



中国工程热物理学会

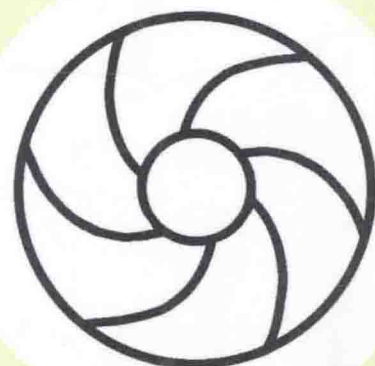
流体机械学术会议

论文集

二〇〇六

重庆

中国工程热物理学会编



流体机械学术会议论文目录

一. 流体机械内部流动数值模拟

- 067004 圆柱和直桨叶突然启动瞬态流动的数值研究……李志峰 吴大转 王乐勤(1)
- 067006 基于无网格法的水中气泡上升运动数值模拟……
……孙中国 席光 王焕然 项利峰(7)
- 067007 耗散粒子动力学对颗粒沉降问题的研究……孔铁华 张楚华 席光(13)
- 067008 湍流模型对水轮机压力脉动数值预测的比较……钱忠东 杨建东 吴玉林(17)
- 067009 微型泵性能的数值模拟研究…徐宇 江仲夏 赵晓路 徐建中 西道弘(24)
- 067011 带无叶扩压器的离心压缩机内部流动数值分析……
……郭强 竺晓程 杜朝辉 陈华 赵岩(30)
- 067012 气冷涡轮环形叶栅三维流场的实验与数值研究…袁锋 竺晓程 杜朝辉(37)
- 067013 机械密封端面摩擦热与热变形的耦合分析……周剑锋 顾伯勤(43)
- 067016 传热管与管板最佳胀接参数的数值模拟及分析……
……薛松龄 姜任秋 宋京凯 姚祺峰 郭海红(49)
- 067020 串联式轴流泵内部流场及能量特性的数值研究……
……余志毅 尹国枫 王国玉 陈荣鑫(55)
- 067025 井下节流嘴的对天然气井筒流场的影响……
……蒋代君 陈次昌 伍超 唐刚(64)
- 067026 螺旋轴流式多相泵单级叶轮纯液相模拟……朱宏武 李清平 张金亚(70)
- 067030 分体空调室内机的双流体数值模拟……薛永飞 甘加业 吴克启(75)
- 067031 开式轴流风扇气动噪声预测……王嘉冰 刘敏 吴克启(80)
- 067032 叶片弦向开缝抑制分离的数值分析……刘飞 石汇林 吴克启(86)
- 067036 对旋轴流风机反风性能的数值模拟……
……王军 吴立强 孙中勤 李坤 钟立群 贺秋冬(92)
- 067038 X型开缝翅片和平直翅片的性能比较及机理分析……周俊杰 陶文铨(97)
- 067039 尾迹控制技术对叶栅性能的影响……林胜洋 竺晓程 沈昕 杜朝辉(102)
- 067040 新型轴流式血泵内血液破坏的数值分析……
……朱宪然 张鸣远 刘吴南 张根广(108)
- 067042 小流量离心压缩机内流动的数值研究……
……闻苏平 胡小文 程益坚 张勇 褚毅 郭雨龙(115)
- 067043 水平轴风力机翼型动态来流条件下气动特性的数值分析…王海刚 戴韧(123)
- 067044 实际气体 R134a 在离心叶轮内部流动的数值研究……刘帆 张楚华(129)
- 067045 基于液体的统一对流扩散型流体力学方程组……黄典贵(134)
- 067046 温度边界条件对微喷管性能的影响……
……张先锋 刘明侯 李蕾 汪东 陈义良(139)
- 067047 管道气体瞬态流动模型研究……杨昭 赖建波 韩金丽(146)
- 067048 离心泵叶轮内空化流动的数值预测……李军 刘立军 李国君 丰镇平(152)
- 067049 应用空间导叶的混流式水轮机三维非定常湍流计算……
……张宇宁 杨建明 吴玉林 刘树红(157)
- 067050 轴流式水轮机摆度对压力脉动影响……吴墙锋 吴玉林 刘树红(161)
- 067051 运用 VOF 模型模拟开敞式水泵吸水池内后台阶流动……
……许兆峰 陈铁军 樊毅 吴玉林(167)
- 067055 可逆式水轮机的流道数值模拟与性能分析……
……冉红娟 彭俊奇 许洪元 罗先武(172)
- 067056 垂直轴潮流水轮机的水力性能研究……史威 罗先武 刘树红 许洪元(179)
- 067057 混流式水轮机内部流场三维空化湍流计算……
……张梁 吴玉林 刘树红 张乐福(186)

- 067058 带有涡流发生器的离心压气机内流动分析.....刘小民 张 炜 席 光(192)
 067062 带有进气箱的轴流风机性能变化数值分析.....李景银 吕 峰 黄 靓(200)

二. 流体机械理论和设计

- 067001 低稠度叶片扩压器形状参数的分析.....戴 冀(207)
 067002 多层桨式搅拌器内混合过程的数值模拟.....杜红霞 吴大转 王乐勤(212)
 067010 水平轴风力机叶片气动性能研究.....张仲柱 王会社 赵晓路 徐建中(217)
 067017 叶片形状对惯性级阻力特性影响的研究.....师蓓蓓 胡日勒巴根 王忠义(227)
 067018 丝网间距对丝网滤清器阻力性能影响分析...栾一刚 师蓓蓓 胡日勒巴根(230)
 067024 微型轴流风扇扭叶片设计与气动分析.....王企琨 叶 舟 陈康民(237)
 067028 斜流叶轮轴向蜗壳内流匹配分析.....周 拔 吴克启(244)
 067029 混流泵叶轮内空化流动的数值计算.....甘加业 薛永飞 吴克启(250)
 067033 谱分析法测量叶尖小翼对风轮旋转时固有频率的影响.....
汪建文 闫建校 刘 博 赵志渊(255)
 067037 斜流风机子午面参数计算的 Matlab 实现.....王 军 孙中勤 吴立强(259)
 067053 漩流泵前弯式叶轮出口直径的确定.....夏朋辉 刘树红 吴玉林(264)
 067054 不同结构进口对水泵吸水池自由液面的影响.....
陈 刚 吴玉林 许兆峰 曹广军 陈铁军(269)
 067059 金融街地下交通工程排风系统流动特性分析.....
陈海生 谭春青 贺敏一 萧显明(274)
 067060 金融街地下交通工程送风系统流动特性分析.....
陈海生 谭春青 贺敏一 萧显明(286)
 067061 基于动态时间弯曲及决策树方法的液体火箭发动机故障诊断.....
韩泉东 胡小平 刘 枫 李京浩(297)
 067063 CFD 在双吸式离心泵优化设计中的应用.....刘文龙 郭加宏 陈红勋(302)

