

有限雷诺数下颗粒靠近壁面运动的受力和力矩模型

周志登*, 晋国栋*

* (中国科学院力学研究所, 北京 100190)

摘要: 本文旨在建立有限颗粒雷诺数下球形颗粒靠近壁面运动的受力和力矩模型。传统的润滑力模型是基于斯托克斯流动理论发展得到的, 只适用于低颗粒雷诺数情况。为了研究有限颗粒雷诺数对颗粒靠近壁面运动的受力和力矩模型的影响, 本文采用格子 Boltzmann 方法对颗粒靠近壁面的四种基本运动情况进行数值模拟, 在分别确定合适的计算区域尺寸并进行网格无关性检验后, 设置不同的颗粒与壁面间距和颗粒雷诺数, 解析颗粒与流场的相互作用, 从而得到颗粒的受力和力矩的无量纲系数。将获得的数值结果与传统的低雷诺数润滑力模型进行定量比较, 提出了有限颗粒雷诺数下颗粒靠近壁面运动的受力和力矩模型。随后模拟了颗粒的一般运动情况, 获得的结果与提出的受力和力矩模型符合得很好。此外, 将提出的颗粒受力和力矩模型与其它文献的相应结果进行对比, 验证了模型的正确性与适用性。在解析颗粒的直接数值模拟中, 当颗粒与壁面的间隙中的流体运动无法求解时, 本文提出的颗粒受力和力矩模型可作为亚格子尺度模型被采用; 在使用点颗粒模型时, 本文提出的模型则可以作为颗粒靠近壁面的运动方程中的受力模型。

关键词: 受力和力矩模型; 有限颗粒雷诺数; 靠近壁面; 格子 Boltzmann 方法; 亚格子尺度模型

引言

颗粒流体二相流在工业和环境流动中普遍存在, 如工业气力输送中的固体颗粒流动^[1]、流化床中的流动^[2]、河流中的泥沙沉积与输运^[3]等, 在这些流动中颗粒与颗粒或颗粒与壁面的相互作用是一种极为重要的机理。

本文中我们主要关注的是壁面受限的颗粒流体二相流中的一个基本过程, 即有限颗粒雷诺数下靠近固体壁面的单个球形颗粒在流体中的运动。在颗粒流体二相流中, 颗粒解析的直接数值模拟 (PR-DNS) 已经成为一种强有力的手段, 我们可以用它来追踪颗粒的运动、解析颗粒周围的流体运动并计算作用于颗粒上的水动力与力矩^[4-6]。对壁面受限的颗粒流体二相流进行数值模拟需要将计算区域划分为有限尺寸的网格, 但网格分辨率是有限的, 当颗粒与壁面的间距小于网格尺寸时, 流体运动与颗粒所受的力与力矩都无法准确求解。在这种情况下, 流体从两个相隔很近的固体壁面的间隙中被挤压出来会产生较大的水动力压力, 此时颗粒所受的阻力需要通过建立合适的亚格子尺度模型来解析。常用的亚格子尺度模型有两种, 其一是有势力方法^[7-8], 即简单地采用颗粒与壁面的距离的函数来表示颗粒所受阻力; 其二是润滑力方法^[9-10], 即采用润滑力和力矩的渐近表达式来解析颗粒与壁面的相互作用, 根据颗粒的运动方向的变化选取表达式, 此种方法更为精确。

靠近固体壁面的单个球形颗粒在流体中运动所受润滑力和力矩的渐近表达式起始于两个颗粒的相对运动研究。两个颗粒的相对运动由四种基本运动组成, 分别是颗粒沿着颗粒中心线方向相对运动、沿着垂直于中心线的某一方向运动、绕着中心线旋转、绕着垂直于中心线的某一方向旋转。对于第一种运动情况, Jeffrey^[11]将 Cooley 和 O'Neill^[12]的结果与数值模拟相结合得出了一个正比于 ε^{-1} 的公式来表示颗粒的受力, $\varepsilon = s/R$ 表示无量纲长度, 其中 s 表示两个颗粒的间距, R 表示受力颗粒的半径。对于其他三种情况, Jeffrey 和 Onishi^[13]将 O'Neill 和 Majumdar^[14]的工作进行延伸, 获得了作用于颗粒的力和力矩的渐近公式。前述的渐近公式对于不同半径的两个颗粒都是适用的, 当其中一个颗粒的半径趋于无穷大时, 此颗粒可被看作平直壁面, 渐近公式则变成靠近壁面运动的单个颗粒所受润滑力与力矩的表达式。

目前的润滑力模型都是基于 Stokes 流动假设得到的, 并不适用于有限颗粒雷诺数情况。颗粒雷诺数定义为 $\text{Re}_p = \rho_f u d_p / \mu$, 其中 ρ_f 和 μ 分别为流体密度与动力粘度, d_p 和 u 分别为颗粒直径与速度。而实际研究中颗粒在流体中的运动涉及到许多有限颗粒雷诺数的情况, 因此我们的研究目标是对已有的低颗粒雷诺数润滑力模型进行修正, 得到有限颗粒雷诺数下颗粒靠近壁面运动的受力和力矩的渐近表达式。

近年来, 越来越多的研究工作涉及到壁面效应对在流体中运动的单个颗粒的作用。Cox 和 Brenner^[15]采用匹配渐近展开法求解壁面效应对有限颗粒雷诺数下的颗粒受力的影响, 颗粒所受润滑力被表示为 Stokes 阻力乘以无量纲因子 $f_{zz}(\varepsilon)$,

$$f_{zz}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} + \frac{1}{5} \left(1 + \frac{\text{Re}_p}{4} \right) \ln \left(\frac{1}{\varepsilon} \right) + O(\text{Re}_p^2) \quad (1)$$

其中 $\varepsilon \ll 1$, $\varepsilon \text{Re}_p \ll 1$, 颗粒匀速靠近壁面。Liu 和 Prosperetti^[16]考虑在 $\text{Re}_\Omega \leq 200$ 时靠近一个或两个壁面的单个球形颗粒绕平行或垂直于壁面的方向旋转的情况, 并研究离心、惯性和粘性效应对颗粒受力和力矩的影响。 $\text{Re}_\Omega = \rho_f \Omega R d_p / \mu$ 表征颗粒旋转雷诺数, Ω 为颗粒的旋转角速度。Lin^[17]等人采用浸没边界方法计算了 $\text{Re}_p \leq 50$ 时颗粒朝向壁面运动所受的润滑力并获得了修正公式。在本文中, 我们对上述的润滑力修正公式进行延伸, 构造颗粒靠近壁面运动的四种基本运动模型, 采用格子 Boltzmann 方法完全解析不同颗粒雷诺数的流动并计算颗粒受力和力矩, 然后进行数据拟合获得颗粒受力和力矩的无量纲系数随着颗粒雷诺数以及颗粒与壁面的间距变化的渐近表达式。

本文接下来的内容分别如下: 第 2 部分我们介绍颗粒的四种基本运动模型和模拟颗粒运动诱导的流动的方法, 并进行模型参数设置; 第 3 部分我们详细介绍获得的计算结果, 分析有限颗粒雷诺数对颗粒受力和力矩的系数的影响; 第 4 部分对本文的内容进行总结, 描述我们得到的结论。

