

# 三维矩形槽道中颗粒沉降的数值模拟\*

刘马林

(清华大学 核能与新能源技术研究院, 北京 100084)

**摘要:** 采用三维格子 Boltzmann 方法对矩形通道中的颗粒沉降进行了模拟研究. 单颗粒沉降的模拟结果表明, 颗粒最终的稳定沉降位置沿槽道中心线, 不受颗粒初始位置和直径的影响. 颗粒和壁面之间的两体相互效应可以用无因次沉降速度定量描述, 无因次沉降速度的模拟结果和实验结果定量上吻合一致. 模拟分析了双颗粒沉降的 DKT(drafting, kissing and tumbling)过程, 探讨了颗粒直径比以及壁面效应对 DKT 过程的影响. 模拟发现当颗粒直径相同时, 双颗粒的沉降过程为周期性的 DKT 过程, 从而形成双螺旋形式的沉降轨迹, 此螺旋沉降轨迹的频率和振幅受颗粒初始位置影响. 从模拟结果中还得到颗粒群的最终稳定构型, 并进行了构型对比分析. 最后对包含 49 个颗粒的颗粒群沉降行为进行了模拟, 说明多体相互作用在对称性的情况下可以简化.

**关键词:** 颗粒沉降; 格子 Boltzmann 方法; 颗粒-颗粒相互作用

**中图分类号:** O311.2; O313.7      **文献标志码:** A

**DOI:** 10.3879/j.issn.1000-0887.2011.09.006

## 引 言

颗粒沉降是自然界中常见的现象, 在实际工业中也有很多应用, 例如颗粒流化、气体除尘等, 同时颗粒沉降也是一种根据颗粒的尺寸和密度不同进行颗粒分离的有效方法. 著名的“巴西果(Brazil-Nut)效应”现象就可以看作是粒子在一个振动颗粒床中的沉降行为, 最近对该现象的研究引起了许多学者的关注<sup>[1-2]</sup>. 在较低颗粒体积分数的颗粒流中, 单考虑两颗粒相互作用就足以描述流动体系, 在较高颗粒浓度时, 需要考虑多颗粒相互作用才能准确描述颗粒流动体系. 然而, 相关研究已经指出, 双颗粒相互作用是颗粒流动中的基本机制, 在颗粒流实际应用中起决定作用. 当两个颗粒在充满 Newton 流体的槽道中进行沉降时, 它们会经历拖拽(drafting)、接触(kissing)、翻转(tumbling)3个步骤, 即所谓双颗粒沉降的 DKT 过程<sup>[3]</sup>. 对双颗粒的流体作用的理论研究也有相关研究和综述报道<sup>[4]</sup>, 最近沉降颗粒的构型演变也有相关理论研究报道<sup>[5]</sup>. 可以看出, 颗粒流以及颗粒沉降过程是一个很有前景的研究领域, 无论从理论到应用上都吸引了许多研究者的关注.

文献[6]中报道了使用二维格子 Boltzmann 方法(lattice Boltzmann method, LBM)模拟计算圆柱体在充满静止液体的二维槽道中的沉降动力学行为, 在此研究中发现了二维颗粒沉降的

\* 收稿日期: 2010-11-24; 修订日期: 2011-06-14

基金项目: 国家科技重大专项基金资助项目(ZX06901)

作者简介: 刘马林(1983—), 男, 安徽人, 助理研究员, 博士(Tel: +86-10-89796092; E-mail: liumalin@tsinghua.edu.cn).

倍周期分岔和混沌状态. 另外三维 Couette 流中中性球形颗粒的转动行为, 文献[7]中也有相关研究, 但是该文献中并没有给出三维的颗粒沉降过程. 还有文献[8-9]基于二维 IB-LBM (immersed boundary-lattice Boltzmann method) 对两个二维圆形颗粒在槽道中的沉降行为进行了模拟研究, 他们发现沉降过程中, 领先的颗粒的尾部会产生一个低压漩涡, 尾随颗粒会被此尾涡捕获, 从而沉降速度快于领先的颗粒<sup>[9]</sup>. 为了更深入地理解颗粒沉降的基本过程, 本文采用三维格子 Boltzmann 方法对颗粒在矩形槽道中的沉降运动行为进行了不同条件下的模拟研究. 与其他模拟方法, 例如直接数值模拟 (direct numerical simulation, DNS)<sup>[10]</sup>, 带移动非结构网格的有限元法 (finite element method, FEM)<sup>[11]</sup>, 分散式 Lagrange 乘子/虚拟区域方法 (distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method)<sup>[12]</sup> 相比较, 格子 Boltzmann 方法具有原理和编程简单, 与微观物理本质联系更密切, 计算量与颗粒数量线性相关等特点<sup>[13]</sup>. 此方法中, 流体采用格子 Boltzmann 方法来描述, 流体-颗粒相互作用采用动量交换方法进行显式处理, 颗粒运动采用 Newton 第二定律来约束控制, 颗粒-颗粒相互作用采用壁面润滑力进行描述. 颗粒流模拟中边界的处理方法至关重要, 文献[8, 14-15]中对此都有很多改进和研究, 致力于更准确的计算颗粒-流体相互作用. 总之, 格子 Boltzmann 方法是在颗粒流模拟计算领域中非常有前景的方法.

本文中首先对单颗粒在三维矩形槽道中的沉降行为进行了模拟, 并和文献中报道的实验数据进行了定量的比较. 然后用三维格子 Boltzmann 方法对双颗粒沉降过程的相互作用进行了模拟研究, 重现了 DKT 过程, 并探讨了双颗粒直径比对 DKT 过程的影响, 详细讨论了初始位置、壁面效应、直径比等条件的影响. 并对等径双颗粒的周期性沉降和螺旋形轨迹进行了模拟分析, 最后本文对多颗粒群沉降行为进行了模拟, 以对多体相互作用进行探讨, 模拟发现对称性导致的有趣的规律性沉降过程. 通过本文研究可以看出, 格子 Boltzmann 方法可用于正确模拟颗粒沉降和捕获颗粒的运动行为.

