

用格子 Boltzmann 方法模拟液滴撞击 固壁动力学行为

权生林, 李 爽, 李维仲*, 宋永臣

(大连理工大学 能源与动力学院, 大连 116024)

摘 要:首次用格子 Boltzmann 方法中的伪势模型对液滴撞击固壁的动力学行为进行了数值模拟。详细研究了液滴在壁面上的流动状态以及各种因素对撞击过程的影响。通过数值模拟得到:壁面的可润湿性越小,液滴越容易发生反弹,液滴的回缩速度越快;液滴的撞击速度越大,所得到的相对直径越大,回缩速度越快;液滴的粘性越小,所得到的相对直径越大;液滴的表面张力越大,液滴越容易发生反弹现象。另外,液滴的最大相对直径与 We 数满足一定的线性关系,这些结果与前人的理论预测和实验结果完全吻合。

关键词:格子 Boltzmann 方法;伪势模型;两相流;液滴撞击固壁;数值模拟

中图分类号:O342;TU323

文献标识码:A

1 引 言

在自然界和工业生产过程中广泛存在液滴撞击固壁现象。自 1876 年 Worthington^[1]开始研究液滴撞击壁面以来,人们展开了大量的理论、实验和数值研究。理论上 Chandra 和 Avedisian^[2]以及 Pasandideh-Fard^[3]根据质量和能量守恒计算了液滴的最大散布直径。Levin 和 Hobbs^[4]实验研究了飞溅的形成,Stow 等^[5]以及 Range 等^[6]研究了表面粗糙度的影响,随着计算机技术的飞速发展,出现了大量的液滴撞击壁面动力学模型。1995 年 Fukai^[7]使用有限元方法模拟了液滴撞击平滑表面的过程,Shannon^[8]建立了一个简化的数学模型,该模型忽略了粘性力和表面张力。2000 年 Davidson^[9]使用边界积分方法研究了液滴撞击固壁的变形过程。2002 年 Pasandideh-Fard^[10]使用 VOF 界面追踪技术和连续表面张力模型(CSF)研究了金属液滴在水平和倾斜表面上的凝固过程。2003 年 Perot 和 Nallapati^[11]使用非结构移动网格方法并建立了一个新的模型模拟了自由表面的流动现象。2007 年 Hitoshi 等^[12],也利用 VOF 方法模拟液滴

撞击倾斜固体壁面现象,获得了一些有价值的结果。尽管提出了很多的计算模型,但均存在一个难题,即自由界面位置的准确追踪难以实现,从而限制了它们的应用范围。格子 Boltzmann^[13]方法是近年来发展迅速的一种计算流体力学新方法,它与以宏观连续方程为基础的传统计算流体力学方法不同,格子 Boltzmann 方法是基于流体微观模型和介观动理论方法。由于格子 Boltzmann 方法的微观粒子特性,可方便地描述相间的相互作用。在两相流方面,格子 Boltzmann 方法经历了三个主要阶段:1991 年 Gunstensen 等提出的着色模型^[14,15],1993 年 Shan 和 Chen 提出的基于均场理论的伪势模型^[16-20]和 Swift 等提出的自由能模型^[21]。但在液滴撞击壁面的数值研究中,还没有利用格子 Boltzmann 方法模拟的文献发表。本文首次使用 Shan 和 Chen 提出的伪势模型^[22],并考虑分子之间的相互作用力,研究了液滴撞击固壁的动力学行为,分析了液滴在壁面上的流动状态,并研究了不同的固壁特性和液滴特性对撞击过程的影响。

