

模擬多球體在黏性流的動態運動

陳俊杉^{1*}、林欣瑞¹、楊馥菱²、謝尚賢¹

¹ 國立臺灣大學土木工程學系、² 國立臺灣大學機械工程學系

*E-mail: dchen@ntu.edu.tw

摘要

以電腦模擬固液二相顆粒流(solid-liquid two-phase granular flow)的運動行為，有助於我們研究多顆粒流體中固體與液體在微觀尺度(顆粒大小)上的交互作用，以及此微觀機制與所造成的巨觀現象(多顆粒混合體)的相互影響。本研究中整合了許多高效率的演算法，包括以晶格波茲曼法(Lattice Boltzmann Method, LBM)求解不可壓縮黏性流場，以離散元素法(Discrete Element Method, DEM)同步求解沉浸固體顆粒的移動以及接觸行為，並且以沉浸邊界法(Immersed Boundary Method, IBM)取代傳統邊界作用力的計算，求解固體跟液體的交互作用行為。藉由這樣的整合系統，本研究試圖模擬土壤力學中的滲流砂湧(Sand Boiling)現象，以期能經由這樣的研究過程，引導出能有效分析及探討二相流相關工程問題與應用及其基礎機制之物理。

關鍵字：固液二相流模擬、沉浸邊界法、晶格波茲曼法、離散元素法、砂湧

一、前言

近年來，隨著全球氣候的變遷而加劇之風災雨災及地震災害，對地處亞洲於太平洋沿岸地震帶的台灣，許多可能被地震及暴雨誘發的自然災害，例如土石流、山崩以及土壤液化等，發生益加頻繁，而且一直嚴重威脅著我們的日常生活。從這次侵襲日本東北的地震可以看到，除了海嘯造成的洪水及大規模沖刷所造成的損傷外，

還有地震發生時，因為劇烈搖晃造成的土壤液化而導致地層下陷樓房橋梁倒塌等災情，直接侵襲著人類的居住地，對我們的生命財產無疑地造成很大的威脅。

從物理上，我們可以將前述的這些自然災害流（natural hazardous flows）簡化為有強烈流固體交互作用的固液二相顆粒流（solid-liquid two-phase granular flow），以方便但有效地探討顆粒和黏滯流體共同運動時，流體浮力及黏滯力等等對顆粒整體運動的影響。由於兩者的交互作用非穩態且非線性，加上眾多球體的集合的行為非等向性亦非均勻，因此使得固液二相顆粒流的整體現象相當複雜。在過去，要做出有工程意義且包含複雜邊界的三維流場數值模擬一直是難以達成的事情。除了數值演算法的成熟度外，最大的瓶頸為電腦硬體效能，大大地限制了人類以數值模擬自然與工程問題的尺度。近年來隨著科技的演進，電腦的計算效能大幅提昇，以往被認為難以達成的三維複雜邊界模擬，已經是變成相當普遍的研究，而具有工程意義及研究方法挑戰的固液二相顆粒流模擬，已經漸漸盛行於各種顆粒流研究中。

傳統上，求解固液二相流問題，最大的問題是求解包含複雜且快速變化邊界的流場。統御牛頓流體運動的 Navier-Stokes 方程式，求解時需在每個時距計算流場速度以及壓力，但這兩個未知數耦合在一起，也因此求解上本身就有一定的難度；加上求解 N-S 方程式中非線性的對流加速度項次使得本偏微分方程式在精度及穩定性兼顧要求下的演算法相當複雜，若再引入形狀複雜的邊界，會讓求解更加困難，遑論在顆粒流中大量且快速變化的固體邊界。為了有效率求解包含複雜邊界的流場問題，本研究導入沉浸邊界，此方法最初由 Peskin 在 1982 年提出[1]，為計算血球在邊界複雜的心臟血管內移動時流場。藉由晶格波茲曼法求解流場並與離散元素法同步模擬多固體顆粒在黏性流體中的運動，並將這套計算工具應用在砂湧現象的模擬，試圖展示這套工具的實用性以及計算效率。

除演算法整合之外，與計算效率及穩定度密不可分的議題是時距的選用。純固體顆粒碰撞計算時，為了精準模擬碰撞過程，步進時距通常以彈性力學架構下的 Hertz 理論接觸時間來訂定，此時距通常遠遠小於傳統計算流體力學演算法需要的

