

基于范德瓦尔斯表面张力模式液滴撞击疏水壁面过程的研究

白玲 李大鸣 李彦卿 王志超 李杨杨

Study on the droplet impact on hydrophobic surface in terms of van der Waals surface tension model

Bai Ling Li Da-Ming Li Yan-Qing Wang Zhi-Chao Li Yang-Yang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 114701 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.114701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.114701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I11>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种新型光滑粒子动力学固壁边界施加模型

[A new boundary treatment method in smoothed particle hydrodynamics](#)

物理学报.2015, 64(9): 094701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.094701>

一类新型激波捕捉格式的耗散性与稳定性分析

[On the accuracy and robustness of a new flux splitting method](#)

物理学报.2015, 64(2): 024702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024702>

基于弱可压与不可压光滑粒子动力学方法的封闭方腔自然对流数值模拟及算法对比

[Comparisons among weakly-compressible and incompressible smoothed particle hydrodynamic algorithms for natural convection](#)

物理学报.2014, 63(22): 224701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.224701>

基于浸入式边界方法的串联双矩形柱绕流数值模拟

[Numerical simulation of flow around two elongated rectangles in tandem arrangement using an immersed boundary method](#)

物理学报.2014, 63(21): 214702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.214702>

脉动流血液通栓的晶格玻尔兹曼模型

[Effect of pulsation on thrombus studied by the lattice Boltzmann method](#)

物理学报.2014, 63(19): 194701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.194701>

基于范德瓦尔斯表面张力模式液滴撞击疏水壁面过程的研究*

白玲^{1)†} 李大鸣¹⁾ 李彦卿²⁾ 王志超¹⁾ 李杨杨¹⁾

1) (天津大学水利工程仿真与安全国家重点实验室, 天津 300072)

2) (阿德莱德大学土木与环境工程学院, 阿德莱德 5005, 澳大利亚)

(2014年9月24日收到; 2014年12月22日收到修改稿)

液滴撞击疏水壁面过程的研究在介观流体力学和微流体作用材料科学的研究中具有重要的理论意义和工程价值. 论文在SPH方法中引入范德瓦尔斯状态方程处理液滴表面张力, 考虑流体粒子之间远程吸引, 近程排斥的内部作用力, 提出了流体粒子与疏水壁面粒子间势能函数与表面张力相结合的作用模式. 通过模拟真空条件下两个静止的等体积液滴相互融合的过程, 验证了计算模式在模拟液滴的表面张力中的有效性. 采用该模式模拟的液滴撞击疏水壁面过程, 不仅能够有效地模拟液滴撞击壁面后的变形过程, 而且清晰地模拟出液滴的回弹、腾空以及二次撞壁现象的完整过程. 模拟结果与液滴撞击疏水壁面的实验结果以及VOF模拟结果符合较好, 表明本文所提出的表面张力和疏水壁面作用力处理模式对模拟液滴撞壁过程具有实际应用价值.

关键词: 光滑粒子流体动力学法, 液滴撞击, 表面张力, 疏水壁面

PACS: 47.11.-j, 47.55.dr, 47.85.-g

DOI: 10.7498/aps.64.114701

1 引言

传统的基于网格的计算方法, 在求解大变形问题以及大范围的物质不均一、移动的材料界面、变形边界等特殊问题时遇到了许多难以解决的问题, 从而促进了无网格方法的产生和发展^[1]. 光滑粒子流体动力学(smoothed particle hydrodynamics, SPH)方法被认为是最早的无网格方法^[2]. 无单元 Galerkin(element-free Galerkin, EFG)方法是最早的基于全局弱式的无网格法^[3-5]. 此外, 重构核粒子法(multi-scale reproducing kernel particle, MRKP)^[6-9]、复变量无网格方法(meshless method with complex variables)^[10]等多种无网格方法也得到了进一步发展和应用. 耗散粒子动力学(dissipative particle dynamics, DPD)方法是一种粒子方法, 该方法中一个粒子表示一个分子或者

几个分子, 研究的尺度比较小^[11]. 格子玻尔兹曼(lattice Boltzmann method, LBM)是近十几年来发展的一种从介观层次模拟流体动力学的方法, 在多相流、渗流、粒子悬浮流等相关领域得到了发展和应用^[12,13].

本文采用的SPH方法属于一种连续介质的无网格粒子方法, 通过在初始时刻的特殊位置合理布设粒子, 可以在模拟过程中比较容易地追踪到系统的自由表面、材料界面以及运动边界SPH的粒子特性, 即粒子间的联系由计算生成且随时间变化, 使得该方法适用于直接处理大变形问题. 在一些典型的高能量集聚现象比如爆炸, 水下爆破, 高速撞击和穿透等方面的应用充分显示了SPH方法在这方面的优势^[14]. 液滴冲击固体壁面现象广泛存在于化工、冶炼、机械加工和制造等工业生产中. 关于采用SPH方法模拟诸如液滴冲击等液滴大变形问

* 国家自然科学基金(批准号: 51079095)和国家自然科学基金创新研究群体科学基金(批准号: 51021004)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: helen-tju@hotmail.com

题的研究,近年来已有不少学者进行了这方面的研究. Li等采用SPH方法研究液滴碰撞与合并问题时,提出一种新的液滴碰撞与合并模型^[15]. Zhang等提出一种解决自由表面凝固问题的处理方法,并将该方法应用于SPH方法中研究微流体和微动力流体例如飞沫的传播、飞溅和凝固,基底的融化和变形^[16,17]. 在模拟液滴变形的过程中,人们对于如何模拟表面张力进行了大量的探索^[18]. Nugent和Posch提出采用范德瓦耳斯(van der Waals)模型研究真空中液滴的形成^[19]. Melean等使用SPH方法研究了微液滴的形成^[20]. Zhou提出一种修正后的表面张力模型,能用在包括光滑粒子在内的宏观的粒子方法中^[21]. Li等研究了液滴撞击带孔口壁面情况下液滴在孔口附近的运动^[22]. 在用SPH方法模拟黏性液滴的过程中,采用Monaghan提出的人工应力可以在很大程度上消除应力的不稳定^[23],此方法同样适用于液滴碰撞^[24]和黏性液滴的振荡^[25].

目前,在SPH方法中引入表面张力的方法,无论是连续表面力(continuum surface force, CSF)模型还是粒子间作用力(inter-particle interaction force, IIF)模型,对于模拟真空中液滴变形效果都比较好^[19,24-26],但是对于引入外边界作用力后液滴变形过程的模拟较少,已有的文献中模拟结果中,存在难以模拟出回缩过程、液滴粒子在强冲击作用下形成线性结构或簇状结构的问题^[26,27]. 在液滴撞击固壁的研究中,不仅涉及液滴内部粒子之间的相互作用,还涉及到液滴与壁面的相互作用. 在已有的研究中,人们提出了多种壁面作用力计算方法. Liu等提出一种耦合动力边界条件来计算壁面作用力^[28]. Tartakovsky和Meakin采用SPH方法研究表面张力和复杂结构中固液接触角^[29]. 自从上世纪70年代发现荷叶效应以来,材料表面的疏水性研究引起了人们极大的兴趣,研究者对此进行了大量的理论与实验研究^[30,31]. 尽管前人已经对液滴撞击壁面的相关问题进行了一系列研究,目前对于液滴撞击疏水壁面后反弹现象的模拟却较少见于文献中. 模拟的难点之一,是由于液滴撞壁过程中会发生强烈的冲击,模拟中液滴粒子很容易在激烈的对冲作用下粒子飞溅开来,使得表面张力的模拟难度增加,模拟效果不理想;该研究的另一难点,就是对于疏水材料分子与水互相排斥的物理性质的模拟.

