

粒子在锥形管中运动的晶格玻尔兹曼方法研究*

薛泽¹⁾ 施娟¹⁾ 王立龙¹⁾ 周锦阳¹⁾ 谭惠丽²⁾ 李华兵^{1)†}

1) (桂林电子科技大学材料科学与工程学院, 桂林 541004)

2) (广西师范大学物理科学与技术学院, 桂林 541004)

(2012年9月28日收到; 2012年12月22日收到修改稿)

运用晶格玻尔兹曼方法对单个悬浮粒子在锥形管中的运动进行了数值计算, 给出了锥形管流体的速度分布和压力分布等. 粒子所受的流体作用力分别用动量交换法、改进的动量交换法和压力张量积分法进行计算. 分析了在不同初始位置释放的粒子的运动轨迹和速度变化情况, 结果表明压力张量积分法和改进的动量交换法的计算结果一致, 而没有改进的动量交换法的计算结果和前两者略有不同.

关键词: 晶格玻尔兹曼方法, 锥形管, 悬浮粒子, 改进的动量交换法

PACS: 47.11.-j

DOI: 10.7498/aps.62.084702

1 引言

微小粒子悬浮运动现象广泛存在于自然界和工业生产中, 如花粉粒子的输运与传播、血管中红细胞随血浆的运动、废水中带粒流的分离与处理等. 了解悬浮体的运动规律对于改善生态系统的循环、了解血液流变的奥秘、提高化学工业的生产效率有重要的意义. 晶格玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method, LBM) 是在格子气 (lattice gas) 模型的基础上发展起来的一种新的探索复杂系统的数值计算方法和模拟方法. LBM 已成为目前流体系统的研究中最有发展前景的方法之一, 被广泛用于研究各种复杂流体的运动^[1-4], 以及流体与粒子的相互作用^[5-7]. 由于 LBM 中流体格点间的相互作用是局域的, 特别适合动边界和变形边界问题的研究, 而血液流系统是有代表性的边界特别复杂的生物系统. 近几十年来, 在国内外国见之于公开文献的有关血管流动的文章越来越多^[8,9], 既有理论的解析解, 也有数值模拟解, 但大多数学者都是把血管当作等截面的圆直管来进行研究. 实际上动脉血管并不是等截面的, 而是渐缩的. 血管这一逐渐缩窄形成的锥度角 (也称半顶角) 大约是 1.0° , 但并不

可以忽略它的影响, 这就是所谓锥度角效应. 有必要对有锥度的血管的流动进行深入的研究^[10,11].

本文主要基于 LBM, 建立了以黏性不可压缩牛顿流体在轴对称二维非弹性锥形管的流动模型, 以单个刚性粒子在锥形管中的运动来模拟血液在小血管中的运动 (这里红细胞是不可形变的粒子), 获得了流体的速度分布和压力分布等. 流体对粒子边界的作用力分别采用动量交换法^[12]、压力张量积分法^[13]和改进的动量交换法^[14]来计算, 分析并比较了三种方法在不同初始位置释放的粒子的轨迹和速度变化情况.

2 D2Q9 LBM

为简单起见, 我们采用二维九速四方格子 (D2Q9) 的 LBM 模型来计算粒子在锥形管中的运动. 流体格点上分布函数的演化方程为^[15]

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

其中 $f_i(\mathbf{x}, t)$ 是 t 时刻, \mathbf{x} 位置, 粒子具有微观速度 \mathbf{e}_i 的分布函数, \mathbf{e}_i 代表微观速度, δt 代表时间步长, τ 代表弛豫时间, 在本文的模拟中取 $\tau = 0.6$. 弛豫时间与无量纲的流体运动学黏滞系数之间的关系

* 国家自然科学基金 (批准号: 11065006, 81060307) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: hbli@guet.edu.cn

满足

$$v = \frac{2\tau - 1}{6}. \quad (2)$$

局域平衡分布函数 $f_i^{(eq)}$ 由下式计算^[16]:

$$f_i^{(eq)} = \rho \alpha_i \left[1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}u^2 \right] \quad (i = 0, 1, 2, \dots, 8), \quad (3)$$

式中 $\alpha_0 = 4/9$, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 1/9$, $\alpha_5 = \alpha_6 = \alpha_7 = \alpha_8 = 1/36$; \mathbf{u} 是宏观流速; ρ 是格点上的流体密度, 它们满足动量守恒定律和质量守恒定律:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i f_i, \\ \rho \mathbf{u} &= \sum_i \mathbf{e}_i f_i = \sum_i \mathbf{e}_i f_i^{(eq)}. \end{aligned} \quad (4)$$