2 格子 Boltzmann 模型

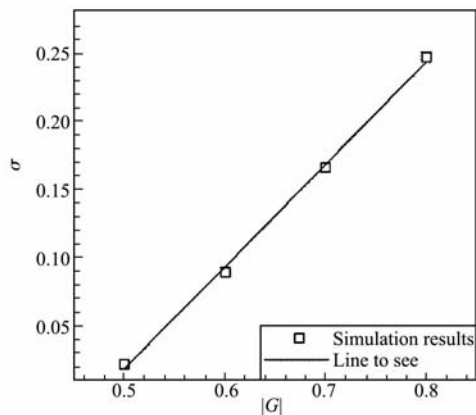
粒子的空间分布为二维九速正方形格子分布,即 D2Q9 模型,粒子的演化方程为

$$f_i(x + e_i, t + 1) - f_i(x, t) = - \frac{f_i(x, t) - f_i^{(eq)}(x, t)}{\tau}$$
$$i = 0, \dots, 8 \quad (1)$$

收稿日期:2007-09-19;修改稿收到日期:2008-04-08.

基金项目:国家自然科学基金(50476074);国家自然科学基金重点(56736001)资助项目.

作者简介:李维仲*(1956-),男,博士,教授,博士生导师
(E-mail:wzhongli@dlut.edu.cn).

图 1 表面张力系数 σ 与参数 G 的关系Fig. 1 The relation of surface tension σ with G

式中 $f_i(x, t)$ 表示在点 (x, t) 沿着 e_i 方向的粒子分布函数, $f_i^{(eq)}(x, t)$ 是局部平衡态分布函数, 方程右端为碰撞项, 采用 BGK^[13] 碰撞算子, τ 是单松弛时间, 用来控制 $f_i(x, t)$ 趋近于 $f_i^{(eq)}(x, t)$ 的速率。

平衡态分布函数遵循 Maxwell 平衡态分布函数, 即

$$f_i^{(eq)} = w_i \rho [1 + 3e_i \cdot u^{eq} + 4.5(e_i \cdot u^{eq})^2 - 1.5u^{eq} \cdot u^{eq}] \quad (2)$$

权重系数 $w_0 = 4/9, w_i = 1/9, i = 1, 2, 3, 4, w_i = 1/36, i = 5, 6, 7, 8$ 。

流体的宏观密度和速度可以表示为分布函数的统计平均, 即

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i, \rho u = \sum_{a=1}^2 \sum_{i=1}^8 f_i e_i, u^{eq} = u + \frac{\tau F}{\rho} \quad (3)$$

式中 F 表示作用在流体上的全部外力, $F = F_s + F_t + F_g$, 其中 F_s 表示分子间的相互作用力, F_t 表示流体与固壁之间的相互作用力, F_g 表示重力。

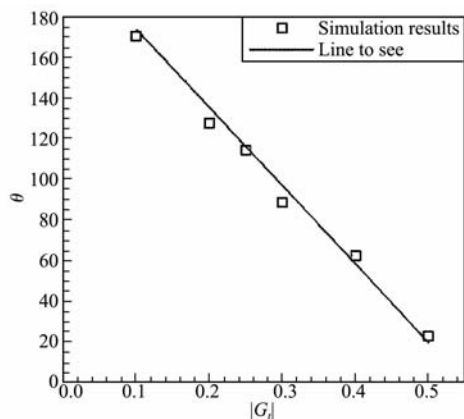
2.1 分子间的相互作用力 F_s

根据文献[16], 为了模拟处于非理想气体状态的流体, 要考虑非局部分子间的相互作用, 定义分子间的相互作用力 $F_s(x)$ 为

$$F_s(x) = -\varphi(x) \sum_{x'} G(x, x') \varphi(x') (x' - x) \quad (4)$$

$$G(x, x') = \begin{cases} G, & |x - x'| = 1 \\ G/4, & |x - x'| = \sqrt{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

式中 $\varphi(x)$ 是密度的函数, 本文取 $\varphi(\rho) = 1 - \exp(-\rho)$ 。 $G(x, x')$ 是 Green 函数, 用来控制相互作用的强度。如图 1 所示, 表面张力系数 σ 与参数 G 成线性关

图 2 接触角 θ 与参数 G_t 的关系Fig. 2 The relation of contact angle θ with G_t

系。由该模型得到的状态方程为: $p = \rho/3 + 3G\varphi^2(\rho)$, 该方程与 van der Waals 状态方程很相似, 用来描述非理想气体的状态。