本文采用表述分子之间近距离排斥远距离相

互吸引的范德瓦耳斯状态方程来描述SPH粒子之间的表面张力. 采用两个静止液滴融合的算例,验证了表面张力模拟的有效性. 壁面对于液滴的排斥作用,采用Hoover提出的势能函数来进行计算^[32]. 流体粒子与疏水壁面粒子间势能函数与范德瓦耳斯表面张力相结合的作用模式,能够较好地模拟出液滴接触壁面后,液滴粒子在表面张力的回拉作用和壁面排斥力的共同作用下,液滴与壁面的疏水接触特性. 为了避免由于应力不稳定而形成粒子簇集或者粒子栅格状分布,在粒子间距离较小时添加强排斥力,来改善应力不稳定现象. 本文所建立模型成功模拟出液滴撞击壁面后的铺展变形,以及液滴达到最大铺展范围后的收缩反弹至脱离壁面,随后再次落回冲击壁面的过程. 并将模拟结果与液滴撞击具有相近接触角壁面的实验结果进行了对比,验证了模型的可靠性.

2 模型的构架

2.1 SPH基本理论

一个用光滑粒子描述的系统,由一系列被称为插值点的粒子组成. 区域内每一个标号为*i*的粒子都具有位置 r_i ,速度 v_i ,质量 m_i ,密度 ρ_i ,加速度 a_i 等属性. 在 \mathbf{x}_i 处的任意场函数 $f(\mathbf{x}_i)$ 的核近似表达式,是由其支持域范围内全部粒子相对应的函数值 $f(\mathbf{x}_j)$ 的加权平均近似得到的,具体表达式为

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W_{ij}, \quad (1)$$

其中, $W_{ij} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h)$ 是核函数, h 是核函数的光滑长度. 相对于高斯型核函数, Lucy's四次样条核函数计算量小、在 $r > h$ 的所有范围内均为零^[33],具体形式为

$$W_{ij} = \begin{cases} \alpha_d(1+3r)(1-r)^3, & r \leq 1, \\ 0, & r > 1, \end{cases} \quad (2)$$

其中, $r = r_{ij}/h = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|/h$ 为相邻粒子*i, j*间的相对距离, α_d 取值与计算的维度有关,

$$\alpha_{d=1} = \frac{5}{4h}, \quad \alpha_{d=2} = \frac{5}{\pi h^2}, \quad \alpha_{d=3} = \frac{105}{16\pi h^3}.$$

任一点场函数的一阶导数的SPH积分表达式为

$$\nabla f(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \nabla W_{ij}. \quad (3)$$

上式表明, 函数 $f(x)$ 的梯度不再是由函数自身的一阶导数来确定, 而是由场函数的值及核函数的一阶导数来确定. 这一特性使得 SPH 在计算中省去了求解函数一阶导数的工作, 是 SPH 方法在数值计算中特有的优点.

任一点的密度采用密度求和方法进行计算, 即

$$\rho(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}. \quad (4)$$

密度梯度可以通过核函数梯度表示为

$$\nabla \rho(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N m_j \nabla_i W_{ij}. \quad (5)$$

模型中采用 SPH 形式的 N-S 方程, 不仅考虑了压强张量 \mathbf{P} 的作用, 同时在能量方程中考虑了热量传输, 加入了傅里叶热通量向量 \mathbf{Q} , 此时的动量和能量方程可表述为

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mathbf{P}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{P}_j}{\rho_j^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij} + \frac{\mathbf{F}_{ci}}{m_i}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mathbf{P}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{P}_j}{\rho_j^2} \right) (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} \\ & - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mathbf{Q}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{Q}_j}{\rho_j^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中, \mathbf{F}_{ci} 外界作用力, u_i 单位质量的内能. 傅里叶热通量向量的表达式为

$$\mathbf{Q}_i = -\kappa \left(\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_{ij}} (t_i - t_j) \nabla_i W_{ij} \right), \quad (8)$$

其中, κ 是热传导系数, t 是粒子温度, $\rho_{ij} = (\rho_i + \rho_j)/2$.

2.2 压强张量

压强张量 \mathbf{P} 在计算中被分解为各向同性压强 p , 不可逆的黏性应力 $\mathbf{\Pi}^{os}$, 各向同性体积黏性 Π , 以及人工黏性 Π_β , 用于表示不同的本构关系 [34,35]:

$$\mathbf{P} = p\mathbf{I} + \mathbf{\Pi}^{os} + \Pi\mathbf{I} + \Pi_\beta\mathbf{I}. \quad (9)$$

各项同性压强 p 由状态方程给出. 通常情况下, 状态方程与温度和压强相关, 具有如下形式: $p = p(\rho, t)$. 荷兰物理学家 J. van der Waals 于 1873 年首次提出了范德瓦尔斯状态方程. 考虑了分子力作用和分子体积的范德瓦尔斯方程, 对理想气体状态方程进行了修正, 通过一个引力参数和斥力参

数, 描述了分子间相互作用的引力和斥力. 论文采用范德瓦尔斯状态方程

$$p = \frac{nk_b t}{1 - nb} - an^2, \quad (10)$$

其中, n 是粒子的数量密度, k_b 是波尔兹曼常数. 通过转换 $\bar{a} = a/m^2$, $\bar{b} = b/m$, $\bar{k}_b = k_b/m$, 将由数量密度表述的范德瓦尔斯方程转换成由质量密度 $\rho = mn$ 表示的状态方程 [19]:

$$p = \frac{\rho \bar{k}_b t}{1 - \rho \bar{b}} - \bar{a} \rho^2, \quad (11)$$

其中, m 是单个粒子的质量. 由质量密度表述的状态方程, 适用于 SPH 计算公式. 无量纲的范德瓦尔斯参数 $\bar{a} = 2$, $\bar{b} = 0.5$, $\bar{k}_b = 1$, $m = 1$, 热传导系数 $\kappa = 1$. 各项同性压强 p 进一步被分解为短距离的斥力 p_s 和长范围的引力 p_L 这两个分量. 在模型的建立中, 对于范德瓦尔斯状态方程十分关键的一项处理, 就是提高含有引力参数 a 的引力项作用范围. 该思路体现在光滑粒子流体动力学近似中, 就是在运动方程中将各向同性压力中的引力项采用二倍于斥力项的光滑长度, 对 $-\bar{a}\rho^2$ 单独进行计算. 因此, 各项同性压强可以分别表示为 $p_s = \frac{\rho_s \bar{k} t}{1 - \rho_s \bar{b}}$ 和 $p_L = -\bar{a}\rho_L^2$ 这两项.

