

PhyStar 理论手册

作者：PhyStar 项目组

时间：June 11, 2023

邮箱：czw17@tsinghua.org.com

前言

PhyStar 是一套面向多物理场科学计算的 C++ 库。名称 PhyStar 由 Physics(物理) 和 Star(星) 结合而来，寓意物理之星，中文名为“星曜”。PhyStar 将主要致力于多物理场问题(流体、固体、电磁、热化学、多组分和多相等) 的求解，提供丰富且简易的调用接口。PhyStar 将邀请相关领域优秀的年轻科学家或相关领域从业者进行合作开发与应用，致力于成为一款具有广泛影响力的计算库。由于 PhyStar 初创团队长期从事流体力学以及颗粒湍流两相流的研究，因此，程序的大部分内容以及理论手册中大篇幅内容将与此有关，且大部分内容延续初创团队开发的 Fortran 程序 PARTURB 的说明文档。未来，我们希望会有更加丰富的内容进行添加，一方面作为程序的理论手册，另一方面成为前沿科学工作者的理论手册集合。

作者非常感谢 ElegantL^AT_EX 项目组提供的 Latex 模板。

作者

2023 年 6 月写于清华园

本手册的贡献者

姓名	单位	时间	主要贡献
崔智文	清华大学	2017-至今	手册主体内容



目录

第一部分 流体部分	1
第二部分 颗粒部分	2
1 颗粒求解器基本理论	3
1.1 球形颗粒	3
1.1.1 阻力模型	3
1.1.2 Saffman 升力	3
1.2 椭球颗粒	3
1.2.1 非球形颗粒绕流 Stokes 解的一般形式	3
1.2.2 姿态描述	4
1.2.3 平动模型	5
1.2.4 转动模型	6
1.2.5 颗粒响应时间	6
1.3 弱惯性椭球颗粒模型	7
1.3.1 平动模型	7
1.3.2 转动模型	7
1.4 游动颗粒模型	7
1.5 pFTLE 颗粒模型	7
1.6 颗粒处流场信息插值方法	8
1.6.1 三维二阶拉格朗日插值	8
1.7 时间推进方法	8
1.7.1 二阶显式 Adams-Bashforth 方法	8
1.8 颗粒碰撞	8
第三部分 流固耦合	9

第一部分

流体部分

第二部分

颗粒部分

第一章 颗粒求解器基本理论

1.1 球形颗粒

$$\begin{aligned} m_p \frac{dv_i}{dt} &= F_i^d + F_i^{Saff} \pm (m_p - m_f) g_i \\ I_p \frac{d\omega_i}{dt} &= M_i^d \end{aligned} \quad (1.1)$$

1.1.1 阻力模型

- Stokes 阻力: $\mathbf{F}^d = 6\pi\mu R(\mathbf{u} - \mathbf{v})$.
- 经验阻力公式: $\mathbf{F}^d = 6\pi\mu R(\mathbf{u} - \mathbf{v})(1 + 0.15Re_p^{0.687})$.

1.1.2 Saffman 升力

$$\mathbf{F}^{Saff} = 1.615 J \mu 2R |\Delta \mathbf{u}| \sqrt{\frac{4R^2 |\Omega|}{\nu}} \frac{\Omega \times \Delta \mathbf{u}}{|\Omega| |\Delta \mathbf{u}|} \quad (1.2)$$

其中 $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$.

- 对于 Saffman model 1: $J = 1$
- 对于 Saffman model 2: $J = 0.3(1 + \tanh[2.5(\log_{10} \epsilon + 0.191)])\left(\frac{2}{3} + \tanh(6\epsilon - 1.92)\right)$, 其中 $\epsilon = \sqrt{|\Omega| \nu} \Delta \mathbf{u}$.