1 模型与方法

1.1 颗粒运动模型

对于一个靠近壁面在 Stokes 流动中运动的颗粒, 其所受的水动力和力矩与平移速度以及角速度的线性关系可以简化表示为^[10]

$$\begin{cases} F_1 = 6\pi\mu R A_{11} U_1 \\ F_2 = 6\pi\mu R (A_{22} U_2 + R B_{23} \Omega_3) \\ F_3 = 6\pi\mu R (A_{22} U_3 - R B_{23} \Omega_2) \\ T_1 = 8\pi\mu R^2 D_{11} \Omega_1 \\ T_2 = 8\pi\mu R^2 (-B_{23} U_3 + R D_{33} \Omega_2) \\ T_3 = 8\pi\mu R^2 (B_{23} U_2 + R D_{33} \Omega_3) \end{cases} \quad (2)$$

其中三维方向分别表示为 $1 \leftrightarrow y(-), 2 \leftrightarrow x(+), 3 \leftrightarrow z(+)$ 。未知的系数只有 5 个, 分别为 $A_{11}, A_{22}, B_{23}, D_{33}$ 和 D_{11} 。Dance 和 Maxey^[10]总结了在低颗粒雷诺数下这 5 个系数的理论表达式, 如表 1 所示, 其中对于系数 D_{11} 我们采用 Jeffery^[18]的结果进行数据拟合作为理论表达式。本文中以表 1 中的 5 个理论表达式为基础, 改变颗粒与壁面的间距以及颗粒雷诺数条件, 利用颗粒靠近固体壁面运动的四种基本运动模型来计算颗粒受力和力矩的无量纲系数, 最后进行数据拟合得到 Re_p 与 ε 表示的颗粒受力和力矩系数的模型公式。

表 1 低颗粒雷诺数下颗粒靠近壁面运动的受力与力矩的无量纲系数表达式

	理论表达式	O(1)
A_{11}	$= -\frac{1}{\varepsilon} + \frac{1}{5} \ln \varepsilon + \frac{1}{21} \varepsilon \ln \varepsilon$	+ -0.848 + $O(\varepsilon)$
A_{22}	$= \frac{8}{15} \ln \varepsilon + \frac{64}{375} \varepsilon \ln \varepsilon$	+ -0.952 + $O(\varepsilon)$
B_{23}	$= -\frac{2}{15} \ln \varepsilon - \frac{86}{375} \varepsilon \ln \varepsilon$	+ -0.257 + $O(\varepsilon)$
D_{33}	$= \frac{2}{5} \ln \varepsilon + \frac{66}{125} \varepsilon \ln \varepsilon$	+ -0.371 + $O(\varepsilon)$
D_{11}	$= -1.277 + 0.285 \cdot \varepsilon^{0.25}$	

颗粒靠近固体壁面的四种基本运动分别为：（1）颗粒沿垂直于壁面的 y 轴运动；（2）颗粒沿平行于壁面的 x 轴运动；（3）颗粒绕平行于壁面的 z 轴旋转；（4）颗粒绕 y 轴旋转。如图 1 所示，四种基本运动模型对应的计算颗粒受力与力矩系数的公式如下所示：

$$\begin{aligned} F_1 &= 6\pi\mu R U_1 \cdot A_{11}(\text{Re}_p, \varepsilon) \\ F_2 &= 6\pi\mu R U_2 \cdot A_{22}(\text{Re}_p, \varepsilon) \\ \begin{cases} F_2 = 6\pi\mu R (R \cdot B_{23}(\text{Re}_\Omega, \varepsilon) \Omega_3) \\ T_3 = 8\pi\mu R^2 (R \cdot D_{33}(\text{Re}_\Omega, \varepsilon) \Omega_3) \end{cases} & \quad (3) \\ T_1 &= 8\pi\mu R^2 (R \cdot D_{11}(\text{Re}_\Omega, \varepsilon) \Omega_1) \end{aligned}$$

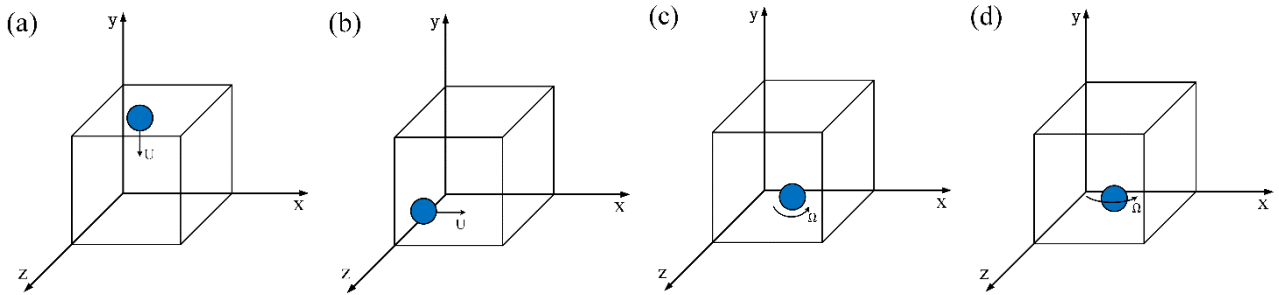


图 1 单个颗粒 (a) 沿垂直于壁面的 y 轴运动；(b) 沿平行于壁面的 x 轴运动；(c) 平行于壁面的 z 轴旋转；(d) 垂直于壁面的 y 轴旋转

对于图 1 中的四种颗粒基本运动情况，先设置颗粒与壁面的距离与颗粒雷诺数，令颗粒先进行短暂的匀加速运动至速度设定值，随后保持匀速运动，在流场达到稳定后，我们即可得到稳定的颗粒受力和力矩，并利用式(3)计算无量纲系数。

1.2 数值方法

本文中采用格子 Boltzmann 方法的多松弛模型 (MRT-LBM) 来解析一个有限尺寸颗粒靠近壁面运动时所引起的流体运动，并计算颗粒的受力和力矩。在格点 \mathbf{x} 与时间 t ，格子 Boltzmann 方法的多松弛模型的演化方程为^[19]

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{S} \cdot [\mathbf{m} - \mathbf{m}^{(eq)}], \quad (4)$$

其中 $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ 表示格点处的离散速度分布函数矢量。在本文采用的 D3Q19 离散速度模型中， \mathbf{M} 是一个 19×19 的正交变换矩阵， $\mathbf{m}^{(eq)}$ 是矩空间 \mathbf{m} 的平衡态函数， \mathbf{S} 表示松弛时间的对角矩阵， δ_t 为时间步长。分布函数空间与矩空间的转换可表示为

$$\mathbf{m} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{f}, \quad \mathbf{f} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{m}, \quad \mathbf{m}^{(eq)} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{f}^{(eq)}, \quad (5)$$

相关的宏观物理量可由离散速度分布函数计算得到：

$$\rho_{f0} = 1, \quad \rho_f = \sum_i f_i, \quad \rho_{f0} \mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{e}_i, \quad p = \rho_f c_s^2, \quad (6)$$

其中 \mathbf{u} 为流体速度， ρ_{f0} 为流体平均密度， p 为流体压力， $c_s = 1/\sqrt{3}$ 为模型声速，D3Q19 模型中的离散速度 \mathbf{e}_i 如图 2 所示，表示为

$$\mathbf{e}_i = \begin{cases} (0, 0, 0) & i = 1 \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1) & i = 2, \dots, 6 \\ (\pm 1, \pm 1, 0), (\pm 1, 0, \pm 1), (0, \pm 1, \pm 1) & i = 7, 8, \dots, 18. \end{cases} \quad (7)$$

