

# 微液滴动力学特性的耗散粒子动力学模拟<sup>\*</sup>

常建忠<sup>1)</sup> 刘谋斌<sup>2)</sup> 刘汉涛<sup>1)†</sup>

1) 中北大学机电工程学院, 太原 030051)

2) 新加坡南洋理工大学化学与生物医学工程系, 新加坡 649798)

(2007 年 10 月 25 日收到, 2007 年 12 月 12 日收到修改稿)

对传统的耗散粒子动力学方法进行了改进. 改进的耗散粒子动力学方法采用了包含远程吸引力和近距排斥力的保守力势函数, 从而使得用耗散粒子动力学方法模拟多相流动成为可能. 应用改进的耗散粒子动力学方法, 对微尺度下液滴的形成及液滴在微重力下的大幅度振荡变形进行了数值模拟. 计算结果表明, 改进的耗散粒子动力学 (DPD) 方法能够有效地描述微尺度下液滴的动力学特性, 对研究复杂流体多相流动有着重要的意义.

关键词: 多相流, 微液滴, 耗散粒子动力学 (DPD) 方法, 保守力势函数

PACC: 0340G, 4710, 4755K

## 1. 引 言

微尺度下液滴动力学, 作为复杂流体多相流动的一个重要分支, 对喷墨打印、高分子及蛋白质悬浮传输分析、微米/纳米粒子的合成以及药物运输等不同的工程领域有着非常重要的意义<sup>[1,2]</sup>. 微尺度下液滴动力学解析或半解析形式的理论研究, 一般局限在极少数非常特殊的情形中. 而实验研究往往耗资不菲, 而且为了得到具有统计意义的数据导致实验周期漫长. 近年来, 越来越多的研究者把兴趣集中在微尺度或者介观尺度下液滴动力学的数值研究上.

微尺度及介观尺度下多相流体流动的计算模型必须能够处理诸如自由表面和移动界面等运动边界, 必须能够处理不同流体间较大的密度比及黏度比, 必须能处理由微尺度所带来的各种微效应. 这些微效应包括低雷诺数 (Reynolds number, 惯性-黏性比), 中高克卢森数 (Knudsen number, 粒子尺寸-流动区域比) 以及较大的面积-体积比<sup>[3,4]</sup>. 传统的分子动力学 (molecular dynamics, MD) 方法<sup>[5,6]</sup>, 通过追踪各个分子/原子的运动 (位置及动量) 对整个流体系统的特性进行模拟. 其时间及空间尺度大致为纳秒和纳米级. 在现在的计算条件下, 很难对介观尺度以上的流动区域进行模拟. 而传统的有限差分法和有限

容积等网格方法对模拟微液滴动力学特性也存在着不少困难<sup>7,8]</sup>. 一方面, 基于 N-S 方程的有限差分法和有限容积法对介观和微观尺度的流体行为未必适用; 另一方面, 有限差分法和有限容积法必须配备合适算法以确定多相流动中的自由表面/运动界面. 典型的自由表面/运动界面追踪及捕捉算法有: 1) 粒子追踪法如 PIC<sup>[9]</sup>, MAC<sup>[10]</sup> 和 FLIC<sup>[11]</sup> 等; 2) Volume of Fluid (VOF)<sup>[12]</sup>; 3) Level Set (LS)<sup>[13,14]</sup>; 4) Phase Field<sup>[15]</sup> 等. 这些算法比较复杂, 而且往往适应性不强. 例如粒子追踪法需要大量的计算时间, 复杂的界面重构使得 VOF 很难从二维推广到三维; LS 往往伴随质量的增加或减少, 并对复杂几何区域适应性较差<sup>[16]</sup>.

介于纳米与微米之间的介观尺度模拟方法, 已经逐渐成为最热门的课题之一. 这些方法包括: 1) 光滑粒子动力学 (smoothed particle hydrodynamics, SPH)<sup>[17-19]</sup>; 2) 网格玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method, LBM)<sup>[20,21]</sup>; 3) 直接模拟蒙特卡洛 (direct simulation Monte Carlo, DSMC)<sup>[22]</sup>; 4) 耗散粒子动力学 (dissipative particle dynamics, DPD)<sup>[23-25]</sup>. 这些方法特点不同, 应用各异. SPH 源于天文物理学以模拟星系演变, 最近被逐步推广到传统连续力学所适用的领域, 甚至进一步应用于微尺度下非连续介质的运动特性. LBM 比较适合模拟具有复杂几何区域, 复杂

<sup>\*</sup> 山西省人才专项基金 (批准号: 20060403JJ) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: lht@nuc.edu.cn

边界的流体流动. DSMC 适用于模拟稀薄气体的特性. 耗散粒子动力学则适合模拟各种复杂的流体流动, 如相分离<sup>[25]</sup>, 蛋白质等大分子悬浮<sup>[26]</sup>, 表面活性剂<sup>[27, 28]</sup>, 胶体运输<sup>[29, 30]</sup>, 稀释聚合物溶液<sup>[31]</sup>以及生物薄膜<sup>[32]</sup>等.

