

黏性液滴变形过程的核梯度修正 光滑粒子动力学模拟^{*}

蒋 涛 欧阳洁[†] 赵晓凯 任金莲

(西北工业大学理学院应用数学系, 西安 710129)

(2010年7月9日收到; 2010年8月22日收到修改稿)

本文提出了一种核梯度改进光滑粒子动力学(KGC-SPH)方法, 模拟了黏性液滴形变自由表面问题. 首先, 通过模拟等温黏性液滴拉伸和旋转变形, 验证了 KGC-SPH 法较 SPH 法具有较高精度和更好稳定性, 且能很好地保持总角动量守恒. 其次, 基于非等温 van der Waals 模型对平衡态圆形液滴的形成过程进行数值研究, 观察到小幅度振荡现象, 并给出了一种新的克服张力不稳定性的方法和一种适合 KGC-SPH 方法的新的表面张力处理技术. 最后, 研究了 van der Waals 液滴的周期性振荡现象, 讨论了初始椭圆形液滴长短半轴比例、雷诺数对液滴振幅及振荡周期的影响.

关键词: 光滑粒子动力学, 黏性液滴, van der Waals 模型, 表面张力

PACS: 47.11.-j, 44.10.+i, 47.85.-g

1. 引言

自由表面流动^[1,2]或大变形^[3,4]现象广泛存在于日常生活或工业生产之中, 目前人们已经发展了多种数值方法来追踪自由表面. 如质点粒子单元法^[5]和 Lattice-Boltzmann^[6,7]等无网格类方法^[8-10], 有限差分、有限体积等网格类方法. 光滑粒子动力学(smoothed particle hydrodynamics, SPH)方法是一种纯粹的粒子方法, 该方法最初提出是为求解三维无边界空间的行星运动问题^[11]. 在 1994 年开始被应用于自由表面流问题^[12], 并被广泛应用于黏性流体^[13,14], 多相流^[15,16]等问题. 与上述方法相比, SPH 方法计算空间导数时不需要使用任何网格, 自由面模拟过程中不需要额外追踪技术(如 VOF(volume-of-fluid)方法); 能避免对流占优带来的数值困难问题; 程序实现容易, 特别是三维问题.

传统 SPH 方法虽然有很多优点, 但它也存在一些缺点, 其缺点主要表现在精度不高和数值稳定性差这两方面, 特别在粒子分布不均和边界处尤为明显. 此外, 传统 SPH 离散的控制方程通常不能保持

总角动量守恒. 近年来, 针对 SPH 的缺点已提出了很多改进方法^[17-20], 这些改进格式大多着眼于恢复 SPH 方法中核近似的相容性, 以改善其计算精度, 同时忽略了粒子之间的相互作用. 事实上, 利用传统 SPH 模拟流动问题时, 通常将流体控制方程中速度、应力等物理量的导数形式近似成以核梯度形式的粒子离散形式. 因此, 控制方程离散格式中核梯度的精度, 以及在此格式中是否考虑了粒子间的相互作用将直接影响到整个数值模拟的精度、稳定性等问题.

本文在黏性变形液滴的数值模拟过程中, 为提高传统 SPH 离散格式的精度与稳定性, 基于梯度离散和 Taylor 级数展开思想, 对核梯度形式进行修正, 并考虑粒子间相互作用, 提出了核梯度修正 SPH (kernel gradient corrected SPH, KGC-SPH) 方法. 与传统 SPH 法相比, 此方法具有较高的精度和更好的稳定性, 并且能很好保持总角动量守恒. 文中先是模拟了等温情况下黏性液滴拉伸和旋转变形过程, 对 KGC-SPH 方法的有效性进行了验证. 之后对复杂 van der Waals 模型液滴变形过程^[15,21-23]进行了数值研究, 模拟中, 为克服张力不稳定性给出了一种

* 国家自然科学基金(批准号: 10871159), 国家重点基础研究发展计划(973)项目(批准号: 2005CB321704)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: jieouyang@nwpu.edu.cn

新的变光滑长度方法,同时为准确追踪液滴表面变形,给出了一种适合 KGC-SPH 方法的新的表面张力处理方式.最后,对 van der Waals 液滴在一定条件下出现的周期性振荡现象进行了研究.

2. 热传导流体控制方程

在二维 Lagrange 坐标系下,忽略重力时非等温可压黏性流体^[8,23]的质量、动量、能量守恒控制方程为

$$\frac{dp}{dt} = -\rho \frac{\partial v^\beta}{\partial x^\beta}, \quad (1)$$

$$\frac{dv^\alpha}{dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta}, \quad (2)$$

$$\frac{de}{dt} = \frac{1}{\rho} \left(\sigma^{\alpha\beta} \frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\beta} - \frac{\partial q^\beta}{\partial x^\beta} \right), \quad (3)$$

其中, ρ 为密度, v^β 为流体速度矢量 v 第 β 个分量, $\sigma^{\alpha\beta}$ 总应力张量 σ 的第 (α, β) 个分量, e 为特定内能, q^β 为热通矢量 q 第 β 个分量. 通常情况下, d/dt 为物质导数 $d/dt = \partial/\partial t + v^\beta \partial/\partial x^\beta$.

总应力张量 σ 由各向同性压力 p 和黏性应力张量 τ 两部分组成, 即

$$\sigma^{\alpha\beta} = -p\delta^{\alpha\beta} + \tau^{\alpha\beta}, \quad (4)$$

其中, $\delta^{\alpha\beta}$ 表示单位张量分量, 黏性应力张量分量 $\tau^{\alpha\beta}$ 的表达式为

$$\begin{aligned} \tau^{\alpha\beta} = & \eta (\nabla v + (\nabla v)^T)^{\alpha\beta} \\ & + (\zeta - \frac{2}{d}\eta) (\nabla \cdot v) \delta^{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (5)$$

η 和 ζ 分别表示为流体剪切、体积黏度, d 为空间维数. 假设热通量 q 遵从 Fourier 法则, 即

$$q^\beta = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x^\beta}, \quad (6)$$

其中 κ 为热传导系数, T 为流体温度.