标准 N-S 方程中的剪切黏性和体积黏性分别为

$$\mathbf{\Pi}^{os} = -2\eta \nabla \mathbf{v}_i^{os}, \quad \Pi = -\eta_v \nabla \cdot \mathbf{v}_i \quad (12)$$

其中,

$$\mathbf{v}_i^{os} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v}_i + (\nabla \mathbf{v}_i)^T \right) - \frac{1}{d} (\nabla \cdot \mathbf{v}_i) \mathbf{1},$$

速度梯度

$$\nabla \mathbf{v}_i = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N m_j (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \nabla_i W_{ij},$$

速度散度

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_i = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^N m_j (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla_i W_{ij}.$$

在 SPH 计算中 Monaghan 形式的人工黏性被广泛地使用. Monaghan 人工黏性中包含一个含有系数 α_Π 的体积黏性项, 以及一个含有系数 β_Π 的避免粒子穿透的类似 von Neumann-Richtmyer 人工黏性的项 [36]. 模型中只采用了第二项用于防止粒子间的相互穿透:

$$\Pi_\beta = \frac{\beta_\Pi \phi_{ij}^2}{\rho_{ij}}, \quad (13)$$

其中,

$$\phi_{ij} = \frac{h_{ij} \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij}}{|\mathbf{x}_{ij}|^2 + (0.1h_{ij})^2},$$

其中 $\rho_{ij} = (\rho_i - \rho_j)/2$, $h_{ij} = (h_i - h_j)/2$, $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, 且 $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$, β_{Π} 取值一般为 1.

增加引力作用范围后, 为了计算的一致性, 每个粒子都需要计算两个密度求和值 $\rho(\mathbf{x}_i)$ 和 $\rho_L(\mathbf{x}_i)$, 其中 $\rho_L(\mathbf{x}_i)$ 用于远距离引力的计算中.

$$\rho_L(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N m_j W_{Lij}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, H),$$

$$W_{Lij} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, H), \quad (14)$$

其中, W_{Lij} 表示引力计算中采用的光滑长度较大的核函数, $H = 2h$ 是 W_{Lij} 的光滑长度^[19].

运动方程进一步改写为

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mathbf{P}_{si}}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{P}_{sj}}{\rho_j^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij}$$

$$- \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mathbf{P}_{Li}}{\rho_{Li}^2} + \frac{\mathbf{P}_{Lj}}{\rho_{Lj}^2} \right) \cdot \nabla_i W_{Lij}$$

$$+ \frac{\mathbf{F}_{ci}}{m_i}, \quad (15)$$

其中, $\mathbf{P}_{Li} = (-\bar{a}\rho_{Li}^2) \mathbf{I}$, $\mathbf{P}_{si} = \left(\frac{\rho_{si} \bar{k}t}{1 - \rho_{si} \bar{b}} \right) \mathbf{I} - 2\eta \nabla v_i^{os} - (\eta_v \nabla \cdot \mathbf{v}_i) \mathbf{I} + \Pi_\beta \mathbf{I}$.

SPH 粒子的能量可以通过压强-体积变化和热传导而发生改变. 此处采用的能量方程

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mathbf{P}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{P}_j}{\rho_j^2} \right) : (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \nabla_i W_{ij}$$

$$- \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\mathbf{Q}_i}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{Q}_j}{\rho_j^2} \right) \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (16)$$

量热状态方程将温度与密度、内能以及材料特性这几个变量联系起来. 对于范德瓦尔斯流体, 其温度为 $t = (u + \bar{a}\rho) / \bar{k}_b$.

2.3 边界作用力

为了体现疏水边壁对于液滴的排斥作用, 防止边壁粒子穿透和边壁处的粒子聚集, 采用 Hoover 提出的势能函数^[32]

$$\phi = \sum_{r_{ij} < \sigma} c_r \frac{1}{4} \left[1 - \left(\frac{r_{ij}}{\sigma} \right)^2 \right]^4, \quad (17)$$

其相互作用力为

$$\mathbf{F}_c = c_r \frac{2r_{ij}}{\sigma^2} \left[1 - \left(\frac{r_{ij}}{\sigma} \right)^2 \right]^3, \quad (18)$$

其中, 系数 c_r 决定了斥力的作用强度, σ 给出了硬核尺寸. 图 1 和图 2 分别给出了当 $\sigma = 0.7$, $c_r = 1.5$ 时, 势函数和核心斥力的大小随着粒子间相对距离的变化而变化的过程, 当 σ 大于等于 0.7 时, 核心斥力作用为零.

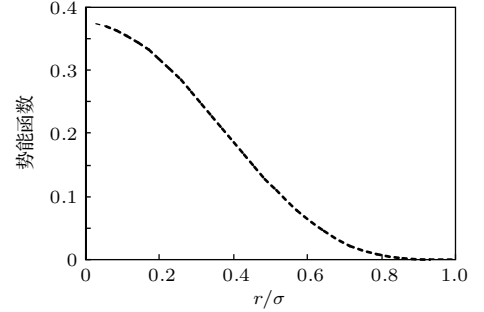


图 1 边壁作用势函数

Fig. 1. Potential of boundary force.

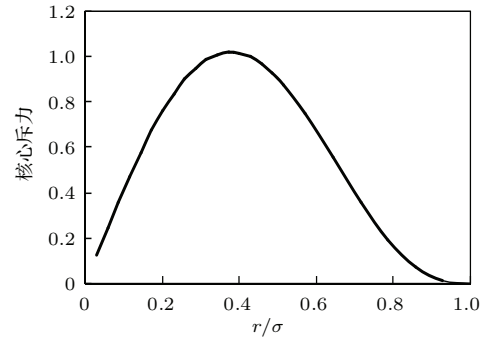


图 2 边壁斥力的大小示意图

Fig. 2. Repulsive force of boundary.

在温度很低的情况下, 粒子间距离非常近, 粒子容易集聚在一起形成栅格状或条状, 或者相互穿透. 对于传统的 SPH 方法所存在的应力不稳定性问题, 人们通过采用人工应力^[23] 或者改进核函数和离散格式^[37] 来改善了应力不稳定性. 本文通过在 SPH 应力不稳定性区域添加一个排斥力的方式, 来防止粒子间距离小于一定距离后 (图 3 中距离小于 $0.45h$) 发生的应力不稳定性. 进行斥力修正后的合力, 应力不稳定性区域明显减小, 但是粒子间距离更小时, 仍会发生排斥力急剧下降的问题^[21]. 然而, 粒子间距离达到如此接近的概率是非常小的, 因为计算中为了保证流体密度满足 $p_s = \frac{\rho_s \bar{k}t}{1 - \rho_s \bar{b}} > 0$, 密度不能大于 $1/\bar{b}$, 即粒子间距离有一个最小值, 不会无限制地相互靠近.