三. 流体机械试验研究

- 067003 不同启动加速度下离心泵瞬态水力性能的试验研究.....
吴大转 焦 磊 王乐勤(309)
 067005 小型轴流式管路液力涡轮的试验研究.....焦 磊 吴大转 王乐勤(314)
 067014 低温推进剂供应系统充填过程仿真与试验研究.....陶玉静 王振国(320)
 067015 螺旋轴流式多相泵的现场试验研究.....朱宏武 李清平 陈 骆(325)
 067019 绕水翼游离与附着型空化流动结构与机理.....王国玉 顾玲燕 史 维(330)
 067021 超空化水翼近壁处流场的实验研究.....
张敏第 鲁君瑞 王国玉 李向宾 高德明(341)
 067022 转速对油泵空化性能影响及其换算研究.....
曹广军 吴玉林 刘树红 傅苏红(350)
 067023 油气旋流分离器的模型试验研究.....傅苏红 刘进立 曹广军(355)
 067027 吸力面带凹窝轴流风扇内流分析与实验研究.....
游 斌 程志明 马 列 张 敏 吴克启(359)
 067034 三叶片风轮实验模态分析的初步研究...汪建文 闫建校 刘 博 赵志渊(365)
 067035 用 PIV 测量水泵开敞吸水池内突扩流动.....
曹广军 吴玉林 许兆峰 陈 刚 陈铁军(370)
 067041 具有强迫过流旋转圆盘系统的实验研究.....
闻苏平 郭雨龙 程益坚 褚 毅 胡小文(375)
 067052 水泵吸水池后台阶流动的自由液面的实验研究.....
陈铁军 樊 毅 吴玉林 刘树红 许兆峰(383)

圆柱和直桨叶突然启动瞬态流动的数值研究

李志峰 吴大转 王乐勤

(浙江大学化工机械研究所 310027 杭州)

Tel: 0571-87952406 Email: hj_wlq2@zju.edu.cn

摘要: 采用基于动网格方法的有限体积法对圆柱和直桨叶突然启动引起的二维非定常不可压粘性流进行了数值模拟,给出了计算方法。通过计算得到了 $Re=5000$ 和 9500 时圆柱突然启动后的流场分布;分析了采用不同湍流模式计算高雷诺数下的圆柱启动流动,并对结果进行比较分析;采用大涡模拟对高雷诺数下的直桨叶突然旋转启动的流场进行了计算,得到了完成启动后叶片内部流场随时间的演化过程。所采用的方法和结果为进一步求解三维叶轮启动过程内部非定常流动提供了基础和依据。

关键词: 瞬态流动; 数值模拟; 有限体积法; 动网格; 突然启动

1 引言

在自然界和工程实际问题中普遍存在的非定常流动问题,通常情况下它可以分为两种类型,第一种类型为边界移动引起流场的非定常变化,在工程上例如流体机械的启动和停机过程^[1, 2],第二种类型是由于流体自身诱发的周期性非定常流动。其中圆柱瞬时启动和流体机械叶轮突然加速旋转过程引起的非定常流动属于第一种非定常流动现象,此类问题的研究对于理论分析、实验测试以及解决工程问题都具有十分重要的意义,特别是对于许多存在突然启动现象的工程问题。

对于第一类非定常流动问题,在实验研究方面, Bouard 等^[3]对圆柱的突然启动过程进行了实验,得出 $40 < Re < 10^4$ 范围内分离区内详细的流场分布情况,已经成为验证数值计算结果的一个重要参考。然而对于叶轮突然加速旋转问题,目前还没有较系统的实验研究结果。在突然启动问题的数值计算方面,目前采用大多采用差分法和涡方法^[4-6],这两类方法在求解几何形状简单的问题具有较好效果,但在处理复杂结构形状方面存在边界条件处理困难等问题,并且向三维复杂问题的拓展方面存在较大困难。

由于流体机械加速旋转引起的流动问题比较复杂,采用以上方法目前还存在许多的困难,例如边界条件的处理以及三维的求解问题等。而有限体积法在处理复杂流动问题方面具有明显的优势,由于其在流体机械内部流动分析等复杂工程问题上取得很好的效果,同时,考虑到采用动网格方法^[7]使得启动过程移动边界的处理更加灵活,本文采用基于动网格方法的有限体积法对平动和旋转两类突然启动引起的流场进行数值求解,在验证基于动网格方法的有限体积法求解突然启动问题的有效性基础上,为求解流体机械启动过程的内部流动打下基础。

2 控制方程和数值方法

2.1 控制方程

考虑由移动边界 ∂V 所包围的任意控制体内积分形式的非定常不可压黏性流的体积守恒方程、质量守恒方程与动量守恒方程:

$$\frac{d}{dt} \int_V dV - \int_{\partial V} \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dA = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_{\partial V} \rho(\mathbf{u} - \mathbf{u}_g) \cdot \mathbf{n} dA = 0, \quad (2)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV + \int_{\partial V} \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_g) \cdot \mathbf{n} dA = \int_{\partial V} \mu \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA + \int_V \mathbf{S}_u dV. \quad (3)$$

式中, t 为时间, V 为控制体积的体积, $\mathbf{u}_g$ 为控制体边界的移动速度矢量, $\mathbf{n}$ 为边界 A 上外法向单位矢量, ρ 为密度, $\mathbf{u}$ 为速度矢量, μ 为动力黏度, $\mathbf{S}_u$ 为源项。

2.2 数值求解方法

上述方程中的时间导数项用一阶向后差分格式表示为

$$\frac{d}{dt} \int_V \mathbf{u} dV = \frac{(\mathbf{u}V)^{n+1} - (\mathbf{u}V)^n}{\Delta t}. \quad (4)$$

式中, n 和 $n+1$ 分别代表不同的时间层。采用动网格方法, $n+1$ 层上的 V^{n+1} 可表示为

$$V^{n+1} = V^n + \frac{dV}{dt} \Delta t. \quad (5)$$

式中, dV/dt 为控制体的时间导数。为满足网格守恒定律, 控制体的时间导数为

$$\frac{dV}{dt} = \int_{\partial V} \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dA = \sum_j \mathbf{u}_{g,j} \cdot \mathbf{n} A_j. \quad (6)$$

式中, n_f 为控制体积的面网格数, A_j 为面 j 的面积向量。式中 $\mathbf{u}_{g,j} \cdot \mathbf{n} A_j$ 可描述为

$$\mathbf{u}_{g,j} \cdot \mathbf{n} A_j = \frac{\delta V_j}{\Delta t}. \quad (7)$$

式中 δV_j 为控制体积面 j 在时间间隔 Δt 中扫过的空间体积。

对流项的离散采用二阶迎风格式, 扩散项的离散采用具有二阶精度的中心差分格式, 速度与压力的耦合采用 SIMPLE 算法^[8]。

3 圆柱突然启动的计算

3.1 物理模型和边界条件

圆柱突然启动问题的计算模型如图 1 所示, 设定长 1000 mm 宽 460 mm 长方形容容器内充满黏度 μ 为 $1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 的水, 容器

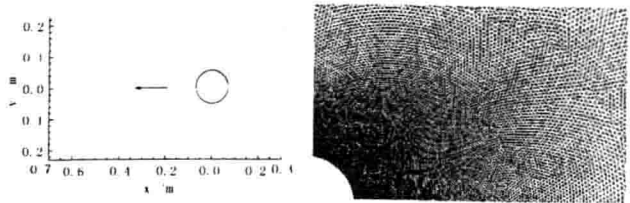


图 1 圆柱启动模型示意图 图 2 圆柱局部区域网格

表 1 不同雷诺数下的模型参数

Re	D /mm	$U_\infty / (\text{m/s})$	t^* / s
5000	100	0.050	0.040
9000	150	0.063	0.047