为使方程(1)–(3)封闭, 选择下面基于 van der Waals 模型的压力和内能状态方程^[15]

$$p = \frac{\rho k_B T}{1 - \rho b} - \bar{a} \rho^2, \quad (7)$$

$$e = \frac{\xi}{2} \bar{k}_B T - \bar{a} \rho, \quad (8)$$

这里 $\bar{k}_B = k_B/m$, $\bar{a} = a/m^2$, $\bar{b} = b/m$, ξ 为粒子自由度数, 其中 k_B 是 Boltzmann 常数, a 为控制相邻粒子间吸引力的参数, b 为取决于粒子有限尺寸的常数, m 表示粒子质量.

3. KGC-SPH 离散格式

3.1. 传统 SPH 离散

传统 SPH 方法, 通过核函数进行积分插值^[11]. 数值模拟中流体域 Ω 用有限个粒子表示, 对每个粒子赋有一定的质量、速度及其他相关的物理性质, 粒子随着流体一起运动. 传统 SPH 离散格式需经过核近似和粒子近似两个步骤.

对任意函数 A 及其一阶导数 ∇A 在位置 $\mathbf{r} = (x, y)$ 处的 SPH 核近似通常表示为

$$\langle A(\mathbf{r}) \rangle = \int_{\Omega} A(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}', \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla A(\mathbf{r}) \rangle = & \int_{\Omega} A(\mathbf{r}') \nabla W d\mathbf{r}' \\ & - A(\mathbf{r}) \int_{\Omega} \nabla W d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h)$ 称为核函数或光滑函数, 它的选择一般需要满足正则化、对称性、紧致性和 Dirac 函数性质^[18,24], ∇W 为核函数梯度, h 为光滑长度. 通过(9)和(10)式对第 i 个粒子在 $\mathbf{r}_i = (x, y)$ 处进行粒子插值近似, 可得

$$A_i = \sum_j V_j A_j W_{ij}, \quad (11)$$

$$\left(\frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}_i} \right) = \sum_j V_j (A_j - A_i) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad (12)$$

其中 V_j 为第 j 个粒子所占体积, 常取 $V_j = m_j/\rho_j$, $W_{ij} = W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, h)$, $\partial W_{ij}/\partial \mathbf{r}_i = \partial W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, h)/\partial \mathbf{r}_i$, $\partial W_{ij}/\partial \mathbf{r}_i = -\partial W_{ji}/\partial \mathbf{r}_j$. 本文取分段三次样条作为核函数^[25], 此时支持域半径为 $2h$.

由(12)式, 得到速度、温度梯度的 SPH 粒子离散格式为

$$(\nabla f) = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij}, \quad (13)$$

其中 f 可代表速度矢量 v 和温度 T . 同样可以得到质量式(1)的离散格式为

$$\left(\frac{dp}{dt} \right)_i = \rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_i^\beta - v_j^\beta) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (14)$$

由(14)式可以求得每个时刻的粒子密度. 当粒子质量取定, 总粒子数在模拟过程中不变时, 利用密度求和公式

$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}, \quad (15)$$

将会更有利于本文中的数值模拟^[13,15].

对于动量和能量守恒方程(2),(3),考虑粒子间相互作用,并结合公式

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta} = \frac{\partial(\sigma^{\alpha\beta}/\rho)}{\partial x^\beta} + \frac{\sigma^{\alpha\beta}}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x^\beta}, \quad (16)$$

得

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt} \right)_i = \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{de}{dt} \right)_i &= \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} \\ &- \sum_j m_j \left(\frac{q_i^\beta}{\rho_i^2} + \frac{q_j^\beta}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \end{aligned} \quad (18)$$

由

$$\frac{dx_i^\alpha}{dt} = v_i^\alpha, \quad (19)$$

即得粒子位置.

在数值模拟中,为求解方程组(13)–(14),(17)–(19),采用具有二阶精度和较好稳定性的简单预估校正格式离散时间.简单预估校正格式以及时间步长选取原则可参见文献[13,19].

3.2. 核梯度修正 SPH 方法

由 SPH 梯度离散公式(13)可知,核梯度 $\nabla_i W_{ij}$ 对控制方程离散格式的精度、稳定性和总角动量守恒性有重要影响.

将(10)式中右端第一项 $A(\mathbf{r}')$ 在 \mathbf{r} 处进行二阶 Taylor 展开得到

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} A(\mathbf{r}') \nabla W d\mathbf{r}' &= A(\mathbf{r}) \int_{\Omega} \nabla W d\mathbf{r}' \\ &+ \frac{\partial A(\mathbf{r})}{\partial x} \int_{\Omega} (x' - x) \nabla W d\mathbf{r}' \\ &+ \frac{\partial A(\mathbf{r})}{\partial y} \int_{\Omega} (y' - y) \nabla W d\mathbf{r}' \\ &+ O(h^2), \end{aligned} \quad (20)$$

将(20)式代入(10)式得

$$\begin{aligned} \langle \nabla A(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{\partial A(\mathbf{r})}{\partial x} \underbrace{\int_{\Omega} (x' - x) \nabla W d\mathbf{r}'}_X \\ &+ \frac{\partial A(\mathbf{r})}{\partial y} \underbrace{\int_{\Omega} (y' - y) \nabla W d\mathbf{r}'}_Y \\ &+ O(h^2). \end{aligned} \quad (21)$$

当下面条件

$$X = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

满足时,核近似格式(10)具有二阶精度.