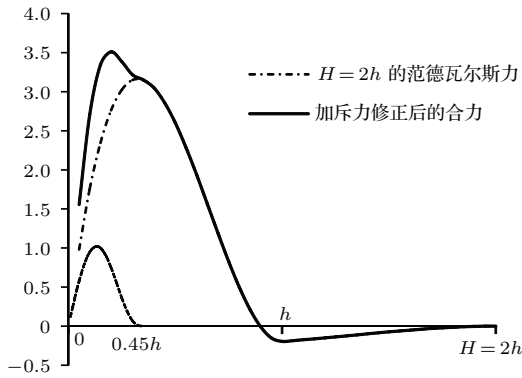


图3 应力不稳定区域的修正

Fig. 3. Correction of stress instability area.

3 表面张力验证计算

本文的所有算例中,粒子的温度均赋为无量纲温度0.4,该温度条件下全部粒子处于液态.在此算例中采用的圆形液滴,是由400个初始粒子间距为0.8的正方形液滴置于真空中,任其在表面张力作用下自由变形,形成一个圆形液滴.计算所采用的时间步长为0.01,计算进行了10000步后,最终形成一个稳定的圆形液滴.

采用真空中两个静止的等体积液滴融合的算例,对表面张力模拟的有效性进行验证.初始时刻两个液滴处在几何形状相切的位置,随后在由粒子间相互吸引而形成的表面张力作用下,经过多次变形,逐步合并为一个稳定的圆形液滴.算例中采用的无量纲时间步长为0.01,计算100000步.图4给出了液滴合并过程中的变形过程示意图,采用不同颜色标记两个不同液滴.两个静止的几何相切的等体积液滴,初始阶段两个液滴连接处曲率变化非常大,表面张力作用非常明显,液滴连接处的液桥由窄变宽,直至液滴从扁平形状变为 $T = 56$ 时刻的狭长的椭圆形液滴,此阶段系统动能经历了先

增大后减小的一个振荡周期.自此之后,液滴经过多次的拉伸变形,最终形成一个稳定的圆形液滴.图4中蓝色和红色分别表示初始时刻不同的两个液滴,可以明显看出,随着液滴的振荡变形,处在两个液滴之间界面处的粒子逐渐进入到对方液滴内部,使得原本清晰的两液滴之间的界面逐渐变得模糊难以辨认,最终形成稳定的圆形大液滴之后,界面变得模糊不清.这一现象符合自然界中的分子扩散规律.

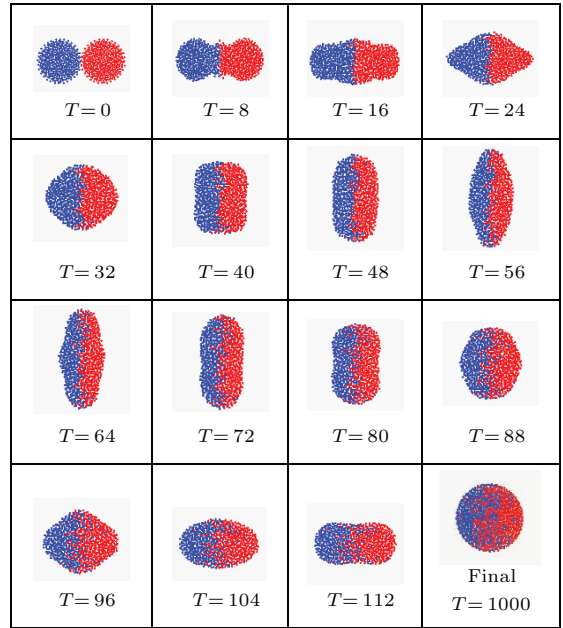


图4 两个等体积液滴融合过程图

Fig. 4. Coalescence of two equally sized droplets.

图5中将本文模拟结果与文献[38]采用二维轴对称的表面跟踪法(front tracking method, FTM)的模拟结果(图5中第二行),以及文献[39]中两个质量为1 g的静止水银液滴合并后的变形过程(图5中第三行)做了比较.图5中的时间均作了无

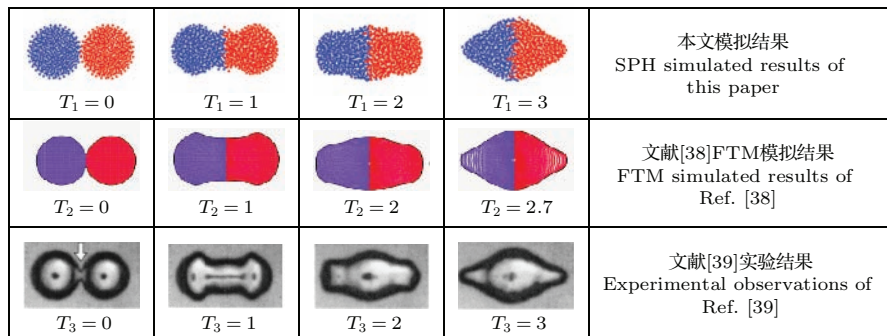


图5 静止的等体积液滴融合过程对比图

Fig. 5. Validation of coalescence of two equally sized droplets.

量纲化处理, 以方便进行对比. 对比结果显示本文采用SPH方法计算结果与FTM模拟结果和实验结果均符合良好, 不仅变形过程非常相似, 而且时间间隔也基本一致.

在液滴变形过程中, 由于粒子内部对冲运动和粒子间的相对运动会不断产生黏性耗散. 以 $T = 8$ 时刻的压强分布图 6 为例来分析, 整个大液滴边缘处由于粒子分布较为稀疏, 粒子间距离较大, 粒子之间作用力主要为吸引力, 因此在界面处形成表面张力. 在原先两液滴接触区域附近 (也称为液桥) 的压强也是负压, 说明两个液滴此时仍旧在相互靠近且有比较强烈的对冲发生. 从 $T = 8$ 时刻的速度分布图图 7 中, 可以观察到两个小液滴接触面处粒子相对运动的趋势非常明显, 并因对冲和挤压发生了向液桥两侧扩散的速度.

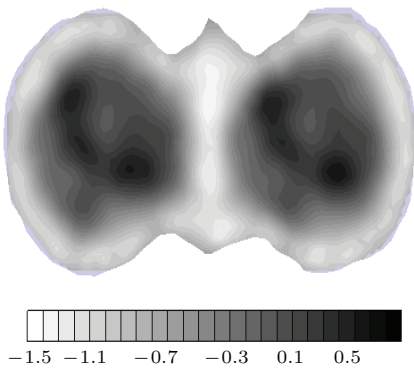


图 6 $T = 8$ 时刻的压强分布图

Fig. 6. Pressure distribution at $T = 8$ moment.

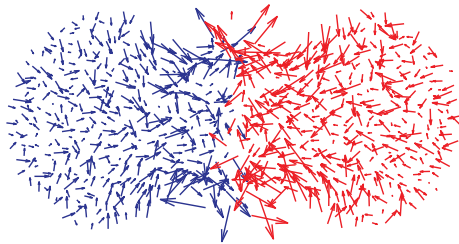


图 7 $T = 8$ 时刻的速度矢量图

Fig. 7. Velocity distribution at $T = 8$ moment.

