

不可混溶液滴正面碰撞的数值模拟研究

张建涛, 刘浩然, 丁航

(中国科学技术大学近代力学系, 合肥, 230027, Email: hding@ustc.edu.cn)

摘要: 液滴互相碰撞的现象广泛存在于自然界与工业应用中, 对其动力学过程的研究对科学问题的理解及工业生产的指导都有着重要的意义。本研究针对不可混溶液滴正面碰撞的动力学过程进行了直接数值模拟研究。所使用的数值方法为三相扩散界面方法。研究中重点关注了液-液之间与气-液之间的表面张力系数比值以及韦伯数对液滴正面碰撞后的最大伸展直径的影响。由于碰撞后液滴之间不可混溶界面的存在, 不可混溶液滴正面碰撞的最大伸展直径小于相同液滴正面碰撞的最大伸展直径。

关键词: 液滴碰撞; 不可混溶液体; 扩散界面法; 自适应网格

1 引言

液滴互相碰撞的现象广泛存在于自然界和工业应用之中, 对其动力学过程的研究对科学问题的理解及工业生产的指导都有着重要的意义。人们最初研究两个水滴之间的碰撞是出于对气象学上降雨问题^[1]的兴趣。随后为了更好地解决工程实践中所遇到的问题, 例如扑灭火灾, 乳化剂制备^[2], 喷墨打印, 喷雾燃烧等, 人们广泛研究了包括水在内的各种液滴相互碰撞后的动力学行为。

对于同种液滴碰撞的情况, 前人已经进行了大量研究。Ashgriz 等^[3]通过实验观测的方法探究了水滴之间的碰撞, 通过改变相对碰撞速度和液滴直径比以及撞击参数, 得到了碰撞后丰富的模态, 包括: 融合、反向分离和拉伸分离, 并给出了碰撞后模态随韦伯数和撞击参数变化的相图。Jiang 等^[4]研究了碳氢化合物液滴的碰撞问题, 发现不同于水滴碰撞, 在小韦伯数下, 碰撞后会出现回弹模态, 这是由于碰撞的液滴无法排开液滴之间的气膜, 同时他们给出了融合模态与分离模态之间的临界条件。随后, Qian 等^[5]研究了液滴周围气体组分和气体压力对碰撞结果的影响, 发现降低气体压力, 水滴碰撞会出现和碳氢化合物液滴碰撞同样的碰撞模态, 统一了之前的研究。

以上对液滴碰撞的研究中, 相撞的两个液滴均为相同的液体。近些年来, 越来越多的研究开始关注不同种类液体组成液滴之间的碰撞。Gao 等^[6]首先研究了酒精液滴和水滴之

间的碰撞问题。Chen 等^[7]和 Planchette 等^[8]实验研究了不可混溶液滴之间的碰撞。在 Planchette 等的研究中, 通过硅油液滴和水滴碰撞发现了不同于前人研究的新的碰撞结果。

对于液滴碰撞, 影响碰撞结果的因素有液滴的直径、相对碰撞速度、液滴间的撞击参数以及液滴的物性参数, 包括液滴各自的密度, 动力学黏性系数, 与环境气体之间的表面张力系数以及液滴与液滴之间的表面张力系数。为了减少影响碰撞结果的变量数目, 我们可以定义如下的无量纲数: 无量纲的撞击参数 $X = x/D$, 直径比 $\Delta = D_1/D_2$, 表征惯性力与表面张力之比的韦伯数 $We = \rho U^2 D / \sigma$, 表征惯性力与黏性力之比的雷诺数 $Re = \rho U D / \mu$ 。

我们通过数值模拟研究了高雷诺数下不可混溶液滴正面碰撞的动力学过程。在自适应网格生成软件包 PARAMESH^[9]的框架下, 使用三相扩散界面方法, 重点关注了液-液之间与气-液之间的表面张力系数比值以及韦伯数对液滴正面碰撞后的最大伸展直径的影响。数值结果和实验结果的对比验证了数值方法的准确性和收敛性。基于前人理论, 我们对能量耗散机制进行修正, 综合考虑了表面张力系数比的影响, 从而可以预测不可混溶液滴正面碰撞后的最大伸展直径, 理论预测结果与数值模拟结果符合较好。

2 数值方法

2.1 界面捕捉方法和流动控制方程

为了研究三相不可混溶流体的流动问题, 我们采用了三相扩散界面方法^[10]。在此方法中, 三相流体的界面具有有限厚度, 且通过体积分数 C 来表示。体积分数的演化方程为无量纲的 Cahn-Hilliard 方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \Psi \quad (1)$$