由(21)式可得到下面离散格式:

$$\begin{aligned} \langle \nabla A(\mathbf{r}_i) \rangle &= \frac{\partial A(\mathbf{r}_i)}{\partial x_i} \underbrace{\sum_j (x_j - x_i) \nabla_i W_{ij} V_j}_X \\ &+ \frac{\partial A(\mathbf{r}_i)}{\partial y_i} \underbrace{\sum_j (y_j - y_i) \nabla_i W_{ij} V_j}_Y, \end{aligned} \quad (23)$$

上式中 X, Y 仅对内部粒子分布均匀的区域满足条件(22),对于粒子分布不均匀或边界处,条件(22)均不满足,从而降低了(13)式的精度,进而影响整个数值模拟的精度、稳定性等^[20,26,27].为了使得离散格式(23)中 X, Y 满足条件(22),本文将核梯度 $\nabla_i W_{ij}$ 修正为

$$\nabla_i^C W_{ij} = L(\mathbf{r}_i) \nabla_i W_{ij}, \quad (24)$$

其中 $L(\mathbf{r}_i)$ 为与粒子 i 相关的局部可逆矩阵

$$L(\mathbf{r}_i) = \left(\sum_j \begin{pmatrix} x_{ji} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i} & y_{ji} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i} \\ x_{ji} \frac{\partial W_{ij}}{\partial y_i} & y_{ji} \frac{\partial W_{ij}}{\partial y_i} \end{pmatrix} V_j \right)^{-1}, \quad (25)$$

其中 $x_{ji} = x_j - x_i, y_{ji} = y_j - y_i$. 将(23)式右端项中 $\nabla_i W_{ij}$ 用 $\nabla_i^C W_{ij}$ 代替,易验证此时 X, Y 满足条件(22).这样无论区域内粒子分布是否均匀或在边界处,梯度离散格式(13)均有二阶精度. 数值模拟过程中,与粒子 i 相关的(25)式中矩阵若出现奇异或病态现象.可根据文献[19,28]中的变光滑长度思想,将粒子 i 处对应的光滑长度进行适当调整以解决其矩阵奇异或病态的问题.

将方程(13)–(14)和(17),(18)中核梯度 $\nabla_i W_{ij}$ 用 $\nabla_i^C W_{ij}$ 代替,即得到控制方程的 KGC-SPH 离散格式

$$\left(\frac{d\rho}{dt} \right)_i = \rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_i^\beta - v_j^\beta) \frac{\partial^C W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \quad (26)$$

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt} \right)_i = \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial^C W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{de}{dt} \right)_i &= \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial^C W_{ij}}{\partial x_i^\beta} \\ &- \sum_j m_j \left(\frac{q_i^\beta}{\rho_i^2} + \frac{q_j^\beta}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial^C W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \end{aligned} \quad (28)$$

$$(\nabla f) = m \sum_j \frac{(f_j - f_i)}{\rho_j} \nabla_i^C W_{ij}. \quad (29)$$

离散格式(26)和(29)满足函数梯度一阶相容性,且能提高求解精度和稳定性.值得注意的是,虽然离

散格式(27)和(28)违背了上面 Taylor 展开和相容性原则,同时与文献[19,20]中改进 SPH 动量方程的离散形式不同,但此格式考虑了粒子之间的相互影响,提高了传统 SPH 方法的精度和稳定性,同时满足总角动量守恒. KGC-SPH 法的有效性将在 4.1 节进行数值验证.

3.3. 张力不稳定性及表面张力处理技术

3.3.1. 张力不稳定性处理技术

利用 SPH 方法模拟流体时会发生非物理粒子簇集现象,即所谓张力不稳定性^[29]. 解决张力不稳定性的方法有很多,较常使用的解决方法是在动量和能量方程中施加一个人工应力项^[22,30,31]. 数值模拟中作者发现,这种施加人工应力的方式虽能克服粒子簇集现象,但会使原来正常区域内粒子分布更加不均匀从而降低数值精度. 由文献[28]知,采用自适应核近似(变光滑长度)会增加数值精度和改善稳定性,并在模拟 van der Waals 模型液滴变形时能够克服非物理聚集现象^[23]. 因此,本文采用一种新的变光滑步长法.

假设初始时刻光滑步长均为 h_0 , 在随后时刻每个粒子 i 对应的光滑长度为 $h_i = \lambda_i h_0$, 变化系数 λ_i 满足下面关系:

$$\lambda_i = (\hat{\rho}_i / \bar{\rho})^{-\varepsilon}, \quad (30)$$

其中 $\varepsilon \in [0, 1]$, $\bar{\rho} = \sum_i^N \hat{\rho}_i / N$ (N 为粒子总数), $\hat{\rho}_i = \sum_j m_j W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, h_0)$.

数值模拟中,核函数 W_{ij} 采用下列表达式:

$$W_{ij} = W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, h_{ij}), \quad (31)$$

其中 $h_{ij} = \frac{1}{2}(h_i + h_j)$.

3.3.2. 表面张力的处理技术

在单相^[1,32]或多相^[33,34]流体自由面的 SPH 数值模拟过程中,表面张力处理是一个值得关注的问题. van der Waals 液滴在变形过程中表面处粒子明显变稀,表面张力的处理将对整个液滴变形过程的模拟有很大影响. 文献[15,23]已成功利用 van der Waals 状态方程(7)中粒子相互吸引作用部分 $-\bar{a}\rho^2$ 来处理表面张力,即将状态方程(7)代入动量和能量离散格式中,对 $-\bar{a}\rho^2$ 部分使用大尺度光滑长度进行处理,从而有

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt} \right)_i = 2\bar{a} \sum_j m_j \frac{\partial W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, H)}{\partial x_i^\alpha}, \quad (32)$$

$$\left(\frac{de}{dt} \right)_i = 2\bar{a} \sum_j m_j (v_j^\beta - v_i^\beta) \frac{\partial W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, H)}{\partial x_i^\beta}, \quad (33)$$

其中 $H \geq 2h_0$.