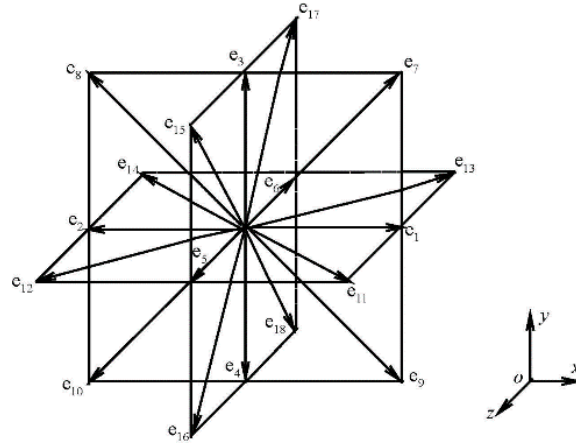


图 2 D3Q19 模型中流体格点的 19 个离散速度的示意图

矩空间 \mathbf{m} 的 19 个元素表示为^[19]

$$\mathbf{m} = \{\rho_f, k_1, k_2^2, u_x, q_x, u_y, q_y, u_z, q_z, 3p_{xx}, 3\pi_{xx}, p_{ww}, \pi_{ww}, p_{xy}, p_{yz}, p_{xz}, m_x, m_y, m_z\}^T, \quad (8)$$

其中元素 m_i ($i = 0, 1, 2, \dots, 18$) 分别表示流体密度 ρ_f 、独立于密度的动能部分 k_1 、独立于密度和动能的动能平方 k_2^2 、动量 $\rho_f u_x, \rho_f u_y, \rho_f u_z$ 、能量通量 q_x, q_y, q_z 、应力张量 p_{xx}, p_{yy}, p_{zz} 以及三阶矩 m_x, m_y, m_z 。守恒的水动力矩为密度和动量 $m_0^{(eq)} = \rho_f$ 、 $m_3^{(eq)} = \rho_f u_x$ 、 $m_5^{(eq)} = \rho_f u_y$ 与 $m_7^{(eq)} = \rho_f u_z$ ，其它非守恒动力矩为守恒矩的函数。对角矩阵 \mathbf{S} 指定非守恒矩在碰撞中的松弛速率，可表示为

$$\mathbf{S} \equiv \text{diag}(s_0, s_1, s_2, s_3, s_4, s_3, s_4, s_3, s_4, s_9, s_{10}, s_9, s_{10}, s_{13}, s_{13}, s_{13}, s_{16}, s_{16}, s_{16}) \quad (9)$$

其中对于守恒矩有 $s_0 = s_3 = 0$ ，对于非守恒矩有 $s_1 = 1.19$ 、 $s_2 = s_{10} = 1.4$ 、 $s_4 = 1.2$ 、 $s_{16} = 1.98$ 、 $s_9 = s_{13} = 1/(3\nu + 0.5)$ ， ν 为流体的运动粘度。非守恒矩的平衡态函数为 $m_1^{(eq)} = -11\rho_f + 19(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)$ 、 $m_2^{(eq)} = w_\varepsilon \rho_f + w_{\varepsilon j}(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)$ 、 $m_4^{(eq)} = -2u_x/3$ 、 $m_6^{(eq)} = -2u_y/3$ 、 $m_8^{(eq)} = -2u_z/3$ 、 $m_9^{(eq)} = 2u_x^2 - (u_y^2 + u_z^2)$ 、 $m_{10}^{(eq)} = w_{xx} m_9^{(eq)}$ 、 $m_{11}^{(eq)} = u_y^2 - u_z^2$ 、 $m_{12}^{(eq)} = w_{xx} m_{11}^{(eq)}$ 、 $m_{13}^{(eq)} = u_x u_y$ 、 $m_{14}^{(eq)} = u_x u_z$ 、 $m_{15}^{(eq)} = u_x u_z$ 、 $m_{16}^{(eq)} = m_{17}^{(eq)} = m_{18}^{(eq)} = 0$ ，其中 w_ε 、 $w_{\varepsilon j}$ 和 w_{xx} 是自由参数。为了最优化的稳定性计算，可令 $w_\varepsilon = 0$ 、 $w_{\varepsilon j} = -475/63$ 、 $w_{xx} = 0$ 。

以下的平衡分布函数可用来初始化分布函数：

$$f_i^{(eq)} = W_i \left(\rho_f + \rho_{f0} \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \rho_{f0} \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \rho_{f0} \frac{u^2}{2c_s^2} \right) \quad (10)$$

其中权重因子 $W_i = 1/3$ ($i = 0$)， $W_i = 1/18$ ($i = 1, \dots, 6$)， $W_i = 1/36$ ($i = 7, \dots, 18$)。

为了便于计算，容器的底部壁面和侧壁都设定位于网格的格线中心处，采用经典的中点反弹格式实现无滑移边界条件；顶部自由表面也位于格线中心处，采用镜面反射格式实现自由边界条件。运动颗粒与流体的接触面采用二次插值格式施加无滑移边界条件^[20-21]。当颗粒靠近壁面且其间隙中只有两个网格时，可采用线性插值格式^[20]。内插值反弹格式可产生相对光滑的球体表面，而非像中点反弹格式产生阶梯形状的表面，同时它还可减小由于颗粒相对固定格点运动而在颗粒表面产生的非物理振荡。当颗粒与壁面的间隙小至一个网格时，采用标准反弹格式来计算未知的分布函数。在本文的模拟中，流体格点在空间中固定，固态球形颗粒相对于格点运动。前一时间步处于颗粒内部的固体格点可能由于颗粒运动而变成流体格点，这些新的流体格点的分布函数必须重新构造。在 D3Q19 模型中，新的流体格点的分布函数的 19 个分量可

通过平衡态分布函数加上非平衡部分修正^[22]重构,平衡态分布函数基于颗粒边界的运动速度 \mathbf{u}_w 和附近所有流体点的平均密度 $\bar{\rho}_f$ 并采用方程(10)计算得到,非平衡部分可从附近的拥有使得 $\mathbf{e}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 最大的离散速度 \mathbf{e}_i 的流体格点处得到,其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 是运动边界中固体格点变成流体格点所穿过的点处的外法线矢量。

在本文研究中,设定了颗粒运动的平移速度与角速度之后,流体作用于颗粒的力和力矩可采用冲量定理计算。在传统计算流体力学(CFD)方法中,流体速度的空间差分计算得到局部应力,再对颗粒表面的局部应力积分得到颗粒所受水动力。格子 Boltzmann 方法的优点是颗粒所受力和力矩基于作用于流体格点的冲量和牛顿第三定律直接计算得到。作用于固体颗粒的力 \mathbf{F}_{hy} 是从 t 到 $t + \delta_t$ 时刻流体与颗粒表面边界所有节点作用所损失的动量总和;力矩 \mathbf{T}_{hy} 则是颗粒表面边界各节点相对于颗粒中心的局部位置矢量与损失的流体动量的点乘的总和,

$$\mathbf{F}_{hy}^{t+0.5\delta_t} \delta_t = \sum_{\text{bn}} \left[\hat{f}_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_i - f_{\bar{i}}(\mathbf{x}, t + \delta_t) \mathbf{e}_{\bar{i}} \right] = \sum_{\text{bn}} \left[\hat{f}_i(\mathbf{x}, t) + f_{\bar{i}}(\mathbf{x}, t + \delta_t) \right] \mathbf{e}_i, \quad (11)$$

$$\mathbf{T}_{hy}^{t+0.5\delta_t} \delta_t = \sum_{\text{bn}} \hat{\mathbf{n}}_i \times \left[\hat{f}_i(\mathbf{x}, t) + f_{\bar{i}}(\mathbf{x}, t + \delta_t) \right] \mathbf{e}_i, \quad (12)$$