2.2 流体与固壁之间的相互作用力

Martys 和 Chen^[20] 在 1996 年首先在伪势模型中引进了流体与固体之间的相互作用力 F_t , 定义如下:

$$F_t(x) = -\varphi(x) \sum_i G_{ti} s(x + e_i) e_i \quad (5)$$

$$G_{ti} = \begin{cases} G_t, & e_i = 1 \\ G_t/4, & e_i = \sqrt{2} \\ 0, & e_i = 0 \end{cases}$$

其中对于流体节点 $s = 0$, 对于固体节点 $s = 1$ 。 G_t 是用来控制流体与固壁之间相互作用强度的参数, 通过调节 G_t , 可以控制表面的可润湿能力。如图 2 所示, $|G_t|$ 越大流体与固壁之间的相互吸附能力越强, 接触角越小, 并且 $|G_t|$ 与接触角 θ 成线性关系。使用 Chapman-Enskog^[23] 多尺度展开技术, 可由格子 Boltzmann 方程得到宏观的连续性和动量方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho u = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \nabla u = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{F}{\rho} + \nu \nabla^2 u \quad (7)$$

3 数值模拟

3.1 初始条件和边界条件

计算流场的左右边界为周期性边界, 上下边界为固壁边界, 使用半程反弹方法处理。初始时刻液

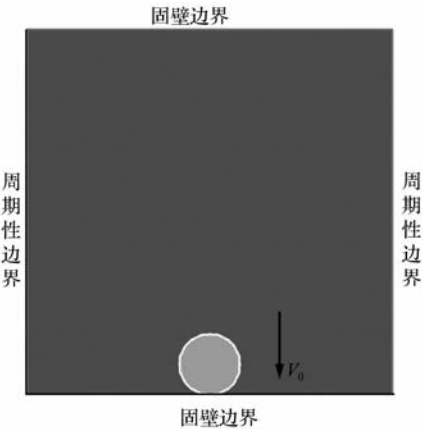


图 3 计算流场的初始条件和边界条件
Fig. 3 The initial and boundary conditions in domain

滴刚好与壁面接触,以竖直向下的速度 V_0 撞击壁面,如图 3 所示。通常用来描述液滴撞击动力学的有两个无量纲参数: $We = \rho D_0 V_0^2 / \sigma$, $Re = D_0 V_0 / \nu$ 。其中 ρ 为液滴的密度, D_0 为液滴的直径, V_0 为液滴的撞击速度, σ 为表面张力系数, ν 为流体的运动学粘度。

3.2 模拟的结果及分析

3.2.1 液滴在壁面上的流动状态分析

液滴在壁面上的流动状态可分为两个过程:一是液滴在壁面上沿着半径的方向向外扩散过程,即散布过程,如图 4(a) 所示;二是当液滴在壁面散布到最大程度后,在表面张力的作用下,液滴开始沿着半径的方向向内回缩,即回缩过程,如图 4(b) 所示。液滴撞击到壁面后,很快就会在外围形成一个翘起的边缘,随着时间的进一步演化,在 $t = 150$ 时会形成皇冠形状;在 $t = 750$ 时液滴在壁面上散布