在液滴不断的伸缩变形过程中, 整个系统动能的变化过程由图 8 给出. 一方面, 在表面张力的作用下, 液滴在一次次的周期性振荡过程中经历

了动能的周期性大小变化; 另一方面, 在黏性耗散的作用下, 系统整体的动能在不断减小, 直至最终趋于零. 文献 [38] 中给出了合并后形成液滴的最小自由振荡周期的计算公式 $\tau = \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{\rho d_c^3}{\gamma}}$, 式中 d_c

为合并后形成液滴的直径, ρ 为液滴密度, γ 为表面张力系数. 当温度为 0.4 时, ρ 近似等于 1.75, 初始小液滴的直径为 18.65, 根据等体积法则可以推求得到 $d_c = 23.5$. 根据文献 [19] 的 SPAM 计算结果, 本文拟合出了表面张力系数和温度的线性关系, 如图 9 所示. 根据曲线拟合结果, 当温度为 0.4 时, $\gamma = 5$. 由此得到合并后液滴的最小自由振荡周期为 53. 表 1 给出了图 8 中系统动能达到各个极大值的时刻, 计算出各个振荡周期的平均值为 54, 与公式求得的值非常接近.

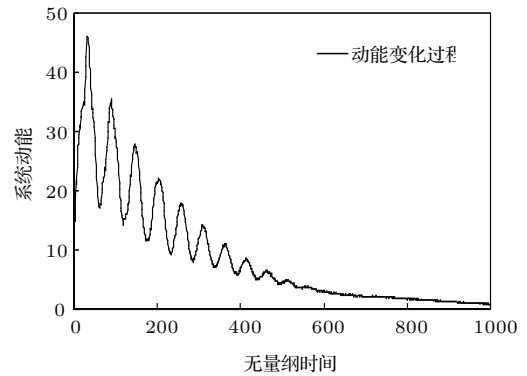


图 8 动能变化过程示意图

Fig. 8. Variation of kinetic energy.

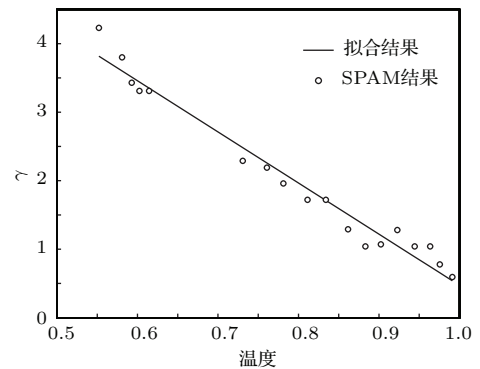


图 9 表面张力系数与温度关系的拟合结果

Fig. 9. Fitting line of the relationship between surface tension coefficient and temperature.

表 1 合并后液滴的振荡周期

Table 1. Period of oscillation of the coalesced droplet.

动能值最大的时刻	32	90	146	203	258	311	364	414	464
振荡周期 (均值为 54)	58	56	57	55	53	53	50	50	

4 液滴撞击壁面的模拟

在液滴撞击固壁的模拟中, 固壁对于液滴的作用力采用(17)式中提出的核心斥力表达式, $c_r = 1.5$, $\sigma = 1$. 计算中采用的无量纲参数为长度 0.15 mm, 时间 0.38 ms, 因此重力加速度无量纲化以后为 0.01, 水的运动黏性 $10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$ 无量纲化以后为 0.017, 此处不考虑水的体积黏性. 在本节的讨论中, 为了方便与实验结果进行对比, 计算中采用的无量纲的长度和时间数值都通过无量纲参数进行了还原. 本算例将图 5 中所示的大小的液滴(直径为 2.8 mm), 以 0.80 m/s 的初速度撞击固壁. 计算时间步长为 $1.4 \times 10^{-7} \text{s}$, 每隔 5000 步输出也即每隔 0.7 ms 输出一次, 总共计算 1×10^7 步, 也即 1.4 s. 图 10 给出了液滴撞击壁面过程中各个阶段液滴形态的变化过程. 从 0 时刻到 8.4 ms 时刻为液

滴在固壁表面的扩展过程, 此阶段液滴在惯性力作用下向下运动, 遇到壁面的阻挡之后沿着壁面铺展开来, 液滴动能一部分转化为势能, 另一部分在黏性作用下耗散掉. 随着液滴表面积的增加, 表面张力对于液滴铺展的抵制作用越来越明显, 直至 8.4 ms 时刻液滴动能为零, 此时液滴与固壁接触面积达到最大, 且由于表面张力的回拉作用, 液滴边缘处厚度大于中心处的厚度. 从 8.4 ms 时刻到 29.4 ms 为液滴收缩并发生回弹的过程, 这一阶段中, 液滴主要受到表面张力的作用, 液滴表面积不断缩小, 直至液滴与固壁的接触面积减小到零, 此时液滴发生反弹脱离固壁, 形状又一次恢复近似圆形, 在 29.4 ms 时刻液滴反弹到最高点, 速度又一次变为零, 部分动能转化为势能. 在 29.4 ms 时刻之后, 液滴在重力作用下开始下落, 再次经历在固壁表面铺展与收缩的过程, 直至动能在黏性力作用下完全耗散掉.

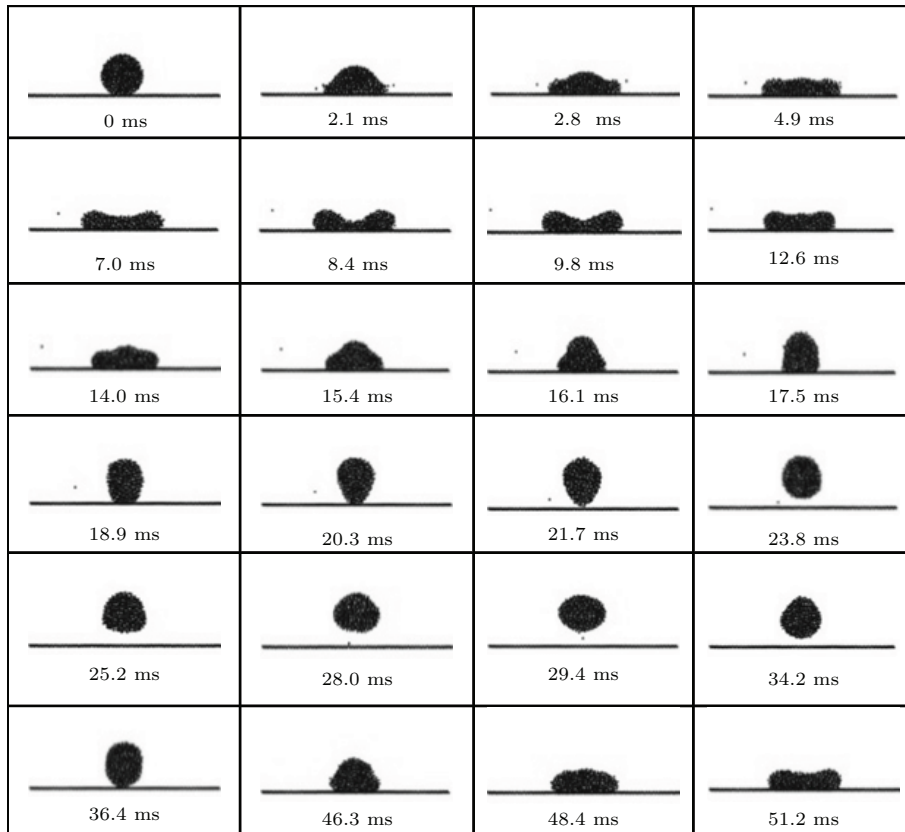


图 10 液滴撞击壁面后的变化过程

Fig. 10. Deformation of the droplet after it contacts the surface.

