方法实现无滑移边界条件的算法仅适用于静止边界, 对动边界必须另行处理. Ladd [3,10] 提出能够统一处理动、静边界的 LBM 算法, 其基本思想如图 1 所示.

在图 1 中, 当悬浮颗粒边界位于格点之间时, 格点的连线穿过固 - 流边界表面. 流体粒子沿着连线运动并与悬浮颗粒发生碰撞和相互作用. 由于在流体、固体间局部动量交换过程中保持动量守恒, 所以运用该模型能够得到正确的固 - 流边界条件.

对应于平行 \mathbf{x} 与 $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i$ 连线的速度 \mathbf{e}_i 和 $\mathbf{e}_{i'}$ ($\mathbf{e}_{i'} = -\mathbf{e}_i$), 在每个边界格点处存在两个分布函

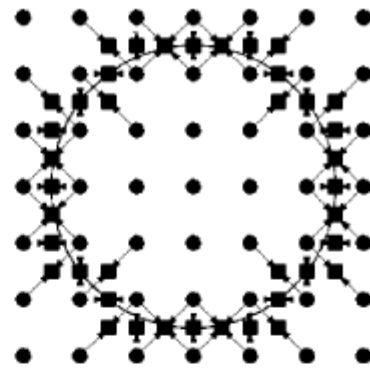


图 1 LBM 算法中的固 - 流边界

Fig.1 The solid-fluid boundary in LBM

数 $f_i(\mathbf{x}, t^+)$ 和 $f_{i'}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t^+)$, 其中, i 和 i' 分别表示入射和反射方向. $f_i(\mathbf{x}, t^+) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t)$ 为碰撞后的分布函数. 边界格点速度 \mathbf{u}_b 由悬浮固体颗粒的速度 \mathbf{U} , 角速度 Ω 和颗粒合力中心半径 \mathbf{R} 决定, 即 $\mathbf{u}_b = \mathbf{U} + \Omega \times (\mathbf{x} + (\mathbf{e}_i/2) - \mathbf{R})$. 通过交换 f_i 和 $f_{i'}$ 间的分布密度, 流体的局部动量密度可与边界格点上的固体颗粒表面速度相匹配.

由图 2 可以了解动、静两种边界格点相互作用的过程. 图中, 箭头表示速度方向, 线段的长度表示分布密度的比例. 在图 2(a) 中两个分布函数与静止边界条件相互作用, 此时, 分布函数沿着入射方向弹回. 因此, 它与处理静止固体边界条件的全反射模型一致. 所以

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_{i'}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t^+)$$

$$f_{i'}(\mathbf{x}, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t^+)$$

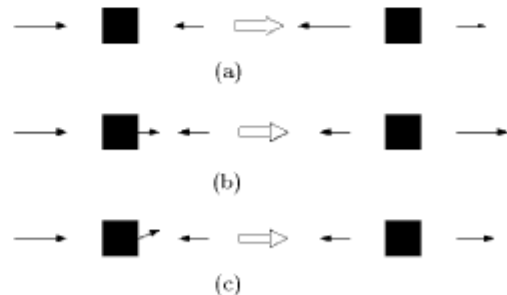


图 2 边界格点处的相互作用

Fig.2 The interaction at the boundary grids

在图 2(b), 图 2(c) 中, 因受动边界的影响, 边界格点处的分布密度随之而变, 其变化值与 \mathbf{u}_b 成比例, 即

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_{i'}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t^+) + 2\alpha_1^{e_i} \rho \mathbf{u}_b \cdot \mathbf{e}_i$$

$$f_{i'}(\mathbf{x}, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t^+) - 2\alpha_1^{e_i} \rho \mathbf{u}_b \cdot \mathbf{e}_i$$

其中, $a_1^{e_i}$ 为动边界碰撞比例系数, 它与式 (2) 中的 ω_i 有关. 对应于离散速度方向 $1 \sim 8$, $a_1^{e_i} = 2/3$, $i = 1, 2, 3, 4$ 或 $a_1^{e_i} = 1/6$, $i = 5, 6, 7, 8$.

由牛顿第二定律和 LBGK 动量密度表达式, 对单位质量流体, 可求得作用在固体颗粒上的力

$$\mathbf{f} = \rho \mathbf{a} = \rho [\mathbf{u}(t+1) - \mathbf{u}(t^+)] = \sum_i f_i^{\text{eq}}(t+1) \mathbf{e}_i - \sum_i f_i^{\text{eq}}(t^+) \mathbf{e}_i$$

其中, \mathbf{a} 为加速度. 考虑到固-流边界处的动量交换特点, 由上式可得作用在固体颗粒上的力为

$$\begin{aligned} f_l \left(\mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{e}_i, t+1 \right) = & -[f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t+1) - f_i'(\mathbf{x}, t+1) - \\ & f_i(\mathbf{x}, t^+) + f_i'(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t^+)] \mathbf{e}_i = \\ & 2[f_i(\mathbf{x}, t^+) - f_i'(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t^+) - \\ & 2a_1^{e_i} \rho u_b \cdot \mathbf{e}_i] \mathbf{e}_i \end{aligned}$$

1.3 不规则颗粒受力分析及其速度和角速度

由于化学反应物沉积等生长作用, 悬浮颗粒形状会变得不规则, 所以必须对不规则形状颗粒进行受力分析, 即对合力、合力矩和合力作用中心等进行分析. 在此, 仅对二维情形进行讨论.

1.3.1 不规则颗粒受力分析

首先求出颗粒的质量 M , 合力作用中心 (\bar{x}, \bar{y}) —— 颗粒的质心.

$$\left. \begin{aligned} M = \iint_D \rho(x, y) d\sigma, \quad \bar{x} = \frac{\iint_D x \rho(x, y) d\sigma}{\iint_D \rho(x, y) d\sigma} \\ \bar{y} = \frac{\iint_D y \rho(x, y) d\sigma}{\iint_D \rho(x, y) d\sigma}, \quad |\mathbf{R}| = \sqrt{\bar{x}^2 + \bar{y}^2} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

其中 D 为颗粒所占据的区域. 然后, 根据颗粒的质心来求其转动惯量 I_x, I_y

$$\left. \begin{aligned} I_x = \iint_D (x - \bar{x})^2 \rho(x, y) d\sigma \\ I_y = \iint_D (y - \bar{y})^2 \rho(x, y) d\sigma \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

最后, 根据颗粒的质心和转动惯量求作用在悬浮颗粒上的合力

$$\mathbf{F} = \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_l \left(\mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{e}_i \right)$$

合力矩

$$\mathbf{T} = \sum_{i=1}^N \left(\mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{e}_i - \mathbf{R} \right) \times \mathbf{f}_l \left(\mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{e}_i \right)$$

其中, N 是在每个格点上粒子速度的方向数.