其中“bn”表示所有边界节点的总和, $\mathbf{e}_{\bar{i}} = -\mathbf{e}_i$, $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{S} \cdot [\mathbf{m} - \mathbf{m}^{(eq)}]$ 表示碰撞后的分布函数, $f_{\bar{i}}(\mathbf{x}, t + \delta_t)$ 表示时间 $t + \delta_t$ 、位置 \mathbf{x} 的流体与颗粒表面发生反弹碰撞后的分布函数, $\hat{\mathbf{n}}_i$ 表示颗粒中心与位置 \mathbf{x} 的流体点的连线与颗粒表面的交叉点处的外法线矢量。

在获得作用于颗粒上的力和力矩后,我们即可分别更新颗粒的平移速度 $\mathbf{V}_p^{t+\delta_t}$ 、角速度 $\boldsymbol{\Omega}_p^{t+\delta_t}$ 、位移 $\mathbf{Y}_p^{t+\delta_t}$ 以及角位移 $\boldsymbol{\Theta}_p^{t+\delta_t}$,

$$\mathbf{V}_p^{t+\delta_t} = \mathbf{V}_p^t + \frac{1}{2M_p} \left[\mathbf{F}_{hy}^{t+\delta_t/2} + \mathbf{F}_{hy}^{t-\delta_t/2} \right] \delta_t + \mathbf{g} \left(1 - \frac{\rho_{f0}}{\rho_p} \right) \delta_t, \quad (13)$$

$$\boldsymbol{\Omega}_p^{t+\delta_t} = \boldsymbol{\Omega}_p^t + \frac{1}{2I_p} \left[\mathbf{T}_{hy}^{t+\delta_t/2} + \mathbf{T}_{hy}^{t-\delta_t/2} \right] \delta_t, \quad (14)$$

$$\mathbf{Y}_p^{t+\delta_t} = \mathbf{Y}_p^t + 0.5(\mathbf{V}_p^t + \mathbf{V}_p^{t+\delta_t}) \delta_t, \quad (15)$$

$$\boldsymbol{\Theta}_p^{t+\delta_t} = \boldsymbol{\Theta}_p^t + 0.5(\boldsymbol{\Omega}_p^t + \boldsymbol{\Omega}_p^{t+\delta_t}) \delta_t, \quad (16)$$

其中 M_p 表示颗粒质量, I_p 表示颗粒的惯性矩, \mathbf{g} 为重力加速度, ρ_{f0} 与 ρ_p 分别为流体和颗粒的密度。对于本文中颗粒的四种基本运动, \mathbf{V}_p^t 、 $\mathbf{V}_p^{t+\delta_t} = \mathbf{V}_p^t + \mathbf{a}_{p,t} \delta_t$ 、 $\boldsymbol{\Omega}_p^t$ 、 $\boldsymbol{\Omega}_p^{t+\delta_t} = \boldsymbol{\Omega}_p^t + \mathbf{a}_{p,r} \delta_t$ 分别为 t 和 $t + \delta_t$ 时刻颗粒的平移速度和角速度, $\mathbf{a}_{p,t}$ 和 $\mathbf{a}_{p,r}$ 为设定的颗粒平移加速度与角加速度。加速至设定速度值后,颗粒将会匀速平移或旋转以获得统计稳定的受力和力矩。

1.3 参数设置

为了保证数值稳定性,我们需要估计流体速度的最大值以使得马赫数 $\max\{u_B\} / c_s \leq 0.15$, 这里 u_B 表示格子 Boltzmann 空间的颗粒设定速度。

在 Stokes 流动中颗粒所受阻力的表达式为 $F = -6\pi\mu Ru$, 但当颗粒雷诺数变得足够大时,阻力公式变成 $F = -6\pi\mu R u f(\text{Re}_p)$, $f(\text{Re}_p) = 1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687}$ ^[23], 其中 u 为颗粒与流体的相对速度,由于模型中流场的平均速度趋于零,则 u 即为颗粒速度。令颗粒所受阻力、重力与浮力满足平衡方程

$$6\pi\mu R u f(\text{Re}_p) = \frac{4}{3}\pi R^3(\rho_p - \rho_f)g, \quad (17)$$

其中颗粒密度 $\rho_p=1500\text{kg/m}^3$ ，颗粒速度 u 可以通过牛顿迭代法求得。

根据量纲分析，物理空间与格子 Boltzmann 空间的参数的变换公式为

$$\frac{T_p}{T_B} = \frac{d_p}{d_B} \cdot \frac{u_B}{u_p}, \quad \frac{v_p}{v_B} = \frac{d_p}{d_B} \cdot \frac{u_p}{u_B}, \quad (18)$$

其中下标“ p ”和“ B ”分别表示物理尺度与 Boltzmann 尺度， $d_p=6\text{mm}$ ， $v_p=\mu/\rho_f$ ， u_p 是方程(17)中的速度， u_B 和 $d_B=2\cdot r_B=50$ 分别是 Boltzmann 空间的颗粒设定速度与直径。另外颗粒旋转速度为 $\Omega=u/R$ ，其中 u 是旋转颗粒表面的最大线速度。改变流体的粘度与密度，我们可以得到多组物理参数与对应的颗粒雷诺数，如表 2 所示。将这些参数分别代入程序中进行数值模拟，将计算出不同颗粒雷诺数对应的颗粒受力与力矩的系数，然后即可对数值结果进行处理和分析。

表 2 不同的颗粒雷诺数与对应的物理尺度以及 Boltzmann 尺度的参数

Case	$\rho_f(\text{kg/m}^3)$	$\mu(\times 10^{-3}\text{N}\cdot\text{s/m}^2)$	v_B	$u_p(\text{m/s})$	r_B	u_B	St	Re_p
Case 1	967	290	0.38551480	0.032413	25	0.005	0.112	0.6485
Case 2	965	212	0.21577852	0.042422	25	0.005	0.200	1.159
Case 3	962	113	0.14221879	0.068828	25	0.01	0.609	3.516
Case 4	960	58	0.09645247	0.104398	25	0.02	1.8	10.368
Case 5	950	28	0.03278679	0.149825	25	0.02	5.351	30.500
Case 6	930	15	0.02077498	0.194092	25	0.03	12.939	72.202
Case 7	925	9	0.01421272	0.228193	25	0.04	25.355	140.719
Case 8	915	6	0.00846908	0.258091	25	0.04	43.015	236.153
Case 9	910	5	0.00841330	0.272114	25	0.05	54.423	297.148
Case10	900	4.2	0.00675197	0.287982	25	0.05	68.567	370.263

2 结果与分析

在计算颗粒受力和力矩之前，首先需要确定合适的计算区域尺寸，既要节省计算资源，又要保证计算区域尺寸对数值结果的准确性几乎不产生影响。因此我们保持其他参数不变而只改变计算区域尺寸 L_x 、 L_y 和 L_z ，将颗粒受力和力矩系数的数值结果进行比较，以确定颗粒的四种基本运动模型各自所需的计算区域尺寸。随后需要检验网格的无关性，为了得到独立于网格尺寸的数值结果，我们将直径 $d_p=6\text{mm}$ 的颗粒分别划分为 40、50、70 和 100 个网格，比较不同网格分辨率下的结果，确定合适的网格分辨率。随后，我们改变颗粒与壁面的无量纲间距 ε 与颗粒雷诺数 Re_p ，开始计算有限颗粒雷诺数下颗粒靠近壁面运动的受力和力矩系数。