其中, \mathbf{u} 是无量纲的流动速度, $\mathbf{C} = (C_1, C_2)$ 是体积分数量, C_i 是流体 i 的体积分, 第三相流体的体积分 C_3 可以通过 $C_3 = 1 - C_1 - C_2$ 得到, Ψ 是无量纲的化学势。 Pe 数定义为对流通量和扩散通量之比。

流体运动的控制方程为无量纲的 N-S 方程和连续性方程:

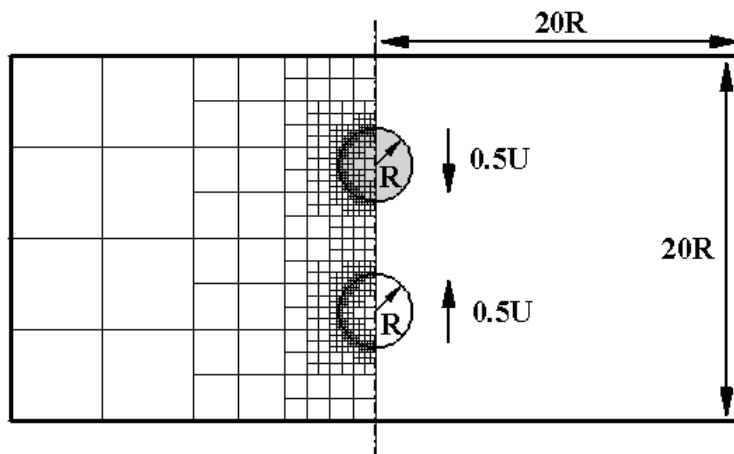


图1 数值模拟示意图与自适应网格示意图，两液滴以相对速度 U 相碰撞

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \right] + \frac{\mathbf{f}_s}{We} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3)$$

其中， \mathbf{f}_s 为表面张力， ρ 和 μ 为无量纲的密度和黏性系数，定义如下：

$$\rho = C_1 + \frac{\rho_2}{\rho_1} C_2 + \frac{\rho_3}{\rho_1} C_3 \quad (4)$$

$$\mu = C_1 + \frac{\mu_2}{\mu_1} C_2 + \frac{\mu_3}{\mu_1} C_3 \quad (5)$$

我们使用上部液滴的物性参数和液滴间相对碰撞速度定义无量纲数：雷诺数 $Re = \rho_1 U D_1 / \mu_1$ ，韦伯数 $We = \rho_1 U^2 D_1 / \sigma_{31}$ ， σ_{31} 是上部液滴和环境气体之间的表面张力系数。

2.2 三相表面张力模型

采用 Smith 等^[11]提出的方法来计算三相流体间表面张力，该方法将物理的表面

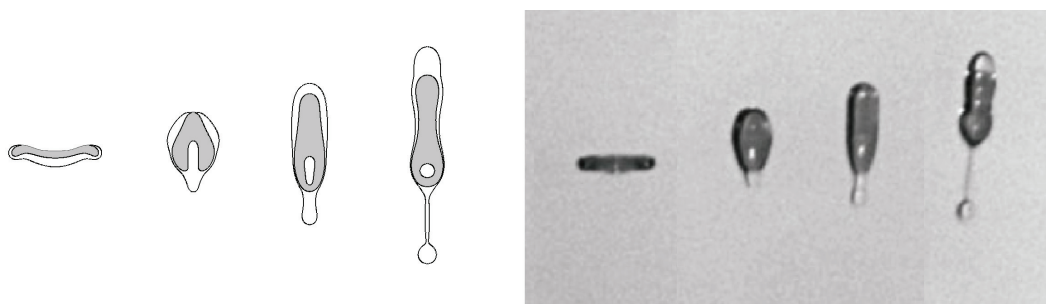


图2 数值模拟与实验结果的对比

两组无量纲参数分别为： $Re=148.3$ ， $We=51.2$ ， $\rho_2/\rho_1=1.72$ ， $\mu_2/\mu_1=0.92$ ，表面张力系数比为 $\sigma_{13}:\sigma_{23}:\sigma_{12}=70:20:35$