## 1 模拟方法

### 1.1 格子 Boltzmann 方法

格子 Boltzmann 方法是求解微观粒子分布函数  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$  的动力学方程的一种方法, 其中,  $t$  是时间,  $\boldsymbol{\xi}$  是粒子速度, 和粒子空间一起构成相空间  $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ . 宏观量 (例如物质密度  $\rho$  和速度  $\mathbf{u}$ ) 可以通过对微观粒子分布函数  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$  进行积分得到. 原始 Boltzmann 方程形式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = Q, \quad (1)$$

式中  $Q$  是碰撞项. 格子 Boltzmann 方程最广泛的应用形式为上式的离散格式, 如方程(2)所示. 基于 BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) 近似的单松弛因子近似的离散格式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = \frac{1}{\lambda} (f - f^{\text{eq}}), \quad (2)$$

式中,  $f^{\text{eq}}$  是 Maxwell-Boltzmann 平衡分布函数,  $\lambda$  是松弛时间. 当速度空间  $\boldsymbol{\xi}$  进行适当的离散化之后, 方程(2)可以简化成 Boltzmann 方程的一个离散速度模型:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\lambda} (f_i - f_i^{\text{eq}}). \quad (3)$$

方程(3)经过空间  $\mathbf{x}$  和时间  $t$  的再离散化,即可得到:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)], \quad (4)$$

其中,  $\tau = \lambda/\Delta t$ , 为无因次松弛时间,  $\mathbf{c}$  是离散速度矢量. 方程(4) 中的平衡分配函数  $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$  可以通过将 Maxwell-Boltzmann 分布进行 Taylor 级数展开获得,取  $\mathbf{u}$  的二阶近似,可以表达为如下形式:

$$f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho \left[ 1 + \frac{3\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right], \quad (5)$$

其中,  $c = \Delta x/\Delta t$ ,  $\Delta x$  是离散空间的格子常数, 系数  $w_i$  随不同维度  $D$  空间的速度集合( $\mathbf{c}$ ) 而改变. 本文采用的 D3Q19 模型,即三维空间 19 速度模型,系数  $w_i$  分别等于  $1/3$  ( $i=0$ ),  $1/18$  ( $i=1, 2, \dots, 6$ ),  $1/36$  ( $i=7, 8, \dots, 18$ ). 流体粘度定义式为  $(2\tau - 1)c^2\Delta t/6$ , 为简便起见,本文设定  $\Delta x = \Delta t = c = 1$ .

### 1.2 边界条件

Ladd 在文献[13]中对移动边界条件和如何计算固体颗粒的流体作用力进行了深入探讨. 本文采取类似的处理方法,具体而言,即固体颗粒用一组边界表面点进行定义,如图 1 所示<sup>[16]</sup>. 当固体颗粒置于格子空间时,边界表面会与一些格子节点的连线相交,流体粒子会沿着这些相交连线移动,与置于连线中心的固体颗粒近似表面节点相互作用. 通过上述步骤,即得到固体颗粒表面和边界节点的离散化处理. 每一个边界节点的速度  $\mathbf{u}_b$  可由下式确定:

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{U}_p + \boldsymbol{\Omega}_p \times (\mathbf{r}_b - \mathbf{R}), \quad (6)$$

其中,  $\mathbf{U}_p$  是固体颗粒速度,  $\boldsymbol{\Omega}_p$  是颗粒角速度,  $\mathbf{R}$  是颗粒质量中心的坐标,  $\mathbf{r}_b$  是边界节点的坐标. 边界处理在计算颗粒-流体相互作用力时至关重要. 此处采用弹跳-返回 (bounce-back) 规则来描述边界条件. 对于静止的边界节点,粒子分布函数即简化为从来流方向直接反弹回去. 对于移动颗粒的边界节点,粒子分布函数移动通过边界节点,改变的 是与边界节点的速度  $\mathbf{u}_b$  相关的函数,所以在碰撞和漂移步骤后,颗粒边界节点的更新规则如下:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, t + \Delta t) = f_{-i}^*(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, t) + g(\mathbf{u}_b \cdot \mathbf{c}), \quad (7a)$$

$$f_{-i}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}, t) - g(\mathbf{u}_b \cdot \mathbf{c}), \quad (7b)$$

上式中,下标  $-i$  表示  $i$  的反方向. 有上标星号的表示碰撞步骤之后的粒子分布函数. 附加项  $g(\mathbf{u}_b \cdot \mathbf{c})$  是  $\mathbf{u}_b \cdot \mathbf{c}$  的函数<sup>[13]</sup>. 对于移动的颗粒而言,在上述更新步骤中,动量在颗粒节点和流体节点之间进行了传递,通过动量传递过程,固体颗粒的受力和角动量就可以被计算出来,然后颗粒的运动学性质可以通过 Newton 第二定律进行 Euler 向前积分计算得到,并在下一时刻流体-颗粒相互作用之前进行更新.

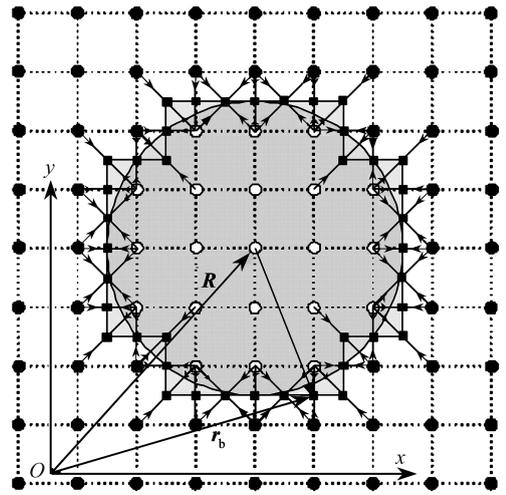


图 1 边界节点(方形)的位置和坐标计算过程示意图  
Fig. 1 Schematic of the location and calculation process of the boundary nodes (square)

### 1.3 颗粒-颗粒相互作用

当两个颗粒位置非常靠近时,颗粒之间的相互作用就不可忽略了,此时壁面润滑力起重要作用.壁面润滑力的产生是由于颗粒之间间隙的液膜厚度变化而引起的,当颗粒相互靠近时显示为斥力,当颗粒之间分开时显示为吸引力.当颗粒之间的缝隙大约为一个格子长度时,壁面润滑力不能通过格子 Boltzmann 方法精确得到,这是因为在模拟计算中颗粒和流体都是离散在网格空间上的原因,其他的模拟方法也会遇到类似的问题.在三维格子 Boltzmann 方法模拟中,壁面润滑力  $\mathbf{F}$  采取如下这种显式计算方法来计算<sup>[17]</sup>:

$$\mathbf{F} = \begin{cases} -6\pi\mu_L \mathbf{U}_{12} \cdot \mathbf{R}_{12} \frac{a_1 a_2}{(a_1 + a_2)^2} \left( \frac{1}{h} - \frac{1}{h_c} \right) \mathbf{R}_{12}, & h < h_c, \\ \mathbf{0}, & h \geq h_c, \end{cases} \quad (8)$$

式中,  $\mu_L$  是流体粘度,  $\mathbf{U}_{12} = \mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2$ ,  $h = |\mathbf{R}_{12}| - (a_1 + a_2)$  代表颗粒间的最近距离,单位矢量  $\mathbf{R}_{12} = \mathbf{R}_{12}/|\mathbf{R}_{12}|$ ,  $h_c$  代表壁面润滑力开始起作用的颗粒间的临界距离,在初始化以后整个模拟计算中是不变量,壁面润滑力的形象描述如图 2 所示.