3 模型及流体对粒子作用力的计算方法

3.1 模型的建立

用图 1 所示的二维锥形管道模拟有锥度的血管, 两条斜线代表管壁. 锥形管入口和出口宽度比为 3:1, 模拟在 2001×91 的网格区域内进行. 如图 1 所示建立直角坐标系, x 轴为流体流动方向, y 轴为管子径向, 原点取在入口的中心位置. 可以求出管道高度 H 随轴线方向的变化规律为

$$H = 90 - 0.03x. \quad (5)$$

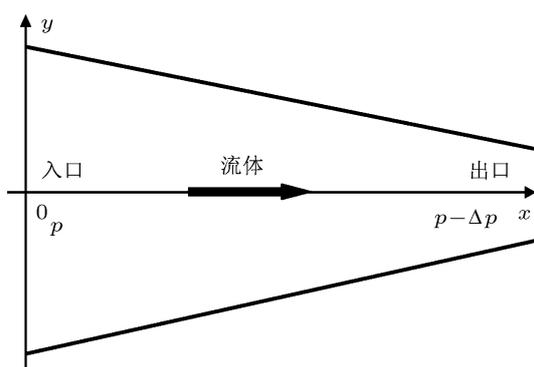


图 1 锥形管模型结构示意图

由于要研究流体在压力差的驱动下的流动, 所以管道出入口采用 Zou 和 He^[17] 基于非平衡态反弹概念提出的压力边界条件. 流体压强 p 与流体密度 ρ 之间的关系满足

$$p = \frac{1}{3}\rho. \quad (6)$$

流体的平均密度 $\rho = 1.0$, 入口密度取 $\rho_1 = 1.00315$, 出口密度取 $\rho_2 = 0.99685$. 产生的压力梯度为

$$\frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{1}{3} \frac{(\rho_1 - \rho_2)}{\Delta x} = 1.05 \times 10^{-6}.$$

粒子密度和流体平均密度一样, 粒子格子半径为 6.5, 物理半径为 0.05 cm. 流体的动力学黏滞系数 $\mu = 0.01 \text{ cm}^2/\text{s}$, 压力差为 0.0041 Pa.

3.2 动量交换法和压力张量积分法

LBM 中计算流体对粒子边界作用力的方法主要有动量交换法和压力张量积分法. Ladd^[18] 最早提出用边界获得的净动量来计算流体对边界的作用力. 动量交换法用下式计算固体边界所受到的流体总的的作用力:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_l &= \sum \mathbf{F}(\mathbf{x}_b) \\ &= \sum \mathbf{e}_i (\tilde{f}_i(\mathbf{x}_f, t) + \tilde{f}_i(\mathbf{x}_b, t)), \end{aligned} \quad (7)$$

其中 \mathbf{x}_f 是流体格点, \mathbf{x}_b 是粒子内固体格点, \tilde{f}_i 是沿 \mathbf{e}_i 方向流向粒子边界的碰后分布函数, \tilde{f}_i 是由曲线边界条件^[19] 计算得到沿 \mathbf{e}_i 反方向从粒子边界流出的分布函数. 粒子边界所受到流体的合力矩也是计算所有边界得到的流体作用的力矩之和, 即

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_l &= \sum (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_0) \times \mathbf{F}(\mathbf{x}_b) \\ &= \sum (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_0) \times \mathbf{e}_i (\tilde{f}_i(\mathbf{x}_f, t) + \tilde{f}_i(\mathbf{x}_b, t)), \end{aligned} \quad (8)$$

其中 \mathbf{x}_0 是参考点的坐标, 一般取质量中心.

