

液滴在气固交界面变形移动问题的 光滑粒子流体动力学模拟*

强洪夫 刘开[†] 陈福振

(第二炮兵工程大学 601 室, 西安 710025)

(2012 年 6 月 5 日收到; 2012 年 6 月 26 日收到修改稿)

为准确模拟液滴在气固交界面变形移动问题, 对基于连续表面张力模型的表面张力光滑粒子流体动力学方法进行了改进. 改进方法采用新的边界处理方式和界面法向修正方法, 即将固体边界虚粒子色函数值根据液面的位置进行相应设定以保证气-液-固三相交界处流体粒子的界面法向沿接触线法线方向, 引入 Brackbill 提出的壁面附着力边界条件处理方法, 对气-液-固三相交界处的流体粒子及部分固体边界虚粒子的界面法向进行修正, 修正前后保持法向模值不变, 得到了含壁面附着力边界条件的表面张力算法. 模拟了受壁面附着力影响的水槽中液面的变化过程、液滴润湿壁面过程和剪切气流驱动液滴在固体表面变形脱落过程, 并与流体体积函数方法进行了对比. 结果表明, 该方法在处理壁面附着力问题时精度较高, 稳定性较好, 适合处理工程中液滴在气固交界面变形移动问题.

关键词: 光滑粒子流体动力学, 表面张力算法, 壁面附着力, 接触角

PACS: 47.11.-j, 68.08.-p, 47.61.Jd

1 引言

液滴作为一种常见的物质广泛存在于自然界和各种工程应用中. 对于液滴在气-固交界面的变形和移动问题, 鉴于其重要的应用价值, 一直以来都是人们关注的热点. 如酒杯壁上会出现小圈液滴粘附于酒杯壁上, 然后下滑返回酒中, 形成一条尾迹线^[1]; 倾斜表面上的液滴发生向上的运动, 与重力相悖而行^[2]; 液滴润湿壁面并与壁面之间形成一定的接触角, 并且不同的液体及不同的表面粗糙程度会形成不同的接触角等等. 这些现象的形成都与液体一个重要的性质息息相关, 即液体的表面张力.

对于涉及液体在气-固交界面变形移动问题的表面张力算法, 国内外学者进行了许多研究. 在网格法中, Brackbill 等^[3]提出了连续表面张力 (continuum surface force, 简记为 CSF) 模型, 将单元表面张力转化为单元体积力进行计算, 提出壁面附着力

边界条件处理方法并进行了一系列算例验证. Liu 等^[4]提出一种网格法与粒子法混合的方法, 结合壁面附着力边界条件处理方法, 模拟了不同接触角度液滴与壁面的润湿情况. 王飞和何枫^[5]利用水平集法 (level set) 计算了微管道两种液体的界面状态, 模拟了平板上的微液滴在不同电势作用下处于不同的润湿形态. Liu 等^[6]利用耗散粒子动力学^[7]方法 (dissipative particle dynamics, 简记为 DPD) 对表面张力作用下两平板间多相流动的润湿行为进行了数值模拟. 张明焜等^[8]也利用 DPD 对带凹槽的微通道中的液滴运动进行了数值模拟. 在光滑粒子流体动力学 (smoothed particle hydrodynamics, 简记为 SPH) 方法中, Fang 等^[9]和 Bao 等^[10]运用 Morris^[11]的方法分别对表面张力作用下方形液滴的自然变化过程和液滴对金属表面的喷溅固化与溃坝问题进行了模拟研究, 但未对液体在气-固交界面表面张力计算进行修正, 不能很好模拟液体对壁面的润湿效果. Liu 等^[12,13]借鉴 Brackbill 等

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 973-61338) 和第二炮兵工程学院创新性探索研究项目 (批准号: EPXY0806) 资助的课题.

[†] E-mail: liukai_epgc@126.com

的壁面附着力边界条件处理方法, 利用含表面张力模型的 SPH 多相流方法对密封剂密封充型的微管流动过程进行了数值模拟, 获得的液体流动前沿速度与理论解十分符合, 但是未获得液面的实际变化过程. 上述 SPH 算法存在的主要问题是未能说明在气-固交界面处流体粒子界面法向的计算过程、固体边界虚粒子的处理方式, 不能很好地将壁面附着力边界条件处理方法与基于 CSF 模型的表面张力 SPH 方法有机结合, 没有模拟典型的、具有说服力的验证算例.

本文从强洪夫等^[14,15]提出的修正表面张力算法的 SPH 方法出发, 采用新的边界处理方式和法向修正方法进行改进, 得到了含壁面附着力边界条件的表面张力算法. 采用 Monaghan 提出的人工应力^[16]方法消除粒子的非物理聚集, 解决计算中出现的拉伸不稳定问题. 利用本文方法对水槽模型中受壁面附着力影响的水面的变化过程进行了数值模拟, 并与流体体积函数 (volume of fluid, 简记为 VOF) 方法进行对比分析, 验证了该方法的正确性. 最后, 通过模拟液滴对壁面的润湿过程和剪切气流驱动液滴在固体表面变形脱落过程, 对本文的方法在工程上的适用性进行了验证.

2 SPH 方法

2.1 控制方程组和状态方程

对于本文算例, 需考虑流体的粘性与表面张力作用, 流动过程看作弱可压缩流动, 不考虑热传导, 采用 Lagrangian 方程组作为其控制方程组, 形式如下:

$$\begin{cases} \frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \\ \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}_s, \\ \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}, \end{cases} \quad (1)$$

式中, ρ , \mathbf{v} , P 和 \mathbf{f}_s 分别表示流体的密度、速度、压力和表面张力, ν 为动力粘度系数, t 为时间, $\nu \nabla^2 \mathbf{v}$ 为粘性项, d/dt 表示物质导数.

为有效计算方程 (1) 中的压力项 P , 引入弱可压缩状态方程^[17]

$$P = P_0 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right], \quad (2)$$

式中, 参数 P_0 为参考压强, γ 是常数, 当流体为液体

时一般取 $\gamma = 7$, γ 和 P_0 共同用于控制计算中流体密度在其常态密度附近的震荡幅度 (一般要求控制在 1% 左右). 实际计算中需要对 P_0 选取适当值, 使水流弱可压缩近似的声速 c 为流场中最大流速 10 倍以上值, 以保证模拟流场的不可压缩性. 在此可通过 $P_0 = 100\rho_0 v_{\max}^2/\gamma$ 获得, 其中 ρ_0 为液体的初始密度, v_{\max} 为流体的最大速度.