時距(與 Courant–Friedrichs–Lewy (CFL)數有關)。考量所選的砂湧過程中固體顆粒碰撞及接觸頻繁，本研究統一以固體顆粒碰撞的時距作流體力學計算的時距。

二、計算方法

2.1 固體顆粒的運動與碰撞模擬計算

Cundall [2] 在 1971 年提出了離散元素法 (Discrete Element Method, DEM)，主要概念是將所有的模擬域中所有的元素視為獨立的離散體；在系統隨時間變化的過程中，若元素未與其他元素接觸，則以運動方程式 (equations of motion) 來描述之，當元素與元素達到了接觸的定義之後，就會引入兩個元素互相碰撞的接觸模型 (contact model)，以表達兩個元素的接觸以及接觸後的反應。在各種接觸模型中，最常使用的是如圖 1 的軟球接觸模型 (soft contact model)，該接觸模型將兩個發生接觸的離散元素之間的交互作用力分為三個機制：彈性變形 (elastic deformation)、塑性變形阻尼 (deformation-related damping) 以及摩擦接觸 (frictional contact) [3]。

為了簡單的敘述這三種交互作用的機制，我們從最簡單兩顆均質圓球顆粒碰撞來看。當這兩顆圓球顆粒分布於空間中，相對速度不為零，且速度的向量皆不同 (如圖 1)；若兩顆圓球因為距離夠近，發生斜向接觸時 (oblique contact)，若圓球質心距離小於兩球半徑和，則暗示圓球顆粒表面因碰撞發生變形。可是 DEM 中我們將所有元素視為剛體，所以這邊所謂的變形量在 DEM 中以兩顆圓球的重疊量 (overlap) 來描述。在軟球模型中，變形量可以在接觸點上延著連心線方向分解為沿著連心線的正向分量 (normal component) 以及垂連心線的切向分量 (tangential component)，分別標示為 δ_n 以及 δ_t 。藉由這個兩個變形量，我們可以試著描述因應而生的正向恢復力， F_{n1} ，以及側向恢復力， F_{t1} ，因為這兩個力並不會消散掉兩顆碰撞球體各自的動能，我們以線性彈簧來模擬之，如：

$$F_{n1} = k_n \delta_n \quad (1)$$

$$F_{t1} = k_t \delta_t \quad (2)$$

其中， k_n 及 k_t 為彈簧常數。由 F_{n1} 造成的位移 δ_n 以及其相對應的彈簧常數 k_n ，控制了整個接觸過程的時間，因此可預期 k_n 與材料彈性性質相關；而切向力 F_{t1} 描述兩顆圓球的仍維持在靜摩擦接觸的受力，與兩個碰撞的面彈性性質及粗糙度有關。

上面兩式所描述的碰撞行為，在碰撞過程中，能量在顆粒自身的動能及接觸彈簧的變形能轉換，因此能量沒有損失。然而，若兩個圓球顆粒，以足夠大的相對速度碰撞，衝量會導致超越降伏強度的應變，產生塑性變形，而消散動能。為了模擬這個消散能量的機制，在軟球接觸模型中以力學阻尼 c_n (mechanical damper) 描述，這個阻尼沿著碰撞的正向會產生第二個阻力：

$$F_{n2} = c_n U_{n,rel} \quad (3)$$

其中 $U_{n,rel}$ 為兩球在連心線方向上的相對速度。同樣的，來自碰撞切向的衝量同樣也可能超過切向的恢復彈簧力 F_{t1} ，而在接觸面上產生全域滑動 (gross slip)，這時產生動摩擦接觸，消散更多的動能，所對應的切向力以庫倫模型估計為

$$F_{t2} = f(F_{n1} + F_{n2}) \quad (4)$$

其中， f 為摩擦係數。而這兩個機制決定了一對碰撞的能量耗損。值得一提的是，在接觸點上正向力一直為正向恢復力及阻尼力之總和， $F_n = F_{n1} + F_{n2}$ ，然側向力則為 F_{t1} 或 F_{t2} 較小的值。