内部一个截面直径为 D 的圆柱从静止以时间 t^* 完成加速之后以稳定的速度 U_∞ 向 x 负方向运动至 $t_s=3.0$ ($t_s=tU/D$)。

不同雷诺数下所选用的圆柱尺寸以及稳定后的速度列于表 1。考虑到非结构化网格在处理复杂边界条件的物理区域时有明显的优势，并且很容易通过细分或者重新生成网格的方法实现自适应过程，本文采用三角形非结构化网格对流动区域进行网格划分，计算区域局部的 Delauney 三角形网格如图 2 所示。

动网格的实现有网格变形方法、层推进与网格变形分区结合方法以及变形加局部或全场重构网格方法。由于弹簧近似网格变形方法简单高效，且本文求解的问题网格畸变并不严重，采用弹簧近似网格变形加全场重构网格方法实现动网格的划分^[9]。

求解过程中，圆柱边界的移动速度描述为：

$$u = \begin{cases} at & t \leq t^*, \\ U_\infty & t > t^*. \end{cases} \quad (8)$$

式中， a 为圆柱启动的匀加速度。水槽壁面采用无滑移壁面边界条件， $u=0, v=0$ 。

3.2 计算结果分析

在 $Re=5000$ 时计算均得到了的流场的分布与实验结果比较如图 3 所示，图中的结果为 $t_s=2.5$ 时刻的相对速度速度分布，以固定在圆柱上的坐标为参考坐标系。由图可以看出，计算的流动发展情况与实验结果较好吻合，此外 $Re=9500$ 的情况下，两者的

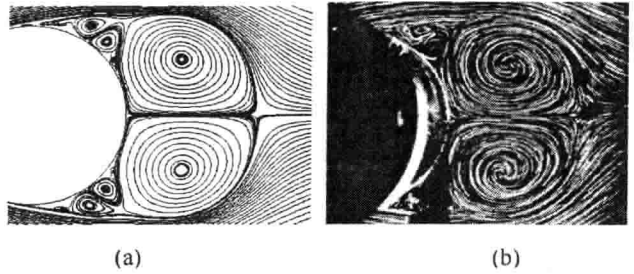


图 3. 计算结果 (a) 与实验结果 (b) 的比较 ($t_s=2.5, Re=5000$)

也能较好吻合。雷诺数分别为 5000 和 9500 的条件下不同时刻流场速度矢量分布分别如图 4 和图 5 所示。

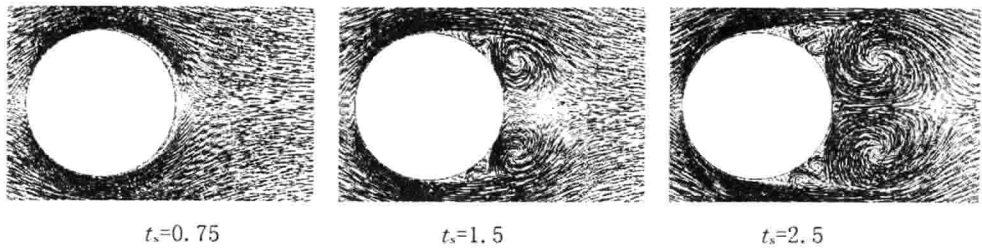


图 4 $Re=5000$ 时流场速度矢量图

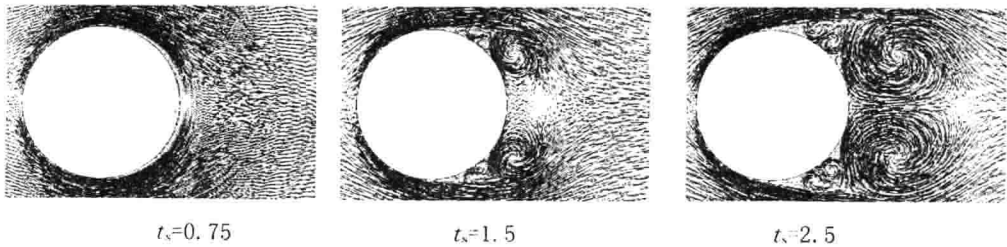


图 5 $Re=9500$ 时流场速度矢量图

由结果可以看出, $t_s=0.75$ 时, 紧贴圆柱表面形成一层旋转的流体薄层, 该流体薄层内流体的速度明显大于流动分离区内其他各点流速, 形成了一个人小和强度随时间逐渐增大的主旋涡。 $t_s=1.0$ 以后旋涡将流动分离区分隔成两个部分, 主旋涡向下游发展的同时, 在流动分离点附近形成了一对二次涡, 但两个涡在大小和形状方面稍有差别; 到 $t_s=1.5$ 时, 整个流动发展成由一个脱离壁面的主旋涡与壁面上的涡对组成的结构。

3.3 湍流模型的比较分析

对更高雷诺数的圆柱突然启动问题, 通常需要考虑采用一定的湍流模式进行模拟, 本文针对 $Re=9500$ 的情况, 分别采用单方程模式(S-A)、双方程模型(RNG $k-\varepsilon$)和大涡模拟(LES)等进行计算, 并将结果与层流模型的结果进行比较, 计算结果如图 6、图 7 和图 8 所示。由图可以看出, 采用大涡模拟的计算结果和层流计算结果与实验结果能够较好吻合, 能够预测出突然启动后边界层的分离和启动涡的形成和演化现象。而采用 S-A 模型和双方程模型的计算结果与试验观察的现象存在较大的差别, 难以准确预测突然启动过程非定常流动的演化过程, 特别是采用双方程模型的情况下, 当 $t_s=2.5$ 时仍未出现漩涡, 因此, 虽然 $k-\varepsilon$ 双方程模型在大量的工程应用中取得很好的效果, 但是对于快速启动过程的过渡状态下, 对非定常过渡流动的计算难以取得满意的结果。大涡模拟的方法对于求解高雷诺数下的突然启动问题可能具有较好效果。