1.3.2 不规则颗粒运动的速度和角速度

按牛顿定律, 可通过作用在悬浮颗粒上的合力 \mathbf{F} 及合力矩 \mathbf{T} 和求解

$$\begin{aligned} M \frac{d\mathbf{U}(t)}{dt} &= \mathbf{F}(t_0) \\ I_x \frac{d\Omega_x(t)}{dt} &= T_x(t_0) \\ I_y \frac{d\Omega_y(t)}{dt} &= T_y(t_0) \end{aligned}$$

得到从 $t = t_0$ 到 $t = t_0 + 1$ 时刻不规则颗粒运动的速度 $\mathbf{U}(t)$ 和角速度 $\Omega(t)$. 计算中采用对悬浮颗粒所占据的网格求和的方式近似计算式 (3) 及 (4) 中的积分运算 \iint_D . 参照 Ladd^[3,10], 并注意到在 LBM 中 $\Delta t = 1$, 采用如下离散格式求得悬浮颗粒的速度

$$\mathbf{U}(t+1) = \mathbf{U}(t) + \frac{\mathbf{F}(t)}{M}$$

角速度

$$\begin{aligned} \Omega_x(t+1) &= \Omega_x(t) + \frac{T_x(t)}{I_x} \\ \Omega_y(t+1) &= \Omega_y(t) + \frac{T_y(t)}{I_y} \end{aligned}$$

和合力作用中心半径

$$\mathbf{R}(t+1) = \mathbf{R}(t) + \mathbf{U}_0(t) + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{F}(t)}{M}$$

其中, \mathbf{U}_0 是颗粒质心的速度.

1.4 局部数组方法、Euler-Lagrange 两套坐标技术和动网格技术

对于非圆(球)形颗粒, 必须根据其受力和合力中心在每一时间步求得所需转动的角度. 同时, 为了精确模拟不规则形状颗粒的转动过程, 必须采用一些特殊技术以减少对计算机内存等资源的需求.

1.4.1 局部数组方法与 Euler-Lagrange 两套网络坐标技术

1) 局部数组方法的基本思想

对坐标和角速度数组,在其整体计算数组中取出一个大小比单个颗粒所占网格大一些的小数组,在其中处理颗粒的转动.这样,就避免了为每一颗粒建立一个整体数组,而仅为其定义一个比整体计算数组小得多的局部数组,从而大大减少对计算内存的需求.

将颗粒的运动分解为旋转运动与平动,并对其分别处理,即:求得经 Δt 时间后悬浮颗粒的平动速度 U 后,由 $\Delta x = U\Delta t$ 求出其质心的新位置.然后由转动角速度 Ω 求得颗粒在 Δt 时段中的转角,即

$$\Delta\alpha = |\Omega|\Delta t$$

在局部数组中,对每一颗粒分别根据其 $\Delta\alpha$ 及颗粒边界与该颗粒质心的距离求得转动后颗粒边界的新位置.最后,将每一颗粒所对应的局部数组“粘贴”回整体数组中去,在这一过程中必须保证局部数组中颗粒的质心位置与整体数组中该颗粒的质心位置重合.但当局部网格较粗时,在每一时间步中颗粒转动的角度很小,由于累积误差和因颗粒边界点的位置与方形网格点不重合而无法精确描述转动后颗粒边界位置,从而使颗粒变形、失真.

2) Euler-Lagrange 两套网格技术的基本思想

为了克服上述局部数组方法中由于累积误差等造成的颗粒变形失真问题,可采用 Euler-Lagrange 两套坐标技术. Euler 坐标系下的正交方形网格的位置不随计算过程而变,流场变量均在此网格中求得.由沿不规则形状颗粒边界的点所组成的曲线贴体坐标系形成随颗粒运动的 Lagrange 坐标.对每一悬浮颗粒建立一个类似的 Lagrange 坐标系,就可以精确给出任意时刻不规则颗粒的形状和位置.但在求颗粒受力时,必须将 Euler 网格下的流动变量值插值到对应的 Lagrange 坐标下.因此,选择准确、合适的插值方法是该方法成功的关键.

1.4.2 动网格技术

由于颗粒的运动会使其跑出固定的计算域,为了跟踪悬浮颗粒的运动,必须采用跟随颗粒运动的动网格技术.而在模拟多个颗粒的聚合和分散过程时,计算域会随颗粒群散开而扩大,这样,在编程时整体数组大小必须随之变化.下面,分两种情形讨论计算域可变的动网格技术.这里我们只考虑二维情形,并假设颗粒沿二维槽道的 y 方向向下运动.

1) 计算域跟随颗粒运动,但大小不变

此时,数组元素的个数不变.保持二维数组中对应于槽道宽度方向的一维不变,则当颗粒在二维

槽道中下降一个网格时,令

$$u^{(t+1)}(i,j) = u^t(i,j+1), \quad j = 0, 1, \dots, n-1$$

其中 u^t 为 t 时刻的流动变量, n 为 j 方向的最大网格数.

2) 计算域跟随颗粒运动,且其大小发生变化

当数值模拟多个颗粒的运动时,颗粒群会随流场演化而聚集或散开,为了保持所有颗粒均位于计算域内,必须在采用动网格技术的同时使得计算域的大小随颗粒群的聚合或散开而变化.为此,设上边界与顶部颗粒的距离保持不变,同时,下边界距底部颗粒的距离亦保持不变.在计算中,同样保持二维数组 $u(i,j)$ 中对应于槽道宽度的一维 i 不变.

设 t_1 时刻计算域的 j_{\max} 为 n_1 , 顶部颗粒最上方的 j 为 j_1 , 底部颗粒最下方的 j 为 j_2 , 而 t_2 时刻计算域的 j_{\max} 为 n_2 , 顶部颗粒最上方的 j 为 j'_1 , 底部颗粒最下方的 j 为 j'_2 , 则有

$$n_2 = n_1 + (j'_2 - j_2) - (j'_1 - j_1)$$

若 $j'_2 - j_2 > 1$ 且 $n_2 - n_1 > 1$, 令

$$u^{(t+1)}(i,j) = u^t(i,j+1) \quad (j = 0, 1, \dots, n_2 - 1)$$

$$u^{(t+1)}(i,j+1) = u^t(i,j) \quad (j = n_2 - 1)$$

若 $j'_1 - j_1 > 1$ 且 $n_2 - n_1 < 1$, 则令

$$u^{(t+1)}(i,j) = u^t(i,j-1) \quad (j = 0, 1, \dots, n_2 - 2)$$

$$u^{(t+1)}(i,j-1) = u^t(i,j) \quad (j = n_2 - 1)$$

这样,就能保证即使计算无限进行下去,悬浮颗粒也不会跑出计算域.

