

等直径微液滴碰撞过程的改进光滑粒子动力学模拟*

蒋涛¹⁾²⁾ 陆林广^{1)†} 陆伟刚¹⁾

1) (扬州大学数学科学学院, 扬州大学水利科学与工程学院, 扬州 225002)

2) (西北工业大学应用数学系, 西安 710129)

(2013年5月1日收到; 2013年8月15日收到修改稿)

运用一种改进光滑粒子动力学 (SPH) 方法模拟了相溶和不相溶两种情况下的等直径微液滴碰撞动力学过程. 为提高传统 SPH 方法的数值精度和稳定性, 采用一种不涉及核导数计算的核梯度改进形式; 为处理液滴界面张力采用修正的 van der Waals 表面张力模型. 通过模拟牛顿液滴碰撞聚并变形过程并与相关文献或试验结果进行对比, 验证了改进 SPH 方法模拟微液滴碰撞过程的可靠性. 随后, 研究了基于 van der Waals 模型相溶聚合物微液滴碰撞聚并变形过程及不相溶微液滴碰撞后的反弹、分离过程, 讨论了碰撞过程中碰撞速度、碰撞角度、密度比等参数对碰撞变形过程的影响, 分析了流体桥、旋转角度等因素的变化情况.

关键词: 光滑粒子动力学, 微液滴, 聚合物液滴, 碰撞

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

DOI: 10.7498/aps.62.224701

1 引言

微液滴^[1,2](主要指较小尺度下的液滴)碰撞变形过程是工业上产品制造过程和日常生活中常见的现象, 它包含复杂的流动过程, 如液滴的融合、旋转和分离等现象^[3-8], 其变形过程受多种因素的影响, 如碰撞速度、密度比、两液滴直径比及碰撞角度等. 微液滴碰撞的流动机理研究对化工工程、环境工程以及石油产业等有着重要意义.

目前, 已有很多学者对两个相溶微液滴的碰撞动力学行为进行了实验^[3,6,9,10]或数值模拟^[1,2,4,11-13]研究. 大部分实验研究中考虑了真空条件下液滴的碰撞动力学行为, 数值模拟中研究了液滴变形过程中表面张力的处理问题. 然而, 已有文献数值模拟中基于网格类的数值方法在模拟微液滴碰撞变化过程中存在一些不足之处, 如有限差法、有限体积法等网格类方法在实现过程中存在网格重构等问题, 且它们需要借助其他界面追踪技术(如 level-set 方法、流体体积方法等^[1,13])来捕捉微液滴的变形过程, 使得网格类方法模拟微液

滴碰撞变形过程时存在诸多困难, 更不易将其应用到聚合物微液滴碰撞变形过程的模拟. 此外, 由文献^[14, 15]知, 对聚合物液滴的碰撞动力学行为进行实验研究亦存在诸多困难, 且相关的数值模拟研究也鲜有报道.

因此, 本文采用一种无网格粒子方法^[16-20]——光滑粒子动力学 (SPH) 方法^[20]来对相溶聚合物微液滴的碰撞聚并过程以及不相溶微液滴的碰撞分离过程进行模拟研究. SPH 方法是一种纯无网格粒子方法, 它最初提出是为求解三维无边界空间的行星运动问题. 在 1994 年开始被应用于自由表面流问题^[21], 后来逐渐被应用于黏性流动、黏弹性流动、多相流动等问题^[22-25]. 与网格类方法相比, SPH 方法完全摒弃了网格, 通过粒子位置就可以确定运动界面, 不需要额外的界面追踪技术, 特别适合模拟涉及大变形、自由表面流动的问题.

随着 SPH 方法的广泛应用, 传统 SPH 方法的一些缺点也逐渐显现出来, 主要表现在数值精度低、稳定性差两方面. 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

* 江苏省高校自然科学研究项目(批准号: 12KJD570001)和江苏省青年科学基金(批准号: BK20130436)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: lglu@yzu.edu.cn; jtrjl_2007@126.com

SPH 的缺点已提出了很多改进方法^[26-30]. 然而已有的改进 SPH 方法在提高数值精度和稳定性的同时也引入了其他问题, 如局部矩阵奇异、实施过程繁琐、计算效率低等. 因此, 已有的改进 SPH 方法还未被广泛应用于复杂聚合物流动问题的模拟.

本文在微液滴碰撞变形过程模拟中, 将文献[29, 31]的改进方法引入到聚合物流动问题的模拟, 给出了一种基于聚合物流动问题模拟的改进 SPH (corrected SPH, 简称 C-SPH) 离散格式. 其优点在于: 1) 能提高传统 SPH 离散格式数值精度、改善其稳定性; 2) 能较好地保持总角动量守恒; 3) 较其他改进的 SPH 方法具有较高计算效率; 4) 不含核导数计算, 增加了核函数的选择范围. 此外, 为克服张力不稳定性, 采用了一种新的变光滑长度方法; 为准确捕捉液滴表面变形, 给出了一种基于 van der Waals 模型的修正表面张力处理技术. 本文首先对牛顿相溶微液滴碰撞变形过程进行了模拟, 验证了改进 SPH 方法结合其他改进措施模拟微液滴碰撞问题的可靠性. 随后, 研究了基于 van der Waals 模型相溶聚合物微液滴碰撞聚并变形过程及不相溶微液滴碰撞后的反弹、分离过程, 讨论了碰撞过程中碰撞速度、碰撞角度、密度比等参数对碰撞变形过程的影响.

2 基于 van der Waals 模型的流体控制方程

在二维 Lagrange 坐标系下, 忽略重力时基于 van der Waals 模型可压缩非牛顿流体^[22,31,32]的质量、动量、能量守恒控制方程为

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

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

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

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

本文采用 Oldroyd-B 本构模型^[24,25]来描述具有黏弹性的聚合物流体, 此时总应力张量 $\boldsymbol{\sigma}$ 的表达

式为

$$\begin{aligned} \sigma^{\alpha\beta} &= -p\delta^{\alpha\beta} + \tau^{\alpha\beta} \\ &= -p\delta^{\alpha\beta} + 2\beta_0\eta D^{\alpha\beta} + T^{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$T^{\alpha\beta} + \lambda_1 \overset{\nabla}{T}^{\alpha\beta} = 2(1 - \beta_0)\eta D^{\alpha\beta}, \quad (5)$$

$$\overset{\nabla}{T}^{\alpha\beta} = \frac{dT^{\alpha\beta}}{dt} - \frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\gamma} T^{\gamma\beta} - \frac{\partial v^\beta}{\partial x^\gamma} T^{\alpha\gamma}, \quad (6)$$

$\delta^{\alpha\beta}$ 表示单位张量分量, p 表示压力, $T^{\alpha\beta}$ 表示聚合物溶剂贡献的偏应力, λ_1 为松弛时间. 变形速度张量 $\mathbf{D} = (D^{\alpha\beta}) = (1/2)(\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T)$, 黏度比 $\beta_0 = \eta_s/\eta$ (η_s 表示牛顿溶剂黏度, η 表示流体总黏度).

假设热通量 \mathbf{q} 遵从 Fourier 法则, 即

$$q^\beta = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x^\beta}, \quad (7)$$

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^[22,32]

$$p = \frac{\rho \bar{k}_B T}{1 - \rho \bar{b}} - \bar{a} \rho^2, \quad (8)$$

$$e = \frac{\xi}{2} \bar{k}_B T - \bar{a} \rho, \quad (9)$$

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 改进 SPH (C-SPH) 离散格式

3.1 SPH 离散

传统 SPH 方法通过核函数进行积分插值^[20], 将流体域用有限个粒子表示, 每个粒子赋有一定的密度、质量、温度等物理性质.