2000 年, Inamuro 等^[20] 提出的压力张量积分法中边界所受到的力和力矩分别由以下两式计算

$$\mathbf{F} = \int_s [\hat{\mathbf{p}} - \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_s)] \cdot d\mathbf{s}, \quad (9)$$

$$\mathbf{T} = \int_s \mathbf{r} \times \{[\hat{\mathbf{p}} - \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_s)] \cdot d\mathbf{s}\}, \quad (10)$$

其中, \mathbf{u}_s 是边界速度, $d\mathbf{s}$ 是粒子边界面积元矢量, \mathbf{r} 是从参考点指向 $d\mathbf{s}$ 的矢量, $\hat{\mathbf{p}}$ 为流体内的压力张量, 它与流体压强 p 之间的关系为

$$\begin{aligned} p_{\alpha\beta} &= -\frac{1}{2\tau} P \delta_{\alpha\beta} - \left(\frac{\tau - 1/2}{\tau} \right) \\ &\quad \times \sum_i (\mathbf{e}_{i\alpha} - u_\alpha)(\mathbf{e}_{i\beta} - u_\beta) f_i, \end{aligned} \quad (11)$$

f_i 为离边界点最近的流体格点上的分布函数. Li 等^[21] 把压力张量积分法应用于曲线边界. 粒子的

运动和转动用半步蛙跳法计算 [22]. 由于粒子的运动, 新出现的流体点分布函数由外推法计算.

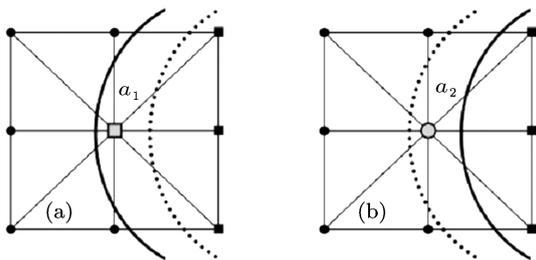


图2 改进的动量交换法

3.3 改进的动量交换法

传统的动量交换法简单但计算结果有比较大的偏差. 压力张量积分法比起动量交换法要复杂得多, 但能够正确反映 Segré-Silberberg 效应而动量交换法却不能 [3]. 2012 年 1 月, Wen 等 [14] 基于动量交换法提出一种新的计算流体对边界作用力的方法——改进的动量交换法. 对于运动的边界, 如图 2(a) 所示, 当粒子边界从虚线运动到实线时, 流体格点 a_1 将被粒子覆盖而变成固体格点. 相反, 如图 2(b) 所示, 当粒子边界从虚线运动到实线时, 固体格点 a_2 将从粒子中释放后变成流体格点, 也即粒子的运动会引起流体格点和固体格点的相互转化, 因此会带来粒子动量的变化.

对于图 2(a) 的情况, 格点 a_1 引起粒子动量增加, 由其产生的力是:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_c) = \sum_i \mathbf{e}_i \tilde{f}_i(\mathbf{x}_c, t),$$

其中 \mathbf{x}_c 表示由流体变为固体的格点. 对于图 2(b) 的情况, 格点 a_2 引起粒子动量减小, 由格点 a_2 产生的力是:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_c) = -\sum_i \mathbf{e}_i \tilde{f}_i(\mathbf{x}_c, t),$$

其中 \mathbf{x}_c 表示由固体变为流体的格点. 改进的动量交换法就是把因格点状态转化引起的动量变化加到传统动量交换法的结果里. 故流体对固体边界总的作用力和力矩分别为

$$\mathbf{F}_p = \sum \mathbf{F}(\mathbf{x}_b) + \sum \mathbf{F}(\mathbf{x}_c), \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_p = & \sum (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_0) \times \mathbf{F}(\mathbf{x}_b) \\ & + \sum (\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_0) \times \mathbf{F}(\mathbf{x}_c). \end{aligned} \quad (13)$$

4 模拟结果及讨论

4.1 锥形管中纯流体的模拟结果

在 Poiseuille 流模型中, 流速分布为抛物线形 [23]:

$$u = -\frac{1}{2\rho\nu} \frac{dp}{dx} (b^2 - y^2), \quad (14)$$

其中 $2b$ 为管道高度, $\frac{dp}{dx}$ 为压力梯度. 最大流速出现在两板中心 ($y = 0$) 处

$$u_{\max} = -\frac{b^2}{2\rho\nu} \frac{dp}{dx}, \quad (15)$$

平均流速

$$V = \frac{2}{3} u_{\max} = -\frac{b^2}{3\rho\nu} \frac{dp}{dx} = \frac{q}{2b}, \quad (16)$$

其中 q 为单位高度管内流量.