液滴达到稳定后与固壁的接触形态如图 11 所示, 通过测量左右接触角得出液滴与固壁的接触角大约为 100.5° 左右, 液滴与固体表面的接触属于疏水性表面接触(接触角大于 90°). 采用文献[40]的

实验结果与本文模拟结果进行对比. 图 12(a) 中, 液滴以 0.85 m/s 的初速度撞击固体石蜡表面(液滴与该表面接触角为 97°), 图 12(b) 和 (c) 分别是相对应阶段 SPH 模拟结果和相应的速度矢量图. 从

对比图中可以看出,液滴冲击壁面后各个阶段模拟结果与实验结果基本符合,对应的速度分布图也进一步描述了该时刻液滴各个部分的运动趋势.由于模型中采用的范德瓦尔斯状态方程对于表面张力的模拟效果比较明显,因此在8.4 ms时刻的液滴形态与8.0 ms时刻的实验结果稍有差别.

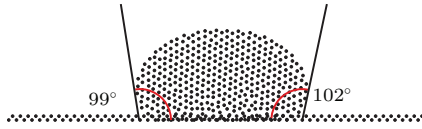


图 11 静止液滴与壁面的接触形态

Fig. 11. Contact status of a static droplet on the hydrophobic surface.

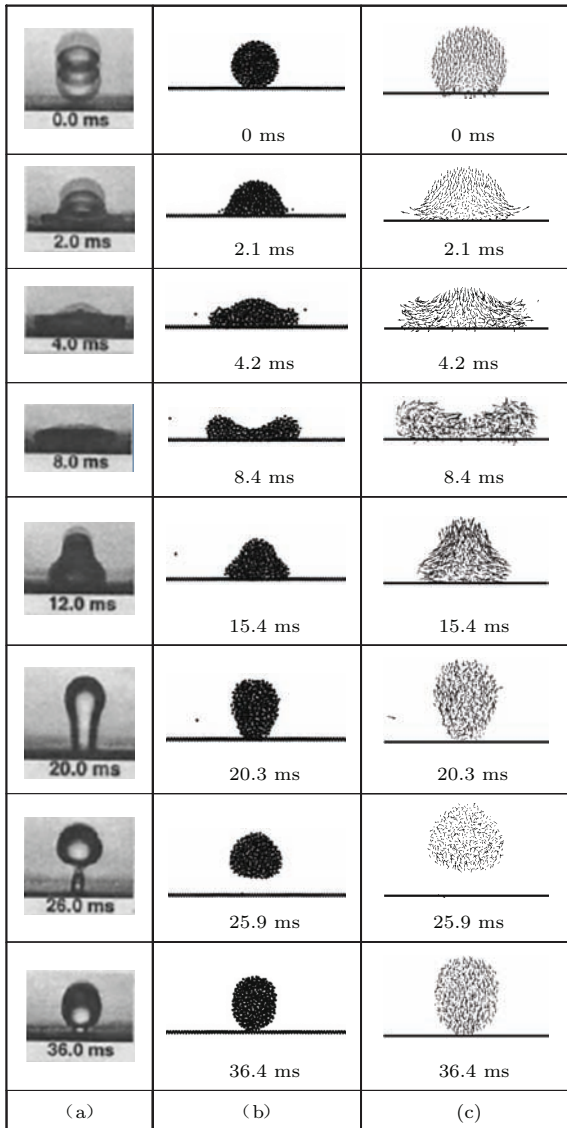


图 12 液滴撞击壁面过程结果验证

Fig. 12. Validation of the droplet deformation process.

图 13 中给出了液滴在 56 ms 之内经历了铺展、收缩反弹以及第二次铺展的过程中,液滴水平方向

直径最大值的变化过程和液滴最高点位置的变化过程.液滴铺展使得水平直径增大,由于体积不变,液滴高度必然减小;反之在液滴收缩和回弹的过程中,液滴与壁面接触面积开始减小,中心部分的高度逐渐增加.在液滴回弹直至脱离壁面后,液滴在空中的这段时间不受壁面作用的影响,液滴由于内部振荡而发生一系列微小变形,因此在 30 ms 附近最大直径发生一些微小的波动.再次接触壁面后,液滴再次开始在壁面的铺展,如前所述,由于黏性耗散的作用,第二次撞击壁面的动能减少,因此铺展后的最大直径明显小于第一阶段直径的最大值.

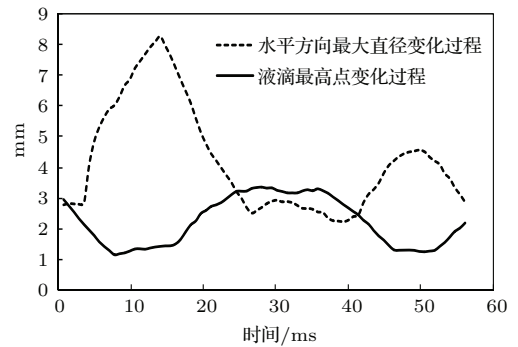


图 13 液滴撞壁后最大直径和最高点变化过程

Fig. 13. Variation of the maximum diameter and highest point of droplet.

为了对本文模拟结果进行进一步验证,将撞击速度为 0.3 m/s 的液滴撞壁计算结果与文献 [41] 中采用 VOF 方法模拟的直径为 $D = 2.5$ mm,初始撞击速度为 0.3 m/s 的液滴撞击固体石蜡表面的模拟结果进行了对比,如图 14 所示.对比结果可以看出,在几个典型的液滴形态位置,对应的时刻基本符合,时间量级也一致.

由于不同的数值模拟方法中采用的表面张力计算模式不同,而数值模拟方法也很难将实际情况中复杂的固-液-气三相作用完全真实地模拟再现.从图 12 和图 14 的对比图中可以看出,本模型中表面张力作用的效果比较明显,液滴铺平后没有马上回缩,而是继续变形成为一个中间薄、边缘厚的饼状液膜.使得本文 SPH 模拟的液滴回弹较慢的原因有: 1) 液滴撞壁后达到最大铺展范围前后的这段时间,动能最小,此时表面张力对液滴变形的阻碍作用最为明显,减缓了此阶段液滴变形的速度; 2) 此阶段表面积是液滴表面积迅速增大的阶段,而表面张力的作用会抑制液滴表面积的增加,使得液滴向表面积最小的方向变形,这一因素同样增加了此阶段液滴变形的时间.