传统的耗散粒子动力学方法采用简单的线性的函数  $1 - r$  ( $r \leq 1$ ) 作为保守力的权函数 (weight function). 这种简单形式的权函数描述了一种纯排斥性的软作用力. 纯排斥力导致了 DPD 粒子相互之间排斥而分散开来, 从而占据整个计算区域. 因此, 基于这种纯排斥性权函数的 DPD 方法实际上模拟的是气体. 对液体甚至固体的描述往往是通过增加介质密度来实现的. 这种 DPD 方法不能模拟带有液-气共存的多相流体如液滴动力学特性等等. 虽然有的研究者利用传统的 DPD 方法对液滴变形、破碎等等作了一些研究<sup>[33, 34]</sup>, 这些研究都是基于模拟多组分系统液-液和液-固交接面, 而并非单一组分下带有液-气共存的液滴动力学特性. 本文利用改进的 DPD 方法对微液滴的形成及大变形进行了数值模拟. 改进的 DPD 方法采用了一种新的保守力权函数, 这种权函数包含远程吸引力和近距排斥力, 能有效地描述液滴起源中的液-气行为.

## 2. 耗散粒子动力学

在耗散粒子动力学模型中, 流体系统由一系列性质相同的粒子组成. 这些粒子并非单个分子, 而是由若干个分子组成. 组成粒子的分子数目的多少与粒子大小, 实际计算区域的几何尺寸, 以及计算时间等等密切相关. 如果组成粒子的分子数目很少, DPD 模型只能模拟较小的区域. 极端的情形是粒子由单个分子构成, 这时 DPD 模型实际上就是带软作用力的分子动力学模型. 而如果组成粒子的分子数目很多, DPD 模型能够充分发挥其优势, 模拟较大的区域. 因此耗散粒子动力学方法可以被视为一种粗粒化的分子动力学方法.

### 2.1. 控制方程

同分子动力学模型类似, 牛顿运动方程描述了 DPD 模型中 DPD 粒子的运动:

$$\begin{aligned} \frac{dr_i}{dt} &= v_i, \\ \frac{dv_i}{dt} &= F_i = f_i^{\text{int}} + f_i^{\text{ext}}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中  $r_i$  和  $v_i$  分别是位置和速度矢量;  $f_i^{\text{ext}}$  是包括重力在内的外力;  $f_i^{\text{int}}$  是可叠加的粒子-粒子间两两相互作用力, 包括保守力  $F_{ij}^C$ , 耗散力  $F_{ij}^D$ , 以及随机力  $F_{ij}^R$ ,

$$f_i^{\text{int}} = \sum_{j \neq i} F_{ij} = \sum_{j \neq i} F_{ij}^C + F_{ij}^D + F_{ij}^R, \quad (2)$$

式中  $F_{ij}$  是粒子  $j$  施加在粒子  $i$  上的作用力.  $F_{ij}$  与  $F_{ji}$  大小相等, 方向相反, 从而保证了 DPD 模型中动量的严格守恒. 粒子-粒子间的两两相互作用力局限在有限的截距  $r_c$  内, 而  $r_c$  往往可取为 DPD 模型中无量纲的单位长度.

保守力  $F_{ij}^C$  是一种沿粒子-粒子中心的软作用力, 可表示为

$$F_{ij}^C = a_{ij} w^C(r) \hat{r}_{ij}, \quad (3)$$

式中  $a_{ij}$  为保守力系数, 它所描述的是粒子  $i$  与  $j$  间相互作用的保守力的强度.  $r_{ij} (= r_i - r_j)$  为方向矢量, 其模为  $r = r_{ij} = |r_{ij}|$ .  $\hat{r}_{ij} = r_{ij}/r_{ij}$  为单位矢量.  $w^C(r_{ij})$  为保守力权函数.

耗散力  $F_{ij}^D$  可表示为

$$F_{ij}^D = -\gamma w^D(r_{ij}) (\hat{r}_{ij} \cdot v_{ij}) \hat{r}_{ij}, \quad (4)$$

式中  $\gamma$  为耗散力系数, 描述了粒子  $i$  与  $j$  间相互作用的耗散力强度.  $v_{ij} (= v_i - v_j)$  为速度矢量.  $w^D(r_{ij})$  为耗散力权函数. 由(4)式可见, 耗散力由粒子间的相对位置和相对速度共同决定.