如果把锥形管看作是由多个管道高度逐渐减小的泊松管的合成, 那么 (14)—(16) 式在锥形管中仍然近似成立, 只需将公式中的 b 换作 $45 - 0.015x$. 流量 q 由模拟得到. 故由 (16) 式得到

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{3q\rho\nu}{2(45 - 0.015x)^3}, \quad (17)$$

流场中心线流速

$$u_{\max} = \frac{3q}{4(45 - 0.015x)}, \quad (18)$$

代入数据求得

$$u_{\max} = \frac{0.2304}{45 - 0.015x}. \quad (19)$$

由 (17) 式积分可知密度 ρ 的形式为

$$-\frac{A}{(45 - 0.015x)^2} + B = \rho,$$

其中 A, B 为待测系数. 边界条件满足

$$\begin{cases} x = 0, & \rho = 1.00315 \\ x = 2000, & \rho = 0.99685 \end{cases},$$

故求得沿轴线方向密度分布为

$$\rho = -\frac{1.59469}{(45 - 0.015x)^2} + 1.00394. \quad (20)$$

由上式可知管道压力与管道高度的平方成反比, 与文献 [9] 中的弹性长管的压力与管道高度成线性不同. 另外, 弹性管的管壁可以变形, 这里的锥形管的管壁不可以变形, 二者流场是不一样的.

流体的雷诺数定义为 $Re = UL/\nu$, 其中 U 为管道中部 ($x = 1000$) 沿水平方向的平均流速, L 为管道中部的高度, 模拟中流体的雷诺数为 $Re \approx 9.2$.

待流场稳定后,我们做了密度、速度和流线图,并与上述理论值进行对比.图3是流场密度分布三维图.从图3中可以看出,流场密度呈平滑的带状曲面,从入口的1.0315逐渐减小到出口的0.99685,在任一横截面密度保持某一定值.图4是沿流场中线的密度分布,也即图3的纵切线,与(20)式的理论值能够完全重合,但与二维 Poiseuille 流中密度分布相比,不再是线性变化.

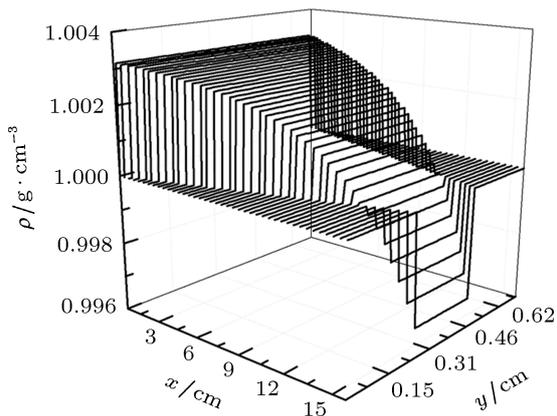


图3 流场密度分布三维图

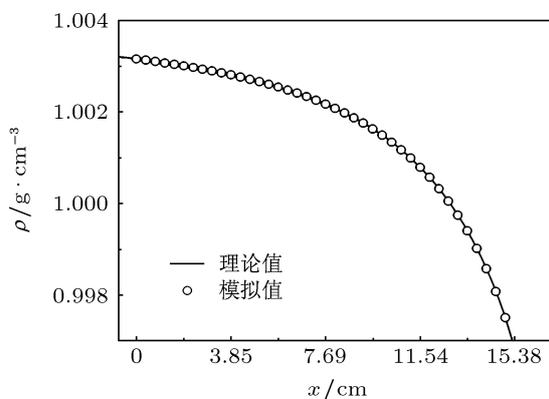


图4 流场中线密度分布图

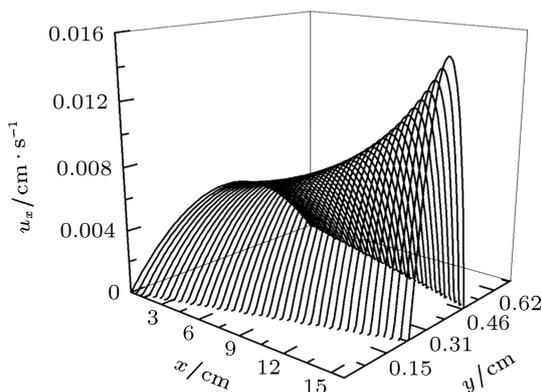


图5 流场水平速度三维分布图

图5是流场水平速度三维分布图.从图5可以看出,任一横截面仍和二维 Poiseuille 流中一样呈抛物线分布,在管的中心水平速度达到最大值.只是随着管的逐渐变窄,管中心的最大值有所变化,图6则反映了这一最大值沿管道的变化规律.由于在流场任一横截面的流量是一致的,因此其最大值也呈逐渐上升趋势.模拟值与(19)式描述的理论值精确符合,证明了模拟的正确性.

