

國立臺灣大學工學院應用力學研究所



碩士論文

Institute of Applied Mechanics

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis

固液二相懸浮微粒問題之雙向耦合數值模式

A Two-way Coupled Eulerian-Lagrangian Model for
Suspension of Fine Particles in Liquid Flow.

古詩弘

Shih-Hong Gu

指導教授：周逸儒 博士

Advisor: Yi-Ju Chou, Ph.D.

中華民國 103 年 7 月

July, 2014

國立臺灣大學碩士學位論文
口試委員會審定書

固液二相懸浮問題之雙向耦合數值模式

A Two-way Coupled Eulerian-Lagrangian Model
for Suspension of Fine Particles in Liquid Flow

本論文係古詩弘君（學號：R01543074）在國立臺灣大學應用力學研究所完成之碩士學位論文，於民國 103 年 7 月 24 日承下列考試委員審查通過及口試及格，特此證明

口試委員：

周逸儒 周逸儒

(指導教授)

陳國慶 陳國慶

楊馥菱 楊馥菱

郭志禹 郭志禹

所 長 張家歐 張家歐

誌謝

時光飛逝，轉眼便要離開應力所了，雖然我初到實驗室時，成員僅不到五人，但短短兩年就已成長到近十人之多，很高興能見證這個研究團隊茁壯的過程，看到學長和學弟們認真的態度，相信實驗室日後的發展必定無可限量。

在這兩年的研究生涯中，首要感謝的是我的指導教授周逸儒博士，研究上遇到的任何問題，老師都會不厭其煩地替我解惑，同時亦會給予我獨立思考的空間。除了研究以外，處世的態度也受到老師很大的啟發，不畏懼和逃避所遭遇的困難，挺身面對並突破才能使自己再往前踏出一步。而實驗室的同伴們則是學習路上相互砥礪與扶持的好夥伴，不論是裕民和宗緯兩位學長，早一步畢業的聖堯，最後一起熬過口試的善合，還有鈐雍和育誠兩位學弟，都是這段學習過程中給予我許多幫助和鼓勵的人，期許大家日後都能走上各自理想的道路。另外，不可忘記的還有我的室友們，雖然幾乎只有晚上才碰得到面，但關係卻沒有因而疏離，週末悠閒的早午餐和每次都橋很久的寢聚都是難忘的回憶，恭喜大家都順利完成學位，希望日後踏入社會後能再出來聚一聚。最後，必須要感謝我的家人在我背後給予支持，當我忙得心力交瘁時，回家與家人團聚就能使我有動力繼續堅持下去，感謝你們時時刻刻給予我的鼓勵與關懷。

完成碩士學位後，緊接著便要步入社會了，雖然心中仍充滿著不安，但我相信秉著作研究的精神與態度，日後定能化解困難，找到自己的價值與目標。

中文摘要

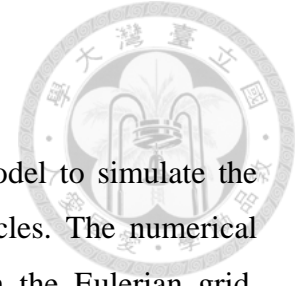


本研究主旨為開發雙向耦合之固液二相流數值模式，針對懸浮微粒的固液二相流進行模擬。在這套數值模式中，流體運動以 Navier–Stokes 方程式在尤拉網格上進行解析，顆粒運動則為牛頓第二運動定律輔以質點網格法來解析，並追蹤每個顆粒的動向。在處理顆粒移動時，本模式使用自行開發的顆粒傳輸系統，在尤拉網格上儲存顆粒資訊，並將顆粒的移動分成三個方向來進行，控制其在各方向的位移均不可超過一個網格的距離，故計算時僅需考慮前後各一個網格的資訊即可，使得網格間傳接顆粒及顆粒體積通量等計算流程得以大幅簡化。本研究另一主要目標為模擬有限體積顆粒之特性，為了描述顆粒體積所造成的影響，我們開發一套採用混合流體之不可壓縮性的二相映射法，修改波松方程式(Poisson's equation)的來源項以及求解方法。與現行採用流體不可壓縮性的固液模式相比，本模式更進一步捕捉到固體顆粒造成的體積效應，而為了建立完整的理論架構，我們將附加質量效應一併考慮進來。

我們以瑞利泰勒不穩定性(Rayleigh–Taylor instability)作為範例，改變顆粒直徑或初始濃度，分析混合層厚度的發展。接著將本研究的數值模式與傳統研究方法以顆粒自由沉降的模擬來進行比較，發現在高濃度的情況下，壓力耦合造成的影響十分顯著。為評估顆粒所造成的壓力是否佔有相當的分量，我們設定一特定範例，在壓力方程式中僅考慮顆粒的體積通量，並令流體保持靜止狀態。模擬結果顯示純顆粒流動引起之壓力與單相流的總動壓在同一值級內，說明顆粒體積效應的重要性。

關鍵字：固液二相流、數值直解法、雙向耦合、壓力耦合、瑞利泰勒不穩定性

ABSTRACT



This study presents a two-way coupled Eulerian-Lagrangian model to simulate the solid-liquid two-phase flow system with suspension of fine particles. The numerical model solves the momentum equations of carrier flow phase on the Eulerian grid. Particle motion is governed by Newton's second law and is solved with the particle-in-cell(PIC) method. We develop a three-dimensional particle transport algorithm, in which particle information is stored in the Eulerian grid. The particle motion is split into three directions of the Cartesian coordinate system, and particle movement at each computational time step is restricted to be within one cell in each direction. The algorithm significantly simplifies the calculation of particle motion and the resulting volume flux. To include the finite-size effect of particles, we develop a two-phase projection method that takes mixture incompressibility into account. The method modified both the source term and solver of Poisson-type pressure equation in the fractional-step incompressible flow calculation. Compared to existing models that only consider incompressibility of the carrier flow phase for dilute suspensions, the present model captures the volumetric effect of solid particles. In addition, in order to have a complete physical consideration, the present model takes the added mass into account.

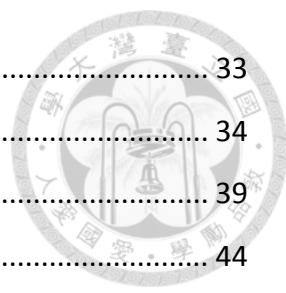
The model is then applied to study the RT instability induced by fine suspended particles. We analyze the thickness of mixing layer and examine the effect of particle size and concentration. Comparison between the present two-phase model and traditional solid-liquid model demonstrates that the influence of pressure coupling becomes important as the concentration increases. To assess the magnitude of the pressure-coupling effect induced by particles only, special cases that only account for particle flux are simulated. The results show that the pressure field induced by the volumetric effect of particles can be of the same order of magnitude of the single-phase pressure field, which demonstrates the importance of the volumetric effect of settling particles.

Keywords: Solid-liquid two-phase flow, DNS, Two-way coupling, Pressure coupling, Rayleigh-Taylor instability

總目錄



誌謝.....	i
中文摘要.....	ii
ABSTRACT.....	iii
總目錄.....	iv
圖目錄.....	vi
表目錄.....	viii
Chapter 1 緒論.....	1
1.1 研究動機.....	1
1.2 文獻回顧.....	2
1.3 本文內容概述.....	5
Chapter 2 理論與方法.....	7
2.1 統御方程式.....	7
2.2 顆粒傳輸系統.....	10
2.3 數值方法.....	13
2.3.1 數值直解法(Direct numerical simulation).....	13
2.3.2 顆粒運動方程式.....	15
2.3.3 質點網格法(Particle-in-cell).....	17
2.3.4 壓力耦合(Pressure coupling).....	18
2.4 數值模式之理論差異.....	26
Chapter 3 數值模式之基礎驗證.....	27
3.1 顆粒傳輸系統之校正.....	27
3.2 潛變流(CREEPING FLOW).....	29
3.2.1 顆粒自由沉降.....	30
3.2.2 不同顆粒直徑之差異比較.....	31
Chapter 4 物理現象探討.....	33



4.1	顆粒引起之瑞利泰勒不穩定性	33
4.1.1	不同初始濃度模擬	34
4.1.2	不同沉降速度模擬	39
4.2	壓力耦合效應之評估	44
4.3	顆粒引起之水平異重流	55
Chapter 5	結論與未來工作	57
5.1	結論	57
5.2	未來工作	59
參考文獻		60

圖目錄



圖 1-1 模擬方法與顆粒尺度之演進(Ferry and Balachandar, 2001).....	3
圖 1-2 流場中顆粒之體積分率隨時間的變化(Snider, 2001).....	3
圖 1-3 顆粒在流場中隨時間的散佈情況(Snider, 2001).....	4
圖 1-4 位能($\Delta PE = 1 - PE$)及動能($K_{xy}, K_z, K = K_{xy} + K_z$)隨時間的變化.....	5
圖 2-1 顆粒傳輸系統之計算流程.....	11
圖 2-2 壁面碰撞之示意圖.....	12
圖 2-3 一維網格示意圖.....	14
圖 2-4 線性插值法示意圖.....	17
圖 2-5 A_p 與時間之關係圖.....	20
圖 2-6 \tilde{A}_p 與時間之關係圖.....	21
圖 2-7 數值模式之計算流程.....	25
圖 3-1 顆粒在流場中之初始分佈.....	27
圖 3-2 顆粒散佈情形與流場之垂直速度分佈(a) 6s (b) 68s.....	28
圖 3-3 球體在潛變流中沉降之受力情況.....	29
圖 3-4 自由沉降實驗之顆粒初始分佈.....	30
圖 3-5 顆粒在潛變流中隨時間之沉降情形(a)10s (b)30s (c)60s.....	31
圖 3-6 不同顆粒直徑之沉降情形(a) 30s (b) 60s.....	32
圖 4-1 顆粒初始分佈情況.....	34
圖 4-2 顆粒散佈圖($\phi_0 = 0.0128$) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s.....	35
圖 4-3 流場之垂直速度場(z=0.02m) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s.....	35
圖 4-4 顆粒散佈情形($\phi_0 = 0.0512$) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s.....	37
圖 4-5 流場之垂直速度場(z=0.02m) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s.....	37
圖 4-6 混合層厚度之示意圖.....	38
圖 4-7 不同濃度之混合層厚度發展.....	38
圖 4-8 顆粒散佈圖($D_p = 240\mu\text{m}$) (a)t=0.4s (b)t=0.6s (c)t=0.8s.....	40
圖 4-9 流場之垂直速度場(z=0.02m) (a)t=0.4s (b)t=0.6s (c)t=0.8s.....	41
圖 4-10 顆粒散佈圖($D_p = 60\mu\text{m}$) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s.....	42

圖 4-11 流場之垂直速度場($z=0.02\text{m}$) (a) $t=0.4\text{s}$ (b) $t=0.8\text{s}$ (c) $t=1.2\text{s}$	42
圖 4-12 不同粒徑之混合層厚度發展.....	43
圖 4-13 顆粒初始分佈圖.....	45
圖 4-14 壓力耦合模式之顆粒散佈與流場垂直速度分佈($z=0.02\text{m}$).....	46
圖 4-15 顆粒體積分率之垂直分佈($t = 2\text{s}$)。.....	47
圖 4-16 壓力耦合模式之顆粒散佈與流場垂直速度($z=0.02\text{m}$).....	49
圖 4-17 顆粒體積分率之垂直分佈($t=1.2\text{s}$)。.....	50
圖 4-18 顆粒體積分率之垂直分佈($t=1.6\text{s}$).....	51
圖 4-19 顆粒體積分率之垂直分佈($t=1.9\text{s}$).....	52
圖 4-20 壓力耦合模式之壓力分佈($t = 1\text{s}$).....	52
圖 4-21 壓力耦合與純顆粒流動之壓力分佈($t=1\text{s}, \phi_0 = 0.0512$).....	53
圖 4-22 壓力耦合與純顆粒流動之壓力分佈($t=1\text{s}, \phi_0 = 0.0128$).....	54
圖 4-23 顆粒初始分佈.....	55
圖 4-24 流場速度(y 方向)與顆粒散佈隨時間之變化.....	56

表目錄

表 3-1 顆粒自由沉降實驗.....	30
表 3-2 不同粒徑之沉降實驗.....	31
表 4-1 中等濃度之 RT 不穩定性模擬.....	34
表 4-2 高濃度之 RT 不穩定性模擬.....	36
表 4-3 粒徑 240 μm 之 RT 不穩定性模擬.....	39
表 4-4 粒徑 60 μm 之 RT 不穩定性模擬.....	41
表 4-5 數值模式比較範例一($\phi_0 = 0.0128$).....	44
表 4-6 數值模式比較範例二($\phi_0 = 0.0512$).....	48
表 4-7 異重流模擬.....	55

Chapter 1 緒論




1.1 研究動機

二相流是自然界中常見的物理系統，在環境問題和工程應用等領域都有許多相關的研究。就相態的類型來分，以液氣系統、固氣系統及固液系統為研究大宗，由於考量到未來本實驗室的发展方向，故決定著重在固液系統方面的研究。我們關心的問題是懸浮微粒的固液二相流，顆粒的尺寸相對小，且顆粒與背景流體不會發生化學反應。

回顧過往二相流方面的研究文獻，我們可知此類問題主要有兩大研究領域，分別為 Turbulent dispersed multiphase flow(TDMF)及 Fluidization of gas-solid bed(FGSB)，就數值方法的发展而言，Balachandar and Eaton(2010)對前者有詳細的說明，而 van der Hoef et al.(2008)則對後者作統整性的介紹。此兩類領域所關心的問題各有不同，最大不同之處在於固體顆粒的尺寸及濃度。在 TDMF 的架構下，多數方法將顆粒視為「點顆粒」，亦即是不佔有體積(Elghobashi & Truesdell, 1993; Ferrante & Elghobashi, 2003; Eaton, 2009)，而流場的統御方程式與單相流相同，故此類研究著重在點顆粒給予的作用力對流場的影響，且以稀薄濃度的懸浮顆粒流問題為主。而在 FGSB 的架構下，主要由問題的尺度來決定適合的數值方法，若以 Eulerian-Lagrangian 架構的方法來處理實驗室尺度的問題，不解析顆粒周圍的流場變化已是大家所認可的假設，而本文亦屬於此範疇。此外，不同於 TDMF 的點顆粒假設，FGSB 將體積分率導入動量方程式中，以此來描述顆粒體積造成的影響，並採用適當的顆粒碰撞模式來解析顆粒碰撞及密堆積等現象(Patankar & Joseph, 2001; Apte et al. 2008)，此領域研究關心的是顆粒的運動，流場行為則相對不重要。

現今 FGSB 的固體懸浮二相流研究大多著重在固氣系統，而固液系統方面的研究則屈指可數。在固氣系統中，固態相和氣態相的密度差異甚大，使得固態相之動量方程式中的動壓梯度及附加質量，可以忽略不計。但反觀固液系統，固態相和液態相的密度均在同一值級內，故不適用固氣系統因密度差而忽略動壓梯度和附加質量的假設，我們認為有必要將其重新考慮進去。此外，傳統的固液系統



模式將流場中的顆粒視為不佔有體積的質點，因此流場的連續方程式僅需考慮流體的不可壓縮性，而在現今常用的 Navier–Stokes 方程式之數值演算法中，流體的不可壓縮性是求解壓力場所需的必要條件，我們認為傳統的研究方法對於二相流的描述不夠精確。流場中的顆粒應佔有體積，且顆粒的體積會對流場帶來影響，為實現顆粒體積所造成的影響，我們的作法是考慮混合流體的不可壓縮性，將兩相態的壓力方程式耦合在一起，亦即是「壓力耦合」。

在本研究開始之前，Chou et al.(2014)已先完成了 Eulerian-Eulerian 架構的固液系統模式，將液態相與固態相視為兩種不同的流體進行模擬。而考量到顆粒實為離散的個體，將其視為連體來模擬略為不夠精確，故本研究的主旨在開發 Eulerian-Lagrangian 架構的固液系統模式。

1.2 文獻回顧

過去十幾年來，已發展出許多種方法來模擬二相流的行為，Ferry and Balachandar(2001)指出，顆粒的尺度決定使用的模擬方法，如圖 1-1 所示，其中 τ_p 為顆粒弛豫時間，與顆粒的尺度有直接的關係。當顆粒尺寸非常微小時，可以忽略顆粒的慣性，將其視為流體的一部份，因此可將流場以非均勻密度的單相流來描述。而顆粒尺度更大時，已無法忽略顆粒的慣性，但仍可將顆粒群體視為一連體，即是 Eulerian 法。若顆粒再更大些，連體的假設已不再適用，必須將顆粒視為離散的個體來解析，則此為 Lagrangian 法。而在 Eulerian 與 Lagrangian 法之間，亦有另一種模擬方法，當顆粒尺度不適用連體假設，且顆粒數目過於龐大，則將數個顆粒以一個計算點來代替，此即 *super-particle* 法，雖可降低計算需求，但卻影響了精確度。最後，當顆粒大到一定程度之時，顆粒周圍的流場開始變得複雜，網格的解析度因而必須提高至小於顆粒尺度，以捕捉到顆粒周圍完整的流動特性，即是說將顆粒視為流場中的固定邊界，此法稱之為完全解析模式(*Fully Resolved Simulations*)。由於本實驗室大多探討的是含有懸浮微粒的固液二相流，且希望模擬的結果能有相當高的精確度，故採用 Lagrangian 法作為數值模式的基本架構，逐一追蹤並解析每個顆粒的行為。

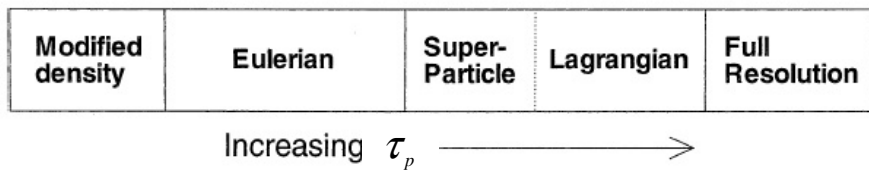


圖 1-1 模擬方法與顆粒尺度之演進(Ferry and Balachandar, 2001)

顆粒的動量方程式中，有些物理量難以直接就顆粒所在位置進行解析，故必須先在尤拉網格上解析該物理量，而後再內插至顆粒所在的位置，此作法的精神源自 F. H. Harlow (1971)提出的質點網格法。在固液二相流中使用質點網格法來輔助的作法已有許多先例，較知名的有 Andrews 與 O'Rourke(1996)提出的多相態質點網格法(Multiphase particle-in-cell method)，但僅適用於一維流場。而之後 D. M. Snider(2001)延續 Andrews 與 O'Rourke 的理論架構，並將其推廣至三維流場的應用。多相態質點網格法主要應用在處理顆粒的計算，它的作法是將適合在顆粒位置上計算的物理量，便直接在其位置上作計算。相反，難以直接在顆粒位置上計算的物理量，則將顆粒整體視為連體，仿照流體的作法，先在尤拉網格上計算，而後再將該物理量內插至各個顆粒的位置，其中顆粒間的作用力便是採用此作法。另外，他們的理論架構也與傳統的固液系統模式不同，在流體的統御方程式中引入了體積分率，換句話說便是考慮到了顆粒佔有體積的影響，且在顆粒的運動方程式中進一步加入了動壓及顆粒間的作用力，而他們所使用的顆粒碰撞模型十分強大，如圖 1-2 所示，顆粒沉降到後期達到了密堆積的效果。

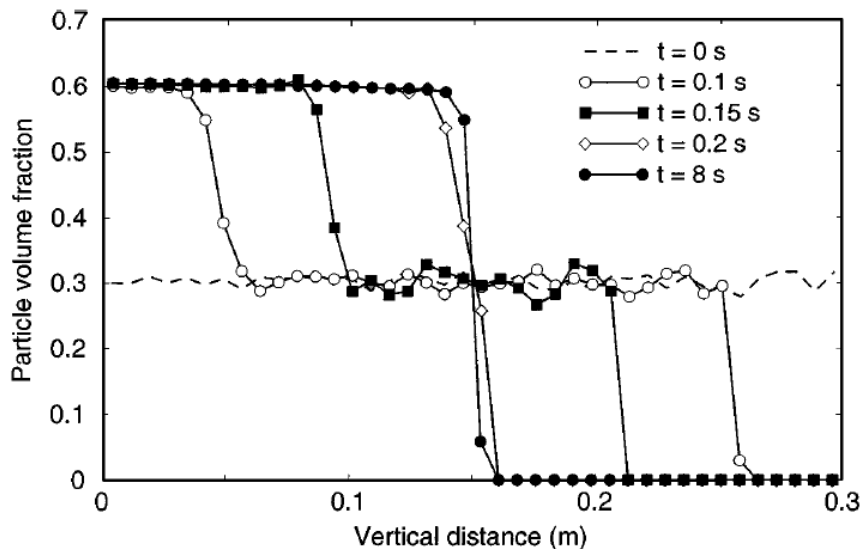


圖 1-2 流場中顆粒之體積分率隨時間的變化(Snider, 2001)

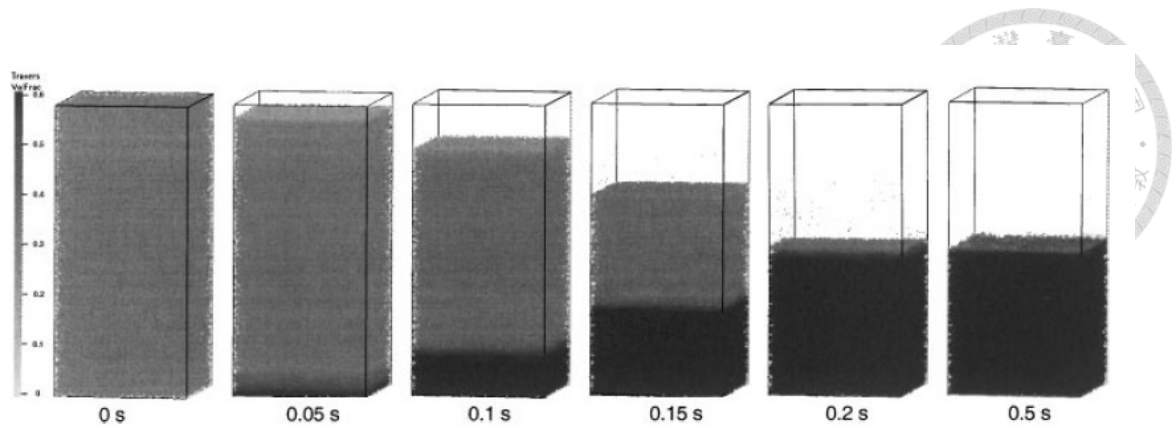


圖 1-3 顆粒在流場中隨時間的散佈情況(Snider, 2001)

前面所提的二相流之研究均是建立在 Eulerian-Lagrangian 法的架構上。而 Chou et al.(2014)提出了採用 Eulerian-Eulerian 架構的固液系統模式，亦即是將固液二相流視為有兩種流體共存的物理系統，而該研究與傳統 E-E 架構的固液系統模式有顯著的不同。首先，在理論的架構上，作者將以往所忽略的動壓及附加質量重新導入固態相的動量方程式，並將兩個相態的動量方程式表示成一個系統的形式，進而將附加質量力拆解，與其他作用力耦合。最後，考慮顆粒體積的影響，在固液二相的統御方程式中加入體積分率，且提出混合流體的不可壓縮性，將兩相態的壓力方程式耦合，即是前文所提的「壓力耦合」。考慮瑞利泰勒不穩定性過程中的能量變化，如圖 1-4 所示，在稀薄($\phi_0 = 0.0032$)及中等($\phi_0 = 0.0128$)濃度的情況下，壓力耦合與傳統方法的位能釋放差異並不顯著，但在高濃度($\phi_0 = 0.0512$)時，壓力耦合與傳統方法比較之下就有相當明顯的差異，我們認為是因為壓力耦合使得顆粒沉降速度變慢，故位能釋放率也隨之變緩。