到最大程度,它的中心部分变得很薄,最终形成一个圆盘形状;随后在表面张力的作用下,液滴开始回缩,回缩后的流体在中心部分聚合,并且形成一个向上的流动。

3.2.2 壁面特性的影响

对于同种液滴,不同的壁面对液滴的吸附力不同,即亲水与疏水表面。本文通过调节参数 G_t 研究了不同壁面特性对液滴撞击的影响。所取参数分别为 $G_t = -0.4, -0.15, -0.1, -0.02$ 。如图 5 所示,当 $G_t = -0.4$ 的时,即固体壁面和流体之间的相互作用力比较大(即为亲水表面),液滴在撞击该壁面时只发生了沉积现象,没有反弹发生。当 $G_t = -0.15$ 和 $G_t = -0.1$ 的时候,固体壁面和流体之间的相互作用力减小,当 We 数比较小的时候没有反弹发生,随着 We 数的增加得到了反弹现象,而且 $G_t = -0.1$ 的壁面开始发生反弹的 We 数比 $G_t = -0.15$ 的壁面小;当 $G_t = -0.02$ 时,固体壁面与流体之间的相互作用力非常小(即为疏水表面),当液滴撞击时,没有沉积发生,非常小的 We 数下就发生了反弹的现象。本文还研究了在 $We = 50$ 的情况下,液滴撞击不同壁面的相对直径随时间的变化,如图 6 所示,可知当 $G_t = -0.4$ 时得到的相对直径最大, $G_t = -0.1$ 的时候,液滴的回缩速度最快。对于 $G_t = -0.4$ 的壁面,液滴达到最大的直径后保持了一段时间后才开始回缩,而对于 $G_t = -0.15$ 和 $G_t = -0.1$ 的壁面,液滴达到最大直径后立即开始回缩。

3.2.3 撞击速度的影响

撞击速度不同,液滴的 We 数也就不同。本文

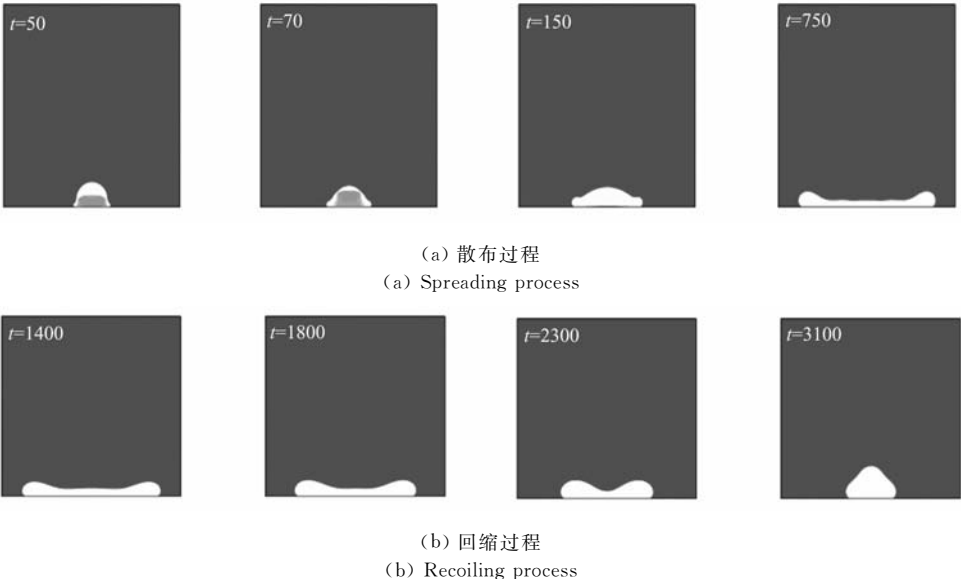


图 4 液滴在壁面上的流动状态 ($We = 90$)
Fig. 4 The flow of a droplet on solid surface ($We = 90$)

通过改变撞击初始速度 V_0 研究了不同 We 数下液滴的相对直径随时间的变化,如图 7 所示。可见随着 We 数的增加,液滴在壁面上的扩散速度和最大相对直径都增加,并且液滴的回缩速度也增加。这是因为,对于相同的液滴, We 数越大,惯性越大,根据能量守恒,液滴在壁面上扩散能量和回缩能量也越大。观察图 8 可见,液滴的最大相对直径与

$We^{1/4}$ 呈线性关系,这与 Clanet 等^[24] 的结论 $D_{\max} \propto D_0 We^{1/4}$ 完全吻合。

3. 2. 4 液滴的粘度与表面张力的影响

在格子 Boltzmann 方法中,流体粘度为 $\nu = (2\tau - 1)/6$,其中 τ 为松弛时间,通过调节 τ ,可得到不同的流体粘度, $We = 20$ 时模拟的结果如图 9 所示。