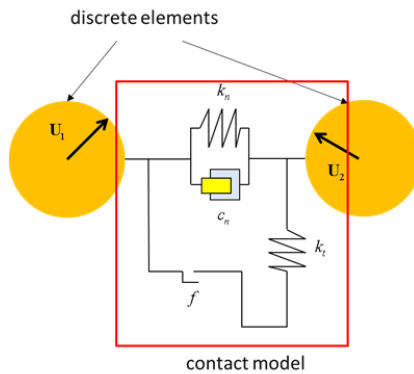


圖 1 軟球接觸模型示意圖

2.1 以晶格波茲曼法作為計算流體力學的方案

晶格波茲曼法 (Lattice Boltzmann method, LBM) 為一用來求解黏性流的數值方法，是基於氣體動力論的數值方法—Lattice Gas Automata (LGA) 演變而來。原本的 LGA 運用大量布林值判斷，用以計算氣體的運動行為，後來引入了波茲曼方程式 (Boltzmann Equation) 描述不同交互作用下之機率，進而演變成 LBM，用以求解高密度流體的連續運動行為。隨著各個領域研究的需要，這二十多年來，晶格波茲曼法發展得相當成熟，在計算流體力學有著相當廣泛的應用[4]。傳統的計算流體數值方法，例如有限元素法以及有限體積法，會將計算域劃分為等距或是非等距的固定網格，並以流場速度以及壓力來表達某一格點位置上的流體行為，在每一步時距中，根據 Navier-Stokes 方程式以及邊界條件，以迭代計算解偏微分方程式的方式，求得流場和壓力。可是迭代求解偏微分方程式時，迭代收斂速度會影響計算效率，尤其在壓力和速度耦合的 Navier-Stokes 方程式中，求解過程的收斂速度往往不甚理想。LBM 作為新一代高效能計算流體力學方案，最主要的原因是 LBM 不去求解矩陣代數方程式的問題，取而代之的，LBM 在每一個網格點使用虛擬的流體粒子，以分布函數 $f(\mathbf{r}, t, \xi)$ 來描述流體的組成，其中 t 為時間， \mathbf{r} 為座標位置向量， ξ 為流體粒子有限維度的速度向量(依演算法複雜程度而定)。然後以波茲曼方程描述分布函數 $f(\mathbf{r}, t, \xi)$ 在空間以及時間中的變化，再整體平均 (ensemble average) 分布函數於特定維度方向上的分量，以求得我們在計算流體力學中所關心的流場密度、速度以及壓力等等巨觀連續體變量。LBM 在計算上，僅用波茲曼方程式的 Collision 以及往晶格點有限維度方向的 Streaming 計算，就完成了一個時距的過程。若採用最單純且最廣泛應用的單鬆弛時間 (Single Relaxation Time, SRT) 運算，每一次的 Stream 過程只跟鄰近的格點交換資訊，則可避免掉過多的非局部 (non-local) 資訊交換，對於不同節點 (node) 的處理器，可以減少跨節點的資料查詢 (query)，計算效率自然提升，而以資料結構而論，相當適合於平行演算法的設計以及實作。

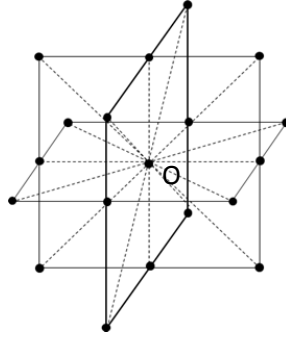


圖 2 D3Q15 的晶格模型，以 O 點為圓心，往周圍長出有限維度的向量空間作局部資訊交換

一般最常用的 LBM 為 SRT 和 D3Q15 (圖 2) 或 D3Q19 三維晶格，並導入 Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) 碰撞模型求解三維不可壓縮黏性流場，其方程式可以表為：

$$f_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\alpha}, t + \delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}^{(eq)}(\mathbf{r}, t)] \quad (5)$$

$$f_{\alpha}^{(eq)} = \rho w_{\alpha} \left(1 + \frac{3}{c^2} (\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2c^4} (\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) \right) \quad (6)$$

在實際計算流場隨著時間演進的狀態變化時，會將式(5)分為 Collision 以及 Streaming 兩個步驟來看，並以下式表示：

Collision step:

$$\tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{r}, t + \delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [f_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - f_{\alpha}^{(eq)}(\mathbf{r}, t)] \quad (7)$$

Streaming step:

$$f_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t + \delta t) = \tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{r}, t + \delta t) \quad (8)$$

其中式(7)的 \tilde{f}_{α} 為經過碰撞後流體粒子狀態的分佈函數 (post-collision)，然後在式(8)根據每個方向的碰撞速度把流場狀態的變化 streaming 到鄰近的晶格點。而流

體計算中所關心的密度 ρ 、及速度向量 \mathbf{u} ，則藉流場分布函式達成整體平均（ensemble average）：

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \quad (9)$$

$$\mathbf{u} = \left(\sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \right) / \rho \quad (10)$$