一般地, 任意函数 f 的一阶导数 ∇f 在位置 $\mathbf{x} = (x, y)$ 处的 SPH 粒子近似式为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_i} \right) = \sum_j (f_j - f_i) \frac{m_j}{\rho_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i}, \quad (10)$$

其中 $W_{ij} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h)$ 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^[20], $\partial W_{ij}/\partial \mathbf{x}_i = \partial W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h)/\partial \mathbf{x}_i$, $\partial W_{ij}/\partial \mathbf{x}_i = -\partial W_{ji}/\partial \mathbf{x}_j$, h 为光滑长度. 本文取分段三次样条作为核函数^[20].

于是,质量守恒方程 (1) 的 SPH 离散格式为

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_i = \rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_i^\beta - v_j^\beta) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (11)$$

当模拟中粒子质量取定,总粒子数不变时,利用密度求和公式

$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}, \quad (12)$$

将更有利于本文中的数值模拟 [22,27,31].

对于动量和能量守恒方程 (2) 和 (3),考虑粒子间相互作用,并结合公式

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta} = \frac{\partial (\sigma^{\alpha\beta}/\rho)}{\partial x^\beta} + \frac{\sigma^{\alpha\beta}}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x^\beta} \quad (13)$$

得

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt}\right)_i = \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2}\right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{de}{dt}\right)_i &= \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2}\right) (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} \\ &\quad - \sum_j m_j \left(\frac{q_i^\beta}{\rho_i^2} + \frac{q_j^\beta}{\rho_j^2}\right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \end{aligned} \quad (15)$$

定义

$$\kappa_i^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\beta}\right)_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \quad (16)$$

类似地,Oldroyd-B 本构模型的 SPH 离散形式为

$$\begin{aligned} \left(\frac{dT^{\alpha\beta}}{dt}\right)_i &= \kappa_i^{\alpha\gamma} (T^{\gamma\beta})_i + \kappa_i^{\beta\gamma} (T^{\gamma\alpha})_i - \frac{1}{\lambda_1} (T^{\alpha\beta})_i \\ &\quad + \frac{(1-\beta_0)\eta}{\lambda_1} (\kappa_i^{\alpha\beta} + \kappa_i^{\beta\alpha}), \end{aligned} \quad (17)$$

由

$$\frac{dx_i^\alpha}{dt} = v_i^\alpha \quad (18)$$

即得粒子位置.

在数值模拟中,为求解方程组 (12), (14)—(18),采用具有二阶精度和较好稳定性的简单预估校正格式对时间进行离散 [25].

3.2 C-SPH 方法

由上述过程可以看出,离散公式 (11) 中,核梯度 $\nabla_i W_{ij}$ 对模拟的数值精度和数值稳定性有直接影响.根据文献 [26—29] 可知,基于 Taylor 展开思想对核梯度进行修正可提高传统 SPH 方法的数值精

度和改善其稳定性,然而大部分文献中核梯度改进形式里的局部系数矩阵中含有核导数,使矩阵的奇异性过分依赖于核导数、光滑长度等参数的选择.于是,本文采用文献 [29] 中不含核导数计算的核梯度修正形式直接对 (14)—(17) 式中核梯度进行改进(值得注意的是文献 [26—29] 中的改进 SPH 方法还未被应用到聚合物流动问题的模拟中),得到下列聚合物流动控制方程的改进 SPH 离散形式:

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt}\right)_i = \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2}\right) \frac{\partial^S W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{de}{dt}\right)_i &= \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2}\right) (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial^S W_{ij}}{\partial x_i^\beta} \\ &\quad - \sum_j m_j \left(\frac{q_i^\beta}{\rho_i^2} + \frac{q_j^\beta}{\rho_j^2}\right) \frac{\partial^S W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \kappa_i^{\alpha\beta} &= \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\beta}\right)_i \\ &= \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial^S W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{dT^{\alpha\beta}}{dt}\right)_i &= \kappa_i^{\alpha\gamma} (T^{\gamma\beta})_i + \kappa_i^{\beta\gamma} (T^{\gamma\alpha})_i - \frac{1}{\lambda_1} (T^{\alpha\beta})_i \\ &\quad + \frac{(1-\beta_0)\eta}{\lambda_1} (\kappa_i^{\alpha\beta} + \kappa_i^{\beta\alpha}), \end{aligned} \quad (22)$$

其中修正后的核梯度 $\nabla_i^S W_{ij}$ 为

$$\nabla_i^S W_{ij} = (\mathbf{A}^s)^{-1} \begin{pmatrix} (x_j - x_i) W_{ij} \\ (y_j - y_i) W_{ij} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

\mathbf{A}^s 为不含核导数的对称矩阵,其分量形式为 $\sum_j (x_j^\alpha - x_i^\alpha) (x_j^\beta - x_i^\beta) W_{ij} (m_j/\rho_j)$. (23) 式称为改进的 SPH 离散形式,该格式中虽只涉及核函数的计算,但也能够弥补传统 SPH 离散格式边界处不满足一阶相容性的缺陷,降低了系数矩阵对核函数的依赖性.事实上,无论区域内粒子分布是否均匀或在边界处,梯度离散格式 (23) 式均具有二阶精度和较好的稳定性.

本文的 C-SPH 方法相对于其他改进的 SPH 方法 [26,27,30] 的优势可参见文献 [29, 31]. 与文献 [30, 31] 的区别在于: 1) 本文的改进 SPH 方法中修正矩阵不涉及核函数导数的计算,增加了核函数的选择范围,而文献 [30, 31] 中修正矩阵需要计算核函数导数; 2) 本文模拟了两微液滴碰撞问题,其数值模拟难度较大,需要考虑两液滴交界面的处理等问题,而文献 [31] 中仅对单液滴形成平衡态下的圆形

液滴进行了模拟. 此外, 在模拟自由表面流动问题时, 根据文献 [31] 的分析易验证改进 SPH 离散格式 (19)—(22) 式将较传统 SPH 离散格式捕捉界面更准确, 稳定性更好, 且能满足总角动量守恒.

3.3 修正 van der Waals 模型表面张力处理技术

由文献 [22, 32] 知, 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 [31, 32] 已成功利用 van der Waals 状态方程 (8) 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 (8) 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

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt}\right)_i = 2\bar{a}\sum_j m_j \frac{\partial W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, H)}{\partial x_i^\beta}, \quad (24)$$

$$\left(\frac{de}{dt}\right)_i = 2\bar{a}\sum_j m_j (v_j^\beta - v_i^\beta) \frac{\partial W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, H)}{\partial x_i^\beta}, \quad (25)$$

其中 $H \geq 2h_0$.

通过数值模拟发现, 由于 C-SPH 与 SPH 中核梯度的形式不同, 将 (24) 和 (25) 式直接应用于 C-SPH 方法, 会使得液滴界面出现不稳定现象. 因此, 将其修正为

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt}\right)_i = \bar{a}\sum_j m_j \frac{\partial W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, H)}{\partial x_i^\beta}, \quad (26)$$

$$\left(\frac{de}{dt}\right)_i = \bar{a}\sum_j m_j (v_j^\beta - v_i^\beta) \frac{\partial W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, H)}{\partial x_i^\beta}, \quad (27)$$

局部矩阵的可逆性将使局部表面模拟的稳定性与 (24) 或 (25) 式中 H 的选取密切相关, 本文中取 $H \approx 1.7h_0$.

