

基于SPH应力修正算法的液滴撞击超疏水壁面模拟分析

王志超,牛娇

江西省水利科学研究院,南昌 330029

摘要 针对SPH方法中的压应力不稳定问题,提出一种改进的Quintic核函数,相对于传统的“钟形”核函数可以更好地改善SPH模拟过程中粒子的聚集现象。应用改进模型对液滴撞击超疏水壁面过程进行模拟研究,根据撞击后液滴铺展的运动特征,分析了影响壁面摩擦阻力的因素以及摩擦阻力的作用区域。结果表明,当壁面相对浸润直径 $\phi < 1$ 时,撞击后液滴铺展受壁面黏度系数 ν 的影响不明显,而当 $\phi \geq 1$ 时,相同条件下 ν 越大液滴铺展速度越小,壁面相对浸润直径的最大值 ϕ_{\max} 越小,因此 $\phi \geq 1$ 为撞击后液滴铺展过程中壁面摩擦阻力的主要作用区域;壁面黏度系数 ν 对撞击后液滴铺展时间影响较小,不同 ν 条件下液滴铺展达到 ϕ_{\max} 的时间相近,在相同壁面条件下液滴铺展受到的摩擦阻力会随着撞击速度 v_0 的增加而变大, ν 与 v_0 大致按二次抛物线变化。

关键词 SPH;应力不稳定;核函数;液滴撞击;超疏水壁面

黏性液滴撞击壁面现象是一个复杂的气、液、固多相耦合作用过程。研究液滴与壁面的相互作用机理,不仅有利于多相流理论的完善,而且有利于船舶、水利等工程中所面临相关问题的改善,具有重要学术价值和工程意义。

事实上关于液滴撞击的问题,前人已经进行了大量的探索。在实验研究方面,2002年Rioboo等^[1]通过研究发现,对于干燥壁面,当液滴撞击速度较小时,在运动初期液滴沿壁面逐渐铺展且粘附在壁面上;当撞击速度稍大时,液滴运动初期呈现外缘凸出的铺展形式,并伴有少许小液滴飞溅;同年Thoroddsen^[2]则发现,当液滴撞击壁面的速度较大时($We > 40$)液滴与壁面接触的位置存在一定射流,且射流速度可达到液滴撞击壁面初始速度的10倍。在数值模拟方面,模拟液滴撞击现象的关键在于相界面的准确定位和追踪,刘赵森等^[3]模拟研究了液滴喷射技术在全聚合物薄膜晶体管制备中的应用。目前针对相界面的定位追踪问题已经发展出多种方法,按照模型点面线的拓扑结构关系主要分为传统的网格方法和无网格方法。传统的网格方法包括VOF(volume of fluid)^[4]、Level Set^[5]、FTM(front tracking method)^[6]等。常见的无网格方法有LBM(lattice-boltzmann method)^[7]、SPH(smoothed particle hydrodynamics)^[8-9]等。

然而以上诸多研究主要偏重于表面张力、壁面反作用力和液滴内部压应力对液滴运动的影响,针对壁面摩擦阻力影响的关注较少。SPH方法作为一种经典的无网格拉格朗日粒子方法,最初主要是用于解决天体物理问题。近年来SPH方法涉及的领域不断扩展,在水动力学问题的模拟中亦得到广泛的关注和应用。本文针对SPH方法中的压应力不稳定问题,提出一种改进的Quintic核函数,并应用改进模型对液滴撞击超疏水壁面过程进行模拟研究。

1 模型理论

1.1 SPH控制方程

采用SPH方法基本理论分别对流体连续方程和运动方程进行空间离散化,可以得到在笛卡尔坐标系下的SPH控制方程

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_{j=1}^N m_j \nu_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} \quad (1)$$

$$\frac{d\nu_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{P_j}{\rho_j^2} + \frac{P_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} + f_{\mu i} + X_i \quad (2)$$

式中, m 为粒子质量; ν 为流体速度; W 为核函数; ∇W 为核函数的一阶导数; N 为支持域内粒子数;黏性 f_{μ} 采用Morris^[10]提

收稿日期:2016-02-23;修回日期:2016-12-06

作者简介:王志超,博士,研究方向为水动力学与模拟,电子信箱:wzc_tju@sina.com

引用格式:王志超,牛娇.基于SPH应力修正算法的液滴撞击超疏水壁面模拟分析[J].科技导报,2017,35(2):87-91;doi 10.3981/j.issn.1000-7857.2017.02.012