2.1 颗粒沿 y 轴朝向壁面运动

首先模拟的是球形颗粒在静止流体中沿 y 轴朝着底部壁面运动，如图 1(a)所示。对于这种运动情况，我们可计算出不同的 ε 和 Re_p 对应的颗粒受力系数，记为 A_{11}^N 。通过数据拟合，得出了 ε 和 Re_p 表示的系数 A_{11}^N 的模型公式(19)，式(20)由式(19)简单推导得到，其中上标“ T ”表示表格 1 中的理论表达式。图 3(a)展示了不

同颗粒雷诺数下系数 A_{11} 随 ε 变化的曲线, 对于每一条曲线, 系数 A_{11} 的绝对值都随着 ε 的增大而减小。当 $Re_p \rightarrow 0$ 时, 修正公式与表 1 中的理论表达式的曲线保持一致。对于一个固定的 ε , 系数 A_{11} 的绝对值随着 Re_p 单调递增。图 3(b) 则展示了采用无量纲距离项进行归一化的系数 A_{11}^* 与 Re_p 的关系, 不同 Re_p 对应的 A_{11}^* 结果都落在斜率为 1 的直线上, 验证了数据拟合的准确性。

$$A_{11} = A_{11}^T + (6.07 \times 10^{-4} + 0.0351 \cdot \ln \varepsilon) \cdot Re_p, \quad Re_p \leq 370, \quad (19)$$

$$A_{11}^* = \frac{A_{11} - A_{11}^T}{6.07 \times 10^{-4} + 0.0351 \cdot \ln \varepsilon} = Re_p. \quad (20)$$

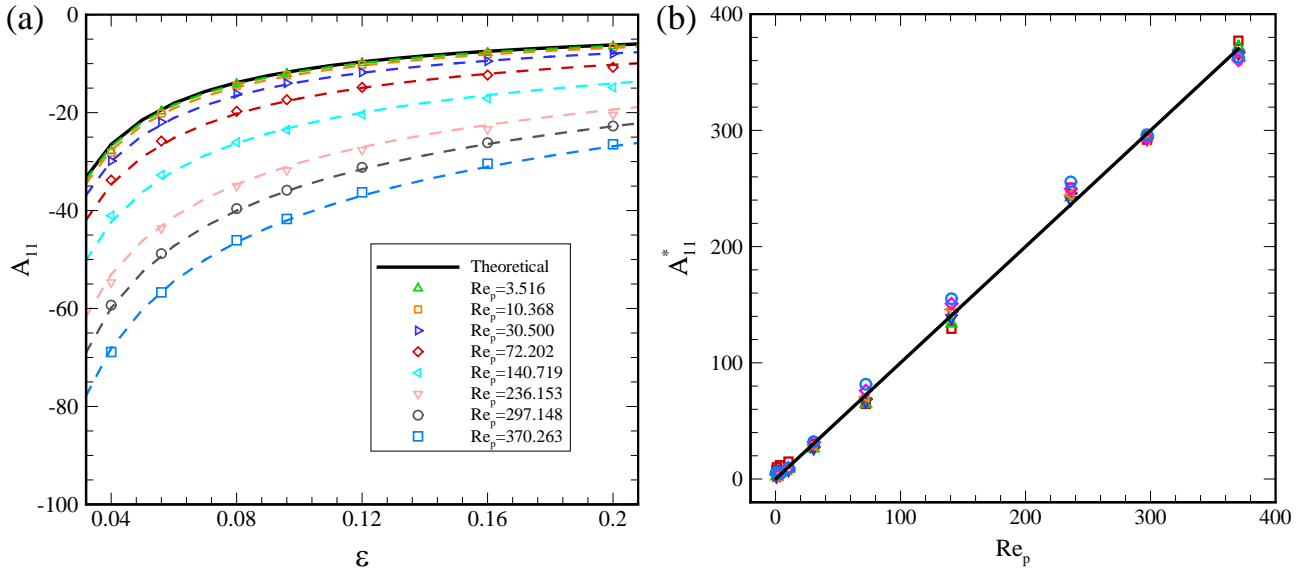


图 3 (a) 不同颗粒雷诺数下系数 A_{11} 随 ε 变化的曲线, 其中实线表示低颗粒雷诺数的理论表达式曲线, 虚线与符号分别表示不同颗粒雷诺数下的修正公式(19)的结果与数值结果。(b) 采用无量纲距离进行归一化的系数 A_{11}^* 的结果, 实线的斜率为 1, 符号表示(a)中的数值结果。

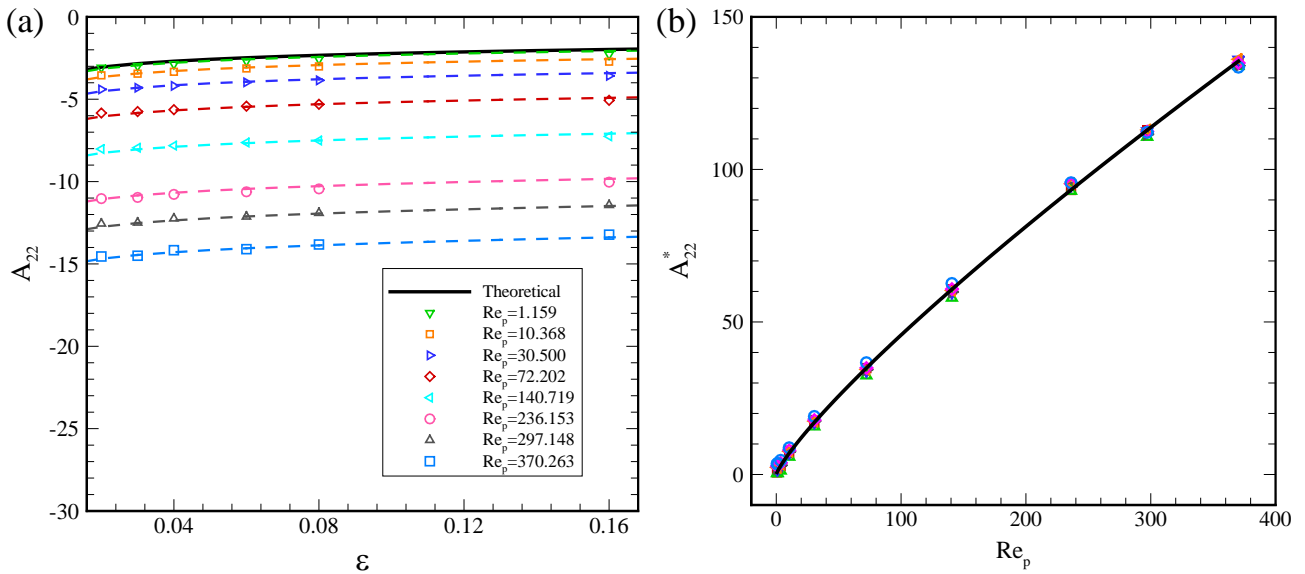


图 4 (a) 不同颗粒雷诺数下系数 A_{22} 随 ε 变化的曲线, 其中实线表示低颗粒雷诺数的理论表达式曲线, 虚线与符号分别表示不同颗粒雷诺数下的修正公式(21)的结果与数值结果。(b) 采用无量纲距离进行归一化的系数 A_{22}^* 的结果, 实线表示 A_{22}^* 与 Re_p 的函数关系, 符号表示(a)中的数值结果。