1.2 椭球颗粒

1.2.1 非球形颗粒绕流 Stokes 解的一般形式

对于一般非球形的颗粒的绕流问题, 其颗粒的受力可以描述为阻力, 力矩与应力子。它们的表达式分别为:

$$\begin{aligned} F_i &= K_{ij}^t (U_j - v_j) + K_{ij}^c (\Omega_j - \omega_j) + \Phi_{ijk} S_{jk} \\ M_i &= K_{ij}^c (U_j - v_j) + K_{ij}^r (\Omega_j - \omega_j) + \Theta_{ijk} S_{jk} \\ \Sigma_{ij} &= \Phi_{kij} (U_k - v_k) + \Theta_{kij} (\Omega_k - \omega_k) + Q_{ijkl} S_{kl} \end{aligned} \quad (1.3)$$

其中 $K_{ij}^t, K_{ij}^c, K_{ij}^r, \Theta_{ijk}, \Phi_{ijk}, Q_{ijkl}$ 均与颗粒形状有关。同时, 由于应力子的对称性, 这些系数满足一些对称特点, 即

$$\begin{aligned} K_{ij}^t &= K_{ji}^t, \quad K_{ij}^c = K_{ji}^c, \quad K_{ij}^r = K_{ji}^r, \\ \Phi_{ijk} &= \Phi_{ikj}, \quad \Theta_{ijk} = \Theta_{ikj}, \\ Q_{ijkl} &= Q_{ijlk}, \quad Q_{ijkl} = Q_{ijlk}, \quad Q_{ijkl} = Q_{klij}, \quad Q_{ijkl} = Q_{jilk}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

通过公式(1.3)可知,对于一般形状的颗粒,颗粒在流场中受到的合力,合力矩是相互耦合,且应力子也与颗粒的平动相关。但对于中心对称颗粒, $K_{ij}^c = 0, \phi_{ijk} = 0$. 即:

$$\begin{aligned} F_i &= K_{ij}^t(U_j - v_j) \\ M_i &= K_{ij}^r(\Omega_j - \omega_j) + \Theta_{ijk}S_{jk} \\ \Sigma_{ij} &= \Theta_{kij}(\Omega_k - \omega_k) + Q_{ijkl}S_{kl}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

理论上,如果我们能获得任意形状颗粒的这些参数的具体表达式或者数值,我们便可以将其用于点颗粒计算。

1.2.2 姿态描述

对于非球形颗粒,颗粒的取向需要考虑。在此,我们引入颗粒的姿态描述。在介绍姿态描述之前,我们需要定义惯性坐标系,随体坐标系和颗粒坐标系,并阐述两种坐标系之间的联系。在本程序中,默认使用椭球颗粒模型。基矢量转换关系: $\mathbf{g}_{i'} = R_{ii'}\mathbf{g}_i, \mathbf{g}_i = R_{ii'}\mathbf{g}_{i'}$ 。其中 \mathbf{g}_i 惯性

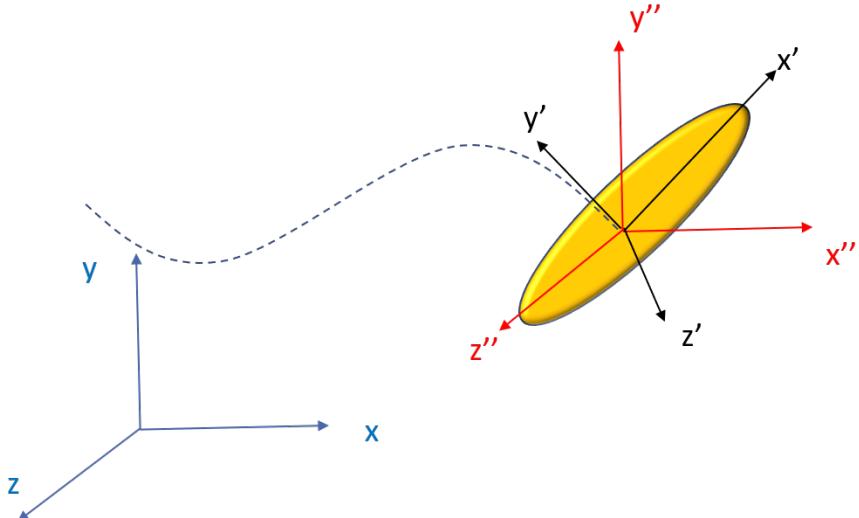


图 1.1: 坐标系示意图

坐标系的基矢量, $\mathbf{g}_{i'}$ 颗粒坐标系的基矢量。

将惯性空间的矢量在颗粒坐标系中描述: $\mathbf{n} = n_i \mathbf{g}_i = n_i R_{ii'} \mathbf{g}_{i'}$

将颗粒空间的矢量在惯性坐标系中描述: $\mathbf{n}' = n_{i'} \mathbf{g}_{i'} = n_{i'} R_{i'i} \mathbf{g}_i$