出的简化的层流黏性,如式(3);在考虑表面张力的条件下,各项同性压强 P 的求解包括压应力项 p 和拉应力 \tilde{p} 。本文采用 Monaghan^[11]在求解自由表面流动问题时提出的水的状态方程求解压应力项 p ,如式(4),采用范德瓦尔斯形式状态方程中的引力项求解流体粒子间存在的拉应力 \tilde{p} ,如式(5)。

$$f_{\mu} = \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{4v_{x_j} \cdot \nabla_i W_{ij}}{(\rho_i + \rho_j)r_{ij}^2} \right) v_{ij} \quad (3)$$

$$p = \frac{c_0^2 \rho_0}{\gamma} \left((\rho/\rho_0)^{\gamma} - 1 \right) \quad (4)$$

$$\tilde{p} = -k\tilde{\rho}^2 \quad (5)$$

式中, v 为流体的运动黏度系数; $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$; $r_{ij} = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$; ρ_0 为参考密度; c_0 为初始声速; γ 为常数,一般 $\gamma=7$; k 为度量分子间引力的参数,从受力的角度也可以认为是拉应力系数。

将应力求解式(4)和式(5)代入运动方程式(2),可得考虑表面张力条件下 SPH 形式的流体运动方程

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \nabla_i W_{ij} - \sum_{j=1}^N \left(\frac{\tilde{p}_j}{\tilde{\rho}_j^2} + \frac{\tilde{p}_i}{\tilde{\rho}_i^2} \right) \nabla_i \tilde{W}_{ij} + f_{\mu} + \mathbf{X}_i \quad (6)$$

式中, \tilde{w} 为专用于计算拉应力的核函数,一般 \tilde{w} 的光滑长度 \tilde{h} 会大于 W 的光滑长度 h ; \tilde{N} 为光滑长度 \tilde{h} 条件下支持域内粒子数; $\tilde{\rho}$ 为与拉应力相对应的密度,该密度采用 \tilde{w} 条件下的密度求和法计算。

方程(6)中除去拉应力项外,其余部分为传统 SPH 的运动方程(2),满足动量守恒要求。而拉应力项所采用粒子近似式的模式与压应力完全相同。即在计算粒子压应力项的同时以相同的应力计算模式额外得到一个拉应力项,因此运动方程(6)也应满足动量守恒要求。

1.2 应力不稳定处理

尽管传统的 SPH 方法在不可压缩流、大变形流体、多相流以及高速碰撞等问题中得到了广泛应用,但是 SPH 方法有着一个严重的固有缺陷,即应力不稳定(tensile instability)问题。应力不稳定包含拉伸状态下的拉力不稳定和压缩状态下的压力不稳定。对此已有学者对于 SPH 方法应力不稳定的问题进行了大量的研究并提出了改善方法,例如应力点法^[12]、修正核函数^[13]、人工应力^[14-15]等。要解决 SPH 方法中的应力不稳定的问题,就必须使得粒子间的压应力随间距的减小而增加,拉应力随间距的增加而增加。Swegle 等^[14]在研究中解释了导致应力不稳定的原因,并提出了传统 SPH 方法中应力不稳定的充分条件为 $T \cdot W'' > 0$,其中 T 为应力, W'' 为核函数二阶导数。当 $T > 0$ 时粒子间表现为压应力, $T < 0$ 则为拉应力。 $W'' > 0$ 表示核函数一阶导数 W' 随着粒子间距的增大而增加,反之 W' 随着粒子间距的增大而减小。根据 SPH 形式流体运动方程,当 T 不变时,粒子间作用力与 W' 成正比关系。因此,当 $T > 0$ 、 $W'' > 0$ 时粒子间会导致压应力不稳定, $T < 0$ 、 $W'' < 0$ 时粒子间会导致拉应力不稳定。