随机力  $F_{ij}^R$  可表示为

$$F_{ij}^R = \sigma w^R(r_{ij}) \xi_{ij} \hat{r}_{ij}, \quad (5)$$

式中  $\sigma$  为随机力系数, 描述了粒子  $i$  与  $j$  间相互作用的耗散力强度.  $w^R(r_{ij})$  为随机力权函数. 耗散力和随机力也是沿粒子-粒子中心的作用力, 这确保了 DPD 模型的线动量的守恒.  $\xi_{ij}$  为随机变量, 一般具有高斯分布, 平均值为 0 且方差为  $\Delta t^{-1}$  ( $\Delta t$  为推进牛顿方程时间积分的时间步长).

(4) 式负号表明, 耗散力方向与粒子间相对矢量的方向相反, 因此减弱粒子间相互作用. 其直接结果是减少系统的动能, 降低系统的温度. 而随机力引起粒子间的随机振动, 增加系统的动能, 提高系统的温度. 耗散力和随机力的相互作用, 在满足一定条件下, 能使整个系统温度维持在基本恒定的水平上. 因此耗散粒子动力学方法实际上就是粗粒化、恒温, 以及含软作用力的分子动力学方法. 保持系统恒温的条件可以从对系统的热力学平衡学的统计分析得到<sup>[35]</sup>. 对温度为  $T$  的 DPD 流体系统, 为了维持系统温度不变, 耗散力系数和随机力系数, 以及耗散力权

函数和随机力权函数必须满足

$$\gamma = \frac{\sigma^2}{2k_B T}, \quad (6)$$

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2, \quad (7)$$

(6)式中,  $k_B$  为玻尔兹曼常数. DPD 模型中相互作用能量用  $k_B T$  表示, 而  $k_B T$  往往取整为 1. 而(7)式中 耗散力权函数和随机力权函数比较常用的形式为

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2 = \begin{cases} (1-r)^2, & r < 1, \\ 0, & r \geq 1. \end{cases} \quad (8)$$

## 2.2. 保守力权函数

传统的 DPD 方法采用一个简单线性形式的保守力权函数

$$w^C(r) = 1 - r, \quad (9)$$

(9)式所描述的是一个纯排斥性质的软作用力. 它所对应的保守力势函数  $U^C(r) = 0.5 - (r - r^2)$  也是纯排斥性质的软作用势. 采用此种纯排斥性的保守力权函数的 DPD 模型理论上只能模拟类似气体的特性, 因为纯排斥力导致 DPD 粒子相互排斥离散开来, 占据整个计算区域(或容器体积). 虽然传统的 DPD 模型被广泛应用于多组分多相系统, 却不能够模拟单组分多相(气-液-固)系统, 因为粒子间只有排斥力, 而没有吸引力将粒子结合在一起. 因此传统的 DPD 模型不能模拟带有自由表面的流体流动, 中空带气泡的液体, 液滴动力学特性等等含气-液甚至气-液-固共存的多相系统. 考虑到气-液-固共存及相互转化的物理本质, 在保守力势函数中引入吸引力是必需的. 引入的吸引力一方面必须能够描述气-液共存的流体系统, 另一方面, 必须也是软作用力形式, 从而不改变 DPD 方法的物理本质. 这样的保守力势函数在 DPD 粒子非常趋近时表现为排斥形式, 而当 DPD 粒子间距离趋远时表现为吸引形式. 构造这种近距排斥远程吸引的保守力权函数的方式较多. 一种可能的方式是把不同作用强度和截距的光滑粒子动力学的光滑函数叠加, 从而组合出满足特定要求的保守力权函数. 光滑粒子动力学中最常用的是三次样条光滑函数<sup>[19, 36]</sup>

$$W(r) = W(r, r_c) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} \left( \frac{2r}{r_c} \right)^2 + \frac{3}{4} \left( \frac{2r}{r_c} \right)^3, & 0 \leq \frac{2r}{r_c} < 1, \\ \frac{1}{4} \left( 2 - \left( \frac{2r}{r_c} \right) \right)^3, & 1 \leq \frac{2r}{r_c} < 2, \end{cases} \quad (10)$$

(10)式中  $r_c$  为光滑函数截距(SPH 方法常称之为光滑长度). (10)式所定义的是非负的单调递减函数. 在原点及截距光滑过渡. 采用不同的作用强度系数及截距, 能够组合构造出如下部分区域为正, 部分区域为负的函数  $U(r)$ , 以作为 DPD 模型中粒子间相互作用的保守力势函数

$$U(r) = (AW_1(r) - BW_2(r)) = (AW_1(r, r_{c1}) - BW_2(r, r_{c2})), \quad (11)$$

(11)式中  $W_1(r)$  和  $W_2(r)$  是非正则化的三次样条光滑函数,  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$ , 以及  $A$  和  $B$  分别是对应于  $W_1(r)$  和  $W_2(r)$  的截距及作用强度系数. 考虑到  $W_1(r)$  是非负的函数, 而  $-W_2(r)$  是非正的函数,  $W_1(r)$  和  $W_2(r)$  实际上就代表了势函数中的排斥作用和吸引作用. 而  $A$  和  $B$  分别代表了排斥作用和吸引作用的强度. 增加  $A$  或减小  $B$  意味着增加保守力势函数  $U(r)$  中排斥力的相对强度. 相反增加  $B$  或减小  $A$  意味着增加保守力势函数  $U(r)$  中吸引力的相对强度.  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$  代表了排斥作用和吸引作用的作用范围.  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$ , 以及  $A$  和  $B$  的选择就决定了  $U(r)$  的形状: 正、负、或者部分正部分负及其正负转换点位置.