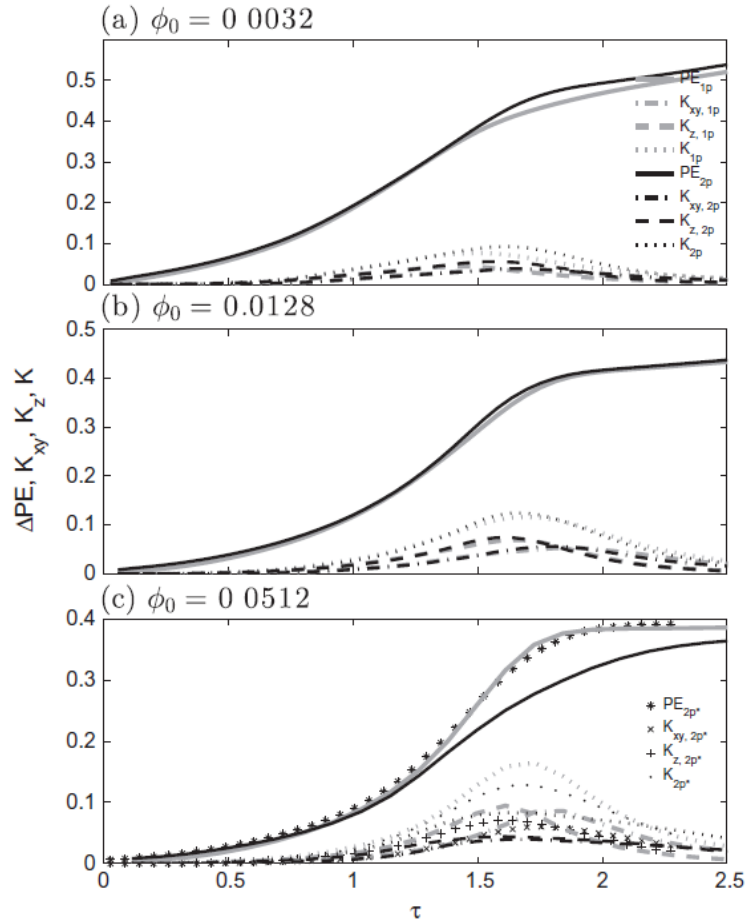
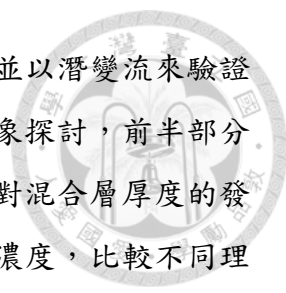


圖 1-4 位能($\Delta PE = 1 - PE$)及動能($K_{xy}, K_z, K = K_{xy} + K_z$)隨時間的變化。 ϕ_0 表示顆粒初始體積分率，下標 $2p$ 為壓力耦合模式， $1p$ 為單相架構模式， $2p^*$ 為傳統二相流模式。

1.3 本文內容概述

包含本章節，本文共有五章。第一章旨在說明研究動機與相關文獻的回顧，第二章為理論架構的建立與數值方法的說明，由於顆粒為離散之個體，故不適合以微分形式之統御方程式來描述，將顆粒的連續方程式以積分形式表示，而運動方程式則以牛頓第二運動定律表示，為保持一致性，我們亦將液態相的連續方程式及動量方程式以積分形式來表示。藉由附加質量及相態間之動量交換，我們將兩相態的動量方程式耦合成一個系統，並將附加質量拆解為其餘作用力的分量。數值方法主要分為顆粒傳輸系統、流體演算法、顆粒運動模擬及壓力耦合方程式四個部分，從統御方程式開始說明各項如何離散化及使用的離散方法。第三章為



數值模式的基礎驗證，以方腔流來進行顆粒傳輸系統的校正，並以潛變流來驗證顆粒的運動是否符合解析解。第四章為流體力學之基礎物理現象探討，前半部分以瑞利泰勒不穩定性為討論的主題，探討不同濃度或沉降速度對混合層厚度的發展有何影響，後半部分以顆粒自由沉降為範例，改變顆粒初始濃度，比較不同理論架構之數值模式的模擬結果。第五章為結論與未來工作，針對本研究之數值模式的建立、驗證及模擬結果分析並提出本文結論，對模式不足之處提出建議及可行之改善方案。



Chapter 2 理論與方法

本研究主要著重在懸浮微粒之固液二相流的問題，顆粒的直徑 $\leq O(150\mu\text{m})$ ，且與網格的尺度相比， D/d_p 在 $O(10)$ 之內，其中 D 為網格之邊長， d_p 為顆粒直徑。而顆粒之雷諾數小於80，滿足史托克流之條件，故可定義顆粒弛豫時間(particle relaxation time)為

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu}$$

其中 ρ_p 為顆粒密度， d_p 為顆粒直徑， μ 為水的動態黏滯係數。

傳統採用固氣系統架構的固液二相流模式，均因密度差的關係而將顆粒受到的動壓及附加質量忽略，然而該假設僅適用於密度差異甚大的問題，如固氣系統，故我們認為固液系統的模式應當將其重新考慮進去。另一方面，本研究亦考慮了相態間的動量交換，不僅是顆粒受到流體的影響，顆粒亦給予流體作用力，此即是「雙向耦合」。最後，在統御方程式中引入體積分率，將固液兩相之壓力方程式耦合，導出新的固液二相流之壓力方程式，即是「壓力耦合」。

本章內容將先進行理論架構的說明，即是統御方程式的推導過程。接著針對所使用的數值模式進行解說，包含統御方程式之離散化、內插方法及數值演算法。

2.1 統御方程式

二相流系統中液態相的統御方程式如下(Drew and Passman, 1998)

$$\frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \phi_c \rho_c \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \rho_c \mathbf{u}_c) = -\phi_c \rho_c \nabla p + \phi_c (\rho_c \nu \nabla^2 \mathbf{u}_c) + \phi_s \rho_p \mathbf{M}_{cd} \quad (2.2)$$

ϕ_c 為液態相之體積分率， \mathbf{u}_c 為流體速度， ϕ_s 為單一顆粒之體積分率， ρ_c 為液態相密度， ρ_p 為顆粒密度， p 為動壓，已先除以了 ρ_c ， ν 為流體的運動黏滯係數， \mathbf{M}_{cd}

為相態間之動量交換。而顆粒相的連續方程式及運動方程式(Maxey and Riley, 1983)如下所示

$$\frac{\partial \phi_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \phi_s) = 0 \quad (2.3)$$

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = 3\pi d_p \mu (\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p) - m_c \nabla p + C_{vm} m_c \left(\frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_p - \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} \right) + (m_p - m_c) \mathbf{g} \quad (2.4)$$

\mathbf{u}_p 為顆粒速度， m_p 為單一顆粒質量， $m_c = \rho_c \pi d_p^3 / 6$ 為流體質量， \mathbf{u}_{clp} 為顆粒所在位置的流體速度， $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{u}_c \cdot \nabla$ 表對流體的隨質導數。而(2.4)式的等號右側第一項為史托克阻力(Stokes' drag)，第二項為背景流場之動壓梯度，第三項為附加質量(Auton et al., 1988)，其中 C_{vm} 為附加質量係數，第四項為重力和浮力。接著將(2.4)式除以 m_p 整理後可得

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{18\mu(\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p)}{\rho_p d_p^2} + (1 - \frac{1}{s})\mathbf{g} - \frac{1}{s}\nabla p + \frac{C_{vm}}{s} \left(\frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_p - \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} \right) \quad (2.5)$$

其中 $s = \rho_p / \rho_c$ ，在此，我們將史托克阻力表示成通用的形式

$$\frac{18\mu(\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p)}{\rho_p d_p^2} = \frac{\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} \quad (2.6)$$

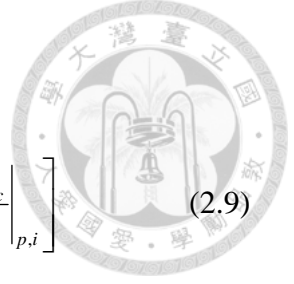
將(2.5)式等號右側的附加質量項拆解並移項後可得

$$\left(1 + \frac{C_{vm}}{s}\right) \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} + (1 - \frac{1}{s})\mathbf{g} - \frac{1}{s}\nabla p + \frac{C_{vm}}{s} \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_p \quad (2.7)$$

而由(2.5)式，我們可將相態間之動量交換表示成以下形式

$$\mathbf{M}_{cd} = - \sum_{i=1}^{N_p} \left[\frac{\mathbf{u}_{clp,i} - \mathbf{u}_{p_i}}{\tau_p} + \frac{C_{vm}}{s} \left(\frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_{p,i} - \frac{d\mathbf{u}_{p_i}}{dt} \right) \right] \quad (2.8)$$

其中，等號右側第一項為史托克阻力，第二項為附加質量力。而 $\sum_{i=1}^{N_p}$ 代表控制體積內顆粒給予流體的作用力之總和。將(2.8)式代入(2.2)式並除以 ρ_c 後可得



$$\begin{aligned}
& -C_{vm}\phi_s \sum_{i=1}^{N_p} \frac{d\mathbf{u}_{p,i}}{dt} + \frac{\partial \phi_c \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \mathbf{u}_c) \\
& = -\phi_c \nabla p + \phi_c (\nu \nabla^2 \mathbf{u}_c) - s\phi_s \sum_{i=1}^{N_p} \left[\frac{\mathbf{u}_{c|p,i} - \mathbf{u}_{p,i}}{\tau_p} + \frac{C_{vm}}{s} \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_{p,i} \right] \quad (2.9)
\end{aligned}$$

我們可將(2.7)式和(2.9)式改寫成一個耦合二相流系統，如下所示

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} 1 + \frac{C_{vm}}{s} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \ddots \\ -C_{vm}\phi_s & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d\mathbf{u}_{p,1}}{dt} \\ \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \mathbf{u}_c) \end{bmatrix} \\
& = \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{u}_{c|p,1} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} \\ \vdots \\ -s\phi_s \sum \frac{\mathbf{u}_{c|p} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{1}{s} \nabla p \\ \vdots \\ -\phi_c \nabla p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (1 - \frac{1}{s}) \mathbf{g} \\ \vdots \\ \phi_c \nu \nabla^2 \mathbf{u}_c \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{C_{vm}}{s} \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_{p,1} \\ \vdots \\ -\sum C_{vm}\phi_s \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_p \end{bmatrix} \quad (2.10)
\end{aligned}$$

而(2.10)式可再改寫成以下形式

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \frac{d\mathbf{u}_{p,1}}{dt} \\ \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \mathbf{u}_c) \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{u}_{c|p,1} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} \\ \vdots \\ -s\phi_s \sum \frac{\mathbf{u}_{c|p} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} \end{bmatrix} + A \begin{bmatrix} -\frac{1}{s} \nabla p \\ \vdots \\ -\phi_c \nabla p \end{bmatrix} \\
& \quad + A \begin{bmatrix} (1 - \frac{1}{s}) \mathbf{g} \\ \vdots \\ \phi_c \nu \nabla^2 \mathbf{u}_c \end{bmatrix} + A \begin{bmatrix} \frac{C_{vm}}{s} \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_{p,1} \\ \vdots \\ -\sum C_{vm}\phi_s \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_p \end{bmatrix} \quad (2.11)
\end{aligned}$$

其中矩陣 A 的形式如下

$$A = \begin{bmatrix} 1 + \frac{C_{vm}}{s} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \ddots \\ -C_{vm}\phi_s & \dots & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} & & 0 \\ & \ddots & \\ \frac{C_{vm}\phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

矩陣 A 的意義即是將附加質量的影響劃分成各作用力的貢獻。

顆粒潛沒在流體中運動，其所受的作用力並不僅止於(2.4)式所示，我們尚未將 Basset history force、Saffman lift、顆粒轉動及相互碰撞等因素考慮進去，目前僅先建立出模式的原型，故在此將其忽略。將(2.12)式代入(2.11)式展開後可得

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \left(\frac{1}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \right) \left[\frac{\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} + \left(1 - \frac{1}{s} \right) \mathbf{g} - \frac{1}{s} \nabla p + \frac{C_{vm}}{s} \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_p \right] \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_c \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \mathbf{u}_c) = \phi_c (\nu \nabla^2 \mathbf{u}_c) + \left(\frac{C_{vm} \phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} - s \phi_s \right) \sum \frac{\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} + \frac{C_{vm} \phi_d}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \left(1 - \frac{1}{s} \right) \mathbf{g} \\ + \left(\frac{C_{vm} \phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} - C_{vm} \phi_s \right) \sum \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \Big|_p - \left(\phi_c + \frac{C_{vm} \phi_d}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \right) \nabla p \end{aligned} \quad (2.14)$$

(2.13)式和(2.14)式即為本研究之固液系統模式所採用的動量方程式。在相態間之動量交換項中，除了先前相關研究已考慮的史托克阻力外，在此我們多加入了附加質量的影響，並透過反矩陣之運算，將附加質量力拆解成各作用力的貢獻。從(2.13)式可以發現，流體給予顆粒的附加質量效應，會隨著密度比(s)的增加而降低，在固氣二相流的問題中，固氣兩相態的密度比通常約是 $O(1000)$ ，故將固態相所受到的附加質量力忽略是合理之假設，但固液二相流則不適用。另一方面，由(2.14)式可以得知，液態相所受的附加質量力與固態相的體積分率息息相關，即是說隨著顆粒的數量增加，液態相受到來自固態相的附加質量力亦隨之增加。

2.2 顆粒傳輸系統

本研究採用 Lagrangian 描述法來解析顆粒的運動，即是將顆粒視為離散的個體，逐一追蹤顆粒的動向。因此，如何正確地在網格間傳遞顆粒，便是此數值模式的重點之一。

根據運動的獨立性，我們將顆粒的移動在卡氏座標上分成三個正交方向，而不同方向移動的先後順序沒有影響。將顆粒的移動拆成三次的原因在於，若控制顆粒移動不超過一個網格的距離，則每個網格在傳輸之時，只需考慮前後各一個網格的資訊，其計算方法如同 Eulerian 法的 Advection scheme，比起直接一次移動到定位的作法相對簡單許多。另一個考量則是，在後續計算的部分需要顆粒在控制表面上的通量，而分成三個方向移動較方便計算控制表面上通過的顆粒數目，進而求得顆粒的通量。

顆粒傳遞的本質其實就是網格間的資訊交換，若一顆粒將離開目前所在的網格，則必須將該顆粒的資訊傳遞至下個瞬間顆粒所停留的網格。反之，若顆粒移動後仍會停留在目前的網格，則必須保留該顆粒的資訊。當所有的顆粒都完成單一方向的移動之後，則所有的網格必須整理保留及接收的顆粒資訊，之後才進行下個方向的移動，整個系統的計算方法可以圖 2-1 簡述之。

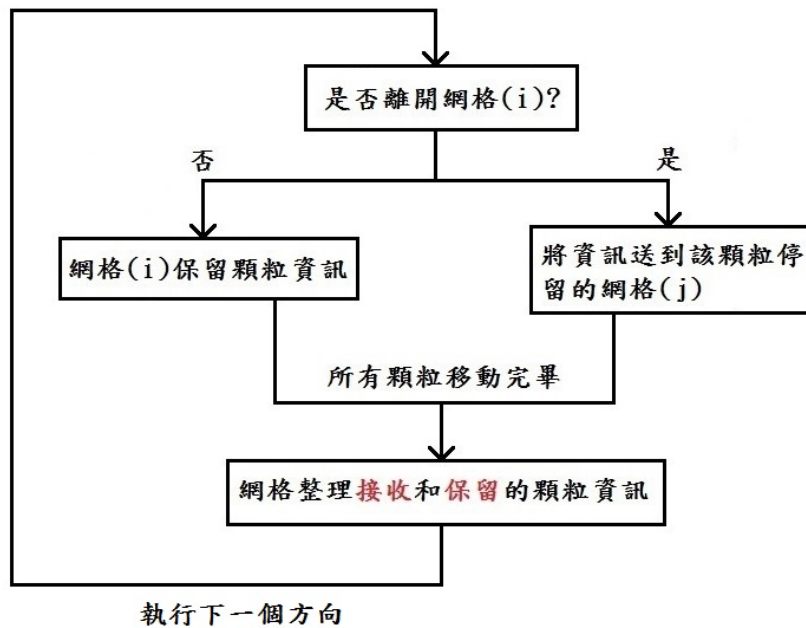


圖 2-1 顆粒傳輸系統之計算流程

顆粒的資訊包含了速度、位置及位移量。而顆粒位置的更新可由(2.15)式決定

$$\mathbf{x}_p^{n+1} = \mathbf{x}_p^n + \mathbf{u}_p^{n+1} \Delta t \quad (2.15)$$



我們藉由 $\mathbf{u}_p^{n+1} \Delta t$ 來判斷顆粒是否會離開目前的網格，由於顆粒的位移量會在開始傳輸前就先計算完畢，因此在顆粒傳輸的過程中，必須將位移的資訊一起跟著顆粒移動，以使用在另一個方向的傳輸上。

顆粒的邊界條件採用非彈性碰撞，因未找到相關的實驗數據，故先假定顆粒的恢復係數為 0.25。由於顆粒碰撞壁面後速度會改變，因此顆粒位置的更新方式必須稍作修正。

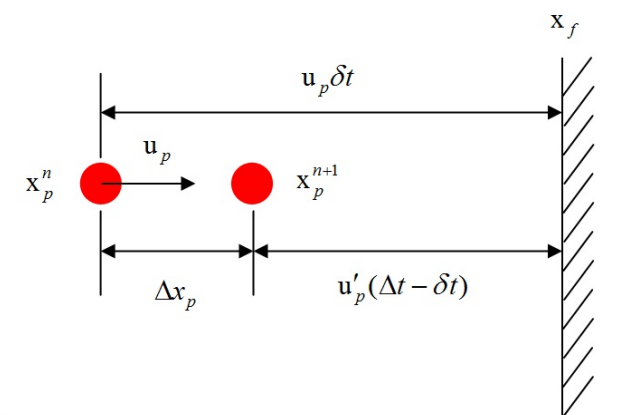


圖 2-2 壁面碰撞之示意圖

如圖 2-2 所示，在此以水平方向作為範例， x_f 為壁面位置， x_p^n 為碰撞前的顆粒位置， x_p^{n+1} 為碰撞後的顆粒位置， u_p 為碰撞前的水平速度， u'_p 為碰撞後的水平速度， Δt 為每一步計算的時間區間， δt 為顆粒到達壁面所需時間， Δx_p 為顆粒的位移。而 δt 可由(2.16)式求得

$$\delta t = \frac{x_f - x_p^n}{u_p} \quad (2.16)$$

而 $u'_p = -0.25u_p$ ，故顆粒反彈後移動的位移為

$$u'_p(\Delta t - \delta t) = -0.25u_p(\Delta t - \delta t) \quad (2.17)$$

則 Δx_p 可得

$$\Delta x_p = (x_f - x_p^n) + [u'_p(\Delta t - \delta t)] \quad (2.18)$$



求得 Δx_p 後，顆粒反彈後的位置 x_p^{n+1} 即是

$$x_p^{n+1} = x_p^n + \Delta x_p \quad (2.19)$$

顆粒傳輸系統的主程式部分是由周逸儒教授和研究助理石武融共同撰寫，程式的平行化和顆粒邊界條件則由本文作者完成。

2.3 數值方法

2.3.1 數值直解法(Direct numerical simulation)

本研究採用數值直解法來處理流體的計算，其核心演算法的名稱為映射法(Projection method)，是由 A. J. Chorin 於 1967 年提出。假設流體為不可壓縮流，其統御方程式為以下之形式

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_c = 0 \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}_c}{\partial t} + \mathbf{u}_c \cdot \nabla \mathbf{u}_c = -\frac{1}{\rho_c} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}_c \quad (2.21)$$

在(2.21)式中，重力項已和靜水壓平衡，而將其用分步法拆解後可得

$$\frac{\mathbf{u}_c^* - \mathbf{u}_c^n}{\Delta t} = -\mathbf{u}_c^n \cdot \nabla \mathbf{u}_c^n + \nu \nabla^2 \mathbf{u}_c^n \quad (2.22)$$

$$\frac{\mathbf{u}_c^{n+1} - \mathbf{u}_c^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho_c} \nabla p^{n+1} \quad (2.23)$$

其中 \mathbf{u}_c^n 代表目前的速度， \mathbf{u}_c^{n+1} 代表下一步的速度， \mathbf{u}_c^* 代表中間速度，為計算過程中的過渡產物。(2.22)式等號右方第一項為對流項，在本研究使用的數值模式中，對流項的時間離散部分，我們採用 Adam-Bashforth 法，其為二階精度的離散方法，而空間離散則是採用 QUICK，為三階精度的離散方法，如圖 2-3 所示，實線為網格中心處，即是純量和向量定義的位置，虛線則是網格的面。假設 Φ 為任意純量或物理量，若 \mathbf{u}_c 為 $+x$ 方向，則 Φ_e 可由 Φ_i 、 Φ_{i-1} 和 Φ_{i+1} 內插求得。反之，若 \mathbf{u}_c 為 $-x$ 方向，則 Φ_e 由 Φ_i 、 Φ_{i+1} 和 Φ_{i+2} 內插求得，此即是 QUICK 離散法之原理。第二項

為擴散項，在數值模式中，透過二階中央差分法，我們可用一個 $N_x \times N_y \times N_z$ 的矩陣來描述擴散項，其中 N_x 、 N_y 和 N_z 為三方向之網格個數。而本研究所使用的數值模式將該矩陣拆解成對角矩陣及非對角矩陣，其中對角矩陣採用 Crank–Nicolson 法來作時間離散，而非對角矩陣則採用 Adam-Bashforth 法作時間離散。

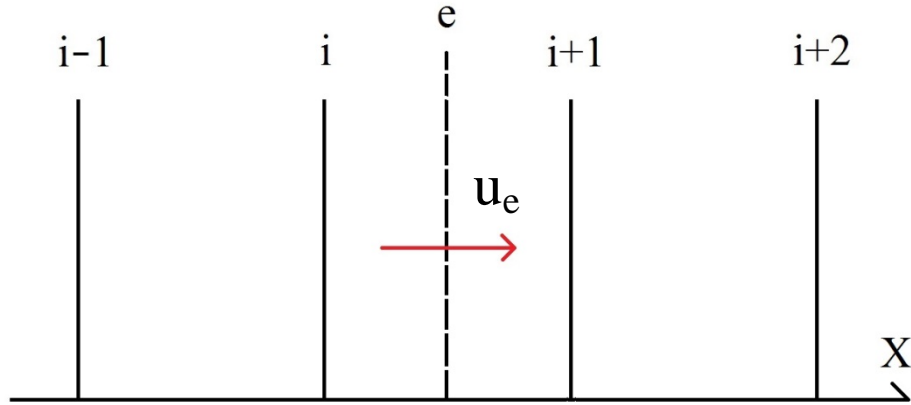


圖 2-3 一維網格示意圖

由(2.22)式解得 \mathbf{u}_c^* 後，將(2.23)式取散度後可得

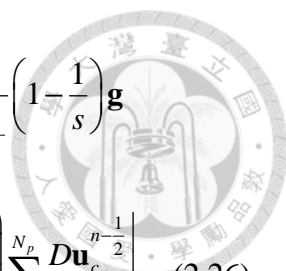
$$\nabla \cdot \mathbf{u}_c^{n+1} - \nabla \cdot \mathbf{u}_c^* = -\frac{\Delta t}{\rho_c} \nabla^2 p^{n+1} \quad (2.24)$$

而由於 $\nabla \cdot \mathbf{u}_c^{n+1}$ 滿足(2.20)式，故可得

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_c^* = \frac{\Delta t}{\rho_c} \nabla^2 p^{n+1} \quad (2.25)$$