而流場的壓力則是藉由以下的狀態方程式求得：

$$p = \rho c_s^2 \quad (11)$$

式(11)的 $c_s = c/\sqrt{3}$ 是聲速，而 $c=1$ 或 $\sqrt{2}$ 為虛擬流體顆粒在晶格上運動的速度。於不可壓縮流場中， $c_s = 1/\sqrt{3}$ 。如同其他的計算流體力學數值方法，在進入下一個時距時，即採用現時距的速度和壓力條件作為下一步的初始條件，以此迭代下去，求得流體暫態的行為。

2.3 以沉浸邊界法解決複雜移動邊界之問題

傳統計算流體力學將固體邊界視為偏微分方程式的邊界條件，可是在探討多球體在黏性流中的動態行為時，流場中固體顆粒所形成的邊界必定會隨著時間改變位置，如此一來在每一個時距後都需要重新形成網格，以符合改變位置的邊界條件，並且在這個過程衍生新舊網格資料轉換等複雜的運算，尤其是當邊界為複雜幾何形狀時，偏微分方程式的求解難度將會大為增加。而固液二相顆粒流模擬除了隨時間改變的移動邊界外，還會遇到大量顆粒形成的多孔隙介質這種複雜形狀邊界以及三維的問題，直接將大量顆粒形成的固體邊界視為偏微分方程式的邊界條件，並非有效率的解決方案。

沉浸邊界法的提出就是要解決這樣複雜邊界的動態問題。其主要精神是將邊界對流體的影響，轉以外部力（external force）的形式加入到 Navier-Stokes 方程式中，這個外部力的大小及方向根據固體邊界與鄰近流場的相對速度求出，再依照邊界的幾何形狀，加入到相對應的流場格點。這時候受到外部力的流場會被強迫表現出如

同受到無滑移條件 (no-slip condition) 的行為，藉此達成邊界條件；因為這些固體邊界對流場並非真的是邊界條件，不再需要處理包含複雜邊界條件的偏微分方程式，流場步進過程僅需考慮外部力的變化，大幅提昇了計算效率[5]。在我們研究中，採用了文獻[6]的直接力法(direct forcing) IBM，該方法以體積分數函數 ϕ 在流場中描述固體顆粒的位置。如圖 3 所示，紅色線畫出了球體顆粒真實的形狀，而黃色部分為固體格點，設其 $\phi=1$ ，白色部分為流場格點，設其 $\phi=0$ ，而綠色部分為固液界面格點， $0 < \phi < 1$ ，確切的 ϕ 值則藉由圓球半徑跟一個各格點與球心絕對距離的線性函數求出。藉此 ϕ 函數，我們可以在流場晶格中描述圓球所在位置以及記錄其在流場中所佔有的晶格元素。而固體與流體的界面部份，則描述流場晶格中被固體顆粒影響的局部流場。

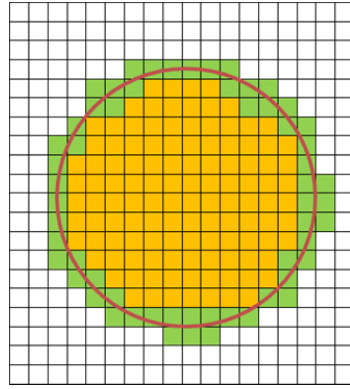


圖 3 以 volume fraction function 在均勻網格中描述圓球顆粒

在定義出固體邊界與流場後，為了使邊界的影響能夠被導入 LBM 內，我們會根據 ϕ 在每一個時距修改流場格點的分佈函數：

$$f_{\alpha}(\mathbf{r}, t^{n+1}) = [1 - \phi(\mathbf{r})]f_{\alpha}(\mathbf{r}, t^*) + \phi(\mathbf{r})f_{\alpha}^{(eq,*)}(\mathbf{r}, t^*) \quad (12)$$