DPD 模型中保守力权函数是势函数的导数

$$w^c = -U'(r) = -(AW_1'(r, r_{c1}) - BW_2'(r, r_{c2})), \quad (12)$$

从(3)式考虑到保守力系数  $a_{ij}$ , DPD 模型中粒子间相互作用的保守力为

$$F_{ij}^C = -a_{ij}U'(r)\hat{r}_{ij} = a_{ij}w^c\hat{r}_{ij} = -a_{ij}(AW_1'(r, r_{c1}) - BW_2'(r, r_{c2}))\hat{r}_{ij}. \quad (13)$$

不同的  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$ , 以及  $A$  和  $B$  组合可以得到不同形式的保守力势函数及相应的权函数. 值得注意的是, 为了得到近距排斥远程吸引的保守力势函数和权函数, 排斥作用的强度应该大于吸引作用的强度, 即  $A > B$ , 而排斥作用的作用范围应该小于吸引作用的作用范围, 即  $r_{c1} < r_{c2}$ . 合理选择  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$ , 以及  $A$  和  $B$ , 就能得到描述特定流体的含近距排斥远程吸引的保守力势函数和权函数. 图 1 显示了不同吸引力强度系数下的保守力势函数及传统的权函数势函数  $U(r) = 18.75(2W_1(r, 0.8) - BW_2(r, 1.0))$  及  $U^C(r) = 0.5 - (r - r^2)$ . 如果  $B \neq 0$ , 如  $B = 1.0$ , 不同于线性非负、单调递减的传统的保守力势函数, 新构造的保守力势函数  $U(r) = 18.75(2W_1(r, 0.8) - W_2(r, 1.0))$  既有正的部分, 也有负的部分, 分别代表了近距排斥力和远程吸引力. 新保守力权函数在原点及

截距处导数为 0,而传统的保守力权函数原点及截距处导数非 0 (为 -1)。这显示采用新的保守力权函数,所得到的新的 DPD 模型中粒子间的作用力比使用传统的保守力权函数的 DPD 模型所得到的粒子间的作用力更光滑,所模拟的物理现象也应该更合理。例如我们的数值计算表明,新保守力势函数  $U(r)$  能有效的模拟在介观、微观尺度下水的动力学特性。

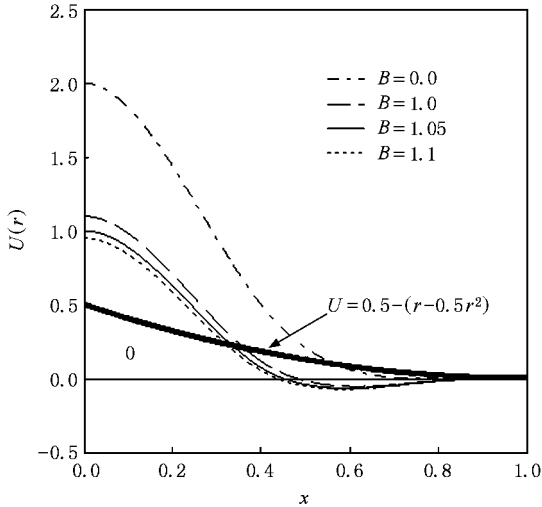


图 1 所构造的不同的保守力势函数  $U(r) = 18.75(2W_1(r, 0.8) - BW_2(r, 1.0))$  及传统的势函数  $U^c(r) = 0.5 - (r - r^2)$

### 3. 算例及分析

上面所描述的新的含近距排斥远程吸引的保守力权函数被用来模拟微液滴的形成,以及液滴的大变形及引起的振荡。

#### 3.1. 微液滴的形成

如上所述,不同的  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$ ,以及  $A$  和  $B$  的所构造出的保守力势函数  $U(r)$  有着不同的形状。利用这一构造出保守力势函数模拟流体时可能展示出的不同流体特性。本算例中  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$ ,以及  $A$  保持不变,为  $A = 2.0$ ,  $r_{c1} = 0.8$  及  $r_{c2} = 1.0$ 。所研究的是改变  $B$  对保守力势函数  $U(r)$ ,及对其所模拟的流体特性的影响。其他与 DPD 模拟相关的常数如下  $a = 18.75$ ,  $\sigma = 3.0$ , 及  $k_B T = 1.0$  ( $\gamma = 4.5$ )。保守力势函数  $U(r) = 18.75(2W_1(r, 0.8) - BW_2(r, 1.0))$ ,如图 1 所示。