张力系数 σ_{ij} 分解成如下形式， σ_{ij} 是流体 i 与流体 j 之间的表面张力系数：

$$\sigma_{ij} = \lambda_i + \lambda_j \quad (6)$$

对于三相流体，我们可以得到：

$$\lambda_1 = (\sigma_{12} - \sigma_{23} + \sigma_{31}) / 2 \quad (7)$$

$$\lambda_2 = (\sigma_{12} + \sigma_{23} - \sigma_{31}) / 2 \quad (8)$$

$$\lambda_3 = (-\sigma_{12} + \sigma_{23} + \sigma_{31}) / 2 \quad (9)$$

因此，表面张力可以写成：

$$\mathbf{F}_s = \sum_{i=1}^3 \gamma_i \kappa(C_i) \nabla H(C_i) \quad (10)$$

其中 κ 是界面曲率， H 是 Heaviside 方程。

2.3 自适应网格

本研究数值模拟中采用了自适应网格，以期减少计算成本，提高计算效率。我们采用 MacNeice^[9] 开发的 PARAMESH 开源软件包来实现网格的自适应。PARAMESH 是基于 Fortran 语言和 MPI 通信协议发展的。PARAMESH 的基本功能是将现有代码便利地扩展成使用自适应网格和并行计算的程序，其中自适应网格是基于块自适应的笛卡尔网格。

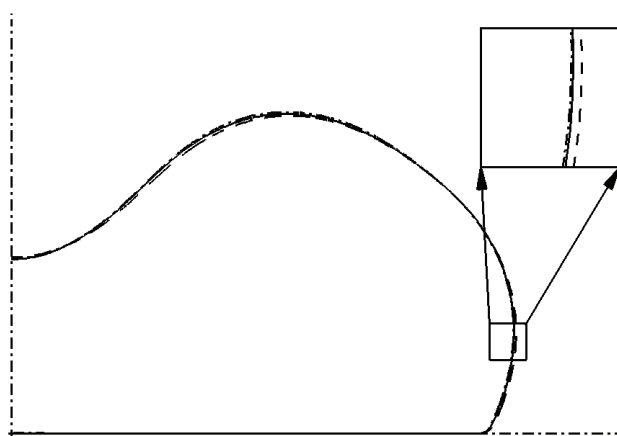


图3 不可混溶液滴正面碰撞的网格收敛性验证

无量纲参数为 $Re=1000$, $We=10$, 液-液之间与气-液之间表面张力系数比 $\gamma=1$, 无量纲时间为 $t=2.75$, 此时液滴达到最大伸展直径, 数值结果基于不同网格间距: $dx=0.0049$ (虚线), $dx=0.0039$ (实线) 和 $dx=0.0032$ (点划线)。

2.4 问题描述

本研究数值模拟的不可混溶液滴正面碰撞问题, 如图 1 所示。两个液滴直径大小相等, 均为 R , 分别以 $0.5U$ 的速度相向运动。计算区域大小为 $20R \times 20R$, 左边界为轴对称边界条件, 下边界为固壁边界条件, 上边界与右边界为远场边界条件, 数值模拟结果显示增加计算区域对计算结果没有影响。在所有算例中, 两个液滴密度相等, 动力学粘性系数相等, 与环境气体之间表面张力系数相等, 环境气体密度为液滴千分之一, 环境气体粘性系数为液滴千分之二。

2.5 数值结果验证

我们通过与 Planchette 等^[8]文章中水与硅油相撞的实验结果进行比较, 来验证我们数值模拟方法的准确性。图 2 中两组实验参数分别为 $Re=148.3$, $We=51.2$, $\rho_2/\rho_1=1.72$, $\mu_2/\mu_1=0.92$, 我们在 $dx=0.0039$ 网格分辨率和 $dt=0.0001$ 时间步长下, 计算了相同无量纲数下的算例。图 2 是不同时刻的数值模拟结果与实验结果的对比, 可以看出, 我们的计算结果在相同时间刻度与实验结果符合较好。验证结果说明了我们数值模拟方法的准确性。图 3 为网格收敛性验证, 计算采用了 3 套不同的网格, 依次是: $dx=0.0049$, $dx=0.0039$ 和 $dx=0.0032$ 。其中 $dx=0.0039$ 与 $dx=0.0032$ 的计算结果相接近, 网格收敛性较好。因此, 在以下研究中, 网格分辨率均选取 $dx=0.0039$ 。