根据上述分析及数值模拟上的方便, 本文运用粒子方法对液滴碰撞过程进行数值模拟时, 主要采用无量纲参数公式 (7)—(9), (12), (18), (19)—(22), (26), (27). 其中 (12), (26), (27) 式的应用与两个液滴是否相溶有关 (表面张力处理方程 (26), (27) 对相溶性液滴碰撞聚并和不相溶液滴碰撞分离起决定性作用), 即: 两个液滴相溶时, 考虑两液滴黏度相同, (12), (26), (27) 式右端中的相邻粒子 “ j ” 与粒子 “ i ” 可属于不同液滴粒子, 使得两液滴相碰后能相互浸

入并最终溶为一个液滴; 两个液滴不相溶时, 考虑两液滴黏度相同或不同两种情况 (因模拟中采用无量纲参数, 对黏度不同两不相溶液滴可取其黏度比值作为其黏度), (12), (26), (27) 式右端中的相邻粒子 “ j ” 与粒子 “ i ” 只能属于同一个液滴粒子, 使得两液滴相碰撞后在各自表面张力作用下能够出现液滴碰后分离过程.

此外, 微液滴变形过程的数值模拟中易出现张力不稳定性, 即粒子簇集的非物理现象, 为克服这种粒子聚集的非物理现象, 本文采用文献 [31] 给出的一种变光滑长度法.

4 等直径液滴碰撞过程的模拟

4.1 数值验证

为了验证本文给出的 C-SPH 方法模拟微液滴碰撞问题的可靠性, 本小节对真空封闭容器 [3] 中两牛顿相溶微液滴的碰撞聚合过程进行模拟研究. 模拟中主要考虑直径相等且碰撞前已达到热力学平衡的两液滴. 两等直径相溶液滴在较小速度碰撞后聚合为一体, 随后经过振荡变形最后形成一个圆形液滴 [1,3,4,13]. 模拟中选取的无量纲参数为: $Re = (\rho v_{rel} D)/\eta$, $We = (\lambda_1 v_{rel})/D$, 碰撞参数 $\chi = X_p/D$, 其中 v_{rel} 为两液滴碰撞相对速度, D 为液滴直径, X_p 为两液滴连线在相对碰撞速度法线上进行投影的距离. 两液滴碰撞模型如图 1 所示. 为简单起见, 本小节仅考虑正碰的情况, 其中取较小碰撞速度 $v_{rel} = 0.6$ 和 $v_{rel} = 1.2$, 分别对应 $Re \approx 35$ 和 $Re \approx 75$.

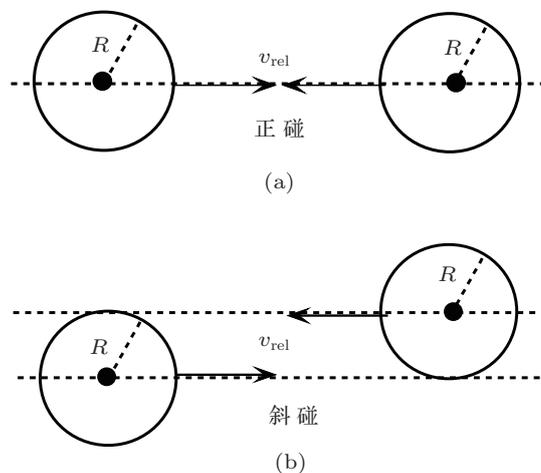


图 1 等直径微液滴碰撞模型 (a) 正碰, $\chi = 0$; (b) 斜碰, $\chi = 0.5$

根据文献 [22, 32], 为保证热力学稳定, 要求初始密度和温度需要满足不等式 $\bar{k}_B T > 2\bar{\alpha}\rho(1-\rho\bar{b})^2$ 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 ($a = -(1/\rho)(\partial \rho/\partial T)_p$) 和 Gruneisen 系数 ($\Gamma = (1/\rho)(\partial \rho/\partial e)_p$) 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 (9) 中第一部分必须为正值.

为便于与文献 [22, 31, 32] 中实验或数值结果进行对比, 模型中选取的无量纲量为: $m = 1, \bar{\alpha} = 2, \bar{b} = 0.5, \bar{k}_B = 1, \xi = 2, \kappa_q = 5, \eta = 1, \zeta = 0.1$; van der Waals 液滴变形过程中的物理量临界值 $\rho_{cr} = 2/3, \rho_{cr} = 8/27, T_{cr} = 32/27$; 在 (x, y) 坐标平面上, 初始方形液滴长度 $L_m = 32.25$, 区域上均匀分布 1936 个粒子, 粒子初始间距 $d_0 = 0.75$, 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 $\epsilon = 0.6$, 初始状态每个粒子温度 $T = 0.2$, 大尺度光滑长度 $h^* = 1.7h_0$.

真空失重条件 [3] 下两个微液滴碰撞时, 当两个液滴开始有接触的瞬间, 受表面张力的驱动, 在作用点处慢慢形成一个小流体桥. 文献 [9, 33] 给出了两相溶液滴碰撞初期形成流体桥随时间演化的近似解析解, 其中 Hopper [33] 研究了二维空间下液滴的碰撞聚合过程, 并给出了碰撞初期的流体桥随时间的演化关系式, 即 $r_m \sim (\sigma_s(t-t_c)/\pi\eta) \cdot \ln((\sigma_s(t-t_c)/\eta R))$, 流体桥半径为 r_m (两液滴中心线的法向距离), 表面力 $\sigma_s = p_0 R$ (p_0 为液滴中心处压力, R 表示液滴半径), t_c 为液滴开始接触的时刻, 它依赖于两液滴碰撞的相对速度大小.

图 2(a) 给出了不同时刻两个液滴碰撞形成流体桥的情况. 模拟中, 两液滴的初始距离为 $4d_0$ ($= 3$). 图 2(b) 给出了碰撞初期, 两牛顿液滴形成的流体桥随时间变化的曲线. 可以观察到, 液滴碰撞的相对速度对流体桥半径影响很大, 相对速度越大, 形成的流体桥越长.

图 3 给出了 $Re \approx 75$ 时, 牛顿微液滴正碰后第一个振荡周期内的变形情况. 液滴碰撞的瞬间, 流动域里出现“滞流”区域 [34], 该区域的压力大于表面张力 (见图 5), 使得合并液滴开始沿 y 轴扩张、拉伸变形. 当 $13 \leq t \leq 116$, 合并的液滴沿 y 轴拉伸到最大程度时, 两液滴连线附近出现凹形现象. 根据文献 [34] 中关于能量守恒的分析知, 当拉伸变形

达到最大时 ($t \approx 116$), 粒子表面聚集的能量使得内部粒子的速度梯度迅速改变, 合并的液滴开始沿水平运动. 图 3 给出的合并液滴的变形过程与文献 [3, 34, 35] 中给出的真实液滴碰撞变形实验相符合, 与文献 [1, 4] 中用不同数值方法得到的结果一致. 图 3 给出的数值结果表明, 本文提出的 C-SPH 方法是有效、可靠的.