将惯性空间的张量在颗粒坐标系中描述: $\mathbf{K} = K_{ij} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j = K_{ij} R_{ii'} R_{jj'} \mathbf{g}_{i'} \mathbf{g}_{j'}$

将颗粒空间的张量在惯性坐标系中描述: $\mathbf{K}' = K_{i'j'} \mathbf{g}_{i'} \mathbf{g}_{j'} = K_{i'j'} R_{i'i} R_{j'j} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j$

1.2.2.1 欧拉角与卡丹角

1.2.2.2 欧拉四元数

在数值计算中,欧拉角和卡丹角容易产生奇异性。但我们可以用欧拉四元数来表征颗粒的取向。对于欧拉四元数的数学原理详见[REF](#)

$$e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = 1 \quad (1.6)$$

$$\mathbf{R}_{ii'} = \begin{bmatrix} e_0^2 + e_1^2 - e_2^2 - e_3^2 & 2(e_1e_2 + e_0e_3) & 2(e_1e_3 - e_0e_2) \\ 2(e_1e_2 - e_0e_3) & e_0^2 - e_1^2 + e_2^2 - e_3^2 & 2(e_2e_3 + e_0e_1) \\ 2(e_1e_3 + e_0e_2) & 2(e_2e_3 - e_0e_1) & e_0^2 - e_1^2 - e_2^2 + e_3^2 \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

$$\mathbf{e} = [e_0 \ e_1 \ e_2 \ e_3]^T$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} -e_1 & e_0 & e_3 & -e_2 \\ -e_2 & -e_3 & e_0 & e_1 \\ -e_3 & e_2 & -e_1 & e_0 \end{bmatrix} \quad (1.8)$$

$$\dot{\mathbf{e}} = \frac{1}{2} \mathbf{G}^T \boldsymbol{\omega}' \quad (1.9)$$

1.2.3 平动模型

对于一般性的椭球颗粒，其平动方程为

$$m_p \frac{dv_i}{dt} = \mu K_{ij} \Delta u_j \pm (m_p - m_f) \mathbf{g} \quad (1.10)$$

其中 $K_{ij} = R_{ii'} K_{i'j'} R_{j'j}$, 取决于颗粒的取向. 其任意椭球体的 Stokes 阻力模型 (H. Brenner, 1963):

$$\mathbf{K}' = 16\pi \left[\frac{\mathbf{g}_1 \mathbf{g}_1}{\chi + a_1^2 \alpha_1} + \frac{\mathbf{g}_2 \mathbf{g}_2}{\chi + a_2^2 \alpha_2} + \frac{\mathbf{g}_3 \mathbf{g}_3}{\chi + a_3^2 \alpha_3} \right] \quad (1.11)$$

为了方便表述, \mathbf{g}_i 代表固结在颗粒坐标系上的基矢量。其中 $a_i (i = 1, 2, 3)$ 分别代表椭球三个主轴的半轴长, 而 α_i 和 χ 均代表椭球体的形状因子。其各自的表达式为

$$\chi = \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\Delta(\lambda)}, \quad (1.12)$$

$$\alpha_i = \int_0^\infty \frac{d\lambda}{(a_j^2 + \lambda) \Delta(\lambda)} \quad (j = 1, 2, 3). \quad (1.13)$$

其中

$$\Delta(\lambda) = \sqrt{(a_1^2 + \lambda)(a_2^2 + \lambda)(a_3^2 + \lambda)}, \quad (1.14)$$

将平动模型化简后,

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{12\nu}{Dr^2 k_1 k_2 k_3} \tilde{K}_{i'j'} R_{i'i} R_{j'j} \Delta u_j \pm (1 - \frac{1}{D}) g_i \quad (1.15)$$

其中 D 为颗粒与流体的密度比 ρ_p/ρ_f , k_i 为颗粒的长细比, 即 $k_i = a_i/r$. r 为参考半径。而无量纲阻力矩阵 $\tilde{\mathbf{K}}'$ 为

$$\tilde{\mathbf{K}}' = \left[\frac{\mathbf{g}_1 \mathbf{g}_1}{\tilde{\chi} + k_1^2 \tilde{\alpha}_1} + \frac{\mathbf{g}_2 \mathbf{g}_2}{\tilde{\chi} + k_2^2 \tilde{\alpha}_2} + \frac{\mathbf{g}_3 \mathbf{g}_3}{\tilde{\chi} + k_3^2 \tilde{\alpha}_3} \right] \quad (1.16)$$