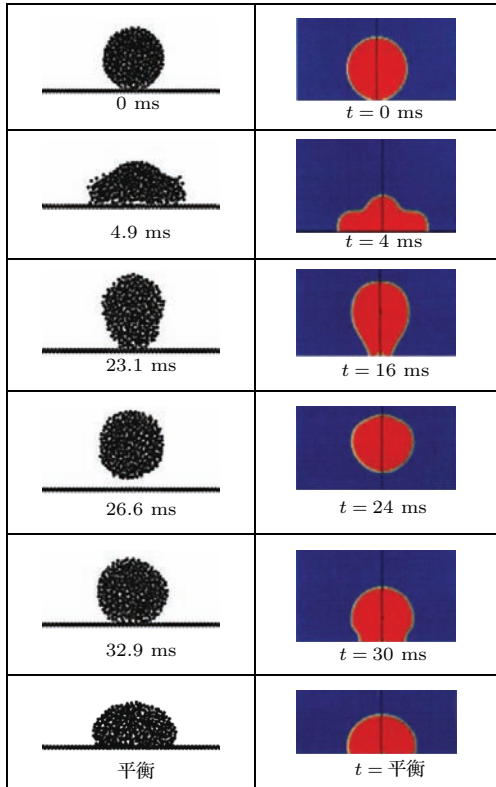


图 14 SPH 模拟结果与 VOF 模拟结果对比图
Fig. 14. Comparison between SPH results and published VOF results.

图 15 分析比较了相同条件下, 只改变撞击速度大小对于液滴撞击固壁现象的影响. 液滴撞击速度越大, 在水平壁面铺展的范围越大, 达到最大铺展直径的时间越短, 且第二次下落铺展的范围也越大. 当液滴在反弹阶段有腾空脱离壁面的情况时 (如撞击速度为 0.8 m/s 和 0.65 m/s), 液滴在空中由于内部振荡作用发生微小变形, 导致在液滴第二次撞击壁面之前液滴水平方向最大直径有一个小的起伏.

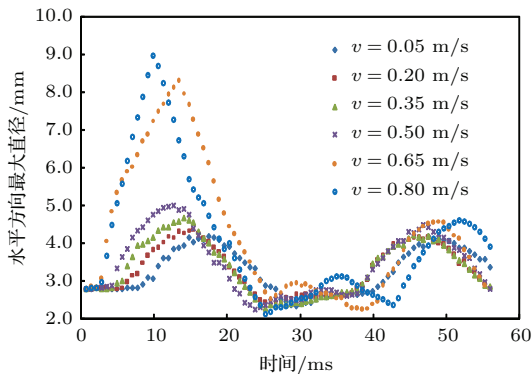


图 15 (网刊彩色) 不同撞击速度液滴最大直径变化
Fig. 15. (color online) Variation of maximum droplet diameter of different impact velocities.

图 16 比较了不同黏性的液滴撞击速度为 0.8 m/s 时水平方向最大直径的变化过程. 从图 16 中可以看出, 在黏性较小的情况下, 液滴初次撞击后水平方向铺展的最大值基本不受黏性的影响, 因为这一阶段主要受液滴惯性力的影响, 在黏性作用对液滴在表面铺展运动的影响基本可以忽略不计. 当黏性增大到接近水的黏性的 10 倍以上时, 由于液体非常黏稠, 因此初次撞击后的铺展范围显著缩小. 对于液滴撞击壁面后的第二次铺展过程, 由于液滴经历了较多的运动和变形, 此时黏性耗散的作用比较明显, 因此黏性大小对液滴在壁面第二次铺展范围的影响比较明显.

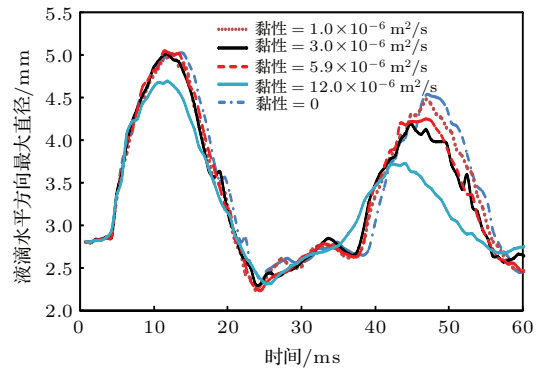


图 16 (网刊彩色) 不同黏性液滴撞壁后最大直径变化
Fig. 16. (color online) Variation of maximum droplet diameter of different droplet viscosities.

5 结 论

本文针对液滴撞击疏水表面问题进行了模拟研究. 论文在传统的 SPH 方法中引入了描述粒子间远程吸引, 近程排斥的相互作用力的范德瓦尔斯模型来模拟液滴的表面张力. 粒子之间远程的吸引力导致了表面张力的形成. 通过对真空下两个等体积液滴融合后的拉伸变形进行模拟, 并将合并后液滴的振荡周期与理论计算结果进行对比, 验证了表面张力模拟的有效性.

在液滴撞击疏水固体壁面的研究中, 提出了流体粒子与疏水壁面粒子间势能函数与表面张力相结合的作用模式. 该模式很好地模拟出了具有一定初速度的液滴撞击疏水壁面后铺展、回缩, 反弹直至腾空以及之后的二次撞壁现象. 在壁面附近的流体粒子, 同时受到表面张力和壁面排斥力的作用, 很好地体现了液滴与壁面的疏水接触特性. 模拟结果与液滴冲击石蜡表面的实验结果以及 VOF 模拟结果进行了对比, 本文模型在液滴变形的各个阶段

液滴形态和所处时刻均与实验结果符合较好. 采用该计算模型, 计算比较了撞击速度和黏性对于液滴撞击壁面后铺展范围的影响, 得到了在其他参数相同的条件下, 撞击速度越大液滴铺展范围越大, 而黏性越大的液滴铺展范围越小的结论.

从分子间作用力的角度来看, 液体表面张力的形成与表面处分子之间因距离较大而形成的拉力有关, 而壁面的疏水性是疏水材料分子与水分子相互排斥的体现. 由于SPH天然的粒子特性, 使得该方法很容易结合描述分子间作用力的函数, 将微观粒子间的作用规律体现在介观或者宏观的SPH粒子之间. 本文采用SPH方法建立的模型, 通过耦合描述分子间排斥力的势函数以及描述分子间远程吸引、近程排斥的范德瓦尔斯模型, 为进一步研究介观流体力学和微流体与不同疏水性材料的相互作用进行了有益的探索.