2.2 颗粒沿 x 轴平行于壁面运动

对于颗粒的其他三种基本运动模型，我们需要事先设定颗粒与壁面的不同间距。系数的数值结果分别记作 A_{22}^N 、 B_{23}^N 、 D_{33}^N 和 D_{11}^N 。对于不同的颗粒雷诺数和无量纲间距，我们可以得到稳定状态下颗粒的受力和力矩模型。当颗粒沿 x 轴平行于壁面运动时，我们得到了 ε 和 Re_p 表示的系数 A_{22} 的修正公式(21)，式(22)由式(21)变换得到，其结果如图 4 所示。在图 4(a)中，颗粒雷诺数极小时 A_{22} 的修正公式曲线与表 1 中的理论表达式的曲线一致。对于一个固定的 ε ，系数 A_{22} 的绝对值随着 Re_p 单调递增。与图 3(b)类似，图 4(b)中不同 Re_p 对应的 A_{22}^* 数值结果都落在实线附近，验证了公式(21)能够准确捕捉颗粒受力的雷诺数效应。

$$A_{22} = A_{22}^T + (-0.0861 + 0.0118 \cdot \varepsilon) \cdot Re_p^{0.83}, \quad Re_p \leq 370, \quad (21)$$

$$A_{22}^* = \frac{A_{22} - A_{22}^T}{-0.0861 + 0.0118 \cdot \varepsilon} = Re_p^{0.83}. \quad (22)$$

2.3 颗粒绕 z 轴旋转

对于颗粒绕平行于壁面的 z 轴旋转，我们同时得到系数 B_{23} 和 D_{33} 的修正公式(23)和(25)。由图 5(a)和 6(a)可见，当 $Re_p \rightarrow 0$ 时修正公式曲线与表 1 中的理论表达式曲线趋向重合。 ε 的值固定时，图 6(a)中系数 D_{33} 的绝对值随颗粒雷诺数单调递增，而图 5(a)中系数 B_{23} 随雷诺数增大由正变负，即作用于颗粒的 x 方向上的力发生了变向，原因是当 Re_p 与 ε 较小时粘性效应较强，壁面的存在阻碍颗粒旋转产生了 x 轴负方向的力，而随着 ε 增大粘性效应变弱，另外 Re_p 增大时颗粒与壁面的间隙中的流体压力主导了颗粒表面所受的粘性应力，从而使得颗粒受力发生变向。图 5(b)和 6(b)中不同 Re_p 对应的归一化系数数值结果都落在实线附近，验证了数据拟合的准确性。

$$B_{23} = B_{23}^T + (-0.00246 - 3.69 \times 10^{-4} \cdot \varepsilon^{-1/2}) \cdot Re_\Omega^{0.83}, \quad Re_\Omega \leq 236, \quad (23)$$

$$B_{23}^* = \frac{B_{23} - B_{23}^T}{-0.00246 - 3.69 \times 10^{-4} \cdot \varepsilon^{-1/2}} = Re_\Omega^{0.83}. \quad (24)$$

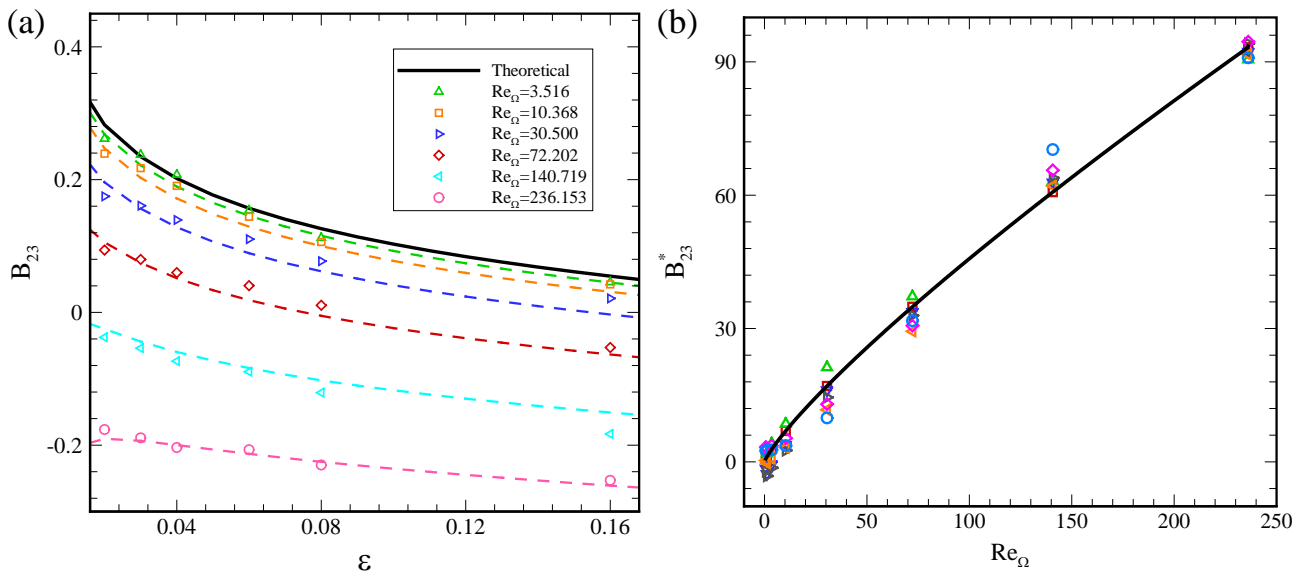


图 5 (a)不同旋转颗粒雷诺数下系数 B_{23} 随 ε 变化的曲线，其中实线表示低颗粒雷诺数的理论表达式曲线，虚线与符号分别表示不同颗粒雷诺数下的修正公式(23)的结果与数值结果。(b)采用无量纲距离进行归一化的系数 B_{23}^* 的结果，实线表示 B_{23}^* 与 Re_Ω 的函数关系，符号表示(a)中的数值结果。

$$D_{33} = D_{33}^T - \left(0.02195 \cdot e^{-\varepsilon/0.00924} + 0.00254 + 0.00423 \cdot \varepsilon \right) \cdot \text{Re}_\Omega, \quad \text{Re}_\Omega \leq 370, \quad (25)$$

$$D_{33}^* = \frac{D_{33} - D_{33}^T}{-\left(0.02195 \cdot e^{-\varepsilon/0.00924} + 0.00254 + 0.00423 \cdot \varepsilon \right)} = \text{Re}_\Omega. \quad (26)$$