而进行归一化的形状因子分别表示为:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha} &= \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\Delta(\lambda)(k_1^2 + \lambda)}, & \tilde{\beta} &= \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\Delta(\lambda)(k_2^2 + \lambda)}; \\ \tilde{\gamma} &= \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\Delta(\lambda)(k_3^2 + \lambda)}, & \tilde{\chi} &= \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\Delta(\lambda)}; \end{aligned} \quad (1.17)$$

对于回转体的椭球颗粒, 令 $r = a_1, a_1 = a_2$. 则有 $k_1 = k_2 = 1, k_3 = \lambda$ (这里的 λ 指的长轴与短轴之比).

此时椭球体的形状参数有解析解:



	碟状颗粒	球形颗粒	杆状颗粒
	$\lambda < 1$	$\lambda = 1$	$\lambda > 1$
$\tilde{\alpha}_1 = \tilde{\alpha}_2$	$-\frac{B-\pi}{2(1-\lambda^2)^{3/2}} - \frac{\lambda}{(1-\lambda^2)}$	$2/3$	$\frac{-A}{2(\lambda^2-1)^{3/2}} + \frac{\lambda}{(\lambda^2-1)}$
$\tilde{\alpha}_3$	$\frac{B-\pi}{(1-\lambda^2)^{3/2}} + \frac{2}{(1-\lambda^2)\lambda}$	$2/3$	$\frac{A}{(\lambda^2-1)^{3/2}} - \frac{2}{\lambda(\lambda^2-1)}$
$\tilde{\chi}$	$-\frac{B-\pi}{(1-\lambda^2)}$	2	$\frac{A}{\sqrt{\lambda^2-1}}$

其中 $A = 2 \ln(\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 1})$ 和 $B = 2 \arctan \frac{\lambda}{\sqrt{1-\lambda^2}}$

1.2.4 转动模型

椭球颗粒转动动力学模型 (Jeffery, 1922; Lundell, 2011; Lundell & Carlsson, 2010):

$$\mathbf{I}' \cdot \dot{\boldsymbol{\omega}}' + \boldsymbol{\omega}' \times (\mathbf{I}' \cdot \boldsymbol{\omega}') = \mathbf{M}' \quad (1.18)$$

其中 $'$ 代表颗粒坐标系。颗粒受到的合外力矩为 \mathbf{M}'

$$\begin{aligned} M_{1'} &= \frac{16\pi\mu}{3(a_2^2\alpha_2 + a_3^2\alpha_3)} [(a_2^2 - a_3^2)S_{2'3'} + (a_2^2 + a_3^2)(\Omega_{3'2'} - \omega_{1'})] \\ M_{2'} &= \frac{16\pi\mu}{3(a_3^2\alpha_3 + a_1^2\alpha_1)} [(a_3^2 - a_1^2)S_{1'3'} + (a_3^2 + a_1^2)(\Omega_{1'3'} - \omega_{2'})] \\ M_{3'} &= \frac{16\pi\mu}{3(a_1^2\alpha_1 + a_2^2\alpha_2)} [(a_1^2 - a_2^2)S_{1'2'} + (a_1^2 + a_2^2)(\Omega_{2'1'} - \omega_{3'})] \end{aligned} \quad (1.19)$$

写成基于角速度的微分方程形式

$$\begin{aligned} \frac{d\omega_{1'}}{dt} &= \frac{20\nu}{Dr^2k_1k_2k_3}\tilde{M}_{1'} - \Theta_1\omega_{2'}\omega_{3'} \\ \frac{d\omega_{2'}}{dt} &= \frac{20\nu}{Dr^2k_1k_2k_3}\tilde{M}_{2'} - \Theta_2\omega_{1'}\omega_{3'} \\ \frac{d\omega_{3'}}{dt} &= \frac{20\nu}{Dr^2k_1k_2k_3}\tilde{M}_{3'} - \Theta_3\omega_{1'}\omega_{2'} \end{aligned} \quad (1.20)$$