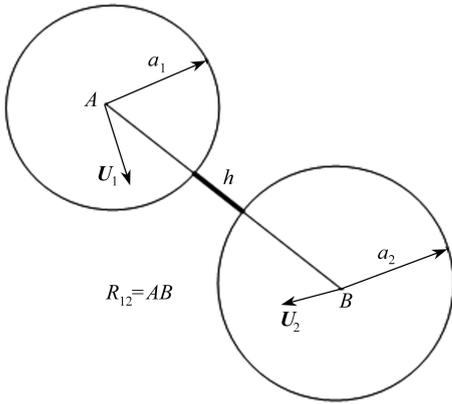


图 2 壁面润滑力示意图

Fig. 2 Schematic of the lubrication force

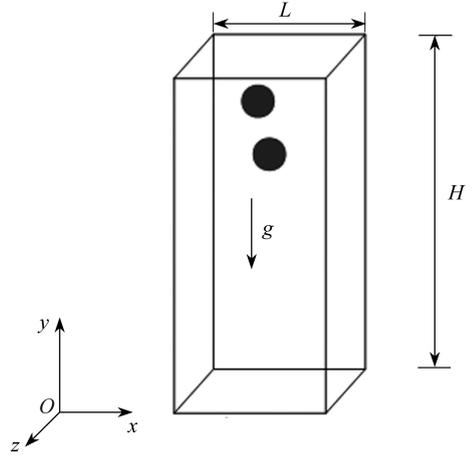


图 3 模拟的三维槽道几何结果示意图

Fig. 3 Schematic diagram of the simulation geometry of 3D channel

### 1.4 几何构型和模拟参数

模拟计算是在直角坐标系中的三维矩形槽道中进行的,如图 3 所示.初始时,颗粒置于槽道上部,当  $t = 0$  时,颗粒在重力作用下开始在槽道中沉降.可变模拟计算参数有:槽道高度  $H$ ,槽道截面为正方形,特征尺寸边长为  $L$ ,颗粒半径  $r$  ( $d = 2r$ ) 和颗粒初始位置坐标  $[x, y, z]$ ,这些模拟计算参数随着运行条件变化而改变.在所有的模拟过程中不变的参数包括:颗粒密度  $\rho_p = 72$ ,流体密度  $\rho_L = 36$ ,重力  $g$  设置为  $-0.72 \times 10^{-3}$ ,流体粘度  $\mu_L = 1.8$ .所有这些参数的值均为基于格子 Boltzmann 方法的无因次量,即本文中所有模拟值均基于格子单位.如果需要将模拟结果和实验结果对比,需要使用无因次变量组,例如 Reynolds 数等,作为基准或比较对象.

## 2 结果与讨论

本文主要模拟了单颗粒沉降、双颗粒群(等直径或不等直径)沉降、含有 49 个颗粒的颗粒

群沉降过程. 模拟结果给出了颗粒的运动轨迹、运动速度变化趋势等关键信息, 同时对部分模拟结果和文献中报道的实验结果进行了定量的比较分析. 通过三维格子 Boltzmann 方法模拟, 发现并深入分析了颗粒沉降中的周期性现象和螺旋型沉降轨迹.

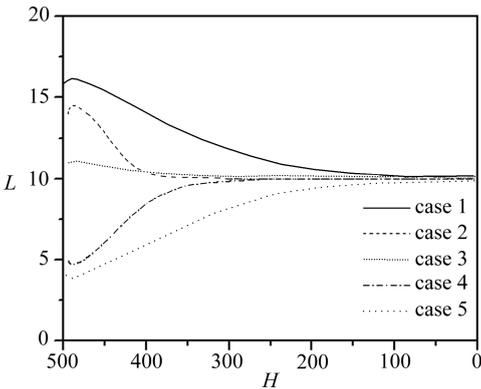
### 2.1 单颗粒沉降

文献[11,18]中采用了分散式 Lagrange 乘子/虚拟区域方法 (distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method) 或其他方法研究了低 Reynolds 数下单颗粒的沉降行为, 指出单颗粒的槽道中心沉降现象. 本文采用三维格子 Boltzmann 方法对此现象进行研究, 并将模拟结果和实验对比, 矩形槽道的尺寸为  $20 \times 500 \times 20$  (XYZ), 分别模拟了 5 种工况下单颗粒的沉降行为, 5 种工况的具体参数见表 1.

表 1 单颗粒沉降的 5 种工况

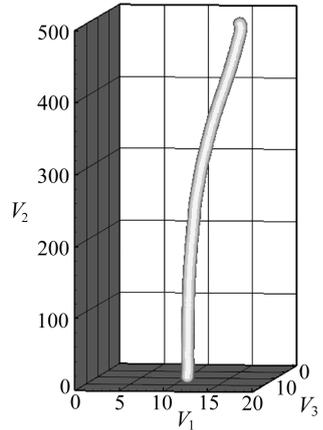
Table 1 Five cases in single particle sedimentation

	case 1	case 2	case 3	case 4	case 5
particle radius $r$	2.5	2.5	2.5	3.75	5.0
initial position $(x, y, z)$	16, 495, 10	11, 495, 10	4, 495, 10	5, 495, 10	14, 495, 10



(a) 沉降轨迹

(a) Sedimentation trajectory



(b) 三维轨迹示意图: 工况 1

(b) 3D sketch map: case 1

图 4 单颗粒的沉降轨迹示意图

Fig. 4 Sedimentation trajectory of one particle

不同工况下颗粒的沉降轨迹如图 4 所示. 从图中可以看出, 颗粒沉降的最终平衡位置均在矩形槽道的中心线上, 颗粒的初始位置和直径决定了颗粒趋近于颗粒最终位置的速度, 但是对最终平衡位置没有影响. Vasseur 和 Cox<sup>[19]</sup> 实验研究了小颗粒在垂直矩形槽道中的沉降行为, 他们发现当 Reynolds 数较小时, 颗粒总是横向移动到两个垂直壁面的中心位置. 我们的模拟结果及上述实验结论<sup>[19]</sup> 和其他模拟方法<sup>[11]</sup> 的结果相符合, 这说明颗粒和壁面之间的两体相互作用是存在的, 并且在横截面 4 个方向是对称的.