作者通过数值模拟发现,由于 KGC-SPH 与 SPH 中核梯度的形式不同,将(32)和(33)式直接应用于 KGC-SPH 方法,会使得液滴界面出现不稳定现象. 因此,将其修正为

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt} \right)_i = \bar{a} \sum_j m_j \frac{\partial W^c(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, H)}{\partial x_i^\alpha}, \quad (34)$$

$$\left(\frac{de}{dt} \right)_i = \bar{a} \sum_j m_j (v_j^\beta - v_i^\beta) \frac{\partial W^c(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, H)}{\partial x_i^\beta}, \quad (35)$$

局部矩阵的可逆性将使局部表面模拟的稳定性与(34)或(35)式中 H 的选取密切相关,本文中取 $H \approx 1.8h_0$.

4. 黏性液滴变形过程的 KGC-SPH 模拟

4.1. KGC-SPH 方法的有效性验证

为了验证 KGC-SPH 方法精度高、稳定性好、总角动量守恒的特性,本文模拟了等温情况下黏性液滴(忽略重力)的拉伸变形与旋转变形. 此时压力状态方程取为 $\rho = c^2(\rho - \rho_0)$ (c 为声速,一般取 $c \approx 10V$, V 为特征速度).

4.1.1. 液滴拉伸过程

考虑二维等温粘性圆形液滴拉伸情况下的变形过程,其所有物理量参数选择均与文献[19]相同. 取初始光滑长度 $h_0 = 1.5d_0$, 1961 个粒子,时间步长 $dt = 1 \times 10^{-5}$ s. 由于此数值模拟不存在张力不稳定性问题,为提高计算效率,模拟中光滑长度保持不变.

圆形液滴在拉伸作用下呈椭圆形. 设椭圆长、短半轴长度分别为 S_b 和 S_a , 变形过程中 S_b 与 S_a 比值会越来越大,但其乘积不变且等于初始圆形液滴半径的平方. 图 1 给出了液滴在拉伸状态下 $t = 0.01$ s 时的粒子分布情况. 由图 1 知,由 KGC-SPH 法得到的粒子分布明显要比 SPH 法得到的分布更均匀,且模拟所得边界更加光滑. 根据文献[26,27]可知,粒子分布越规则,得到的数值结果精度和稳定性越好.

图 2 给出变形过程中椭圆形液滴短半轴长度 S_a 随时间变化的数值结果与解析解的对比. 从图 2

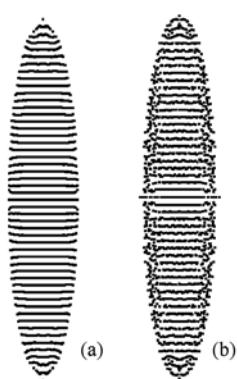


图1 0.01s 时刻 1961 个粒子的分布情况 (a) KGC-SPH;
(b) SPH

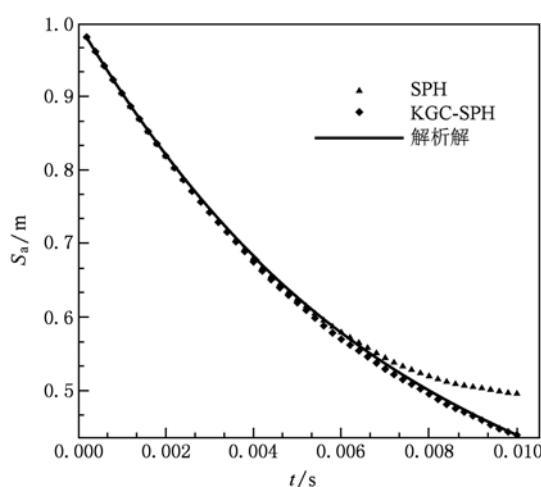


图2 椭圆形液滴短半轴长度 S_a 随时间变化的数值结果与解析解的对比

中可以看出, KGC-SPH 法得到的结果与解析解符合很好, 而 SPH 法得到数值结果与解析解的差距随时间的增加而增大. 另外, 由于 KGC-SPH 方法对每个粒子需要一个局部矩阵的求解, 使得其计算效率低于 SPH 方法. 作者在双核奔腾 4 单机上模拟液滴拉伸变形运行 1000 步时, SPH 方法需要 1235s, KGC-SPH 方法需要 2013s, 即 KGC-SPH 方法数值模拟中计算耗时约为 SPH 方法的 1.7 倍.

图 3 给出了不同时刻由两种不同方法得到的液滴压力分布. 由图 3 知, KGC-SPH 法较 SPH 法得到的压力分布更加均匀. 虽这两种数值结果随时间延长均会出现压力振荡的情况, 但 SPH 法得到的压力振荡非常严重. 值得注意的是, 图 3 中由 SPH 法得到的压力云图在边界处的严重缺陷, 是由边界处粒子分布的缺失及杂乱无章所引起. 这也正凸显了

SPH 方法的缺点.

4.1.2. 液滴旋转过程

为了验证 KGC-SPH 方法能够保持总的角动量守恒, 下面对二维等温液滴受剪切速度影响而进行旋转的过程进行了模拟. 此算例中所有物理量参数均与文献[19]中的参数相同: 初始液滴半径为 1 m, 液滴中心坐标为 ($x = 0, y = 0$), 黏度 $\eta = 500 \text{ kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$, 初始密度 $\rho_0 = 10^3 \text{ kgm}^{-3}$; 声速 $c = 14 \text{ ms}^{-1}$, 初始速度场 $v_0^x = 0.1y, v_0^y = -0.1x$, 初始压力为 0; 取 $d_0 = 0.04 \text{ m}$, 初始光滑长度 $h_0 = 1.5d_0$, 计算中采用 1961 个粒子, 时间步长 $dt = 1 \times 10^{-5} \text{ s}$. 模拟中光滑长度保持不变.

