

直接模拟中不同边界条件的实施及对 沉降规律的影响*

刘汉涛 常建忠†

(中北大学机电工程学院, 太原 030051)

(2012年11月16日收到; 2012年12月7日收到修改稿)

在牛顿流体中, 对颗粒在 4 种不同边界的垂直通道中的沉降运动进行了直接数值模拟. 计算结果表明: 通过计算区域随颗粒运动而移动构建的无限长通道能准确模拟颗粒自由下落到稳定沉降的发展过程; 周期性边界条件由于流场变化, 对颗粒沉降产生了影响, 不能模拟颗粒的自由沉降过程; 底部封闭边界适合模拟封闭容器内颗粒与固壁的相互作用过程, 若颗粒达到稳定沉降, 也能模拟无限长通道内的沉降过程; 流化边界适合模拟流化床内气固两相流动. 计算结果有助于更好地理解和使用不同边界条件.

关键词: 直接数值模拟, 边界条件, 沉降, 任意拉格朗日 - 欧拉方法

PACS: 44.25.+f, 47.11.-j

DOI: 10.7498/aps.62.084401

1 引言

直接数值模拟 (direct numerical simulation, DNS) 方法是在与紊流耗散尺度相当的网格上直接求解瞬态 Navier-Stokes 方程, 随着计算机内存的发展, 已成为颗粒两相流研究的重要手段^[1,2]. 直接数值模拟颗粒两相流动过程, 可在介观尺寸上阐明该复杂流动中颗粒的运动规律、相间分界面的移动变形、颗粒相相互作用形成的结构以及传热和流动的相互作用机制, 得到颗粒两相流的一些新特征. 进一步分析数值计算结果, 总结一些重要的无量纲特征参数与流场特征变化之间的规律, 如得到颗粒群阻力系数、传热系数. 这无论是在学术理论还是在工程应用上都有非常重要的意义^[3,4]. 自 20 世纪 70 年代初发展直接数值模拟以来, 人们提出了各种直接数值模拟方法, 如颗粒点源直接模拟和完全或真正直接模拟 (fully resolved DNS 或 true DNS). 前者把颗粒处理成点源, 气相采用谱方法、高阶有限差分法直接求解; 后者将颗粒周围网格缩小到颗粒尺寸以下进行流动计算, 颗粒占据有限体

积, 颗粒的受力不通过模型计算, 而是通过积分表面的黏性力和压力获得, 该方法又被称为真正直接数值模拟 (TDNS). 数值实现方法主要包括任意拉格朗日 - 欧拉法 (ALE) 有限元 (FEM) 方法、格子玻尔兹曼方法 (LBM)、虚拟区域法 (DLM)、界面跟踪法 (front-tracking)、内嵌边界法 (IB) 等^[5-8].

虽然直接模拟发展了多种数值方法, 但在颗粒两相流动的研究中, 通道底部大都采用固壁边界、周期性边界或模拟流化床采用的流化边界条件. Yu 等^[9]用虚拟区域法分别对有热对流影响的颗粒在封闭四方腔内的沉降、圆形颗粒在具有周期性边界的 Couette 流中的自由悬浮进行了计算. Wan^[10]采用多重网格虚拟边界元法 (multigrid fictitious boundary method, MFBM) 对固体颗粒的沉降进行了直接模拟, 容器四周边界为无滑移条件. 直接模拟具有高精度、高分辨率的要求, 从而能分辨出湍流中详细的空间结构及变化剧烈的时间特性. 不同边界条件的设置对颗粒轨迹、流场结构都有较大的影响, 导致文献中计算结果存在差异. 如要对无限长通道内颗粒沉降进行模拟, 若底部采用封闭固壁边界, 固壁边界会对颗粒运动造成

* 国家自然科学基金 (批准号: 50976108) 和山西省国际科技合作项目 (批准号: 2011081040) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: changjz01@nuc.edu.cn

一定影响. 采用周期性边界条件模拟无限大区域内的流动, 也由于区域内变化了的流场对沉降产生影响. 以致于 Chen 等^[11] 在耗散粒子动力学方法中提出了以区域尺寸比为准则的条件要求. 为模拟无限大区域内的流动并消除周期性边界条件的影响, Thompson^[12] 提出了无反射边界条件, Berenger^[13] 提出非物理最匹配层 (perfectly matched layer, PML) 缓冲区, 设置边界条件. 尽管如此, 这些方法在直接数值模拟中仍需不断完善和改进, 以满足高精度的要求. 本文对在直接模拟中经常采用的固壁边界、周期性边界、流化边界进行了对比, 并通过计算网格的移动实现了无限长通道问题的准确模拟.