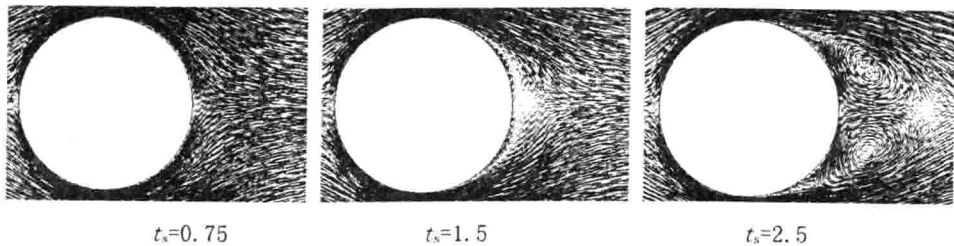


图 6 单方程模式(S-A 模型)计算结果

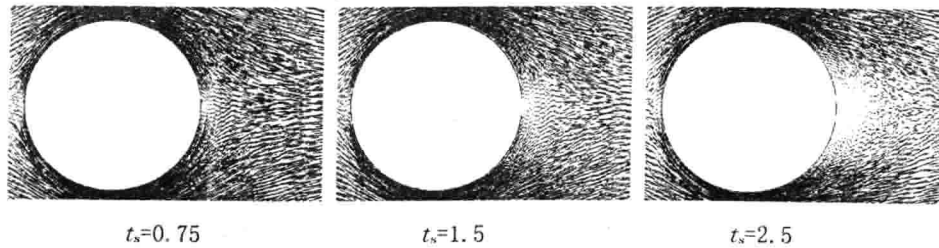


图 7 双方程模型(RNG $k-\varepsilon$)计算结果

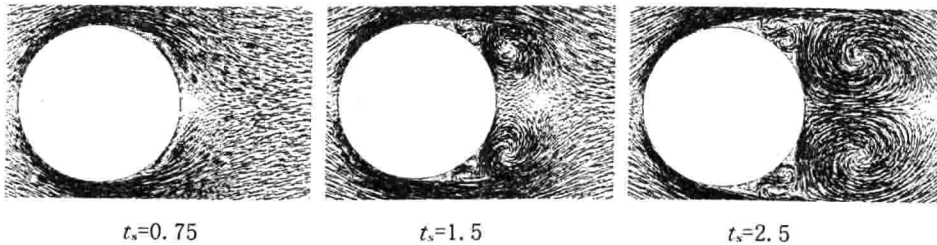


图 8 大涡模拟(LES)计算结果

4 直桨叶突然旋转计算结果

4.1 物理模型和计算方法

直桨叶启动旋转启动问题的计算模型如图 9 所示, 设定外径 D 为 240mm 的直桨叶宽 550 mm 高 650 mm 的充满水长方形容器, 至于其中的叶轮从静止突然以 83.33 rad/s^2 角加速度做匀加速旋转运动, 加速时间为 0.3 s, 几乎是瞬时完成了加速, 之后以稳定的角速度 $\omega=25 \text{ rad/s}$ 运动至 $t_s=12(t_s=t\omega/2\pi)$, 完成加速后, Re 为 720000 ($Re=\rho\omega\bar{D}^2/2\mu$)。

网格划分与动网格实现均采用与圆柱突然启动计算相同的方法, 而对于湍流的描述采用二维大涡模拟。

4.2 计算结果分析

直桨叶突然启动过程的流动计算结果如图 10 所示, 图中给出了整个过程的相对速度分布, 以固定在旋转桨叶上的坐标为参考坐标系, 其中 $t_s=1.2$ 时刻为加速完成时刻。

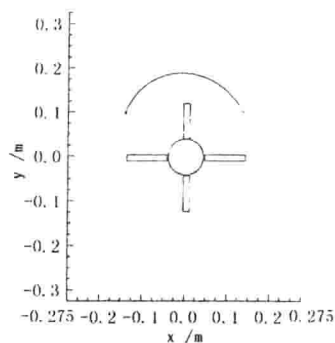


图 9 叶轮模型示意图

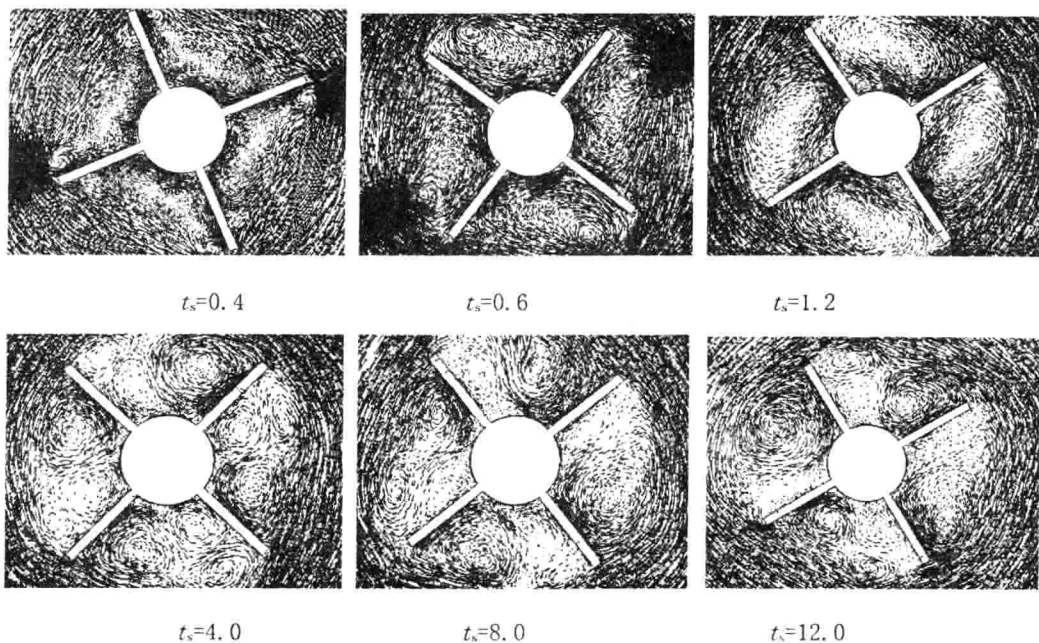


图 10 直桨叶突然启动过程的计算结果 (大涡模拟)

由图可知, 在 $t_s=0.4$ 时刻, 在桨叶背压面尖端开始出现流动分离并产生漩涡, 并随着时间的发展, 该主漩涡逐步增大并向桨叶压力面发展, 在 $t_s=1.2$ 时刻, 主漩涡到达压力面, 并在桨叶背压面根部出现一个小漩涡, 该小漩涡在 $t_s=4.0$ 时刻已发展成一对贴近桨叶背压面正反转涡对, 而主漩涡则尺寸减小而强度增大, 发展成贴近桨叶压力面的相对紧凑的漩涡。桨叶突然启动和加速过程引起的流动表现出明显的非定常流动特性。

5 结 论

本文采用基于非结构化动网格的有限体积法对圆柱和直桨叶突然启动引起的非定常流动进行了数值模拟, 计算了高雷诺数下典型平动和旋转启动过程非定常流动演化历程, 并探讨了湍流模型在计算突然启动问题上的适用性问题。计算结果表明, 圆柱启动过程, 由圆柱壁面流动分离产生的漩涡逐步向下游发展, 形成由大尺寸注漩涡和壁面上的小尺寸涡对组成的流动结构; 直桨叶启动过程中, 桨叶背压面尖端首先出现流动分离形成漩涡, 并逐步向压力面发展, 最后形成由贴近压力面上的主漩涡与贴近背压面上的涡对组成的流动结构。

高雷诺数下圆柱启动的计算结果与实验结果能很好吻合, 说明动网格方法和有限体积法在处理瞬态流动问题时是可行的, 同时采用大涡模拟计算高雷诺数下的平动和旋转启动问题均取得较好的结果。因此, 本文的方法和结果可以向更为复杂的流体机械瞬态启动问题推广。