计算机模拟设置中,1600 个相同的 DPD 粒子首先被投射在  $20 \times 20$  的无量纲化的计算区域中。采用传统的 DPD 方法,使系统达到平衡状态。因为传统

的 DPD 方法中保守力权函数是纯排斥性的,达到平衡状态后,DPD 粒子大致均匀地布满整个区域。当系统达到平衡状态后,应用新的保守力势函数  $U(r)$ ,改进的 velocity-Verlet 时间积分算法在经验系数  $\lambda = 0.65$  时间步长  $\Delta t = 0.02$  时继续展开 DPD 模拟。两个方向上施加周期性边界条件。

图 2 表示了保守力势函数中不同的吸引力强度系数所导致的不同结果。图 2(a)中  $B = 0$ ,所得到的保守力势函数  $U(r) = 37.5W_1(r, 0.8)$  中没有吸引力项,是一个纯排斥性质的作用势。和传统的保守力势函数  $U^c(r)$  类似,新保守力势函数  $U(r) = 37.5W_1(r, 0.8)$  导致 DPD 粒子间相互排斥离散开来,最终占据整个计算区域。图 2(b)中  $B = 1.0$ ,所得到的保守力势函数  $U(r) = 18.75(2W_1(r, 0.8) - W_2(r, 1.0))$  是一个含近距排斥远程吸引的作用势。当 DPD 粒子间的距离趋远时,保守力势函数中的吸引作用使得 DPD 粒子有聚集的趋势,而不是简单的排斥飞散。最终的结果是在计算区域中形成一个较大的微液滴。因为这个保守力势函数吸引作用相对排斥作用并非绝对优势,有不少 DPD 粒子飞散逃逸出中心微液滴的范围,形成气相。系统中液相/气相的密度比大致在 20 左右。图 2(c)中  $B = 1.05$ ,所得到的保守力势函数  $U(r) = 18.75(2W_1(r, 0.8) - 1.05W_2(r, 1.0))$  也是一个含近距排斥远程吸引的作用势。此时保守力势函数中吸引作用增强,所形成的微液滴半径变小,密度增加。而围绕在微液滴周围的气相粒子大幅度减少,密度变小。如果进一步增加保守力势函数吸引力强度系数,DPD 粒子中的吸引力进一步增加。如图 2(d)所示,计算区域中气相粒子凝结成许多小微液滴。同时围绕在微液滴周围的气相粒子非常稀薄。

#### 3.2. 微液滴的大变形及振荡

为了进一步验证新的含近距排斥远程吸引的保守力权函数在模拟气相-液相共存的微液滴的有效性,我们研究了一个微液滴在微重力作用下的大振幅振荡过程所涉及的动力学特性。所研究的微液滴初始为扁平形状,从达到准平衡态的圆形大微液滴截取而得。而准平衡态的圆形大微液滴是由 20000 个 DPD 粒子投射在  $20 \times 20$  的计算区域中,应用保守力势函数  $U(r) = 18.75(2W_1(r, 0.8) - 1.09W_2(r, 1.0))$  及系统温度  $k_B T = 1.0$  进行 DPD 计算得到。研究所截取的扁平微液滴的初始形状长宽比为