這個時候整個流場就會因此表現出受到大量固體邊界影響的行為，而不用求解複雜邊界條件問題，達到極高的計算效率。

三、模擬案例討論：砂湧現象

土壤中的滲流現象，在土壤力學領域中是個被廣泛而且持續討論的議題[7]，該現象基於達西定律（Darcy's law）的假設或是其他被接受的經驗公式，定義了飽和土壤的滲透性係數。在許多土壤力學的實驗中，土壤整體的巨觀行為以及現象已經被研究得相當透徹，可是因為實驗量測儀器的限制，土壤顆粒尺度的微觀行為，特別是飽和土壤中的滲流及砂湧現象（quicksand）現象，人們目前仍難以直接從實驗得知。目前的了解，上滲流的水壓抵消了由重力造成的顆粒有效應力（此時的液壓差即為臨界壓差），顆粒失去與其他顆粒之間的有效應力，得以隨水流不斷地湧動著。然此為穩定砂湧時的力平衡，究竟何機制讓本來接觸靜止不動的砂堆開始鬆動進入大規模的砂湧，仍待進一步的研究。因此，本研究藉由電腦數值計算，直接模擬了流體在多孔隙顆粒介質中，向上滲流造成的砂湧現象（quicksand），從模擬的結果，我們可以得到從實驗難以量測或觀察的變化加以分析討論。

圖 4 為向上滲流的模擬配置，在四方盒中自然堆疊 3000 顆直徑 1 cm，密度 2.7 kg/m^3 的圓球顆粒，並在上下兩側給予兩個壓力邊界產生壓差，推動流體向上滲流。在模擬中，準備了幾個大於及小於臨界壓差 ($i_c = 0.987$) 的壓力梯度，試圖由下向上推動顆粒體。從模擬的結果可以看到在 $i = 1.02$ 的壓力梯度下，顆粒體在 9 秒以及 20 秒時，排列高度有很明顯的變化，根據這個現象我們可以先假設，顆粒在水壓的作用下，失去了重力造成的有效應力，因此被滲流水抬升了體積，跟著水流流動，形成類似砂湧的現象。

由 DEM 的計算結果，更讓我們可以觀測顆粒體內部相對應的有效應力。本研究將顆粒試體依照圖 4 上下等分為五層，每一層依據該層內所有顆粒的交互作用力，計算出該層平均的應力，並且取 ZZ 方向的應力作為有效應力 [8, 9]，在圖 6 中觀察其值如何隨深度及時間演變。可以看到在不同滲流水壓作用下，不同深度的顆粒群有效應力的變化。在滲流水壓大過臨界值 ($i_c = 0.987$) 的情況下，顆粒群的有效應力很明顯的降低，此時顆粒發生砂湧，也可以證明前面提到顆粒失去有效應力後整個滲流試體的外顯行為就是顆粒被抬升，並且跟著流體流動。