参考文献

- [1] 吴大转, 王乐勤, 胡征宇. 离心泵快速启动过程外部特性的试验研究. 工程热物理学报, 2006, 27(1): 68-70
- [2] 吴大转, 王乐勤, 胡征宇. 离心泵快速启动过程瞬态水力特性的数值模拟. 浙江大学学报: 工学版, 2005, 39(9): 1427-1430, 1454.
- [3] BOUARD R, COUTANCEAU M. The early stage of development of the wake behind an impulsively started cylinder for $40 < Re < 10^4$. Journal of Fluid Mechanics, 1980, 101(3): 583-607.
- [4] WANG X G, CHARLES D. Numerical solutions for impulsively started and decelerated viscous flow past a circular cylinder. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 1991, 12(4): 383-400.
- [5] SANYASIRAJU Y V S S, MANJULA V. Flow past an impulsively started circular cylinder using a higher-order semicompact scheme. Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 2005, 72(1): 1-10.
- [6] CHANG C C, CHERN R L. Numerical study of flow around an impulsively started circular cylinder by a deterministic vortex method. Journal of Fluid Mechanics, 1991, 233: 243-263.
- [7] DEMIRDZIC I, PERIC M. Finite volume method for prediction of fluid flow in arbitrarily shaped domains with moving boundaries. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 1990, 10(7): 771-790.
- [8] PATANKAR S V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. New York: Hemisphere, 1980.
- [9] Baum JD, Luo Hong, Lohner R. Application of unstructured adaptive moving body methodology to the simulation of fuel tank separation from an F-16 C/D fighter. AIAA-97-0166, 1997.
- [10] 吴大转, 焦磊, 王乐勤. 绕翼型加速流动的数值模拟——加速度的影响. 工程热物理学报, 2006, 27(3): 423-425

基于无网格法的水中气泡 上升运动数值模拟

孙中国 席光 王焕然 项利锋

西安交通大学 能源与动力工程学院 710049

电话: 029-82668783 E-mail: xiguang@mail.xjtu.edu.cn

摘要: 本文对无网格法的一种——移动粒子半隐式法(MPS)进行了研究,建立了表面张力和气液两相流等若干粒子作用模型,编程实现了二维情况下水中气泡自由上升运动的数值模拟;对计算结果进行分析并与相关实验结果进行了定性比较,模拟结果显示了移动粒子半隐式法在模拟自由表面和气液两相流等涉及到大变形的有效性。

关键词: 移动粒子半隐式法; 表面张力; 气液两相流

1. 引言

气液两相流动在工业生产和日常生活中是极其常见的流动现象,但是由于两相流动常常伴随着自由表面较剧烈的位移和变形,因此使得传统基于网格的数值模拟方法在模拟上述流动时面临着网格的动态调整和重组等困难,可能会造成计算误差增大和计算量的急剧增加,对于较复杂的流动现象甚至无法收敛。

移动粒子半隐式法作为一种新的无网格方法消除了网格对计算的影响,连续介质的离散化处理使得该方法可以很容易的模拟各种复杂几何大变形,并且不会对计算量产生任何影响,本文采用该方法对简单的气液两相流问题——水中静止气泡自由上升运动进行建模和数值模拟。

2. 数值方法

MPS方法是日本东京大学 Koshizuka^[1]等学者于20世纪90年代提出的一种求解不可压缩流动的无网格数值解法。其基本思想是在求解区域内部及其边界上布置一系列离散的粒子来代表宏观流体,每个粒子都携带其相应的位置、速度等流动信息,在Lagrange框架下,通过粒子间相应函数关系的求解来追踪各流体粒子在各个时间层的位置,速度等信息,以时间层推进的方式,来获得整个流场的动态流动信息。

2.1 流动控制方程:

控制方程满足质量守恒和动量守恒:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} + \gamma \quad (2)$$

其中 $\mathbf{u}$ 为流体速度矢量, ρ 为流体密度, p 为压力, μ 为流体动力粘性系数, $\mathbf{g}$ 为作用在流体单位质量上的外力矢量, γ 为表面张力矢量。

2.2 粒子作用模型

每个粒子通过核函数与其邻点粒子发生相互作用,核函数为:

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_c}{r} - 1 & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases} \quad (3)$$

式(3)中 r 是粒子 i 和 j 之间的距离, $r = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$, r_c 称为粒子作用半径。粒子仅与位于其粒子作用半径 r_c 范围内的邻点粒子发生相互作用。定义 i 粒子的粒子数密度为:

$$\langle n \rangle_i = \sum_{j \neq i} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad (4)$$

流体密度与粒子数密度成正比。对于不可压缩流体, 流体密度保持定常相当于其粒子数密度维持一个常数 n^0 。

设 $\phi_i = \phi(\mathbf{r}_i)$, 表示位于 $\mathbf{r}_i$ 处 i 粒子的物理参数标量值, 则 i 粒子的梯度矢量和拉普拉斯算子的粒子作用形式表示为:

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{\phi_j - \phi_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad (7)$$

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{\lambda n^0} \sum_{j \neq i} (\phi_j - \phi_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad (8)$$

式中 d 为求解问题的空间维数。 λ 的引入使 $\nabla^2 \phi$ 用粒子作用模型模拟得到的结果与扩散方程解析解相一致。

2.3 边界条件

由于在自由表面的外部区域没有粒子存在, 因此自由表面上粒子的粒子数密度较小。计算中凡满足

$$\langle n^* \rangle_i < \beta n^0 \quad (9)$$

条件的粒子即可认为是自由表面粒子, 式中 β 为一个小于1的常数。

对于固体壁面则可以很简便地以固定粒子表示, 这些固定粒子速度总为0。为使流体粒子不进入固壁区域, 固壁粒子中靠近流体的第一层粒子需与流体粒子一起参与压力计算, 固壁粒子的层数则须足够满足计算粒子数密度所需的层数。

2.4 算法

MPS方法采用半隐式时间推进算法。在每个时层内, 首先估算粒子速度及位置, 然后求解连续方程获得粒子速度及位置的修正值, 对估算值进行修正得到粒子在下一时层的速度及位置。具体算法如下:

(1) 给定粒子的初始分布, 包括给定粒子的速度及位置的初场: $\mathbf{u}_i^0, \mathbf{r}_i^0$

(2) 在时间步长 Δt 之后, 显式计算动量方程中的粘性项及源项, 得到粒子速度及位置的估算值 $\mathbf{u}_i^*, \mathbf{r}_i^*$

$$\mathbf{u}_i^* = \mathbf{u}_i^n + \Delta t (\nu \nabla^2 \mathbf{u}_i^n + \mathbf{g} + \gamma) \quad (10)$$

$$\mathbf{r}_i^* = \mathbf{r}_i^n + \Delta t \mathbf{u}_i^* \quad (11)$$

式中 ν 为流体运动粘性系数。

(3) 根据估算得到的粒子位置 $\mathbf{r}_i^*$ 计算此时的粒子数密度 $\langle n^* \rangle_i$, 这个粒子数密度与流体粒子数密度常数 n^0 有偏差 n' 。因此对各个粒子的粒子数密度进行修正

$$n^* + n' = n^0 \quad (12)$$

同时由连续性方程

$$-\nabla \cdot \mathbf{u}' = \frac{1}{\Delta t} \frac{n_i^{n+1} - \langle n^* \rangle_i}{n^0} \quad (13)$$

其中粒子速度修正值由动量方程计算得到

$$\mathbf{u}' = -\frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{n+1} \quad (14)$$

联立以上三式，得到压力泊松方程：

$$\langle \nabla^2 p^{n+1} \rangle_i = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{\langle n^* \rangle_i - n^0}{n^0} \quad (15)$$