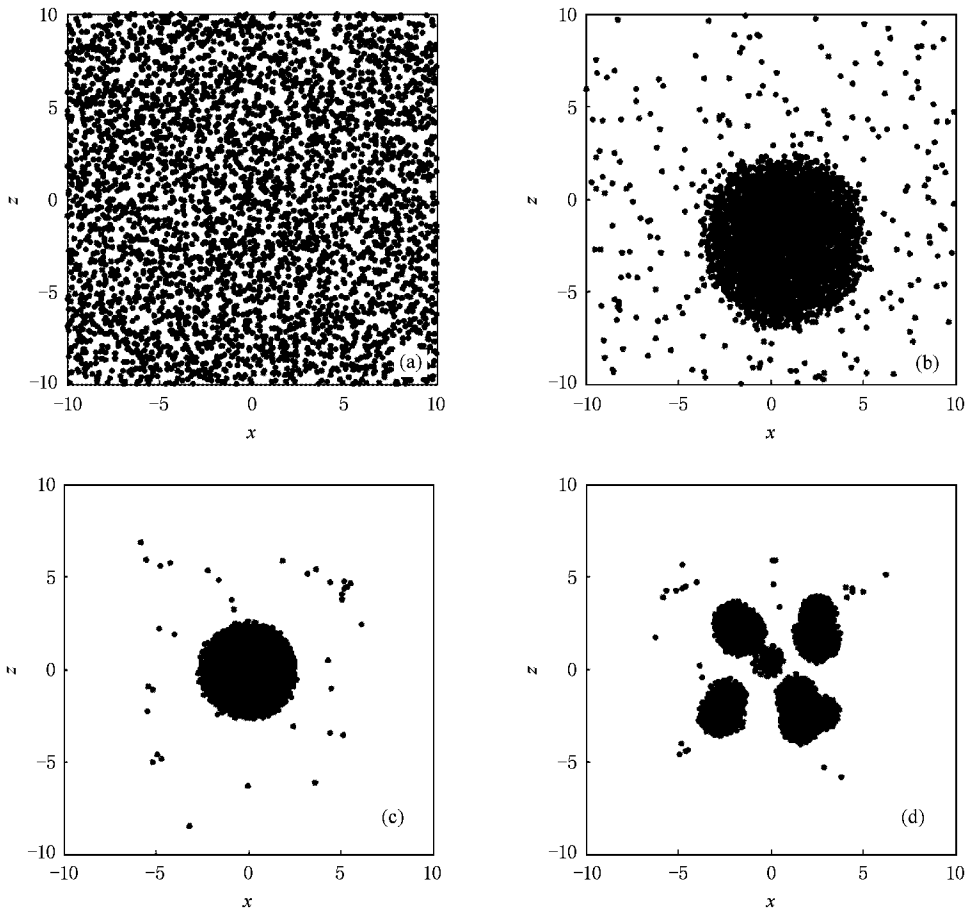


图2 采用新的 DPD 模型模拟微液滴的形成. 保守力势函数中不同的吸引力强度系数导致系统达到平衡状态后, 粒子分布状况不同. 展示了气相, 液相, 或者含不同密度比的气-液共存的各种状态. (a)  $B = 0.0$ , (b)  $B = 1.0$  (c)  $B = 1.05$  (d)  $B = 1.1$

5. 在相同的保守力势函数及系统温度下进一步展开 DPD 仿真. 因为初始的微液滴为扁平现状, 在表面张力的作用下, 扁平微液滴逐渐收缩变粗, 然后在惯性力的作用下, 变粗的微液滴挤压而向与初始方向垂直的方向扩展变得扁平. 达到最大位移后在表面张力的作用下, 扁平微液滴在垂直的方向逐渐收缩变粗. 如此循环往复, 形成一个个振幅较大的振荡过程.

图3显示了8个典型时刻 DPD 模拟的所得到的微液滴形状. 初始扁平微液滴的收缩变粗及其后面的在垂直方向的扩展变平过程可以很清楚从图3看出. 这一微液滴振荡变形过程也用了光滑粒子动力学 SPH 进行对比模拟计算. 两种研究方法使用相同的介质(水), 以及相同的计算参数(相同的无量纲计算区域及与 DPD 方法中保守力势函数相对应的 SPH 方法中的状态方程). SPH 作为一种无网格粒子方法, 应用粒子代表离散的介质, 并以这些粒子作为

框架对控制系统运动的偏微分方程进行离散以及计算<sup>[37]</sup>. 和 DPD 相同的是, SPH 模拟中也采用了无量纲化的单位. 不同的是, SPH 模拟基于 N-S 方程, 其压力-密度关系由范德华(van der Waals)状态方程得到. 在 SPH 计算模型中, 首先把 3600 ( $60 \times 60$ ) 个相同的 SPH 粒子均匀地分布在  $20 \times 20$  的无量纲化的计算区域中, 每个粒子含有相同的单位无量纲质量. SPH 模型中使用的范德华状态方程能够描述 SPH 粒子-粒子间的相互吸引力项, 反映系统的表面张力, 从而模拟气-液共存的系统. 在表面张力的作用下, 随着系统的逐渐演变, 每个粒子所对应的密度、压强及温度逐渐发生改变. 最终达到平衡状态. 在达到平衡状态的液滴中, 截取出一部分长方形扁平微液滴, 其初始形状长宽比为 5. 把这一扁平微液滴及其所对应的 SPH 粒子分布作为初始条件, 进一步进行 SPH 模拟. 因为微液滴的初始形状长宽比较大, 在表面张力的作用下, 这一初始扁平的微液滴形成

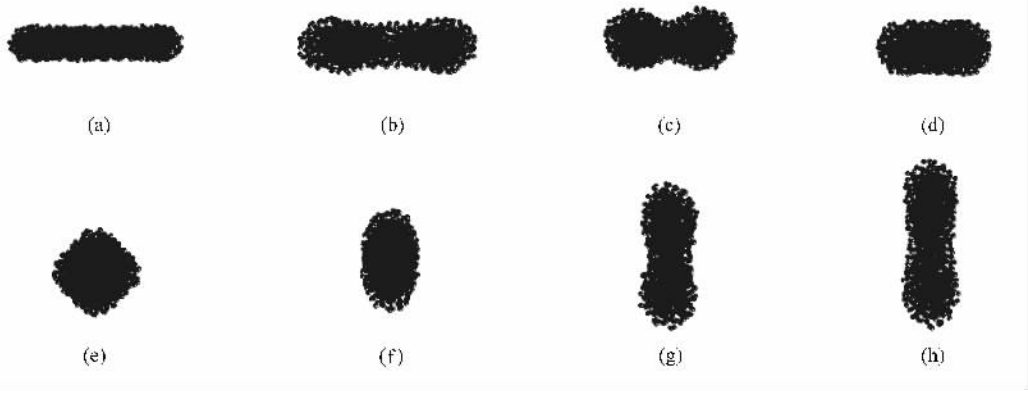


图 3 8 个典型时刻 DPD 模拟的所得到的微液滴形状

一个振幅较大的振荡过程.