图7和图8分别是流场速度矢量图和流线图.

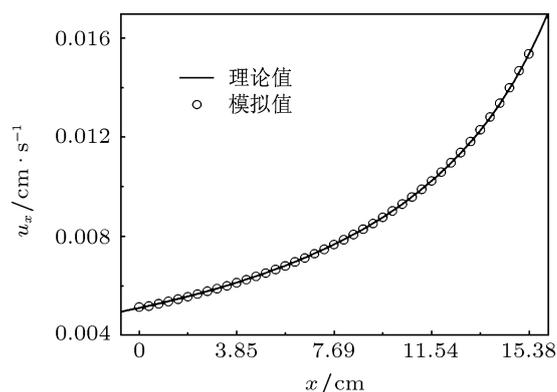


图6 流场中线速率分布图

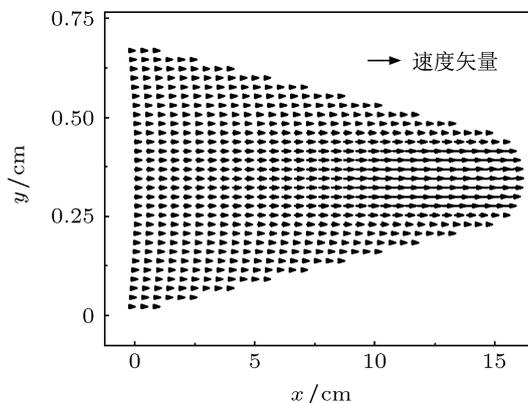


图7 流场速度矢量图

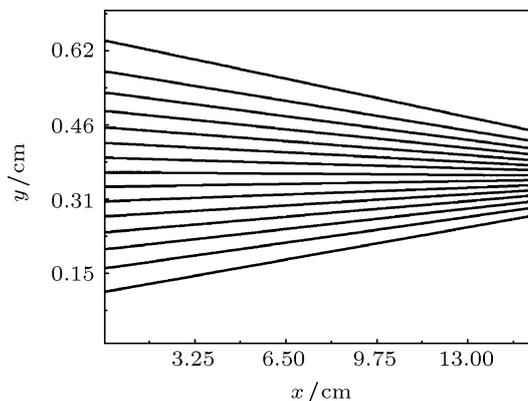


图8 流线图

矢量图反映了流体在流场中的流向和速度大小, 流线图的疏密程度又间接反映了流速的大小, 与图 5 的结果是一致的.

4.2 单个悬浮粒子在锥形管中的运动

图 9 是待流场稳定后将粒子分别从 (30, 20),

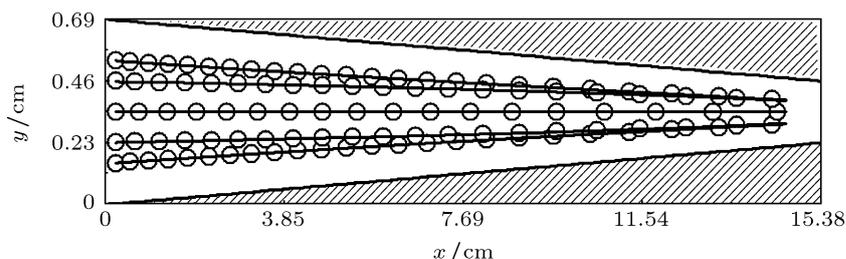


图 9 粒子在不同初始位置释放的轨迹

图 10 是粒子分别从 (30, 30), (30, 60) 格子单位处释放的轨迹图, 图 11 是粒子从这两个相对于管子上下对称的位置释放的径向速度对比图. 由于锥形管上下对称, 故粒子在对称的初始位置释放后, 其运动轨迹及径向速度沿轴向表现出对称性. 锥形管两端的压力差保持恒定, 由纯流模型知, 流体的水平速度分布也沿轴向对称, 故粒子在对称的初始位置释放后, 在水平方向受到流体的作用力是一样的, 也即粒子水平速度是一样的, 图 12 反映了粒子水平速度随流体速度的增大而增大的情况. 图 13 是粒子在 (30, 45) 格子单位处, 也即管子中央释放的水平速度变化情况. 此时流场流速最大, 粒子运动速度也最大.