由(2.24)式之波松方程式求得 p^{n+1} 後，將 \mathbf{u}_c^* 和 p^{n+1} 代入(2.23)式，即可求得 \mathbf{u}_c^{n+1} 。

映射法主要由三個步驟組成，由(2.22)式求得 \mathbf{u}_c^* 之過程稱為「預測步」，求解波松方程式為「壓力步」，最後將 \mathbf{u}_c^* 及 p^{n+1} 代入(2.23)式求得 \mathbf{u}_c^{n+1} 則為「修正步」。本研究所使用的流體演算法與原始映射法有些許不同之處，但兩者的計算原理仍是相同的。考慮一雙向耦合架構的二相流模式，我們將液態相的動量方程式以分步法拆解後可得



$$\begin{aligned} \frac{\phi_c^n \mathbf{u}_c^* - \phi_c^n \mathbf{u}_c^n}{\Delta t} = & \frac{3}{2}(C^n + D_E^n) - \frac{1}{2}(C^{n-1} + D_E^{n-1}) + \frac{1}{2}(D_I^{n+1} + D_I^n) + \frac{C_{vm} \phi_d^n}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \left(1 - \frac{1}{s}\right) \mathbf{g} \\ & + \left(\frac{C_{vm} \phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} - s \phi_s \right) \sum_{i=1}^{N_p} \frac{(\mathbf{u}_{clp,i}^n - \mathbf{u}_{p_i}^n)}{\tau_p} + \left(\frac{C_{vm} \phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \frac{C_{vm}}{s} - C_{vm} \phi_s \right) \sum_{i=1}^{N_p} \frac{D\mathbf{u}_c^{n-\frac{1}{2}}}{Dt} \Bigg|_p \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\frac{\phi_c^{n+1} \mathbf{u}_c^{n+1} - \phi_c^n \mathbf{u}_c^*}{\Delta t} = - \left(\phi_c^n + \frac{C_{vm} \phi_d^n}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \right) \nabla p^{n+1} \quad (2.27)$$

其中 C 為對流項， D_E 為擴散項之非對角矩陣部分， D_I 為擴散項之對角矩陣部分， ϕ_d 為網格內所有顆粒的體積分率。對於相態間之動量交換項，我們對其使用一階顯式法作時間離散，程式部分的作法是將當下網格內所有顆粒給予的作用力加總之後，將其與對流項和擴散項一同處理，解(2.26)式求得 \mathbf{u}_c^* 。而壓力場的解法與原始映射法相差甚大，必須與固態相耦合後再解析，待介紹完顆粒運動方程式的計算方法後會一同作說明。

由於在驗證數值模式的過程中，我們希望能有最完整的流場情況輔助，因此採用數值直解法來負責解析流場。本研究使用的數值直解法之原始碼是由 Zang et al.(1994)開發，可用曲線網格處理複雜邊界，且支援平行計算(Cui and Street, 2001)，後再根據我們的理論自行稍作修改而成。

2.3.2 顆粒運動方程式

2.3.1 節說明完數值直解法後，本節即是介紹顆粒運動方程式的數值方法。如(2.13)式，將顆粒運動方程式以分步法拆解並離散化後可得

$$\frac{\mathbf{u}_p^* - \mathbf{u}_p^n}{\Delta t} = \frac{1}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \frac{\mathbf{u}_{clp}^n - \mathbf{u}_p^n}{\tau_p} + \frac{1}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \left(1 - \frac{1}{s}\right) \mathbf{g} + \frac{1}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \frac{C_{vm}}{s} \frac{D\mathbf{u}_c^{n-\frac{1}{2}}}{Dt} \Bigg|_p \quad (2.28)$$

$$\frac{\mathbf{u}_p^{n+1} - \mathbf{u}_p^*}{\Delta t} = - \frac{1}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \frac{1}{s} \nabla p^{n+1} \quad (2.29)$$

其中 \mathbf{u}_{clp} 為顆粒所在位置的流體速度，(2.28)式即為顆粒相的預測步。

在(2.28)式中，除了 $\left. \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \right|_p$ 之外，其餘的物理量均可直接或經由內插來求得，

而若要求得 $\left. \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \right|_p$ ，則必須先找到與(2.2)式之慣性項的關係。將(2.2)式之慣性項除

以 ρ_c 後取單一方向之分量為

$$\frac{\partial \phi_c \mathbf{u}_{c_x}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \mathbf{u}_{c_x}) \quad (2.30)$$

將(2.30)式展開後可得

$$\mathbf{u}_{c_x} \frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \mathbf{u}_{c_x}}{\partial t} + \phi_c \mathbf{u}_{c_x} (\nabla \cdot \mathbf{u}_c) + \mathbf{u}_c \cdot (\nabla \phi_c \mathbf{u}_{c_x}) \quad (2.31)$$

而(2.31)式可再進一步展開得

$$\mathbf{u}_{c_x} \frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \phi_c \frac{\partial \mathbf{u}_{c_x}}{\partial t} + \phi_c \mathbf{u}_{c_x} (\nabla \cdot \mathbf{u}_c) + \mathbf{u}_c \cdot (\mathbf{u}_{c_x} \nabla \phi_c) + \mathbf{u}_c \cdot (\phi_c \nabla \mathbf{u}_{c_x}) \quad (2.32)$$

(2.32)式整理後為

$$\mathbf{u}_{c_x} \left[\frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \phi_c (\nabla \cdot \mathbf{u}_c) + \mathbf{u}_c \cdot \nabla \phi_c \right] + \phi_c \left[\frac{\partial \mathbf{u}_{c_x}}{\partial t} + \mathbf{u}_c \cdot \nabla \mathbf{u}_{c_x} \right] \quad (2.33)$$

其中(2.33)式之第一項滿足(2.1)式，故可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_c \mathbf{u}_{c_x}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \mathbf{u}_{c_x}) &= \phi_c \left[\frac{\partial \mathbf{u}_{c_x}}{\partial t} + \mathbf{u}_c \cdot \nabla \mathbf{u}_{c_x} \right] \\ &= \phi_c \frac{D\mathbf{u}_{c_x}}{Dt} \end{aligned} \quad (2.34)$$

將(2.34)式離散化後為

$$\frac{D\mathbf{u}_{c_x}^{\frac{n-1}{2}}}{Dt} = \frac{1}{\phi_c^n} \left[\frac{\phi_c^n \mathbf{u}_{c_x}^n - \phi_c^{n-1} \mathbf{u}_{c_x}^{n-1}}{\Delta t} + \frac{3}{2} C^n - \frac{1}{2} C^{n-1} \right] \quad (2.35)$$



而在(2.28)式中，史托克阻力項的 \mathbf{u}_{clp} 及附加質量項的 $\left. \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \right|_p$ 皆難以直接在顆粒的位置上計算，且若顆粒數目龐大，直接計算亦不是有效率的方法，故必須採用質點網格法來輔助，待 2.3.3 會再進一步說明。

2.3.3 質點網格法(Particle-in-cell)

本研究採用質點網格法的架構來輔助解析顆粒的運動，此方法的精神主要是將 Eulerian 和 Lagrangian 兩種描述法結合在一起，以我們的固液系統模式來說，便是在尤拉網格上解析離散的顆粒。

顆粒運動方程式中的史托克阻力、動壓梯度及附加質量都是難以直接在顆粒位置上解析的物理量，因此必須採用質點網格法的精神，先將前面所提的物理量在尤拉網格上作計算，再透過三線性插值法，內插出顆粒所在位置上的值。

在此以二維的情況來作說明，如圖 2-4 所示，黑點代表尤拉網格上純量及向量義的位置，紅點代表任意顆粒所在的位置。若 ψ 代表任意純量或向量，透過線性插值法，則 ψ_p 為

$$\psi_p = \left[\psi_1 \frac{f_x}{\Delta x} + \psi_2 \left(1 - \frac{f_x}{\Delta x} \right) \right] \frac{f_y}{\Delta y} + \left[\psi_3 \frac{f_x}{\Delta x} + \psi_4 \left(1 - \frac{f_x}{\Delta x} \right) \right] \left(1 - \frac{f_y}{\Delta y} \right) \quad (2.36)$$

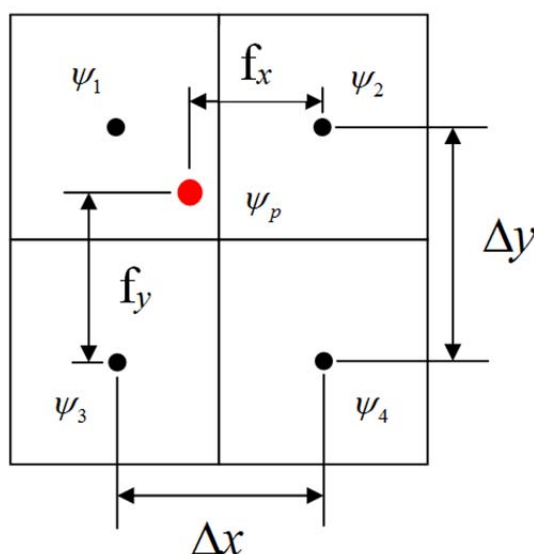


圖 2-4 線性插值法示意圖



2.3.4 壓力耦合(Pressure coupling)

此部分為本研究與傳統固液二相流研究差異最大之處，早期的固液系統模式都是將液態相和固態相分開處理，假設顆粒不佔有體積，亦即是「點顆粒」，解析流場時僅考慮液態相，也就是一般的純流體流場，之後在後處理部分解析顆粒在流場中的行為，並且不考慮顆粒給予流場的作用力，即所謂的「單向耦合」。

而之後有部分的研究開始考慮顆粒的體積所造成的影響，如文獻回顧提到的 Snider 便在液態相的統御方程式中引入「體積分率」，且考慮了顆粒對流體造成的作用力，即是前文提到的「雙向耦合」。

本研究承襲 Chou et al.(2014)的理論架構，除了在液態相的統御方程式中引入體積分率之外，還考慮了相態間之動量交換，即是雙向耦合。而我們認為顆粒體積的影響不僅只有前面所提，映射法在解析流場的壓力時，須求出控制表面上流過的體積通量，並以此作為波松方程式的來源項。傳統的研究方法均是僅考慮流體的體積通量，即是流體之不可壓縮性，然而控制表面上流過的不僅是只有流體，還有散佈在流場中的顆粒，所以我們認為不應該只考慮流體的體積通量，而是要考慮「混合流體的體積通量」，並以此將兩相態的壓力方程式耦合，即是前文所提的「壓力耦合」。如 2.1 節所提，固液二相流的連續方程式為

$$\frac{\partial \phi_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \phi_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p \phi_s) = 0 \quad (2.3)$$

而我們認為顆粒是離散的個體，故不適合以微分形式的連續方程式來描述，因此將(2.1)式和(2.3)式改寫成積分形式後為以下之形式

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{c.v.} \phi_c dV + \oint_{c.s.} \phi_c (\mathbf{u}_c \cdot \hat{\mathbf{n}}) dA = 0 \quad (2.37)$$

$$\sum_{i=1}^{N_p} \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{c.v.} \phi_s dV + \oint_{c.s.} \phi_s (\mathbf{u}_p \cdot \hat{\mathbf{n}}) dA \right) = 0 \quad (2.38)$$

將(2.37)式及(2.38)式離散化後可得

$$\frac{\phi_c^{n+1} - \phi_c^n}{\Delta t} \nabla + \sum_{j=1}^N \phi_{c_j}^n \mathbf{u}_{c_j}^n A_j = 0 \quad (2.39)$$

$$\frac{N_p^{n+1} \phi_s^{n+1} - N_p^n \phi_s^n}{\Delta t} \nabla + \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^n \mathbf{u}_{p_i}^n A_j \right) = 0 \quad (2.40)$$

其中 ϕ_{c_j} 為控制表面上流體的面積分率， \mathbf{u}_{c_j} 為流過控制表面的流體速度， A_j 為控制表面之面積， N_p 為控制體積內的顆粒數目， N_s 為通過控制表面的顆粒數目， ϕ_{p_i} 為控制表面上單一顆粒的面積分率。而由於 $\phi_c + N_p \phi_s = 1$ ，故(2.39)式及(2.40)式相加後可得

$$\sum_{j=1}^N \phi_{c_j}^n \mathbf{u}_{c_j}^n A_j + \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^n \mathbf{u}_{p_i}^n A_j \right) = 0 \quad (2.41)$$

我們將(2.41)式稱之為混合流體的不可壓縮性。

承接 2.3.1 及 2.3.2，由預測步求得 \mathbf{u}_c^* 和 \mathbf{u}_p^* 後，本節進一步說明如何求解壓力場。固液系統的壓力方程式如下

$$\frac{\phi_c^{n+1} \mathbf{u}_c^{n+1} - \phi_c^n \mathbf{u}_c^*}{\Delta t} = - \left(\phi_c^n + \frac{C_{vm} \phi_d^n}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \right) \nabla p^{n+1} \quad (2.27)$$

$$\frac{\mathbf{u}_p^{n+1} - \mathbf{u}_p^*}{\Delta t} = - \frac{1}{s + C_{vm}} \nabla p^{n+1} \quad (2.29)$$

將(2.29)式乘上 ϕ_s 後與(2.27)式一同取散度並代入高斯散度定理可得

$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \phi_{c_j}^{n+1} \mathbf{u}_{c_j}^{n+1} A_j - \frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \phi_{c_j}^* \mathbf{u}_{c_j}^* A_j = - \frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left(\phi_{c_j}^* + \frac{C_{vm}}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^* \right) \nabla p^{n+1} A_j \quad (2.41)$$

$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^{n+1} \mathbf{u}_{p_i}^{n+1} A_j \right) - \frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^* \mathbf{u}_{p_i}^* A_j \right) = - \frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{s + C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^* \right) \nabla p^{n+1} A_j \quad (2.42)$$





其中 ∇ 為網格的體積， ϕ_{d_j} 為控制表面上所有顆粒的面積分率， A_j 為控制表面之面積。接著將(2.41)式及(2.42)式相加後可得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\phi_{c_j}^{n+1} \mathbf{u}_{c_j}^{n+1} A_j + \left(\sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^{n+1} \mathbf{u}_{p_i}^{n+1} A_j \right) \right] - \frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\phi_{c_j}^* \mathbf{u}_{c_j}^* A_j + \left(\sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^* \mathbf{u}_{p_i}^* A_j \right) \right] \\ &= -\frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left(\phi_{c_j}^n + \frac{C_{vm}}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^* + \frac{1}{s + C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^* \right) \nabla p^{n+1} A_j \quad (2.43) \end{aligned}$$

由於(2.43)式必須滿足(2.41)式，故(2.43)式可改寫為

$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\phi_{c_j}^* \mathbf{u}_{c_j}^* A_j + \left(\sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^* \mathbf{u}_{p_i}^* A_j \right) \right] = \frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\phi_{c_j}^n + \left(\frac{sC_{vm} + 1}{s + C_{vm}} \right) \sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_i}^* \right] \nabla p^{n+1} A_j \quad (2.44)$$

由於顆粒是離散的個體，故不像流體是連續性地流過控制表面，所以顆粒體積通量的計算方式與流體稍有不同。若將單一顆粒在控制表面上的截面積以 $A_p(t)$ 來表示，如圖 2-5 所示，則 Δt 時間內顆粒通過的體積 ∇_{pass} 為

$$\nabla_{pass} = \int_{\delta\tau} A_p(t) \mathbf{u}_p^* dt + \int_{\Delta t - \delta\tau} \mathbf{0} \cdot \mathbf{u}_p^* dt \quad (2.45)$$

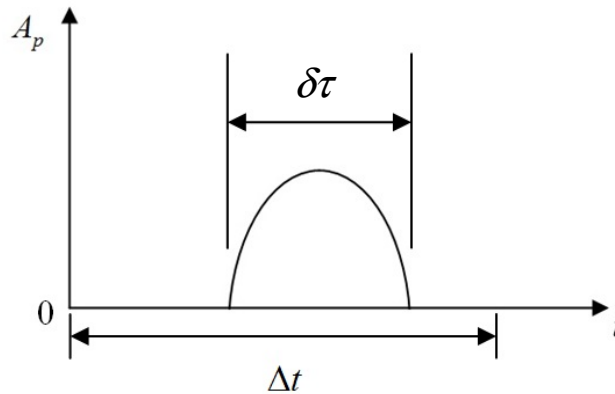


圖 2-5 A_p 與時間之關係圖

其中 \mathbf{u}_p^* 代表顆粒之中間速度，在 Δt 時間內為常數， $\delta\tau$ 為顆粒通過控制表面所需時間。而我們可將 $A_p(t)$ 非零的部分取時間平均後以 \tilde{A}_p 表示之，如圖 2-6，其數學形式如(2.46)式



$$\tilde{A}_p = \frac{\int_{\delta\tau} A_p(t) dt}{\delta\tau} \quad (2.46)$$

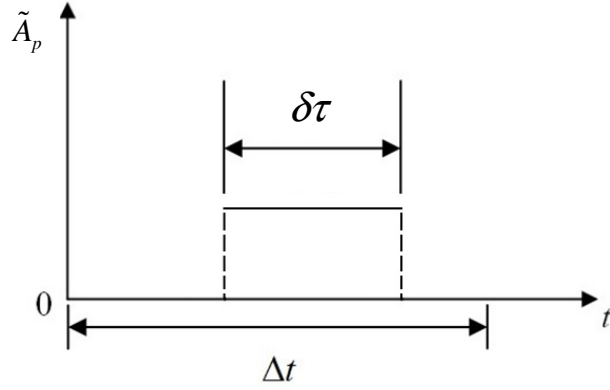


圖 2-6 \tilde{A}_p 與時間之關係圖

故 ∇_{pass} 可表示成以下之形式

$$\nabla_{pass} = \tilde{A}_p u_p^* \delta\tau \quad (2.47)$$

而(2.44)式中的 $\phi_{p_i}^*$ 及 $\phi_{c_j}^*$ 則可表示成以下之形式

$$\phi_{p_i}^* = \frac{\tilde{A}_{p_i}}{A_j} \quad (2.48)$$

$$\phi_{c_j}^* = \frac{1 - \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i}}{A_j} \quad (2.49)$$

將(2.48)式及(2.49)式代入(2.44)式，並對時間積分

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\int_{\Delta t} \left(A_j - \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} \right) u_{c_j}^* dt + \int_{\Delta t} \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} u_{p_i}^* dt \right] \\ & = \frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{\Delta t} \left[\left(A_j - \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} \right) + \left(\frac{sC_{vm} + 1}{s + C_{vm}} \right) \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} \right] \nabla p^{n+1} dt \right\} \quad (2.50) \end{aligned}$$



而(2.50)式之等號左側可再整理成

$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\int_{\Delta t} A_j \mathbf{u}_{c_j}^* dt + \int_{\Delta t} \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} (\mathbf{u}_{p_i}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) dt \right] = RHS \quad (2.51)$$

其中，將(2.51)式等號左側第一項積分後可得

$$\int_{\Delta t} A_j \mathbf{u}_{c_j}^* dt = \mathbf{u}_{c_j}^* A_j \Delta t \quad (2.52)$$

而第二項則可展開成

$$\int_{\Delta t} \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} (\mathbf{u}_{p_i}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) dt = \int_{\Delta t} \left[\tilde{A}_{p_1} (\mathbf{u}_{p_1}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) + \tilde{A}_{p_2} (\mathbf{u}_{p_2}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) + \dots \right] dt \quad (2.53)$$

將(2.53)式積分後可得

$$\int_{\Delta t} \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} (\mathbf{u}_{p_i}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) dt = \tilde{A}_{p_1} (\mathbf{u}_{p_1}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) \delta \tau_1 + \tilde{A}_{p_2} (\mathbf{u}_{p_2}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) \delta \tau_2 + \dots \quad (2.54)$$

再將(2.47)式代入(2.54)式後可得

$$\int_{\Delta t} \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} (\mathbf{u}_{p_i}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) dt = \frac{\nabla_{pass_1}}{\mathbf{u}_{p_1}^*} (\mathbf{u}_{p_1}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) + \frac{\nabla_{pass_2}}{\mathbf{u}_{p_2}^*} (\mathbf{u}_{p_2}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) + \dots \quad (2.55)$$

由(2.52)式及(2.55)式求得控制表面上流過的總體積後，代入(2.51)式可得

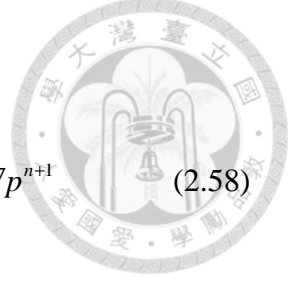
$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\mathbf{u}_{c_j}^* A_j \Delta t + \frac{\nabla_{pass_1}}{\mathbf{u}_{p_1}^*} (\mathbf{u}_{p_1}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) + \frac{\nabla_{pass_2}}{\mathbf{u}_{p_2}^*} (\mathbf{u}_{p_2}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) + \dots \right] = RHS \quad (2.56)$$

而(2.50)式之等號右側可整理成

$$LHS = \frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{\Delta t} \left[A_j + \frac{(1-s)(1-C_{vm})}{s+C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \tilde{A}_{p_i} \right] dt \right\} \nabla p^{n+1} \quad (2.57)$$

將(2.57)式括號內之積分拆解可得

$$LHS = \frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{\Delta t} A_j dt + \frac{(1-s)(1-C_{vm})}{s+C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \int_{\Delta t} \tilde{A}_{p_i} dt \right\} \nabla p^{n+1} \quad (2.58)$$



由(2.46)式及(2.47)式可知

$$\int_{\Delta t} \tilde{A}_{p_i} dt = \frac{\nabla_{pass_i}}{\mathbf{u}_{p_i}^*} \quad (2.59)$$

將(2.59)式代入(2.58)式整理可得

$$LHS = \frac{\Delta t^2}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[1 + \frac{(1-s)(1-C_{vm})}{s+C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\nabla_{pass_i}}{\mathbf{u}_{p_i}^* A_j \Delta t} \right] \nabla p^{n+1} A_j \quad (2.60)$$

再將(2.56)式及(2.60)式整理可得

$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\mathbf{u}_{c_j}^* A_j \Delta t + \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\nabla_{pass_i}}{\mathbf{u}_{p_i}^*} (\mathbf{u}_{p_i}^* - \mathbf{u}_{c_j}^*) \right] = \frac{\Delta t^2}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[1 + \frac{(1-s)(1-C_{vm})}{s+C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\nabla_{pass_i}}{\mathbf{u}_{p_i}^* A_j \Delta t} \right] \nabla p^{n+1} A_j \quad (2.61)$$

(2.61)式即為本研究之固液系統模式的壓力方程式。

我們考慮到顆粒是分三次移動，因此在求解壓力場時，無法同原始之映射法那般，求出所有控制表面上的通量總和，並且解一次波松方程式即可。本研究的作法是先以流體造成的體積通量解一次壓力場，並且作一次修正步與顆粒傳輸。接著讓顆粒移動一個方向後，計算出該方向的顆粒體積通量，然後解一次動壓方程式，以求出的壓力作一次修正步，接著再繼續移動顆粒，依此類推，共解四次壓力方程式，即是將(2.56)式拆解如下所示

$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \mathbf{u}_{c_j}^* A_j = \frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\phi_{c_j}^n + \frac{(sC_{vm}+1)}{s+C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_j}^n \right] \nabla p_1^{n+1} \quad (2.62)$$

$$\text{Flux}_{px} = \frac{\Delta t^2}{\nabla} \sum_{j=1}^N \Psi \nabla p_2^{n+1} \quad (2.63)$$



$$\text{Flux}_{py} = \frac{\Delta t^2}{\nabla} \sum_{j=1}^N \Psi \nabla p_3^{n+1} \quad (2.64)$$

$$\text{Flux}_{pz} = \frac{\Delta t^2}{\nabla} \sum_{j=1}^N \Psi \nabla p_4^{n+1} \quad (2.65)$$