2 方程及数值方法

在牛顿流体中, 固体颗粒在重力作用下沉降, 如图 1 所示. 颗粒的质心为 $X(t)$, 流体温度与颗粒温度相同, 牛顿流体的连续性方程、运动方程分别为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_f \mathbf{g}. \quad (2)$$

颗粒平移和旋转的控制方程为

$$M_i \frac{dU_i}{dt} = \mathbf{G}_i + \mathbf{F}_i, \quad (3)$$

$$\frac{d(I_i \Omega_i)}{dt} = \mathbf{T}_i, \quad (4)$$

其中,

$$\frac{d\mathbf{X}_i}{dt} = \mathbf{U}_i, \quad (5)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \Omega_i, \quad (6)$$

i 表示第 i 个颗粒, M_i 和 I_i 分别是颗粒的质量和转动惯量, 分别为 $\pi\rho_s d^2/4$ 和 $\pi\rho_s d^4/32$; \mathbf{X}_i , \mathbf{U}_i 和 Ω_i 是颗粒的位置、线速度和角速度; \mathbf{G}_i , \mathbf{F}_i 和 \mathbf{T}_i 分别是体积力, 流体对颗粒的作用力和力矩.

流体作用在颗粒表面上的力 F_i 通过积分颗粒表面的受力得到:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = -pn + 2\eta \mathbf{D} \cdot \mathbf{n}, \quad (7)$$

其中,

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (8)$$

为流体应变率, \mathbf{n} 为颗粒表面外向法线单位向量.

$$[\mathbf{T}_x, \mathbf{T}_y, \mathbf{T}_z] = \int (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{X}}) \times (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma, \quad (9)$$

上式在颗粒表面上积分, 其中, $\bar{\mathbf{X}} = [X, Y, Z]^T$ 为颗粒的质点坐标.

在固体颗粒的表面, 流体的速度与颗粒运动速度相等, 也就是采用了无滑移的边界条件 (no slip boundary condition):

$$\mathbf{u} = \mathbf{U}_i + \Omega_i \wedge \mathbf{r}_i. \quad (10)$$

颗粒与通道壁之间的排斥力 \mathbf{F}_{ij}^P 满足:

$$\mathbf{F}_{ij}^W = \begin{cases} 0 & d_i > 2R_i + \rho \\ \frac{1}{\varepsilon_w} (\mathbf{G}_i - \mathbf{G}'_i) [(2R_i + \rho)^2 - d_i^2] & \\ 0 & d_i \leq 2R_i + \rho \end{cases}, \quad (11)$$

其中 $d_i = |\mathbf{G}_i - \mathbf{G}'_i|$ 是颗粒 B_i 的中心与通道壁 Γ_j 另一侧假设颗粒的中心之间的距离 (如图 2), 颗粒半径为 R_i , $\varepsilon_w = 5 \times 10^{-7}$ 为与壁面相关的刚度参数.

本文分别采用 4 类边界条件: 周期性边界、底部封闭边界、流化边界、无限长通道. 周期性边界条件在 AB, CD 边界施加. 施加底部封闭边界条件时, 将 CD 边界设为固壁边界, 颗粒接近通道壁时, 其相互间作用满足 (11) 式. 施加流化边界条件时, 空床流速为 -0.8 cm/s. 上述三类边界条件在模拟计算过程中, 计算区域不随颗粒运动而移动. 对无限长通道设置:

BC, CD, DA 边上: $v = 0$;

AB 边上: $\tau_{xy} = \tau_{yx} = 0$, τ 表示切应力.

对无限长通道, 在模拟过程中, 颗粒离顶部 AB 和底部 CD 的距离保持不变, 计算区域将随着颗粒的运动而移动, 并在每一时间步内重新定义, 但区域的大小和颗粒在区域中的相对位置不变, 即颗粒在计算区域中与顶端和底端的距离始终不变. 在 CD 边界上, $v = 0$ 表示 CD 边界离颗粒无限远, 以致沉降颗粒在 CD 边界上驱动的净流量为 0.