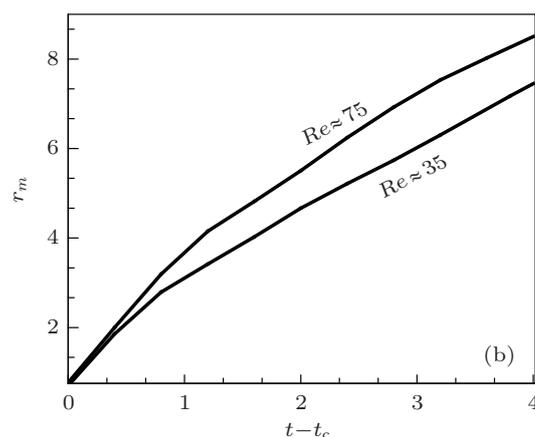
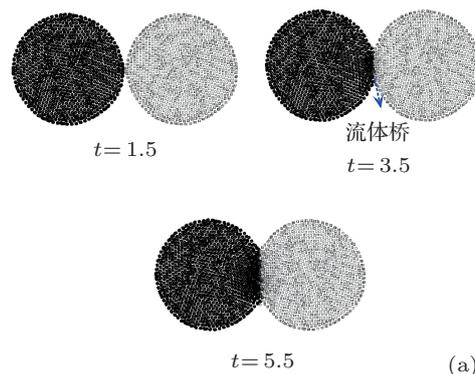


图 2 正碰初期两牛顿液滴之间流体桥的形成 (a) 流体桥的形状随时间的变化 ($Re \approx 75$); (b) 正撞瞬间里流体桥半径随时间的变化曲线

通过图 3 和图 6 可以看出, 尽管两液滴碰撞的相对速度不同, 但它们的变形情况基本相同, 且当流体桥 $r_m \approx R$ 时合并的液滴体积基本相同. 两种情况的明显区别在于液滴变形过程中的拉伸程度不一样, Re 越大, 拉伸变形越严重 (见图 6), 得到的圆盘越薄.

图 4 给出了图 3 中几个不同时刻的速度场, 可以观察到: 1) 液滴合并后的粒子运动情况; 2) 液滴第一次扩张、伸长变形过程, 沿 y 方向两边的液滴边缘附近速度反向 ($t \approx 25$); 3) 合并液滴伸长到最大变形后, 沿 y 方向出现回缩变形 ($t \approx 120$), 速度反

向. 这也验证了图 3 的结论.

模拟两等直径微液滴碰撞过程.

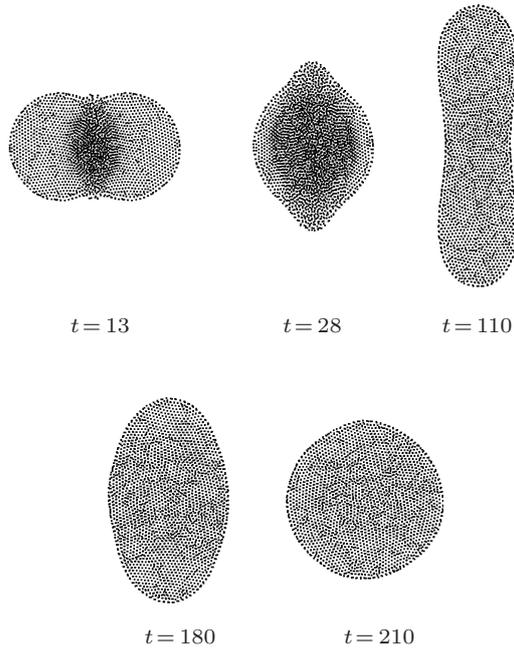


图 3 牛顿液滴正碰后第一个振荡周期内的聚合变形过程 ($Re \approx 75$)

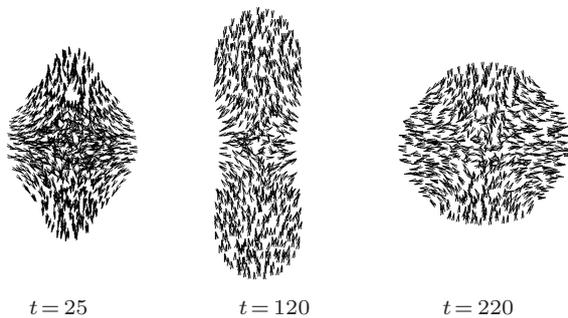


图 4 牛顿液滴正碰后的变形速度场 ($Re \approx 75$)

图 5 给出了图 3 中几个不同时刻的压力场, 可以观察到: 1) 液滴合并瞬间较大压力值区域出现在两液滴碰撞区域 ($t \approx 7$), 使液滴开始沿 y 方向伸长变形; 2) 液滴第一次伸长变形过程中较大压力区域主要分布在合并液滴中心位置附近, 随时间延长形成的单液滴中心位置区域的压力值先变大后变小; 3) 液滴达到最大伸长变形后, 液滴有回缩的趋势, 液滴边缘附近压力值瞬间增大. 这验证了图 3 和图 4 的结论. 值得注意的是, 图 5 中分布的压力负值主要分布在液滴边缘上, 体现粒子间的吸引力现象.

上述结果与文献 [1, 3, 4, 35] 的结果符合得很好, 这说明本文的改进 SPH 方法能够有效、可靠地

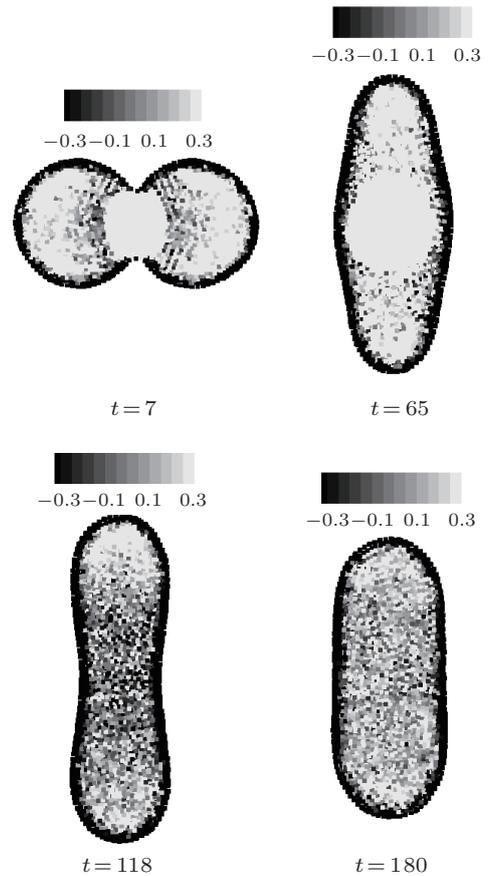


图 5 牛顿液滴正碰后几个不同时刻的压力分布 ($Re \approx 75$)

4.2 两相溶聚合物液滴碰撞过程模拟

4.2.1 相溶液滴正碰过程

图 6 给出了不同模型液滴正碰后沿 y 轴拉伸到最大变形的合并液滴形状, 由此可知 Oldroyd-B 液滴正碰后的拉伸变形比牛顿液滴的拉伸变形剧烈, 且合并的 Oldroyd-B 液滴拉伸变形中形成的圆盘要比牛顿液滴的薄.

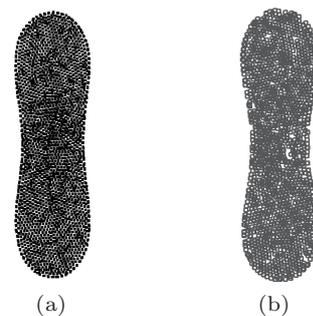


图 6 不同模型液滴正碰后沿 y 轴拉伸变形到最大 ($Re \approx 75$) (a) 牛顿; (b) Oldroyd-B

为进一步体现 Oldroyd-B 液滴和牛顿液滴碰撞变形过程中的差异, 图 7 给出了某一位置处的表面粒子沿不同方向随时间变化的曲线. 从图 7 中可以明显看出液滴正碰后的拉伸、压缩等变形沿不同方向的变化. 可见无论沿哪个方向 Oldroyd-B 液滴的拉伸或压缩变形趋势都要较牛顿液滴的剧烈, 不同的本构对合并液滴形状变化有不同的影响. 液滴正碰后沿 y 变化趋势要比沿 x 轴的变化趋势大, 这是因为运动能量在整个振荡变形过程中呈逐渐衰减趋势, 直至它们最终形成一个稳定的圆形液滴.