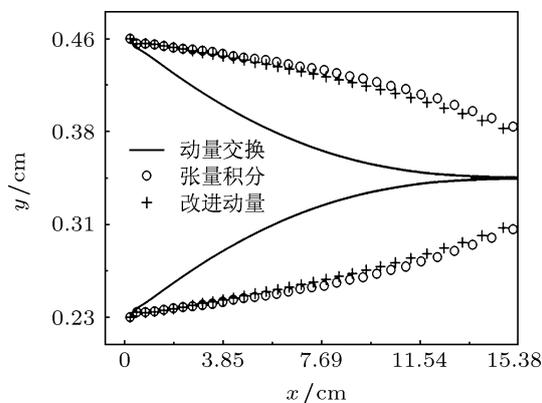


图 10 粒子在 (30, 30) 和 (30, 60) 处释放的轨迹

由图 10—13 可以看出, 当采用张量积分法和改进的动量交换法计算粒子受到流体作用力的时

(30, 30), (30, 45), (30, 60), (30, 70) 格子单位处, 也即入口高度的 2/9, 1/3, 1/2, 2/3, 7/9 处释放的轨迹对比图. 粒子释放的初始速度和角速度均为零. 这里粒子所受流体作用力均采用改进的动量交换法. 图 9 中圆圈代表粒子. 平滑、对称的轨迹表明锥形管内流场稳定、粒子受力均匀, 直观地反映了锥形管内粒子的运动情况.

候, 二者描述的轨迹和速度图基本一致, 而与传统的动量交换法描述的向管子中心移动的轨迹图以及速度图有较大偏差. 这证明改进的动量交换法能正确反映流体对粒子的作用力, 而且它比压力张量积分法简单. 在锥形管中央释放的粒子, 由于流场的所有物理量对粒子来说都是对称的, 流体速度最大, 粒子离边界最远, 此时用三种方法做出的速度曲线能完全重合.

图 14 是粒子从 (30, 30) 格子单位处释放后, 其角速度变化图. 由于粒子处于管子的下部, 在其运动过程中粒子上部水平速度大于下部水平速度, 粒子发生顺时针旋转, 角速度为负. 用动量交换法计算流体力时粒子趋向中心位置移动, 角速度逐渐减小. 与粒子从管子上部释放情况正好相反, 如图 15 所示. 图 14, 15 反映了采用改进的动量交换法和张量积分法粒子的角速度也能有较好的符合.