图 4 给出了液滴旋转情况下总角动量随时间的变化曲线. 从图 4 可以看到液滴旋转过程中, 由 SPH 法得到的总角动量(TAM)慢慢变小, 而由 KGC-SPH 法得到的结果保持总角动量不变. 这一结果为下面运用 KGC-SPH 方法模拟基于 van der Waals 模型的传热液滴的变形过程提供了较 SPH 更为有效的理论依据.

4.2. 基于 van der Waals 模型的传热液滴变形过程

非等温 van der Waals 模型液滴在一定初始状态下(忽略重力)受密度、压力、温度及表面张力的影响而出现变形, 在此考虑两种不同情况的变形过程^[15,21-23]: 方形 van der Waals 液滴经压缩、拉伸逐渐变形形成平衡态圆形液滴^[15,22]; 平衡态下圆形液滴经纯剪切变形^[15,23]形成椭圆形液滴. 这两种变形使得液滴表面聚集了一定能量, 从而导致变形过程因表面能量释放而出现周期性振荡^[21,23].

4.2.1. 平衡态下圆形液滴形成过程

对于 van der Waals 流体模型, 为保证热力学稳定性, 其初始密度和温度需要满足不等式 $\bar{k}_B T > 2\bar{a}\rho(1 - \rho\bar{b})^2$ 和 $\rho < 1/\bar{b}$: 第一个不等式是为了确保比热容、等熵体积模量 ($K_s = \rho(\partial p/\partial\rho)_s$) 以及热扩张系数 ($\alpha = -(1/\rho)(\partial\rho/\partial T)_\rho$) 和 Gruneisen 系数 ($\Gamma = (1/\rho)(\partial\rho/\partial e)_\rho$) 的乘积始终为正值; 第二个不等式是为了确保运动学压力, 即状态方程(7)中第一部分必须为正值. 将基本热力学状态 (ρ, T, Γ) 定义为 van der Waals 流体模型的相空间. 为了便于与文献[15,22,23]中实验或数值结果进行对比, 对所有物理参数选取无量纲的值: $m = 1, \bar{a} = 2, \bar{b} = 0.5, \bar{k}_B = 1, \xi = 2, \kappa = 5, \eta = 1, \zeta = 0.1$; 对应 van der Waals 液滴变形过程中的临界值 $\rho_{cr} = 2/3, p_{cr} =$

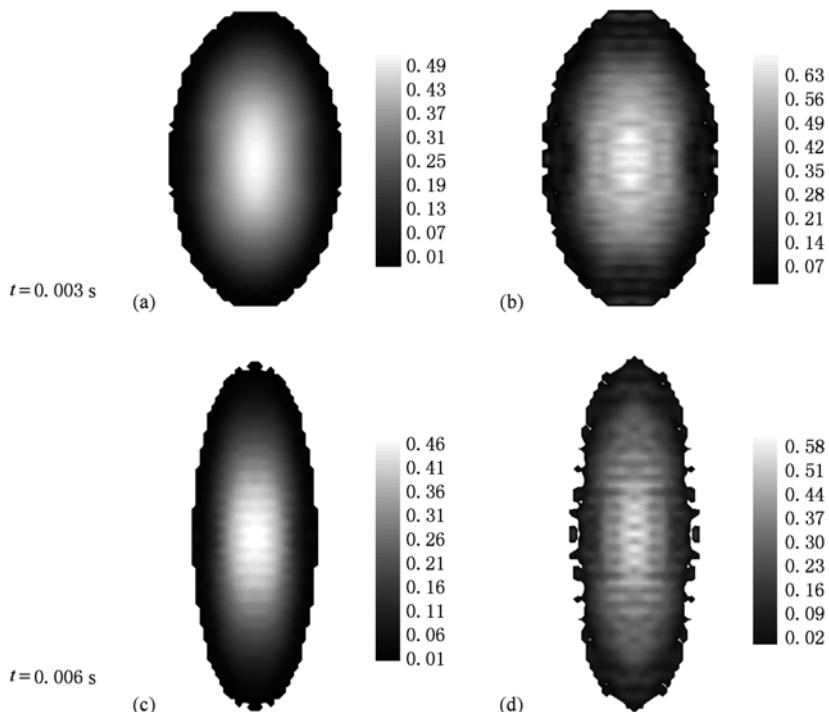


图3 两个不同时刻的压力分布情况 (a) KGC-SPH; (b) SPH

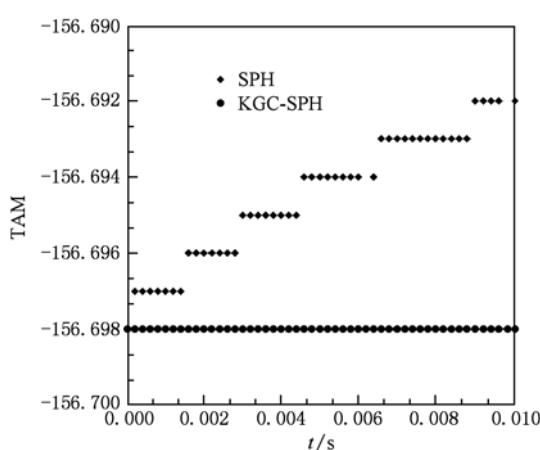


图4 液滴旋转情况下总角动量随时间变化数值结果

$8/27$, $T_{cr} = 32/27$; 在 (x, y) 坐标平面上, 初始方形液滴长度 $L_m = 22.5$, 区域上均匀分布 900 个粒子, 粒子间初始间距 $d_0 = 0.75$, 初始光滑长度 $h_0 = 1.8d_0$, 时间步长 $dt = 0.005$, 变光滑长度影响因子 $\varepsilon = 0.65$, 初始状态每个粒子温度 $T = 0.2$, 大尺度光滑长度 $H = 1.85h_0$. 由于每个粒子质量指定为 1, 为体现液滴内密度与边界附近密度不同, 利用密度求和(15)式来计算每个时刻的粒子密度.