2.2 多相粘性流 SPH 离散方程组

针对本文中含密度差的情况, 传统 SPH 方法在间断面处计算不稳定, 本文采用 Ott 和 Schnetter^[18]提出的修正 SPH 方程组; 在计算粘性时, 由于 SPH 二阶导数在计算时精度不高, 易出现计算不稳定, 造成粒子秩序较差, 因此本文采用 Morris 等^[19]模拟低雷诺数不可压缩流动问题应用的有限差分法与 SPH 一阶导数相结合的方法, 此方法鲁棒性和精确性要更好一些; 为有效解决计算中出现的拉伸不稳定问题, 采用 Monaghan 提出的人工应力的方法消除粒子的非物理聚集. 由此, 多相粘性流 SPH 离散方程组表达式如下:

$$\begin{cases} \frac{d\rho_i}{dt} = m_i \sum_j \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}, \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left(\frac{P_i + P_j}{\rho_i \rho_j} + f_{ij}^n R_{ij} \right) \nabla_i W_{ij} \\ \quad + \sum_j^N m_j \frac{\mu_i + \mu_j}{\rho_i \rho_j} \mathbf{v}_{ij} \left(\frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \right) + \mathbf{f}_s, \\ \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \end{cases} \quad (3)$$

式中, i, j 表示粒子编码, m_j, ρ_j 分别表示粒子 j 的质量和密度, $\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i$ 分别表示粒子 i 的位置、速度矢量, $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, $W_{ij} = W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h)$ 为核函数, 本文选用三次样条核函数, $\nabla_i W_{ij} = \partial W_{ij}/\partial \mathbf{x}_i$ 表示核函数对粒子 i 的偏导数, h 是定义核函数影响区域的光滑长度.

$f_{ij}^n R_{ij}$ 为人工应力项^[16,20], 其基本思想是在两相近的粒子间施加一个短程排斥力, 以避免其过于靠近甚至聚集. 其中, $f_{ij} = W(r_{ij})/W(\Delta p)$, r_{ij} 为粒子 i 和 j 的距离, Δp 是初始粒子间距, $n > 0$. 在 SPH 计算中, 比率 $h/\Delta p$ 是常数, 因此 $W(\Delta p)$ 也是常量. 在实际中, h 取决于密度, 局部粒子间隔是对 h 和 $h/\Delta p$ 的平均估计求得的.

$$R_{ij} = R_i + R_j, \quad (4)$$

其中, R_i, R_j 由散射方程求出. 在本文中仅对静水

压力进行修正便可达到要求, 即当压力 $P_i < 0$ 时,

$$R_i = -\varepsilon_1 \frac{P_i}{\rho_i^2}, \quad (5)$$

否则,

$$R_i = \varepsilon_2 \frac{P_i}{\rho_i^2}, \quad (6)$$

同理可得 R_j . 通常, ε_1 取值 0.2, 由于压力为正也会造成粒子聚集, 因此本文中 ε_2 同样取值为 0.2.

3 表面张力修正算法

3.1 CSPM 修正的表面张力算法

CSF 表面张力模型是由 Brackbill 等 [3] 提出的, 通过给不同的流体赋以不同的色值 (color) 来区分界面处的流体的不同属性, 利用色函数 (color function) 得到表面法向及曲率, 并将单元表面张力转化为单元体积力进行计算, 之间保持转化的动量守恒. CSF 模型在网格方法中得到了广泛的应用, 是 Fluent 等商用软件的表面张力核心求解方法.

Morris 根据 CSF 模型思想, 提出的法向及曲率的计算过程如下:

定位表面

$$\bar{c}_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} c_j W_{ij}, \quad (7)$$

求解法向

$$n_{\alpha i} = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\bar{c}_j - \bar{c}_i) W_{ij, \alpha}, \quad (8)$$

求解曲率

$$\hat{n}_{\gamma, \alpha i} = \sum_{j=1}^N \min(N_a, N_b) (\hat{n}_{\gamma j} - \hat{n}_{\gamma i}) W_{ij, \alpha} \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (9)$$

$$k_i = -(\nabla \cdot \hat{n})_i = -\left(\frac{\partial \hat{n}_{xi}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{n}_{yi}}{\partial y} \right) = \hat{n}_{x, xi} + \hat{n}_{y, yi}, \quad (10)$$

式中, c_j 为色标, 在定义的流体区域内初始设为 1, 在流体区域外时初始设为 0, α, β, γ 取值为 1 或 2, 表示坐标方向. N_a, N_b 取值为 0 或 1, 用以判别远离边界的粒子法向是否对曲率计算产生影响. \hat{n} 表示单位化的法向, $n_{\alpha i}$ 表示粒子 i 在 α 方向的法向分量, $\hat{n}_{\gamma, \alpha i}$ 表示 \hat{n}_{γ} 在 α 方向的分量.

Morris 方法在计算尖角及粒子分布不均等部位时存在较大的误差, 为解决这一问题, 强洪夫

等 [14,15] 利用 CSPM 算法对 (8) 和 (9) 式进行了修正, 得到新的法向和曲率分量计算式分别为

$$n_{\alpha i} = \left[\sum_{j=1}^N (\bar{c}_j - \bar{c}_i) W_{ij, \beta} \frac{m_j}{\rho_j} \right] \times \left[\sum_{j=1}^N (x_j^\alpha - x_i^\alpha) W_{ij, \beta} \frac{m_j}{\rho_j} \right]^{-1}, \quad (11)$$

$$\hat{n}_{\gamma, \alpha i} = \left[\sum_{j=1}^N (\hat{n}_{\gamma j} - \hat{n}_{\gamma i}) W_{ij, \beta} \frac{m_j}{\rho_j} \right] \times \left[\sum_{j=1}^N (x_j^\alpha - x_i^\alpha) W_{ij, \beta} \frac{m_j}{\rho_j} \right]^{-1}. \quad (12)$$

将 (12) 式代入曲率计算公式

$$k_i = -(\nabla \cdot \hat{n})_i = -\left(\frac{\partial \hat{n}_{xi}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{n}_{yi}}{\partial y} \right) = \hat{n}_{x, xi} + \hat{n}_{y, yi}, \quad (13)$$

最终得到单位质量表面张力公式为

$$(f_s)_i = -\frac{\sigma}{\rho_i} (\nabla \cdot \hat{n})_i \hat{n}_i, \quad (14)$$

式中, f_s 为单位质量表面张力, σ 为界面张力系数, 当算例模型为两相流体时, $\rho = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)$, ρ_i, ρ_j 分别为界面两边流体的密度.

3.2 壁面附着力边界条件

通过文献 [3] 可知, 在网格法中, 根据 CSF 表面张力模型计算的处于气固交界面的流体粒子界面法向沿流体与壁面形成的接触线的法线方向, 而理论上界面法向应沿气液交界面的法线方向. 因此 Brackbill 提出了壁面附着力边界条件处理方法对这些粒子的界面法向进行修正, 即利用液体与壁面形成的接触角 θ 来修正法向, 修正示意图如图 1. 修正公式为

$$\hat{n} = \hat{n}_w \cos \theta + \hat{n}_t \sin \theta, \quad (15)$$

式中 \hat{n} 为修正后单位化法向, 始终沿液体与壁面接触达到稳定状态时气液交界面的法线方向, \hat{n}_t 为在边界平面内并沿接触线法线方向的单位化法向, 利用文献 [3] 中公式 $\hat{n}(\mathbf{x}) = \nabla \bar{c}(\mathbf{x})$ 求解, \hat{n}_w 为垂直于 \hat{n}_t 并指向壁面内的单位化法向. 当接触线处于运动状态时, 接触角为动态接触角, 但是对于速度比较小的微管流动, 动态的接触角可以认为恒定不变, 即等于初始静态接触角. 当固定边界为平面

时, \hat{n}_t 始终在平面内并与壁面相切, \hat{n}_w 始终垂直于壁面.