其中

$$\Psi = 1 + \frac{(1-s)(1-C_{vm})}{s+C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\nabla_{pass_i}}{\mathbf{u}_{p_i}^* A_j \Delta t} \quad (2.66)$$

由於每解一次壓力方程式時，顆粒的位置都會隨之改變，因此必須即時作修正步的處理，液態相也必須一同作修正，若以一維的情況來說明，即是將(2.27)式及(2.29)式再拆解如下

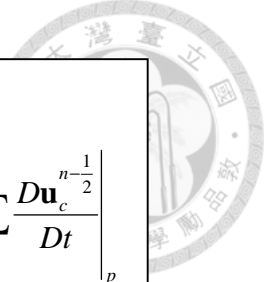
$$\mathbf{u}_c^{**} = \frac{\phi_c^n}{\phi_c^{**}} \mathbf{u}_c^* - \frac{\Delta t}{\phi_c^{**}} \left(\phi_c^n + \frac{C_{vm} \phi_d^n}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \right) \nabla p_1^{n+1} \quad (2.67)$$

$$\mathbf{u}_c^{n+1} = \frac{\phi_c^{**}}{\phi_c^{n+1}} \mathbf{u}_c^{**} - \frac{\Delta t}{\phi_c^{n+1}} \left(\phi_c^n + \frac{C_{vm} \phi_d^n}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \right) \nabla p_2^{n+1} \quad (2.68)$$

$$\mathbf{u}_p^{**} = \mathbf{u}_p^* - \frac{\Delta t}{s+C_{vm}} \nabla p_1^{n+1} \quad (2.69)$$

$$\mathbf{u}_p^{n+1} = \mathbf{u}_p^{**} - \frac{\Delta t}{s+C_{vm}} \nabla p_2^{n+1} \quad (2.70)$$

由(2.69)式先求得 \mathbf{u}_p^{**} 之後，進行一次顆粒傳輸，之後便可求得 ϕ_c^{**} ，再將 \mathbf{u}_c^* 、 p_1^{n+1} 及 ϕ_c^{**} 代入(2.67)式以求得 \mathbf{u}_c^{**} ，依此類推，最後即可求得 \mathbf{u}_c^{n+1} 及 \mathbf{u}_p^{n+1} 。本研究之數值模式的計算流程可見圖 2-7。



計算相態間之動量交換

$$\mathbf{M}_{cd} = \left(\frac{C_{vm}\phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} - s\phi_s \right) \sum \frac{\mathbf{u}_{c|p}^n - \mathbf{u}_f^n}{\tau_p} + \left(\frac{C_{vm}\phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} - C_{vm}\phi_s \right) \sum \frac{D\mathbf{u}_c^{n-\frac{1}{2}}}{Dt} \Big|_p$$

預測步

$$\frac{\phi_c^n \mathbf{u}_c^* - \phi_c^n \mathbf{u}_c^n}{\Delta t} = C + D + \frac{C_{vm}\phi_d^n}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \left(1 - \frac{1}{s} \right) \mathbf{g} + \mathbf{M}_{cd}$$

$$\frac{\mathbf{u}_p^* - \mathbf{u}_p^n}{\Delta t} = \frac{1}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \left[\frac{\mathbf{u}_{c|p}^n - \mathbf{u}_p^n}{\tau_p} + \left(1 - \frac{1}{s} \right) \mathbf{g} + \frac{C_{vm}}{s} \frac{D\mathbf{u}_c^{n-\frac{1}{2}}}{Dt} \Big|_p \right]$$

求得控制表面上的體積通量

$$\mathbf{u}_c^* A \Delta t + \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\nabla_{pass_i}}{\mathbf{u}_{p_i}^*} (\mathbf{u}_{p_i}^* - \mathbf{u}_c^*)$$

解單相流來源的壓力場

$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \mathbf{u}_{c_j}^* A_j = \frac{\Delta t}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[\phi_{c_j}^n + \frac{(sC_{vm} + 1)}{s + C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \phi_{p_j}^n \right] \nabla p^{n+1}$$

修正步

$$\mathbf{u}_c^{**} = \frac{\phi_c^n}{\phi_c^{**}} \mathbf{u}_c^* - \frac{\Delta t}{\phi_c^{**}} \left(\phi_c^n + \frac{C_{vm}\phi_d^n}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \right) \nabla p^{n+1}$$

$$\mathbf{u}_p^{**} = \mathbf{u}_p^* - \frac{\Delta t}{s + C_{vm}} \nabla p^{n+1}$$

解顆粒通量造成的壓力場

$$Flux_p = \frac{\Delta t^2}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[1 + \frac{(1-s)(1-C_{vm})}{s + C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\nabla_{pass_i}}{\mathbf{u}_{p_i}^*} A_j \Delta t \right] \nabla p^{n+1} A_j$$

進行顆粒傳輸

執行下一個
方向

完成三個方向

Next time step

圖 2-7 數值模式之計算流程



2.4 數值模式之理論差異

前文說明完本研究的數值模式後，本節將說明三種不同理論架構的固液系統模式，其分別為傳統固液系統模式、附加質量耦合模式及壓力耦合模式。此三者之差異主要為統御方程式的不同，傳統固液系統模式在顆粒的運動方程式中僅考慮慣性力、史托克阻力及重力的平衡，如(2.71)式，(2.72)式則為液態相的動量方程式，在雙向耦合的架構下，加入相態間之動量交換項，來源主要為史托克阻力。

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} + \left(1 - \frac{1}{s}\right)\mathbf{g} \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial \phi_c \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \mathbf{u}_c) = -\phi_c \nabla p + \phi_c (\nu \nabla^2 \mathbf{u}_c) + s \phi_s \sum_{i=1}^{N_p} \frac{(\mathbf{u}_{clp,i} - \mathbf{u}_{p_i})}{\tau_p} \quad (2.72)$$

附加質量耦合模式則是基於傳統固液系統模式的理論，將以往因採用固氣系統假設而忽略的附加質量效應考慮進去，並藉由相態間之動量交換，將顆粒運動方程式與液態相的動量方程式耦合，透過反矩陣的操作，進一步將附加質量力拆解為各作用力的分量，如(2.73)式及(2.74)式所示

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_c \mathbf{u}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_c \phi_c \mathbf{u}_c) = & -\phi_c \nabla p + \phi_c \nu \nabla^2 \mathbf{u}_c + \frac{C_{vm} \phi_d}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \left(1 - \frac{1}{s}\right) \mathbf{g} \\ & + \left(\frac{C_{vm} \phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} - s \phi_s \right) \sum_{i=1}^{N_p} \frac{(\mathbf{u}_{clp,i} - \mathbf{u}_{p_i})}{\tau_p} + \left(\frac{C_{vm} \phi_s}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \frac{C_{vm}}{s} - C_{vm} \phi_s \right) \sum_{i=1}^{N_p} \frac{D\mathbf{u}_c^{n-\frac{1}{2}}}{Dt} \Bigg|_p \end{aligned} \quad (2.73)$$

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{1}{1 + \frac{C_{vm}}{s}} \left[\frac{\mathbf{u}_{clp} - \mathbf{u}_p}{\tau_p} + \left(1 - \frac{1}{s}\right) \mathbf{g} + \frac{C_{vm}}{s} \frac{D\mathbf{u}_c^{n-\frac{1}{2}}}{Dt} \Bigg|_p \right] \quad (2.74)$$

最後為本文之主題—壓力耦合模式，延續附加質量耦合模式的理論架構，更進一步在顆粒運動方程式中考慮動壓的影響。在求解壓力時，導入混合流體之不可壓縮性，將兩相態的壓力方程式耦合，如(2.13)式及(2.14)式。第四章將以顆粒自由沉降作為範例，比較此三種模式之模擬結果。

Chapter 3 數值模式之基礎驗證



3.1 顆粒傳輸系統之校正

顆粒傳輸為此數值模式一重要程序，由於顆粒在網格間傳輸的過程中，牽涉到許多資訊的傳遞與接收，且經過平行計算後，各計算單元亦必須交流資訊，為了確保每個顆粒都能對應到正確的資訊，因此偵錯並校正相當重要。

我們以方腔流做為測試的範例，流場尺寸為 $L(0.08\text{m}) \times H(0.08\text{m}) \times W(0.02\text{m})$ 網格解析度為 $N_x(64) \times N_y(64) \times N_z(16)$ ，除 $y=0$ 處為移動式邊界外，其餘皆為靜止壁面。初始設定流體與顆粒均為靜止狀態， $y=0$ 處的邊界會往 $+x$ 方向移動以驅動整個流場，在 z 方向一半深度的 $x-y$ 平面之網格均放置一個顆粒，如圖 3-1，並設定顆粒的速度與流體相同，即是「被動式顆粒」。

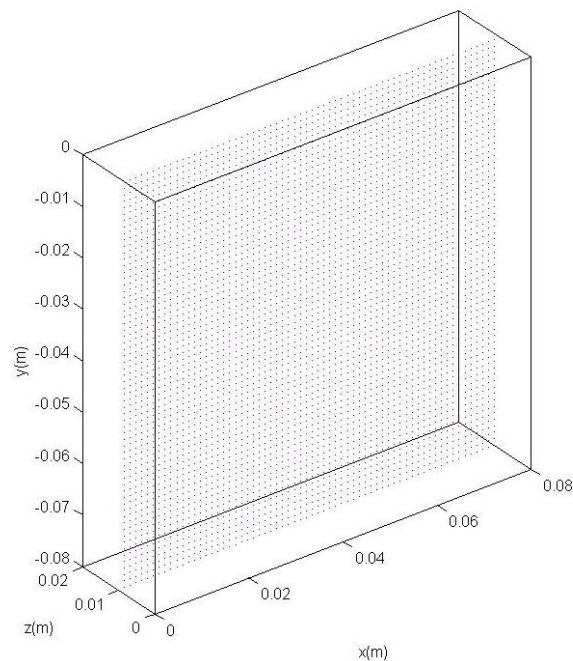


圖 3-1 顆粒在流場中之初始分佈

流場經歷 70 秒後，顆粒之散佈情形如圖 3-2 所示，其中左圖均為顆粒在流場中的散佈情形，右圖背景顏色所繪是流場速度之 y 軸分量，向量箭頭則是 $x-y$ 平面的速度向量。因頂蓋處有流體不斷流向流場右方，故造成前期右方壁面有一渦

漩產生，並沿著壁面向下移動，而渦漩周圍的顆粒亦呈現出渦漩的形貌，同時間流場的左方區域流速相當小，故該區域的顆粒亦無顯著的移動。後期流場已趨於完全發展，渦漩尺度擴大至與流場尺度相當，顆粒的散佈情形亦與渦漩形貌十分相似，而自始至終顆粒的數目皆保持守恆，此可說明本研究的顆粒傳輸系統在處理顆粒移動及傳遞資訊的正確性均有達成我們的要求。

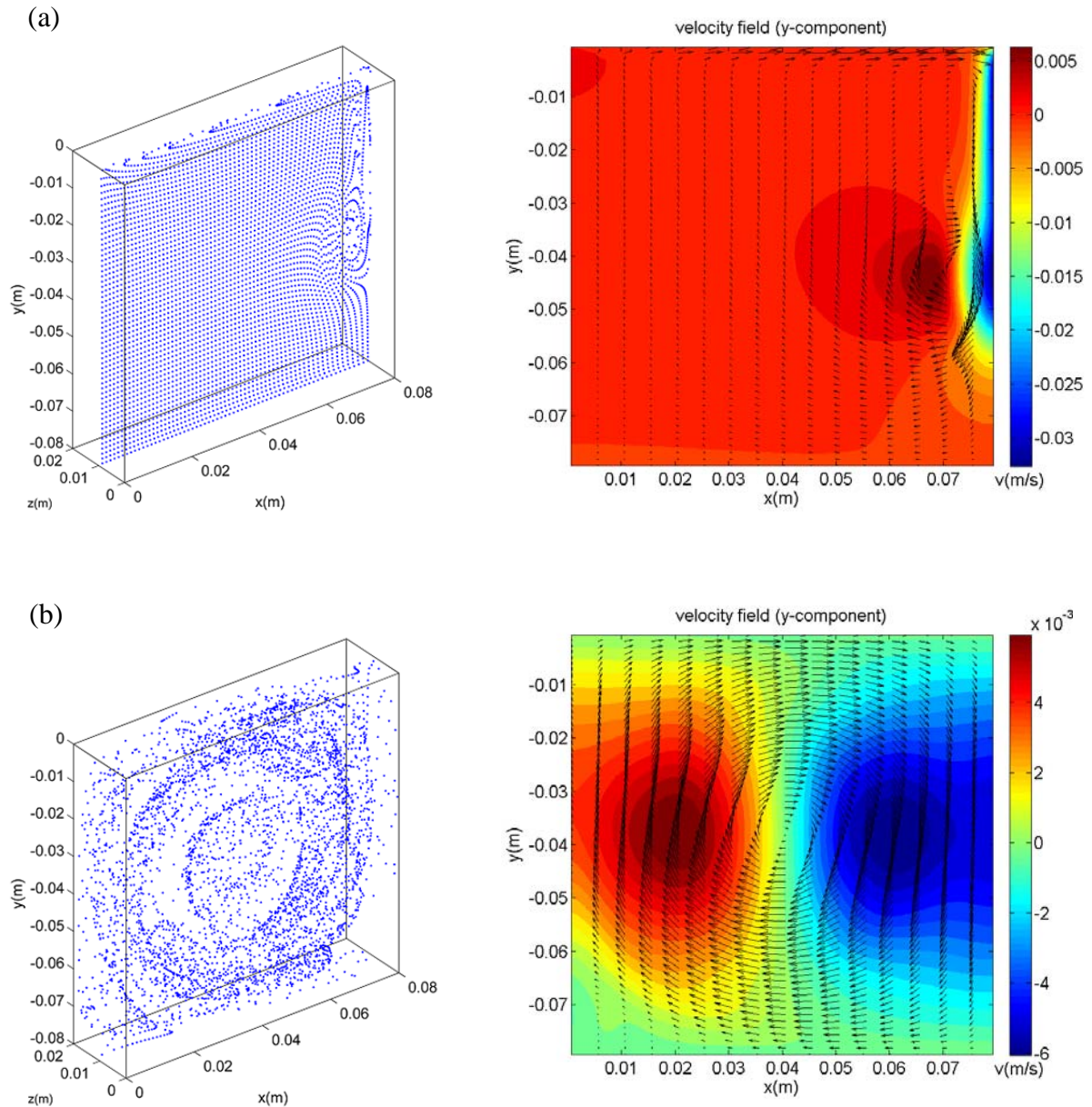


圖 3-2 顆粒散佈情形與流場之垂直速度分佈(a) 6s (b) 68s



3.2 潛變流(Creeping flow)

潛變流，亦即是史托克流(Stokes flow)，為一種流動型態，其特性為流場中黏滯力的主導性遠大於慣性力，故流場之雷諾數遠小於1，動量主要由黏滯力、壓力和重力三者達成平衡。

在潛變流的情況下，若有一球體潛沒在流場中沉降，則該球體的終端速度有解析解存在，故相當適合作為本研究的基礎驗證範例。假設有一球體在潛變流中運動，其受力情況如圖 3-3(Batchelor, 1967)所示，其中 F_g 為球體所受重力與浮力之合力，如(3.1)式，而 F_d 為球體所受阻力，即是史托克阻力，如(3.2)式，當球體運動達終端速度時，即是 F_g 等於 F_d ，則球體之終端速度可由(3.3)式表示之。

$$F_g = (\rho_p - \rho_c)g \frac{\pi d_p^3}{6} \quad (3.1)$$

$$F_d = 3\pi\mu d_p v_s \quad (3.2)$$

$$v_s = \frac{(\rho_p - \rho_c)}{18\mu} g d_p^2 \quad (3.3)$$

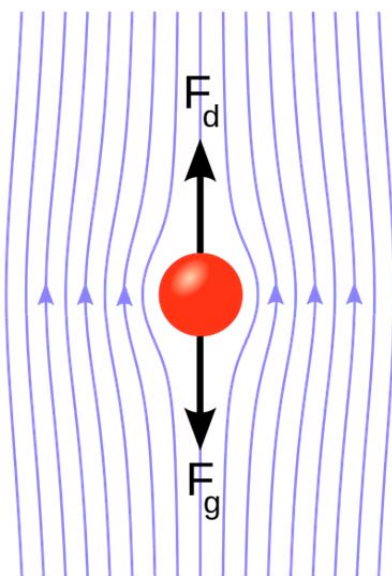


圖 3-3 球體在潛變流中沉降之受力情況



3.2.1 顆粒自由沉降

我們在靠近自由液面處放置 16 個顆粒，如圖 3-4，讓其自靜止開始沉降，初始之流場亦為靜止狀態，而此矩形槽在 $y=0$ 處為 Free slip， $y=H$ 處為底床，其餘邊界皆為週期性邊界，實驗參數如表 3-1 所示。而由(3.3)式可得顆粒沉降之終端速度約為 0.0129 m/s^2 ，則經歷 60 秒後，其沉降的過程如圖 3-5 所示

表 3-1 顆粒自由沉降實驗

顆粒直徑	$120\mu\text{m}$
顆粒密度	2650 kg/m^3
流體密度	1000 kg/m^3
流場尺寸($L\times H\times W$)	$0.5\text{ m}\times 1.0\text{ m}\times 0.25\text{ m}$
網格解析度($L\times H\times W$)	$32\times 64\times 16$
τ_p	0.00212 s
Δt	0.001 s

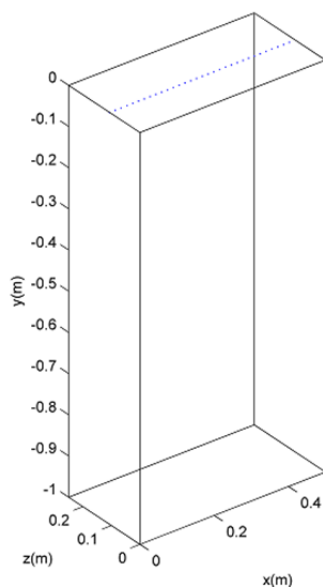


圖 3-4 自由沉降實驗之顆粒初始分佈

由於顆粒數目相當少，因此僅靠顆粒給予流體的作用力不足以引起大尺度的流體運動，流場幾乎可說是近乎靜止的狀態，故顆粒的相對位置在沉降的過程中均保持如初始狀態一般。而如同史托克定律的結論，在顆粒達到終端速度後，其

後續的沉降距離均與解析解估算而得的值相當吻合，由此可說明我們的數值模式能捕捉到微小顆粒在潛變流中運動的特性。

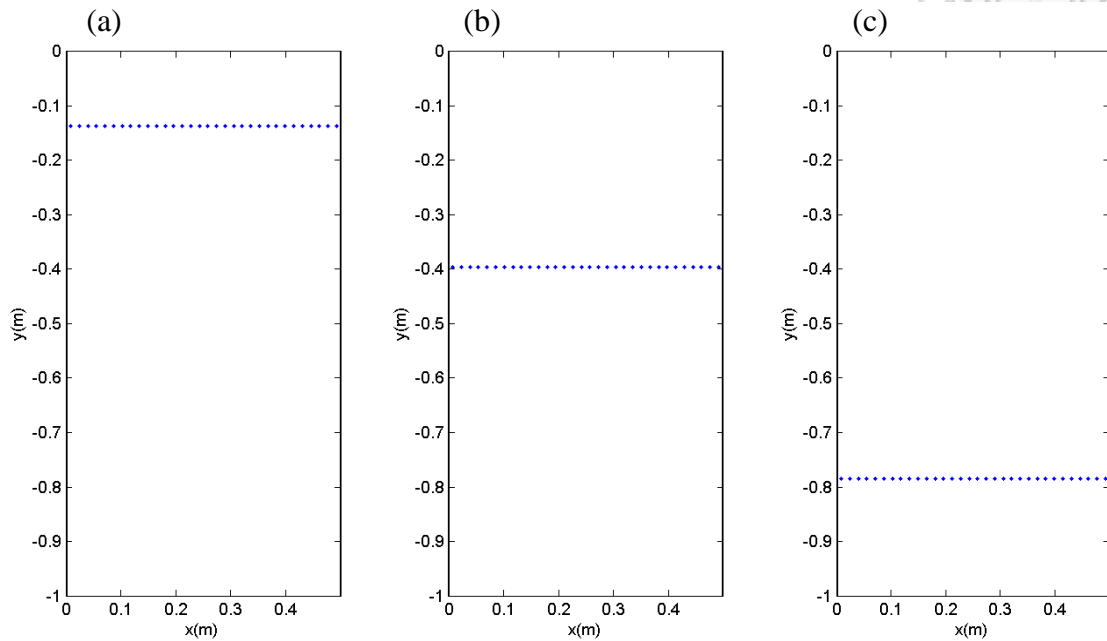


圖 3-5 顆粒在潛變流中隨時間之沉降情形(a)10s (b)30s (c)60s

3.2.2 不同顆粒直徑之差異比較

同 3.2.1 節的驗證範例，本節考慮兩種不同的顆粒直徑在潛變流中沉降的情況，分別為 $120\mu\text{m}$ 及 $60\mu\text{m}$ ，實驗參數如表 3-2 所示。因粒徑比為二比一，故終端速度比為四比一，由圖 3-5 可知，在經歷相同時間時，大顆粒的沉降距離確實約為小顆粒的四倍，此系列的驗證範例亦證明本研究的顆粒傳輸系統可正確地處理顆粒的移動。

表 3-2 不同粒徑之沉降實驗

顆粒直徑	$120\mu\text{m}$	$60\mu\text{m}$
顆粒密度	2650kg/m^3	2650kg/m^3
流體密度	1000kg/m^3	1000kg/m^3
流場尺寸	$0.5\text{m} \times 1.0\text{m} \times 0.25\text{m}$	$0.5\text{m} \times 1.0\text{m} \times 0.25\text{m}$
網格解析度	$32 \times 64 \times 16$	$32 \times 64 \times 16$
τ_p	0.00212 s	0.00053 s