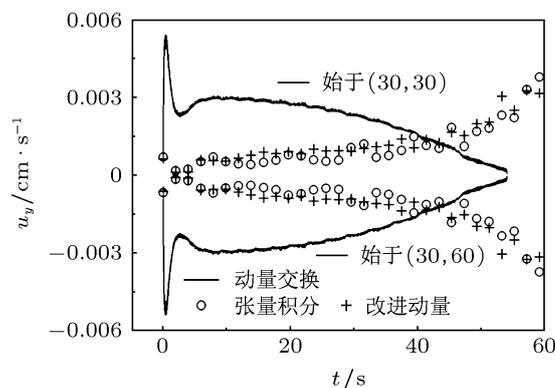


图 11 粒子在 (30, 30) 和 (30, 60) 处释放的径向速度

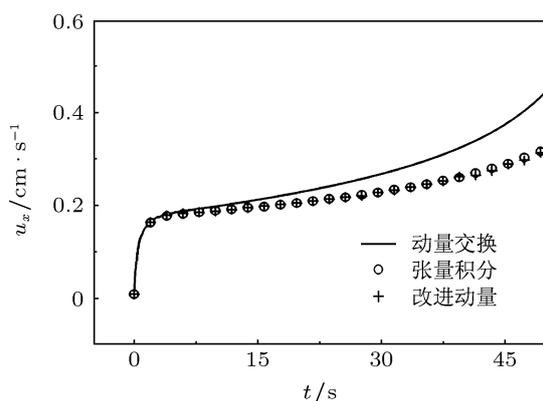


图 12 粒子在 (30, 30) 或 (30, 60) 处释放的水平速率图

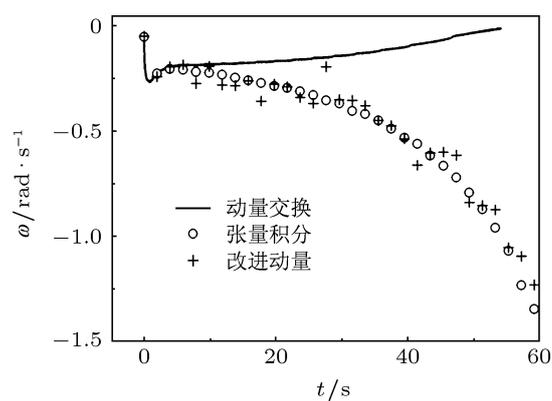


图 14 粒子在 (30, 30) 处释放的角速度图

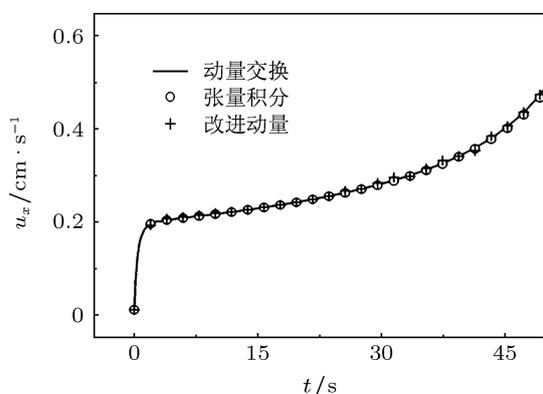


图 13 粒子在 (30, 45) 处释放的水平速率图

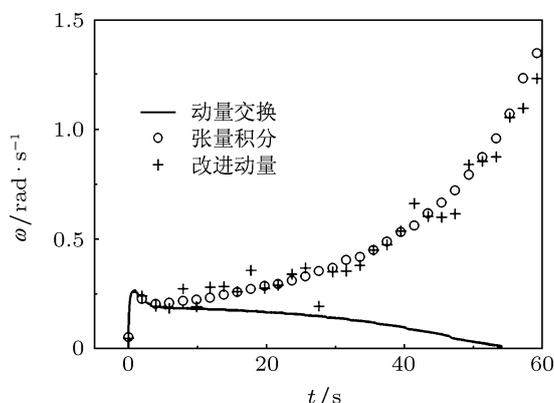


图 15 粒子在 (30, 60) 处释放的角速度图

图 16 是让粒子从 (30, 30) 格子单位处释放, 在其运动到约管子中间位置时的流线图. 图中实心圆代表粒子. 与图 8 相比变化不是很大, 只在粒子处有稍微起伏.

由模拟单个悬浮粒子在流场的运动结果知, 不

管从哪释放粒子, 粒子的水平速度都是一直增大直到流出管子, 故此时仍然用流体的雷诺数公式 $Re = UH/\nu$, 其中 U 为高度为 H 处的流体平均流速. 模拟计算得 $Re \approx 2$. 因粒子边界对流体流动的阻碍作用, 相比纯流的雷诺数已经降低了.

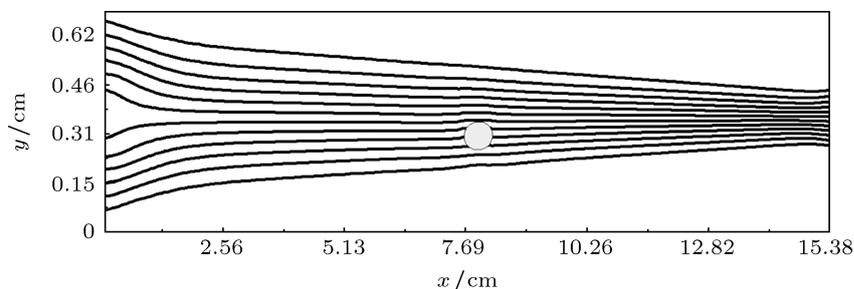


图 16 粒子运动时的流线图

5 结论

运用 LBM, 模拟了单个刚性粒子在有一定锥度的二维管道里的运动. 对流场中流体的密度和速

度分布及粒子的轨迹和速度进行了分析, 对描述粒子受力的动量交换法、张量积分法和改进的动量交换法进行了对比, 模拟结果和理论推导计算出来的结果十分符合. 改进的动量交换法作为一种新的

方法,既继承了动量交换法的可靠性、简单性和并行性等优越特性,又有和张量积分法一样的精确性,不失为一种很好的方法.锥形管模拟的成功说明用LBM模拟流体运动是完全可靠的,同时也证明了

我们所编写程序的正确性.下一步,我们将考虑粒子和粒子间以及粒子和管壁间的相互作用,增加多个粒子,模拟血液在锥形管中的栓塞.