对于基于 CSF 模型的表面张力 SPH 方法, c 值在定义的流体区域内初始设为 1, 在流体区域外时初始设为 0, 边界虚粒子 c 值统一设为 0. 这种处理方法计算处于气-固交界面的流体粒子的 \hat{n}_t 并不沿接触线法线方向, 如图 2 粒子 A 所示, 此时直接利用 (15) 式进行修正是错误的. 所以需要结合色函数对边界虚粒子进行特殊处理, 保证 \hat{n}_t 沿接触线法线方向, 之后才能采用 (15) 式进行修正. 本文处理方法: 主流体 c 值设为 1, 与主流体接触长度范围内的边界虚粒子 c 值设为 1, 如图 2 所示 a—b 的范围, 其余设为 0, 在整个计算过程中始终采用此处理方法, 这样可以保证 \hat{n}_t 始终沿接触线法线方向. 最终, SPH 方法中单位化法向修正示意图如图 2 粒子 B 所示. 由于本文算例中的空气用液体代替, 因此在靠近固体边界的两种液体交界面处的流体粒子的单位化法向都需要用上述方法修正.

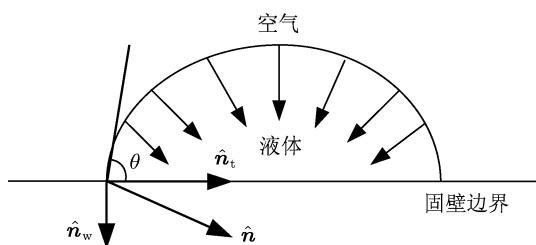


图 1 网格法中单位化法向修正示意图

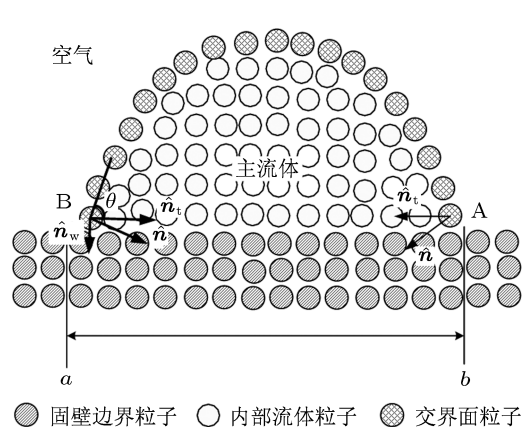


图 2 SPH 方法中单位化法向修正示意图

此外, 由于固体边界虚粒子参与流体粒子界面法向及曲率的计算, 所以也需要利用 (15) 式对部分固体边界虚粒子的界面法向进行修正, 范围为修正流体粒子宽度范围内的所有固体边界虚粒子. 得到

修正后的单位化法向 \mathbf{n} 后, 利用 (12) 和 (13) 式即可求得修正后的曲率.

上述方法只得到了修正后的曲率值, 在表面张力的计算中, 仅得到曲率值是不够的, 还需要计算界面法向值. 然而之前计算的界面法向与修正后的单位化法向是不一致的, 所以也需要对界面法向进行修正. 本文采用的方法为: 对于采用修正公式的粒子, 利用 (11) 式计算界面法向模值并带入 (15) 式即可得出各个方向上修正后的界面法向分量. 最后将修正后的界面法向值及曲率值带入 (14) 式才可求得修正后的表面张力.

3.3 时间积分

本文采用 leap-frog^[21] 格式的时间积分方法, 该方法对时间是二阶精度, 具有存储量低、计算效率高的特点. 公式为

$$\phi_i(t + \delta t/2) = \phi_i(t - \delta t/2) + \phi_i(t)\delta t, \quad (16)$$

$$\mathbf{x}_i(t + \delta t) = \mathbf{x}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \delta t/2)\delta t, \quad (17)$$

式中, ϕ 可表示密度 ρ 或速度 \mathbf{v} , \mathbf{x}_i 是粒子 i 的位置坐标.

为了保持数值积分的稳定性, 在每一个时间步, 根据不同的准则对时间步长加以限制是必要的. Monaghan^[21] 给出了分别考虑具有粘性耗散和外力作用的时间步长表达式, 同时 Brackbill 等^[3] 和 Morris 等^[19] 分别提出了基于表面张力与物理粘性的时间步长, 表达式为

$$\Delta t_f = \min \left(\frac{h_i}{f_i} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (18)$$

$$\Delta t = \min \left(0.25 \left(\frac{\rho h^3}{2\pi\sigma} \right)^{1/2} \right), \quad (19)$$

$$\Delta t = \min \left(0.125 \frac{\rho h^2}{\mu} \right), \quad (20)$$

式中, f_i 是作用在粒子 i 上的单位质量上力的大小 (即加速度), σ 为流体的表面张力系数, μ 为流体的动力粘度系数, 最终取 (18), (19), (20) 三式中最小值作为最终的时间步长.

4 算例验证

4.1 水槽测试算例

为了验证算法的正确性, 我们采用文献 [3] 中的一个典型算例 —— 水槽算例. 本算例假设一个

矩形水槽, 其中的水在表面张力的作用下要与水槽壁面形成一个不同于静止接触角 90° 的特殊的接触角度 θ . 由于 SPH 方法计算气-液大密度差两相流问题还存在一定困难, 因此水面上层空气用油代替, 此处理方法完全可以验证算法的正确性, 物质参数如表 1 所示. 本算例采用的模型如图 3 所示: 最外层为固体壁面边界, 尺寸为 $5\text{ mm} \times 2.5\text{ mm}$, 边界层的厚度为 0.375 mm , 粒子数为 1584 个; 水溶液粒子数与油溶液粒子数相同, 为 1600 个. 假设 $\theta = 30^\circ$, 图 4 为初始时刻修正

后界面法向及表面张力方向示意图, 只显示了图 3 圆圈所示的局部. 图 5 为应用 VOF 方法与本文方法模拟过程的几个典型时刻对比, 前 4 幅图为本文方法, 后 4 幅图为 VOF 方法; 图 6 为不同的接触角度下液面上升高度随时间变化曲线, 高度值为取点时刻上升高度最高的三个油粒子 y 坐标值的平均值; 图 7 为应用 VOF 方法与本文方法模拟不同的接触角度最终达到稳定状态时液面上升高度对比. 计算中不涉及物质的重力和粘性力.