应用牛顿定律跟踪颗粒运动, 颗粒的受力通过积分颗粒表面的黏性应力和压力获得, 避免了对颗粒受力采用的假设, 从而实现了颗粒两相流运动的真正直接数值模拟. 采用 ALE 方法, 方程时间离散采用有限差分方案, 空间离散采用 Galerkin 有限元方案. 数值模拟的网格缩小到颗粒尺寸以下, 颗粒占据有限体积, 采用 Delaunay-Voronoi 法生成非结构化 (unstructured grid) 三角形单元网格的过程, 当单元网格严重变形时网格将重新划分. 颗粒位置的更新将由其速度决定, 时间步长由颗粒的速度和

加速度来自动调整, 方程的非线性部分由牛顿迭代求解, 线性部分由 GMRES 算法来求解 [14,15].

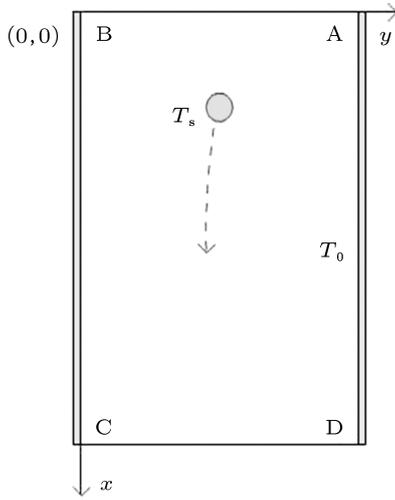


图1 计算区域示意图

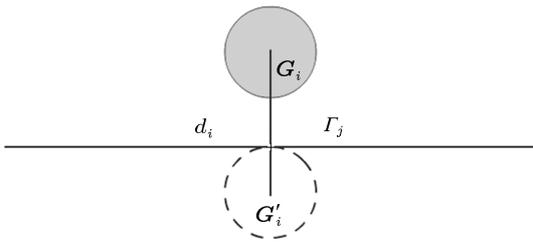


图2 计算颗粒与通道壁之间排斥力时的假设颗粒

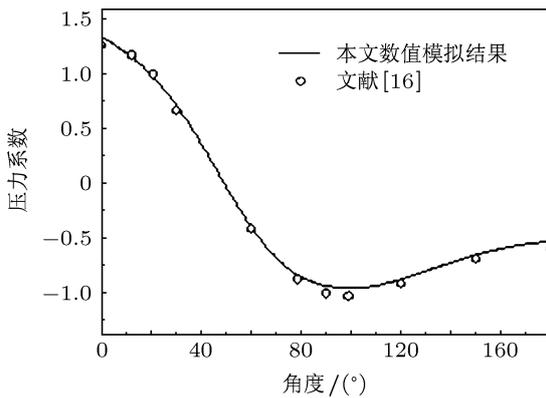


图3 圆柱体表面的压力系数分布

3 测试算例

为验证程序的准确性, 对绕圆柱体的强制对流进行直接模拟. 计算条件与文献 [16, 17] 中的几何

参数相同. 当雷诺数 Re 为 20 时, 用本文的方法计算所得到的圆柱体表面压力系数如图 3 所示. 其中

$$C_p = \frac{D}{\rho U^2 / 2}$$

可以看出, 本文采用直接模拟的计算结果与文献 [16] 采用有限差分方法计算的结果, 文献 [17] 采用有限元计算的结果相当一致. 图 4 为计算中绕流圆柱体速度矢量.

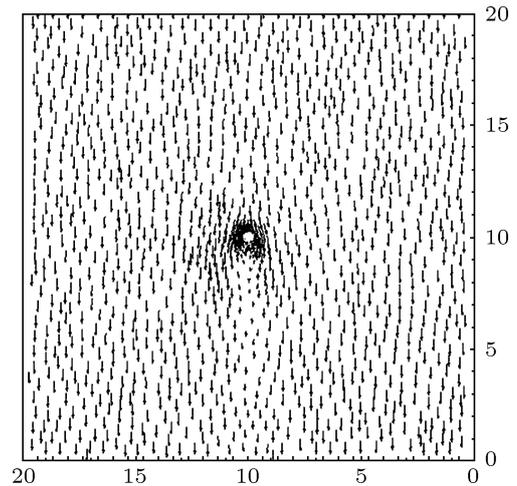


图4 绕流圆柱流体矢量图

4 计算结果及讨论

直径为 d 的颗粒在宽为 $L = 4d$, 长为 $15d$ 的通道中心线上由静止开始沉降. 颗粒密度略大于流体, 通过改变颗粒的密度, 可控制颗粒 x 方向达到的最终平衡速度, 本文计算中颗粒与流体材料相同, 密度比 $\rho_s/\rho_0 = 1.00232$. 初始时刻, 4 种边界条件下, 颗粒中心与计算区域的顶端和底端的距离均为 $7.5d$. 步长为 0.01 s, 计算时间为 60 s.