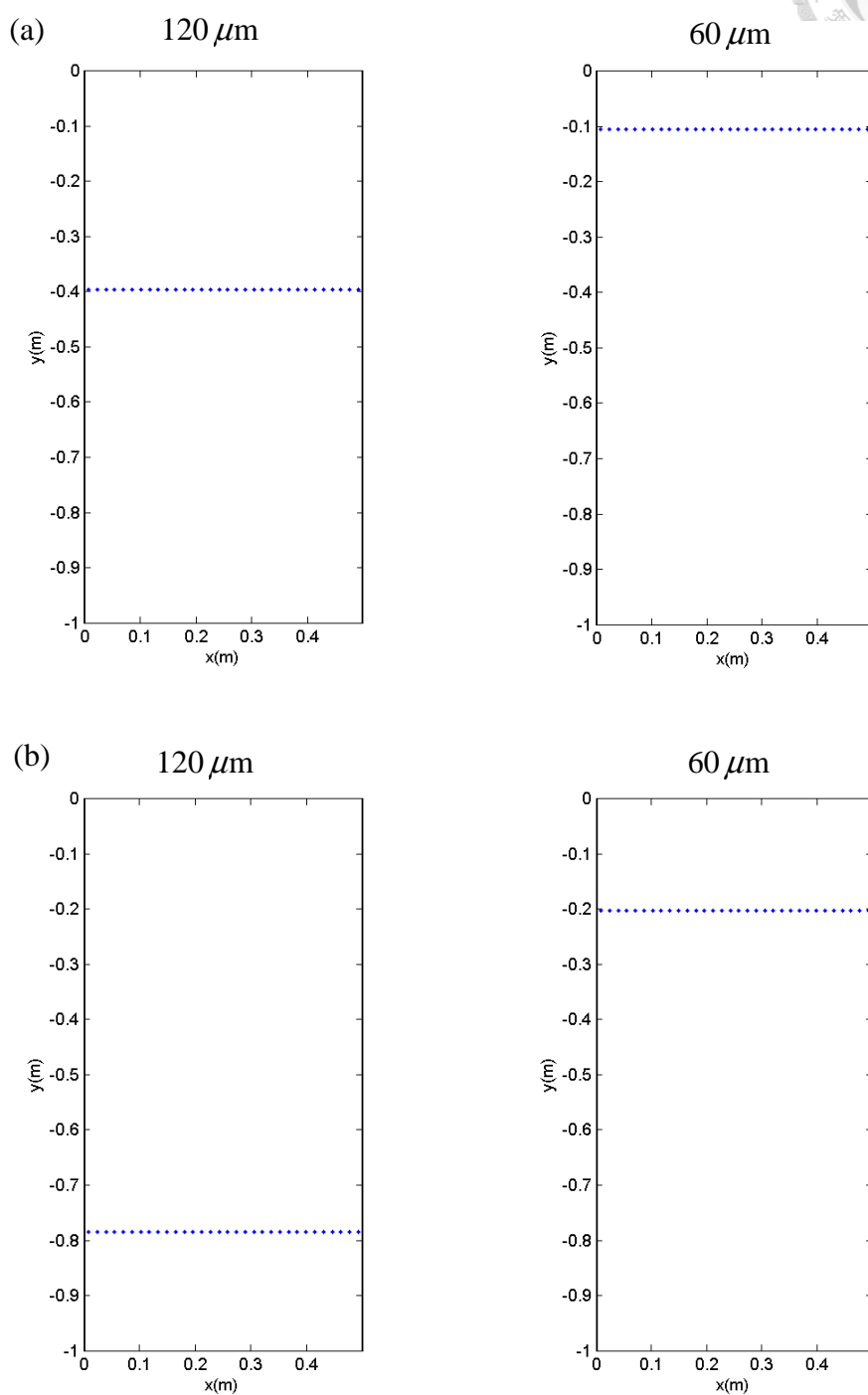
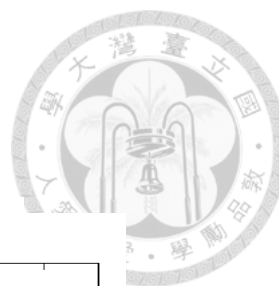


圖 3-6 不同顆粒直徑之沉降情形(a) 30s (b) 60s

Chapter 4 物理現象探討



4.1 顆粒引起之瑞利泰勒不穩定性

瑞利泰勒不穩定性(下稱 RT 不穩定性)為流體力學中一基礎物理現象，為不同流體之密度效應所造成的結果。當高密度(ρ_h)流體浮在低密度(ρ_l)流體的上方時，因重力的關係，使得高密度流體下沉，造成低密度流體因體積替換而上升，此時兩流體之交介面處便會產生擾動，隨後擾動逐漸擴大，並使得不同密度之流體開始混合，進而發展成非均勻密度的混合層。在混合層擴展的過程中，低密度流體會形成氣泡穿透進上層的高密度流體，而高密度流體亦會穿透進低密度流體。混合層厚度(h)的發展可以下列式子來描述(Youngs, 1984; Youngs, 1991)

$$h = \alpha A g t^2 \quad (4.1)$$

其中 $A = (\rho_h - \rho_l) / (\rho_h + \rho_l)$ 為阿特伍德數(Atwood number)， g 為重力加速度， t 為經歷的時間， α 為一常數係數。以往 RT 不穩定性的研究重點之一便是 α 的確切數值，其可說是大尺度混合的指標性參數，且依混合運動的情況以及實驗設置會有所不同，而根據實驗結果指出，其合理的範圍落在 0.04 至 0.08 之間，平均值約為 0.057(Dimonte et al., 2004)。在懸浮微粒二相流的情況下，顆粒與水所形成的混合流體即是一高密度流體，而由顆粒所引起的 RT 不穩定性會產生垂直方向的大尺度對流運動，該情況下的對流速度遠大於由史托克定律所得的顆粒沉降速度，此即是湖泊及河口等自然系統中最主要的泥沙沉降機制(Bradley, 1965)。

數十年以來，數值模擬與實驗方法都有許多關於 RT 不穩定性的研究，然而在數值方法的領域中，以離散顆粒的架構來模擬 RT 不穩定性的研究則相對較少。本節將以壓力耦合模式針對不同的初始濃度或沉降速度來進行模擬，探討不同條件下由顆粒沉降所引起的 RT 不穩定性之差異，並分析混合層厚度發展，接著與 2.4 節所介紹的不同理論架構的固液系統模式作比較。



4.1.1 不同初始濃度模擬

本節以初始顆粒濃度作為控制變因，模擬相同粒徑的顆粒在不同濃度之情況下沉降的過程，以及連帶引起的 RT 不穩定性。我們將設定兩種不同顆粒濃度，分別為 0.0128 及 0.0512，

首先是濃度 0.0128 的範例，顆粒初始分佈如圖 4-1 所示，在指定的網格內給予相同數目的顆粒，而顆粒之初始位置為亂數決定，令顆粒與流體初始時均為靜止狀態，所有顆粒的粒徑與密度均相同， $y=0$ 處為 Free slip， x 及 z 方向的邊界採用週期性邊界條件， $y=H$ 處為底床。混合流體與純水的交界面處沒有給予任何微擾，初始之微擾來自顆粒位置的隨機分佈，實驗參數如表 4-1 所示。

表 4-1 中等濃度之 RT 不穩定性模擬

顆粒尺寸	120 μm
顆粒密度	2,650 kg/m^3
流體密度	1,000 kg/m^3
混合流體密度	1,005 kg/m^3
顆粒初始體積分率	0.0128
流場尺寸($L \times H \times W$)	0.04m \times 0.08m \times 0.04m
網格解析度($L \times H \times W$)	32 \times 64 \times 32
顆粒數目	229,376
Atwood number	0.0026

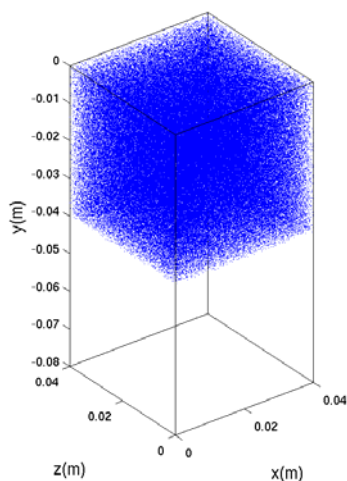


圖 4-1 顆粒初始分佈情況

顆粒沉降初期時，如圖 4-2(a)，交界面尚未產生任何擾動，觀察此時流場的垂直速度場可發現，在顆粒散佈的區域內已有小尺度的垂直對流，然而交界面處仍是與稀薄濃度的情況相同，並未產生流體交換的現象。顆粒繼續沉降達 0.8 秒後，流體的交界面處已有些微擾動發生，如圖 4-2(b)，此即是 RT 不穩定性初期的徵兆。而觀察相同時間之流場垂直速度場，如圖 4-3(b)，顆粒散佈區域內的垂直對流有明顯增強。當沉降時間達 1.2 秒時，如圖 4-2(c)，流場已有較為明顯的 RT 不穩定性現象，上方的高密度流體形成氣泡穿透進下方的低密度流體。而如圖 4-3(c)，交界面處有大尺度的垂直對流運動，代表已有流體交換的現象發生。

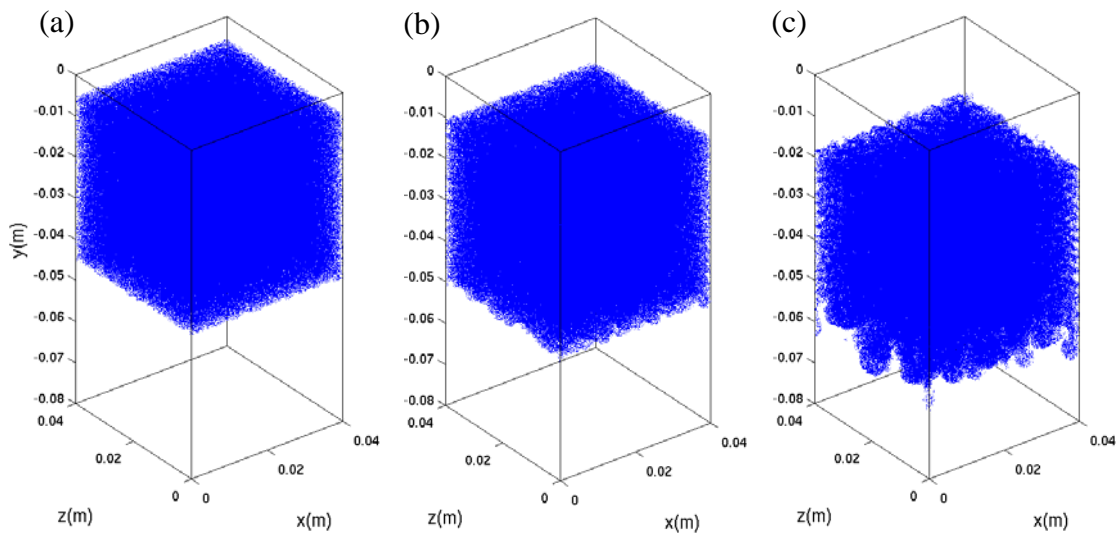


圖 4-2 顆粒散佈圖 ($\phi_0 = 0.0128$) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s

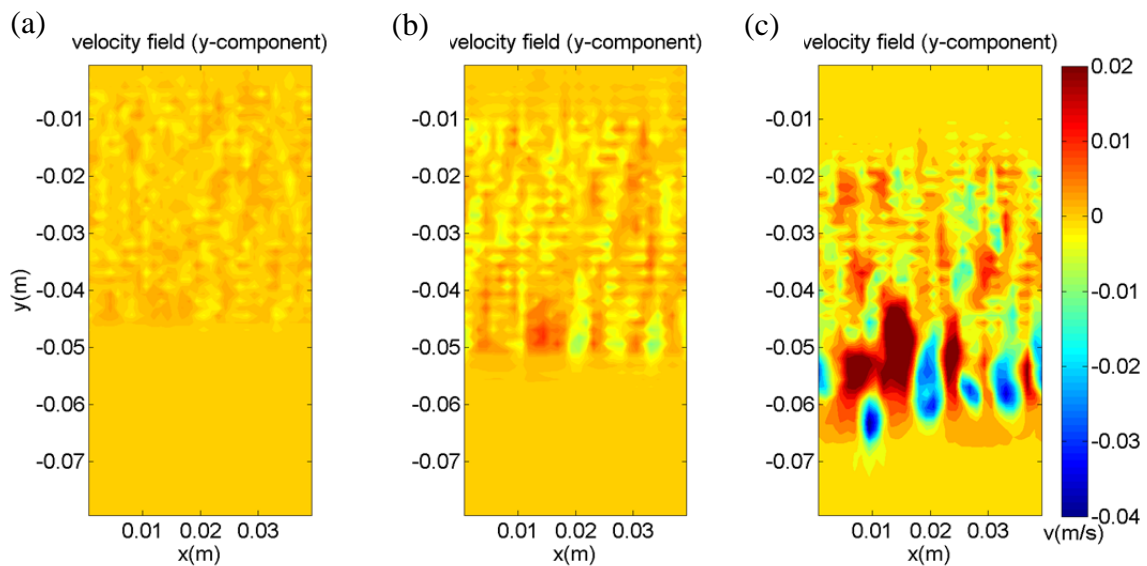


圖 4-3 流場之垂直速度場($z=0.02m$) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s



此部分為高濃度的範例，當顆粒的體積分率達到此標準時，顆粒碰撞的影響已逐漸變得重要，故在本模式尚未建立顆粒碰撞模型之前，不適合在更高濃度的情況下進行模擬，相關實驗參數見表 4-2。

表 4-2 高濃度之 RT 不穩定性模擬

顆粒尺寸	120 μm
顆粒密度	2,650 kg/m^3
流體密度	1,000 kg/m^3
混合流體密度	1,084 kg/m^3
顆粒初始體積分率	0.0512
流場尺寸($L \times H \times W$)	0.04m \times 0.08m \times 0.04m
網格解析度($L \times H \times W$)	64 \times 128 \times 64
顆粒數目	3,670,016
Atwood number	0.0405

當顆粒初始濃度達到 0.0512 後，如圖 4-4(a)，沉降時間僅經歷 0.4 秒，交界面處便已產生擾動，與前一個濃度的範例有明顯的差異，主要是因為濃度提高，密度效應造成的驅動力增強，使得不穩定性的現象越明顯。而從流場的垂直速度場亦可發現，此時交界面處也已產生小尺度的垂直對流，如圖 4-5(a)。顆粒繼續沉降達 0.8 秒時，RT 不穩定性的現象已相當明顯，如圖 4-4(b)，高密度流體形成的氣泡如同手指般穿透進低密度流體區，這些氣泡通稱為 RT 手指(RT fingers)。接著沉降達 1.2 秒時，顆粒已觸底並開始沉積，表 RT 不穩定性已結束，並轉變為大尺度的混合運動，此時垂直方向的對流運動亦發展到與流場尺度相當的規模。

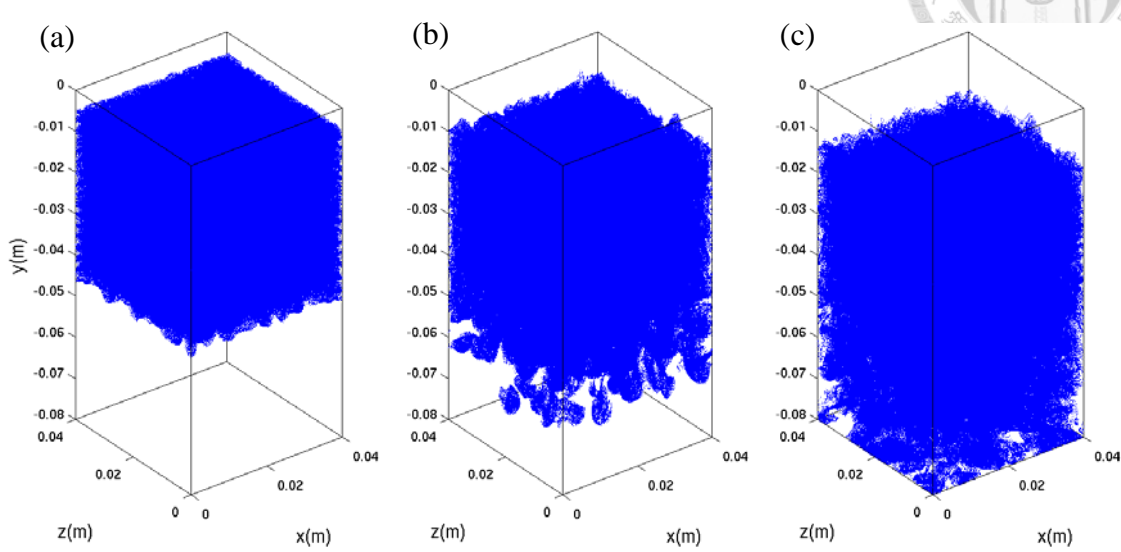


圖 4-4 顆粒散佈情形($\phi_0 = 0.0512$) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s

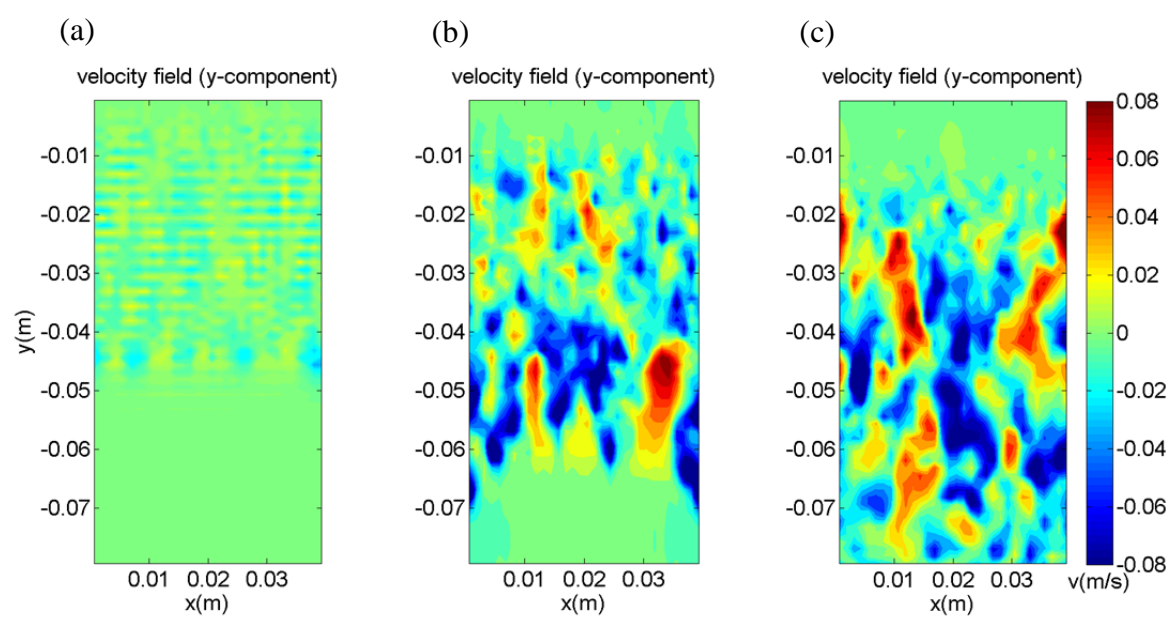


圖 4-5 流場之垂直速度場($z=0.02m$) (a)t=0.4s (b)t=0.8s (c)t=1.2s

由(4-1)式， h 為混合層厚度的一半，而我們定義無因次化顆粒濃度 0.99 至 0 的區域為混合層，如圖 4-6 所示，將混合層厚度發展隨時間之變化描繪出來，即圖 4-7 所示，如此求得 0.0128 和 0.0512 兩種濃度所對應的 α 值分別為 0.0505 及 0.0679，兩者均落在合理範圍之內(0.04~0.08)。在高濃度的情況下，顆粒沉降速度較快，亦使得混合層發展快，故高濃度的 α 較高。

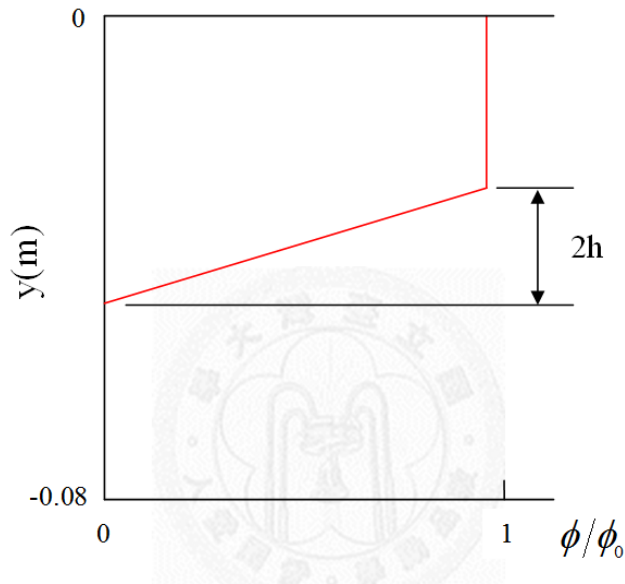


圖 4-6 混合層厚度之示意圖

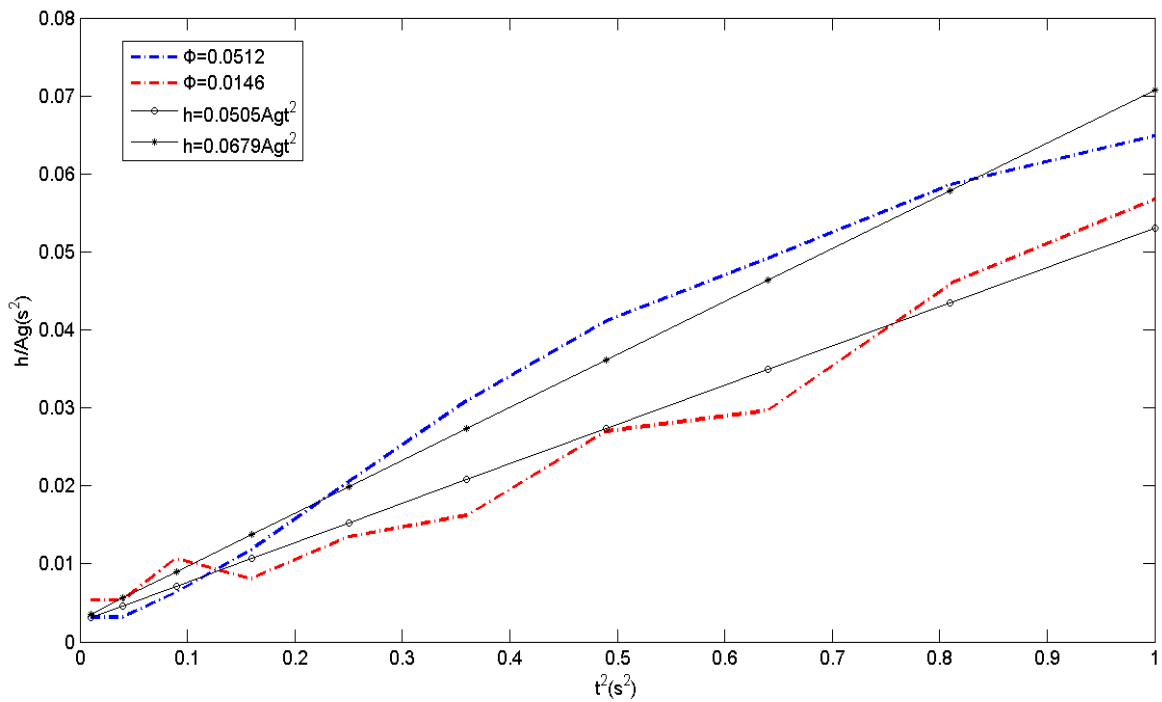


圖 4-7 不同濃度之混合層厚度發展



4.1.2 不同沉降速度模擬

顆粒沉降速度與其粒徑有直接的關聯性，因此若要以沉降速度作為控制變因，改變顆粒直徑是最直接的方式。然而，顆粒直徑減少一半，若要維持相同的顆粒濃度，則每個網格內所放置的顆粒數目便必須增加至原先的八倍，如此會佔據相當大的記憶體空間，容易導致模擬時因暫存容量不足而中斷。因此，我們採用另一配套作法，維持固定的顆粒直徑，轉而改變流體的黏滯性，使其與不同直徑的顆粒有相同的顆粒馳豫時間(τ_p)，如此便不需改變顆粒數目，亦可達到控制顆粒沉降速度的效果。

本節考慮三種不同粒徑的沉降速度，分別為 $240\ \mu\text{m}$ 、 $120\ \mu\text{m}$ 以及 $60\ \mu\text{m}$ 。以 $120\ \mu\text{m}$ 的情形作為參考範例，改變流體的黏滯係數以符合 $240\ \mu\text{m}$ 和 $60\ \mu\text{m}$ 的 τ_p ，由於 4.1.1 節已分析過 $120\ \mu\text{m}$ 的 RT 不穩定性，故本節不特別再作說明。

首先說明大尺寸顆粒的範例，顆粒初始散佈情況與 4.1.1 的範例相同，可見圖 4-1，流場的邊界條件設定 $y=0$ 處為 Free slip， x 及 z 方向的邊界採用週期性邊界條件， $y=H$ 處為底床。初始之微擾來自顆粒位置的隨機分佈，實驗參數見表 4-3。