2 颗粒运动的格子 Boltzmann 数值模拟

本节运用 LBM 和上节介绍的动网格技术、局部数组方法以及 Euler-Lagrange 两套坐标技术模拟悬浮颗粒在二维无限长槽道内的运动.为了考察上述方法模拟颗粒运动的能力,我们详细研究一个圆形颗粒和一个椭圆颗粒、两个椭圆颗粒及多个椭圆颗粒在不同 Re 数流场中的运动,并将所得计算结果与有限元方法的结果进行严格比较.计算中依惯例 L, d, t 等采用 LBM 内部量纲系统.

2.1 一个圆形颗粒及一个椭圆颗粒在长槽道中的运动

2.1.1 一个圆形颗粒的运动

Feng 等^[11,12] 利用固体颗粒的牛顿动力学方程与有限元方法数值求解 Navier-Stokes 方程直接数值模拟了一个圆形颗粒在长槽道的运动. 他们发现: 考虑惯性作用时, 在某个 Re 数下, 固体颗粒开始作阻尼振动, 然后达到平衡状态. Aidun^[2] 用格子 Boltzmann 方法模拟了这个问题, 得到同样的结论. 为了考察本研究的算法和程序, 我们用格子 Boltzmann 方法模拟了相同条件下圆形颗粒在长槽道中的运动, 并将结果与有限元方法的结果进行比较.

在垂直槽道中设立坐标系, 如图 3 所示, 其中, x, y 分别是水平和垂直方向. 将直径为 d 的圆形颗粒分别放在宽为 $1.5d$ 和 $8d$ 的垂直槽道中. 设槽道无限长, 悬浮颗粒的初始速度为 0, 其初始位置为对窄槽道 ($L = 1.5d$), $s = x_0 = 0.4L$ 或对宽槽道 ($L = 8d$), $s = x_0 = 0.25L$. 将颗粒在垂直方向释放使之在重力作用下运动. 取颗粒直径 $d = 120$, $\tau = 0.8634$, 可求出 $\nu = (2\tau - 1)/6 = 0.12113$, 计算网格为 180×3000 . 这里, Re 数基于颗粒直径 d 和悬浮颗粒的最终平衡速度. 可通过改变颗粒的密度来控制平均终止速度和 Re 数. 在整个计算中, 应用动网格技术使计算域入流边界与运动颗粒的距离保持为 $10d$, 而出流边界与运动颗粒间的距离保持为 $15d$.

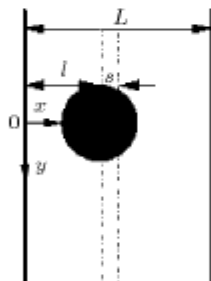
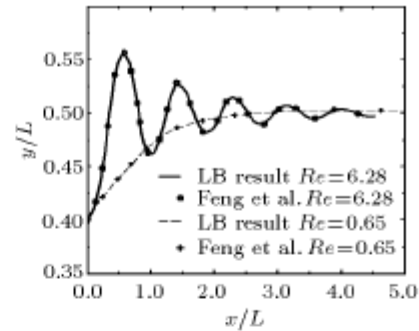
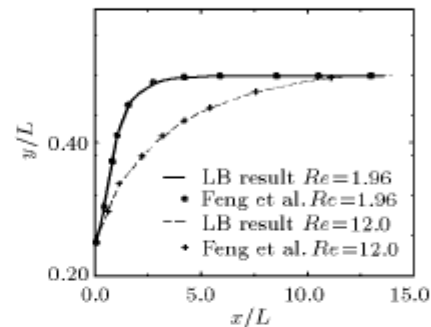


图 3 槽道坐标系

Fig.3 The channel coordinates

悬浮颗粒在不同宽度的槽道中的运动情况如图 4 和图 5 所示. 可见, 对窄槽道 ($L = 1.5d$), 当 Re 数较大时 ($Re = 6.28$), 颗粒在槽道中线 ($x = \frac{L}{2}$) 附近作衰减振荡运动, 直到中心线达到平衡位置. 而当 Re 数较小时 ($Re = 0.65$), 颗粒从其初始偏心位置迅速向槽道中心无振荡地逼近. 图 4, 图 5 中还给出 Feng 等^[11,12] 的有限元计算结果 (O 形与 + 形), 可见 LBM 计算结果与有限元计算结果吻合得很好. 而对宽槽道 ($L = 8d$), 此时, 无论 Re 数较大 ($Re = 12.0$) 或较小时 ($Re = 1.96$), 颗粒从其初始偏心位置迅速向槽道中心无振荡地逼近, 直至到达中心线达到平

图 4 圆形颗粒的轨迹 ($L = 1.5d$)Fig.4 The path of a circular particle. ($L = 1.5d$)图 5 圆形颗粒的轨迹 ($L = 8d$)Fig.5 The path of a circular particle ($L = 8d$).

衡位置. 而这一结果同样与 Feng 等^[11,12] 的有限元计算结果 (O 形与 + 形) 完全一致.

2.1.2 一个椭圆颗粒的运动

由于椭圆颗粒不像圆形颗粒那样具有完全的对称性, 因此其在黏性流场中的运动更加丰富多彩. 颗粒的惯性使其无法即时响应流场的变化, 而其几何形状非对称性与背景流场中的不稳定性相互作用, 从而出现更加复杂的流动现象及颗粒运动轨迹. Feng 等^[11,12] 用有限元方法直接模拟了一个椭圆颗粒在重力场作用下, 在不同 Re 数黏性流场中的运动. 这里, 运用 LBM 模拟与之相同参数条件下的椭圆颗粒在二维槽道中的运动, 分别考察椭圆颗粒形心的初始位置和初始偏角对其后续运动的影响, 以及不同 Re 数下椭圆颗粒的运动情况. 取槽道宽度 L 为椭圆长轴 d ($d = 10$) 的 8 倍, 椭圆长、短轴之比为 1.5. 计算中保持计算区域的入流边界与运动颗粒中心距离为 $15d$, 而出流边界与悬浮颗粒中心保持 $20d$ 的距离. 取计算网格为 80×350 , 椭圆颗粒初始速度为 0.

1) 椭圆颗粒初始位置在槽道中心的情况

首先, 研究不同 Re 数下椭圆颗粒的运动情况. 通过改变颗粒密度的方式来改变其 Re 数, 对应于 Re 数 12.8, 26.8, 35.7 的固流密度之比分别为 1.1,

1.2, 1.3. 颗粒的初始位置处于槽道中心线上, 其长轴与水平方向的倾角为 45° . 取 $\tau = 1$, 可求出 $\nu = (2\tau - 1)/6 = 0.16667$. 图 6, 图 7 给出 LBM 与有限元方法 [11,12] 的结果比较. 图 6, 图 7 中, 横坐标轴是 x/L , 纵坐标轴为 y/L 或旋转角度 θ . 从图 6, 图 7 中可知: 椭圆颗粒的横向运动与其旋转角度之间具有内在联系, 其变化规律相似; 随着 Re 数的增大, 椭圆颗粒的横向运动振幅越大, 达到稳态平衡的时间越长. 且 LBM 计算结果与 Feng 等 [11,12] 的结果 (\diamond 形、 $+$ 形和 \bullet 形) 吻合得很好, 表明 LBM 与有限元方法具有同样的精度. 由于文献 [11,12] 的计算结果均与实验结果符合得很好, 所以采用 LBM 得到的结果与实验结果一致.