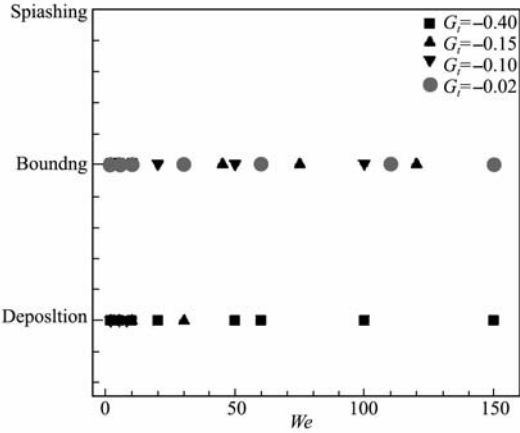


图 5 液滴撞击不同壁面的流动现象
Fig. 5 A droplet impact on different surfaces

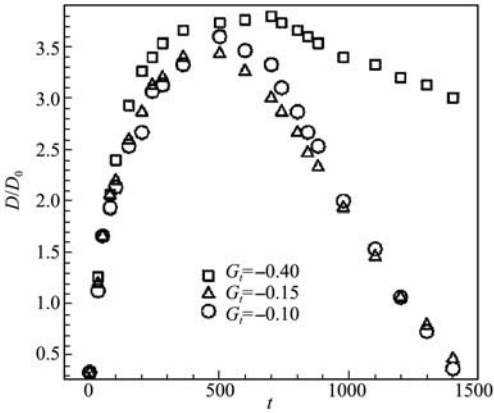


图 6 液滴撞击不同壁面相对直径演化
Fig. 6 The relative diameter evolution a droplet impacting on different surfaces

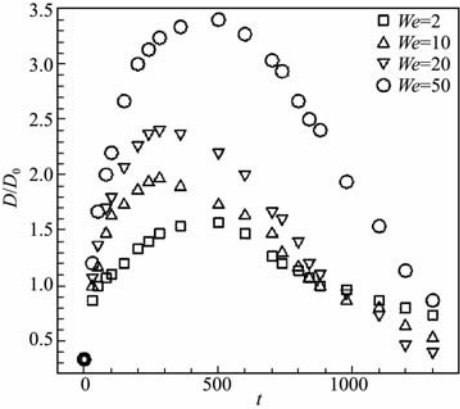


图 7 不同 We 数下液滴的相对直径随时间变化
Fig. 7 The evolution of the relative diameter of a droplet for different Weber number

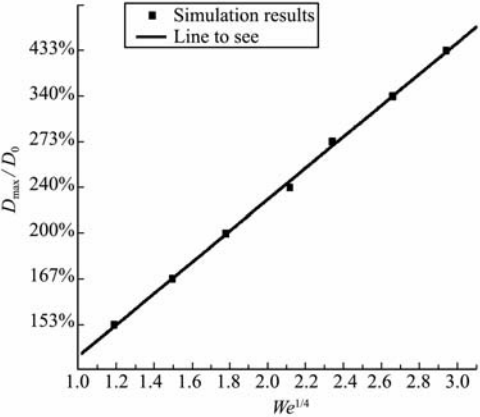


图 8 液滴的最大相对直径与 We 数的关系
Fig. 8 The relation of droplet maximal relative diameter with Weber number

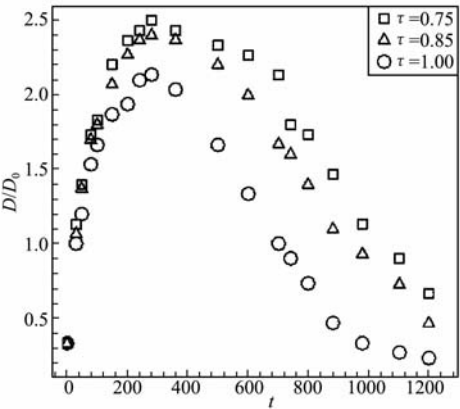


图 9 粘度对液滴撞击的影响
Fig. 9 The effect of viscosity on droplet impingement

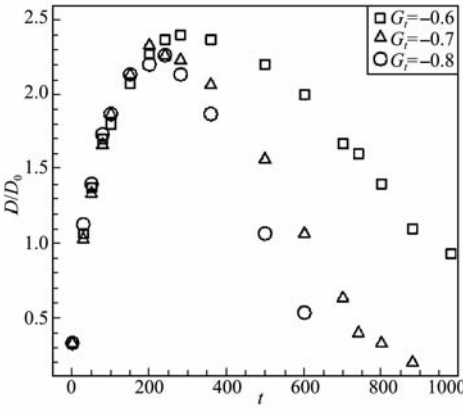


图 10 表面张力对液滴撞击的影响
Fig. 10 The effect of surface tension on droplet impingement

可见粘性越小,液滴的最大相对直径越大。这是因为在相同的惯性条件下,粘性小,液滴的粘性耗散也小,因而扩散能量大,所得到的相对直径也大。如图1所示表面张力系数 σ 与参数 G 呈线性关系,本文通过调节参数 G 模拟了在 $We = 20$ 的情况下表面张力对液滴撞击动力学的影响,如图10所示。可见表面张力对液滴的散布过程几乎没有影响,但在液滴的回缩过程中,表面张力越大回缩的越快,也就是发生反弹的可能性越大,这点结论与 Sikalo^[25]的实验研究是一致的。

4 结 论

用格子 Boltzmann 方法的伪势模型研究了液滴撞击固壁的动力学行为,得到以下结论:

(1) 对不同的固壁,液滴撞击后有两种流动状态,即沉积和反弹。在相同 We 数下,液滴与固壁之间的相互作用力越大,液滴在壁面上的散布程度越高,液滴与固壁之间的相互作用力越小,液滴越容易发生反弹现象,并且回缩的速度越快。

(2) 对相同固壁,随撞击速度增加,液滴在壁面上的扩散速度和最大相对直径均增加,且液滴的回缩速度也加快。

(3) 液滴的最大相对直径与 $We^{1/4}$ 呈线性关系。

(4) 在相同的 We 数下,粘性越小,液滴的最大相对直径越大,表面张力对液滴的散布过程几乎没有影响,但是在液滴的回缩过程中,表面张力越大回缩的越快,越容易发生反弹现象。

参考文献(References):