表 4-3 粒徑 $240\ \mu\text{m}$ 之 RT 不穩定性模擬

顆粒密度	$2,650\ \text{kg}/\text{m}^3$
流體密度	$1,000\ \text{kg}/\text{m}^3$
混合流體密度	$1,084\ \text{kg}/\text{m}^3$
顆粒初始體積分率	0.0512
流體運動黏滯係數	$2.5 \times 10^{-7}\ \text{m}^2/\text{s}$
流場尺寸($L \times H \times W$)	$0.04\text{m} \times 0.08\text{m} \times 0.04\text{m}$
網格解析度($L \times H \times W$)	$64 \times 128 \times 64$
顆粒數目	3,670,016
Atwood number	0.0405

大尺寸顆粒沉降速度相當快，與 4.1.1 節 $120\ \mu\text{m}$ 的範例相比較下，沉降時間達 0.4 秒時， $240\ \mu\text{m}$ 顆粒的沉降距離幾乎為 $120\ \mu\text{m}$ 的四倍，觀察流體的交界面處，我們發現此時已有非常細微的擾動產生，如圖 4-8(a)。在相同時間下，流場之垂直方向速度場幾乎均為向上的速度，如圖 4-9(a)，因大體積且數量眾多的顆粒快速沉降，下方的流體必須即時填補顆粒原先佔據的體積，使得流體必須向上流動。接著達 0.6 秒之時，擾動有些微增強，但仍未有混合現象產生，如圖 4-8(b)。在沉降時間達 0.8 秒時才產生 RT 不穩定性的初期徵兆，但此時顆粒已開始觸底，混合層尚未開始發展就已結束。由圖 4-9(c) 來看，流場中向上流動的比例則較前期來得少，因下方顆粒已開始沉積，即是進入沉降的後期階段，初始在下方的低密度流體大部分均已流至上方區域，使得 +y 方向流速的區塊因而減少。

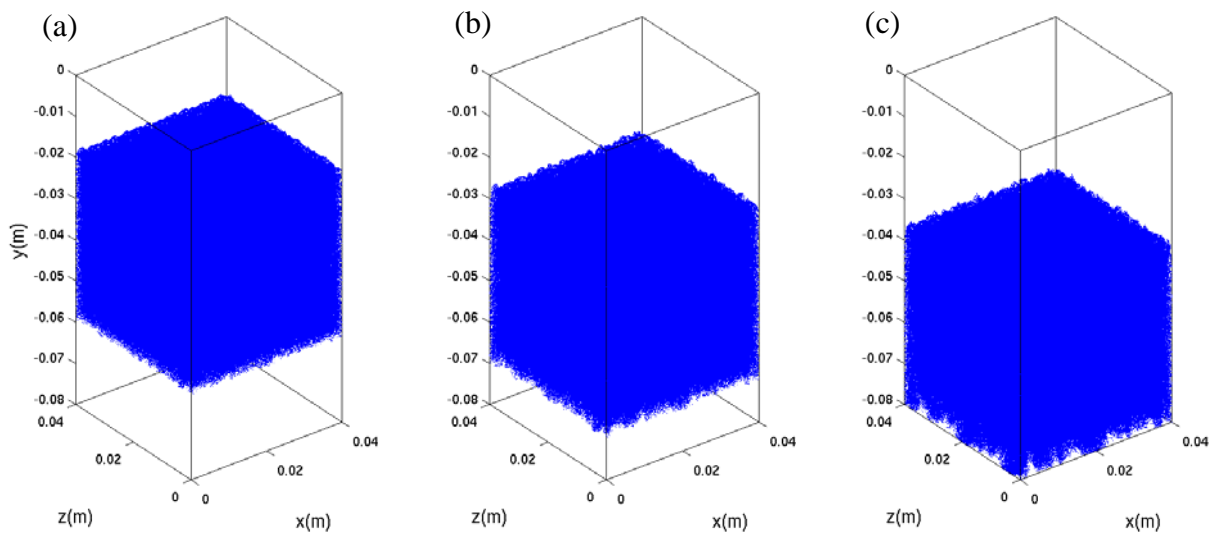


圖 4-8 顆粒散佈圖 ($D_p = 240\ \mu\text{m}$) (a) $t=0.4\text{s}$ (b) $t=0.6\text{s}$ (c) $t=0.8\text{s}$

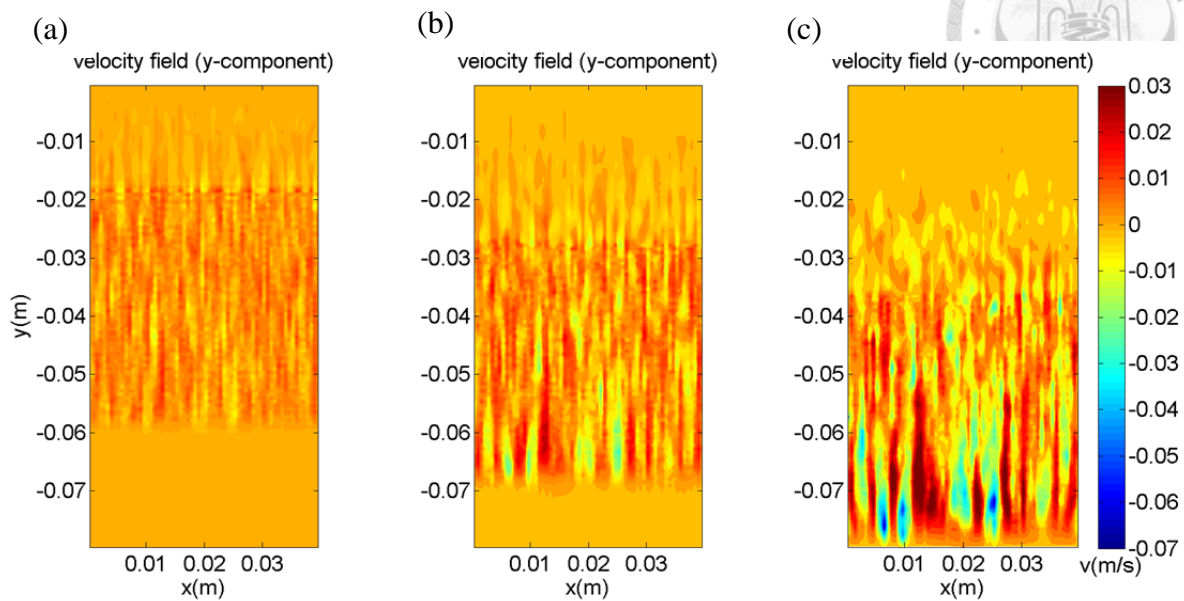


圖 4-9 流場之垂直速度場($z=0.02\text{m}$) (a) $t=0.4\text{s}$ (b) $t=0.6\text{s}$ (c) $t=0.8\text{s}$

此部分說明小尺寸顆粒的沉降模擬，顆粒初始散佈情況可見圖 4-1，模擬的環境設置與大尺寸顆粒相同，實驗參數見表 4-4。

表 4-4 粒徑 $60\mu\text{m}$ 之 RT 不穩定性模擬

顆粒密度	$2,650\text{ kg/m}^3$
流體密度	$1,000\text{ kg/m}^3$
混合流體密度	$1,084\text{ kg/m}^3$
顆粒初始體積分率	0.0512
流體運動黏滯係數	$2.5 \times 10^{-7}\text{ m}^2/\text{s}$
流場尺寸($L \times H \times W$)	$0.04\text{m} \times 0.08\text{m} \times 0.04\text{m}$
網格解析度($L \times H \times W$)	$64 \times 128 \times 64$
顆粒數目	3,670,016
Atwood number	0.0405

60 μm 顆粒的情況與 120 μm 的情況相同，如圖 4-10(a)，在沉降時間經歷 0.4 秒後即已出現不穩定性的初期徵兆，觀察流場的垂直速度亦可發現交界面處的流速特別大，表示流體間已開始進行垂直對流運動。沉降時間達 0.8 秒時，如圖 4-10(b)，前期的擾動已發展成非均勻密度的混合層，高密度流體形成 RT 手指穿透進低密度流體。我們同樣觀察流場的速度場後發現，如圖 4-11(b)，流體的交換現象相當旺盛，上方的流速亦受到交界面的垂直對流影響而增強。而由圖 4-11(c)來看，1.2 秒時流場已相當紊亂，垂直方向的對流運動幾乎已遍佈整個流場，此說明 RT 不穩定性即將結束，流場開始轉變為大尺度的混合運動。

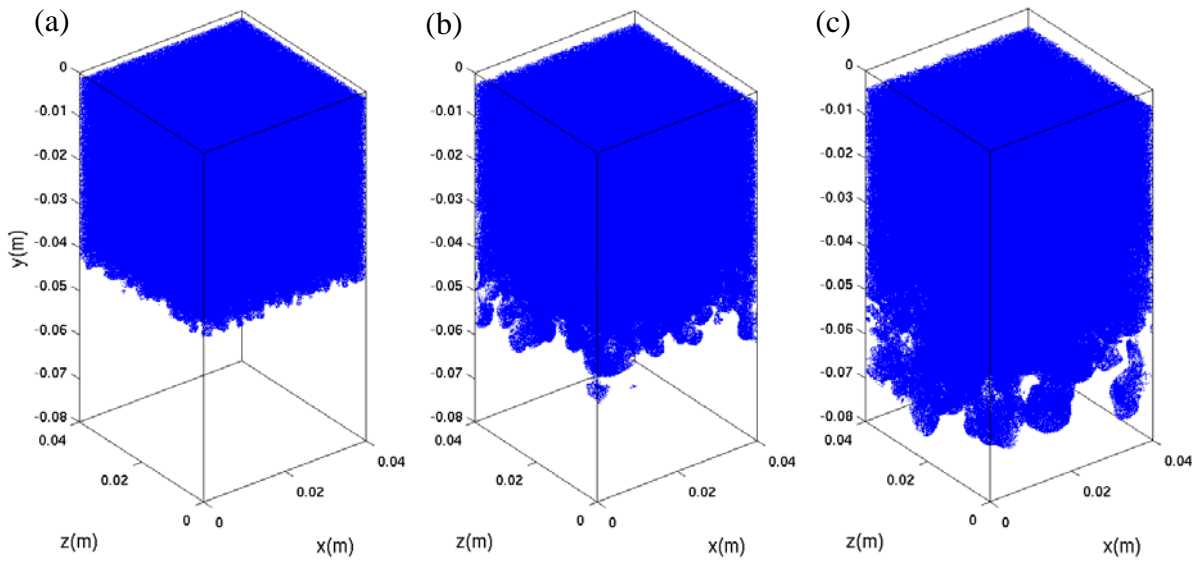


圖 4-10 顆粒散佈圖 ($D_p = 60\mu\text{m}$) (a) $t=0.4\text{s}$ (b) $t=0.8\text{s}$ (c) $t=1.2\text{s}$

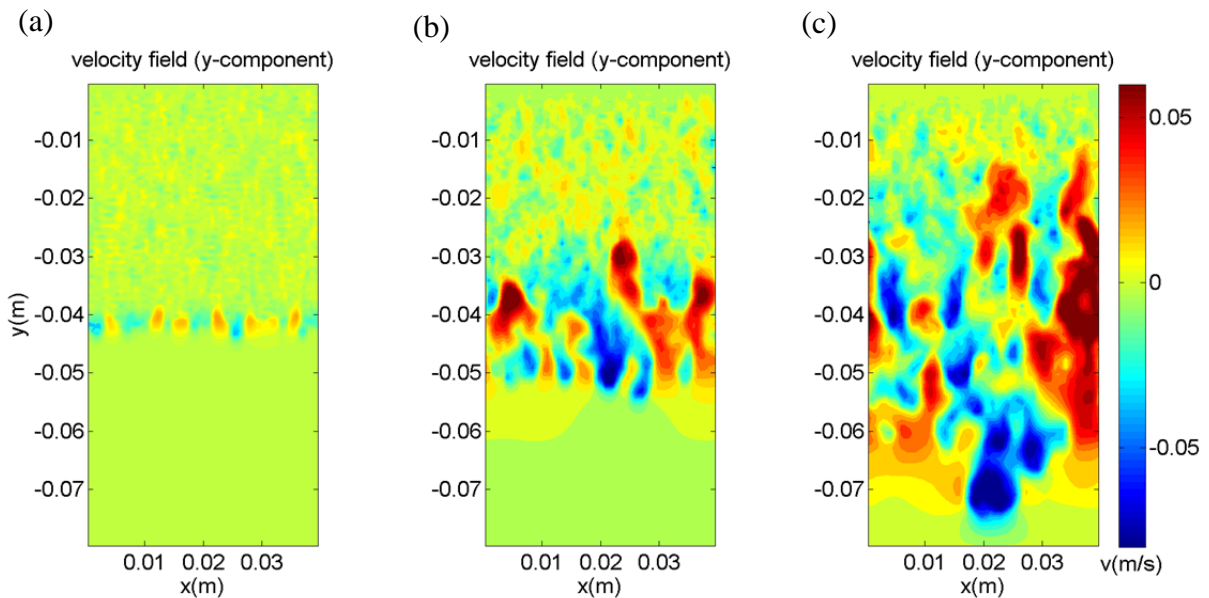


圖 4-11 流場之垂直速度場 ($z=0.02\text{m}$) (a) $t=0.4\text{s}$ (b) $t=0.8\text{s}$ (c) $t=1.2\text{s}$

由(4-1)式求得 $60\ \mu\text{m}$ 、 $120\ \mu\text{m}$ 和 $240\ \mu\text{m}$ 三種顆粒直徑所對應的 α 值，分別為 0.0632 、 0.0679 及 0.0214 。前兩個數值皆落在合理範圍內，而 $240\ \mu\text{m}$ 的 α 則低於最小值 (< 0.04)，我們認為應是顆粒慣性太大，使得懸浮顆粒造成的密度效應已不明顯，故不適合以(4-1)式來描述混合層的發展。 $240\ \mu\text{m}$ 的顆粒沉降速度快，經歷時間僅 0.7 秒即已觸底，混合層才開始發展不久便即將結束，故圖 4-12 僅有 0.7 秒前的結果。

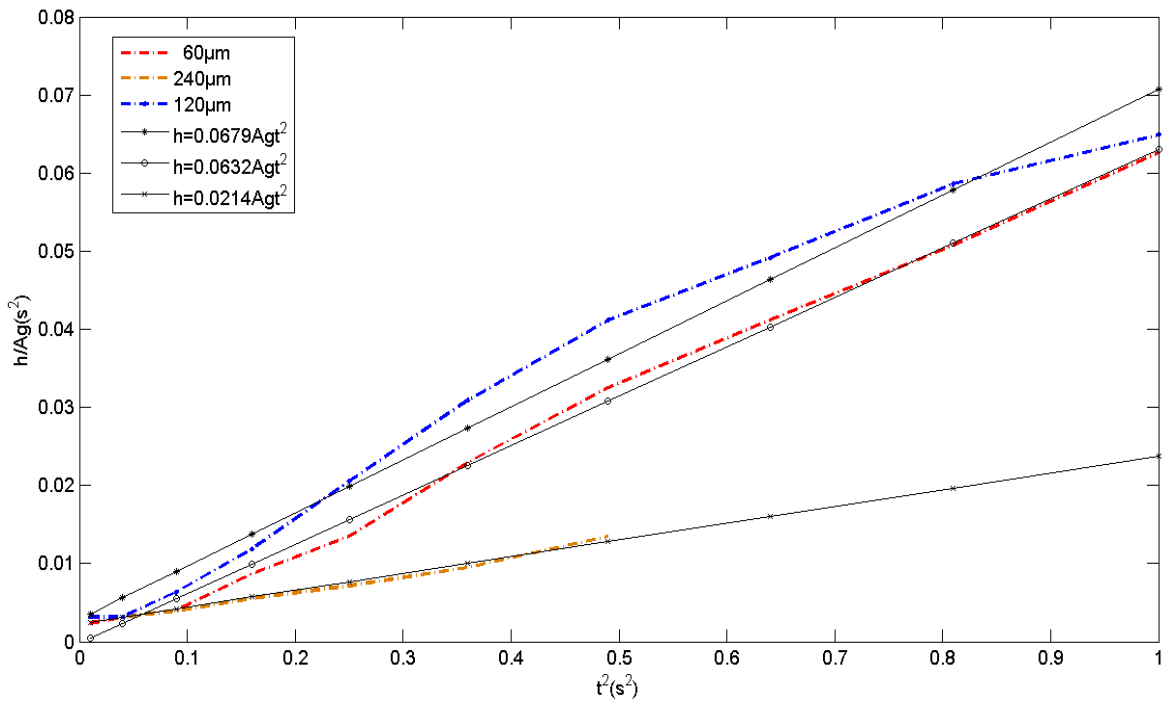


圖 4-12 不同粒徑之混合層厚度發展



4.2 壓力耦合效應之評估

我們在 2.4 節簡略說明各數值模式的理論架構及差異性後，本節將採用兩組不同的實驗參數，分別使用三種數值模式來進行模擬，以比較不同理論架構下所建立的數值模式，對模擬結果會造成何種程度的差異。

三種數值模式即是指傳統固液系統模式、附加質量耦合模式以及壓力耦合模式。其中，附加質量耦合模式並非現行已發展的數值模式，而是我們將壓力耦合模式之理論中的動壓梯度省略後，再建立出來的固液系統模式，其用意主要為直接比較壓力耦合造成的影響。我們將以初始之體積分率作為控制變因，同 4.1.1 節的方式，以 0.0128 和 0.0512 兩種濃度來進行顆粒自由沉降的模擬，並觀察沉降過程中，各模式的結果有何不同。由於沉降時間越長，壓力耦合的效應會越顯著，因此我們減少顆粒初始分佈的厚度，讓顆粒在觸底前有較長的沉降時間。

首先進行濃度為 0.0128 的說明，顆粒初始分佈如圖 4-13 所示，同前兩節的環境設置，在指定網格內放置相同數目的顆粒，顆粒之初始位置為隨機決定，令顆粒與流體初始時為靜止狀態，所有顆粒的粒徑與密度均相同。邊界條件則令 $y = 0$ 處為 Free slip， x 及 z 方向的邊界採用週期性邊界條件， $y = H$ 處為底床。初始之微擾來自顆粒位置的隨機分佈，實驗參數如表 4-5 所示。

表 4-5 數值模式比較範例一($\phi_0 = 0.0128$)

顆粒尺寸	120 μm
顆粒密度	2,650 kg/m^3
流體密度	1,000 kg/m^3
混合流體密度	1,021 kg/m^3
顆粒初始體積分率	0.0128
流場尺寸($L \times H \times W$)	0.04m \times 0.08m \times 0.04m
網格解析度($L \times H \times W$)	32 \times 64 \times 32
顆粒數目	442,368

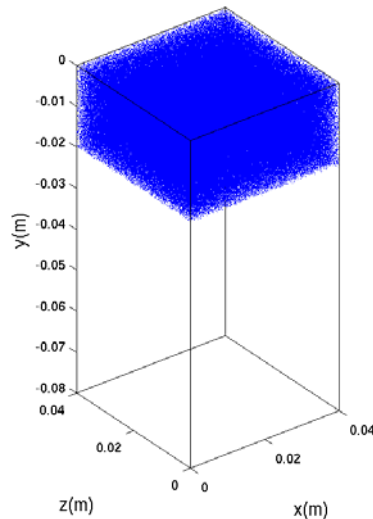
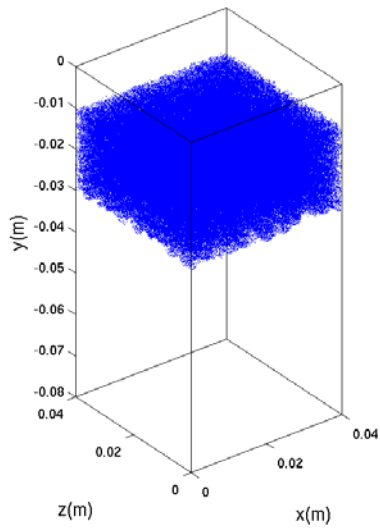


圖 4-13 顆粒初始分佈圖

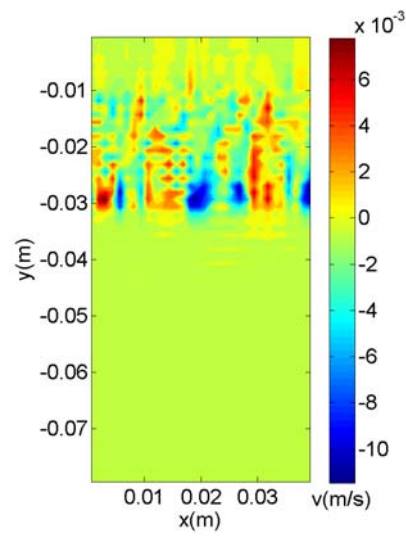
壓力耦合及附加質量效應均與顆粒濃度有直接的關係，我們尚未清楚壓力耦合及附加質量效應開始產生顯著影響的濃度臨界值為多少，因此本研究採用 Chou et al.(2014)的模擬參數，0.0128 及 0.0512 兩種濃度來進行模擬，以驗證在相同的理論架構下，Eulerian 與 Lagrangian 法皆能捕捉到相同的流場特性。

我們先觀察沉降初期顆粒的散佈情形，如圖 4-14(a)所示，在沉降時間達 0.8 秒時，流體交界面處已有擾動產生，再觀察流場的垂直速度場分佈可發現，此時交界面已開始有垂直方向的對流。時間進展至 1.6 秒時，如圖 4-14(c)，已有相當明顯的 RT 不穩定性現象發生，而相同時間下的流場垂直速度分佈顯示出，原先小尺度的對流已有明顯的成長。沉降時間達 2 秒後，如圖 4-14(e)，流場已由大尺度的混合運動主導，有部分顆粒被往上的水流捲至上方區域，此時的流場可看到垂直方向的對流運動已發展至與流場尺度相當的規模，由於在 0.0128 的濃度下，各模式的流場情況與顆粒散佈幾乎相同，故僅說明壓力耦合模式的結果，而由 Chou et al.(2014)以 E-E model 所作的模擬結果來看，在初始濃度為 0.0128 的條件下，壓力耦合模式與傳統固液系統模式並沒有任何明顯的差異，而我們結果符合這個結論。