为此, 定义新的形状参数为 $\Theta_1 = \frac{k_2^2 - k_3^2}{k_2^2 + k_3^2}, \Theta_2 = \frac{k_3^2 - k_1^2}{k_3^2 + k_1^2}, \Theta_3 = \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1^2 + k_2^2}$, 则对应的无量纲力矩为

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{1'} &= \frac{1}{(k_2^2\tilde{\alpha}_2 + k_3^2\tilde{\alpha}_3)} [\Theta_1 S_{2'3'} + (\Omega_{3'2'} - \omega_{1'})] \\ \tilde{M}_{2'} &= \frac{1}{(k_3^2\tilde{\alpha}_3 + k_1^2\tilde{\alpha}_1)} [\Theta_2 S_{1'3'} + (\Omega_{1'3'} - \omega_{2'})] \\ \tilde{M}_{3'} &= \frac{1}{(k_1^2\tilde{\alpha}_1 + k_2^2\tilde{\alpha}_2)} [\Theta_3 S_{1'2'} + (\Omega_{2'1'} - \omega_{3'})] \end{aligned} \quad (1.21)$$

1.2.5 颗粒响应时间

考虑颗粒取向随机, 定义颗粒的平动响应时间为 (H. Brenner, 1963; Shin & Koch, 2005)

$$\tau_p = \frac{Dr^2k_1k_2k_3}{12\nu} \frac{1}{\bar{K}} \quad (1.22)$$

其中 \bar{K}

$$\bar{K} = 3(\tilde{K}_{1'1'}^{-1} + \tilde{K}_{2'2'}^{-1} + \tilde{K}_{3'3'}^{-1})^{-1} \quad (1.23)$$

对于回转椭球体, 其颗粒响应时间有解析解 (Shapiro & Goldenberg, 1993)(注: $\lambda = a/b$, 其中 a 为长半轴, b 为短半轴。表达式取决于颗粒的长细比定义方式。)

$$\tau_{p,prolate} = \frac{Da^2\lambda}{9\nu} \frac{2 \ln(\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 1})}{\sqrt{\lambda^2 - 1}} \quad (1.24)$$

$$\tau_{p,oblate} = \frac{Da^2\lambda}{9\nu} \frac{\pi - 2 \arctan \frac{\lambda}{\sqrt{1-\lambda^2}}}{\sqrt{1-\lambda^2}} \quad (1.25)$$

目前，暂时没有颗粒转动的响应时间的估计公式。

1.3 弱惯性椭球颗粒模型

当颗粒尺寸和密度足够小(大于或等于流体密度)，一般的颗粒运动模型的加速项计算十分困难。在此，我们认为颗粒的合外力为零。因此，可以得出弱惯性椭球颗粒的运动控制方程。

1.3.1 平动模型

当 $\frac{dv}{dt} = 0$, 方程 (1.10) 为

$$\mu K_{ij} \Delta u_j \pm (m_p - m_f) \mathbf{g} = 0 \quad (1.26)$$

因此，颗粒的速度将由两部分组成

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{u} + \mathbf{v}_g \\ \mathbf{v}_g &= \pm \frac{Dr^2 k_1 k_2 k_3}{12\nu} \left(1 - \frac{1}{D}\right) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{g} \end{aligned} \quad (1.27)$$

其中 \mathbf{v}_g 为 Stokes 沉降速度, \mathbf{u} 为颗粒处的流体速度。当不考虑沉降时，颗粒完全跟随流体。

1.3.2 转动模型

同理，让 $\frac{d\omega'}{dt} = 0$, 颗粒的转动速度为

$$\begin{aligned} \omega_{1'} &= \Theta_1 S_{2'3'} + \Omega_{3'2'} \\ \omega_{2'} &= \Theta_2 S_{1'3'} + \Omega_{1'3'} \\ \omega_{3'} &= \Theta_3 S_{1'2'} + \Omega_{2'1'} \end{aligned} \quad (1.28)$$

1.4 游动颗粒模型

1.5 pFTLE 颗粒模型

此类颗粒的类型主要用来计算随流体轨迹线的李雅普诺夫指数和拉格朗日拉伸与压缩方向。本颗粒不直接求解变形梯度张量，而是直接求解左柯西格林张量的特征向量与特征值进行近似计算。具体的概念与实现过程，可见 Cui et al.(Draft). 在此，仅简要给出公式。