为了更深入地研究壁面效应对颗粒沉降行为的影响, 需要对模拟结果进行进一步定量分析. 颗粒沉降速度的轨迹如图 5 所示 (工况 1、工况 2、工况 3 下颗粒的沉降速度的轨迹相同, 图中仅以工况 1 表示).  $U_0$  表示颗粒在槽道中的最终沉降速度. 对于球形颗粒而言, 颗粒在无束缚流体区域的最终沉降速度  $U_T$  可以通过力平衡解析求出. 当颗粒沉降速度不变时, 即颗粒达

到最终沉降速度时,颗粒所受的重力、浮力和流体曳力达到平衡状态,当 Reynolds 数 ( $Re = du_0\rho_L/\mu_L$ ) 小于 10 时(本文中,工况 1 ~ 3:  $Re = 1.05$ ; 工况 4:  $Re = 2.24$ ; 工况 5:  $Re = 3.20$ , 均小于 10),力的平衡可表达为

$$\frac{4}{3}\pi r^3(\rho_P - \rho_L)g = 6\pi\mu_L U_T r. \quad (9)$$

可以求解得到最终沉降速度  $U_T$ :

$$U_T = \frac{2}{9} \frac{(\rho_P - \rho_L)}{\mu_L} g r^2. \quad (10)$$

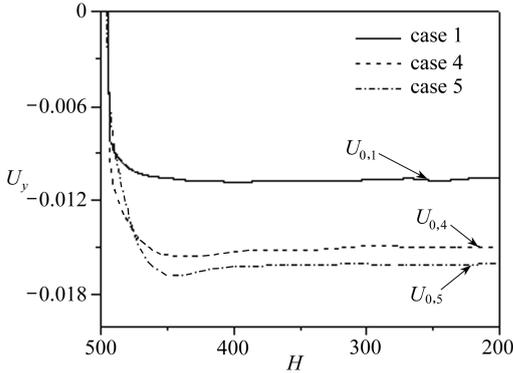


图 5 单颗粒沉降时的速度轨迹

Fig. 5 Velocity trajectory of one particle sedimentation

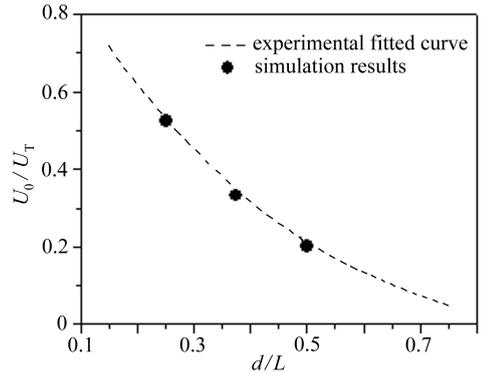


图 6 矩形槽道中壁面对颗粒最终沉降速度的影响:模拟和实验结果<sup>[20]</sup>对比示意图

Fig. 6 The wall effect on terminal velocity in the rectangular channel; simulation vs experimental results<sup>[20]</sup>

当单颗粒在有束缚流体区域,即矩形槽道中沉降时,壁面效应会影响颗粒沉降速度,因为壁面的影响,槽道中的颗粒最终沉降速度  $U_0$  一般都小于无束缚流体区域的最终沉降速度  $U_T$ . 此处采用无因次沉降速度  $U_0/U_T$  来量化描述壁面效应,同时  $U_0/U_T$  还可以用于模拟结果和实验结果的对比.文献[20]中对颗粒沉降中壁面效应进行了大量研究,通过对文献中的实验数据进行拟合分析,可以得到如下关系式:

$$\frac{U_0}{U_T} = 1.25e^{-\eta/0.4} - 0.14, \quad (11)$$

式中  $\eta$  为颗粒的无因次直径,定义为

$$\eta = d/L, \quad (12)$$

式中  $d = 2r$ . 壁面对颗粒最终沉降速度的影响如图 6 所示,图中也给出了实验结果和模拟结果的对比.通过此图可以证实,本文模拟结果和文献[20]中的实验结果在定量描述壁面对颗粒的沉降速度影响方面吻合一致,这也证实了三维格子 Boltzmann 方法可以用于精确地研究颗粒、壁面等之间的二体相互作用.

## 2.2 不同直径的双颗粒群沉降

本部分对不同直径的双颗粒群的沉降行为进行研究,着重在于阐述沉降过程中的颗粒之间的相互作用.二维垂直槽道中的双圆形颗粒沉降和碰撞行为的研究已有相关报道<sup>[21]</sup>,此处给出三维的模拟结果.模拟中设置的矩形槽道的尺寸为  $20 \times 500 \times 20$  (XYZ), 双颗粒群中大小

颗粒的初始位置分别对应为 $[11, 495, 10]$ 和 $[10, 470, 10]$ . 为研究不同颗粒群构型对沉降行为的影响, 此处选取了不同的颗粒直径比, 模拟工况如下:

工况 6: 颗粒半径分别为  $r = 2.5$  和  $r = 1.25$ , 颗粒直径比为 2.0.

工况 7: 颗粒半径分别为  $r = 2.5$  和  $r = 2.0$ , 颗粒直径比为 1.25.