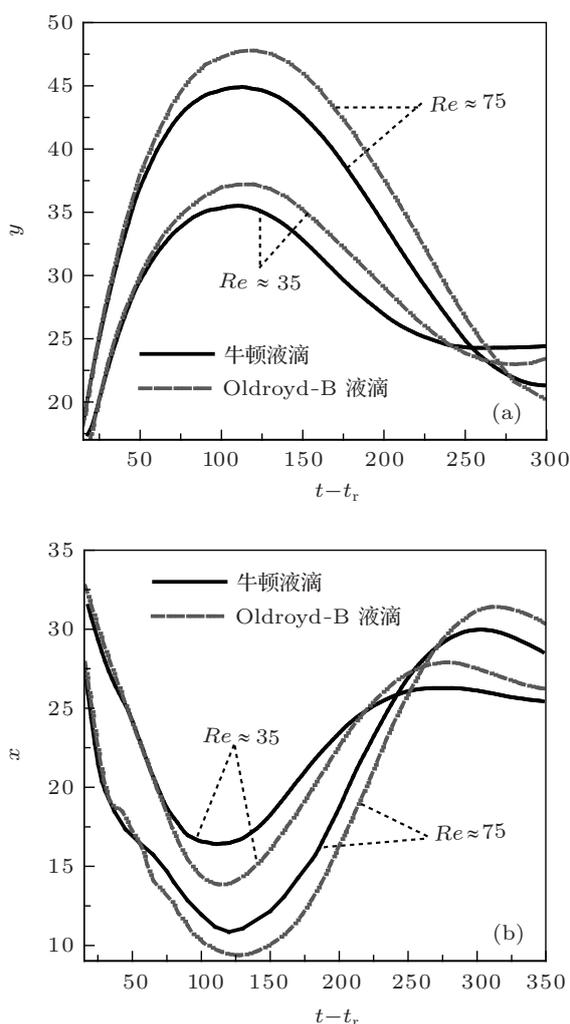


图 7 不同模型液滴正碰后表面粒子沿不同方向随时间的变化

总之, 当合并液滴在 y 方向达到最大拉伸变形后, 液滴边缘处的压力瞬间发生变化, 合并液滴在表面张力驱动下开始收缩 (见图 4 和图 5), 从而在

x 方向达到最大拉伸变形, 这期间伴随着黏性耗散和表面能量之间的转换. 随后由于黏性耗散的作用, 振荡变形呈衰减趋势 (见图 7), 随着时间的延长, 合并后的牛顿或黏弹性液滴最终都形成一个热力学平衡下的圆形液滴.

4.2.2 相溶液滴斜碰过程

本小节对较小 Re 数下, 偏心碰撞参数为 $\chi = 0.5$ 的液滴碰撞聚合过程进行模拟. 液滴接触的瞬间, 两液滴连心线与相对速度方向的夹角 θ_t 满足 $\sin \theta_t = \chi$, 因此, 平行和垂直于连心线的速度可分别取为纵向速度 $v_p = (1 - \chi^2)^{1/2} v_{rel}$, 横向速度 $v_n = \chi v_{rel}$. 根据 Jiang 等 [34] 的实验观察可知, 纵向速度决定了液滴斜碰后聚合、拉伸变形的过程, 其变形过程类似于液滴正碰的情况. 而横向速度引起了合并液滴的滑动和旋转变形运动, 使其绕垂直于该平面的固定轴旋转变形.

图 8 给出了 $Re \approx 75$ 时, 牛顿液滴斜碰后聚合旋转变形的过程, 与图 3 的结果对比, 它们的变形过程明显不同. 液滴斜碰后短时间里也形成流体桥, 随时间延长两个液滴合并为一个液滴, 纵向速度动能转化为合并液滴逆流形成的内运动 [1,3,4]. 横向速度使得合并液滴流体桥之间分成的两部分流体沿相反方向运动, 并导致流体桥的破裂. 图 8 展示了合并液滴变形中的“花生”形状, 变形过程中亦出现过渡的旋转哑铃形状, 并在某时刻达到液滴的最大拉伸变形.

图 9 给出了不同模型液滴斜碰后的变形情况. 可以看出, 合并后的黏弹性液滴的拉伸变形趋势要较牛顿液滴的大, 形成的哑铃或花生形状也较明显, 相同时刻黏弹性液滴形成的圆盘要比牛顿液滴的薄 ($t \approx 136$). 液滴斜碰后发生旋转变形, 定义其旋转角度为两液滴连心线 l 与接触点沿 x 正方向的夹角为 θ .

图 10 给出了不同模型的液滴斜碰后运动过程中旋转角度随时间变化的曲线, 可以看出, 碰撞后的短时间内, 黏弹性液滴的旋转速度略大于牛顿液滴的速度. 随着时间的延长, 由于弹性应力的作用, 黏弹性液滴的旋转速度又会略小于牛顿液滴的速度.

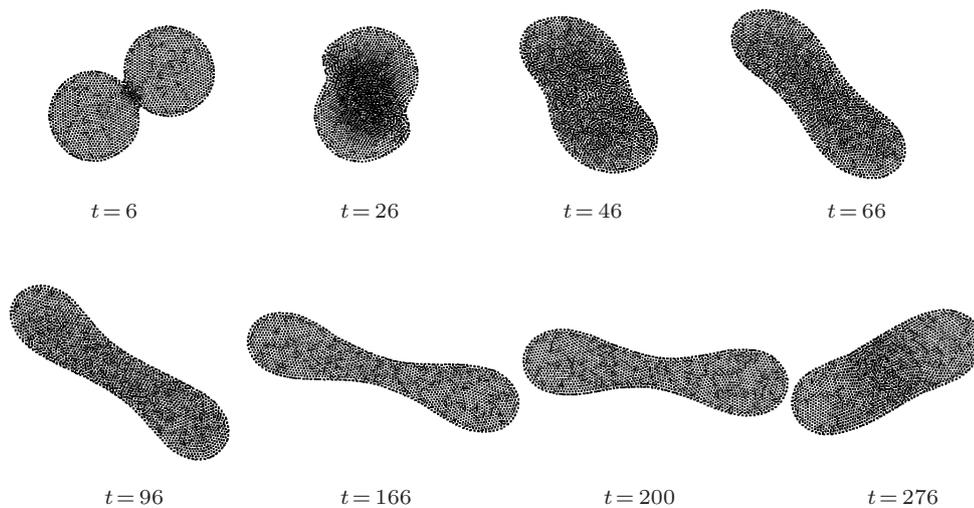


图8 牛顿液滴斜碰后第一个振荡周期内的变形过程 ($Re \approx 75$)