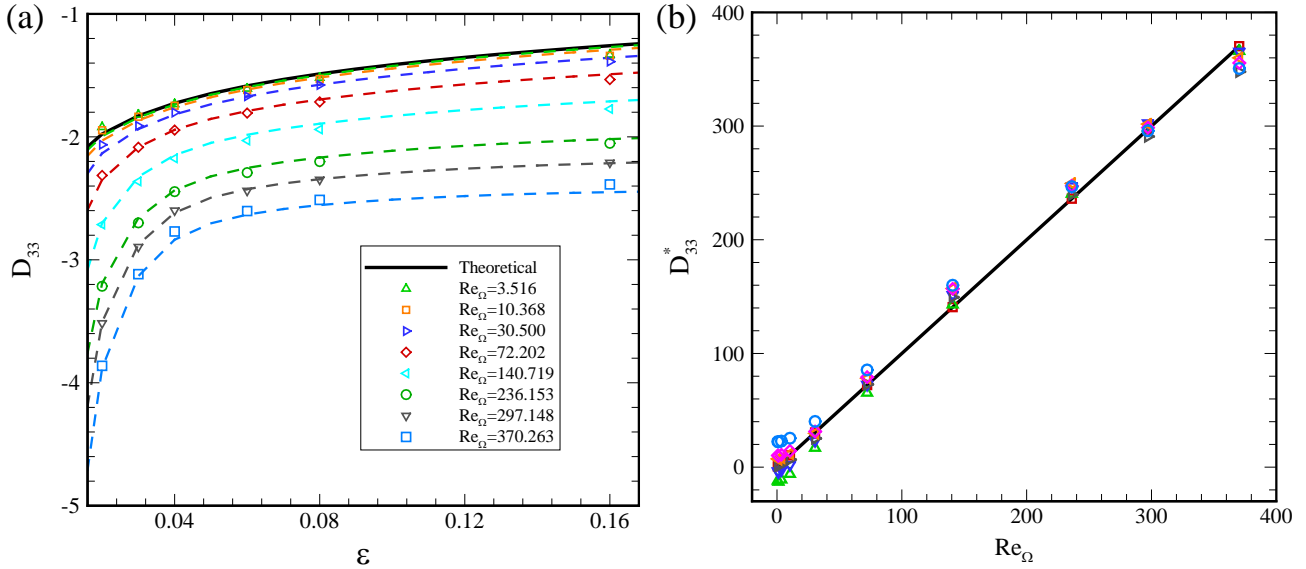


图 6 (a)不同旋转颗粒雷诺数下系数 D_{33} 随 ε 变化的曲线，其中实线表示低颗粒雷诺数的理论表达式曲线，虚线与符号分别表示不同颗粒雷诺数下的修正公式(25)的结果与数值结果。(b)采用无量纲距离进行归一化的系数 D_{33}^* 的结果，实线表示 D_{33}^* 与 Re_Ω 的函数关系，斜率为 1，符号表示(a)中的数值结果。

2.4 颗粒绕 y 轴旋转

对于颗粒绕垂直于壁面的 y 轴旋转，首先需要将本文采用格子 Boltzmann 方法计算得到的低颗粒旋转雷诺数下 D_{11} 的结果与 Jeffery^[18]的相应理论结果进行比较。图 7 展示了 $\text{Re}_\Omega=0.6485$ 时系数 D_{11} 的数值结果与 Jeffery^[18]的理论结果的比较，二者基本一致，我们采用格子 Boltzmann 方法验证了 Jeffery 的结果。对 Jeffery 的结果进行数据拟合，作为系数 D_{11} 的理论表达式：

$$D_{11}^T = -1.277 + 0.285 \cdot \varepsilon^{0.25} \quad (27)$$

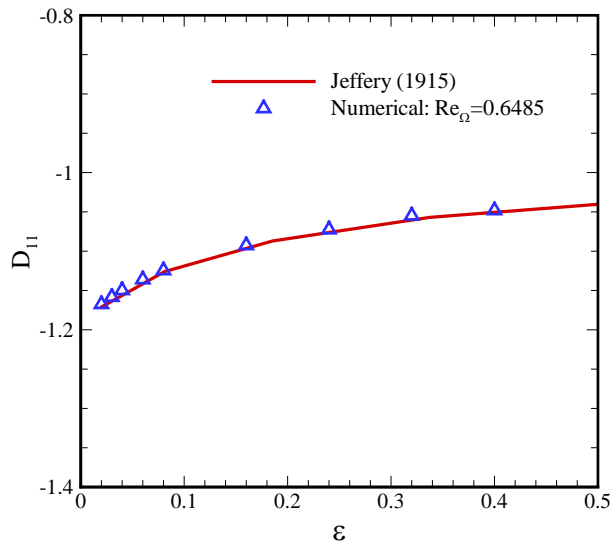


图 7 $\text{Re}_\Omega=0.6485$ 时系数 D_{11} 的数值结果与 Jeffery^[18]获得的理论结果的比较

对于不同的 Re_Ω 和 ε ，我们计算得到对应的系数 D_{11} ，然后拟合得到其修正公式(28)，式(29)由式(28)变换得到。图 8(a)展示了不同颗粒雷诺数下系数 D_{11} 随 ε 变化的曲线，平缓的 $D_{11}-\varepsilon$ 曲线说明颗粒与壁面的间距对颗粒所受力矩影响较小，而当 ε 固定时系数 D_{11} 的绝对值随颗粒旋转雷诺数单调递增。图 8(b)则展示了采用无量纲距离项进行归一化的系数 D_{11}^* 与 Re_Ω 的关系，不同 Re_Ω 对应的 D_{11}^* 值都落在斜率为 1 的直线上，验证了数据拟合的准确性。

$$D_{11} = D_{11}^T + (-0.00329 - 0.00141 \cdot \varepsilon) \cdot Re_\Omega, \quad Re_\Omega \leq 370, \quad (28)$$

$$D_{11}^* = \frac{D_{11} - D_{11}^T}{-0.00329 - 0.00141 \cdot \varepsilon} = Re_\Omega. \quad (29)$$

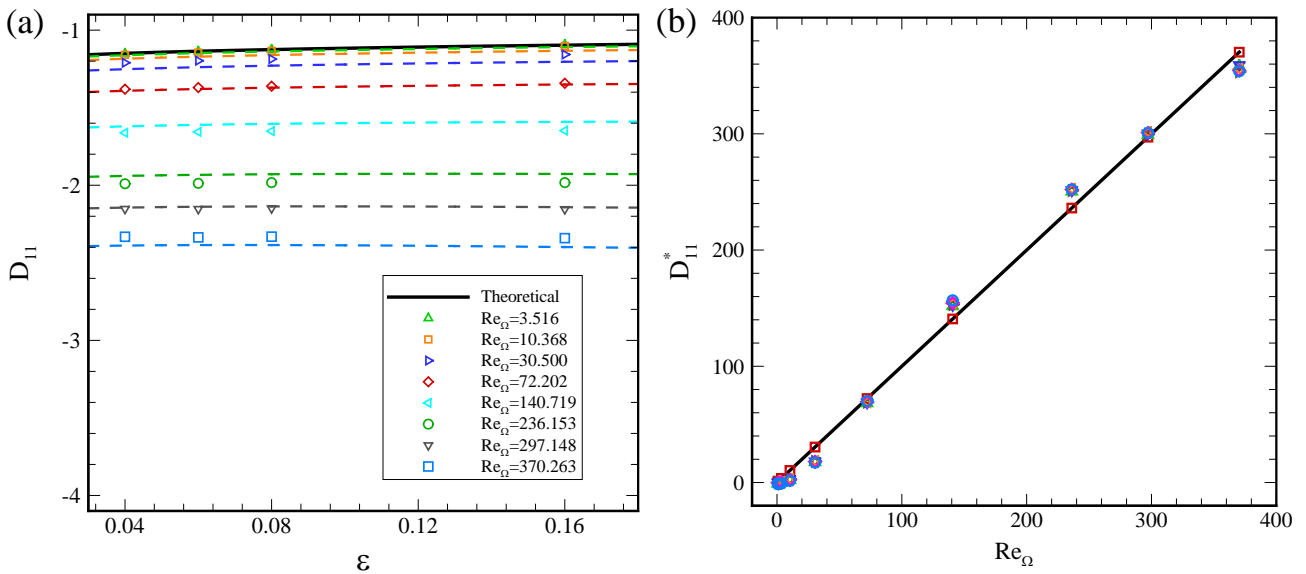


图 8 (a)不同颗粒雷诺数下系数 D_{11} 随 ε 变化的曲线，其中实线表示 Jeffery^[18]获得的理论表达式曲线，虚线与符号分别表示不同颗粒雷诺数下的修正公式(28)的结果与数值结果。(b)采用无量纲距离进行归一化的系数 D_{11}^* 的结果，实线的斜率为 1，符号表示(a)中的数值结果。