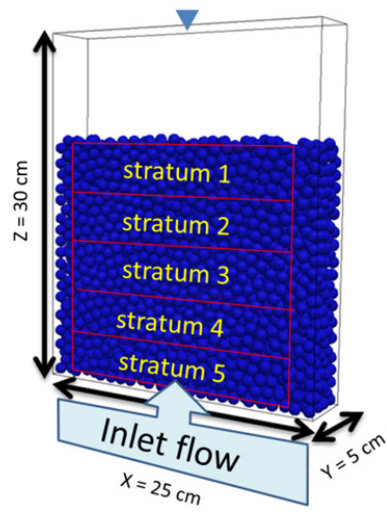


圖 4 滲流模擬的設置

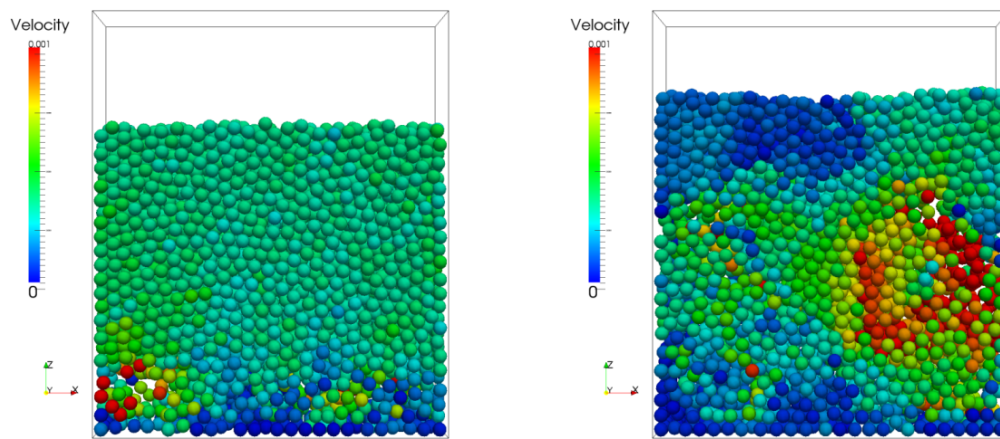


圖 5 在水力坡降 $i=1.012$ ，物理時間 9 秒（左）及 20 秒時的顆粒分佈狀況

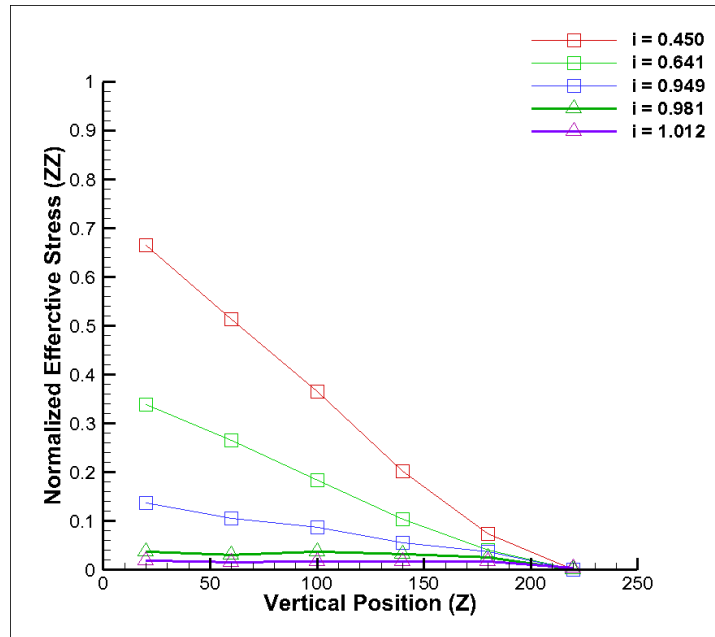


圖 6 物理時間 10 秒時不同水力坡降試體的有效應力分布，水力坡降 i 即為經過正規化的孔隙水壓

四、結論與未來展望

本研究整合 IBM、LBM 與 DEM 的模擬工具，有效率的對複雜幾何邊界形成的流場做出直接的數值模擬，並且保持相當高的計算效率及高解析度的顆粒與流場資訊，也實作了向上滲流的模擬，在重現砂湧現象的部份獲得不錯的成果。未來將再試圖改進模擬效率，同時在不嚴重影響計算效率的情況下，盡可能的提升模擬準確度，並且朝向更大尺度的案例模擬。本研究也將與實驗配合，透過模擬重現顆粒流實驗，並藉由比較模擬與實驗結果，及以模擬補足實驗之不足，期望能夠重現及探討自然與工程現象背後的二相顆粒流之力學機制，對自然災害防護做出貢獻。

參考文獻

- [1] Peskin, C.S. (1982), "The fluid dynamics of heart valves: experimental, theoretical, and computational methods," Ann. Rev. Fluid Mech., 14, 235-259.

- [2] Cundall, P.A. (1971), "A computer model for simulating progressive large scale movements in blocky rock systems," Proceedings of Symposium of International Society of Rock Mechanics. Nancy, France. Vol. 1, Paper II-8.
- [3] Yang, F.-L., Chang, W. T., Huang, Y. T., Hsieh, S. H., and Chen, C. S. (2010), "A new contact model for discrete element simulation of dry or immersed granular avalanches," (in preparation).
- [4] Chang, M-H. (2006), Viscous flow computations with Lattice Boltzmann method, Master Dissertation, National Cheng-Kung University, Tainan, Taiwan R.O.C., 95 pages.
- [5] Mittal, R., and Iaccarino, G. (2005), "Immersed boundary methods," *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 37, 239-261.
- [6] Lin, S.-Y., Lin, C.T., Chin, Y.-H., and Tai, Y.-H. (2010), "A direct-forcing pressure-based lattice Boltzmann method for solving fluid-particle interaction problems," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 66, pp. 648-670.
- [7] Das, Braja M. (1979) *Introduction to Soil Mechanics*. Ames: Iowa State University Press.
- [8] Mansouri, M., Delenne, J.-Y., El Youssoufi, M.S., and Seridi, A. (2009), "A 3D DEM-LBM approach for the assessment of the quick condition for sands," *C. R. Mecanique*, 337, pp. 675-681.
- [9] Itasca PFC3D manual. <<http://www.itascacg.com/pfc3d/>>. page 3-8, Section 3.4.4.