针对压应力不稳定问题,本文采用一种改进的 Quintic 核函数

$$\begin{cases} W(R, h) = \alpha_d \left(1 - \frac{R}{2} \right)^4 \left(\frac{3}{4}R + 1 \right) \\ \frac{\partial W(R, h)}{\partial R} = \frac{5}{64} \alpha_d (R - 2)^3 (3R + 2) \\ \frac{\partial^2 W(R, h)}{\partial R^2} = \frac{15}{16} \alpha_d R (R - 2)^2 \end{cases} \quad (6)$$

式中,正则化系数 α_d 在一维、二维及三维条件下分别为 $2/h$ 、 $21/8\pi h^2$ 、 $21/10\pi h^3$ 。改进的 Quintic 核函数在支持域内具有连续而又光滑的一阶和二阶导函数。该核函数会使得粒子间的排斥力随着粒子间距的减小而增大,不再出现排斥力减小的区域,从而消除了流体介质的压应力不稳定。

粒子间拉应力的计算采用 B-样条型核函数

$$W(R, \tilde{h}) = \alpha_d \times \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3 & 0 \leq R < 1 \\ \frac{1}{6}(2 - R)^3 & 1 \leq R < 2 \\ 0 & R \geq 2 \end{cases} \quad (7)$$

式中, α_d 在一维空间、二维空间及三维空间中取值分别为 $1/\tilde{h}$ 、 $15/7\pi\tilde{h}^2$ 、 $3/2\pi\tilde{h}^3$ 。针对拉应力不稳定问题,采用增加 B-样条型核函数(“钟形”核函数)光滑长度的办法,即 $\tilde{h}=1.8h$,将拉应力不稳定区域移动到原支持域以外,从而增大拉应力稳定区域的范围。

2 数值模拟

2.1 模型验证

本节算例模拟了考虑重力、黏性和表面张力条件下,液滴以 $v_0=0.54$ m/s 的初始速度撞击在超疏水壁面上铺展、回缩和反弹的运动过程,并且与李西营^[16]实验数据进行对比验证。实验中液滴的直径为 (2.67 ± 0.03) mm,以 $v_0=0.54$ m/s 的初始速度撞击固体超疏水材料表面。在此算例中,液滴直径为 2.18 mm,初始粒子间距为 $\Delta x = 4.0 \times 10^{-2}$ mm。根据刘栋^[17]使用的液滴自由拉伸运动振荡周期计算方法,在振荡周期相同时,可以率定出与水的表面张力系数 $\sigma=0.072$ N/m 对应的拉应力系数为 $k=0.00966$,流体运动黏度系数 $\nu=10^{-6}$ m²/s。拟采用层流黏性公式(3)模拟流体与壁面之间的摩擦阻力,铺展回缩阶段壁面黏度系数 ν' 分别为 10^{-2} m²/s 和 7×10^{-4} m²/s。液滴撞击超疏水壁面模拟结果如图 1 所示,与之对应的实验结果如图 2 所示。

在 $0 \sim 2$ ms 阶段,液滴受惯性力作用向下运动,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表面能,另一部分在黏性作用下耗散掉。在 $2 \sim 4.5$ ms 阶段,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,直至液滴动能为 0 ,此时液滴与固壁接触面积达到最大,且由于表面张力的作用,液滴边缘处厚度大于中心处的厚度。在 $4.5 \sim 9.5$ ms 阶段,液滴在表面张力的主导下回缩,液滴表面积不断缩小。在 $9.5 \sim 14.8$ ms 阶段,液滴与固壁的接触面积减小到 0 ,此时液滴脱离固壁发生回弹。对比图 1 和图 2,除 $9.5 \sim 14.8$ ms 回弹阶段数值模拟与实验有所区别以外,液滴铺展和回缩阶段模拟结果与实验结果基本吻合。