- [1] WORTHINGTON A M. On the form assumed by drops of liquids falling vertically on a horizontal plate [J]. *Proc R Soc Lond*, 1876, **25**:261-271.
- [2] CHANDRA S, AVEDISIAN C T. On the collision of a droplet with a solid surface[J]. *Proc Roy Soc London A*, 1991, **432**:13-41.
- [3] PASANDIDEH-FARD M, QIAO Y M, CHANDRA S, et al. Capillary effect during droplet impact on a solid surface[J]. *Phys Fluids*, 1996, **8**:650-659.
- [4] LEVIN Z, HOBBS P V. Splashing of water drops on solid and wetted surfaces; hydrodynamics and charge separation[J]. *Phil Trans R Soc Lond A*, 1971, **269**:555-585.
- [5] STOW C D, HAD"ELD M G. An experimental investigation of fluid flow resulting from the impact of a water drop with an unyielding dry surface[J]. *Proc R Soc Lond A*, 1981, **373**:419-441.
- [6] RANGE K, FEUILLEBOIS F. Influence of surface roughness on liquid drop impact[J]. *J Colloid Interface Sci*, 1998, **203**:16-30.
- [7] FUKAI J, SHIBA Y, YAMAMOTO T. Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a flat surface: Experiment and modelling[J]. *Phys Fluids A*, 1995, **7**(2):236-247.
- [8] HARLOW F H, SHANNON J P. The splash of a liquid droplet[J]. *J Appl Phys*, 1967, **38**:3855-3866.
- [9] DAVIDSON M R. Boundary integral prediction of the spreading of an inviscid drop impacting on a solid surface[J]. *Chem Eng Sci*, 2000, **55**:1159.
- [10] PASANDIDEH-FARD M, CHANDRA S, MO-STAGHIMI J. A three-dimensional model of droplet impact and solidification[J]. *Int J Heat and Mass Transfer*, 2002, **45**:2229.
- [11] PEROT B, NALLAPTI, R. A moving unstructured staggered mesh method for the simulation of incompressible free-surface flows [J]. *J Comput Phys*, 2003, **184**:192-214.
- [12] Hitoshi Fujimoto, Yu Shiotani, Albert Y. Tong, Takayuki Hama, Hirohiko Takuda. Three-dimensional numerical analysis of the deformation behavior of droplets impinging onto a solid substrate[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2007, **33**:317-332.
- [13] QIAN Y H, D'HUMIERES D, LALLEMAND P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation[J]. *Europhys Lett*, 1992, **17**(6):479-484.
- [14] ROTHMAN D H, KELLER J M. Immiscible cellular automaton fluids [J]. *J Stat Phys*, 1988, **52**:1119.
- [15] GUNSTENSEN A K, ROTHMAN D H, ZALESKI S, ZANETTI PHYS G. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids[J]. *Rev A*, 1991, **43**:4320.
- [16] SHAN X, CHEN H. Simulation of non-ideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice boltzmann equation[J]. *Phys Rev E*, 1994, **49**(4):2941-2948.
- [17] SHAN X, HE X. Discretization of the velocity space in the solution of the Boltzmann equation[J]. *Physical Review Letters*, 1998, **8**:65.
- [18] HE X, DOOLEN G D. Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice Boltzmann models for

- multiphase flows[J]. *J Stat Phys*, 2002, **107**:309-328.
- [19] SHAN X, CHEN H D. Simulation of non ideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation[J]. *Phys Rev E*, 2000, **49**:2941.
- [20] MARTYS N S, CHEN H. Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method[J]. *Phys Rev E*, 1996, **53**:743-750.
- [21] SWIFT M, OSBORN W, YEOMANS J. Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids[J]. *Phys Rev Lett*, 1995, **75**:830.
- [22] 李维仲, 李 爽. 用格子 Boltzmann 方法模拟液滴合并过程[J]. 热科学与技术, 2007, **6**(3):198-203. (LI Wei-zhong, LI Shuang. Simulation of droplets coalescence process by Lattice Boltzmann method[J]. *Journal of Thermal Science and Technology*, 2007, **6**(3):198-203. (in Chinese))
- [23] SEHGAL B R, NOURGALIEV R R, DINH T N. Numerical simulation of droplet deformation and break-up by lattice-boltzmann method[J]. *Progress in Nuclear Energy*, 1999, **34**:471-488.
- [24] CLANET C, BEGUIN C, RICHARD D. Maximal deformation of an impacting drop[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2004, **517**:199-208.
- [25] SIKALO S, MARENGO M, TROPEA C, et al. Analysis of impact of droplets on horizontal surfaces[J]. *Exp Therm Fluid Sci*, 2002, **25**:503.

A simulation of impact of droplets on solid surfaces by using the Lattice Boltzmann method

QUAN Sheng-lin, LI Shuang, LI Wei-zhong*, SONG Yong-chen

(School of Energy and Power Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: The lattice Boltzmann potential model was firstly used to simulate the droplets impacting on solid surfaces. The flow state of droplets on solid surfaces and the effects of the impact parameters on the droplet impingement have been studied. It has been observed that surface wettability has a significant influence on the droplets impacting dynamics, the less of surface wettability, the easier to rebound and the faster of the recoiling speed. The higher of the impact speed and the smaller of the liquid viscosity, the bigger of the relative diameter is. In addition, the maximal relative diameter has linearity relation with the Weber number. Simulation results are consistent with the previous theory prediction and experimental results.

Key words: Lattice Boltzmann method; potential model; two-phase fluids; droplets impacting on solid surfaces; numerical simulation