图 4 显示了 8 个相同的时刻 SPH 模拟的所得到的微液滴形状.可以看出,虽然 DPD 模拟中所存在的随机力,导致所得到的微液滴形状没有 SPH 模拟的所得到的微液滴形状光滑,但 DPD 模拟的所得到的微液滴形状和我们应用 SPH 模拟所得到的微液滴形状基本一致.其他研究者也应用 SPH 模型对此

微液滴的振荡变形进行了模拟,得到了相同的微液滴振荡形态<sup>[38]</sup>. DPD 模拟的所得到的微液滴形状,也和哥伦比亚号航天飞机上所做实验中水珠微重力下历经大振幅振荡的形状完全符合<sup>[39]</sup>.这充分显示了利用新的含近距排斥远程吸引的保守力权函数的 DPD 方法在模拟气相-液相共存的微液滴动力学特性上的有效性.

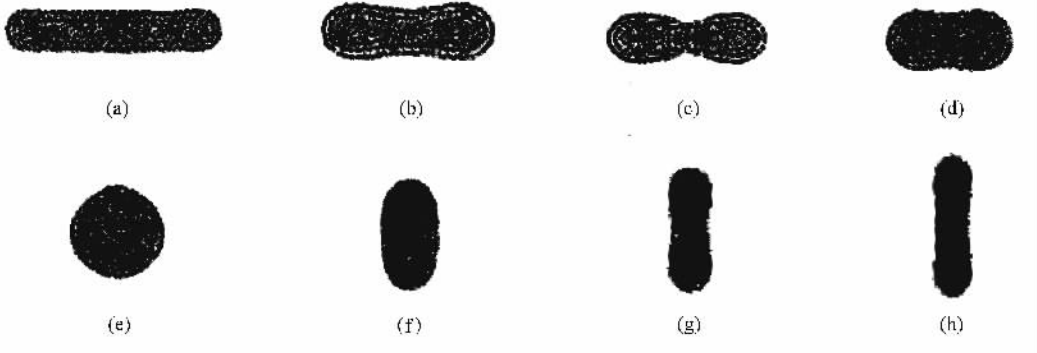


图 4 8 个相同时刻 SPH 模拟的所得到的微液滴形状

### 4. 结 论

传统的 DPD 方法应用纯排斥性保守力势函数,不能模拟诸如带有自由表面的流体流动,中空带气泡的液体,液滴动力学特性等等含气-液甚至气-液-固共存的多相系统.本文利用光滑粒子动力学中的光滑函数,构造出部分区域为正,部分区域为负的函数,以作为 DPD 方法中的保守力势函数.所得到的保守力势函数及相应的权函数具有近距排斥远程吸

引的性质,能够用来模拟传统 DPD 方法所不能模拟的气-液-固共存的多相系统.新的含近距排斥远程吸引的保守力权函数被用在 DPD 方法中以模拟微液滴的形成,以及液滴的大变形及引起的振荡等液滴动力学特性.计算结果表明,新的 DPD 方法能有效地模拟气相-液相共存的微液滴动力学特性.如果配合以较好的边界处理技术,新的 DPD 方法能够被推广应用到微纳米流体,生物流体以及环境流体等复杂的流动问题上.