表 1 模拟中物质参数列表

物质	密度/ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	界面张力系数/ $\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$	粘度系数/ $\text{Ns}\cdot\text{m}^{-2}$	粒子间距/ m	h/m	H/m
油	819.0	0.050475	3.16×10^{-3}	6.25×10^{-5}	9.375×10^{-5}	1.875×10^{-4}
水	1000	0.050475	1.002×10^{-3}	6.25×10^{-5}	9.375×10^{-5}	1.875×10^{-4}

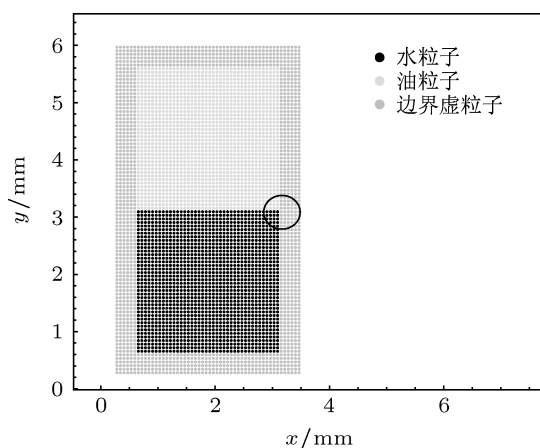


图 3 物理模型及初始粒子分布

从图 5 看出, 靠近两侧边界的两液体交界面处粒子利用 (15) 式修正界面法向以后, 表面张力的大小及方向随之改变, 导致溶液受力不平衡并沿壁面上升. 随着时间的推移, 液面与竖直壁面形成一定接触角度并不断减小, 直到与壁面的接触角度满足 θ 时达到稳定状态, 液面不再变化; 从图 5 比较看出, VOF 方法与本文方法计算结果符合. 从图 6 看出: 1) 液面上升高度随时间近似呈指数增长方式, 达到接触角度以后逐渐趋于平稳, 除少许震荡以外, 基本不再变化; 2) 随着接触角度的增加, 最终达到稳定状态时液面上升高度逐渐减小; 3) 在同一时刻, 角度越小, 液面上升越高; 4) 接触角度越小, 达到稳定状态所需时间越长. 从图 7 看出, 本文方法与 VOF 方法相比, 随着接触角度的减小, 计算结果差距有所增加, 但是最大相对偏差只有 0.56%, 这充

分验证了本文方法的正确性.

4.2 液滴与壁面润湿算例

当液滴静止在均质的水平固体表面上时, 假设它与表面的接触面为圆形, 液滴与固体表面的接触线为曲线. 这样, 固体、液体和气体三种物质状态共存, 液滴与壁面形成接触角度 θ . 液滴与固体表面的接触线通过表面张力的作用将液滴的表面积减

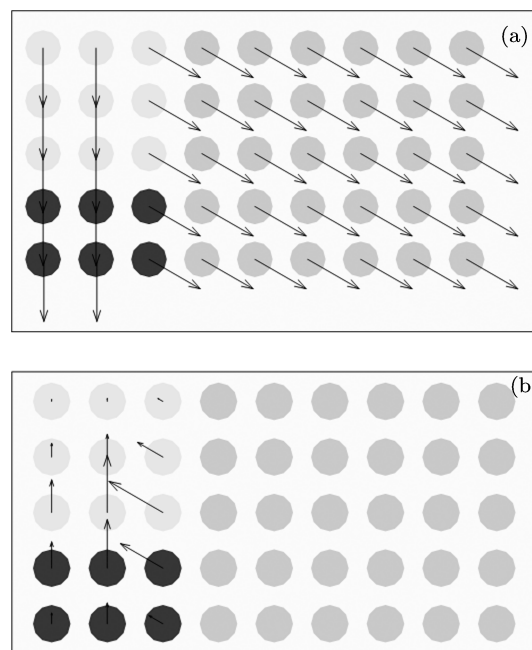


图 4 初始时刻修正后界面法向 (a) 及表面张力方向 (b) 示意图

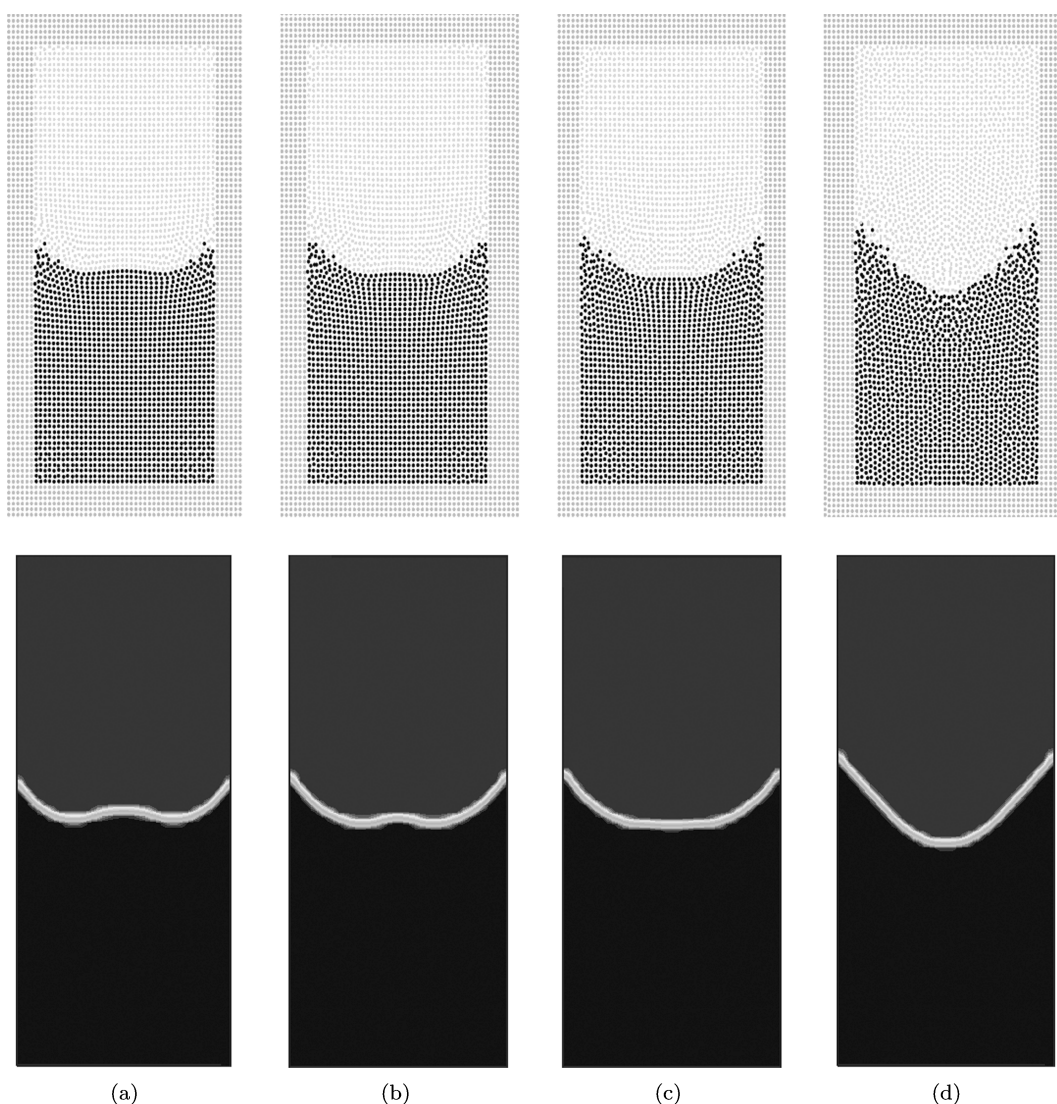


图5 $\theta = 30^\circ$ 时液面变化过程二维数值模拟 (a) $t = 1.8$ ms; (b) $t = 2.6$ ms; (c) $t = 3.0$ ms; (d) $t = 5.0$ ms

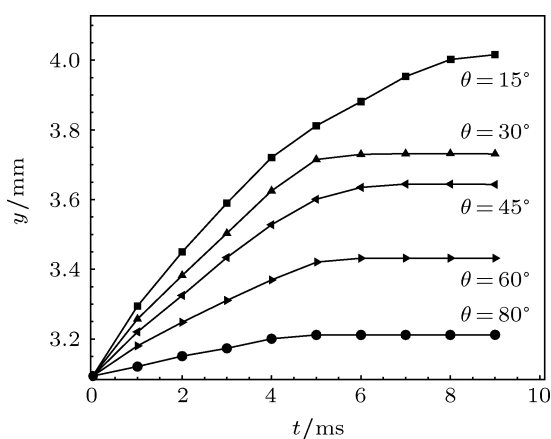


图6 不同接触角度下液面随时间变化过程

少到最小, 最终达到稳定状态. 通过平衡其表面张

力可以得到杨氏关系式 [22]:

$$\cos \theta = \frac{\gamma_{sv} - \gamma_{sl}}{\gamma_{lv}}, \quad (21)$$

式中, s 代表固体 (solid), v 代表气体 (vapor), l 代表液体 (liquid). γ_{lv} 为液滴在空气中的表面张力, γ_{sv} 和 γ_{sl} 分别为气-固和液-固交界面的表面张力. 将气体换为液体亦如此. 水溶液中油滴润湿壁面的示意图如图 8, 当 $\theta < 90^\circ$ 时, 壁面被油滴润湿; 当 $\theta \geq 90^\circ$ 时, 壁面未被油滴润湿.

因此, 本算例可以很好地验证本文表面张力修正算法的正确性及适用性. 计算采用的模型如图 9 所示. 最外层为固体壁面边界, 尺寸为 $0.515 \text{ mm} \times 0.255 \text{ mm}$, 边界层的厚度为 0.025 mm , 粒子数为 1620 个; 单个油滴半径

为 0.06 mm, 粒子数为 424 个; 水溶液粒子数为 4676 个, 粒子间距为 0.005 mm, 光滑长度 $h = 0.0075$ mm, $H = 0.015$ mm, 所采用的物质其他参数同表 1. 假设接触角度为 60° , 应用本文方法与 VOF 方法模拟过程对比见图 10, 速度场对比见图 11. 图 12 是不同的接触角度下液滴与壁面接触长度随时间变化曲线对比. 图 13 为不同接触角度下达到稳定状态时液滴与壁面接触长度的理论解、VOF 解及 SPH 解的对比, 其中理论解是假设最终稳定时刻液滴形状左右对称, 液面呈圆弧形, 面积与初始时刻面积相等而得到的. 计算中不涉及物质的重力.

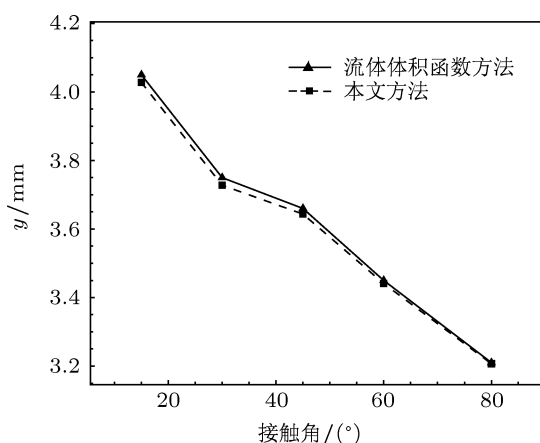


图 7 VOF 方法与本文方法模拟不同接触角度最终达到稳定状态时液面上升高度对比

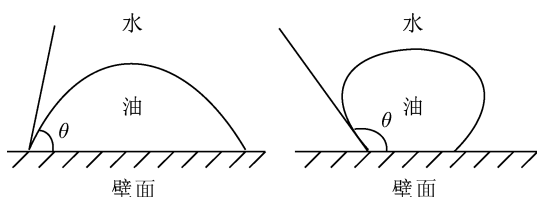


图 8 水溶液中油滴润湿壁面示意图

从图 10 中看出, 由于初始液滴并不圆, 在表面张力的作用下, 液滴与水溶液接触部分首先变圆; 同时, 处于水溶液和壁面交界处的流体粒子由于进行了界面法向修正, 表面张力指向两侧, 方向向上并与水平方向夹角为 30° , 从而导致液滴逐渐与壁面接触并向两侧扩展, 如 $t = 0.03$ ms 所示; 此后, 在此表面张力与内力的共同作用下, 液滴与壁面接触面积越来越大, 液滴高度也随之降低, 如 $t = 0.08$ ms 和 $t = 0.14$ ms 所示; 最终, 当接触角度达到 60° 后, 液滴与壁面接触面积不再增加, 液滴高度降至最低, 表面积减至最小, 达到稳定状态,

如 $t = 0.265$ ms 所示. 通过与 VOF 方法对比发现: 达到相同的状态本文方法所需时间稍长; 对于液滴的形状、最终稳定状态液滴与壁面的接触长度等特征量, 两种方法计算结果有所差别, 主要可能是由于模型的差距造成的, VOF 方法的液滴模型是规则的圆形, 而本文方法的液滴模型初始并不圆, 液滴与壁面接触也比较少, 只有几个粒子. 但是从整个模拟过程及速度场对比看, 两种方法模拟结果基本符合. 从图 12 比较结果看出: 随着时间的推移, 液滴与壁面接触长度逐渐增加, 当达到接触角度以后不再增加, 趋于平稳; 随着接触角的增加, 最终达到稳定状态液滴与壁面接触线长度逐渐减小; 同一时刻, 接触角度越小, 接触长度越大; 当 $\theta < 90^\circ$ 时, 接触角度越小, 达到稳定状态所需时间越长; $\theta \geq 90^\circ$ 时, 接触角度越大, 达到稳定状态所需时间越长. 从图 13 的对比看出, 当 $\theta \geq 90^\circ$ 时, 本文方法相比 VOF 方法更接近理论解; 当 $\theta < 90^\circ$ 时, 本文方法和 VOF 方法结果都与理论解差距较大, VOF 方法计算结果偏大, 本文方法计算结果偏小. 主要原因有以下两点: 1) $\theta \geq 90^\circ$ 时用上述方法求解理论解与实际物理过程非常接近, 结果比较准确; 但是 $\theta < 90^\circ$ 时, 此方法假设的物理模型与液滴实际形状存在一定差距, 导致计算结果不准确; 2) 应用本文方法时, 尽管液滴与壁面达到了预定接触角度, 但是表面张力算法会使液滴上部尽量保持圆形, 导致液滴与壁面的接触长度值偏小; 应用 VOF 方法时, 液滴与壁面接触线不断伸长, 液滴逐渐由圆形变为长弧形, 接触角度较小时顶部甚至变平, 与实际物理现象不太相符, 最终导致液滴与壁面接触长度值偏大而接触角度比预定值偏小.

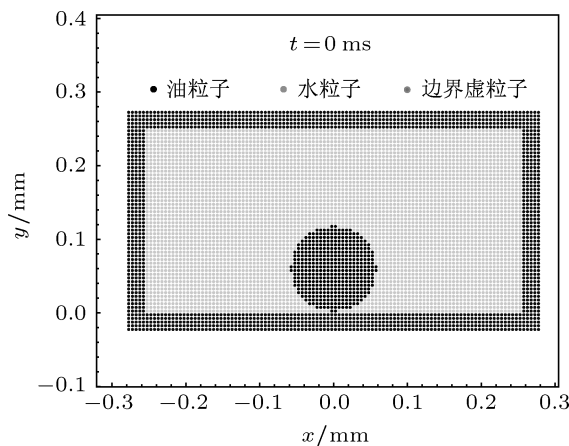


图 9 物理模型及初始粒子分布

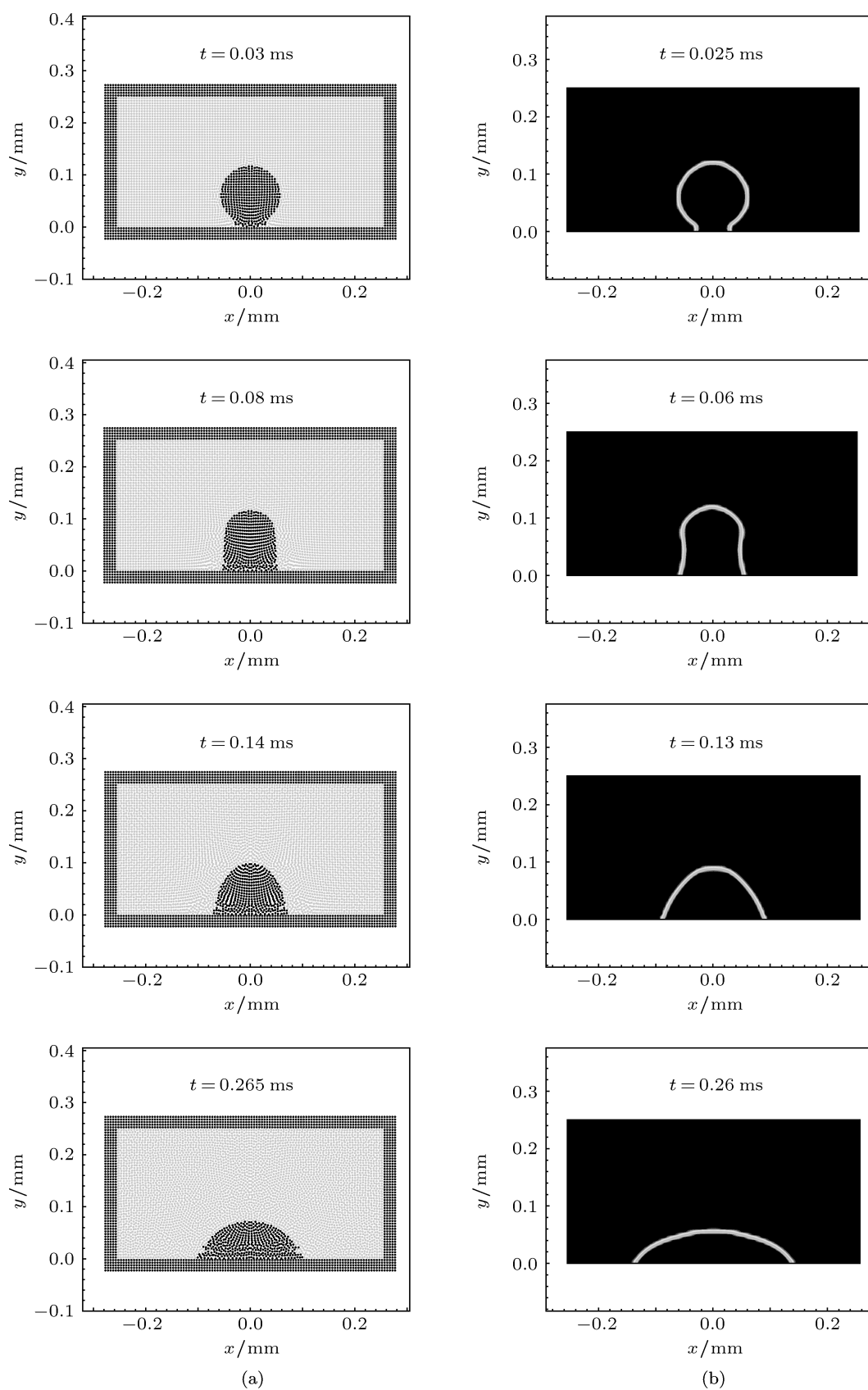


图 10 $\theta = 60^\circ$ 时水溶液中油滴润湿壁面过程二维数值模拟 (a) 本文方法; (b) VOF 方法

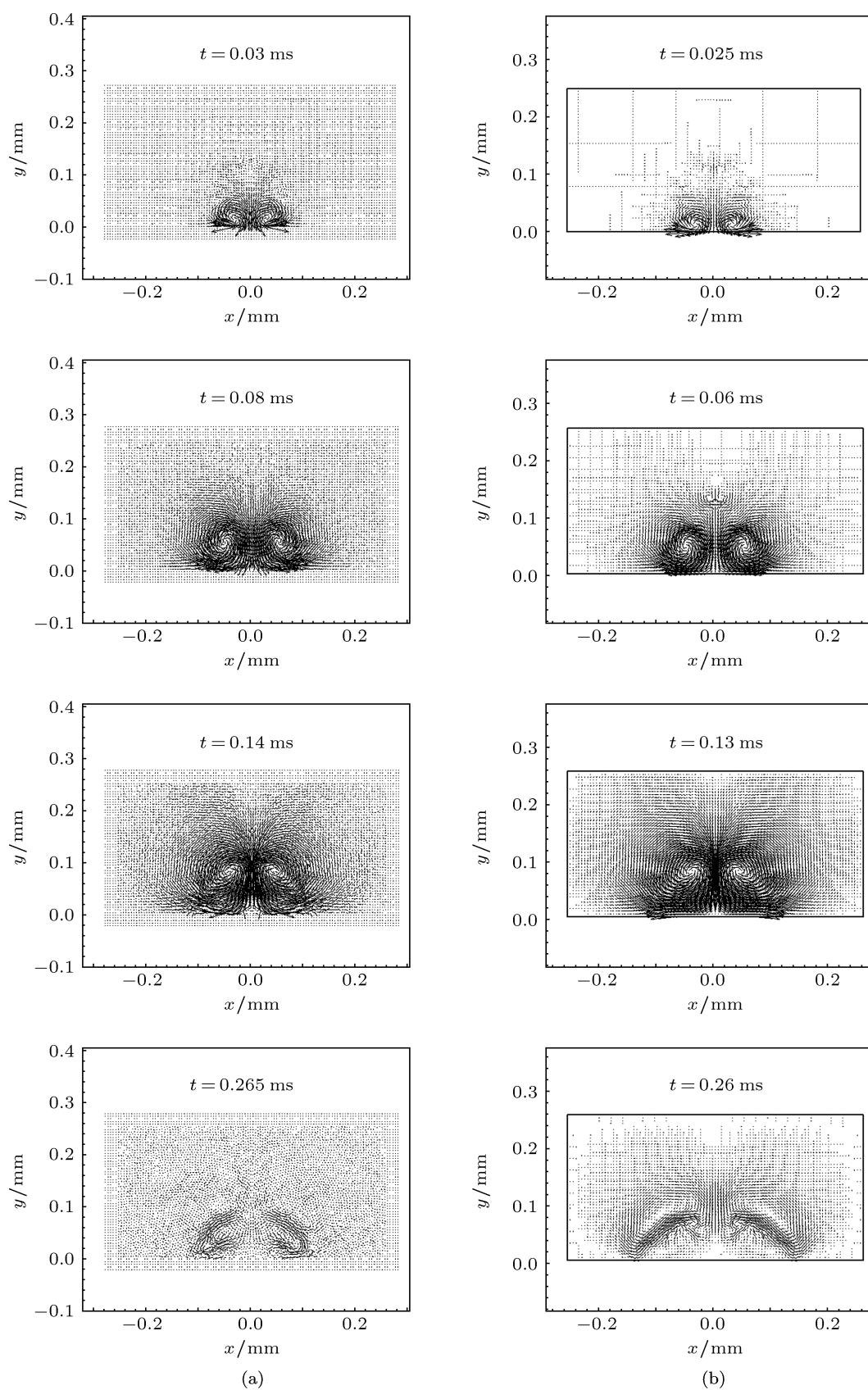


图 11 $\theta = 60^\circ$ 时水溶液中油滴润湿壁面过程二维数值模拟的速度场变化 (a) 本文方法; (b) VOF 方法

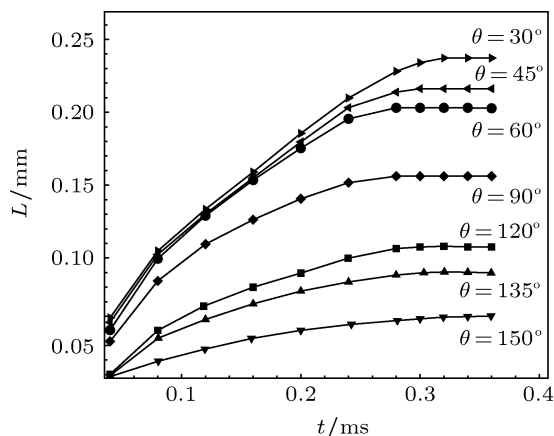


图 12 不同接触角度下液滴与壁面接触长度随时间变化曲线

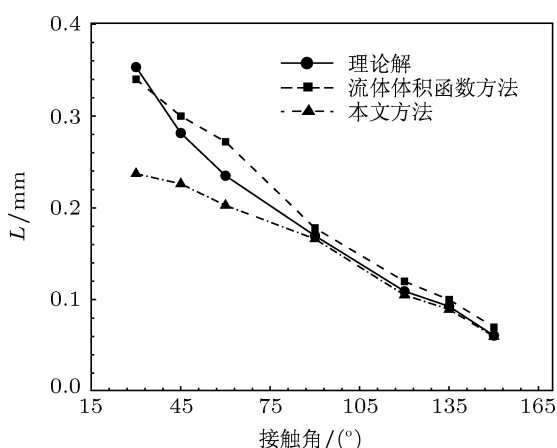


图 13 不同接触角度下达到稳定状态液滴与壁面接触长度的理论解、VOF解及SPH解对比

4.3 剪切气流驱动液滴在固体表面变形脱落算例

为检验本文方法在工程应用中的可行性,选取经常见到的现象——剪切气流驱动液滴在固体表面变形脱落^[23]作为本文的算例.不同的是,本算例中气体用水溶液代替,液滴为油溶液,如图14所

示.其中 θ_A 为前进接触角, θ_R 为后退接触角,一般由实验测得.两个角度之差 $\Delta\theta = \theta_A - \theta_R$ 称为接触角度滞后.当接触角度满足 $\theta_R < \theta < \theta_A$ 时,液滴与固体表面接触线形状保持不变.

对于本算例,研究的过程为:水溶液中圆形油滴首先在表面张力的作用下润湿壁面,达到稳定状态,如图10的 $t = 0.265$ ms时刻所示;后给水溶液粒子赋予一定速度,油滴在剪切流驱动下在固体表面变形,直到脱落,并不涉及脱落以后的运动情况.

本算例的模型与图9类似,不同之处为没有左、右及上层边界.本算例尺寸为 $1\text{ mm} \times 0.25\text{ mm}$,下层为固壁边界,边界层的厚度为 0.025 mm ,粒子数为1000个;固壁边界上层为水溶液和油溶液,单个油滴半径为 0.06 mm ,粒子数为424个;水溶液粒子数为9576个.粒子间距为 0.005 mm ,光滑长度 $h = 0.0075\text{ mm}$, $H = 0.015\text{ mm}$,所采用的物质其他参数同表1.剪切气流的速度按如下公式计算:

$$V_x = Dy(l - y), \quad (22)$$

式中, V_x 为剪切气流速度, D 为控制气流大小的参数,根据实际需要调整, y 为粒子 y 方向坐标值, l 为

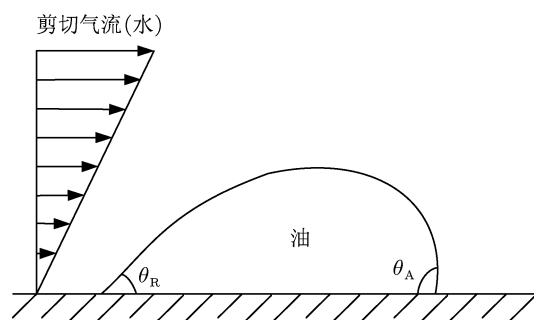


图 14 剪切气流驱动油滴在固体表面变形示意图

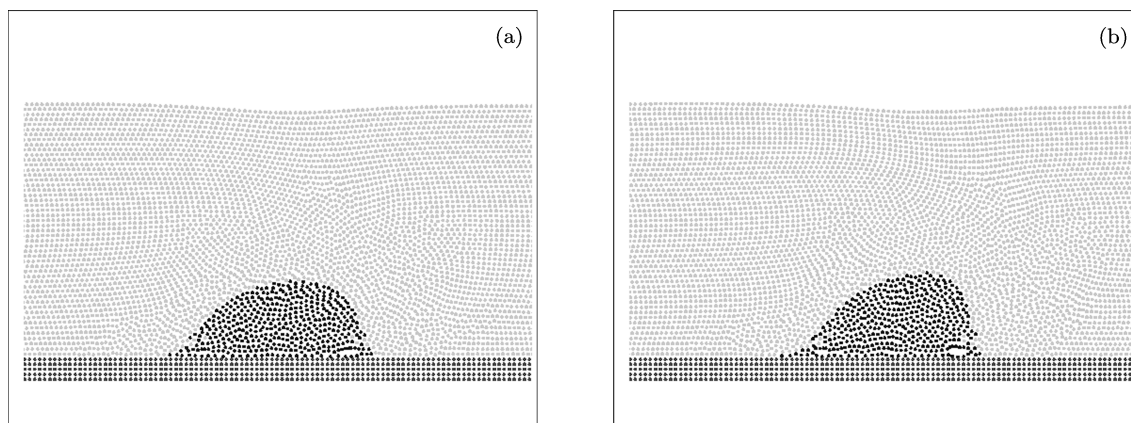


图 15 剪切气流驱动液滴在固体表面变形脱落过程二维数值模拟 (a) $t = 0.3\text{ ms}$; (b) $t = 0.34\text{ ms}$

流场宽度. 假设静止接触角度为 60° , 剪切气流最大速度为 1.32 m/s , 模拟过程如图 14 所示. 计算中不涉及物质的重力.

当液滴受到剪切气流产生的拖拽力时, 液滴会背部向里呈凹陷状并且顶部脊状突起, 前进接触角不断增大, 后退接触角不断减小, 如图 15(a); 随着剪切气流的不断作用, 当前进接触角或者后退接触角任何一个不满足 $\theta_R < \theta < \theta_A$ 时, 如图 15(b), 液滴会发生脱落. 当外力很小时, 液滴与固体表面接触面的形状很快又达到新的平衡, 接触线可能展示出非对称形状; 当外力足够大, 无论液滴的接触线如何变形都无法满足 $\theta_R < \theta < \theta_A$, 液滴无法达到平衡状态, 液滴就开始连续运动. 可见, 数值模拟的过程与实际物理过程十分符合.

5 结论

本文从强洪夫提出的修正 SPH 表面张力算法出发, 采用新的边界处理方式和法向修正方法进行改进, 即将边界虚粒子色函数值根据液面的位置进行相应设定以保证气-液-固三相交界处流体粒子的

界面法向沿接触线法线方向, 引入 Brackbill 提出的壁面附着力边界条件处理方法, 对气-液-固三相交界处的流体粒子及部分固壁边界虚粒子的界面法向进行修正, 修正前后保持法向模值不变, 得到了含壁面附着力边界条件的表面张力算法. 利用 VOF 方法与本文方法模拟了水槽算例中受壁面附着力影响的液面的变化过程, 对比了接触角度为 60° 时两种方法模拟过程的几个典型时刻和不同接触角度下达到稳定状态时液面上升高度, 两者结果基本符合, 验证了本文方法的正确性. 通过液滴润湿壁面的算例验证了本文方法的可行性, 本文方法很好地模拟了不同接触角度的润湿情况, 通过对不同接触角度下液滴与壁面接触长度随时间的变化进行对比分析, 并与 VOF 方法和理论解进行对比, 表明本文方法在处理壁面附着力问题时精度较高, 但是接触角度为锐角时计算结果还存在一定误差, 还需进一步改进和完善, 液滴润湿壁面的模型也需进一步研究. 最后通过剪切气流驱动液滴在固体表面变形脱落的算例验证了该方法在工程应用上的可行性, 表明本文方法适合处理工程中液滴在气-固交界面上的变形移动问题.

-
- [1] Tseng Y T, Tseng F G, Chen Y F, Cheng C C 2004 *Sensor. Actuat. A: Phys.* **114** 292
- [2] Daniel S, Sircar S, Gliem J, Chaudhury M K 2002 *Langmuir* **18** 3404
- [3] Brackbill J U, Kothe D B, Zemach C 1992 *J. Comput. Phys.* **100** 335
- [4] Liu J, Koshizuka S, Oka Y 2005 *J. Comput. Phys.* **202** 65
- [5] Wang F, He F 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1005 (in Chinese) [王飞, 何枫 2006 物理学报 **55** 1005]
- [6] Liu M B, Chang J Z, Liu H T, Su T X 2011 *Int. J. Comput. Met.* **8** 637
- [7] 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]
- [8] Zhang M K, Chen S, Shang Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **61** 034701 (in Chinese) [张明焜, 陈硕, 尚智 2010 物理学报 **61** 034701]
- [9] Fang H S, Bao K, Wei J A, Zhang H, Wu E H, Zheng L L 2009 *Numer. Heat. Tr. A: Appl.* **55** 124
- [10] Bao K, Zhang H, Zheng L L, Wu E H 2009 *Comput. Animat. Virt. W* **20** 311
- [11] Morris J P 2000 *Int. J. Numer. Methods Fluids* **33** 333
- [12] Liu M B, Liu G R, Lam K Y 2003 *Int. J. Comput. Eng. Sci.* **4** 405
- [13] Liu M B, Liu G R 2005 *J. Comput. Mech.* **35** 332
- [14] Qiang H F, Chen F Z, Gao W R 2011 *China J. Comput. Phys.* **28** 375 (in Chinese) [强洪夫, 陈福振, 高巍然 2011 计算物理 **28** 375]
- [15] Qiang H F, Chen F Z, Gao W R 2011 *Comput. Model. Eng.* **77** 239
- [16] Monaghan J J 2000 *J. Comput. Phys.* **159** 290
- [17] Liu G R, Liu M B 2003 *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Meshfree Particle Method* (Singapore: World Scientific) p132
- [18] Ott F, Schnetter E 2003 ArXiv: Physics/0303112v3 [physics.comp-ph]
- [19] Morris J P, Fox P J, Zhu Y 1997 *J. Comput. Phys.* **136** 214
- [20] Gray J P, Monaghan J J, Swift R P 2001 *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **190** 6641
- [21] Monaghan J J 1989 *J. Comput. Phys.* **82** 1
- [22] Cao X P, Jiang Y M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2202 (in Chinese) [曹晓平, 蒋亦民 2005 物理学报 **54** 2202]
- [23] Fan J, Hu C B, Zhang Y L, He G Q 2011 *J. Exp. Fluid. Mech.* **25** 5 (in Chinese) [范健, 胡春波, 张育林, 何国强 2011 实验流体力学 **25** 5]

Numerical implementation of deformation and motion of droplet at the interface between vapor and solid surface with smoothed particle hydrodynamics methodology*

Qiang Hong-Fu Liu Kai[†] Chen Fu-Zhen

(601 Staff Room, Xi'an Hi-Tech Institute, Xi'an 710025, China)

(Received 5 June 2012; revised manuscript received 26 June 2012)

Abstract

In order to simulate the deformation and motion of droplet at the interface between vapor and solid surface, the smoothed particle hydrodynamics method with continuum surface force model for surface tension is modified in this paper. A surface tension algorithm with boundary conditions of wall adhesion is derived using a new treatment of boundary conditions and a corrective algorithm of particle interface normal. The colours of virtual solid particles are set according to the position of fluid surface to assure that the interface normal of particles at the junction of vapor, fluid and solid phase is normal to the contact line. By introducing Brackbill's treatment of boundary conditions of wall adhesion, the interface normal between fluid particles and some virtual solid particles at the junction of vapor, fluid and solid phase is corrected. However the module of the interface normal is kept constant. Finally, based on the new algorithm, the changing process of fluid surface in a tank, wetting process of a droplet and distortion process of a droplet on solid surface driven by shear flow are simulated. The results are compared with those obtained by volume of fluid method, showing that the new method has higher accuracy and better stability, and it is adapted to deal with the engineering problems such as the deformation and motion of droplets at the interface between vapor and solid surface.

Keywords: smoothed particle hydrodynamics, surface tension method, wall adhesion, contact angle

PACS: 47.11.-j, 68.08.-p, 47.61.Jd

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 973-61338) and the Innovative Research Project of the Second Artillery Engineering University, China (Grant No. EPXY0806).

[†] E-mail: liukai_epgc@126.com