上式左端项以拉普拉斯模型替代，离散成代数方程组求解，即可得到各粒子压力值 p_i 。

(4) 由计算得到的压力值根据式 (14) 计算各粒子速度修正值

(5) 修正得到粒子在下一时层的速度及位置分布

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^* + \mathbf{u}_i' \quad (16)$$

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^* + \mathbf{u}_i' \Delta t \quad (17)$$

2.4 气液两相流模型

项利峰^[2]等已将 MPS 方法成功应用于计算相关单相流动算例，本文将计算气液两相流动。首先，引入表面张力模型^{[3]、[4]}，如图 1 所示，表面张力作用于液体表面粒子，根据表面粒子判据，表面粒子分布于厚度为 d_{st} 的区域。

首先，用方程 (18)、(19) 重新计算表面粒子的粒子数密度。

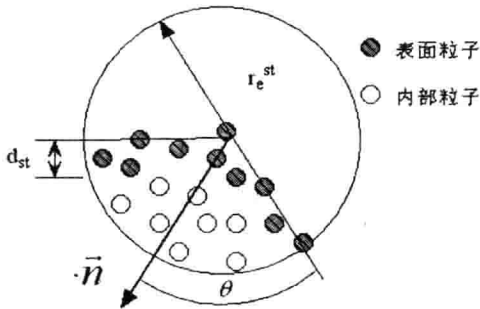


图 1 表面张力模型

一次重新计算。但是计算公式变为：

$$n_i^{st2} = \sum_{j \neq i} w_i^{st2}(|r_j - r_i|) \quad (20)$$

$$w_i^{st}(|r_j - r_i|) = \begin{cases} 1 & 0 \leq r \leq r_e^{st} \text{ 且 } n_j^{st1} > n_i^{st1} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (21)$$

表面粒子 i 和 j (间距 r_e^{st}) 之间切向量的夹角 2θ 与粒子数密度成正比关系：

$$2\theta = \frac{n_i^{st2}}{n_0^{st1}} \pi \quad (22)$$

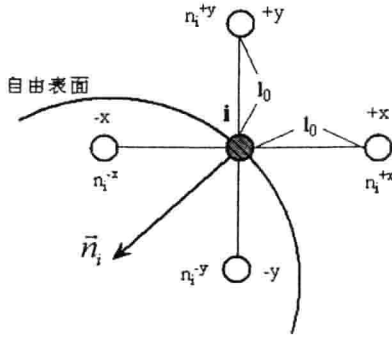
这里 n_0^{st1} 是当粒子处于水平界面上时的 n^{st1} 值，其值为液滴内部粒子 n^{st1} 值的一半。根据定义，曲率 κ 是弧长所对应的单位切向量的导数值，计算公式为：

$$\kappa = \frac{2 \cos \theta}{r_e^{st}} \quad (23)$$

单位法矢量由粒子数密度计算得来，加权函数仍然沿用方程 (3) 计算。 i 粒子的上下左右四个方向的粒子数密度为 $n_i^{\pm x}(r_i \pm l_0 n_x)$ 和 $n_i^{\pm y}(r_i \pm l_0 n_y)$ 。如图 2 所示，法矢量为：

$$a_i = \frac{n_i^{+x} - n_i^{-x}}{2l_0} n_x + \frac{n_i^{+y} - n_i^{-y}}{2l_0} n_y \quad (24)$$

$$n_i = \frac{a_i}{|a_i|} \quad (25)$$



其中， n_x 和 n_y 分别是 x 和 y 方向的单位矢量。于是，表面张力的表达式可以写为：

$$\gamma = \sigma \kappa \delta(s) n_s \quad (26)$$

其中 σ 是界面张力系数， κ 为界面平均弯率， n_s 是界面单位法向量， $\delta(s)$ 是 Dirac 函数。

图 2 单位法矢量计算模型

3. 算例分析

对水中静止气泡自由上升运动问题建立二维几何模型，如图 3 所示，U 型容器宽 $L=160\text{mm}$ ，水深 $H=130\text{mm}$ ，初始时刻气泡位于容器对称轴上，其直径 $D=40\text{mm}$ ，中心距容器底面 $h=42\text{mm}$ 。

初始时刻，由于气泡密度小于水，在浮力作用下气泡由静止开始自由上升运动；在上升过程中，气泡在表面张力、液体压力和周围流场的影响不断发生变形，同时气泡的变形又会影影响周围水体的流场，两方面相互作用形成了气泡的真实形状。

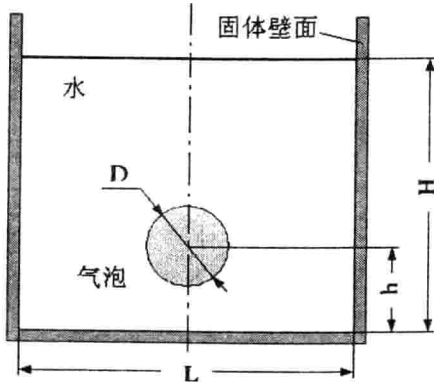


图 3 算例几何模型

对该问题进行离散化处理。如图 4 中 $t=0.0\text{s}$ 所示，取粒子间距 $l_0=2 \times 10^{-3}\text{m}$ ，气泡被离散为 304 个这样的粒子，液体则用 5042 个粒子表示，容器壁面采用三层粒子结构共 717 个粒子。

相关物性参数为：流体密度 $\rho=1.0 \times 10^3 \text{kg/m}^3$ ，动力粘性系数 $\mu=8.0d-2$ ，重力加速度 $g=-9.8\text{m/s}^2$ ，气体密度取 $\rho'=8.0 \times 10^2 \text{kg/m}^3$ ，动力粘性系数 $\mu'=5.0d-5$ ，重力加速度 $g'=-2.0d-3\text{m/s}^2$ 。

数值模拟结果如图 4 所示，图中显示了从 $t=0.0s$ 到 $t=0.45s$ 内的结果。在 $t=0$ 时，由水静力学原理可知，气泡上下表面压力差产生的浮力使气泡从静止开始向上运动；在 $t=0.20s$ 之前，气泡速度非常小，气泡变形的主要原因是气泡周围液体的压力差，气泡呈现出上大下小的纸扇形状；随着气泡运动速度越来越大，气泡不断排开上部液体向上运动，液体对气泡表面的拖曳力也逐渐明显，在 $t=0.25s$ 至 $t=0.35s$ 之间，气泡呈现出球冠状；气泡上升到液面时，液面逐渐隆起，气泡上面的液体不断减少形成液膜，气泡也变宽并逐渐浮出液面，形成漂浮在液面上的气泡。