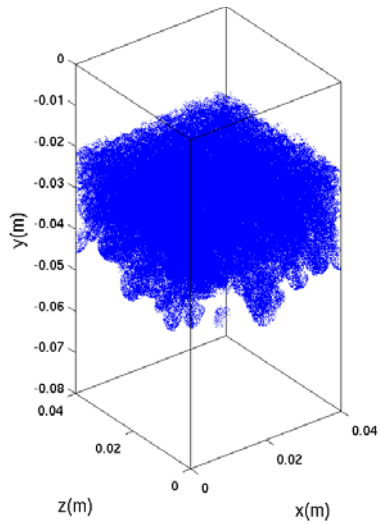
(a) 顆粒散佈 $t=0.8s$



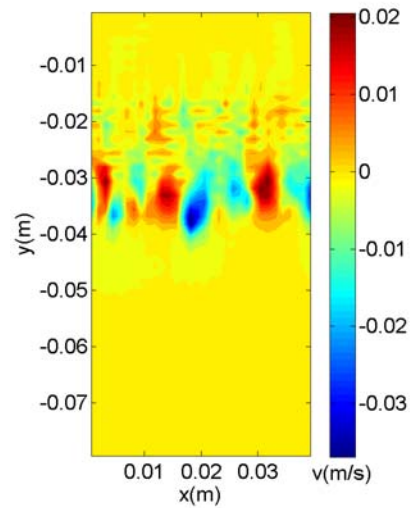
(b) 流場垂直速度 $t=0.8s$



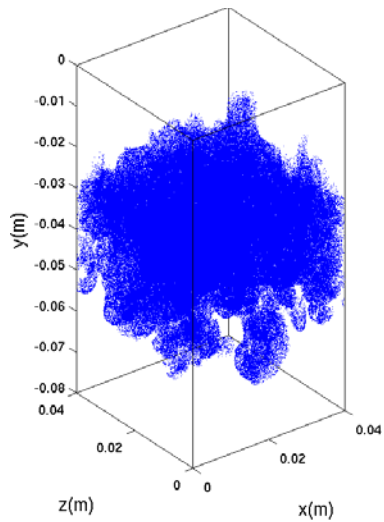
(c) 顆粒散佈 $t=1.6s$



(d) 流場垂直速度 $t=1.6s$



(e) 顆粒散佈 $t=2.0s$



(f) 流場垂直速度 $t=2.0s$

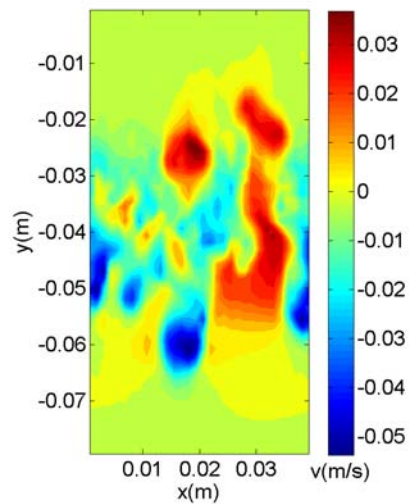


圖 4-14 壓力耦合模式之顆粒散佈與流場垂直速度($z=0.02m$)

為了瞭解在此濃度之情況下，各模式的差異對於沉降距離是否真的沒有顯著的影響，我們將不同深度的的顆粒體積分率對 $x-z$ 平面取平均值，然後描繪出顆粒平均濃度隨深度之變化，如圖 4-15 所示，各模式在沉降達 2 秒時所呈現出的結果幾乎完全一致，我們認為應是濃度不夠高的緣故，因為壓力耦合與附加質量效應均與顆粒的濃度有關聯，故後半部分我們將濃度提高四倍後再作觀察。

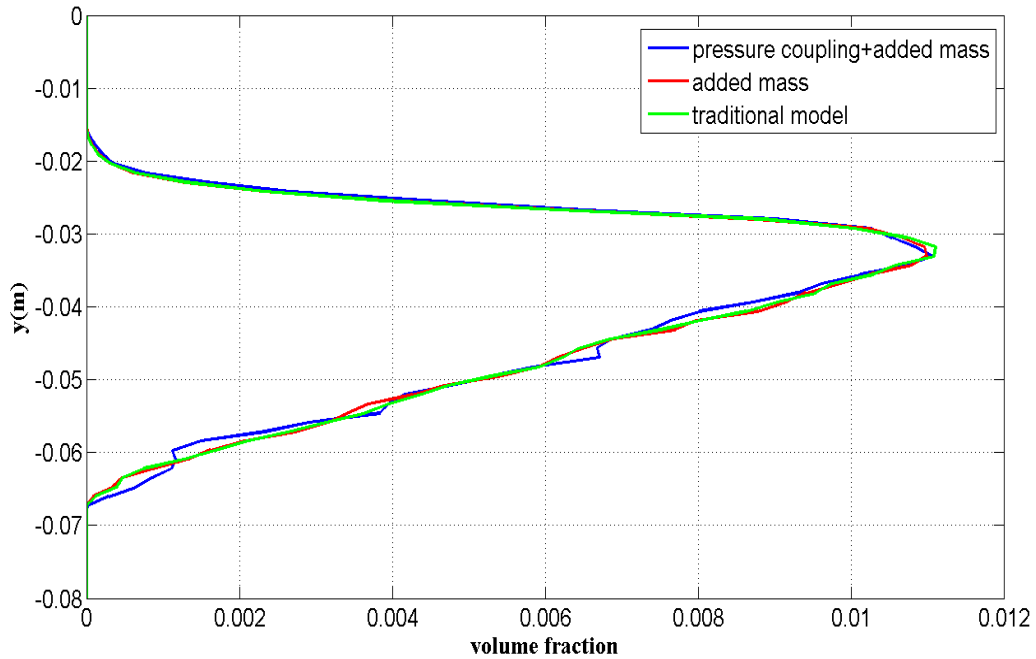


圖 4-15 顆粒體積分率之垂直分佈($t = 2s$)。



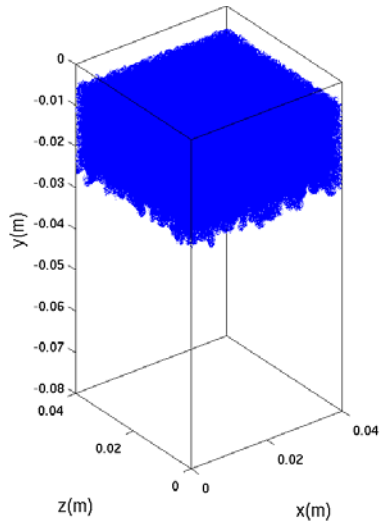
此部分說明濃度為 0.0512 的範例，壓力耦合與附加質量均會隨著濃度提高而逐漸顯示出其影響性，故我們認為在此濃度下，各模式應會展現出差異性。模擬的環境設置與前一個範例相同，相關實驗參數可見表 4-6。

表 4-6 數值模式比較範例二($\phi_0 = 0.0512$)

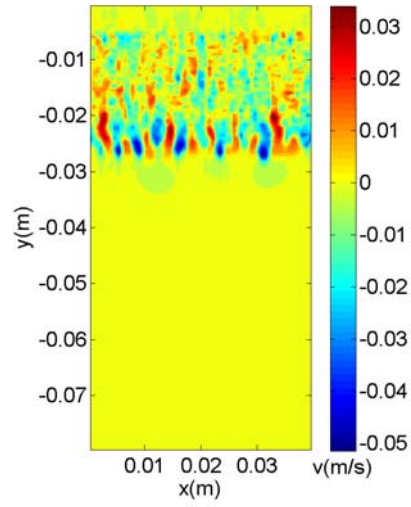
顆粒尺寸	120 μm
顆粒密度	2,650 kg/m^3
流體密度	1,000 kg/m^3
混合流體密度	1,084 kg/m^3
流場尺寸($L \times H \times W$)	0.04m \times 0.08m \times 0.04m
網格解析度($L \times H \times W$)	64 \times 128 \times 64
顆粒數目	1,835,008

顆粒自靜止沉降 0.4 秒後，由圖 4-16(a)可見，混合流體與水的交界面處已產生些許擾動，同時間流場的 y 方向速度場，如圖 4-17(b)所示，在交界面處有小尺度的垂直對流運動發生，由於還在沉降的初期階段，故下半部的流場近乎為靜止的狀態。沉降過程接近中期時，如圖 4-16(c)，初期的微擾已發展成尺度較大的混合層，即是 RT 不穩定性的現象，圖中可看見 RT 手指的型態相當明顯，我們接著觀察同時間流場的垂直速度場，如圖 4-16(d)，原先僅在交界面處才有較明顯的垂直對流，沉降達 0.8s 後，垂直方向已發展出大尺度的對流運動，且遍佈顆粒所在的區域。當沉降過程進入中期後，如圖 4-16(e)，混合層的厚度已發展至接近流場一半的深度，而由於水平方向的對流運動已對顆粒運動造成影響，使得 $x-z$ 平面上顆粒濃度不均勻，造成沉降速度有所差異，而沉降過程中，顆粒與部分流體持續下沉，故下方流體因體積替換而不斷往上流動，使得有部分顆粒被水流捲至上方區域。在濃度為 0.0512 的模擬中，各模式呈現的結果在沉降時間達 1.2 秒之前，均沒有任何明顯的差異，與濃度為 0.0128 的情況相同，而當經歷較長的沉降時間後，顆粒的沉降距離便開始有較明顯的差異產生，之後我們將以垂直方向的濃度分佈來說明。

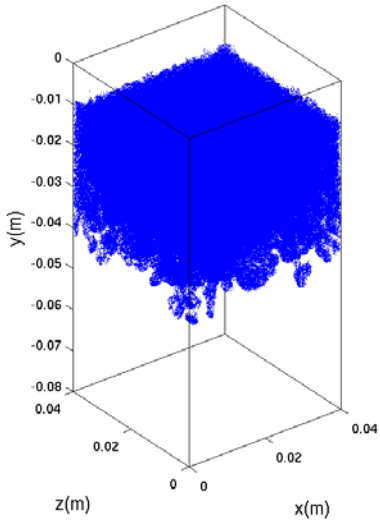
(a) 顆粒散佈 $t=0.4s$



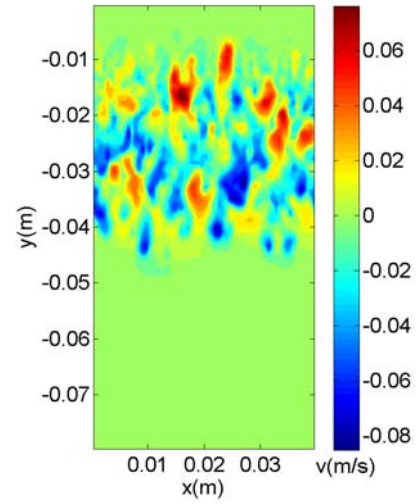
(b) 流場垂直速度 $t=0.4s$



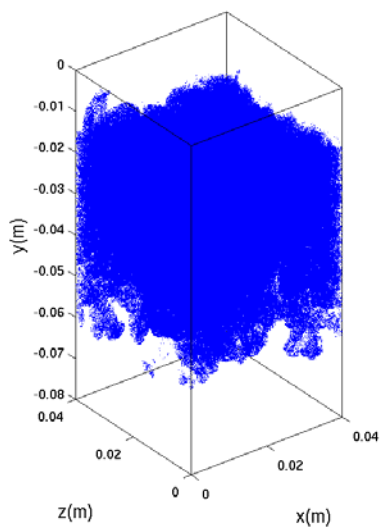
(c) 顆粒散佈 $t=0.8s$



(d) 流場垂直速度 $t=0.8s$



(e) 顆粒散佈 $t=1.2s$



(f) 流場垂直速度 $t=1.2s$

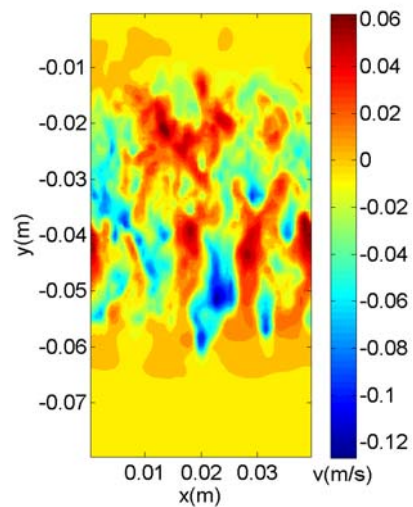


圖 4-16 壓力耦合模式之顆粒散佈與流場垂直速度($z=0.02m$)

我們將不同時間點下各模式的顆粒體積分率以 $x-z$ 平面取平均後描繪出來，時間分別為 1.2 秒、1.6 秒及 1.9 秒。首先看到沉降時間達 1.2 秒時的垂直分佈，如圖 4-17 所示，深度 -0.02m 以上的區域幾乎完全一樣，而在 -0.02m 以下的區域僅有些微的差異，整體來說各模式的結果並沒有顯著的不同。

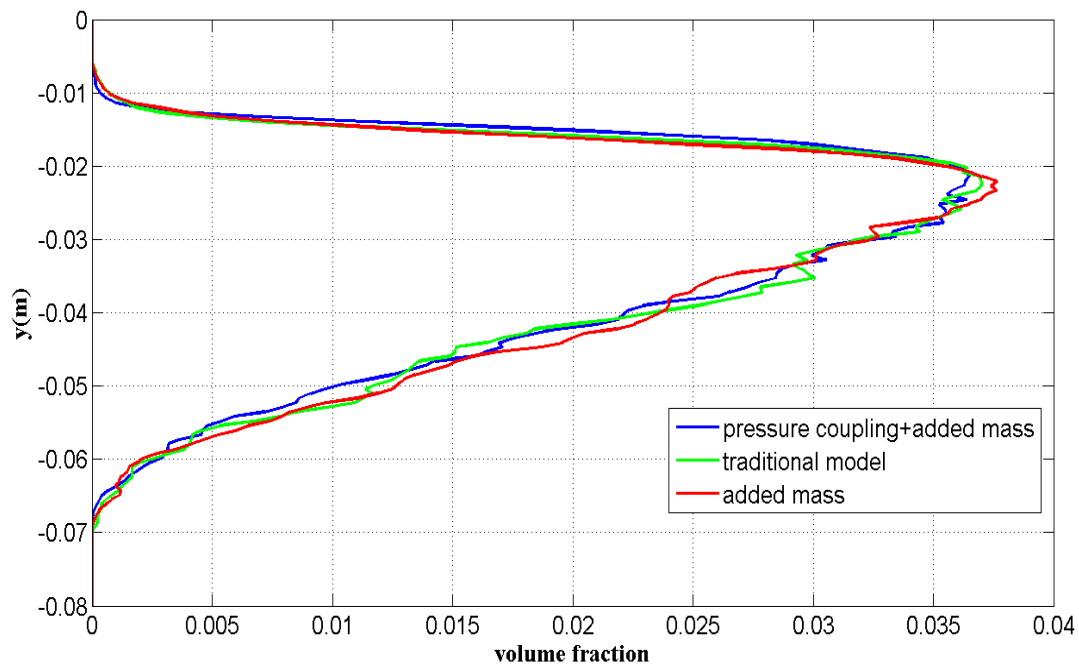


圖 4-17 顆粒體積分率之垂直分佈(t=1.2s)。

接著看沉降達 1.6 秒時的垂直分佈情況，如圖 4-18，在深度 -0.02m 至 -0.03m 的區域中，壓力耦合的顆粒濃度較其它兩者來得高，而在深度 -0.04m 至 -0.08m 的區域中，壓力耦合的顆粒濃度則較其它兩者來得低，此兩點即說明壓力耦合模式的顆粒沉降速度較慢，故才會產生上層濃度相對較高，而下層濃度相對較低的情形。其中壓力耦合模式與附加質量耦合模式的差異最為明顯，兩者理論上的差別僅為顆粒有無受到動壓的影響以及流體之不可壓縮性，故可最直接顯示出壓力耦合對於顆粒運動的重要性，而從結果來看，壓力耦合的確對顆粒沉降有顯著的影響。

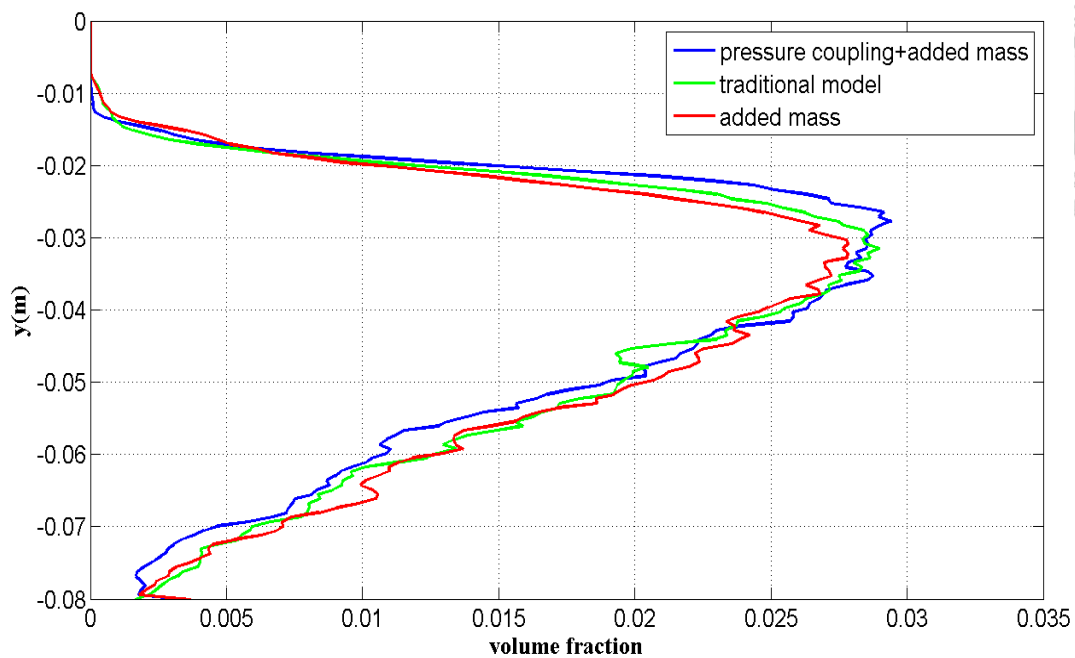


圖 4-18 顆粒體積分率之垂直分佈(t=1.6s)

當顆粒沉降時間達 1.9 秒之時，已有相當多的顆粒在底部沉積，如圖 4-19 所示，經歷較長的沉降時間後，壓力耦合的效應開始逐漸展現出來，與理論差異最小的附加質量耦合模式比較後可發現，壓力耦合模式的沉降速度到後期明顯較慢，在深度為-0.03m 的地方，兩者顆粒濃度的差距將近 25%。而將壓力耦合模式與傳統模式比較後發現，雖然並沒有如同附加質量模式那般差異顯著，但在深度-0.02m 至-0.035m 的區間，壓力耦合的濃度仍是較傳統模式來得大，且就下半部區域的分佈來看，壓力耦合的濃度幾乎都比其他兩者來得低，故我們可以得知在高濃度且足夠長的沉降時間下，壓力耦合的影響會十分顯著。

壓力耦合會造成顆粒沉降較慢的原因，可以從流場的壓力分佈來瞭解，如圖 4-20 所示，流場壓力在底部為正值，而自由液面處為負值，故可知 y 方向的壓力梯度為負值($\partial P/\partial y < 0$)。從壓力耦合模式的顆粒運動方程式可知，顆粒所受到的壓力影響之形式為壓力梯度的負值，可見(2-13)式，因此顆粒在沉降的過程中，y 方向持續受到一向上的作用力，經歷較長時間的沉降後，壓力梯度造成的緩速效果逐漸展現出來，便呈現出沉降速度較慢的結果。

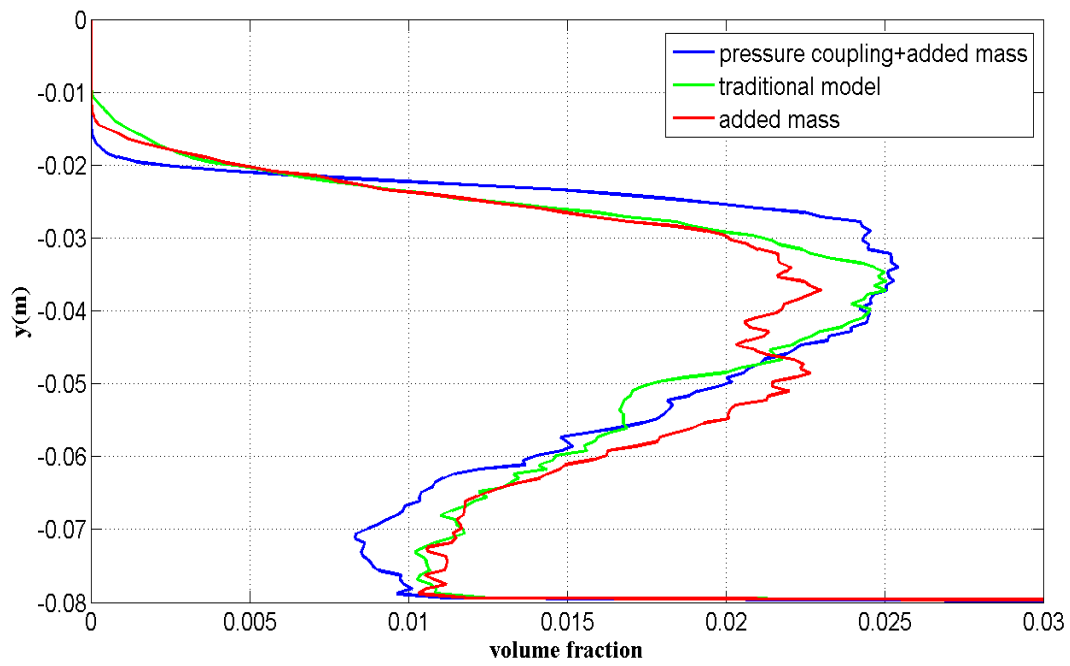


圖 4-19 顆粒體積分率之垂直分佈(t=1.9s)

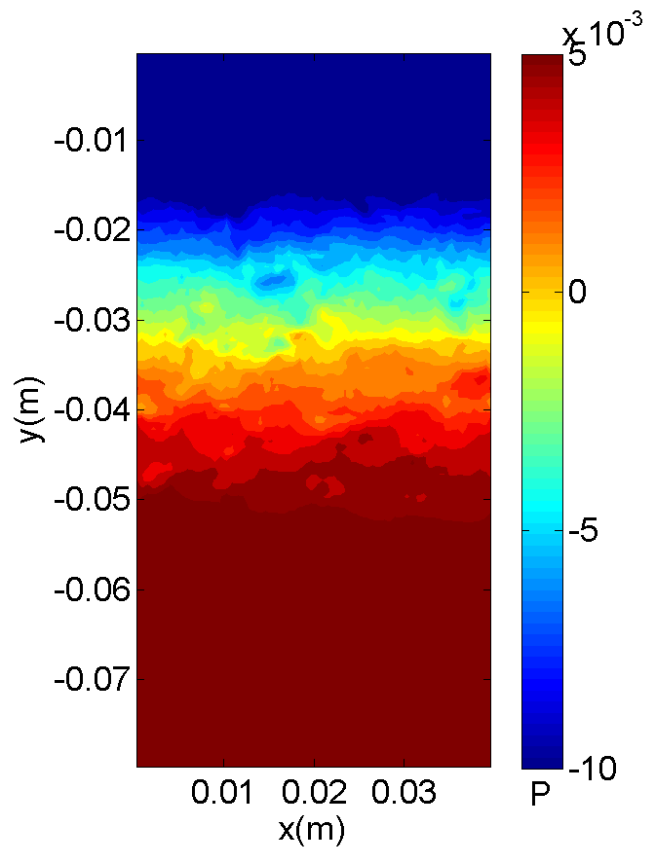


圖 4-20 壓力耦合模式之壓力分佈(t=1s)

由高濃度的範例可發現壓力耦合的效應相當明顯，而壓力耦合的概念即是流場壓力係由液態相與顆粒相的體積通量所造成，因此我們好奇單就顆粒相所造成的壓力，其是否在總壓力中佔有相當程度的分量。為了將顆粒相造成的壓力獨立出來，我們便設定一模擬實驗，初始條件、流場尺寸和邊界條件均與濃度為 0.0512 的範例相同，但令流體為靜止狀態，即是不解析流體的動量方程式，而壓力方程式的來源項僅考慮顆粒的體積通量，即是解以下之壓力方程式

$$\frac{1}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^{N_s} \nabla_{pass_{i,j}} \right) = \frac{\Delta t^2}{\nabla} \sum_{j=1}^N \left[1 + \frac{(1-s)(1-C_{vm})}{s+C_{vm}} \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\nabla_{pass_i}}{\mathbf{u}_{p_i}^* A_j \Delta t} \right] \nabla P^{n+1} A_j$$

我們取相同時間的壓力場來作比較，以 $x-z$ 平面取平均後描繪出來，如圖 4-21 所示，橫軸的 P 為已先除以流體密度的壓力，由圖可發現兩者的值級相當接近，尤其在深度 -0.01m 至 -0.02m 的高濃度區域，顆粒所造成的壓力幾乎佔總動壓的 50% 以上，此即可說明顆粒相造成的壓力是相當顯著的。