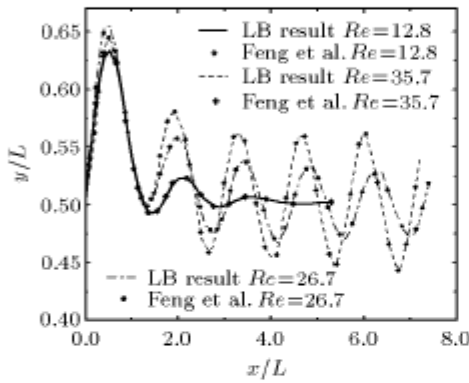


图 6 椭圆颗粒在垂直槽道内的运动轨迹

Fig.6 The path of an elliptical particle in a vertical channel

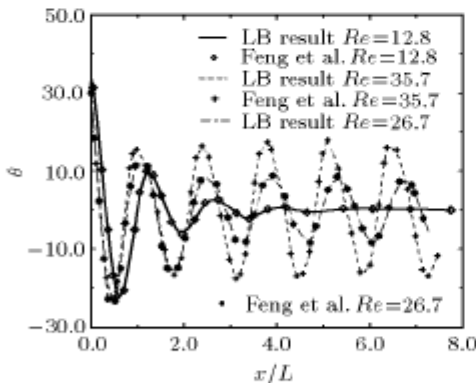


图 7 椭圆颗粒在垂直槽道内旋转角度变化

Fig.7 The changes of the rotating angle of an elliptical particle in a vertical channel

其次, 考察椭圆颗粒初始偏角对后续运动的影响. 设固流密度比为 1.3, $\tau = 0.8849$, 可求出 $\nu = (2\tau - 1)/6 = 0.1283$. 颗粒的初始转角分别为 $\theta_0 = 75^\circ$ 和 $\theta_0 = 15^\circ$, 其余参数同上. 从图 8 可见当椭圆颗粒初始位于槽道中心, 则无论其初始偏角如何, 都将在下落的同时在槽道中心线附近作振荡运动, 但

其最终所达到的运动 Re 数因其初始偏角的不同而有较大差别. 对初始偏角为 $\theta_0 = 15^\circ$ 的情形, 由图 9(a) 可知, 颗粒最终的垂直平衡速度为 0.0795, 所以 $Re = 6.196$; 而对初始偏角为 $\theta_0 = 75^\circ$ 的情形, 由图 9(b) 可知其最终垂直平衡速度为 0.114, 从而可得 $Re = 8.885$.

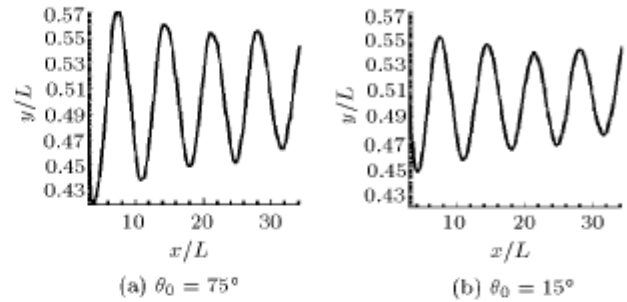


图 8 椭圆颗粒的运动轨迹 ($x_0 = 0.5L$)

Fig.8 The path of an elliptical particle. ($x_0 = 0.5L$)

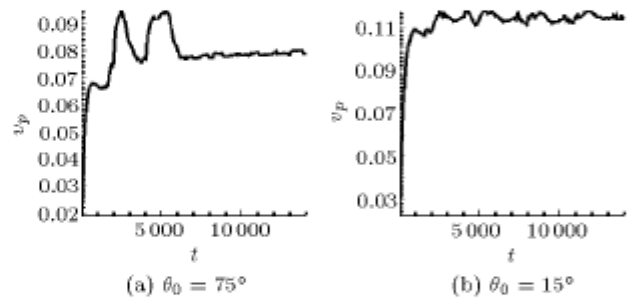


图 9 椭圆颗粒的 v_p 随 t 的演化 ($x_0 = 0.5L$)

Fig.9 The evolution of v_p with t of an elliptical particle. ($x_0 = 0.5L$)

从文献 [13] 可知, 在牛顿流体中当 Re 数较小时 (如 $Re = 0.31$), 椭圆颗粒运动的最终状态为其长轴与水平线重合, 即 $\theta = 0^\circ$. 而当 Re 数较大时 (如 $Re = 0.82$), 椭圆颗粒运动的最终状态为其长轴与水平线垂直, 即 $\theta = 90^\circ$. 我们的结果属于大 Re 数情形 ($Re = 6.196, Re = 8.885$), 即椭圆颗粒运动的最终状态为其长轴与水平线垂直, 与文献 [8] 的结论相符. 当 Re 数较大时, 初始位于槽道中心线上的椭圆颗粒的初始偏角对其最终运动速度有明显影响, 但其最终位置状态不受影响, 均呈垂直状, 如图 10 所示.

2) 椭圆颗粒初始位置偏离槽道中心线的情况

设颗粒初始位置为 $x_0 = 0.32L$, 仍取固流密度比为 1.3, $\tau = 0.8849$. 分别模拟初始转角 $\theta_0 = 0^\circ$ 和 $\theta_0 = 90^\circ$ 两种情况.

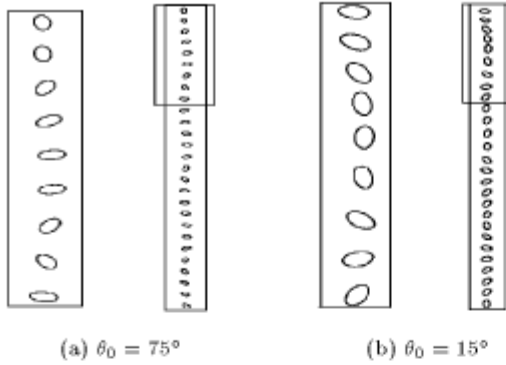


图 10 椭圆颗粒在垂直槽道内的运动轨迹 ($x_0 = 0.5L$)

Fig.10 The path of an elliptical particle in a vertical channel ($x_0 = 0.5L$)

由图 11, 图 12 可知, 当椭圆颗粒初始位置偏离槽道中心线时, 颗粒作阻尼运动, 最后在槽道的中心位置达到平衡. 且这时因初始偏角的不同会使得其最终运动状态 (如 Re 数) 有较大差别. 对初始偏角为 $\theta_0 = 0^\circ$ 的情形, 由图 12(a) 可知, 颗粒最终垂直平衡速度为 0.078, 所以可求得 $Re = 6.08$, 而对初始偏角为 $\theta_0 = 90^\circ$ 的情形, 由图 12(b) 可知颗粒最终垂直平衡速度为 0.12, 从而可得 $Re = 7.20$. 研究结果还表明: 对初始偏角 $\theta_0 = 90^\circ$ 的椭圆颗粒, 由于其最终 Re 数较大, 因此它在水平方向的速度、垂直方向的合力、水平方向的合力、合力矩及颗粒旋