在无限长通道内, 从图 5—8 可以看出, 颗粒在通道中心释放后, 沿通道中心线沉降, 在本文的沉降速度下, 没有横向摆动, 大约 7 s 以后, 速度达到最大值, 此时颗粒受力为 0, 最终 Re 为 21.1, 此后沿通道中心线在此 Re 下稳定沉降. 在整个计算过程中, 计算区域将随着颗粒的运动而移动, 颗粒始终保持在计算区域中部 (图 9(a)), 加上 CD 边界上条件 $v = 0$, 从而保证了通道为无限长通道. 计算过程中, 颗粒前部流场仅受颗粒运动的影响.

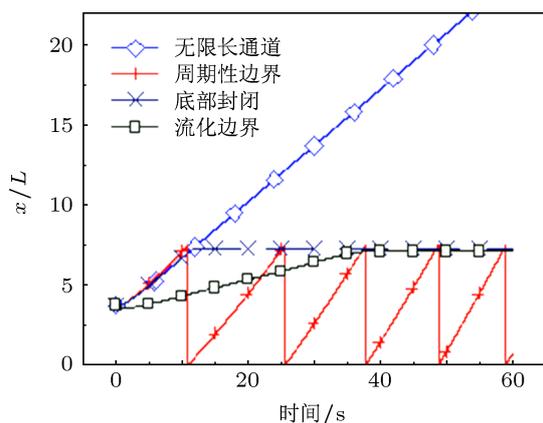


图5 不同时刻颗粒竖直方向沉降轨迹

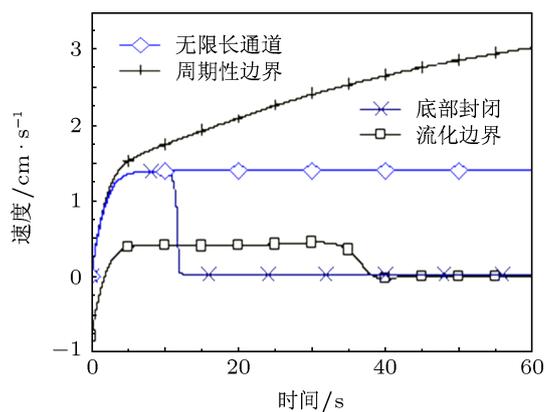


图7 不同时刻颗粒沉降速度

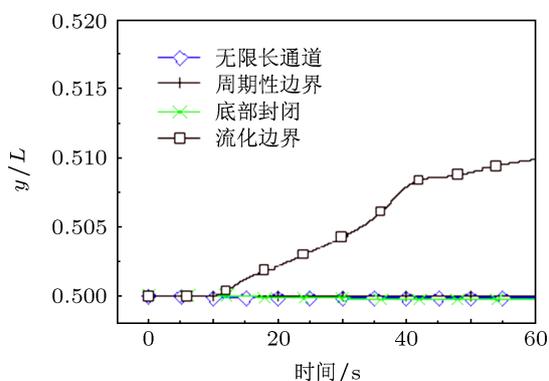


图6 不同时刻颗粒水平方向沉降轨迹

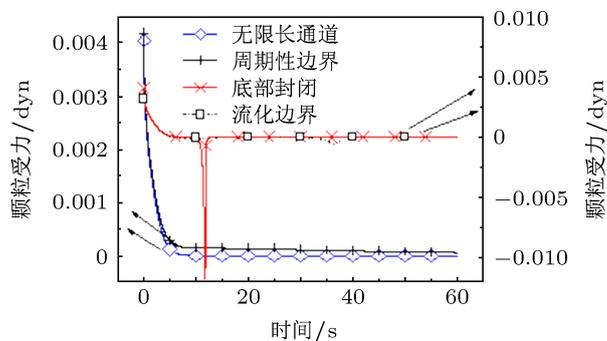


图8 不同时刻颗粒受力

在周期性边界条件下,从沉降轨迹看,颗粒在水平方向上的沉降轨迹与无限长通道内相同,都是

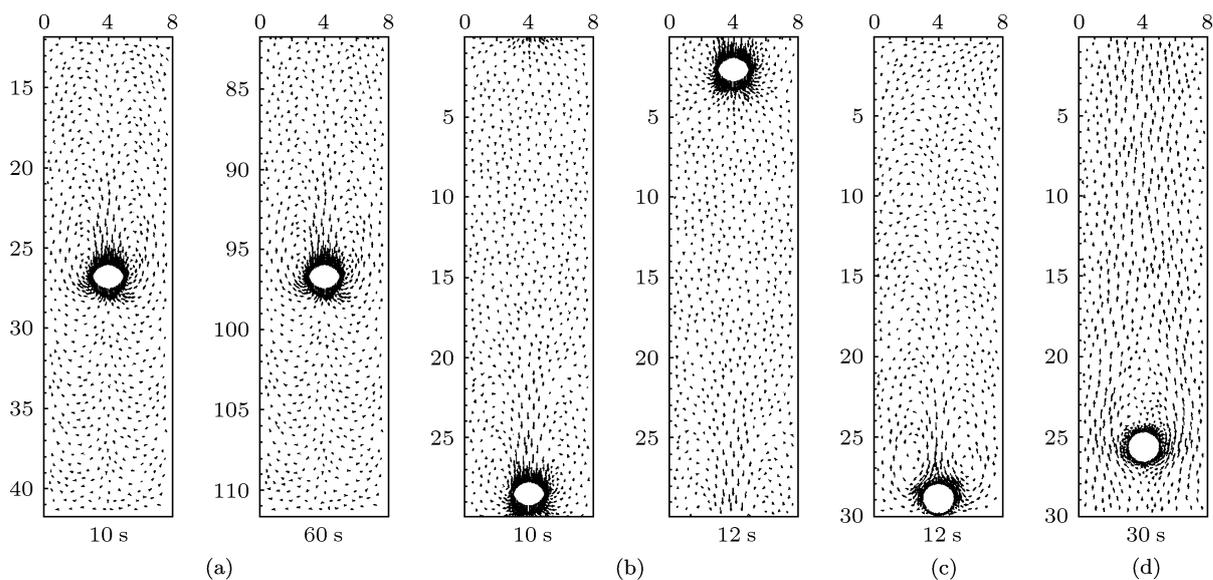