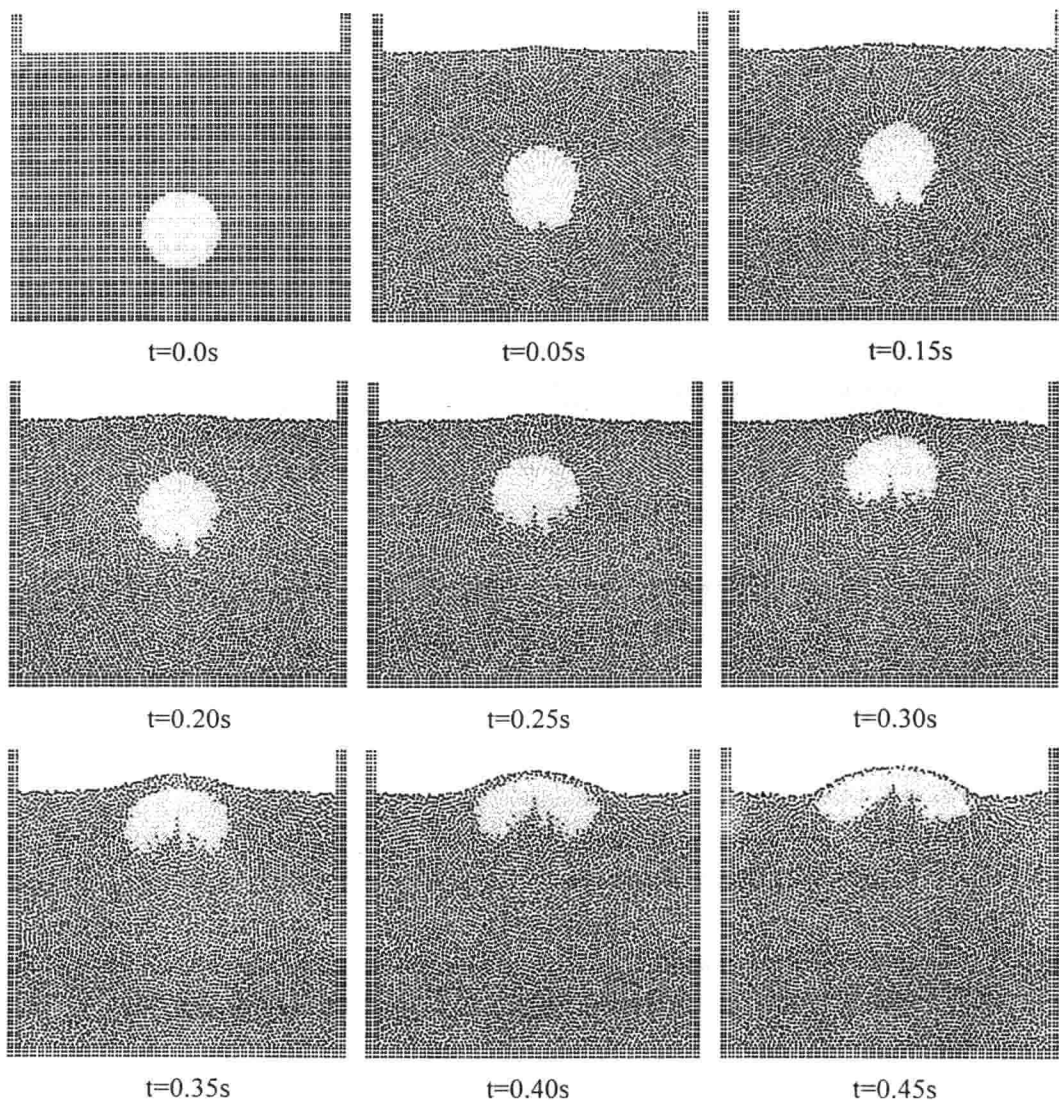
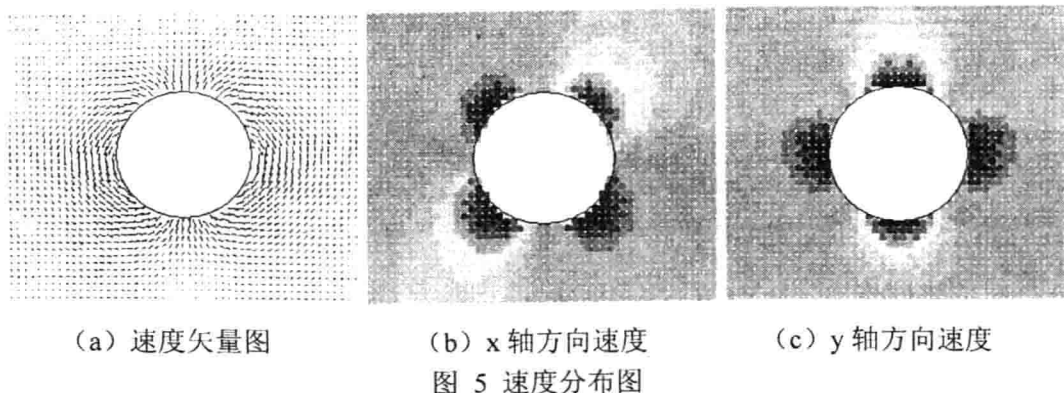


图 4 气泡在水中自由上升

对结果进行进一步分析，如图 5 所示，图中 (a)、(b)、(c) 分别表示在 $t=0.01s$ 时刻气泡周围的速度矢量分布和 x 、 y 两个方向速度大小的分布，该时刻气泡刚刚开始向上运动，基本保持圆形。可以看出，数值模拟结果中速度值的分布符合理论设想和实际情况，并且分布有较好的对称性，定性的显示了 MPS 方法在模拟气液两相流运动中的可行性和有效性。



取 $t=0.50s$ 时刻的模拟结果与实验结果^[5]进行比较, 如图 6 所示, 可以看出当气泡漂浮在液面上时, 数值计算对气泡形状的模拟与实验结果非常吻合, 结果令人满意。

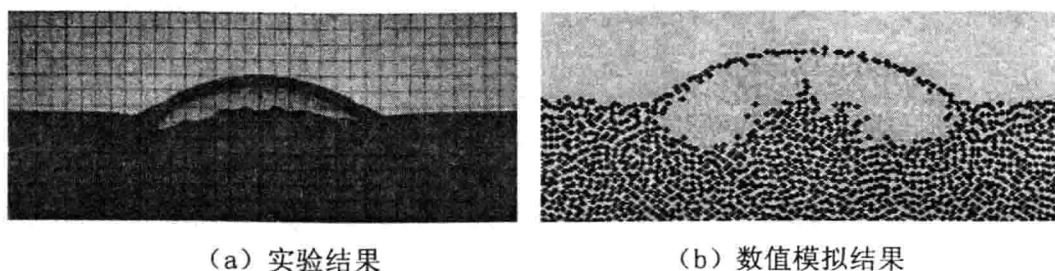


图 6 模拟结果与实验结果比较

4. 结论

本文建立了移动粒子半隐式法 (MPS) 的表面张力和气液两相流等若干粒子作用模型, 编程实现了二维情况下水中气泡自由上升运动的数值模拟; 对计算结果进行分析并与相关实验结果进行了定性比较, 模拟结果显示了移动粒子半隐式法在模拟自由表面和气液两相流等涉及到大变形问题的有效性。