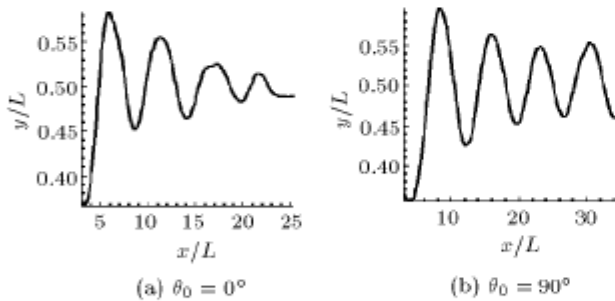


图 11 椭圆颗粒的运动轨迹 ($x_0 = 0.32L$)

Fig.11 The path of an elliptical particle ($x_0 = 0.32L$)

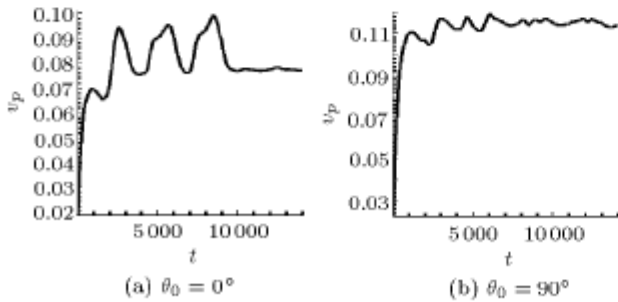


图 12 椭圆颗粒的 v_p 随 t 的演化 ($x_0 = 0.32L$)

Fig.12 The evolution of v_p with t of an elliptical particle ($x_0 = 0.32L$)

转角度等均比对应于 Re 数较小的 $\theta_0 = 0^\circ$ 的情形下的对应值大, 且其变化也较为复杂. 因此, 当椭圆颗粒初始位置偏离槽道中心线时, 其初始位置和初始偏角对其后续运动都有重要影响.

2.2 两个椭圆颗粒在垂直槽道内的运动

两个椭圆颗粒在垂直槽道内的运动是一个有趣的过程. 当 $Re \ll 1$ 及 $St \ll 1$ 时, Navier-Stokes 方程变成准定常 Stokes 方程. Feng 和 Joseph^[14] 用有限元法直接数值模拟了控制颗粒运动的定常和非定常 Stokes 方程. Aidun^[2] 采用 LBM 和与本文不同的处理动网格的方法研究了两个相同椭圆颗粒在垂直槽道内的运动问题.

为了便于比较, 采用与文献 [14] 和文献 [2] 完全相同的参数. 设椭圆颗粒的长短轴之比为 2:1, 其长轴 $d = 10$. 流固密度比 $\alpha = \rho_p/\rho = 1.003$, 形状参数 $q = m/(\rho_p d^n) = 1/(8\pi)$, 其中, m 是固体颗粒的质量, ρ_p 和 ρ 分别是固体颗粒和流体的密度, 对二维问题取 $n = 2$. 设初始时刻颗粒的长轴与重力方向平行, 且两个颗粒的初始位置完全对称, 它们在距长槽道中心线 $s = d/2$ 处从静止开始运动. 通过改变流体的运动黏性系数 ν 来得到不同的 $Re = Ud/\nu$, 其中特征速度 U 为颗粒的最终速度. 当 ν 为 0.01, 0.12, 0.72, 1.09 时, 颗粒偏离槽道中心的距离和颗粒旋转的角度计算结果如图 13 所示. 图中 s, θ 和 x 分别是颗粒偏离中心线的距离、其偏离

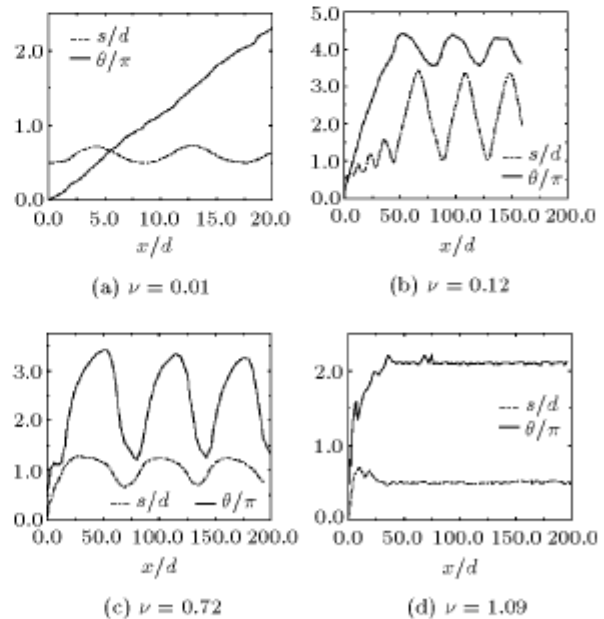


图 13 两个相同椭圆颗粒在无限长垂直槽道内的运动轨迹

Fig.13 The path of two identical elliptical particles in an infinite long vertical channel

初始状态的角度和偏离初始位置 ($x = 0$) 的距离.

图 14 为 Aidun^[2] 的结果, 其参数与图 13 的完全相同. 在图 14(a) 中, (i) 为 Feng 和 Joseph^[14] 忽略流体和颗粒的惯性的结果, (ii) 为 Feng 和 Joseph^[14] 包括流体和颗粒的惯性的结果, (iii) 为 Aidun^[2] 用 LBM 求得的结果. 对于小 Re 数, 我们的结果 (图 13) 及 Aidun^[2] 的计算结果与 Feng 和 Joseph^[6] 忽略流体和颗粒的惯性的结果吻合得很好. 将图 13 与图 14 进行比较, 可知二者在细节上都是几乎完全一致的. 因此采用本文的方法研究多个悬浮颗粒的运动是可行的.