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_1 &= \tilde{\Omega}_1 + \epsilon_1 \tilde{S}_{23}, \\ \tilde{\omega}_2 &= \tilde{\Omega}_2 + \epsilon_2 \tilde{S}_{31}, \\ \tilde{\omega}_3 &= \tilde{\Omega}_3 + \epsilon_3 \tilde{S}_{12}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

其中

$$\epsilon_1 = \frac{e^{2\rho_2} + e^{2\rho_3}}{e^{2\rho_2} - e^{2\rho_3}}, \epsilon_2 = \frac{e^{2\rho_3} + e^{2\rho_1}}{e^{2\rho_3} - e^{2\rho_1}}, \epsilon_3 = \frac{e^{2\rho_1} + e^{2\rho_2}}{e^{2\rho_1} - e^{2\rho_2}}. \quad (1.30)$$

而各个向量方向上的特征值的时间推进为：

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \tilde{S}_{ii} \quad (1.31)$$

1.6 颗粒处流场信息插值方法

1.6.1 三维二阶拉格朗日插值

本程序的颗粒处的插值函数使用的是二阶拉格朗日插值。(注：在算有壁面问题时，壁面附近的网格不能太密，比如用 $\cos \frac{2\pi j}{N}$ ，此网格在算高雷诺数问题时，插值容易出现龙格现象。)

1.6.1.1 均匀网格方向

1.6.1.2 非均匀网格方向

1.7 时间推进方法

1.7.1 二阶显式 Adams-Basforth 方法

对于常微分方程组 $\dot{f} = g$ 。

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = \frac{3}{2}g^n - \frac{1}{2}g^{n-1} \quad (1.32)$$

1.8 颗粒碰撞



第三部分

流固耦合

参考文献

- BATCHELOR, G. K. 1970 The stress system in a suspension of force-free particles. *Journal of Fluid Mechanics* **41** (3), 545–570, publisher: Cambridge University Press.
- BRUCKER, KYLE A., ISAZA, JUAN C., VAITHIANATHAN, T. & COLLINS, LANCE R. 2007 Efficient algorithm for simulating homogeneous turbulent shear flow without remeshing. *Journal of Computational Physics* **225** (1), 20–32.
- H. BRENNER 1963 The Stokes resistance of an arbitrary particle. *Chemical Engineering Science* **18**, 1–25.
- JEFFERY, G. B. 1922 The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **102** (715), 161–179.
- LUNDELL, FREDRIK 2011 The effect of particle inertia on triaxial ellipsoids in creeping shear: From drift toward chaos to a single periodic solution. *Physics of Fluids* **23** (1), 011704.
- LUNDELL, FREDRIK & CARLSSON, ALLAN 2010 Heavy ellipsoids in creeping shear flow: Transitions of the particle rotation rate and orbit shape. *Phys. Rev. E* **81**, 016323.
- LUNDGREN, T S 2003 Linearly forced isotropic turbulence. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs* p. 13.
- MACHIELS, L. 1997 Predictability of Small-Scale Motion in Isotropic Fluid Turbulence. *Phys. Rev. Lett.* **79** (18), 3411–3414.
- ROGALLO, S 1981 Numerical Experiments in Homogeneous Turbulence. *National Aeronautics and Space Administration*.
- ROSALES, CARLOS & MENEVEAU, CHARLES 2005 Linear forcing in numerical simulations of isotropic turbulence: Physical space implementations and convergence properties. *Physics of Fluids* **17** (9), 095106.
- SHAPIRO, MICHAEL & GOLDENBERG, MOSHE 1993 Deposition of glass fiber particles from turbulent air flow in a pipe. *Journal of Aerosol Science* **24** (1), 65–87.
- SHIN, MANSOO & KOCH, DONALD L. 2005 Rotational and translational dispersion of fibres in isotropic turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics* **540**, 143–173.
- SULLIVAN, NEAL P., MAHALINGAM, SHANKAR & KERR, ROBERT M. 1994 Deterministic forcing of homogeneous, isotropic turbulence. *Physics of Fluids* **6** (4), 1612–1614.