图9 不同时刻4种边界条件下瞬时速度矢量图 (a)无限长通道; (b)周期性边界; (c)底部封闭; (d)流化边界

沿通道中心线沉降; 在竖直方向, 颗粒沉降到通道底部后, 又返回到通道顶端重复沉降过程. 但与无限长通道相比, 在周期性边界条件下, 颗粒沉降的速度不断增大, 其最终受力也不再为 0, 在整个计算过程中, 颗粒没有达到平衡状态. 由于颗粒的沉降运动, 其周围的流体产生了与颗粒沉降方向相同的速度, 同时周期性边界也将通道底部流体速度加到通道入口 (图 9(b)). 颗粒重复沉降这一过程中, 其周围的流场已经发生了变化, 导致了颗粒沉降速度及颗粒受力的变化.

在底部封闭的边界条件下, 从图 5—8 可以看出, 颗粒在达到通道底部前, 其沉降轨迹、颗粒沉降速度、受力与无限长通道相同. 颗粒沿通道中心线沉降, 到达底部时受通道壁排斥力作用, 如图 8 中 9—13 s 时刻颗粒受力, 颗粒速度在很短时间内降到 0 (图 7 所示), 颗粒静止.

在通道底部设置 -0.8 cm/s 的流体速度, 颗粒沉降速度较无限长通道低, 在水平方向也有微小摆动. 颗粒在重力作用下速度不断增大, 达到最大值后稳定沉降, 在 30 s 时接近通道底部, 在通道壁排斥力作用下沉降速度降为 0. 与底部封闭情况相比, 由于颗粒沉降速度低, 其沉降到通道底部时受力也较平缓.