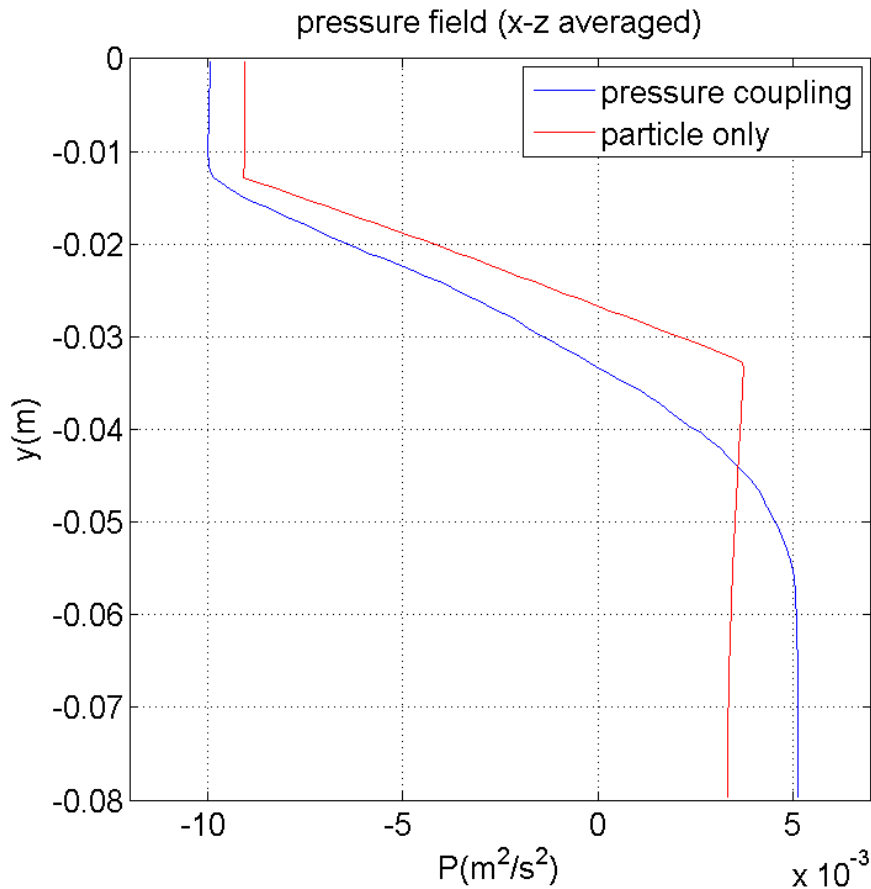


圖 4-21 壓力耦合與純顆粒流動之壓力分佈($t=1s, \phi_0 = 0.0512$)

我們亦對中等濃度($\phi_0 = 0.0128$)做了相同的模擬，同樣以 $x-z$ 平面取平均後描繪出來，如圖 4-22 所示，與濃度 0.0512 的情況相當類似，顆粒相造成的壓力與總動壓在同一值級內，此說明即便是在中等濃度的情況下，顆粒流動所引起的壓力仍是不可忽視的。而我們亦發現同樣使用壓力耦合模式進行模擬，中等濃度範例的總動壓差明顯小於高濃度範例，此即說明為何在高濃度的情況下顆粒沉降較慢的情況相對明顯，因為顆粒所受的動壓梯度隨著濃度而增大，即是 $+y$ 方向的作用力變大，故濃度提高使得壓力耦合的效應逐漸產生顯著的影響，當濃度達到 0.0512 並經歷較長的沉降時間後，壓力耦合模式的顆粒便明顯比其他模式要沉降得慢。

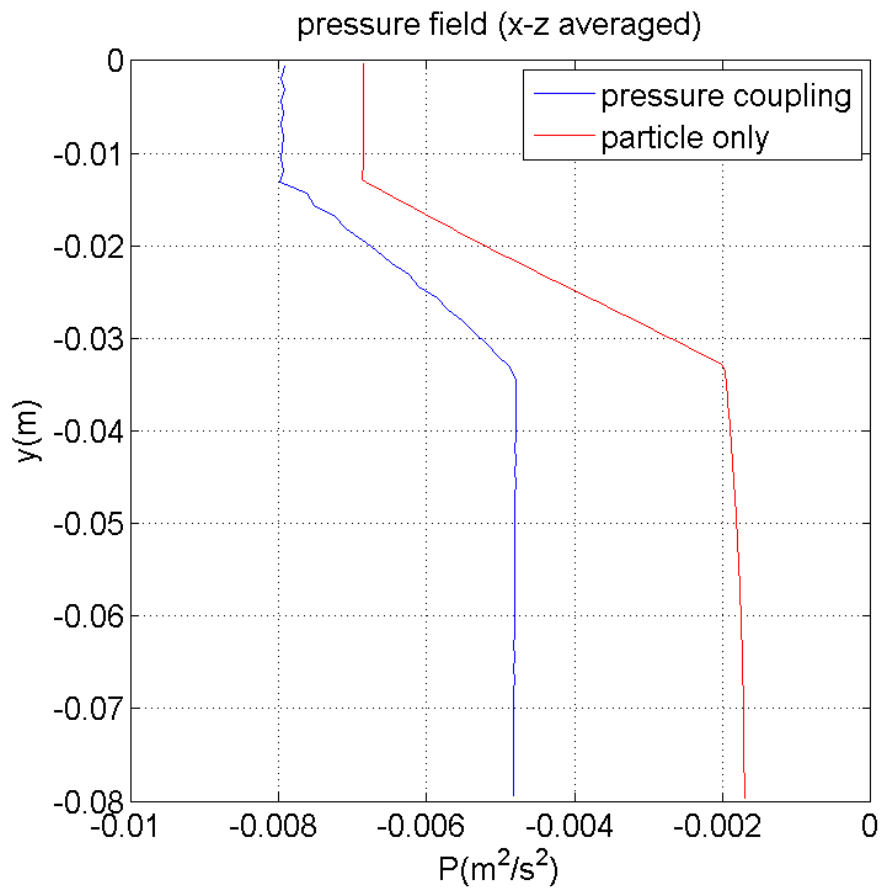


圖 4-22 壓力耦合與純顆粒流動之壓力分佈($t=1s, \phi_0 = 0.0128$)



4.3 顆粒引起之水平異重流

異重流為兩種或兩種以上密度不同且可相溶的流體，因密度差異所產生的相對流動。水流夾帶著顆粒而成的混合流體與純水共存，便是自然界中常見的異重流，而我們所要模擬的異重流類型為 Lock-exchange flow，在一密閉之水槽中裝滿兩種不同密度的流體，初始兩流體之交界面為一垂直線，自靜止釋放後，高密度流體會在底部推擠低密度流體，而低密度流體受推擠後流向原先高密度流體佔據的空間，使得兩流體分別形成方向相反的兩股流動，在其交界面產生渦旋並引起流體混合。

以往 Lock-exchange flow 的數值模擬大多是採用 Eulerian-Eulerian 架構的二相流模式，而本研究嘗試以 Eulerian-Lagrangian 架構的數值方法來進行模擬，實驗參數可見表 4-7，顆粒初始分佈如圖 4-23 所示

表 4-7 異重流模擬

顆粒尺寸	60 μm
顆粒密度	2650 kg/m^3
流體密度	1000 kg/m^3
初始體積分率	0.01
流場尺寸($L \times H \times W$)	0.1m \times 0.04m \times 0.02m
網格解析度($L \times H \times W$)	160 \times 64 \times 32
顆粒數目	1,376,256

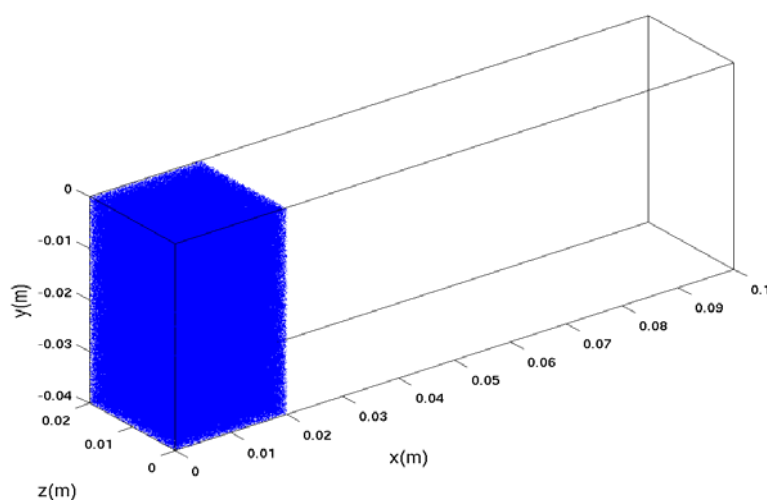


圖 4-23 顆粒初始分佈

自靜止開始運動 0.2 秒後，如圖 4-24(a)，原先垂直的交界面傾斜了一些，表示高密度流體已開始下沉，觀察流場之垂直速度分佈可發現，顆粒所在區域的流速相當一致地呈現往下的流動，而另一側的低密度流體在靠近交界面處則是往上的流動，此表示高密度流體下沉的同時，低密度流體必須即時去填補空缺的區域。經歷大約 0.6 秒之時，已有部分高密度流體潛沒至底部並向右方流動，初始位於上方的顆粒在沉降一段時間後，因重力效應使得其垂直速度比底部的顆粒大，而流體受到顆粒阻力的影響，使得中間深度的流體垂直速度較底部來得大，如圖 4-24(b) 所示。經歷時間達 1 秒時，高密度流體已完全潛沒至底部，且繼續往右方流動，而由於兩種流體的流向完全相反，因此交界面處產生的剪應力引起了渦旋，如圖 4-24(c) 所示，從顆粒散佈圖中可以看到交界處的顆粒被渦旋捲起的現象，此即是 Lock-exchange flow 的重要特徵之一。

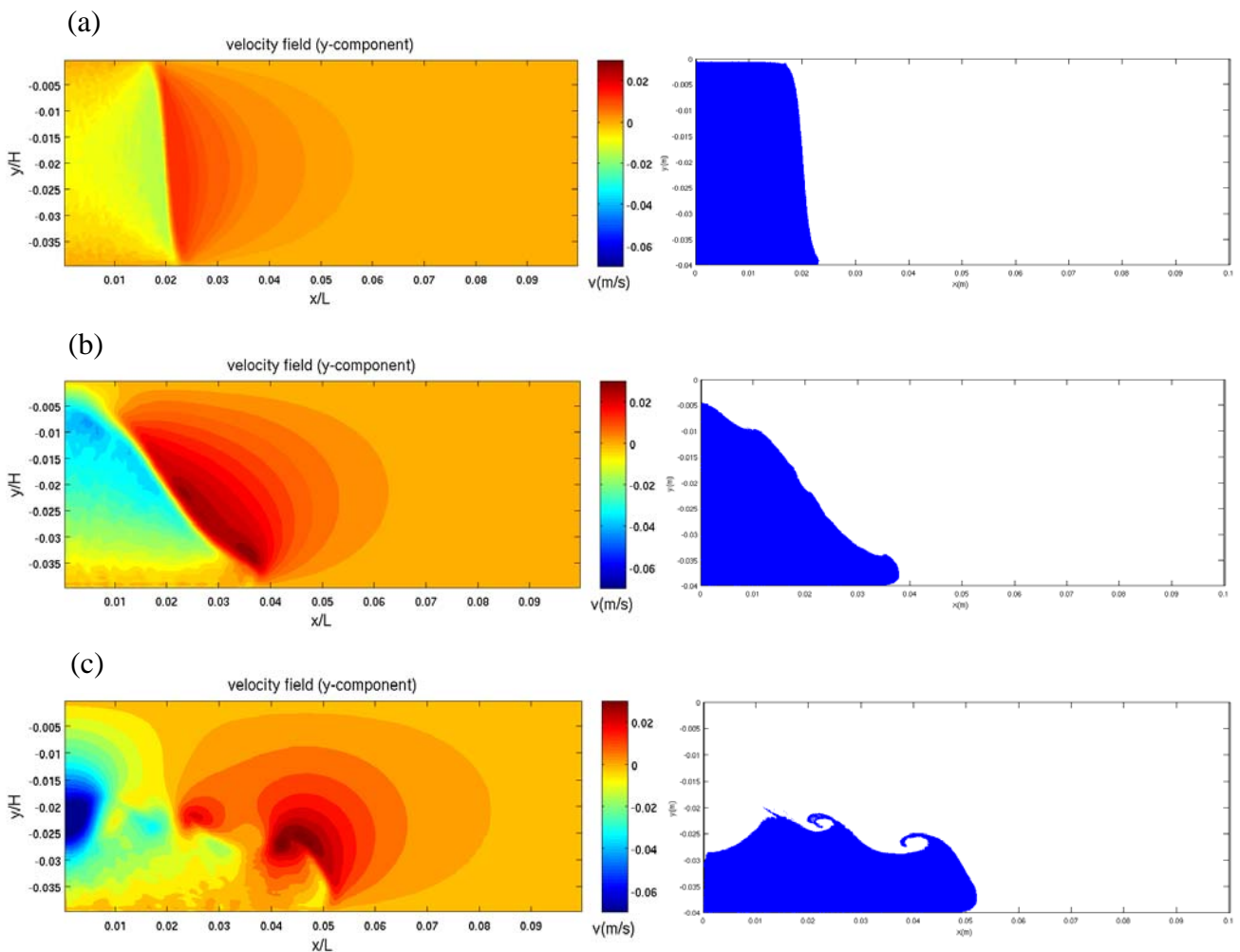


圖 4-24 流場速度(y 方向)與顆粒散佈隨時間之變化，左為流場速度，右為顆粒散佈

(a) $t = 0.2$ s (b) $t = 0.6$ s (c) $t = 1$ s

Chapter 5 結論與未來工作




5.1 結論

本研究針對以往固液二相流的假設稍作修改，承襲 Chou et al.(2014)的理論架構，並採用 Lagrangian 描述法來開發一套固液系統模式，其特點如下所列

1. 我們不延續以往固液二相流採用固氣系統假設的作法，將原先因密度差所忽略的動壓梯度及附加質量效應，重新考慮進顆粒的運動方程式中。並透過相態間之動量交換，將固液二相的動量方程式表示成系統的形式，經由反矩陣的操作後，使附加質量項可被拆解為其餘作用力的分量，藉此簡化數值計算。
2. 對於二相流的連續方程式提出新的定義，即是「混合流體之不可壓縮性」。修改壓力方程式的演算法，定義方程式的來源項為混合流體的體積通量，並提出一合理且嚴謹的混合流體之體積通量計算方法，此理論稱之為「壓力耦合」。
3. 本模式使用的顆粒傳輸系統是將離散的顆粒儲存於尤拉網格上，若顆粒在計算時需要使用到網格資訊，則可立即取得周圍網格的資訊。我們將顆粒的移動分成三個方向執行，並控制顆粒一次不移動超過一個網格，如此可大幅簡化網格接收顆粒及顆粒體積通量的計算流程，因為只需考慮前後一個網格的資訊即可。

實際使用本研究的數值模式來進行模擬並與不同理論架構的模式比較後，我們可得出以下數項結論

1. 考慮潛變流的情況下，本模式的模擬結果與解析解一致，此基礎驗證可證實我們理論的合理性及顆粒傳輸系統的可靠度。而在顆粒自由沉降的模擬中，本模式成功模擬出由顆粒引起的 RT 不穩定性，並利用混合層厚度發展公式求出各組參數所對應的 α 值，除了大尺寸顆粒的特殊情況外，其餘結果皆在合理範圍內。由潛變流及 RT 不穩定性的模擬證實本模式可捕捉到基礎流體力學現象的物理特性。
2. 以顆粒沉降為範例，將本模式與不同理論架構的固液系統模式作比較，改變顆



粒初始濃度對於結果有顯著的差異。在濃度為 0.0128 的模擬結果中，各模式的顆粒沉降速度大致相同，連流場也幾乎沒有差異。然而當濃度提高至 0.0512 後，雖沉降初期仍無顯著之差異，但經歷較長的沉降時間後，壓力耦合模式的顆粒沉降速度明顯較其它兩者來得慢，尤其與附加質量耦合模式的差異最為明顯，而兩者在理論架構上是差異最小的，因為壓力耦合模式已包含了附加質量效應，即是說當顆粒濃度提高時，壓力耦合的影響會相當顯著，此結果與 Chou et al.(2014)的結論相符合。

3. 為了測試本模式是否可模擬出其它流體力學的基礎物理現象，我們以異重流為範例，嘗試模擬 Lock-exchange flow 此一典型異重流問題。過去的研究多是使用 E-E 架構的數值模式來進行模擬，而本研究所開發的 E-L 架構模式亦成功模擬出此現象，且能捕捉到其流動特性，如流體交界面處的渦漩，讓本模式更加具有可靠性。

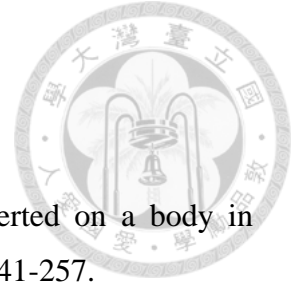


5.2 未來工作

本研究所開發的固液系統模式，在顆粒採用 Lagrangian 法解析的架構下，成功模擬出瑞利泰勒不穩定性及水平異重流等物理現象。然而此數值模式仍有許多不足之處，如下所述：

1. 在高濃度且及細微顆粒的條件下，顆粒數目極為龐大，甚至達到 $O(10^7)$ 的程度，因此儲存顆粒資訊的陣列也相當龐大。然而，受限於程式語言的架構，即使各網格內儲存的顆粒數不相同，我們仍必須建立一個各網格均有相同儲存空間的陣列。若某網格內僅有少許顆粒，甚至是完全沒有顆粒，則該陣列空間便僅是儲存零等無用的資訊，造成其他網格可能儲存空間已不足，此類網格卻浪費了許多儲存空間的窘境。如要改善此問題，應考慮在支援「動態記憶體配置」的程式語言下編譯，針對各網格儲存空間的需求，建立相對應大小的陣列，以有效利用計算時的暫存空間。
2. 顆粒在運動過程中所受的力，除了 2.1 節所列出的之外，尚有顆粒間的作用力並未被考慮進去，即是顆粒碰撞造成的影響。在高濃度的情況下，顆粒間的碰撞機率相當高，因此碰撞造成的作用力便無法忽視。參考以往的文獻，有兩種顆粒碰撞模型較適合我們的模式，其一為 Apte et al.(2008)所使用的碰撞模型，他們為顆粒定義一個碰撞範圍，對任意顆粒而言，在其碰撞範圍的所有顆粒皆會給予該顆粒一正向作用力，因距離遠近影響其作用力的大小，超過範圍以外的顆粒便不加以考慮。我們嘗試使用這個碰撞模型來處理顆粒碰撞，然而計算效率卻十分耗時，若一網格內有 N 個顆粒存在，則必須作 $\sum_{i=1}^N (N-1)$ 次的計算，故此模型雖適合 Lagrangian 架構的數值模式，但由於計算太耗時而暫不採用。其二為 Snider et al.(2001)採用的顆粒正向應力模型，他們將顆粒間的作用力以顆粒體積分率的函數表示之，即是將顆粒整體視為連體來解析此物理量，採用質點網格法的精神，先在尤拉網格上計算出顆粒正向應力，再透過內插求得每個顆粒位置上的值。此法計算相對省時，且由該文獻提供的模擬結果來看，此模型十分健全，能成功模擬出顆粒在底層堆積的現象，因此我們打算朝這方向來建立本模式的顆粒碰撞模型。

參考文獻



Auton, T.R., Hunt, J.C.R., Prud'homme, M., 1988. The force exerted on a body in inviscid unsteady non-uniform rotational flow. *J. Fluid Mech.* 197, 241-257.

Andrews, M.J. and O'Rourke, P.J., 1996. The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particle flow. *Int. J. Multiphase Flow* 22, 379.

Apte, S.V., Mahesh, K., Lundgren, T., 2008. Accounting for finite-size effects in simulations of disperse particle-laden flows. *Int. J. Multiphase Flow* 34, 260-271.

Bradley, W.H., 1965. Vertical density currents. *Science* 150, 1423-1428.

Batchelor, G.K., 1967. *An introduction to fluid dynamics*, Cambridge University Press. Pages 230-235.

Balachandar, S., Eaton, J.K., 2010. Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics* 42, 111-133.

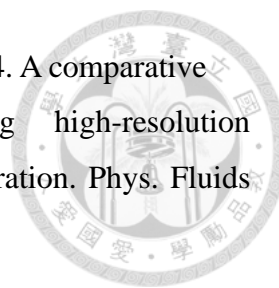
Chorin A.J., 1967 A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comput. Phys.* 2, 12-26.

Cui, A., Street, R.L., 2001. Large-eddy simulation of turbulent rotating convective flow development. *J. Fluid Mech.* 447, 53-84.

Chou, Y.-J., Wu, F.-C., Shih, W.-R., 2014. Toward numerical modeling of fine particle suspension using a two-way coupled Euler–Euler model: Part 1: Formulation and comparison to single-phase approximation. *Int. J. Multiphase Flow* 64, 35-43.

Chou, Y.-J., Wu, F.-C., Shih, W.-R., 2014. Toward numerical modeling of fine particle suspension using a two-way coupled Euler–Euler model: Part 2: Simulation of particle-induced Rayleigh–Taylor instability. *Int. J. Multiphase Flow* 64, 44-54.

Drew, D.A., Passman, S.L., 1998. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer-Verlag, New York



Dimonte, G., Youngs, D.L., Dimits, A., Weber, S., Marinak, M., 2004. A comparative study of the turbulent Rayleigh–Taylor instability using high-resolution three-dimensional numerical simulations: the Alpha-Group collaboration. *Phys. Fluids* 16, 1668-1693.

Elghobashi S, Truesdell GC. 1993. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. I: Turbulence modification. *Phys. Fluids A* 5, 1790-801.

Eaton JK. 2009. Two-way coupled turbulence simulations of gas-particle flows using point particle tracking. *Int. J. Multiphase Flow* 35, 792-800.

Ferry, J., Balachandar, S., 2001. A fast Eulerian method for disperse two-phase flow. *Int. J. Multiphase Flow* 27, 1199-1226.

Ferrante A, Elghobashi S. 2003. On the physical mechanism of two-way coupling in particle-laden isotropic turbulence. *Phys. Fluids* 15, 315-29.

Harlow, F.H., Amsden, A.A., 1971. *Fluid Dynamics, A LASL Monograph, LA-4700* (Los Alamos National Laboratories, Los Alamos, NM, 1971).

Maxey, M.R., Riley, J.J., 1983. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Physics of Fluids* 26, 883-889.

Patankar, N.A., Joseph, D.D., 2001b. Lagrangian numerical simulation of particulate flows. *Int. J. Multiphase Flow* 27, 1685-1706.

Snider, D.M., 2001. An incompressible three-dimensional multiphase particle-in-cell model for dense particle flows. *J. Comput. Phys.* 170, 523-549.

van der Hoef, M.A., van Sint Annaland, M., Deen, N.G., Kuipers, J.A.M., 2008. Numerical simulation of dense gas-solid fluidized beds: a multiscale modeling strategy. *Annual Review of Fluid Mechanics* 40, 47-70.

Youngs, D.L., 1984. Numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh–Taylor instability. *Physica D* 12, 32-44.

Youngs, D.L., 1991. Three-dimensional numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh–Taylor instability. *Phys. Fluids A* 3, 1312-1320.

Zang, Y., Street, R.L., Koseff, J.R., 1994. A non-staggered grid, fractional step method for time-dependent incompressible Navier–Stokes equations in curvilinear coordinates. *J. Comput. Phys.* 114, 18.