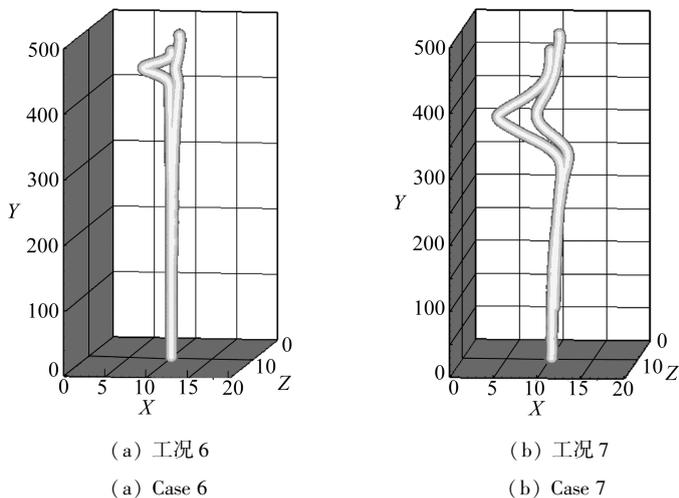


图 7 双颗粒群的沉降轨迹三维示意图

Fig. 7 The 3D sketch map of two particle sedimentation trajectory

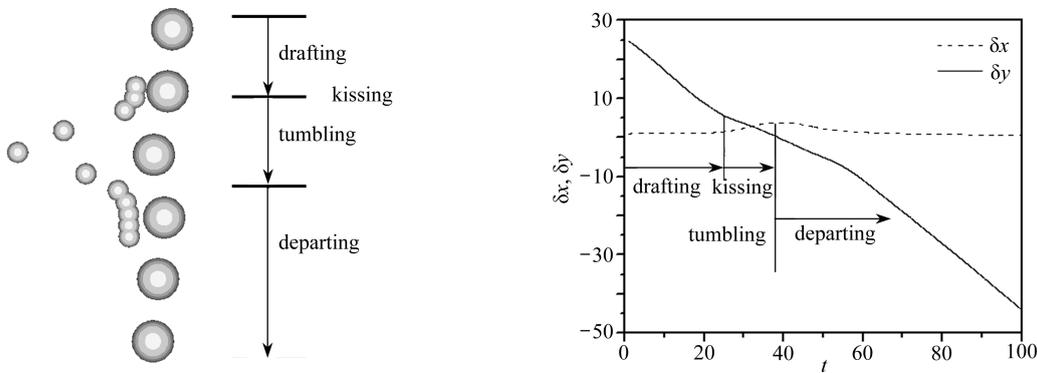


图 8 双颗粒沉降的拖曳, 接触和翻转 (DKT) 过程 (工况 6)

Fig. 8 The drafting, kissing and tumbling process (case 6)

颗粒的沉降轨迹如图 7 所示. 从图中可以看出, 当颗粒直径比变大时, 沉降轨迹受影响也急剧变大. 当两个颗粒在重力作用下发生沉降时, 开始阶段, 大颗粒 (尾随颗粒) 会逐渐接近小颗粒 (领先颗粒), 并受到领先颗粒尾涡中的低压区影响, 这个阶段成为拖曳阶段, 如图 8 所示. 接着尾随颗粒会被迅速吸入尾涡, 大颗粒和小颗粒会发生接触, 这个阶段成为碰撞阶段; 此时双颗粒的构型不稳定, 中心稍有不重合, 就会把领先的颗粒推到横向一侧, 这时大颗粒沉降速度较大, 就会逐渐变成领先颗粒, 这个阶段称为翻转阶段, 上述沉降过程如图 8 所示. 在翻转之后, 小颗粒会受到大颗粒尾涡的影响, 以很快的速度进入大颗粒后方, 然后大小颗粒会逐渐分离开来, 此处可以看出, DKT 过程可以用三维格子 Boltzmann 方法很合理地重现出来.

上述沉降过程中颗粒的沉降速度和侧向速度变化如图 9 所示. 从中可以看出领先颗粒尾

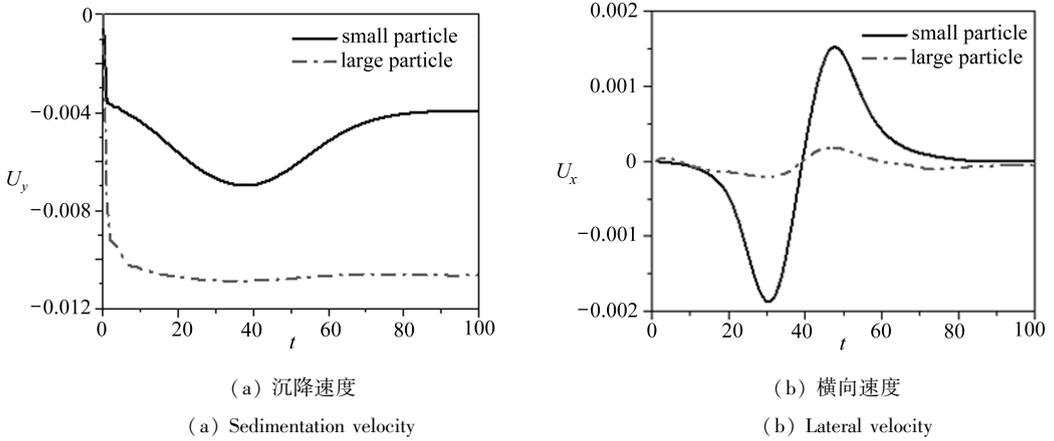


图9 DKT过程中双颗粒的速度变化示意图(工况6)

Fig.9 The velocity of two particle in the DKT process(case 6)

涡对尾随颗粒的沉降速度影响。此处讨论的模拟结果中,分别选取大颗粒的直径  $d$  和最终沉降速度  $U_0$  作为特征长度和特征速度,对这样两种模拟工况下的 Reynolds 数 ( $Re = dU_0\rho_L/\mu_L$ ) 可以计算得到为  $Re = 1.05$ , 与工况 1~3 相同。从图 9 中可以看出,小颗粒的横向速度和沉降速度均变化剧烈,与之相反,大颗粒的运动受到影响较小,在翻转分离之后,双颗粒之间的距离逐渐加大,两个颗粒的最终沉降速度不再互受影响,大颗粒 ( $r = 2.5$ ) 的最终速度和工况 1~3 相同。文献中有用分散式 Lagrange 乘子/虚拟区域方法 (distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method) 对 DKT 过程进行模拟研究的报道<sup>[3]</sup>,此处用三维格子 Boltzmann 方法模拟得到的结果和文献报道的结论是一致的。

### 2.3 相同直径的双颗粒群沉降

本节对包含相同直径的双颗粒群(颗粒直径比 = 1.0)的沉降行为进行模拟,可以发现 DKT 过程重复多次进行,从而形成了双螺旋形式的沉降轨迹,同时在模拟中还发现螺旋沉降轨迹的幅度和频率受颗粒群初始位置影响明显。三维槽道的尺寸设置为  $20 \times 1500 \times 20$  (XYZ), 颗粒半径  $r$  均设置为 4.25, 改变初始位置的工况设置如下:

工况 8: 颗粒的初始位置分别为  $[15, 1495, 10]$  和  $[5, 1485, 10]$ 。

工况 9: 颗粒的初始位置分别为  $[13, 1495, 10]$  和  $[7, 1485, 10]$ 。

沉降轨迹的三维模拟结果示意如图 10 所示。图中可以看出沉降轨迹为螺旋形式,这种有趣的沉降现象可以看作为周期性的颗粒-颗粒相互作用的结果。螺旋沉降轨迹的振幅和频率受到颗粒-流体和颗粒-颗粒相互作用的影响。通过模拟结果还可以发现,双颗粒的最终沉降稳定构型是一个颗粒紧紧靠在另一个颗粒后面,即在沉降方向的垂直面上的投影面积最小,颗粒相互作用在平衡构型中相互抵消,二者速度一致,最终达到稳定状态。

等直径双颗粒沉降过程中的颗粒之间距离,颗粒沉降速度,侧向速度以及旋转速度的变化过程如图 11 所示。从图中可以看出,颗粒最后在  $y$  方向上的距离近似为  $8.5 (= 2r)$ , 这证实了上述最终沉降稳定构型的描述。侧向速度和旋转速度发生周期性的变化,并最终趋于 0。这意味着两个速度的方向发生周期性的翻转。从模拟结果中还可以发现双颗粒群的最终沉降速度  $U_0$  为  $-0.0187$ 。从 2.1 节单颗粒沉降的研究中可以得到,对于横截面  $20 \times 20$  的矩形槽道中沉

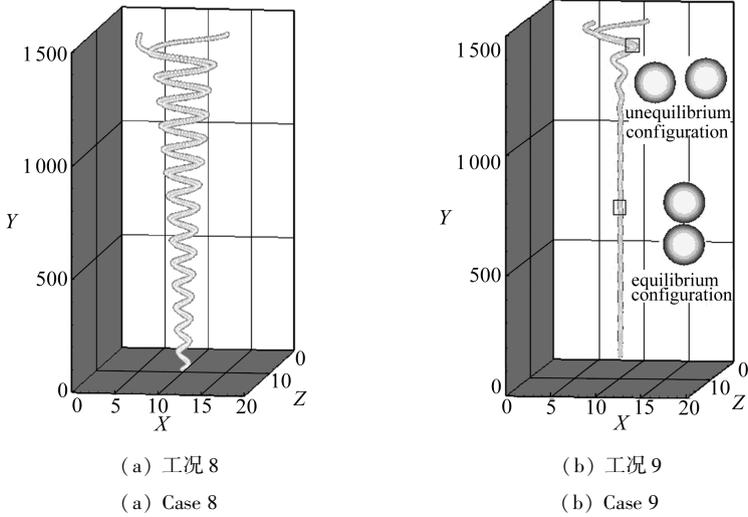
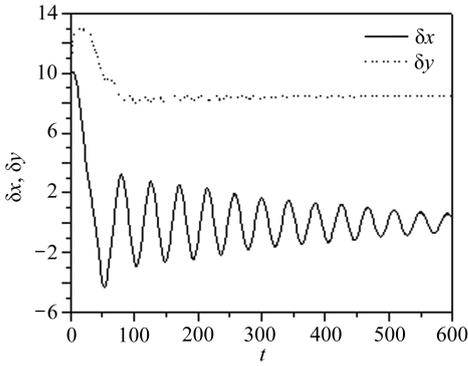


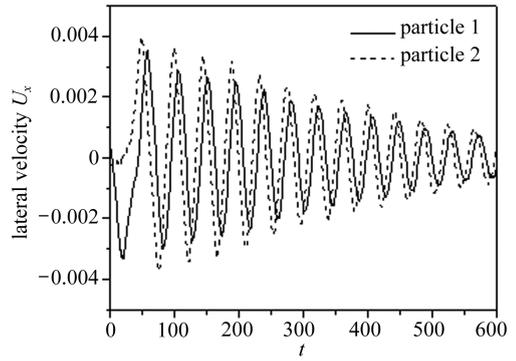
图 10 等径双颗粒沉降的螺旋型轨迹三维示意图

Fig. 10 The 3D sketch map of two particle sedimentation spiraling trajectory



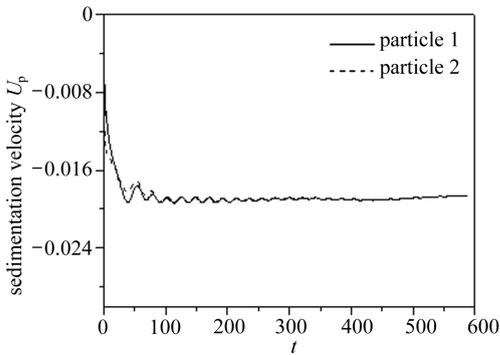
(a) 双颗粒之间的距离

(a) Distance between two particles



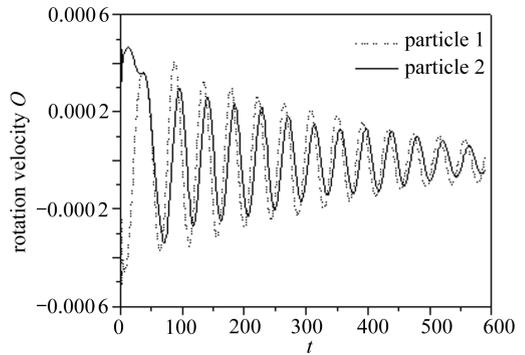
(b) 横向速度

(b) Lateral velocity



(a) 沉降速度

(a) Sedimentation velocity



(b) 转动速度

(b) Rotation velocity

图 11 等径双颗粒沉降过程的模拟结果

Fig. 11 Simulation results of two particle sedimentation with equal diameter(case 8)

降的单颗粒 ( $d = 2r = 8.5, d/L = 0.425$ ), 其最终沉降速度应该为  $-0.0168$ 。这意味这双颗粒群

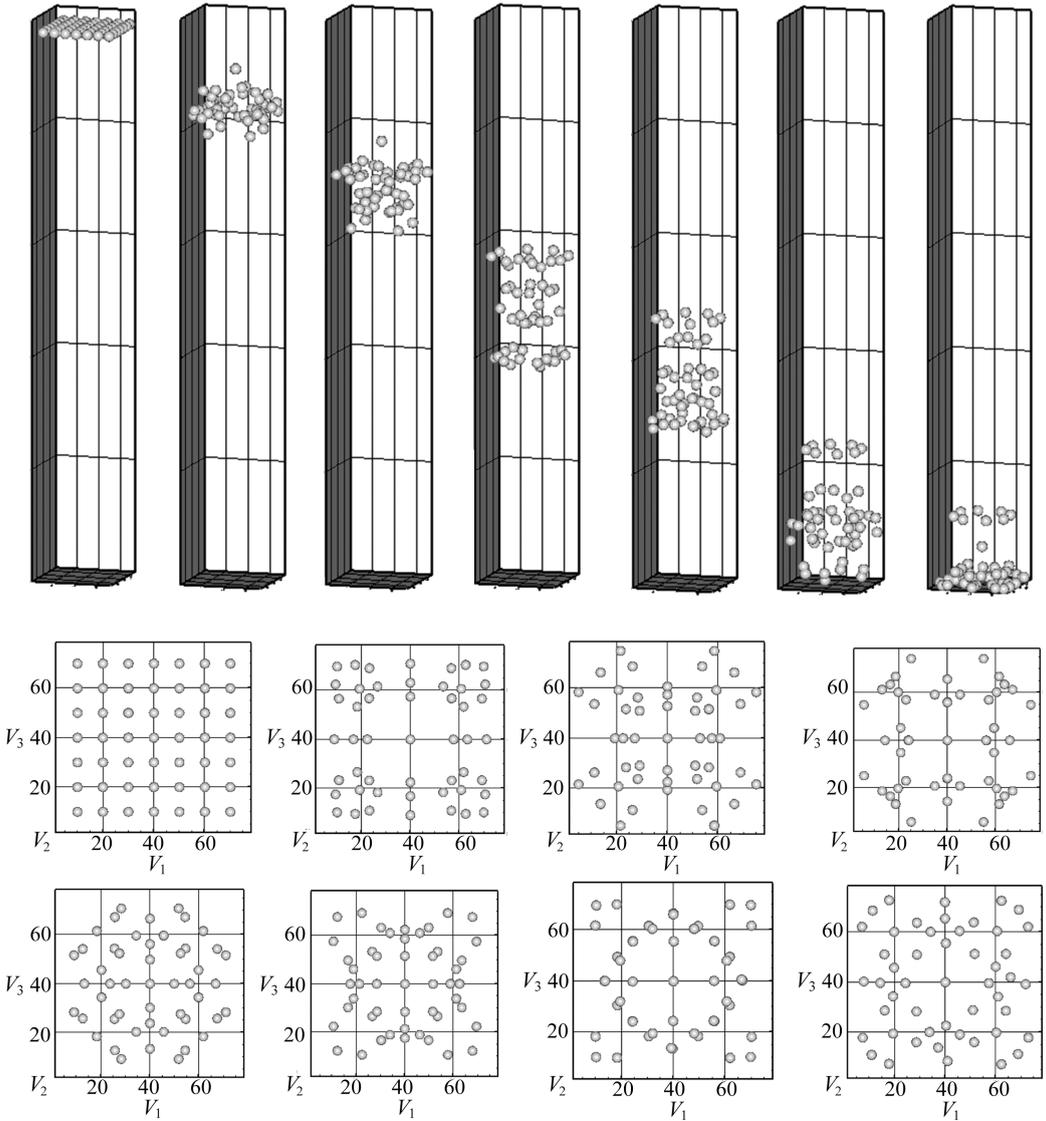


图 12 多颗粒群规则的沉降过程(49个颗粒)

Fig. 12 The regular sedimentation process of particle cluster(49 particles)

将比两个分离开的单颗粒获得更大的沉降速度,从另一个角度分析,即双颗粒群受到的总曳力比两个分离开的单颗粒所受的总曳力要小,这是因为在双颗粒群中,领先颗粒的尾涡会对尾随颗粒起到加速作用.从方程(10)和(11)中,我们同样可以获得和双颗粒群等体积的单一颗粒( $r = 5.35, d/L = 0.2675$ )在横截面  $20 \times 20$  的矩形槽道中的最终沉降速度为  $-0.0172$ . 此处研究结果可以清晰地发现,尽管颗粒群总体积相同,如果颗粒群的空间构型不同,它们受到的曳力也是不同的.因此,格子 Boltzmann 方法可以用于研究颗粒群的空间构型变化对颗粒群所受曳力的影响,这种研究对于认识颗粒-流体相互作用以及深入分析流态化中颗粒的聚集行为是很有必要的.

## 2.4 多颗粒相互作用

通常情况下,两体相互作用可以被解析地表达出来,当颗粒体积分数较小时,双颗粒相互

作用也是占主导地位,足以描述颗粒流体系。然而多体相互作用在数学求解上本身就是困难的,在大多数情况下不能被解析求解。一些研究者对多体相互作用的理论模型<sup>[22]</sup>进行了相关研究,同时指出,多体相互作用在一些情况下是可以简化进行处理的。对三颗粒或多颗粒群的沉降行为进行模拟分析,可以为多体相互作用研究提供更详细和更广泛的信息。此处我们使用三维格子 Boltzmann 方法对包含 49 个粒子的颗粒群在矩形槽道中的沉降行为进行了模拟,模拟参数设置为:

工况 10: 颗粒半径均为 3.25,三维槽道的尺寸设置为  $80 \times 500 \times 80$  (XYZ)。

开始时,所有颗粒均匀分布在  $y = 795$  的槽道横截面上,然后颗粒在重力作用下开始沉降,模拟结果中可以发现,颗粒群的构型在沉降中发生变化,但是由于颗粒相互作用的对称性,可以发现规则的颗粒运动模式,如图 12 所示。通过图中可以发现,由于对称性,槽道中心线上的颗粒不会侧向偏转,同时颗粒沉降行为在矩形槽道“田”字分割的 4 部分是重复相同的,这说明对多体相互作用进行研究在一些情况下是可以简化的,而通常对称性是进行多体相互作用简化的出发点。

### 3 结 论

本文采用三维格子 Boltzmann 方法对单颗粒、不等径双颗粒群、等径双颗粒群和多颗粒群的沉降过程以及颗粒动力学行为进行了数值模拟,并对结果进行了详细地讨论,基于上述讨论结果,可得到如下结论:

1) 单颗粒沉降过程中,粒子沉降的最终平衡位置沿矩形通道的中心线,不随粒径、初始位置的变化而改变。壁面效应对粒子沉降过程影响很明显,可以用最终无因次沉降速度来定量描述壁面效应,本文模拟结果与文献报道的实验结果定量吻合。

2) 三维格子 Boltzmann 方法可以再现双颗粒沉降的 DKT 过程。当两粒子接触时,颗粒速度变化迅速,翻转过程后,小颗粒会被大颗粒的尾涡影响,突然加速到大颗粒的尾部,然后将两个颗粒离开,最终双颗粒的沉降速度互相不受影响。

3) 等直径的双颗粒群沉降过程中可以发现螺旋型的沉降轨迹。螺旋沉降轨迹的幅度和频率与颗粒初始位置相关。双颗粒的最终稳定构型是在沉降方向的垂直面上投影最小的构型。稳定构型下,双颗粒群的最终沉降速度比分离开的两个单颗粒或单个等体积颗粒的沉降速度都大。

4) 模拟发现包含 49 个颗粒的颗粒群沉降轨迹具有重复性,由此指出,在一些情况下,特别是研究对象具有对称性时,多体相互作用可以进行简化。

**致谢** 作者对审稿人的有价值的建议和意见表示感谢。

### 参考文献:

- [1] Shinbrot T. The brazil nut effect—in reverse[J]. *Nature*, 2004, **429**(6990): 352-353.
- [2] Mobius M E, Lauderdale B E, Nagel S R, Jaeger H M. Size separation of granular particles [J]. *Nature*, 2001, **414**(6861): 270.
- [3] 邵雪明,刘杨,余钊圣. 不同大小颗粒之间相互作用的直接数值模拟[J]. *应用数学和力学*, 2005, **26**(3): 372-378. (SHAO Xue-ming, LIU Yang, YU Zhao-sheng. Interactions between two sedimenting particles with different sizes[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*(Eng-

- lish Edition*), 2005, **26**(3): 407-414. )
- [4] Sun R, Chwang A T. Interactions between two touching spherical particles in sedimentation [J]. *Physical Review E*, 2007, **76**(4): 046316.
- [5] Subramanian G, Koch D L. Evolution of clusters of sedimenting low-Reynolds-number particles with Oseen interactions[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2008, **603**: 63-100.
- [6] Aidun C K, Ding E J. Dynamics of particle sedimentation in a vertical channel: period-doubling bifurcation and chaotic state[J]. *Physics of Fluids*, 2003, **15**(6): 1612-1621.
- [7] Qi D W, Luo L S. Rotational and orientational behaviour of three-dimensional spheroidal particles in Couette flows[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2003, **477**: 201-213.
- [8] Feng Z G, Michaelides E E. The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems[J]. *Journal of Computational Physics*, 2004, **195**(2): 602-628.
- [9] Niu X D, Shu C, Chew Y T, Peng Y. A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows[J]. *Physics Letters A*, 2006, **354**(3): 173-182.
- [10] Singh P, Joseph D D. Sedimentation of a sphere near a vertical wall in an Oldroyd-B fluid [J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2000, **94**(2): 179-203.
- [11] Feng J, Hu H H, Joseph D D. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid—part 1: sedimentation [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1994, **261**: 95-134.
- [12] Patankar N A, Singh P, Joseph D D, Glowinski R, Pan T W. New formulation of the distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows [J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2000, **26**(9): 1509-1524.
- [13] Ladd A J C. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation—part 1: theoretical foundation[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1994, **271**: 285-309.
- [14] Feng Z G, Michaelides E E. Proteus; a direct forcing method in the simulations of particulate flows[J]. *Journal of Computational Physics*, 2005, **202**(1): 20-51.
- [15] Wu J, Shu C. Particulate flow simulation via a boundary condition-enforced immersed boundary-lattice Boltzmann scheme[J]. *Communications in Computational Physics*, 2010, **7**(4): 793-812.
- [16] Ladd A J C, Verberg R. Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions[J]. *Journal of Statistical Physics*, 2001, **104**(5/6): 1191-1251.
- [17] Nguyen N Q, Ladd A J C. Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions[J]. *Physical Review E*, 2002, **66**(4): 046708.
- [18] Singh P, Joseph D D, Hesla T I, Glowinski R, Pan T W. Distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for viscoelastic particulate flows[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2000, **91**(2): 165-188.
- [19] Vasseur P, Cox R G. The lateral migration of a spherical particles sedimenting in a stagnant bounded fluid[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1977, **80**: 561-591.
- [20] Miyamura A, Iwasaki S, Ishii T. Experimental wall correction factors of single solid spheres in triangular and square cylinders, and parallel plates[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 1981, **7**(1): 41.
- [21] 王叶龙. 相互碰撞的圆离子在竖直通道中沉降的数值研究[J]. *应用数学和力学*, 2006, **27**(7): 859-866. (WANG YE-Long. Simulation of sedimentation of two circular particles with collision

considered in vertical channel[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*(English Edition), 2006, **27**(7): 983-991.)

- [22] Vanroyen C, Omari A, Toutain J, Reungoat D. Interactions between hard spheres sedimenting at low Reynolds number[J]. *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, 2005, **24**(5): 586-595.

## Numerical Simulation of Particle Sedimentation in a 3D Rectangular Channel

LIU Ma-lin

(*Institute of Nuclear and New Energy Technology, Tsinghua University,  
Beijing 100084, P. R. China*)

**Abstract:** The 3D lattice Boltzmann method was used to simulate the particle sedimentation in a rectangular channel. The results of single particle sedimentation indicated that the last position of particle was along the center line of the channel, regardless of the initial position and the particle diameter, so as to the particle Reynolds number. The wall effect on the terminal velocity was in good agreement with experimental results quantitatively. The drafting, kissing and tumbling (DKT) process was reproduced and analyzed by simulating two particles cluster sedimentation. The diameter ratio, initial position and wall effect on the drafting, kissing and tumbling process were investigated. When two particles with equal diameter sediment in the rectangular channel, the periodical DKT process and the spiraling trajectory were found, the last equilibrium configuration was obtained from simulation results. Also, the interesting regular sedimentation phenomena were found when 49 particles fell down under the gravity.

**Key words:** sedimentation; lattice Boltzmann method; particle-particle interaction