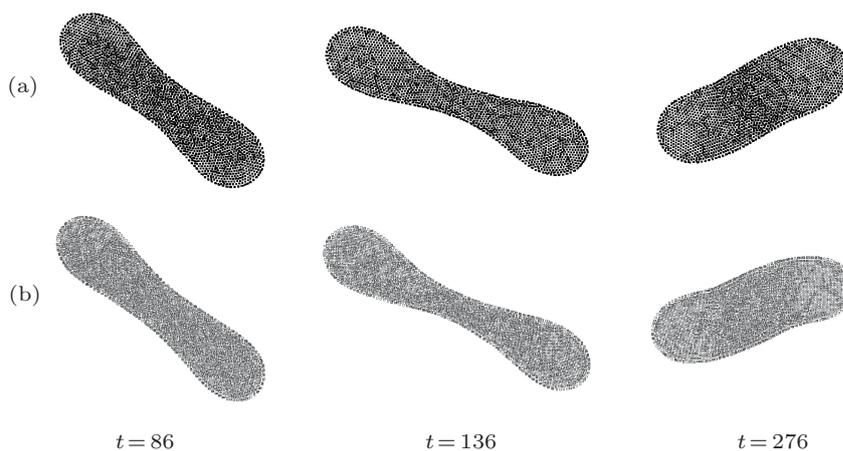


图9 不同模型液滴斜碰后形状的比较 ($Re \approx 75$) (a) 牛顿液滴; (b) Oldroyd-B 液滴

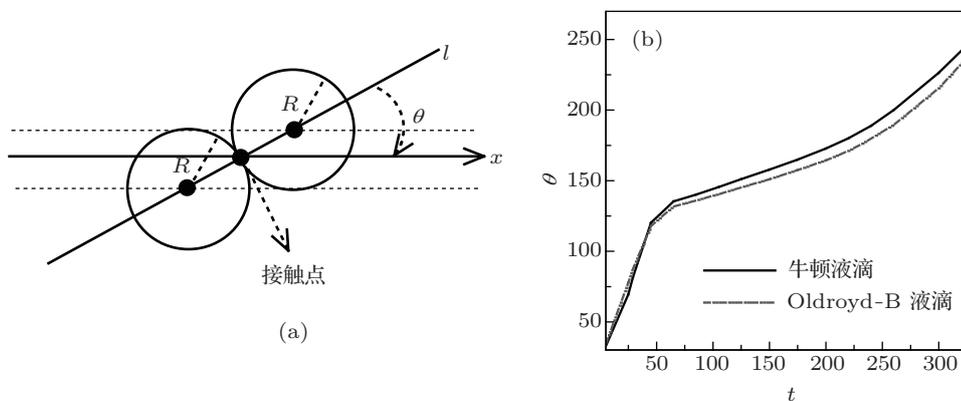


图10 不同模型液滴斜碰后旋转角度随时间的变化

4.3 不相溶液滴碰撞过程模拟

4.2 节中主要对相溶微液滴的碰撞聚合过程进行了模拟研究, 然而不相溶液滴的碰撞变形现象^[1,6,15,34] 要比相溶液滴的复杂得多, 目前关于这方面的实验研究^[6,7] 还不多见, 其数值研究更是少见. 为进一步体现本文提出的 C-SPH 方法模拟较小尺度下流体流动变形的能力, 本小节对文献 [1, 6] 中的不相溶液滴 (两种材料) 碰撞后的现象进行模拟. 模拟中采用的数值技术及表面张力处理与 4.2 节的一致, 参数取值也基本一致, 且忽略不同性质液滴间的传热.

据文献 [1, 6, 13] 中不相溶液滴碰撞变形过程的数值模拟或实验研究知, 在相同碰撞速度下相溶液滴撞后出现聚合现象, 而不相溶液滴撞后出现弹跳、反弹分离等更加复杂的变形过程. 值得注意的是, 真空失重下微液滴的碰撞变形过程受表面张力的影响^[1,6,13] 很大, 不同表面张力的处理方式得到的现象会有稍许差别. 模拟中考虑的碰撞速度与 4.2 节中的相同, 即模拟中考虑较低碰撞速度的情况. 此外, 本小节使用的两个不相溶液滴的材料分别为: 图 11 至图 13 中的液滴代表水和碳氢化合物 ($C_{14}H_{30}$) 两种材料的液滴, 其黏度比及密度比见文献 [1]; 图 14 中的液滴代表水和柴油两种材料的液滴, 其黏度比及密度比见文献 [6]. 值得注意的是, 本小节里展示的所有数值结果中左边液滴代表水液滴.

4.3.1 不相溶液滴正碰过程

图 11 给出了两个不相溶液滴正碰后的形状变化. 通过对比图 11 和图 3 可观察到: 1) 无论两个液滴是否相溶, 在正碰短时间里 ($t < 50$), 液滴

变形情况相似, 都处在沿 y 方向的拉伸变形过程中; 2) 随时间延长两液滴出现对称的收缩变形过程 ($70 < t < 100$), 这是由于不相溶液滴两个交界面处受到表面张力影响的缘故, 而相溶液滴合并为一个液滴后, 其相交面处所受的表面张力消失; 3) 两个不相溶液滴在表面张力的影响下最终使两个液滴出现分离现象, 约 $t > 150$ 出现液滴弹跳、分离的现象. 值得注意的是, 图 11 展示的液滴变形过程与文献 [1] 中采用其他数值方法得到的一致.

图 12 给出了较大碰撞速度下的液滴变形过程. 由图 12 可以明显看到: 1) 在碰撞瞬间, 碰撞速度越大, 液滴的拉伸变形幅度越大; 2) 沿 y 方向拉伸变形过程中, 碰撞速度越大, 相互之间的冲击力越大, 在表面张力作用下, 接触区域出现液滴收缩变形 (与碰撞速度反方向), 而液滴的上下面处仍是在碰撞瞬间产生的压力差下扩张拉伸, 从而在拉伸变形的第一个阶段里液滴之间出现了空隙 ($t \approx 50, 70$); 3) 液滴沿 y 方向达到最大拉伸变形后开始沿与初始碰撞速度相反的方向收缩, 但两液滴原来接触的区域部分又都开始向里变形 (与碰撞速度相同的方向), 从而形成了两个液滴收缩过程的第二次接触 ($t \approx 150$); 4) $t \approx 126$ 时刻里, 出现了“耳朵”形状, 随着时间的延长, 两液滴第二次接触时的碰撞速度非常小, 在较大表面张力的作用下出现了“前细后粗”形状 ($t \approx 150$), 这一现象在文献 [1, 6] 中的数值或实验结果里也能观察到; 5) 两个微液滴第二次接触后在表面力驱动下又会在较短时间里分离 ($t \approx 180$), 从而出现了反弹、分离现象, 另外, 随时间延长液滴变形过程出现了不对称现象, 这是因为在较大碰撞速度下, 数值模拟变得不稳定^[32].