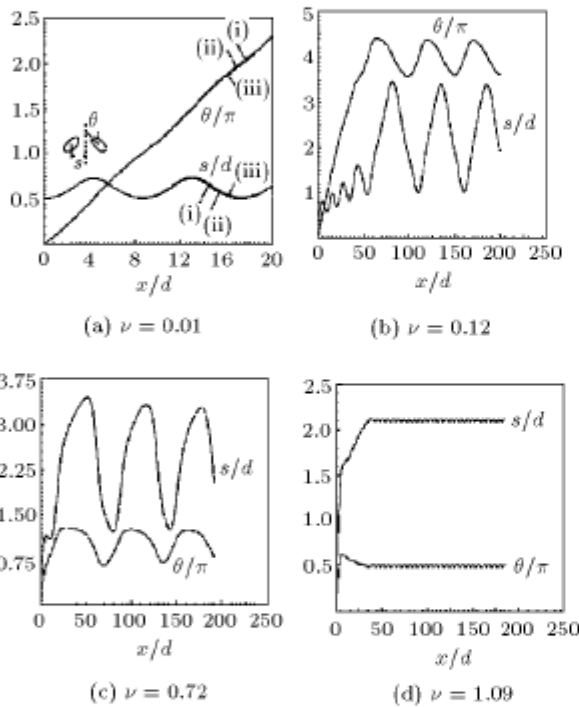


图 14 Aidun 模拟的两个相同椭圆颗粒在无限长垂直槽道内的运动轨迹

Fig.14 The path of two identical elliptical particles in an infinite long vertical channel simulated by Aidun

图 15 和图 16 分别为 Aidun^[2] 和我们采用 LBM 模拟的在不同时刻不同 ν 的椭圆颗粒在槽道中的运动轨迹, 可见二者完全一致. 当椭圆颗粒在长槽道中运动时, 它作周期性旋转. 从 $\nu = 0.01$ 的计算结果 (图 13(a) 或图 14(a)) 可知, 由于惯性力较小, 在每一循环后颗粒有轻微的偏离, 最后颗粒的运动偏离第 1 个时间周期状态 (该状态可用 $Re = 0$ 时的极限圆来描述), 而到达另一个时间周期状态. 第 2 个极限圆与第 1 个极限圆在定性上是不同的, 因为颗粒的轨迹由“完全翻跟斗”变成周期“打滚”移动. 这些结果表明: 当 $\nu = 0$ 时, 由于没有惯性, 系统

瞬时到达一个时间周期状态 T , 它是一个完全翻跟斗的极限圆. 当 $\nu > 0$ 时, 由于颗粒的惯性, 这个时间周期状态就不存在了, 且这种惯性会积累起来, 最后到达完全阻止颗粒旋转的目的. 在 $Re > 1$ 或更大时, 悬浮椭圆颗粒快速地到达另一个定性上不同的平衡状态. 在这一 Re 数范围中, 存在不同周期模型中稳定状态之间的瞬态区域.

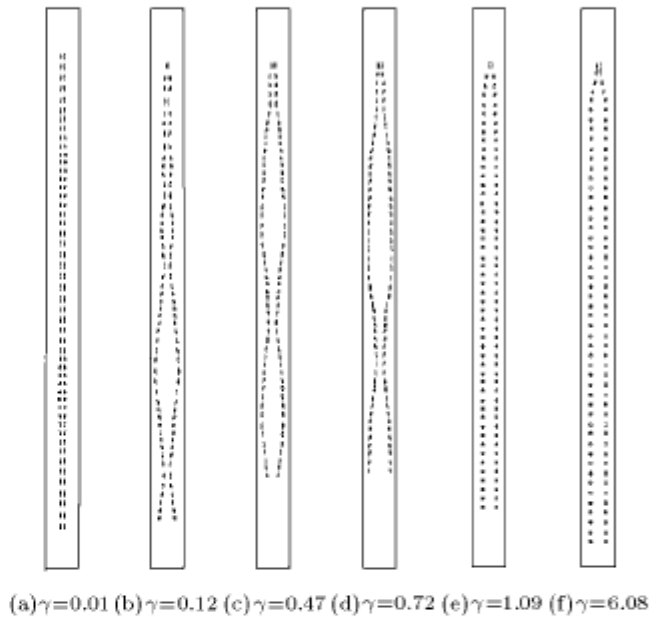


图 15 Aidun 模拟的椭圆颗粒运动情况
Fig.15 The motion of two elliptical particles simulated by Aidun

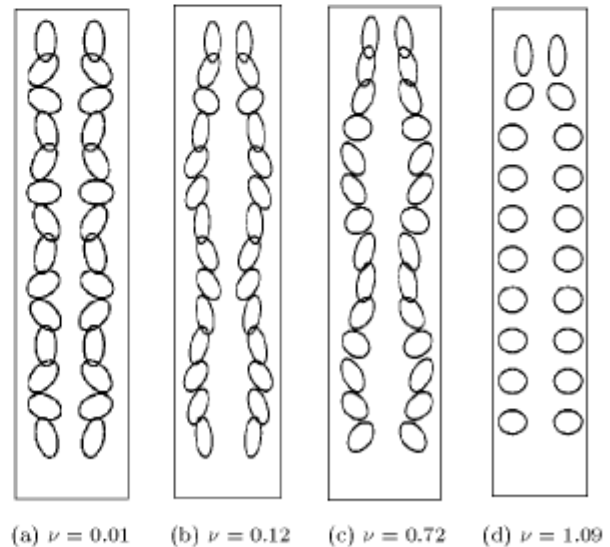


图 16 两个椭圆颗粒在垂直槽道内的运动情况
Fig.16 The motion of two elliptical particles in a vertical channel

2.3 多个椭圆颗粒在垂直槽道内的运动

下面，模拟更为复杂的椭圆颗粒群在垂直槽道中的运动. 设椭圆颗粒的长轴 $d = 10$, 短轴为 6, 固流密度比为 1.1, $\tau = 0.93$, 则由 $\nu = (2\tau - 1)/6$ 可求得 $\nu = 0.14$. 在初始时刻, 将 18 个椭圆颗粒有规则地布置在槽道中, 如图 17(a) 所示. 它们在重力作用下由静止状态开始运动, 设底部边界流体的速度为 0, 且底边界与最下部颗粒中心的距离为 100; 在顶部, 设与边界垂直方向的速度梯度为 0, 且顶部边界与最上部颗粒中心的距离保持 100 不变.

由以上研究可知: 当椭圆颗粒初始位置偏离槽道中心线时, 其初始位置和初始偏角对其后续运动具有重要影响, 再加上颗粒与颗粒及颗粒与边界之间的相互作用, 初始位于不同位置的颗粒会以不同的速度有快有慢地运动. 因此, 在重力方向的计算区域在模拟过程中会增大. 例如, 在初始时刻计算

区域大小为 128×300 , 而在 $t = 30000$ 时计算区域增大为 128×598 .

2.3.1 悬浮椭圆颗粒群的运动图像及其转角演化规律

图 17 给出悬浮椭圆颗粒群在槽道中不同时刻的运动图像. 可见, 当 $t = 500$ 时所有颗粒均从水平位置沿顺时针方向转过 35° . 此后颗粒开始相互碰撞. 在 $t = 2500$ 后颗粒群开始慢慢地解散. 由于左边颗粒与左边壁的距离大于右边颗粒与右边壁的距离, 散开过程从颗粒群的左下角开始, 并传到相邻的颗粒. 因此, 由于流体与颗粒及颗粒与颗粒之间强烈的相互作用, 颗粒的位置和转角变得越来越随机. 从初始的集体碰撞演变成各个颗粒间的单独碰撞, 使得每个颗粒都具有不同的方向. 这一过程与 Qi 等^[5]模拟的多个矩形颗粒的运动类似.