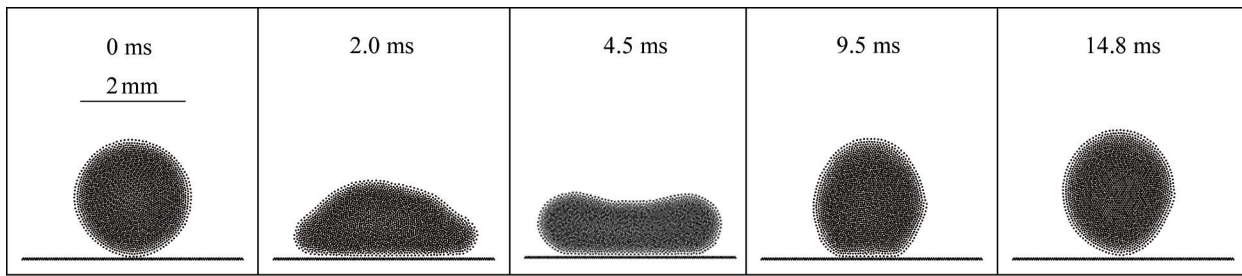


图1 液滴撞击超疏水壁面模拟结果

Fig. 1 Simulation results of droplet impact on super hydrophobic surface

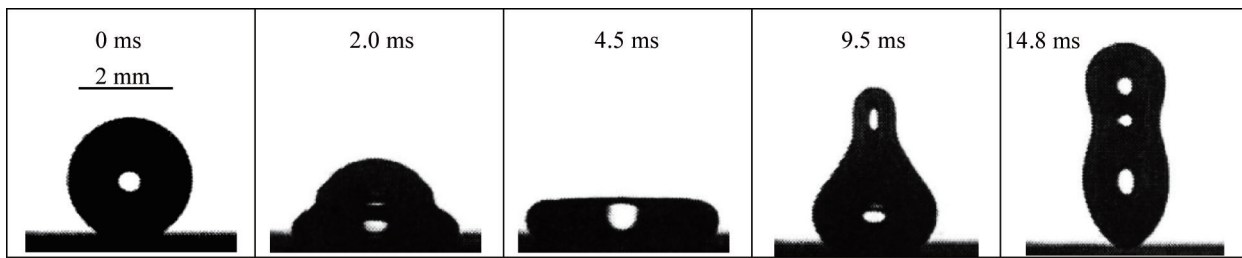


图2 液滴撞击超疏水壁面实验结果

Fig. 2 Experiment results of droplet impact on super hydrophobic surface

壁面相对浸润直径 ϕ 的变化过程 (ϕ =浸润直径/液滴初始直径)如图3所示。实验与模拟得到的壁面相对浸润直径的最大值 ϕ_{max} 相同,达到 ϕ_{max} 的时间基本同步,液滴在壁面停留的时间也基本一致。因此改进SPH模型可以用来模拟研究液滴撞击超疏水壁面问题中的铺展和回缩过程。

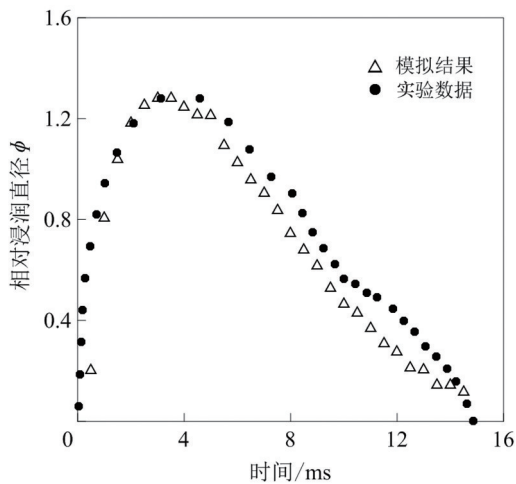


图3 相对浸润直径 ϕ 的变化过程

Fig.3 Variation processes of wetted diameter ϕ

2.2 模拟与分析

液滴在超疏水表面铺展过程中,受到来自壁面的切向摩擦阻力。以壁面黏度系数 ν' 作为体现壁面摩擦阻力大小的控制因素,模拟液滴以相同速度、正面撞击黏度系数分别为 $10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$ 、 $10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ 、 $10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ 的超疏水壁面后的铺展过程。不

同壁面黏度系数 (ν') 条件下壁面相对浸润直径 (ϕ) 的变化过程如图4所示。

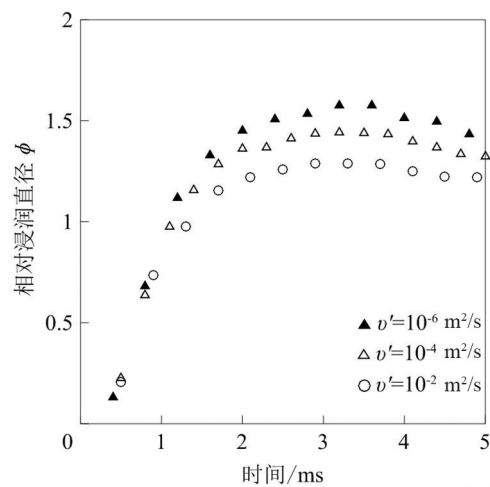


图4 不同 ν' 条件下 ϕ 的变化过程

Fig. 4 Variation processes of ϕ with different ν'