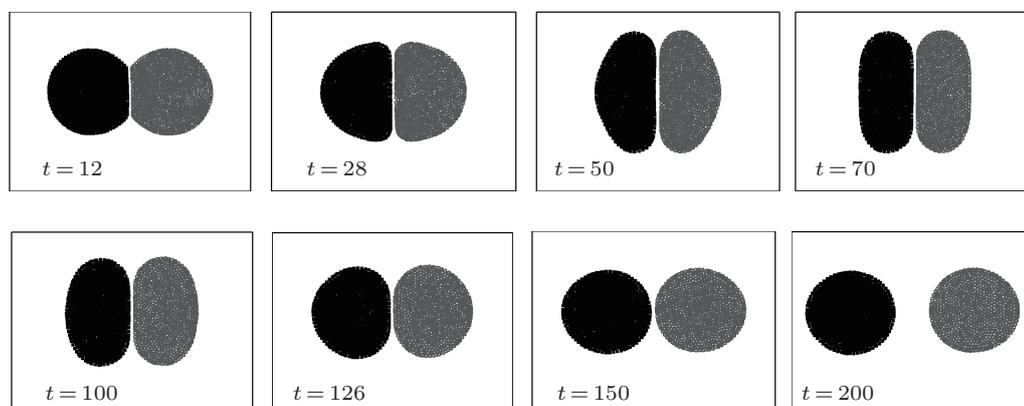


图 11 不相溶液滴正碰后其形状随时间的变化 ($Re \approx 35$)

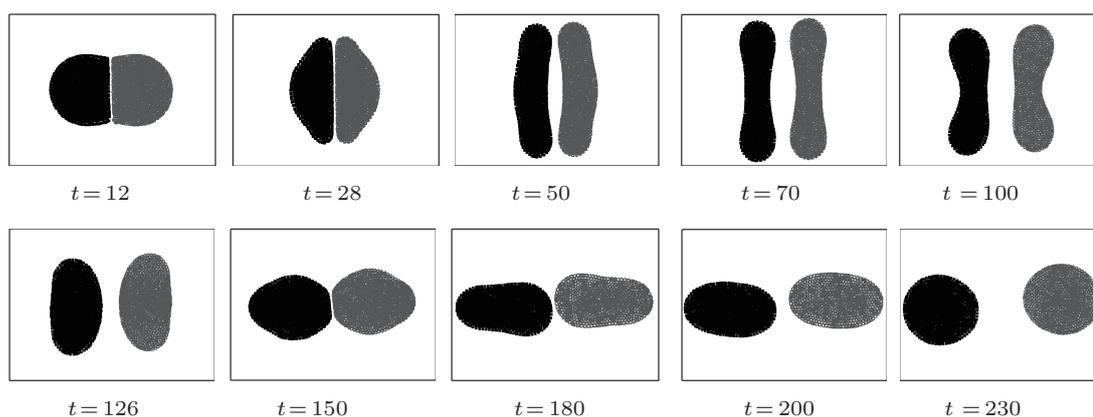


图 12 不相溶液滴正碰后其形状随时间的变化 ($Re \approx 75$)

4.3.2 不相溶液滴斜碰过程

上面主要对正碰 (即碰撞参数 $\chi = 0$) 情况下的

不相溶液滴变形过程进行了模拟分析, 然而据文献 [1, 6] 知, 碰撞参数 χ 对不相溶液滴的碰撞变形过程也有很大影响.

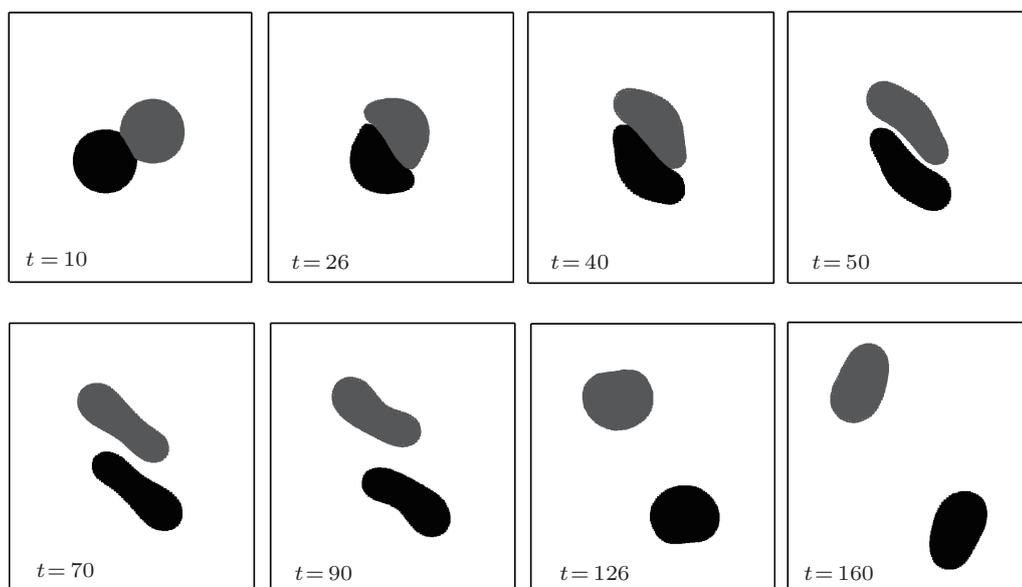


图 13 不相溶液滴斜碰后其形状随时间的变化 ($Re \approx 75$)

图 13 给出了不相溶微液滴 (水和碳氢化合物) 在碰撞参数 $\chi = 0.5$ 时的变形过程. 比较图 13, 图 12 和图 8 可知: 1) 斜碰瞬间里变形过程类似, 在纵向速度 v_p 作用下出现拉伸变形, 横向速度 v_n 作用下出现旋转变形, 但不相溶液滴的拉伸变形程度要小于相溶液滴的; 2) 不相溶液滴拉伸变形过程中 ($t \leq 50$), 接触区域附近出现了收缩变形, 形成了两个液滴间的缝隙, 与其正碰情况下类似 (见图 12); 3) 不相溶液滴达到最大拉伸变形后开始收缩, 但由于两个液滴受纵向和横向速度的影响, 收缩变形

过程中出现旋转远离对方的现象, 这与不相溶液滴的正碰情况 (出现第二次接触, 见图 12) 完全不同; 4) 由于横向速度的影响, 左边的液滴旋转变形到了容器的右边, 右边的液滴旋转到了容器的左边, 这与文献 [1] 中得到的结论一致. 综上分析可知, 不相溶液滴斜碰情况下的变形过程要比正碰情况下的变形过程复杂得多, 较相溶液滴的斜碰的情况也要复杂得多.

图 14 给出了黏度比 $\eta_1 : \eta_2 = 1 : 3$ 时, 不相溶液滴 (左边为水液滴, 右边为柴油液滴) 的正碰变形

过程. 比较图 12 和图 14 知: 1) 液滴正碰变形过程中左边的液滴形状变化与图 12 中的类似, 而右边的液滴由于黏度大的原因拉伸或收缩趋势都小于左边的液滴; 2) 黏度差别比较大的两个不相溶液滴正碰后, 出现了较明显的不对称现象, 这一现象与文献 [6] 中的实验结果符合; 3) 较大黏度的液滴能

较快地形成热力学平衡下的圆形液滴, 而黏度较小的体现出较大幅度的拉伸和收缩变形, 达到热力学平衡圆形液滴所需的时间较长; 4) 液滴变形的趋势体现了能量的转化情况, 黏度小的液滴表面能量比较大, 变形剧烈 ($t \approx 70$).

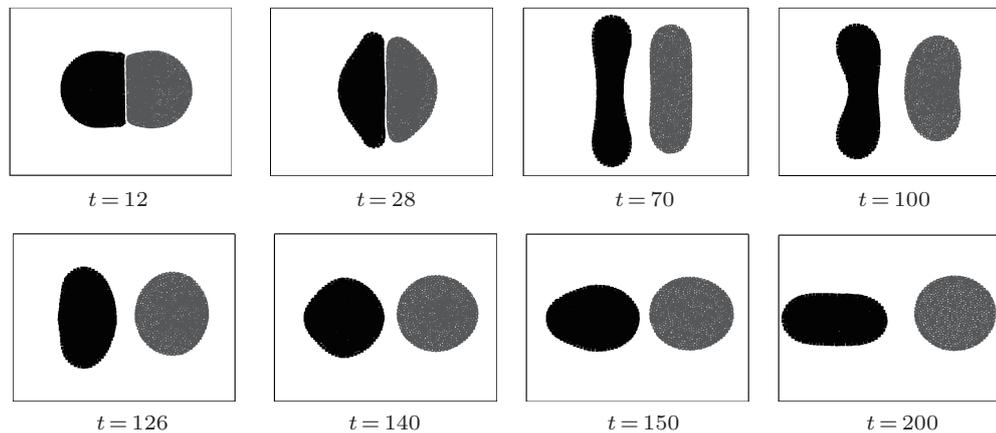


图 14 黏度比 $\eta_1 : \eta_2 = 1 : 3$ 时, 不相溶液滴正碰后其形状随时间的变化 ($Re \approx 75$)

5 结论

针对微液滴碰撞动力学过程模拟, 本文首先建立了一种能够模拟较小尺度下聚合物流动问题的改进 SPH 方法, 同时采用修正的表面张力处理方法; 其次, 运用改进 SPH 方法对等直径牛顿相溶液滴碰撞变形过程进行了模拟研究, 并与相关的数值或实验结果进行比较, 验证了本文提出的改进 SPH 方法模拟微液滴碰撞问题的可靠性; 最后, 为展示本文提出的改进 SPH 方法处理较小尺度下聚合物自由面问题的能力, 对相溶和不相溶两种情况下的微液滴碰撞变形过程进行了试探性模拟研究. 本文结论如下:

1) 提出的改进 SPH 方法联合修正的表面张力处理技术能够准确地捕捉相溶或不相溶聚合物微

液滴的碰撞变形过程;

2) 相溶微液滴的碰撞聚合过程中会出现拉伸、收缩等变形现象, 并伴有黏性能量耗散、动能和表面能量之间的转化, 不相溶液滴的碰撞分离过程中, 也出现拉伸、收缩等变形现象, 但它们的变形情况与相溶液滴的完全不同;

3) 碰撞参数 (相对碰撞位置) 对液滴碰撞变形过程有重要影响, 正碰过程与斜碰过程中出现的变形现象截然不同, 斜碰情况下会出现液滴的旋转现象;

4) 聚合物微液滴的碰撞变形过程较牛顿液滴的要复杂得多;

5) 相溶聚合物微液滴斜碰过程中, 由于弹性应力作用, 黏弹性液滴的旋转速度较牛顿液滴的先快后慢.

[1] Pan Y, Suga K 2005 *Phys. Fluids* **17** 082105

[2] 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]

[3] Willis K D, Orme M E 2000 *Experim. Fluids* **29** 347

[4] Mashayek F, Ashgriz N, Minkowycz W J, Shotorban B 2003 *Int. J. Heat Mass Transfer* **46** 77

[5] Bach G A, Koch D L, Gopinath A 2004 *J. Fluid Mech.* **518** 157

[6] Chen R H, Chen C T 2006 *Experim. Fluids* **41** 453

[7] Gao T C, Chen R H, Pu J Y, Lin T H 2005 *Experim. Fluids* **38** 731

[8] Lyu S P, Bates F S, Macosko C W 2002 *Fluid Mech. Transport Phenomena* **48** 7

[9] Eggers J, Lister J, Stone H A 1999 *J. Fluid Mech.* **401** 293

[10] Yao W, Maris H J, Pennington P, Seidel G M 2005 *Phys. Rev. E* **71** 016309

[11] Dai M Z, Schmidt D P 2005 *Phys. Fluids* **17** 041701

[12] Qian J, Law C K 1997 *J. Fluid Mech.* **331** 59

- [13] Jiang X, James A J 2007 *J. Engineer. Math.* **59** 99
- [14] Motzigmamba M, Roth N, Bothe D, Warnecke H J, Pruss J, Wielage K, Weigand B 2002 *Proceedings of the 18th Annual Conference Liquid Atomization Spray Systems (ILASS Europe)* Zaragoza, Spain September 9–11, 2002 p559
- [15] Ashgriz N 2011 *Handbook of Atomization and Sprays Theory and Applications* (New York: Springer) p157
- [16] 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]
- [17] Zhong C W, Xie J F, Zhuo C S, Xiong S W, Yin D C 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4083
- [18] Wang J F, Sun F X, Cheng R J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 060201
- [19] Cheng R J, Cheng Y M, Ge H X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4059
- [20] Liu G R, Liu M B 2003 *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Mesh-free Particle Method* (Singapore: World Scientific)
- [21] Monaghan J J 1994 *J. Comp. Phys.* **110** 399
- [22] Nugent S, Posch H A 2000 *Phys. Rev. E* **62** 4968
- [23] Hu X Y, Adams N A 2006 *J. Comp. Phys.* **213** 844
- [24] Ellero M, Kröger M, Hess S 2002 *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **105** 35
- [25] Fang J, Owens R G, Tacher L, Parriaux A 2006 *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **13** 68
- [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] Chen J K, Beraun J E 2000 *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* **190** 225
- [28] Yang X Y, Liu M B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 224701 (in Chinese) [杨秀峰, 刘谋斌 2012 物理学报 **61** 224701]
- [29] Jiang T, Ouyang J, Li X J, Zhang L, Ren J L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 096206 (in Chinese) [蒋涛, 欧阳洁, 栗雪娟, 张林, 任金莲 2011 物理学报 **60** 096206]
- [30] Liu M B, Xie W P, Liu G R 2005 *Appl. Math. Model.* **29** 1252
- [31] Jiang T, Ouyang J, Zhao X K, Ren J L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 054701 (in Chinese) [蒋涛, 欧阳洁, 赵晓凯, 任金莲 2011 物理学报 **60** 054701]
- [32] Lopez H, Sigalotti L D G 2006 *Phys. Rev. E* **73** 051201-1
- [33] Hopper R W 1990 *J. Fluid Mech.* **213** 349
- [34] Jiang Y J, Umemura A, Law C K 1992 *J. Fluid Mech.* **234** 171
- [35] Qian J, Law C K 1997 *J. Fluid Mech.* **331** 59

Numerical study of collision process between two equal diameter liquid micro-droplets using a modified smoothed particle hydrodynamics method*

Jiang Tao¹⁾²⁾ Lu Lin-Guang^{1)†} Lu Wei-Gang¹⁾

1) (Department of Mathematics, College of Hydraulic Science and Engineering, Yangzhou University, Yangzhou 225002, China)

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

(Received 1 May 2013; revised manuscript received 15 August 2013)

Abstract

In this work, the dynamical collision process between two miscible/immiscible micro-droplets is simulated by a modified smoothed particle hydrodynamics (C-SPH) method. In order to improve the numerical accuracy and stability of traditional SPH method, a kernel gradient modified scheme without kernel derivative is considered. Meanwhile, an improved surface tension technique based on the van der Waals model is adopted to deal with the moving interface. The reliability of C-SPH method of simulating the deformation process between two droplet collisions is tested through the numerical simulations of coalescence process between two miscible Newtonian droplet collisions. Subsequently, the coalescence process of miscible polymer droplet collision and the deformation process of bouncing and separation between two immiscible droplet collisions are investigated, in which the control equations of droplets are all based on the van der Waals model. The influences of the collision velocity, collision angle and the density ratio on the deformation process of collision are discussed, and the changes of liquid bridge and rotation angle are analyzed.

Keywords: smoothed partical hydrodynamics, micro-droplet, polymer droplet, collision

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

DOI: 10.7498/aps.62.224701

* Project supported by the Natural Science Fundamental Research Project of Jiangsu Colleges and Universities, China (Grant No. 12KJD570001) and the Young Scholars Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK20130436).

† Corresponding author. E-mail: lglu@yzu.edu.cn; jtrjl_2007@126.com