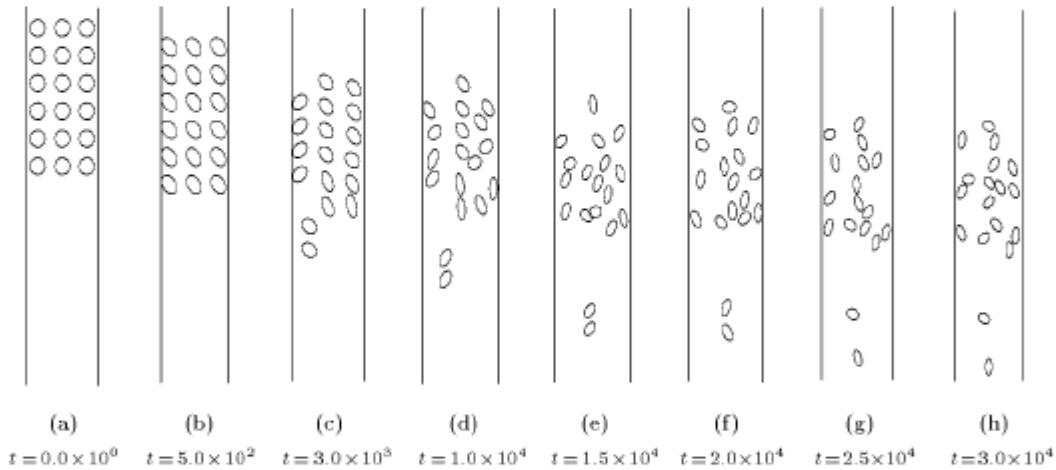


图 17 椭圆颗粒在不同时刻的运动图像

Fig.17 The motion of elliptical particles at different time

定义颗粒群的平均转角 $\bar{\theta}$ 为在 t 时刻所有颗粒的转角的平均值. 图 18 中的实线和虚线分别为椭圆颗粒群平均转角和第 7 个椭圆颗粒转角随时间演化的曲线. 图 19 是 Qi 等^[12]模拟的矩形颗粒平均转角和第 7 个矩形颗粒转角随时间演化的曲线. 可见, 在 $t < 2500$, 椭圆颗粒群的平均转角与个别颗粒 (第 7 个颗粒) 的转角基本相同, 随后它们的差别逐渐增大. 这说明在 $t = 2500$ 之前, 椭圆颗粒群基本上形成一个整体, 颗粒间没有相互运动. 在 $t = 2500$ 之后, 椭圆颗粒群解体, 颗粒群的平均转角与个别颗粒转角间的相关性随时间推移而逐渐减小. 对矩形颗粒群也可以得出类似的结论. 从图 18 和图 19 还

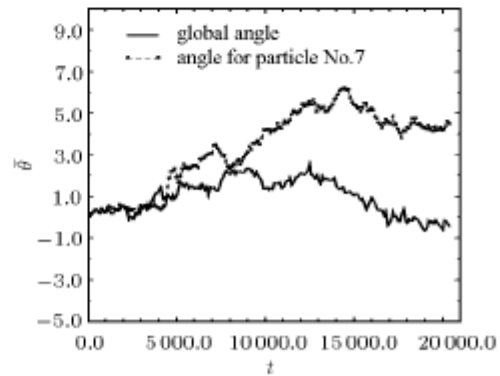


图 18 椭圆颗粒转角 $\bar{\theta}$ 随 t 的演化规律

Fig.18 The rotating angle $\bar{\theta}$ of elliptical particles changes with t

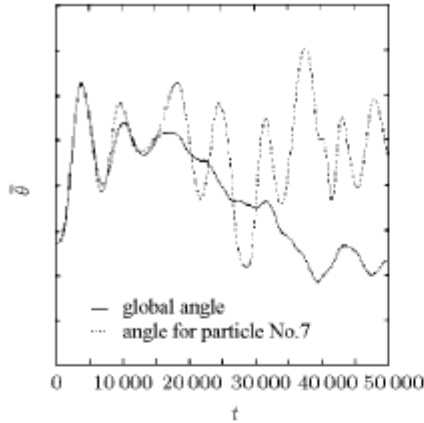


图 19 矩形颗粒转角 $\bar{\theta}$ 随 t 的演化规律

Fig.19 The rotating angle $\bar{\theta}$ of square particles changes with t

可以看到颗粒群的平均转角最终趋于 0. 这说明经过长时间演化, 颗粒间的转角相关性减弱.

定义颗粒群在垂直方向的平均速度 \bar{v}_p 为在 t 时刻所有颗粒的垂直速度的平均值. 从图 20 可见: 椭圆颗粒群从静止状态开始运动后, 在重力场的作用下, 其平均速度急剧增大, 在 $t = 2500$ 附近达到一个局部最大值, 然后急速下降. 结合颗粒群平均转角的演化情况 (图 18), 可以清楚地看到: 这是因为当 $t < 2500$ 时, 颗粒群作整体运动, 因此可将其视为一个大颗粒, 在重力的作用下, 其下降速度急速增大. 但在 $t = 2500$ 之后, 颗粒群解体, 颗粒间相互运动加剧, 造成整体平均速度急速下降. 随后直至 $t = 13000$, 椭圆颗粒群中颗粒分布没有显著特征, 保持均匀状态, 因此其平均速度缓慢增大. 在 $t > 13000$ 后, 颗粒间出现局部成团、随后又散开的准周期运动状态, 如图 17 所示. 因此, 颗粒群的平均速度曲线出现振荡, 即当颗粒群中颗粒间局部成团趋势占主导地位时, 其平均速度增大; 而当局

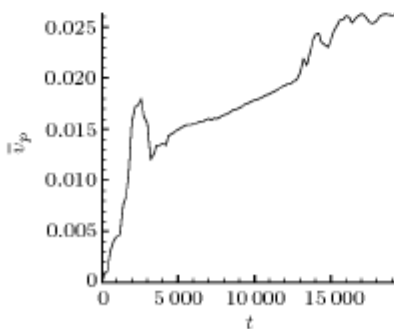


图 20 椭圆颗粒群的 \bar{v}_p 随 t 的演化过程

Fig.20 The evolution of \bar{v}_p of a group of elliptical particles with t

部颗粒团聚体趋势占优时, 其平均速度减小.

由于椭圆颗粒的流动分离比矩形颗粒的小, 所以其尾迹比矩形颗粒的小, 对颗粒运动影响相对较小, 因此其颗粒聚散特征不如矩形颗粒那么明显, 从而使得椭圆颗粒群平均速度曲线的振幅较小, 且从图 18 和图 19 可见单个椭圆颗粒的转角变化也比矩形颗粒的小得多. 从图 20 还可见, 在重力、边壁干扰、背景流场、单个颗粒尾流中的涡脱落及颗粒间的刚体碰撞等因素的影响下, 颗粒群的平均速度不会无限增大, 大约在 0.026 附近振荡. 由此可知其平均雷诺数 $\overline{Re} = (\bar{v}_p d) / \nu \approx 1.86$.