经过对比分析,在液滴铺展的前期即当 $\phi < 1$ 时,铺展过程受到 ν' 值的影响不明显,而当 $\phi \geq 1$ 时 ν' 的大小对液滴铺展过程的影响较明显。当 $\phi < 1$ 时,壁面与液滴之间主要表现为沿撞击方向的阻力,液滴运动受沿壁面方向的摩擦阻力影响较小。当 $\phi \geq 1$ 时,液滴的铺展速度以及壁面相对浸润直径的最大值 ϕ_{max} 均受 ν' 值影响,表现为壁面 ν' 值越大液滴铺展速度越小, ϕ_{max} 越小,因此 ν' 值可以作为体现壁面摩擦阻力大小的控制因素。 ν' 值对液滴铺展时间影响较小,不同 ν' 条件

下铺展达到 ϕ_{\max} 的时间相近。 $\phi \geq 1$ 为液滴铺展过程中壁面摩擦阻力主要作用区域。

为了进一步分析液滴铺展过程中液滴受到壁面摩擦阻力的影响,以及铺展阶段壁面黏性系数 v' 与撞击速度 v_0 的关系,结合李西营^[6]实验结果模拟了一系列不同韦伯数 We 条件下液滴撞击超疏水壁面的铺展过程,如表 1 所示。表 1 中液滴的韦伯数 We 和壁面 ϕ_{\max} 值的实验数据均摘自李西营^[6]的实验结果,模拟的液滴初始撞击速度 v_0 则根据韦伯数 We 换算得到,液滴的直径 $d_0=2.18$ mm,表面张力系数 $\sigma=0.072$ N/m,密度 $\rho=1000$ kg/m³。壁面摩擦阻力大小通过 v' 控制,相同条件下两者成正比例关系。

表 1 不同 We 液滴撞击超疏水壁面的模拟结果
Table 1 Results of droplet impact on super hydrophobic surface with different We

We	$v_0/(m \cdot s^{-1})$	ϕ_{\max}		$v'/(m^2 \cdot s^{-1})$
		实验数据	模拟结果	
8.28	0.52	1.291	1.294	0.007
8.75	0.54	1.30	1.31	0.01
12.69	0.65	1.438	1.435	0.03
20.00	0.82	1.576	1.578	0.042
27.50	0.96	1.756	1.758	0.048

表 1 中壁面 ϕ_{\max} 值的模拟结果与实验数据基本一致,液滴的 We 值越大,撞击速度 v_0 越大,壁面相对浸润直径的最大值 ϕ_{\max} 也越大。模拟中壁面摩擦阻力的大小应随着液滴撞击速度的变大而增大。根据模拟结果,可以拟合出壁面黏性系数 v' 与初始撞击速度 v_0 之间的关系曲线,如图 5 所示。

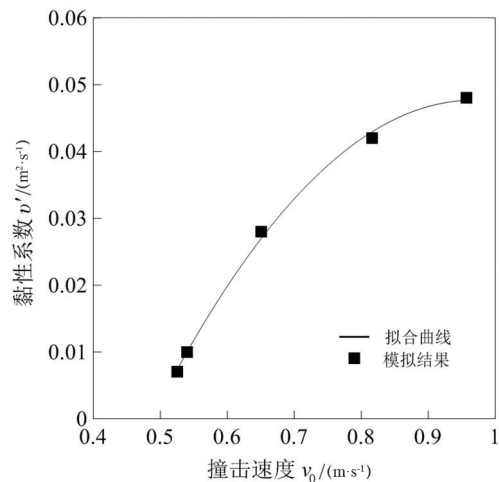


图 5 铺展阶段 v' 与撞击速度 v_0 的关系
Fig.5 Relations between v' of spread stage and droplet impact velocity v_0

在相同壁面条件下,液滴铺展过程中受到的壁面摩擦阻力会随着液滴初始撞击速度的变化而变化。当液滴初始撞击速度 $0.5 < v_0 < 1$ 时, v' 与 v_0 之间的关系曲线大致按二次抛物线变化, v' 值的大小应该随着 v_0 增加而增大,且变化趋势逐渐减缓。

结合图 2 中壁面对回弹液滴表现出的拉拽现象分析,液滴在壁面的铺展回缩以及回弹离开壁面之前,除去切向的壁面摩擦剪切应力以外,还应受到来自壁面法向的拉应力。该拉应力产生原理与流体的附壁现象中附壁力的作用原理相同,即壁面具有一定的可湿润性。考虑附壁力作用后的液滴回弹情况如图 6 所示。

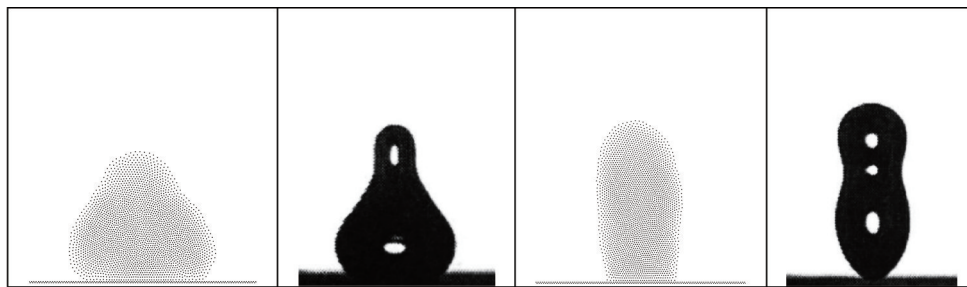


图 6 考虑附壁力后的的模拟结果
Fig.6 Simulation results with consideration of the wall adhering force

3 结论

本文针对 SPH 方法模拟过程中粒子的聚集问题,提出一种改进的 Quintic 核函数,并应用改进模型模拟液滴撞击超疏水壁面过程,分析了影响壁面摩擦阻力的因素以及摩擦阻力的作用区域。壁面黏度系数 v' 的值会对液滴铺展过程产生影响,可以作为体现壁面摩擦阻力大小的控制因素。当壁面相对浸润直径 $\phi < 1$ 时,壁面与液滴之间主要体现为沿撞击方

向的阻力,液滴运动受沿壁面方向的摩擦阻力影响较小,因而铺展受到 v' 值的影响不明显。而当 $\phi \geq 1$ 时, v' 的大小对液滴铺展过程的影响较明显,表现为相同条件下 v' 值越大液滴铺展速度越小, ϕ_{\max} 越小。此外, v' 值对液滴铺展时间影响较小,不同 v' 条件下达到 ϕ_{\max} 的时间相近, $\phi \geq 1$ 为液滴铺展过程中壁面摩擦阻力主要作用区域。在相同壁面条件下,液滴铺展过程中受到的壁面摩擦阻力会随着液滴初始撞击速度 v_0

的增加而变大, v' 与 v_0 之间的关系曲线大致按二次抛物线的形式变化。

研究完善了液滴撞击固壁方面的研究成果, 改进了 SPH 方法中的应力计算模式, 可为进一步研究自由表面流体与复杂固体边界作用问题提供参考。

参考文献 (References)