图 5 给出了方形液滴向平衡态圆形液滴演化的模拟过程. 从图 5 观察到, 初期边界处粒子密度与内

部粒子密度之差导致边界与内部出现压力差, 从而使方形液滴处于压缩状态; 当液滴被压缩到一定程度, 温度、压力、密度达到临界值液滴又开始慢慢膨胀; 经过一段时间液滴达到平衡状态且最终形成圆形液滴. 值得注意的是, 在时间段 5—75 之间液滴经过压缩、膨胀变形的循环过程(见图 5), 说明液滴变形过程中出现了小幅度周期性振荡而最终达到平衡态, 而这一点在文献 [15, 22, 23] 中均未明显体现.

图 5 中平衡态下圆形液滴中心处密度 $\rho(0) \approx 1.83$, 温度 $T(0) \approx 0.34$, 压力 $p(0) \approx 0.23$, 此时液滴半径为 $R \approx 12.3$, 表面张力系数 $\sigma_s \approx p(0)R \approx 2.82$, 这些结果与已有结果^[21]符合很好. 为进一步体现 KGC-SPH 方法优势, 图 6 给出了平衡态下距液滴中心不同位置处密度、温度的变化曲线, 其结果表明模拟所得平衡态下的液滴满足上述给出的热力学稳定性条件 $\bar{k}_B T > 2\bar{a}\rho(1 - \rho\bar{b})^2$ 和 $\rho < 1/\bar{b}$. 同时, 将平衡态下液滴中心处密度、温度的 KGC-SPH 结果与文献 [15] 中的 SPH 结果相比可以得知, KGC-SPH 方法具有更高精度, 即 KGC-SPH 方法模拟 van der Waals 模型液滴变形过程比 SPH 方法更为可信. 此外通过图 5 和图 6, 验证了利用 KGC-SPH 方法模拟 van der Waals 模型液滴变形问题时,

本文给出的新的克服张力不稳定方法及表面处理

技术的有效性.

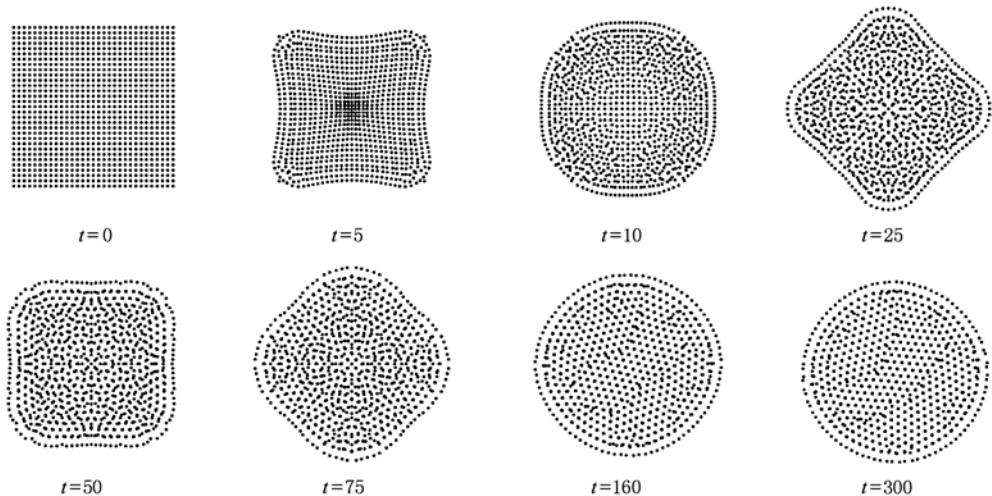


图 5 方形液滴形成平衡态下圆形液滴过程中液滴粒子分布情况

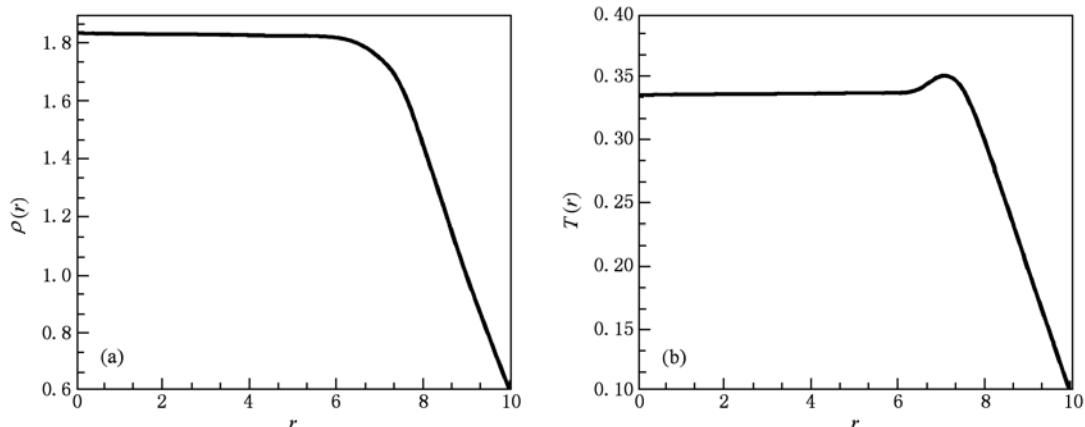


图 6 平衡液滴距中心不同位置处的密度、温度 (a) 密度 (b) 温度

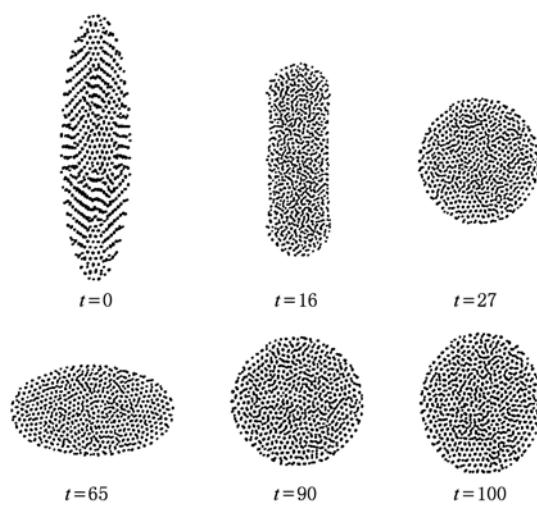
事实上,图 5 和图 6 的数值结果优于 SPH 方法所得结果的根本原因在于多种因素 (KGC-SPH 方法、变光滑长度技术、表面处理技术) 共同作用的结果. 虽然 KGC-SPH 方法较 SPH 方法具有更高精度、更好的数值稳定性且能保持总角动量守恒, 但它不能完全克服 van der Waals 模型液滴变形过程出现的粒子非物理簇集现象, 因而所提出的变光滑长度方法对此进行了必要的补充. 同时, 非等温 van der Waals 模型液滴变形过程受表面张力影响较大, 因此选择适合 KGC-SPH 数值模型的表面张力处理技术也成为得到较好数值结果的另一个重要因素.

4.2.2. 液滴周期性振荡变形过程

将 4.2.1 节中平衡态下圆形液滴通过纯剪切变形转化为椭圆形液滴, 则表面会聚集一定能量, 液

滴处于非平衡状态. 表面能量释放时, 液滴内外密度、压力随之变化, 液滴将出现周期性振荡变形. 初始椭圆形液滴表面能量大小受其长、短半轴之比影响很大, 其比例越大得到的表面能量越大^[15,23], 液滴振荡幅度也就越大, 同时振荡情况也受雷诺数 ($Re = (\rho\sigma R)^{1/2}/\eta$) 影响. 为了清楚观察液滴振荡现象, 经过纯剪切变形得到的椭圆形可由坐标变换 $\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \bar{\omega})^{-1} & 0 \\ 0 & 1 + \bar{\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ 得到 ($\bar{\omega}$ 为伸长率, $(1 + \bar{\omega})/(1 + \bar{\omega})^{-1}$ 为椭圆长、短半轴比值), 其中 $\bar{\omega} = 1$. 参数选择除 η 可变化外其他均与 4.2.1 节相同.

图 7 和图 8 分别给出了 $Re \approx 6$ ($\eta = 1$) 和 $Re \approx 60$ ($\eta = 0.1$) 时, 第一个振荡周期内液滴的变形

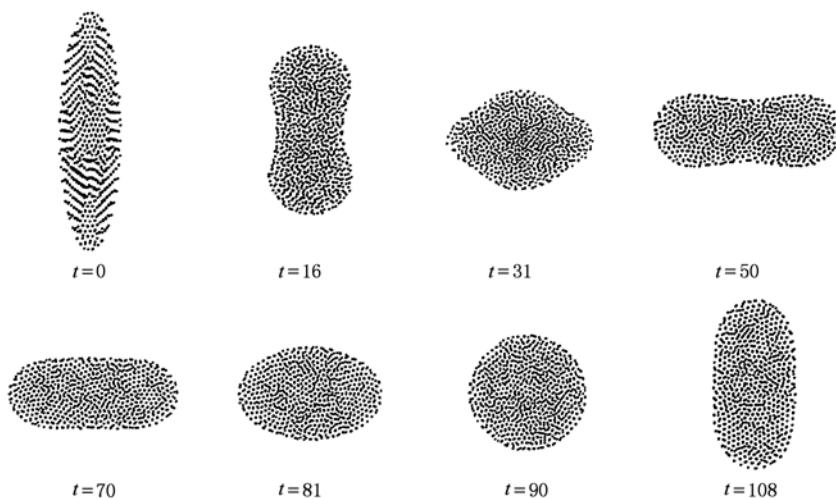
图 7 第一个振荡周期内不同时刻的液滴形状, $Re \approx 6$

过程. 由图 7 和 8 可以看出, 变形初期因表面能量释放较快而导致液滴形状变化较快, 以后的振荡幅度

逐步减小; 并且液滴振荡随 Re 增大其周期变长; 另外, Re 越大液滴振荡幅度越大, 其形状变化越剧烈.

由图 8 可知, 初始时刻起液滴沿长半轴开始收缩, 形成扁长液滴 ($t = 16$), 随时间延长液滴逐渐呈近似圆形, 之后又开始扩张形成扁圆形液滴 ($t = 31$), 此过程与文献[35]中实验符合. 至 $t = 50$ 时, 未消失的内部运动能量变成了表面能量, 然后液滴又开始沿短半轴开始收缩, 如此往返形成周期性振荡变化的液滴. 图 7 与图 8 得到的液滴形状与文献[21, 23]中实验或数值结果均很符合, 只是得到的振荡周期与文献中稍有差距.

文中所有结果表明了 KGC-SPH 方法模拟黏性流体变形, 特别是对基于 van der Waals 模型的流体变形现象的有效性, 该方法为指导实验和发现新的物理现象给出了一个比 SPH 更可靠的数值模拟方法.

图 8 第一个振荡周期内不同时刻的液滴形状, $Re \approx 60$

5. 结 论

本文对传统 SPH 方法中的核梯度进行修正提出了 KGC-SPH 方法, 并对黏性液滴变形过程进行了模拟. 数值模拟中, 为消除非物理簇集现象给出了一种新的变光滑长度方法; 为准确捕捉受表面张力影响的自由界面给出了一种新的表面张力处理技术. 数值结果表明:

1. KGC-SPH 能很好地改善 SPH 方法的计算精

度并提高其稳定性;

2. 文中提出的变光滑长度方法能很好地消除液滴变形过程中的非物理簇集现象;

3. 本文给出的表面张力处理技术使 KGC-SPH 方法能够准确地追踪液滴变形过程, 平衡态圆形液滴形成过程中存在小幅振荡现象.