参考文献

- [1] Koshizuka S, Oka Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. Nuclear Science and Engineering [J]. 1996, 123:421-434.
- [2] 席光, 项利峰. 自由表面流动的移动粒子半隐式模拟方法. 西安交通大学学报[J]. 2006, 40(3):249-252
- [3] Ri-Qiang Duan, Seiichi Koshizuka, Yoshiaki Oka. Two-dimensional simulation of drop deformation and breakup at around the critical Weber number. Nuclear Engineering and Design[J]. 2003, 225:37-48.
- [4] Katsuya NOMURA, Seiichi KOSHIZUKA, Yoshiaki OKA and Hiroyuki OBATA. Numerical Analysis of Droplet Breakup Behavior using Particle Method. Journal NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY. 2001,38(12):1057-1064,
- [5] D. A. May, J. J. Monaghan. Can a Single Bubble Sink a Ship? American Journal of Physics[J]. 2003, 71(9):842-849

耗散粒子动力学对颗粒沉降问题的研究

孔轶华, 张楚华, 席光

(西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

联系电话: 029-82668783 Email: xiguang@mail.xjtu.edu.cn

摘要: 给出了耗散流体粒子运动的控制方程组、边界条件、数值方法等。使用耗散粒子动力学方法编程计算了颗粒在重力作用下的沉降运动, 观察到颗粒的质量和所受重力对颗粒运动轨迹的影响, 且颗粒质量越小, 所受重力越小, 颗粒运动所表现出的随机性越强烈。从而验证了所采用的数学模型、计算方法在流动数值模拟中的可行性及潜在优势。

关键词: 介观模型 耗散粒子动力学 颗粒沉降 随机耗散理论

1 引言

流体流动的耗散粒子动力学^[1] (DPD, Dissipative Particle Dynamics) 是一种介观模型方法。这种模型认为流体由大量相互作用的假想流体粒子 (DPD 粒子) 组成, 而每个 DPD 粒子又包含大量的微观流体分子或原子。

颗粒在通道内的运动过程及其沉降规律是一个流固两相流的机理性问题, 广泛应用于生物医学、环境科学、能源动力等领域。本文使用 DPD 算法模拟颗粒在重力作用下在由两垂直壁面限制的静止流体中的沉降现象。计算结果对于颗粒悬浮物在通道内的运动过程、沉降规律及沉淀分布等实际问题具有指导意义。

2 理论模型

DPD 方法通过求解一组 DPD 粒子群的运动位移、速度、加速度得到流体运动规律。对于任一个 DPD 粒子 i , 其位移及动量方程为:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \quad \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \vec{f}_{ij} + \vec{F}_e \quad (1)$$

$\vec{r}_i$ 和 $\vec{v}_i$ 分别为粒子 i 的位置和速度矢量, $\vec{f}_{ij}$ 为粒子 j 对粒子 i 作用力, $\vec{F}_e$ 为外力, 其中 $\vec{f}_{ij}$ 由三部分组成:

$$\vec{f}_{ij} = \vec{F}_{ij}^C + \vec{F}_{ij}^D + \vec{F}_{ij}^R \quad (2)$$

$\vec{F}_{ij}^C$ 为守恒力, 是作用在中心线方向的软斥力:

$$\vec{F}_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij}(1-r_{ij})\hat{r}_{ij}, & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases} \quad (3)$$

其中 a_{ij} 为粒子 i 和 j 间最大斥力, $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$, $\hat{r}_{ij} = \vec{r}_{ij}/|\vec{r}_{ij}|$, 当粒子间距离大于 r_c , 粒子间作用力忽略不计。耗散力和随机力分别为:

$$\vec{F}_{ij}^D = -\gamma w^D(r_{ij})(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij})\hat{r}_{ij} \quad (4)$$

$$\vec{F}_{ij}^R = \sigma w^R(r_{ij})\theta_{ij}\hat{r}_{ij} = \sigma w^R(r_{ij})\zeta_{ij}\Delta t^{-1/2}\hat{r}_{ij} \quad (5)$$

其中 γ 和 σ 为耗散力和随机力强度, $w^D(r_{ij})$ 和 $w^R(r_{ij})$ 为权重函数, $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$, θ_{ij} 为满足高斯分布的随机函数, ζ_{ij} 为随机数, 均值为零, 方差为 1, 对于每个时间步长、每对粒子相互独立。

耗散力和随机力需满足平衡条件:

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2, \quad \gamma = \frac{\sigma^2}{2k_B T} \quad (6)$$

权重函数与粒子间距离有关, 本文采用 Groot 和 Warren^[2]推荐形式:

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2 = \begin{cases} (1-r)^2, & r < r_c \\ 0, & r \geq r_c \end{cases} \quad (7)$$

对于不可压缩流动, a_{ij} 需满足 $a_{ij} = 75k_B T / \rho$ (ρ 为粒子数密度), $\sigma = 3$ 。

3 计算方法

3.1 速度修正 Verlet 算法

DPD 方程采用速度修正 Verlet 算法^[2]求解:

$$\begin{aligned} r_i(t + \Delta t) &= r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\Delta t^2 \dot{v}_i(t) \\ \tilde{v}_i(t + \Delta t) &= v_i(t) + \lambda \dot{v}_i(t)\Delta t \\ \dot{v}_i(t + \Delta t) &= \dot{v}_i(r_i(t + \Delta t), \tilde{v}_i(t + \Delta t)) \\ v_i(t + \Delta t) &= v_i(t) + \frac{1}{2}[\dot{v}_i(t) + \dot{v}_i(t + \Delta t)]\Delta t \end{aligned} \quad (8)$$

其中 λ 及 Δt 为松弛因子及时间步长, 本文取 $\lambda = 0.65$, $\Delta t = 0.04$ 。

3.2 模拟过程^[3]

如图 1 所示, 计算区域为 6×100 , 布置流体粒子 2400 个, 壁面粒子 800 个。流体粒子初始位置均匀分布, 初始速度由均值为零的随机分布决定。固体颗粒模化为直径 $d = 4$ 的圆柱, 初始位置为距顶部 $7.5d$ 处。

在模拟中, 需要考虑几类对象之间力的作用: 流体粒子与流体粒子之间的作用、流体粒子与壁面粒子之间的作用、流体粒子与颗粒之间的作用、壁面粒子与颗粒之间的作用。

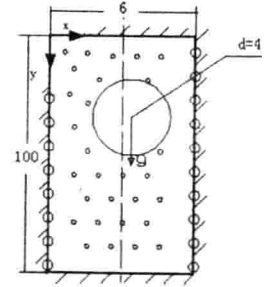


图 1 颗粒在静止流体中沉降示意图

对于平面固体壁面, 采用单层壁面粒子层结合反弹边界条件, 如图 2、图 3 所示, 考虑壁面粒子与流体粒子之间的守恒力:

$$a'_{ij}(1-r_{ij})\hat{r}_{ij}, r_{ij} < r_c \quad (9)$$

其中, $a'_{ij} = \sqrt{a_{ij} \cdot a_{wall}}$, 取 $a_{wall} = 5.0$ 。

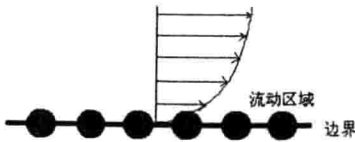


图 2 单层粒子边界条件

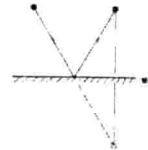


图 3 反弹边界条件

流体粒子、壁面粒子与颗粒之间的作用包括作用力和反弹边界条件。当流体粒子、壁面粒子与颗粒质心距离小于 $r_c + d/2$ 时, 考虑二者之间的作用, 其中守恒力大小为: