

[研究·设计]

DOI:10.3969/j.issn.1005-2895.2019.03.005

颗粒惯性聚集现象的数值优化方法

薛壮壮, 王企鲲

(上海理工大学 能源与动力工程学院, 上海 200093)

摘要:为研究微通道内悬浮颗粒的惯性聚集现象,基于“运动相对性”原理,运用数值方法对颗粒在聚集过程中所受的惯性升力进行计算。利用相对运动模型进行计算时,其关键点在于对所需计算的横向位置处的颗粒沿主流方向的稳定运动速度的确定;通过“试凑法”对其进行近似确定,采用二分法、割线法和抛物线法等方法在相同条件下进行试凑计算。比较上述方法在试凑颗粒稳定状态下平动速度和转动角速度的难易程度,结果表明“割线法”在试凑过程中具有明显的优势,该算法求解颗粒平动速度和转动角速度时快速、高效及可靠。

关键词:微通道;悬浮颗粒;惯性聚集;惯性升力;割线法;CFD

中图分类号:O35 文献标志码:A 文章编号:1005-2895(2019)03-0026-05

Numerical Optimization Method of Inertial Focus of Particles

XUE Zhuangzhuang, WANG Qikun

(School of Energy & Power Engineering, University of Shanghai for Science & Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: In order to study the phenomenon of inertial focus of particles in microchannel, based on the principle of motion relativity, the numerical method was used to calculate the inertial lift of the particles during the aggregation process. By using the relative motion for calculation, the key point was the determination of the steady motion velocity of the particles in the direction of the main flow at the required lateral position. In this paper, the method was approximated by trial and error method, and the methods such as dichotomy, secant line and parabola were used for trial and error calculation under the same conditions. The results show that the secant method has obvious advantages in the process of trial and assembly. The algorithm is faster, more efficient and more reliable in solving the translational and rotational angular velocities of particles.

Keywords: microchannel; suspended particles; inertial focus of particles; inertial lift; secant method; CFD

当均匀散布细颗粒的流体以低雷诺数层流流入直管,经过足够长距离的流动后,会自发的进行径向迁移,颗粒最终会被稳定地聚集在离管道轴心约0.6倍半径的同心圆环状位置上运动,此即“惯性聚集”现象^[1-2]。该现象表明:颗粒在低雷诺数层流管道内运动时,除了受到主流方向运动的驱动力外,还会因受到垂直于主流方向的横向升力而发生横向迁移。

颗粒的“惯性聚集”现象被发现后,引起一些学者的关注^[3-5],之后的研究中发现:颗粒这种自发进行的惯性聚集现象,广泛存在于各种低雷诺数层流管道流

动中,并拥有巨大的应用价值。当前,惯性聚集效应与微流控技术结合,已成功实现了对管道流体中颗粒的操控,不仅可用于对颗粒或细胞的分离、筛选和聚焦,而且还有望利用微流控技术研制出具有耗能低、产量大及效率高的固液分离与净化装置。

DI Carlo等^[6]曾指出,引发“惯性聚集”现象的横向升力本质上是由于流场惯性作用的结果,即在Navier-Stokes方程中含加速度的项。有研究发现^[7],这个横向升力在空间分布上并不均匀,且存在零点,此零点所在位置即是颗粒“惯性聚集”的位置。

收稿日期:2018-11-17;修回日期:2018-12-28

基金项目:国家教育部博士点基金资助项目(20113120120003)。

第一作者简介:薛壮壮(1993),男,河南郑州人,硕士研究生,主要研究方向为微流体机械流动。通信作者:王企鲲(1978),男,浙江嘉兴人,工学博士,副教授,中国机械工程学会高级会员,上海力学学会会员,主要研究方向为叶轮机械流体动力学、低雷诺数黏性流体力学及生物流体力学等。E-mail:wangqk@usst.edu.cn

为深入揭示该横向升力的力学机理,在理论上^[8-9]往往采用的是摄动法中的“匹配渐近展开法”求 Navier-Stokes 方程的近似解,从而获取颗粒的“惯性聚集”位置。但是求得摄动解的前提是基于“点颗粒”假设,而在实际情况中,微流控器件操控的颗粒尺寸与通道尺寸为同一量级,需视为有限尺寸颗粒,在通道中运动时必然会对周围流场具有较强的反作用。用摄动法推导得出的 N-S 方程近似解并未反映颗粒的有限尺寸效应,在解释惯性微流控器件中颗粒的“惯性聚集”现象时具有很大的局限性。因此,理论求解难以反映具有一定尺寸颗粒的水动力学行为。

目前对于颗粒惯性聚集现象的研究多集中于实验研究,所关心的重点也多为颗粒的聚集形式以及受影响的因素,而对于引起颗粒“惯性聚集”现象背后的横向升力却探讨不足,其原因大概是微通道内颗粒的受力难以测量所致。然而使用 CFD 技术却很容易突破实验测量上的困难,它易于获取流动中包括颗粒受力在内的流动细节,颗粒占据有限空间,受力通过对颗粒表面的压力与黏性力积分可以获得。DI Carol 等^[10]鉴于应用非定常算法对于“惯性聚集”现象数学描述上的困难,开创性地提出“运动相对性原理”的概念,以一种更简单的方式,对微通道颗粒所受的横向升力进行了数值计算,并首次揭示了颗粒尺寸在研究惯性升力时的重要性。王企鲲^[11]延用了 Carol 提出的准定常算法,在方形截面通道中利用 CFD 技术,对直管通道内颗粒独特的“惯性聚集”现象的力学机理进行了深入研究。

运用相对运动模型的重点在于如何快速获得颗粒沿主流方向的稳定平移速度和转动角速度。实际情况中,由于微通道中的颗粒均具有一定的尺寸,而不是“点颗粒”,有限尺寸的颗粒会对其周围流场产生影响,颗粒平动速度与转动角速度的数值大小与理想情形下相比必然有所偏差。如此,这类问题便转化为常规的求解非线性方程问题。

本文中颗粒“惯性聚集”对惯性升力的解决都可归结为非线性方程 $f(x) = 0$ 的求解。而此类方程的真实解极难求得,在实际工程应用中也只需要其满足一定精度的近似解即可。通过不断“试凑”颗粒的这两个速度最终可以得出非线性方程的近似解,而二分法是求解非线性方程这类问题最为典型与古老的方法,通过将区间两个端点逐步缩小,进而求得非线性方程的近似解。

二分法广泛应用于程序自动识别与检测中,在数组中使用二分法是一种行之有效的方法。但二分法也

有不足之处,将二分法应用于求解计算非线性方程时,计算量大且周期长。为此,课题组引入一种新的求解方法,可以将非线性方程求根思想引入到确定相对模型平移速度与转动角速度的过程之中,避免再试凑时的盲目性,以期探索到一种较为高效的确定这两个速度的方法,这有助于完善相对运动模型的实施过程。

1 计算模型与方法

1.1 数值计算模型简介

颗粒在直管道中“惯性聚集”过程中,进行 CFD 模拟计算时的难点在于:由于颗粒是运动的,作为流场固体边界之一的颗粒表面的相对位置也是随时间推进而发生变化的。这种流场在常规的静止坐标系下为典型的非定常、动边界流动,需要采用动网格和时间推进等技术进行 CFD 求解,计算过程十分复杂且计算周期极长。考虑到笔者研究对象是处于通道截面上不同横向位置的颗粒所受的横向力,而并非颗粒在通道内运动的历程,笔者利用运动相对性的基本思想建立一个相对运动计算模型,以此将原本复杂的非定常、动网格计算转化为定常、固定网格的计算,使计算过程大为简化。

如图 1 所示,将参考坐标系 $o-xyz$ 建立于球形颗粒中心,并以颗粒的平移速度 U_p 与颗粒一起作等速平移运动。在此平移坐标系 $o-xyz$ 中:颗粒平移速度 U_p 为零,仅存在以坐标原点 o 为旋转中心的旋转运动。通道壁面以颗粒的平移速度做反向移动。在平移坐标系中,整个流场便褪化为定常流动,采用固定的网格系统便可进行 CFD 求解,从而能显著降低计算时间与计算难度。再加之平移坐标系本质上仍是一个惯性坐标系,常规的 CFD 代码均可适用于对它的计算,仅需将速度型边界条件根据运动相对性原理转为相对意义下的值即可。

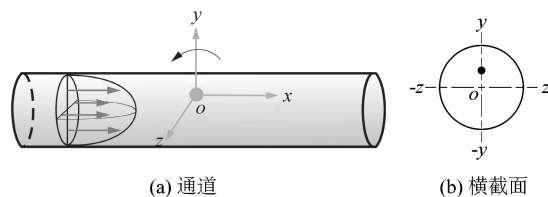


图 1 相对运动模型

Figure 1 Relative motion model

1.2 迭代初始值的确定

与求解线性方程(组)不同,一般来说,求解非线性方程(组)的迭代法收敛性往往依赖于迭代初始值的选取。鉴于求解非线性方程计算量极大,为避免试

凑时的盲目性,须先通过理论经验公式确定颗粒稳定运动后的平移速度和转动角速度的近似值,以期达到快速得出结果的目的。

由于颗粒在截面不同位置上达到稳定运动状态后,其平移速度与周围流体速度极为接近,所以颗粒质心所在空间位置所对应的充分发展管流速度是颗粒稳定平移速度的一个很好的迭代初始值。

流体在圆管中作层流运动时沿管截面的速度分布方程^[12]:

$$u = \frac{\Delta p}{4\mu l}(R^2 - r^2)。(1)$$

式中: Δp 为长管段的压降; r 为颗粒所在通道截面位置到轴心的距离; μ 为水的动力黏度; R 为圆管半径; l 为圆管管长。

圆管截面上流体的平均速度^[12]:

$$V = \frac{\Delta p R^2}{8\mu l}。(2)$$

式中: V 为通道中流体的平均流速。

将公式(2)代入公式(1)推导出公式(3),颗粒的平移速度即可近似确定。

$$U_p \approx u = 2V[1 - (r^+)^2];(3)$$

$$r^+ = \frac{r}{R}。(4)$$

式中: r^+ 为颗粒在截面上的无量纲横向位置。

颗粒的转动角速度 ω_p 可通过涡量 Ω 进行表达:

$$\omega_p = \frac{\Omega}{2} = \frac{\nabla \times V}{2}。(5)$$

位于通道截面中线上的颗粒由于 y 轴方向上的上、下表面存在沿 x 轴方向的速度梯度,故而仅存在绕 z 轴方向的旋转运动,如图1所示。

$$\omega_p = \omega_{pz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_y}{\partial x} - \frac{\partial U_x}{\partial y} \right)。(6)$$

由于颗粒在横向迁移时垂直于主流方向的横向迁移速度 U_{py} 在 x 轴方向的速度梯度为零,将公式(3)代入公式(6)即可得到横截面中线上颗粒的近似转动角速度的分布表达式:

$$\omega_p = \frac{2V}{R} \cdot r^+。(7)$$

1.3 非线性方程计算精度要求

在相对运动计算模型中,颗粒的平移速度 U_p 及转动角速度 ω_p 分别被转化为通道壁面的运动边界条件和颗粒表面的边界条件,在CFD计算前须事先给出。鉴于笔者研究的是刚性颗粒具有一定的尺寸,而不是“点颗粒”,颗粒随流体在通道中运动时,其速度为颗

粒质心的速度,而颗粒质心速度与周围流体平均速度相等。理论上,颗粒周围流体速度采用公式(3)求解,但在实际中,由于颗粒尺寸的影响,其周围区域的流体平均速度不能准确给定,这就把我们研究的问题转化为了如何快速求解非线性方程的问题。

由于此类非线性方程的根难以求解,但在满足一定精度的前提下,考虑求解其根的范围是可行的。文中采用“试凑法”加以确定:为避免初始迭代时的盲目性,在颗粒稳定平移速度和转动角速度的试凑过程中,首先,根据公式(3)、(7)预估颗粒沿主流方向的平移速度 U_p 和转动角速度 ω_p 进行试算,从而获得颗粒沿主流方向受到的合力 F_x 及沿 z 向的力矩 M_z ;若 F_x 或 M_z 不为零,则不断调节 U_p 和 ω_p 的大小,直至找到某一 U_p 和 ω_p ,使颗粒沿主流方向的受力 F_x 和 M_z 近似为零。

鉴于颗粒在垂直于主流方向迁移过程中,颗粒所受的惯性力 F_y 与主流方向颗粒受到的驱动力 F_x 相比很小,因此默认当颗粒在主流方向所受的驱动力 F_x 低于颗粒所受的横向升力 F_y 两个量级时, F_x 已可以忽略不计;默认当颗粒在该坐标轴方向上的转动力矩 M_{pz} 低于其他两个坐标轴上的转动力矩两个量级时,认为 M_{pz} 已可以忽略不计。此时的 U_p 和 ω_p 即为该通道截面上颗粒沿主流方向的最终恒定的平移速度和转动角速度。

1.4 数值计算方法

计算网格采用混合型网格,并在颗粒周围采用网格加密的方法提高计算精度。经网格独立性验证后,模型网格数量最终确定为65万左右。流体模型采取三维、相对定常、不可压缩N-S方程组(忽略质量力)。在求解过程中,N-S方程的压力与速度的耦合采用“SIMPLEC算法”;对流项采用三阶精度的“QUICK格式”离散;黏性项采用具有二阶精度的“中心差分格式”进行离散。

模型边界条件:通道进口端面给定均匀的流体相对速度,其数值大小根据计算工况的 Re 确定;通道出口端面设置为压力出口,并给定参考压力;通道壁面和颗粒表面均设置为无滑移壁面。

基于上述方法,只要将颗粒置于通道截面各位置处,即可求得这些空间点上颗粒所受惯性升力的分布。在实际计算时,为消除通道进、出口效应的影响,通道长度取为 $20D$ 。

2 不同算法的对比分析

上文已给出经验公式的预估值,以 $r^+ = 0.1$ 为例,代入公式(3)、(7)即可求得初始预估值 U_{p0} 和 ω_{p0} ,并

假设一个临近的 U_{p1} 和 ω_{p1} , 从而进行试算, 初始迭代值如表 1 所示。

表 1 初始迭代值

Table 1 Initial iteration value

初始预估速度 U_{p0} (m/s)	初始预估转速 ω_{p0} (rad/s)	预估速度 U_{p1} (m/s)	预估转速 ω_{p1} (rad/s)
0.663 173	4 465.81	0.500 000	4 000.00

2.1 二分法

计算过程:

1) 取区间 (U_{p1}, U_{p0}) 处的中点, 将其代入 FLUENT 中进行试算, 得出 F_x 与 F_y 的数值大小关系, 发现两者之间并未满足精度要求, 缩小区间范围, 直至得出零点的近似值;

2) 运用同样方法试凑旋转角速度;

3) 已满足旋转角速度在要求精度范围, 此时发现 F_x 与 F_y 的数值大小关系却不在规定的合理精度范围内, 这时, 需要重新试凑 U_p , 继续迭代计算, 最终得出计算结果, 并保证两者均在理论要求精度内。

本例使用二分法迭代, 达到要求精度至少需要 27 次迭代。综上所述, 使用二分法虽然也能得出最终的解, 但是收敛速度太慢, 计算环节太多, 并不能有效缩短计算时间。

2.2 割线法

由于割线法具有超线性的收敛性, 笔者将割线法引入求解此类非线性方程, 选用弦的斜率近似代替非线性目标函数的切线斜率, 进而达到对求解方程式的根的逐步逼近的目的。

在使用经典的割线法求解时, 由于经典的割线法具有局部收敛性, 该迭代法要求应选取恰当的初始迭代值, 因此推导理论经验公式作为初始值极有意义, 并将割线法与二分法结合起来, 可以达到与二分法相比较的目的。

1) 采用与二分法同样的 2 个初始值 U_{p0} 和 U_{p1} , ω_{p0} 和 ω_{p1} , 进行试凑计算后, 读取 $F_{x0}, F_{x1}, M_{pz0}, M_{pz1}$ 。

2) 下一次试凑迭代值 U_{p2} , ω_{p2} 的割线法公式:

$$U_{p2} = U_{p1} - \frac{F_{x1} \cdot (U_{p1} - U_{p0})}{F_{x1} - F_{x0}}; \quad (8)$$

$$\omega_{p2} = \omega_{p1} - \frac{M_{pz1} \cdot (\omega_{p1} - \omega_{p0})}{M_{pz1} - M_{pz0}}。 \quad (9)$$

3) 同样满足上文要求的精度控制量, 若不满足, 返回步骤 2) 继续迭代计算, 直至满足理论要求精度。

使用割线法迭代计算, 达到同样精度只需 9 次迭代, 显然割线法在求解颗粒稳定平移速度和转动角速

度时的收敛速度远远大于二分法, 计算速度效率得到明显提升。并且迭代次数大大减少, 极大降低了计算的复杂性, 取得了显著的效果。

2.3 抛物线法

为验证其他迭代法是否比割线法更为高效, 笔者试用一种收敛速度更快的方法。经证实^[13], 抛物线法也是超线性收敛的, 但它比割线法收敛得更快。

抛物线的基本思想是取用原非线性方程的 3 个根, 以此 3 点为节点构造二次插值多项式, 并适当选取该插值多项式的零点作为新的近似根, 进而达到逐步逼近零点的效果。

1) 为了比较抛物线法与割线法的迭代收敛速度, 选取割线法迭代的前 3 次试凑的数值, 取这 3 点作为抛物线法迭代的初始值, 构造二次插值多项式。

2) 初始值选取: 割线法迭代的前 3 点:

$$x_0 = 0.500\ 000, x_1 = 0.628\ 553, x_2 = 0.663\ 173。$$

3) 计算得: $f(x_0) = 1.92E - 08$; $f(x_1) = 2.95E - 11$; $f(x_2) = -5.18E - 09$; $f[x_1, x_0] = -4.64E - 03$; $f[x_2, x_1] = -1.99E - 02$; $f[x_2, x_1, x_0] = -1.99E - 02$ 。因此得出

$$\omega = f[x_2, x_1] + f[x_2, x_1, x_0](x_2 - x_1) = -2.06E - 02。$$

4) 将步骤 3) 结果代入式 (10), 即可得出下一次迭代近似根

$$x_{k+1} = x_k - \frac{2f(x_k)}{\omega + \sqrt{\omega^2 - 4f(x_k)f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}]}}。 \quad (10)$$

5) 若同样满足上文要求的精度控制量, 则迭代终止; 若不满足, 返回步骤 3) 和 4) 继续迭代计算, 直至满足理论要求精度。

通过使用抛物线法计算, 最终也用了 9 次迭代, 可以看出抛物线法和割线法都比二分法收敛速度要快, 但是抛物线法计算复杂度大大增加, 在实际应用中极不方便, 而割线法结构更为单一, 符合实际需要。

笔者为深入研究颗粒“惯性聚集”现象惯性升力的内部机理, 将迭代值与试算结果还原成曲线的形式, 发现平移速度 U_p 与驱动力 F_x 呈近似线性关系; 角速度 ω_p 与转矩 M_{pz} 同样为近似线性关系, 因此使用割线法迭代更有优势, 它们之间的关系如图 2 和图 3 所示。

由图 2~3 可看出是 2 条直线, 但并不是严格意义上的直线, 笔者认为原因可能是颗粒对周围流场的扰动以及微尺度下通道壁面对颗粒的限制作用所致。

2.4 割线法在本研究中的改进

在上述研究对比中, 割线法产生的迭代序列具有更快的收敛速度, 使用割线法更符合本研究的实际需

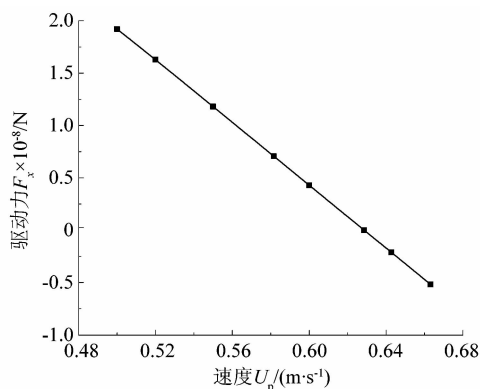


图2 颗粒平移速度与驱动力关系

Figure 2 Relation between translational velocity and lateral lift

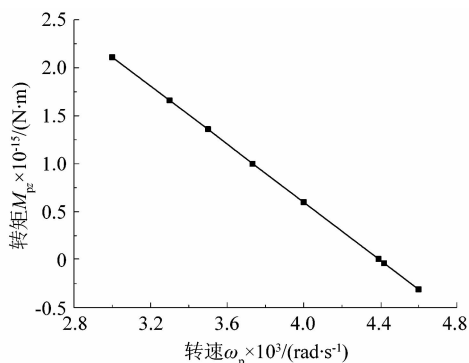


图3 颗粒转动角速度与转矩关系

Figure 3 Relation diagram of particle rotation angular velocity and torque

要。各迭代方法试凑时都是先试凑平移速度,再试凑转动角速度,笔者在应用割线法时作出改进,即在试凑过程当中同时试凑平移速度和转动角速度,当两者同时满足相应精度时,迭代结束。

仍以 $r^+ = 0.1$ 为例,数值计算结果表明,采用改进割线法只需5次迭代即可达到相同精度。改进割线法不仅收敛速度符合实际需求,而且收敛速度、收敛范围和算法的稳定性更是得到明显的提高。

2.5 数值试验对比

为了说明上文给出参数($r^+ = 0.1$)的有效性,取不同无量纲位置 r^+ 分别进行计算,计算结果见表2。

表2 不同方法迭代次数

Table 2 Number of iterations of different methods

r^+	二分法	抛物线法	割线法	改进割线法
0.2	35	10	9	5
0.3	33	9	9	6
0.4	38	11	8	5
0.5	37	10	9	5

3 结语

在自然科学与工程中大多数问题都是非线性的,如本文中颗粒“惯性聚集”现象对惯性升力的研究都可归结为对非线性方程 $f(x) = 0$ 的求解。而此类方程的真实解极难求,在实际工程应用中也不需要其满足一定精度的近似解即可。

经典二分法进行试凑计算时,所用周期长,计算量大;抛物线法比二分法迭代收敛速度快,到达同一精度的迭代次数少,但抛物线法迭代时计算复杂度大大增加;使用割线法较为高效,降低了计算的复杂度。而割线法更优的原因在于此类问题中的平移速度和转动角速度与对应力的关系呈近似线性,割线法可以更快得到收敛的点。若使用割线法同时试凑平移速度和转动角速度,可以有效减少迭代次数和计算量,使得计算更为快速,明显提高收敛速度,在“惯性聚集”力学机理研究计算中具有突出的优点。

参考文献:

- [1] SEGRE G, SILBERBERG A. Radial particle displacements in poiseuille flow of suspensions[J]. Nature, 1961, 189(4760): 209 - 210.
- [2] SEGRE G, SILBERBERG A. Behaviour of macroscopic rigid spheres in Poiseuille flow: part 2 experimental results and interpretation[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1962, 14(1): 136 - 157.
- [3] OLIVER D R. Influence of particle rotation on radial migration in the poiseuille flow of suspensions[J]. Nature, 1962, 194(4835): 1269 - 1271.
- [4] REPETTI R V, LEONARD E F. Segré-silberberg annulus formation: a possible explanation[J]. Nature, 1964, 203(4952): 1346 - 1348.
- [5] JEFFREY R C, PEARSON J R A. Particle motion in laminar vertical tube flow[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1965, 22(4): 721 - 735.
- [6] DI CARLO D. Inertial microfluidics[J]. Lab on a Chip, 2009, 9(21): 3038 - 3046.
- [7] 王企鲲, 孙仁. 管流中颗粒“惯性聚集”现象的研究进展及其在微流动中的应用[J]. 力学进展, 2012, 42(6): 692 - 703.
- [8] HO B P, LEAL L G. Inertial migration of rigid spheres in two-dimensional unidirectional flows[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1974, 65(2): 365 - 400.
- [9] SCHONBERG J A, HINCH E J. Inertial migration of a sphere in Poiseuille flow[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1989, 203: 517 - 524.
- [10] DI CARLO D, EDD J F, HUMPHRY K J, et al. Particle segregation and dynamics in confined flows[J]. Physical Review Letters, 2009, 102(9): 094503.
- [11] 王企鲲. 微通道中颗粒所受惯性升力特性的数值研究[J]. 机械工程学报, 2014, 50(2): 165 - 170.
- [12] 赵汉中. 工程流体力学[M]. 武汉: 华中科技大学出版社, 2011: 79.
- [13] 李庆杨, 王能超, 易大义. 数值分析[M]. 武汉: 华中理工大学出版社, 1986: 156.