参考文献

- [1] Belytschko T, Krongauz Y, Organ D, Fleming M, Krysl P 1996 *Comput. Method Appl. M.* **139** 3
- [2] Vinh Phu N, Timon R, Stéphane B, Marc D 2008 *Math. Comput. Simulat.* **79** 763
- [3] Cheng R J, Ge H X 2012 *Chin. Phys. B* **21** 040203
- [4] Cheng Y M, Li R X, Peng M J 2012 *Chin. Phys. B* **21** 090205
- [5] Feng Z, Wang X D, Ouyang J 2013 *Chin. Phys. B* **22** 074704
- [6] Chen L, Ma H P, Cheng Y M 2013 *Chin. Phys. B* **22** 050202
- [7] Qin Y X, Liu Y Y, Li Z H, Yang M 2014 *Chin. Phys. B* **23** 070207
- [8] Weng Y J, Cheng Y M 2013 *Chin. Phys. B* **22** 090204
- [9] Xia M H, Li J 2007 *Chin. Phys. B* **16** 3067
- [10] Chen L, Cheng Y M 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6047 (in Chinese) [陈丽, 程玉民 2008 物理学报 **57** 6047]
- [11] Ghou A, Malfreyt P 2011 *Phys. Rev. E.* **83** 051601
- [12] Liu X L, Cheng P 2013 *Int. J. Heat Mass Tran.* **64** 1041
- [13] Feng S D, Tsutahara M, Ji Z Z 2001 *Chin. Phys. B* **10** 587
- [14] Liu M B, Liu G R 2010 *Arch. Comput. Method E S.* **17** 25
- [15] Li Q, Cai T M, He G Q, Hu C B 2006 *Appl. Math. Mech-Engl.* **27** 67
- [16] Zhang M Y, Zhang H, Zheng L L 2007 *Numer. Heat Tr. A-Appl.* **52** 299
- [17] Zhang M Y, Zhang H, Zheng L L 2008 *Int. J. Heat Mass Tran.* **51** 3410
- [18] Morris J P 2000 *Int. J. Numer. Meth Fl.* **33** 333
- [19] Nugent S, Posch H A 2000 *Phys. Rev. E* **62** 4968
- [20] Meleán Y, Sigalotti L D G, Hasmy A 2004 *Comput. Phys. Commun.* **157** 191
- [21] Zhou G Z, Wen G, Li J H 2008 *Powder Technol.* **183** 21
- [22] Li D M, Wang Z C, Bai L, Wang X 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 194704 (in Chinese) [李大鸣, 王志超, 白玲, 王笑 2013 物理学报 **62** 194704]
- [23] Monaghan J J 2000 *J. Comput. Phys.* **159** 290
- [24] López H, Sigalotti L D G 2006 *Phys. Rev. E* **73** 1201
- [25] Meleán Y, Sigalotti L D G 2005 *Int. J. Heat. Mass. Tran.* **48** 4041
- [26] Fang H S, Bao K, Wei J A, Zhang H, Wu E H, Zheng L L 2009 *Numer. Heat Tr. A.-Appl.* **55** 124
- [27] Jiang T, Ouyang J, Yang B, Ren J 2010 *Comput. Mech.* **45** 573
- [28] Liu M B, Shao J R, Chang J Z 2012 *Sci. China Tech. Sci.* **55** 244
- [29] Tartakovsky A, Meakin P 2005 *Phys. Rev. E* **72** 026301
- [30] Shirtcliffe N J, McHale G, Atherton S, Newton M I 2010 *Adv Colloid Interfac* **161** 124
- [31] Lafuma A, Quere D 2003 *Nat Mater* **2** 457
- [32] Hoover W G 2006 *Smooth particle applied mechanics: the state of the art* (Singapore: World Scientific) p94
- [33] Charles A N 2014 *Ph. D. Dissertation* (Melbourne, Australia: RMIT University)
- [34] Charles A N, Daivis P 2011 *19th International Congress on Modelling and Simulation* Perth, Australia, December 12–16, 2011 p516
- [35] Charles A, Daivis P 2009 *18th World IMACS/MODSIM Congress* Cairns, Australia July 13–17 2009 p303
- [36] Lattanzio J C, Monaghan J J, Pongracic H, Schwarz M P 1986 *SIAM J. Sci. Stat. Comp.* **7** 591
- [37] Yang X F, Liu M B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 224701 (in Chinese) [杨秀峰, 刘谋斌 2012 物理学报 **61** 224701]
- [38] Liu D 2013 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [刘栋 2013 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [39] Menchaca-Rocha A, Martínez-Dávalos A, Núñez R, Popinet S, Zaleski S 2001 *Phys. Rev. E* **63** 046309
- [40] Mao T, Kuhn D C S, Tran H 1997 *AICHE J* **43** 2169
- [41] Li Y 2008 *Master Dissertation* (Dalian: Dalian University of Technology) (in Chinese) [李燕 2008 硕士学位论文 (大连: 大连理工大学)]

Study on the droplet impact on hydrophobic surface in terms of van der Waals surface tension model*

Bai Ling^{1)†} Li Da-Ming¹⁾ Li Yan-Qing²⁾ Wang Zhi-Chao¹⁾ Li Yang-Yang¹⁾

1) (State Key Laboratory of Hydraulic Engineering Simulation and Safety, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

2) (Department of Civil and Environmental Engineering, the University of Adelaide, Adelaide 5005, Australia)

(Received 24 September 2014; revised manuscript received 22 December 2014)

Abstract

Research on the droplet impact on a hydrophobic surface is of important theoretical significance and engineering value, both in mesoscopic fluid mechanics and interactions between microfluid and special materials. The van der Waals (vdW) equation of state relates the pressure to the temperature and the density of the fluid, and gives the long-range attractive force and short-range repulsive force between particles. The van der Waals equation of state can be used to describe the surface tension between liquid and vapor. As a pure meshless particle method, the smoothed particle hydrodynamic (SPH) method can use the vdW equation of state written in SPH form of N-S equations to describe the surface tension. The vdW surface tension mode is validated by simulating the coalescence of two equally sized static droplets in vacuum. Repellant of the hydrophobic surface is derived from a core potential. By combining the vdW surface tension and the repulsive force of the surface, the phenomenon of a liquid droplet impact with a certain initial velocity on the hydrophobic surface is studied. The SPH model is not only capable to describe the spreading of the droplet after it contacts the surface, but also clearly reproduces the springback, bouncing and secondary impact of the droplet. During the deformation of the droplet, the inertia force impels the spreading process of the droplet whilst the springback and bouncing behavior is dominated by the surface tension. The simulated results are in good agreement with the published experimental observations and VOF simulated results, indicating that the way we treat the surface tension and the repulsive force of the hydrophobic surface is effective and applicable in droplet impact surface problems. The impact velocity and liquid viscosity are considered to be two important factors that affect the deformation of the droplet after it contacts the surface. By varying the impact velocity within a certain range it is concluded that the maximum liquid-solid contact area increases as the impact velocity grows, and the bounced droplet will leave the surface when the velocity is big enough. Another comparison between different liquid viscosities shows that the maximum contact area decreases as the liquid viscosity increases because of the viscous dissipation, and the droplet barely rebound when the liquid viscosity is big enough.

Keywords: smoothed particle hydrodynamics, droplet impact, surface tension, hydrophobic surface

PACS: 47.11.-j, 47.55.dr, 47.85.-g

DOI: 10.7498/aps.64.114701

* Project supported by the National Natural Science foundation of China (Grant No. 51079095), and the Science Fund for Creative Research Groups of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51021004).

† Corresponding author. E-mail: helen-tju@hotmail.com