- [1] Rioboo Romain, Marengo Marco, Tropea Cameron. Time evolution of liquid drop impact onto solid, dry surfaces[J]. *Experiments in Fluids*, 2002, 33(1): 112-124.
- [2] Thoroddsen S T. The ejecting sheet generated by the impact of a drop [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2002, 451: 373-381.
- [3] 刘赵森, 刘华敏, 张谭. 液滴喷射技术在全聚合物薄膜晶体管制备中的应用[J]. *科技导报*, 2008, 26(13): 44-48.
Liu Zhaomiao, Liu Huamin, Zhang Tan. Application of inkjet printing on preparation of all polymer thin film transistors[J]. *Science & Technology Review*, 2008, 26(13): 44-48.
- [4] Malgarinos Ilias, Nikolopoulos Nikolaos, Marengo Marco, et al. VOF simulations of the contact angle dynamics during the drop spreading: Standard models and a new wetting force model[J]. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2014, 212: 1-20.
- [5] Sang H L, Hur Nahmkeon, Kang Seongwon. A numerical analysis of drop impact on liquid film by using a level set method[J]. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2011, 25(10): 2567-2572.
- [6] Jesus W C, Roma A M, Pivello M R, et al. A 3D front-tracking approach for simulation of a two-phase fluid with insoluble surfactant[J]. *Journal of Computational Physics*, 2015, 281: 403-420.
- [7] Song Baowei, Ren Feng, Hu Haibao, et al. Lattice Boltzmann simulation of liquid-vapor system by incorporating a surface tension term[J]. *Chinese Physics B*, 2015, 24(1): 014703.
- [8] 李大鸣, 王志超, 白玲, 等. 液滴撞击孔口附近壁面运动过程的模拟研究[J]. *物理学报*, 2013, 62(19): 194704.
Li Daming, Wang Zhichao, Bai Ling, et al. Investigations on the process of droplet impact on an orifice plate[J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(19): 194704.
- [9] 潘建平, 曾庆筠. 基于 SPH 方法连续液滴撞击固壁面模拟[J]. *科技导报*, 2015, 33(11): 13-16.
Pan Jianping, Zeng Qingyun. Simulation of continuous droplet impinging on solid surface based on SPH method[J]. *Science & Technology Review*, 2015, 33(11): 13-16.
- [10] Morris J P, Fox P J, Zhu Y. Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH[J]. *Journal of Computational Physics*, 1997, 136: 214-226.
- [11] Monaghan J J. Simulating free surface flows with SPH[J]. *Journal of Computational Physics*, 1994, 110: 399-406.
- [12] Randles P W, Libersky L D. Normalized SPH with stress points[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2000, 48(10): 1445-1462.
- [13] 杨秀峰, 刘谋斌. 光滑粒子动力学 SPH 方法应力不稳定性的一种改进方案[J]. *物理学报*, 2012, 61(22): 224701.
Yang Xiufeng, Liu Moubing. Improvement on stress instability in smoothed particle hydrodynamics[J]. *Acta Physica Sinica*, 2012, 61(22): 224701.
- [14] Swegle J W, Hicks D L, Attaways S W. Smoothed particle hydrodynamics stability analysis[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 116: 123-134.
- [15] Monaghan J J. SPH without a tensile instability[J]. *Journal of Computational Physics*, 2000, 159(2): 290-311.
- [16] 李西营. 液滴撞击固体壁面的实验及理论研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2010.
Li Xiyong. Experimental and theoretical studies on water droplet impacting dry solid surfaces[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2010.
- [17] 刘栋. 液滴碰撞及其融合过程的数值模拟研究[D]. 北京: 清华大学, 2013.
Liu Dong. Numerical Simulations on Collision and Coalescence of Binary Droplets[D]. Beijing: Tsinghua University, 2013.

Research of droplet impact on super hydrophobic surface based on an improved stress algorithm of SPH method

WANG Zhichao, NIU Jiao

Jiangxi Hydraulic Research Institute, Nanchang 330029, China

Abstract The compressive stress in the Van der Waals state equation is coupled into the SPH model to simulate the droplet's surface tension. To improve model's stress stability, the tensile stress and compressive stresses are calculated, respectively with a modified Quintic kernel function and a Bell-Shaped kernel function. The model is verified by simulating the droplet impact on super hydrophobic surface, and the numerical result is in good agreement with experiment data. Furthermore, the solid surface's frictional stress and its effective region are analyzed. It is shown that, when the wall relative infiltration diameter $\phi < 1$, the effect of the solid surface viscosity v' on the droplet's spreading is not significant. When $\phi \geq 1$, under the same condition, the droplet spreading velocity and ϕ_{\max} (maximum ϕ) will decrease with the increase of v' . During the spreading process $\phi \geq 1$ is the main effective region of the frictional stress. The time taken to achieve the ϕ_{\max} at different v' sees very small change, so v' has little influence on the spreading time. Under the same solid boundary condition, the frictional stress of the spreading droplet will increase with the increase of the impact velocity v_0 . The relation between v' and v_0 is roughly in a parabola.

Keywords SPH; tension instability; kernel function; droplet impact; super-hydrophobic surface

(责任编辑 韩星明)