5 结论

对通道中一定雷诺数范围内的颗粒沉降进行了直接数值模拟, 对比了 4 种不同边界条件下颗粒的运动规律. 计算结果表明: 通过计算区域随颗粒的运动而移动, 使颗粒始终保持在计算区域中部以及合理的边界设置, 构建的无限长通道能准确模拟颗粒的沉降过程; 周期性边界条件虽能模拟无限大区域内的沉降问题, 但颗粒重复沉降这一过程中, 颗粒周围的流场已发生了变化, 影响了颗粒沉降; 颗粒在底部封闭的通道内沉降, 在到达底部前其沉降规律与无限长通道相同, 因此只要通道足够长, 使颗粒达到稳定沉降, 底部封闭的通道也能模拟无限长通道内的沉降过程; 与其他边界条件相比, 当通道底部设置 -0.8 cm/s 的流体速度模拟流化床条件时, 颗粒沉降速度降低, 其到达底部所受的排斥力也比较平缓.

与以往模拟颗粒沉降规律相比, 本文详细研究了 4 种不同边界条件对颗粒沉降规律的影响, 在介观尺度上阐明了不同边界条件下颗粒的运动规律, 为准确施加边界条件提供参考.

-
- [1] Liu H T, Tong Z H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6369 (in Chinese) [刘汉涛, 全志辉 2009 物理学报 **58** 6369]
 - [2] Liu H T, Chang J Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1877 (in Chinese) [刘汉涛, 常建忠 2010 物理学报 **59** 1877]
 - [3] Feng J, Hu H H, Joseph D D 1994 *J. Fluid Mech.* **261** 95
 - [4] Chang J Z, Liu H T, Su T X, Liu M B 2011 *Int. J. Comp. Meth.* **8** 851
 - [5] Tong Z H, Liu H T, Chang J Z, An K 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 024401 (in Chinese) [全志辉, 刘汉涛, 常建忠, 安康 2012 物理学报 **61** 024401]
 - [6] Sharma N, Patankar N A 2005 *J. Comput. Phys.* **205** 439
 - [7] Luo K, Wang Z L, Fan J R 2007 *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **197** 36
 - [8] Ladd A J C, Verberg R 2001 *J. Stat. Phys.* **104** 1191
 - [9] Yu Z S, Shao X M, Anthony W 2006 *J. Comput. Phys.* **217** 424
 - [10] Wan D C 2006 *Pearl River* **6** 29
 - [11] Chen S, Phan T N, Boo C K, Fan X J 2006 *Phys. Fluids* **18** 103605
 - [12] Thompson K W 1987 *J. Comput. Phys.* **68** 1
 - [13] Berenger J P 1994 *J. Comput. Phys.* **114** 185
 - [14] Hu H H, Joseph D D, Crochet M J 1992 *Fluid Dyn.* **3** 285
 - [15] Gan H, Chang J Z, Feng J J, Hu H H 2003 *J. Fluid Mech.* **481** 385
 - [16] Dennis S C R, Chang G Z 1970 *J. Fluid Mech.* **42** 471
 - [17] Chang M W, Finlayson B A 1987 *Nume. Heat Transfer* **12** 179

The implement and influence of different boundary conditions in direct simulation on particle sedimentation^{*}

Liu Han-Tao Chang Jian-Zhong[†]

(School of Mechatronice Engineering of North University of China, Taiyuan 030051, China)

(Received 16 November 2012; revised manuscript received 7 December 2012)

Abstract

In this paper, we present a direct numerical simulation of particle sedimentation in two-phase flow with four different boundary conditions. We demonstrate that different boundary conditions can result in quite different flow behaviors. Some interesting results are obtained. By redefining the computational domain at each time step according to the position of the particle, we construct an infinite channel, which can simulate the particle sedimentation accurately; the flow pattern of periodic boundary is quite different from the infinite channel because of the disturbed flow field; if the settlement is reached steadily before the closed bottom, the closed channel can also simulate the particle settled in the infinite channel; the fluidized condition slows down the particle sedimentation, which is very helpful for better using the boundary conditions.

Keywords: direct numerical simulation, boundary condition, sedimentation, arbitrary Lagrangian-Eulerian technique

PACS: 44.25.+f, 47.11.-j

DOI: 10.7498/aps.62.084401

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50976108) and the Fund for International Joint Research Program of Shanxi Province, China (Grant No. 2011081040).

[†] Corresponding author. E-mail: changjz01@nuc.edu.cn