- [ 1 ] Fan X J ,Phan-Thien N ,Chen S ,Wu X H ,Ng T Y 2006 *Phys. Fluids A* **18** 3102
- [ 2 ] De Gans B J ,Schubert U S 2003 *Macromol. Rapid Commun.* **24** 659
- [ 3 ] Huang H ,Meakin P ,Liu M B 2005 *Water Resour. Res.* **41** 4204
- [ 4 ] Karniadakis G E M ,Beskok A ,Gad-el-Hak M 2002 *Appl. Mech. Rev.* **55** 76
- [ 5 ] Cao L X ,Wang C Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 413 ( in Chinese )  
[ 曹利霞、王崇愚 2007 物理学报 **56** 413 ]
- [ 6 ] Cao B Y ,Chen M ,Guo Z Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5305 ( in Chinese )  
[ 曹炳阳、陈 民、过增元 2006 物理学报 **55** 5305 ]
- [ 7 ] Anderson J D 2002 *Computational Fluid Dynamics* ( New York : McGraw Hill ) p216
- [ 8 ] Chung T J 2002 *Computational Fluid Dynamics* ( Cambridge : Cambridge University Press ) p347
- [ 9 ] Harlow F H 1964 *Methods Comput. Phys.* **3** 319
- [ 10 ] Harlow F H ,Welch J E 1965 *Phys. Fluids* **8** 156
- [ 11 ] Gentry R A ,MRE D B J 1966 *J. Comput. Phys.* **1** 87
- [ 12 ] Hirt C W ,Nichols B D 1981 *J. Comput. Phys.* **39** 201
- [ 13 ] Osher S ,Sethian J A 1988 *J. Comput. Phys.* **79** 12
- [ 14 ] Sethian J A ,Smereka P 2003 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **35** 341
- [ 15 ] Ding H ,Spelt P D M 2007 *J. Fluid Mech.* **576** 287
- [ 16 ] Huang H ,Meakin P 2005 *GeoPhys. Res. Lett.* **32** 19
- [ 17 ] Lucy L B 1997 *Astron. J.* **82** 1013
- [ 18 ] Monaghan J J 1992 *Ann. Rev. Astron. Astrophys* **30** 543
- [ 19 ] Liu M B ,Liu G R ,Lam K Y 2003 *Shock Waves* **12** 509
- [ 20 ] Ladd A J C ,Verberg R 2001 *J. Stat. Phys.* **104** 1191
- [ 21 ] Lim C Y 2002 *Phys. Fluids A* **14** 2299
- [ 22 ] Alexander F J , Garcia A L 1997 *Comput. Phys.* **11** 588
- [ 23 ] Hoogerbrugge P J ,Koelman J 1992 *Europhys. Lett.* **19** 155
- [ 24 ] Espanol P 1995 *Phys. Rev. E : Stat. Phys. Plasmas. Fluids* **52** 1734
- [ 25 ] Groot R D 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 4423
- [ 26 ] Fan X ,Phan-Thien N 2002 *Phys. Fluids A* **15** 11
- [ 27 ] Groot R D 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 11265
- [ 28 ] Groot R D 2000 *Langmuir* **16** 7493
- [ 29 ] Dzwinel W ,Yuen D A ,Boryczko K J 2002 *Mol. Model* **8** 33
- [ 30 ] Tanaka H ,Araki T 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 1338
- [ 31 ] Schlijper A G ,Hoogerbrugge P J ,Manke C W 1995 *J. Rheol.* **39** 567
- [ 32 ] Venturoli M ,Smit B 1999 *Phys. Chem. Comm.* **2** 45
- [ 33 ] Chen S ,Phan-Thien N ,Fan X J ,Khoo B C 2004 *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **118** 65
- [ 34 ] Clark A T ,Lal M , Ruddock J N ,Warren P B 2000 *Langmuir* **16** 6342
- [ 35 ] Espanol P ,Warren P 1995 *Europhys. Lett.* **30** 191
- [ 36 ] Liu M B ,Liu G R ,Lam K Y 2003 *Comput. Appl. Math.* **155** 263
- [ 37 ] Liu G R ,Liu M B 2003 *Smoothed Particle Hydrodynamics : A Meshfree Particle Method* ( Singapore : World Scientific Publishing Co. Pte.Ltd. ) p58
- [ 38 ] Nugent S ,Posch H A 2000 *Phys. Rev. E* **62** 4968
- [ 39 ] Apfel R E ,Tian Y ,Jankovsky J ,Shi T ,Chen X 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1912

# Simulation of multiphase micro-drop dynamics using dissipative particle dynamics<sup>\*</sup>

Chang Jian-Zhong<sup>1)</sup> Liu Mou-Bin<sup>2)</sup> Liu Han-Tao<sup>1)†</sup>

<sup>1)</sup> *School of Mechatronics Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China*

<sup>2)</sup> *School of Chemical and Biomedical Engineering, Nanyang Technological University, 649798, Singapore*

(Received 25 October 2007; revised manuscript received 12 December 2007)

## Abstract

This paper presents a modified dissipative particle dynamics (DPD) method, which employs an interaction potential with short-range repulsion and long-distance attraction. The modified DPD method is capable of simulating liquids with free surfaces, the behavior of bubbly liquids, drop dynamics and other important multiphase fluid flow processes. The modified DPD method was used to investigate the formation of micro-drops, and the large-amplitude oscillations of an initially oblate liquid drop. The numerical results clearly demonstrate that the modified DPD method involving the interaction potential of short-range repulsion and long-distance attraction is capable of capturing the physics of multiphase micro-drop dynamics, and is of significant importance for investigating complex multiphase systems at micro-meso-scales.

**Keywords** : multiphase flow, micro-drop dynamics, dissipative particle dynamics, conservative interaction potential

**PACC** : 0340G, 4710, 4755K

<sup>\*</sup> Project supported by the Shanxi Provincial Foundation for Talent, China (Grant No.20060403JJ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : lht@nuc.edu.cn