总之, 本文提出的模拟黏性流体的 KGC-SPH 方法较传统 SPH 方法更为有效, 它为研究一些有关液滴变形问题提供了一个可靠的数值方法.

- [1] Zhang L, Zhang L F, Wu H Y, Wang J P 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 703 (in Chinese) [张亮、张立凤、吴海燕、王骥鹏 2009 物理学报 **58** 703]
- [2] Zhang A M, Yao X L, Li J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1672 (in Chinese) [张阿漫、姚熊亮、李佳 2008 物理学报 **57** 1672]
- [3] Zhang A M 2008 *Chin. Phys. B* **17** 927
- [4] Zhang A M, Yao X L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 339 (in Chinese) [张阿漫、姚熊亮 2008 物理学报 **57** 339]
- [5] Harlow F H 1957 *Journal of the Association for Computing Machinery* **4** 137
- [6] Zhao Y, Ji Z Z, Feng T 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 671 (in Chinese) [赵颖、季仲贞、冯涛 2004 物理学报 **53** 671]
- [7] Zhong C W, Xie J F, Zhuo C S, Xiong S W, Yin D C 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4083
- [8] Wang J F, Sun F X, Cheng R J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 060201
- [9] Cheng R J, Cheng Y M, Ge H X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4059
- [10] Wang X D, Ouyang J, Su J 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6361 (in Chinese) [王晓东、欧阳洁、苏进 2010 物理学报 **59** 6361]
- [11] Gingold R A, Monaghan J J 1977 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **181** 375
- [12] Monaghan J J 1994 *J. Comp. Phys.* **110** 399
- [13] Morris J P, Fox P J, Zhu Y 1997 *J. Comp. Phys.* **136** 214
- [14] Watkins S J, Bhattacharjee A S, Francis N, Turner J A, Whitworth A P 1996 *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **119** 177
- [15] Nugent S, Posch H A 2000 *Phys. Rev. E* **62** 4968
- [16] Hu X Y, Adams N A 2006 *J. Comp. Phys.* **213** 844
- [17] Chen J K, Beraun J E 2000 *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* **190** 225
- [18] Liu M B, Xie W P, Liu G R 2005 *Appl. Math. Model.* **29** 1252
- [19] Fang J, Parriaux A, Rentschler M, Ancey C 2009 *Appl. Num. Math.* **59** 251
- [20] Bonet J, Lok T S L 1999 *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **180** 97
- [21] Apfel R E, Tian Y, Jankovshy J, Shi T, Chen X, Holt R G, Trinh E, Croonquist A, Thornton K C, Sacco A, Jr, Coleman C, Leslie F W, Matthies D H 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1912
- [22] Melean Y, Singalotti L D G, Hasmy A 2004 *Comp. Phys. Comm.* **157** 191
- [23] Lopez H, Sigalotti L D G 2006 *Phys. Rev. E* **73** 051201-1
- [24] Liu G R, Liu M B 2003 *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Mesh-free Particle Method* (Singapore: World Scientific)
- [25] Monaghan J J, Lattanzio J C 1985 *Astron. Astrophys.* **149** 135
- [26] Liu M B, Chang J Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3654 (in Chinese) [刘谋斌、常建忠 2010 物理学报 **59** 3654]
- [27] Liu M B, Liu G R 2006 *Appl. Num. Math.* **56** 19
- [28] Silverman B W 1986 *Statistics and Applied Probability* (London: Chapman and Hall)
- [29] Schussler M, Schmitt D 1981 *Astron. Astrophys.* **97** 373
- [30] Gray J P, Monaghan J J, Swift R P 2001 *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* **190** 6641
- [31] Monaghan J J 2000 *J. Comp. Phys.* **159** 290
- [32] Tang B, Li J F, Wang T S 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6722 (in Chinese) [汤波、李俊峰、王天舒 2008 物理学报 **57** 6722]
- [33] Chang J Z, Liu M B, Liu H T 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3954 (in Chinese) [常建忠、刘谋斌、刘汉涛 2008 物理学报 **57** 3954]
- [34] Wang X L, Chen S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6778 (in Chinese) [王晓亮、陈硕 2010 物理学报 **59** 6778]
- [35] Trinh E, Wang T G 1982 *J. Fluid Mech.* **122** 315

The deformation process of viscous liquid drop studied by using kernel gradient corrected SPH method^{*}

Jiang Tao Ouyang Jie[†] Zhao Xiao-Kai Ren Jin-Lian

(Department of Applied Mathematics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129, China)

(Received 9 July 2010; revised manuscript received 22 August 2010)

Abstract

In this paper, a kernel gradient corrected smoothed particle hydrodynamics (KGC-SPH) method is proposed to simulate the deformation process of a viscous liquid drop. The KGC-SPH method has higher accuracy and better stability than the SPH method, which is verified by simulating the stretching and rotating process of an isothermal viscous liquid drop, and the property of preservation of total angular momentum of the present method is also checked. And then, the formation of a stable spherical liquid drop based on van der Waals model is investigated, and a phenomenon of periodic oscillation with small amplitude is observed. Meanwhile, a new variable smoothing length is presented to remove the unstable phenomenon and a new surface tension technique is adopted in the simulation. Subsequently, the phenomenon of periodic oscillation of a van der Waals model liquid drop is simulated using KGC-SPH method, in which the influence of the elongation and Reynolds number on the amplitude and oscillation period is discussed.

Keywords: SPH, viscous drop, van der Waals model, surface tension

PACS: 47.11.-j, 44.10.+i, 47.85.-g

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10871159) and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2005CB321704).

[†] Corresponding author. E-mail: jieouyang@nwpu.edu.cn