-
- [1] Chen S Y, Doolen G D 1998 *Ann. Rev. Fluid Mech.* **30** 329
- [2] Fang H P, Lin Z F, Wang Z W 1998 *Phys. Rev. E* **57** 25
- [3] Li H B 2004 *Ph.D. Dissertation* (Shanghai: Fudan University) (in Chinese) [李华兵 2004 博士学位论文 (上海: 复旦大学)]
- [4] Li H B, Fang H P, Lin Z F, Xu S X, Chen S Y 2004 *Phys. Rev. E* **69** 031919
- [5] Jayaw eera K O L F, Mason B J, Slack G W 1964 *J. Fluid Mech.* **20** 121
- [6] Feng J, Hu H H, Joseph D D 1994 *J. Fluid Mech.* **261** 95
- [7] Shi J, Li J, Qiu B, Li H B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5174 (in Chinese) [施娟, 李剑, 邱冰, 李华兵 2009 物理学报 **58** 5174]
- [8] Li H B, Fang H P, Lin Z F, Xu S X, Chen S Y 2004 *Phys. Rev. E* **69** 031919
- [9] Fang H P, Wang Z W, Lin Z F, Liu M R 2002 *Phys. Rev. E* **65** 051925
- [10] Cen R J 1993 *Biomechanics and Clinic Research* (Guangzhou: South China University of Technology Press) p15 (in Chinese) [岑人经 1993 生物力学与临床研究 (广州: 华南理工大学出版社) 第 15 页]
- [11] Cen R J 1994 *J. South China Univ. Technol.* (Nat. Sci. Ed.) **22** 150 [岑人经 1994 华南理工大学学报 (自然科学版) **22** 150]
- [12] Aidun C K, Lu Y, Ding E 1998 *J. Fluid Mech.* **373** 287
- [13] He X, Doolen G D 1997 *J. Comput. Phys.* **134** 306
- [14] Wen B H, Li H B, Zhang C Y, Fang H P 2012 *Phys. Rev. E* **85** 016704
- [15] Chen H D, Chen S Y 1992 *J. Phys. Rev. A* **45** 5339
- [16] Qian Y H, d'Humieres D, Lallemand P 1992 *J. Europhys. Lett.* **17** 479
- [17] Zou Q, He X 1997 *Phys. Fluids* **9** 1591
- [18] Ladd A J C 1994 *J. Fluid Mech.* **271** 311
- [19] Filippova O, Hänel D 1997 *Comput. Fluids* **26** 697
- [20] Inamuro T, Maeba K, Ogino F 2000 *Int. J. Multiphase Flow* **26** 1981
- [21] Li H B, Lu X Y, Fang H P, Qian Y H 2004 *Phys. Rev. E* **70** 026701
- [22] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquid* (Oxford: Clarendon)
- [23] Sukop M C, Thorne Jr D T 2006 *Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers* (Berlin: Springer) p8

The lattice Boltzmann simulation of suspended particle movement in a tapered tube*

Xue Ze¹⁾ Shi Juan¹⁾ Wang Li-Long¹⁾ Zhou Jin-Yang¹⁾
Tan Hui-Li²⁾ Li Hua-Bing^{1)†}

1) (*School of Material Science and Engineering, Guilin University of Electronic Technology, Guilin 541004, China*)

2) (*College of Physical Science and Technology, Guangxi Normal University, Guilin 541004, China*)

(Received 28 September 2012; revised manuscript received 22 December 2012)

Abstract

Based on the lattice Boltzmann method, the motion of single suspended particle in tapered tube is simulated numerically. The distributions of velocity and pressure in the flow field are obtained. The hydrodynamic force on the particle boundary is evaluated by conventional momentum exchange method (CME), lattice-type-dependent momentum-exchange method (LME) and stress tensor integral method (STI) separately. The variations of velocity and the trajectory of the particle which starts at different places are analyzed, the results evaluated by LME are in excellent agreement with those by STI and the results evaluated by CME are slightly different from those by the former two methods.

Keywords: lattice Boltzmann method, tapered blood vessel, suspended particle, lattice-type-dependent momentum-exchange method

PACS: 47.11.-j

DOI: 10.7498/aps.62.084702

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11065006, 81060307).

† Corresponding author. E-mail: hbli@guet.edu.cn