2.3.2 颗粒运动的串结构

悬浮颗粒群的运动随时间推移变得越来越随机、复杂, 但仍有规律可循, 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——T 型结构和平行结构. 当一个颗粒被卷入另一颗粒的尾流中时, 就会形成由两个颗粒组成的 T 形结构. 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, 从而吸引其它颗粒加入以形成更大的颗粒团, 但当颗粒团吸入了其它颗粒或颗粒团后, 其内部相互作用加强, 从而又使得颗粒团产生解散的趋势. 多个颗粒的聚散过程一般经历: 相吸—碰触—散开几个阶段. 从图 20 和图 21 中的颗粒群平均速度演化过程可以看到颗粒团的聚散对悬浮颗粒群整体运动有重要影响.

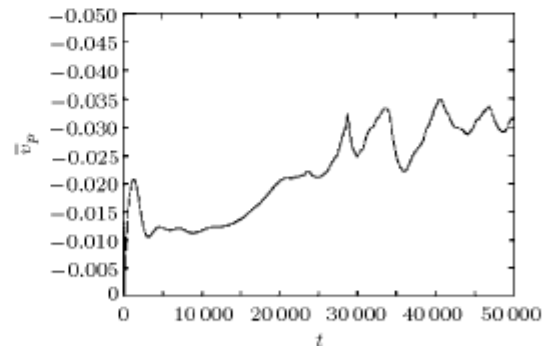


图 21 矩形颗粒群的 \bar{v}_p 随 t 的演化过程

Fig.21 The evolution of \bar{v}_p of a group of square particles with t

3 结 论

(1) LBM 模拟颗粒运动的结果与有限元方法的完全一致, 且具有速度快、处理复杂边界条件十分方便、特别适合并行计算等优点;

(2) 计算实践表明本文发展的一系列处理动网格、不规则颗粒旋转等问题的数值方法, 如动网格技术、局部数组和 Euler-Lagrange 两套坐标技术等正确、可行;

(3) 通过对椭圆颗粒群运动的数值模拟和对照他人对矩形颗粒群的研究, 本文分析了其复杂运动的规律, 并提供了合理的物理解释, 从而对了解其它类似不规则悬浮颗粒运动规律提供了线索.

笔者认为在未来的研究中有必要深入分析、研究三维颗粒的运动和生长过程, 探讨湍流对悬浮颗粒运动和生长过程的影响, 研究电磁场与悬浮颗粒相互作用的多场耦合效应.

致谢 谨向 Johns Hopkins University 的陈十一教授表示衷心的感谢. 感谢解放军理工大学理学院流体力学研究中心提供并行机群和很好的工作条件, 确保了本研究顺利进行.

参 考 文 献

- 1 Aidun CK, Lu YN. Lattice Boltzmann method of solid suspensions with impermeable boundaries. *J Statist Phys*, 1995, 81: 49~61
- 2 Aidun CK, Lu YN, Ding EJ. Direct analysis of particulate suspensions with inertia using the discrete Boltzmann equation. *J Fluid Mech*, 1998, 373: 287~311
- 3 Ladd AJC. Numerical simulation via adiscretized Boltzmann equation, Part II. Numerical results. *J Fluid Mech*, 1994, 271: 311~339
- 4 Ladd AJC. Hydrodynamic screening in sedimenting suspensions of non-Brownian spheres. *Phys Rev Lett*, 1996, 76: 1392~1395
- 5 Qi DW. Lattice Boltzmann simulation of fluidization of rectangular particles. *Int J Multiphase Flow*, 2000, 26: 421~433
- 6 Chen S, Chen H, Martinez D, et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Phys Rev Lett*, 1991, 7: 3776~3779
- 7 Qian YH, d'Humieres D, Lallemand P. Lattice BSK models for Navier-Stokes equation. *Europhys Lett*, 1992, 17: 479~484
- 8 He X, Luo L, Dembo M. Some progres in lattice-Boltzmann method, Part 1. Nonuniform mesh grids. *J Comput Phys*, 1996, 129: 357~363
- 9 Ziegler DP. Boundary condition for lattice-Boltzmann simulations. *J Stat Phys*, 1993, 71: 1171~1177
- 10 Ladd AJC. Numerical simulation via adiscretized Boltzmann equation, Part I. Theoretical foundation. *J Fluid Mech*, 1994, 271: 285~309
- 11 Feng J, Hu HH, Joseph DD. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid, Part 1. Sedimentation. *J Fluid Mech*, 1994, 261: 95~134
- 12 Feng J, Hu HH, Joseph DD. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid, Part 2. Couette and Poiseuille flows. *J Fluid Mech*, 1994, 277: 271~301
- 13 Huang PY, Hu HH, Joseph DD. Direct simulation of the sedimentation of elliptic particles in Oldroyd-B fluids. *J Fluid Mech*, 1998, 362: 297~326
- 14 Feng J, Joseph DD. The unsteady motion of solid bodies in creeping flow. *J Fluid Mech*, 1995, 303: 83~102

NUMERICAL SIMULATIONS OF SUSPENSION MOTION OF IRREGULAR SHAPED PARTICLES VIA THE LATTICE BOLTZMANN METHOD

Wu Chuijie^{*,**} Zhou Juguang[†]

^{*}(*Res. Center for Fluid Dyn., Science School, PLA Univ. Sci. & Tech., Nanjing 211101, China*)

^{**}(*State Key Lab. Turbulence & Complex System, Peking Univ., Beijing 100871, China*)

[†](*Inst. Artillery, Univ. Defence Sci. & Tech., Changsha 410000, China*)

Abstract In this study, we combine the Newtonian mechanics with lattice Boltzmann method(LBM) to simulate the motion of irregular shaped particle suspensions. A moving boundary method to follow the motion of moving particles is used, which can not only trace the motion of particles for a long time, but also increase the speed of computation and decrease the usage of computer memory. We also analyze in detail of the forces acted on the elliptical and irregular particle suspensions. In the study, with the comparison of our results of the motion of elliptical particles with others results of the motion of long square particles, reasonable physical explanations of the complex phenomena are found, which can be used as a guide to understand the motion of particle suspensions with more general irregular shapes. It is shown that the lattice Boltzmann method is as accurate as the finite element method in the simulation of motion of particle suspensions and has a lot of advantages, such as fast and can handle complex boundaries easily. The code of LBM is much shorter than other CFD methods and is particularly suitable for large scale parallel computation.

Key words lattice Boltzmann method, motion of particle suspensions, moving mesh, Navier-Stokes equations, parallel computation