

拉格朗日-欧拉计算机模拟方法 ——对牛顿流体的解*

李险峰 赵得禄**

(中国科学院化学研究所高分子物理开放实验室 北京 100080)

摘 要 用拉格朗日-欧拉方法模拟计算了各种流场中牛顿流体的流动问题,并以此来验证该算法的正确性。其中,对具有准确解的二维 Poiseuille 流动、Couette 流动以及同心圆筒间的流动,将模拟得到的数值解与数学解析解直接加以比较;对没有准确解的绕圆柱的平面流动、平面收缩和扩张流动,将模拟结果同一些已经发表的模拟或实验结果相比较。从文中可见,该方法得到的各种结果都是合理、准确的。

关键词 拉格朗日-欧拉方法,牛顿流体

近年来,随着理论界和工业界对计算机模拟技术的要求日益提高以及计算能力的不断发展,各种应用于流体力学领域内的计算方法不断涌现,其中的一些方法在解决具体的问题时显示出了极大的潜力和应用价值,引起了各界研究人员的关注。在分子流变学领域,从分子水平上认识和预报高分子流体在复杂边界条件下的流场已成为目前的一个研究热点,而由英国剑桥大学 Cavendish 实验室的研究人员提出拉格朗日-欧拉方法(Lagrange-Euler,以下简写 LE)^[1]就是一个建立在这个层次上的数值模拟方法。该方法的最大特点是具有非常好的普适性,既可以用于模拟高分子流体^[1,2],也可以用于模拟浓悬浮液^[3]、泡沫^[4]和乳液^[5]等其它的复杂流体;既可以模拟流动的稳态过程^[1],也可以模拟动态过程^[2,5]。在我们的一系列研究工作中,所使用的就是该方法,并且对其中流动网格的生成和边界条件的处理等内容做了进一步改进^[6],使之能够处理各种复杂边界条件下流体的流动问题。另外,通过采取动态的自适应网格技术进一步提高其计算效率^[7]。本文做为系列工作之一,目的在于用几种牛顿流体的流动问题来验证现有方法的合理性和准确性。

1 流体力学控制方程

对纯粘性不可压缩绝热流体,其控制方程为

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \nabla \cdot \sigma - \nabla p \quad (2)$$

式中 v 为速度矢量, ρ 为流体的密度, p 为各向同

性的压力, D/Dt 为随体导数, σ 为应力张量,可表示为

$$\sigma = 2\eta_N D \quad (3)$$

η_N 为粘度, D 为应变率张量,它是速度梯度 (∇v) 及其转置 (∇v^T) 的线性组合

$$D = \frac{1}{2}(\nabla v + \nabla v^T) \quad (4)$$

2 拉格朗日-欧拉模拟方法

2.1 流场网格划分方法

LE 方法中使用的是多边形网格^[1,5],是通过将整个求解区域按 Voronoi 规则划分而得到的。以二维流动体系为例, Voronoi 规则的含义是将流场中最近邻点连接形成 Delaunay 三角形,以相邻 Delaunay 三角形外接圆的圆心为顶点,连接这些顶点就将整个流场划分为许多个相互连接的多边形,每个多边形就是一个 Voronoi 单元(图 1a)。这种划分流场的方式可确保流动单元在流场中沿流线做连续的、平滑的运动。在流动发生一段时间之后,各流动单元及其相邻点的位置发生变化,还要按 Voronoi 规则重新划分流场(图 1b),这种连续性的划分方式保证了流场的构型变化还是连续的。

2.2 差分格式

LE 方法在构造差分格式时,流动单元的应变率、应力和压力都定义在 Voronoi 多边形的中心,而速度分别定义在 Voronoi 多边形的中心和顶点上。下面我们对二维流动问题介绍流场物理量的求法^[5]。

*1998-12-24 收稿,1999-05-19 修稿;国家自然科学基金重点资助项目(基金号 29634030),国家重点基础研究专项经费资助(G1999064800);**通讯联系人

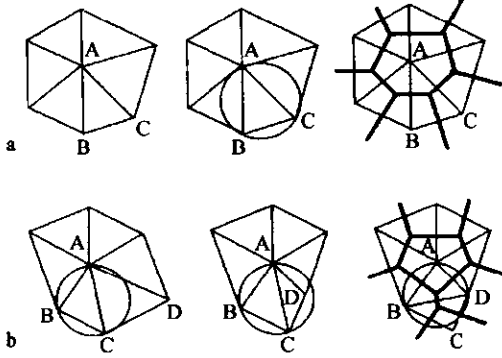


Fig. 1 a) Delaunay triangle(—) and voronoi polygon(---); b) reconnection of voronoi ploygon (---)

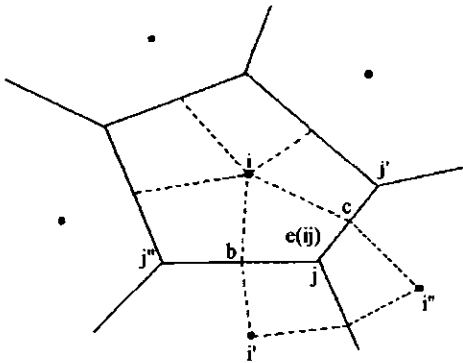


Fig. 2 A fluid element

根据(3)式可知道若要求解应力必须首先知道流动单元的应变率张量 D , 而 D 是速度梯度 (∇v) 的函数((4)式). 参考图 2, 在流动单元 i 内, 速度梯度可按下式求得

$$(\nabla v)_{e(ij)} = \frac{1}{A_{e(ij)}} \int_{e(ij)} n_k v_k dl_k = \frac{1}{A_{e(ij)}} \sum_k n_k v_k \Delta l_k \tag{5}$$

式中 $e(ij)$ 是其中的一个小四边形单元. 所有以 $e(ij)$ 为代表的四边形都具有相同的顶点 i , 并各有一个流动单元 i 的顶点 j , 其它两个顶点分别是 j 所在的两条边的中点. 对某个四边形, $A_{e(ij)}$ 为其面积, v_k 是第 k 条边的速度, 是该边上两个顶点速度的平均, n_k 是第 k 条边的外法向量, l_k 是第 k 条边的边长. 式(6)的求和按逆时针方向进行. 一旦求出了速度梯度, 便可得到 $e(ij)$ 的平均应变率张量 $D_{e(ij)}$ 以及平均应力 $\sigma_{e(ij)}$. 进而可以得到作用在流动单元 i 上的平均应力, 表示为

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \sigma_i &= \frac{1}{A_i} \int (n_j \cdot \sigma_j) dl_j \\ &= \frac{1}{A_i} \sum_j [n_{bj} + n_{jc}]_{e(ij)} \cdot \sigma_{e(ij)} \Delta l_j \tag{6} \end{aligned}$$

式中 A_i 为流动单元的面积, n_{bj} 和 n_{jc} 是四边形 $e(ij)$ 的两条边 bj 和 cj 的外法向量, $\Delta l_j = l_{bj} + l_{cj}$. 式中对四边形的求和仍按逆时针方向. 根据受力平衡条件, 有 $\nabla \cdot \sigma_{e(ij)} = 0$. 同理, 可通过对顶点 j 周围的小四边形单元做积分 (按逆时针方向), 求出作用在 j 上的平均应力, 即

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \sigma - pI)_j &= \frac{1}{A_j} \int n_i \cdot [\sigma_i - p_i] dl_i \\ &= \frac{1}{A_j} \sum_i [n_{ci} + n_{ib}]_{e(ij)} \cdot [\sigma_{e(ij)} - p_i] \Delta l_i \\ &= 0 \tag{7} \end{aligned}$$

式中 A_j 为顶点 j 周围的四边形面积之和, n_{ci} 和 n_{ib} 是 $e(ij)$ 的两条边 ci 和 ib 的外法向量 $\Delta l_i = l_{ci} + l_{ib}$. 此时仍有 $(\nabla \cdot \sigma - pI)_j = 0$. 上式中的压力 p_i 需要根据不可压缩条件(1)式迭代求得. 这里(1)式有如下的差分格式:

$$\nabla \cdot v_i = \frac{1}{A_i} \sum_j (n_{bj} + n_{jc}) \cdot v_j \Delta l_j = 0 \tag{8}$$

v_j 是顶点 j 的速度, 其它变量的意义与(7)式相同.

3 结果与讨论

以下讨论均为无滑移边界条件下的二维不可压缩蠕动流.

3.1 平行平板之间的 Poiseuille 流动

在恒定的压力梯度下, 两个静止平行板之间的二维定常流动, 速度分布为^[8]

$$u_x = \frac{h^2 dp}{2 \eta dx} \left[1 - \frac{y^2}{h^2} \right] \tag{9}$$

式中, u_x 是水平速度分量, η 是流体的粘度, $2h$ 是平板间距(图 3), dp/dx 是压力梯度.

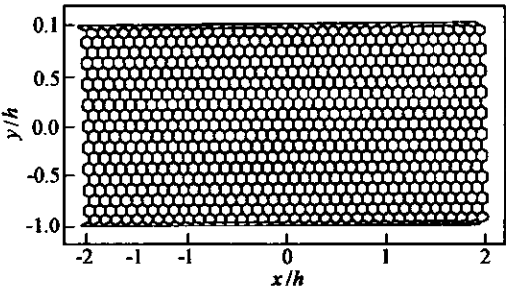


Fig. 3 Flow geometry (800 Voronoi cells)

图 4a 给出了分别由解析解与模拟解得到的速度分布 (最大误差为 0.38%), $\langle U \rangle$ 是平均流

速.在不同的压力梯度下,解析解与模拟解所得到的体积流量之比在图 4b 中给出.从这些结果可见,模拟解和解析解的结果与是精确相符合的(最大误差为 0.37%).

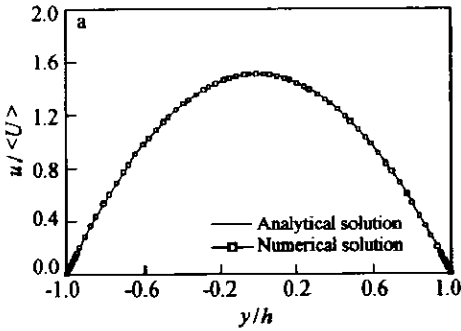


Fig. 4a Comparison of velocity between the numerical result and the analytical solution

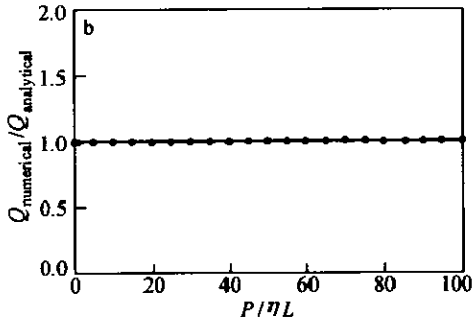


Fig. 4b The ratio of flow rate per cross-section versus Pressure gradient

3.2 平行板之间的 Couette 流动

此种流动条件下,流场的几何条件与图 3 相同,但两平行平板之间有相对运动.假定下板静止而上板在自身所在平面内沿流向移动,则在恒定压力梯度下,速度分布为^[8]

$$u_x = \frac{U}{2} \left(1 + \frac{y}{h} \right) - \frac{h^2 dp}{2\eta dx} \left[1 - \left(\frac{y}{h} \right)^2 \right] \tag{10}$$

式中 U 为上板的运动速度,其余物理量的定义与(10)式同.令 B 是无量纲压力梯度

$$B = - \frac{2h^2 dp}{\eta U dx} \tag{11}$$

在不同的 B 值下,解析解与模拟解得到的速度分布由图 5 给出.可见,模拟解和解析解的结果也是精确相符合的(最大误差为 0.31%).

3.3 同轴旋转圆筒之间的流动

同轴旋转圆筒之间的定常流动在轴承润滑体系中经常会见到,由于无法向应力,因此可认为这是另外一种形式的 Couette 流动.当令内外圆筒的半径分别为 r_1 和 r_2 ,并分别以等角速度 ω_1 和 ω_2 旋转时,沿径向的速度(v_θ)和剪切应力($\tau_{r\theta}$)的分布分别为^[8]

$$v_\theta = \frac{1}{r_2^2 - r_1^2} \left[r(\omega_2 r_2^2 - \omega_1 r_1^2) - \frac{r_2^2 r_1^2}{r} (\omega_2 - \omega_1) \right] \tag{12}$$

$$\tau_{r\theta} = \eta r \frac{d}{dr} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) = \frac{2\eta(\omega_2 - \omega_1)r_1^2 r_2^2}{r_2^2 - r_1^2} \frac{1}{r^2} \tag{13}$$

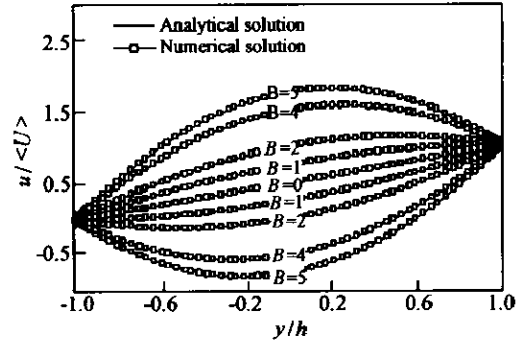


Fig. 5 Comparison of velocity between the numerical results and the analytical solutions $\langle U \rangle$ is the mean velocity

设内外圆筒的半径比为 $\chi = r_1/r_2$,我们研究了 χ 分别等于 0.1、0.2 和 0.4(图 6)三种情况下的流动.解析解与模拟解得到的速度分布(最大误差为 1.4%)和剪切应力(最大误差为 5.2%)的分布分别由图 7 和 8 给出.可见,模拟解和解析解的结果仍然精确相符.

3.4 绕圆柱的平面流动

圆柱绕流也是一个流体力学的标准问题.虽然该问题没有数学上的精确解,但已有很多人给出了数值模拟解.以下我们给出二维平面绕流(见图 9,圆柱半径与流场半高宽之比为 1:2)的计算结果(图 10~12).经过与文献[8]比较,证明这些结果是合理的.

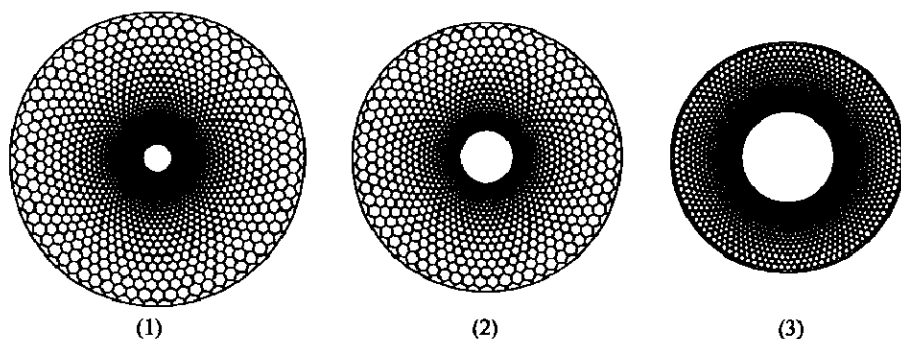


Fig. 6 Flow geometry (1) $\chi = 0.1$ (2083 Voronoi cells, 68 elements near the surface of the cylinder);
(2) $\chi = 0.2$ (1786 Voronoi cells, 64 elements near the surface of the cylinder);
(3) $\chi = 0.4$ (1963 Voronoi cells, 102 elements near the surface of the cylinder)

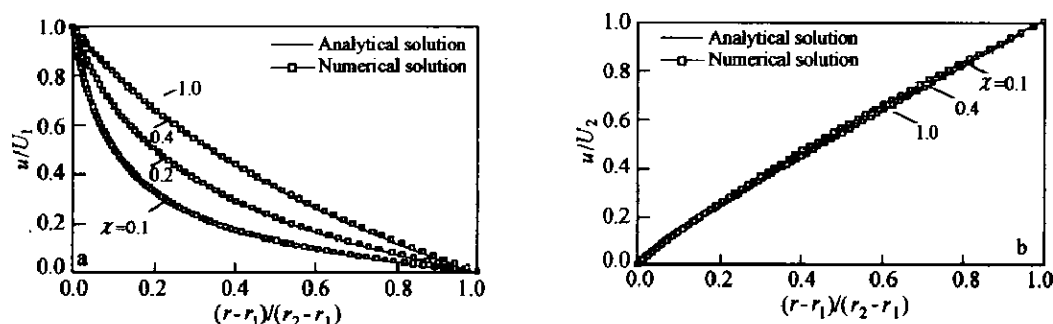


Fig. 7 Comparison of velocity between numerical results and analytical solutions

a) Outer cylinder is fixed, inner cylinder rotates

b) Outer cylinder rotates, outer cylinder is fixed

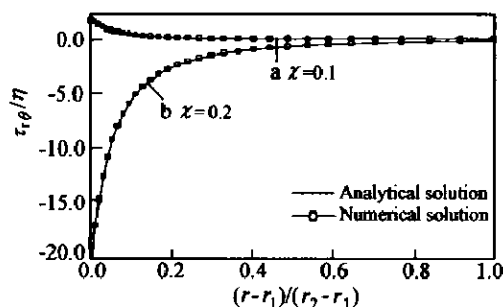


Fig. 8 Comparison of shear stress between numerical results and analytical solutions

a) Outer cylinder rotates, inner cylinder is fixed

b) Outer cylinder is fixed, outer cylinder rotates

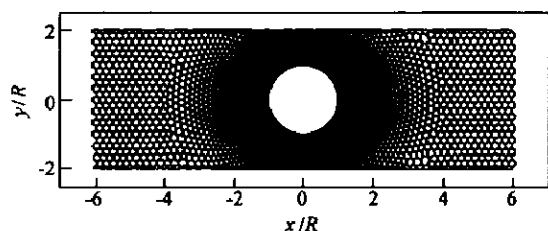


Fig. 9 Flow geometry (3669 Voronoi Cells, 122 elements near the cylinder)

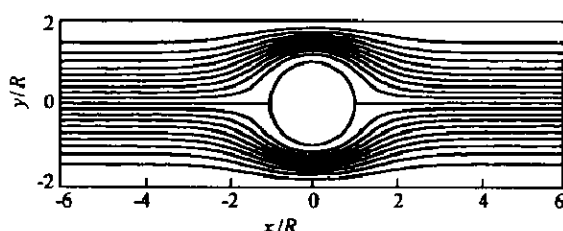


Fig. 10 Streamline pattern. Contour values have been normalized and drawn every 0.1 intervals between -1 and 1

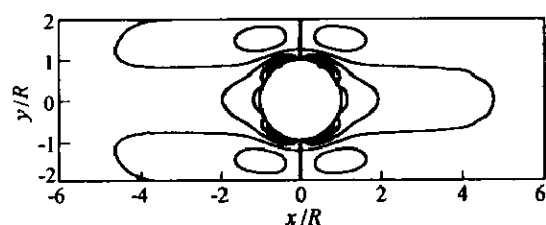


Fig. 11 Contour plot of normal stress τ_{xx} ($\tau_{xx, \min}/(\eta_N U/R) = -8.780, \tau_{xx, \max}/(\eta_N U/R) = 8.780, 1.756$ intervals)

对牛顿流体的平面绕流问题, Mitsoulis^[9]和 Liu 等^[10]曾给出了作用在单位长度圆柱上的阻力 (F) 的数值模拟解. 对二维问题, F 可通过对作用在圆周上的应力积分而求得

$$F = \int_0^{2\pi R} n \cdot \sigma dl \quad (14)$$

式中 n 是垂直于圆周的外法向量, 应力张量 $\sigma = \tau_N - PI, I$ 为单位张量. 在文献[9]和文献[10]的计算中, 所得阻力用 $\eta_N U/R$ 约化 (U 为平均流速) 后的值分别为 132.31 和 132.34. 本计算的结果为 130.94, 比上述结果低 1.06%.

3.5 平面收缩和扩张流动

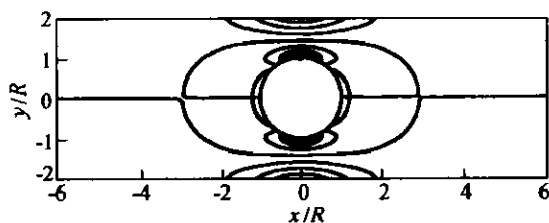


Fig. 12 Contour plot of shear stress τ_{xy} ($\tau_{xy, \min}/(\eta_N U/R) = -11.020, \tau_{xy, \max}/(\eta_N U/R) = 14.096, 2.512$ intervals)

平面收缩和扩张流动也是一种常见的流动方式, 其流场内部存在次级流动和应力奇异点. 对该类问题模拟结果的好与坏也是评价一个算法是优或劣的标准. 本计算中取收缩比(上、下游流场宽度比) $\beta = 4$. 我们在模拟中将收缩和扩张流动放在一个流场中来研究. 图 13 为一部分这样的流场 (其中, h 为收缩后或扩张前管道的半高宽). 流动过程首先是充分发展的流动在上游经过一个 4:1 的收缩; 其次, 收缩后流动恢复为充分发展; 最后, 流动在下游经过一个 4:1 的扩张. 收缩和扩张流动的流线分别由图 14a 和 b 给出.

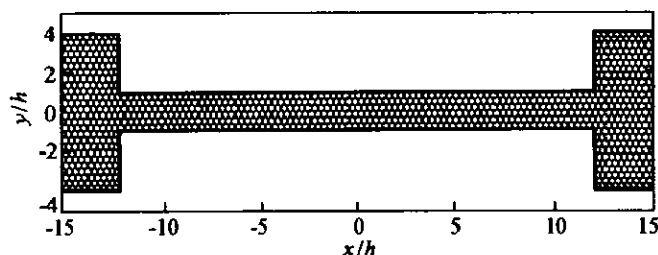


Fig. 13 A part of the flow geometry (2990 voronoi cells in whole flow field)

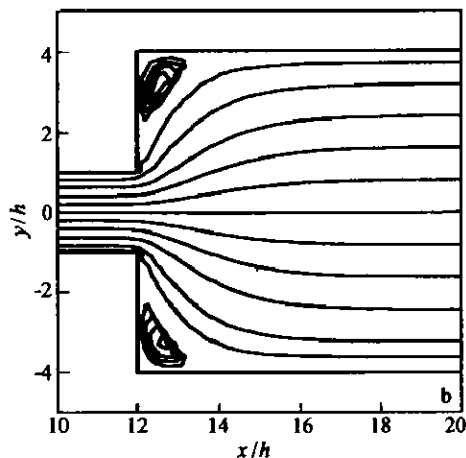
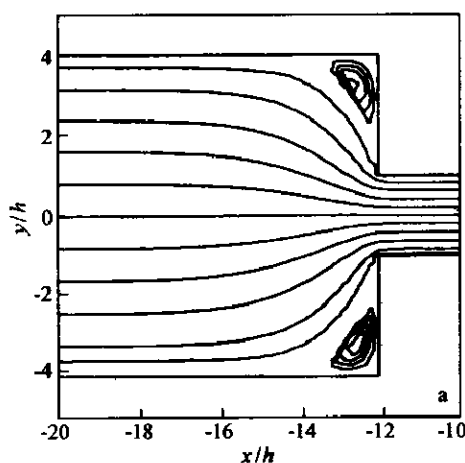


Fig. 14 Stream patterns (a) contraction flow (b) expansion flow

Values of stream function:

0.0; 0.00073; 0.0073; 0.028; 0.104; 0.216; 0.352; 0.499; 0.647; 0.783; 0.895; 0.971; 0.999; 1.0;

Values of stream function corresponding to vortex: -0.00075; -0.0006; -0.00045; -0.0003; -0.00015

收缩流动的速度场由图 15 给出,从中可以估计次级流动(涡旋)的尺寸. 涡旋的无量纲长度 X 可按下式计算:

$$X = \frac{L_V}{H_U} \quad (15)$$

式中 L_V 为涡旋的长度, H_U 为上游流场的宽度(图 15). 对牛顿流体蠕动流(雷诺数 $N_{Re} \leq 0.1$)的流场, Nguyen^[11] 和 Boger^[12] 等曾用实验方法、Viriyayuthakorn 和 Caswell^[13] 以及 Kim-E^[14] 等曾用模拟方法分别得到了非常一致的结果,即对收缩比 $\beta \geq 4$ 、雷诺数 $N_{Re} \leq 1$ 的轴对称收缩流动,一般有 $X = 0.17$ ^[15]. 本计算结果为 $x \approx 0.18$, 与上述结果相当一致.

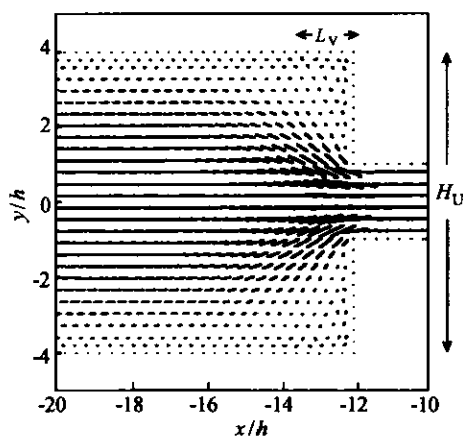


Fig. 15 Velocity field of 4:1 planar contraction flow (Vortex size $X = L_V/H_U$)

在 Walters 和 Webster 的工作中^[16], 为考察应力奇异性对流动的影响, 他们同时给出了直收缩口和圆收缩口对流动影响的比较实验. 本文中我们也对牛顿流体在这样的不对称流场中的流动情况进行了模拟. 这里我们取圆收缩口(见图 16)的半径为 $R = h/2$ (h 意义同上). 图 17 为该收缩流动的流线, 可见, 模拟得到的流函数的分布是不对称的, 并且在圆收缩口的半区内只产生很微弱的涡旋流动, 这与文献^[16]的结果一致.

本文用拉格朗日-欧拉方法模拟计算了在各种边界下牛顿流体的流动问题. 通过与数学解析

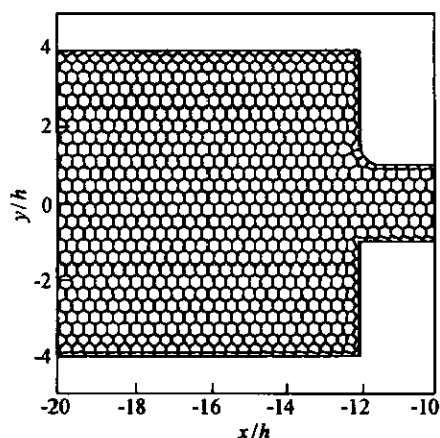


Fig. 16 A part of the flow geometry (2870 Voronoi cells in whole flow field)

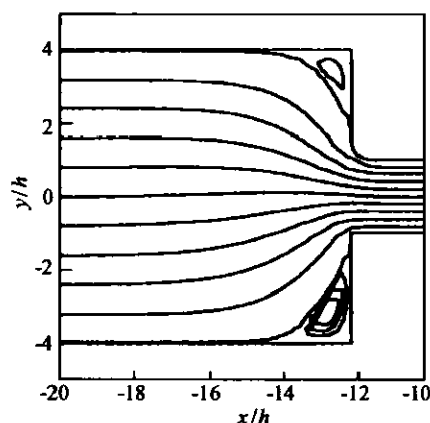


Fig. 17 Stream pattern

Values of stream function:

0.0; 0.00036; 0.028; 0.103; 0.215; 0.35; 0.5; 0.645; 0.78; 0.892; 0.967; 0.999; 1.0; Values of stream function corresponding to vortex: -0.00074; -0.00049; -0.00025

解以及相关的模拟结果或实验结果相比较, 验证了拉格朗日-欧拉方法的合理性和准确性, 为我们进一步应用该方法来模拟真实的高分子流体奠定了基础.

致谢 感谢英国 Bristol 大学 Dr. Xue-feng Yuan 的密切合作.

REFERENCES

- 1 Yuan X F, Ball R C, Edwards S F. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1993, 46: 331~350
- 2 Yuan X F, Ball R C, Edwards S F. *J Non-Newtonian fluid Mech*, 1994, 54: 423~435
- 3 Yuan X F, Ball R C. *J Chem Phys*, 1994, 101: 9016~9021
- 4 Yuan X F, Edwards S F. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1995, 60: 335~348
- 5 Yuan X F, Doi M. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 1998, 144: 305~318
- 6 Li Xianfeng(李险峰), Zhao Delu(赵得禄). Annual Report of PPLAS, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences(中科院化学所高分子物理实验室年报), 1998. 63~64
- 7 Li Xianfeng(李险峰), Zhao Delu(赵得禄). Annual Report of PPLAS, Institute of chemistry, Chinese Academy of Sciences(中科院化学所高分子物理实验室年报), 1998. 61~62
- 8 Landau L D, Lifshitz E M, *Fluid Mechanics*, 2nd ed. Oxford: Pergamon Press, 1987. 51~56
- 9 Mitsoulis E. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1998, 76: 327~350
- 10 Liu A W, Bornside D E, Armstrong R C, Brown R A. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1988, 77: 153~190
- 11 Nguyen T H. The influence of elasticity on die entry flow, Ph D Thesis, Monash University, Clayton, Victoria, Australia. 1978. 272
- 12 Boger D V, Hur D U, Binnington R J. *J Non-newtonian fluid Mech*, 1986, 20: 31~49
- 13 Viriyayuthakorn M, Caswell B. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1980, 6: 245~267
- 14 Kim-E M E, Brown R A, Armstrong R C. *J Non-Newtonian fluid Mech*, 1983, 13: 341~363
- 15 Boger D V. *Ann Rev Fluid Mech*, 1987, 19: 157~182
- 16 Walters K, Webster M F. *Phil Trans R Soc Lond A*, 1982, 308: 199~218

THE LAGRANGIAN-EULERIAN METHOD

—SOLUTIONS FOR VARIOUS NEWTONIAN FLOWS

LI Xianfeng, ZHAO Delu

(Polymer Physics Laboratory, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Abstract The Lagrangian-eulerian method has been used to simulate two dimensional creeping flows of Newtonian fluids in various flow fields. For Poiseuille and Couette flow and flow between rotating cylinders, the numerical results have been directly examined by the analytical solutions. For the flow around a cylinder between parallel plates, the present results are compared with the previous reports given by Mitsoulis and Liu *et al.*. The dimensionless drag of 130.94 is consistent fair well with the values given by Mitsoulis (132.31) and by Lu *et al.* (132.34), respectively. For the flow through abrupt contraction geometry, the numerical results have been compared with the experimental observations of Nguyen and the numerical predictions of Viriyayuthakorn and Caswell. The size of the upstream vortex, measured in terms of a dimensionless re-attachment length is 0.18, excellently agrees with the previous reports. For the flow through rounded re-entrant corner, excellent agreement between the present results and the experimental observations of Walters and Webster is obtained. In conclusion, the Lagrangian-Eulerian method has predicted accurate results for all cases of the flows presented in this paper.

Key words Lagrangian-Eulerian method, Newtonian flow