本文通过对颗粒靠近壁面的四种基本运动情况进行数值模拟，得到了有限颗粒雷诺数下颗粒的受力和力矩模型。随后，我们将颗粒的几种单向基本运动组合成一般运动情况，计算此时颗粒的受力和力矩的无量纲系数，其结果与模型公式算出的结果基本保持一致，验证了颗粒的受力和力矩模型在颗粒的一般运动中的适用性。

3 结论与展望

本文提出了有限颗粒雷诺数下在静止流体中靠近壁面运动的颗粒的受力和力矩模型。传统的润滑力模型是基于低颗粒雷诺数 Stokes 假设发展出的，不适用于有限颗粒雷诺数的情况，需要进行修正。我们采用格子 Boltzmann 方法的多松弛模型来模拟有限尺寸的球形颗粒靠近壁面运动引发的流动，颗粒直径被划分为 50 个网格，设定不同的颗粒雷诺数以及颗粒与壁面的间距，可以计算出颗粒的四种基本运动模型对应的颗粒受力与力矩。

根据公式(3)将颗粒的受力与力矩无量纲化后进行数据拟合，我们得到了 5 个系数 A_{11} 、 A_{22} 、 B_{23} 、 D_{33} 和 D_{11} 的修正公式，并画出了它们随 ε 和 Re_p 或 Re_Ω 变化的图像。当颗粒雷诺数趋近于零时，所有系数的修正公式与理论表达式的曲线都保持一致，从而验证了理论表达式的正确性。颗粒雷诺数对颗粒受力与力矩

的变化有重要影响, 当 ε 给定时, 系数 A_{11} 、 A_{22} 、 D_{33} 和 D_{11} 的绝对值随颗粒雷诺数单调递增, 系数 B_{23} 的值随颗粒雷诺数单调递减且存在由正到负的变化, 变化的原因是颗粒与壁面的间隙里的流体压力对颗粒受力的贡献随着颗粒雷诺数增大而增大, 从而导致颗粒受力的变向。

进一步地, 我们将颗粒的四种基本运动组合成一般运动, 计算颗粒受力与力矩的系数并与提出的模型进行比较, 说明了模型在颗粒的一般运动中的适用性。另外我们还将颗粒的受力和力矩模型与参考文献的相关结果进行了对比, 保持一致的比较结果验证了模型的正确性。当颗粒与壁面的距离极小以至于间隙中的流体无法解析时, 我们提出的颗粒受力和力矩模型可以被用作颗粒与壁面相互作用的亚格子模型。在未来的工作中, 我们可以进一步研究两个距离很小的球形颗粒相对运动时有限颗粒雷诺数对颗粒受力和力矩的影响, 并对传统的润滑力模型进行修正。

致谢

本项目得到国家自然科学基金 (No. 11472277, 11232011)、中科院战略性先导科技专项(XDB22040104)、中科院前沿科学重点项目(QYZDJ-SSW-SYS002)、国防基础科研科学挑战专题项目(TZ2016001)和“973”项目(2013CB834100)。

参考文献

- 1 Lafín Santiago, Sommerfeld Martin. Numerical calculation of pneumatic conveying in horizontal channels and pipes: Detailed analysis of conveying behaviour. *International Journal of Multiphase Flow*, 2012, 369: 105-120
- 2 Lu Huang, Chen Juhui, Liu Guodong, et al. Simulated second-order moments of clusters and dispersed particles in riser. *Chemical Engineering Science*, 2013, 101: 800-812
- 3 Aman G Kidanemariam, Clemens Chan-Braun, Todor Doychev, et al. Direct numerical simulation of horizontal open channel flow with finite-size, heavy particles at low solid volume fraction. *New Journal of Physics*, 2013, 15: 025031
- 4 Shao Xueming, Wu Tenghu, Yu Zhaosheng. Fully resolved numerical simulation of particle-laden turbulent flow in a horizontal channel at a low Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 2012, 693: 319-344
- 5 Wang Limin, Zhang Bo, Wang Xiaowei, et al. Lattice Boltzmann based discrete simulation for gas–solid fluidization. *Chemical Engineering Science*, 2013, 101: 228-239
- 6 Uhlmann, M, Doychev, T. Sedimentation of a dilute suspension of rigid spheres at intermediate Galileo numbers: the effect of clustering upon the particle motion. *Journal of Fluid Mechanics*, 2014, 752: 310-348
- 7 Wang Zeli, Fan Jianren, Luo Kun. Combined multi-direct forcing and immersed boundary method for simulating flows with moving particles. *International Journal of Multiphase Flow*, 2008, 34: 283-302
- 8 Ozdemir, CE, HSU, TJ, Balachandar, S. A numerical investigation of fine particle laden flow in an oscillatory channel: the role of particle-induced density stratification. *Journal of Fluid Mechanics*, 2010, 665: 1-45
- 9 Nguyen, NQ, Ladd, AJC. Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions. *Physical Review E*, 2002, 66: 046708
- 10 Dance, SL, Maxey, MR. Incorporation of lubrication effects into the force-coupling method for particulate two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 2003, 189: 212-238
- 11 Jeffrey, DJ. Low-Reynolds-number flow between converging spheres. *Mathematika*, 1982, 29: 58-66
- 12 Cooley, MDA, O'Neill, ME. On the slow motion generated in a viscous fluid by the approach of a sphere to a plane wall or stationary sphere. *Mathematika*, 1969, 16: 37-49

- 13 Jeffrey, DJ, Onishi, Y. The forces and couples acting on two nearly touching spheres in low-Reynolds-number flow. *Journal of Applied Mathematics and Physics*, 1984, 35: 634-641
- 14 O'Neill, ME, Majumdar, SR. Asymmetrical slow viscous fluid motions caused by the translation or rotation of two spheres. Part I: the determination of exact solutions for any values of the ratio of the radii and separation parameters. *Journal of Applied Mathematics and Physics*, 1970, 21: 164-179
- 15 Cox, R, Brenner, H. The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface: part ii. small gaps widths, including inertial effects. *Chemical Engineering Science*, 1967, 22: 1753-1777
- 16 Liu Qianlong, Prosperetti Andrea. Wall effects on a rotating sphere. *Journal of Fluid Mechanics*, 2010, 657: 1-21
- 17 Lin San-Yih, Lin Jeng-Feng. Numerical investigation of lubrication force on a spherical particle moving to a plane wall at finite Reynolds numbers. *International Journal of Multiphase Flow*, 2013, 53: 40-53
- 18 Jeffery, GB. On the steady rotation of a solid of revolution in a viscous fluid. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 1915, s2_14(1): 327-338
- 19 d'Humieres, D, Ginzburg, I, Krafczyk, M, et al. Multiple-relaxation time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Philosophical Transactions of The Royal Society A*, 2002, 360: 437-451
- 20 Bouzidi, M, Firdaouss, M, Lallemand, P. Momentum transfer of a Boltzmann- lattice fluid with boundaries. *Physics of Fluids*, 2001, 13(11): 3452-3459
- 21 Lallemand, P, Luo, LS. Lattice Boltzmann method for moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 2003, 184: 406-421
- 22 Caiazzo, A. Analysis of lattice Boltzmann nodes initialisation in moving boundary problems. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 2008, 8: 3-10
- 23 Clift, R, Grace, JR, Weber, ME. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978