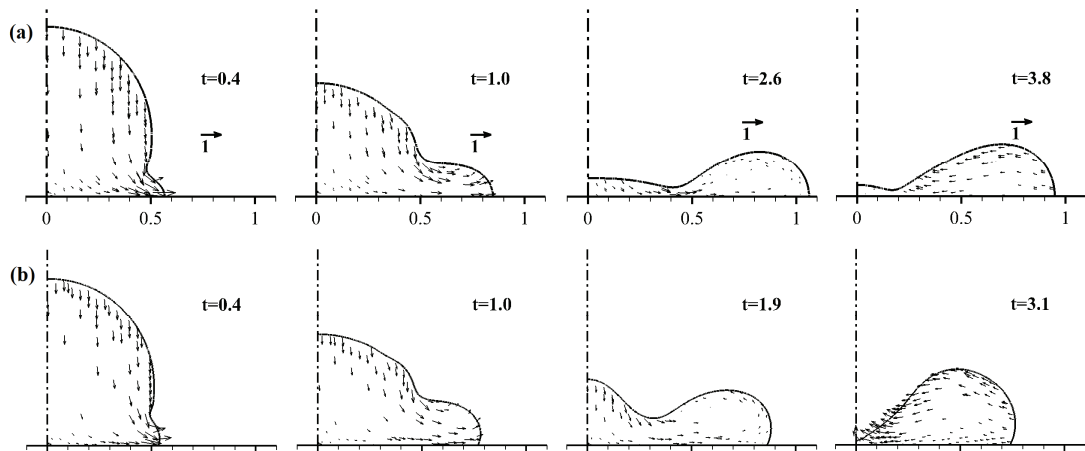


图4 不可混溶液滴正面碰撞的瞬时图

无量纲参数为 $Re=1000$, $We=50$, (a) $\gamma=0$; (b) $\gamma=1$, 每行无量纲时间从左往右分别是 $t=0.4, 1.0, t_{\max}, t_{\max}+1.2$, 其中 t_{\max} 代表液滴碰撞铺展达到最大直径的时刻, X 轴为液滴碰撞的对称面。

3 结果与讨论

除非有特别的声明, 以下数值模拟中使用的 Re 数固定为 1000, 所有的时间均通过时间尺度 D/U 作无量纲化处理, 液滴界面轮廓分别通过体积分数 $C_1 = 0.5$ 和 $C_2 = 0.5$ 来表示, 在使用的计算设置中, 当液滴之间表面张力系数 $\sigma_{12} = 0$ 时, 不可混溶液滴碰撞退化成为同种液滴碰撞。

3.1 流动特征

当相向运动的液滴互相靠近时, 液滴面对另一液滴的一侧开始逐渐变扁, 液滴之间存在有一层非常薄的气体层, 根据不同碰撞参数, 液滴与液滴之间可以捕获单个或多个微型气泡。液滴随后的运动与变形由液滴大小, 相对碰撞速度和液滴与液滴之间界面张力系数所决定, 因而, 液滴铺展和回缩的过程都会受到其影响。为了研究不可混溶液滴碰撞问题, 我们定义了韦伯数 We , 韦伯数表征着液滴动能与液滴表面能之比, 以及液-液之间与气-液之间的表面张力系数比值 $\gamma = \sigma_{31}/\sigma_{12}$ 。我们改变 We 数和 γ , 进行了一系列数值实验。

图 4 展示了在固定韦伯数 $We = 50$ 与不同表面张力系数比 ($\gamma=0,1$) 的条件下, 不可混溶液滴碰撞之后在不同时间刻的轮廓图与速度矢量图。在两个液滴碰撞的初期 ($t = 0.4$), 液滴与液滴间不可混溶的界面的存在对液滴伸展的形状没有太大的影响, 而液滴伸展前端形状有略微的不同。当 $\gamma=0$ 时, 碰撞的两个液滴为同种液滴, 从液滴对称剖面可以看出, 液滴铺展前端处切线垂直于 X 轴; 当 $\gamma=1$ 时, 两个不可混溶液滴接触后会形成三相点, 三相点的相对位置由三相表面张力系数所决定。当 $t = 1.0$ 时, 液滴伸展前端开始出现隆起, 表面张力系数比值越大, 液滴伸展越缓慢。图 4 第三纵列显示的是液滴达到最大伸展时刻时液滴形状, 我们可以观察到, ①液滴最大伸展直径, 由于额外的液-液界面的出现而减小;

②液滴达到最大伸展的时间随表面张力系数比值的增大而减小；③液滴达到最大铺展时，不可混溶液滴撞击中液滴沿对称轴高度要大于相同液滴撞击的结果，但从图中可以看到，此时液滴顶端部分流体依然保持着向下的流动速度。随后，在毛细力作用下，液滴四周的流体会向液滴中线聚拢，并形成向上的射流。

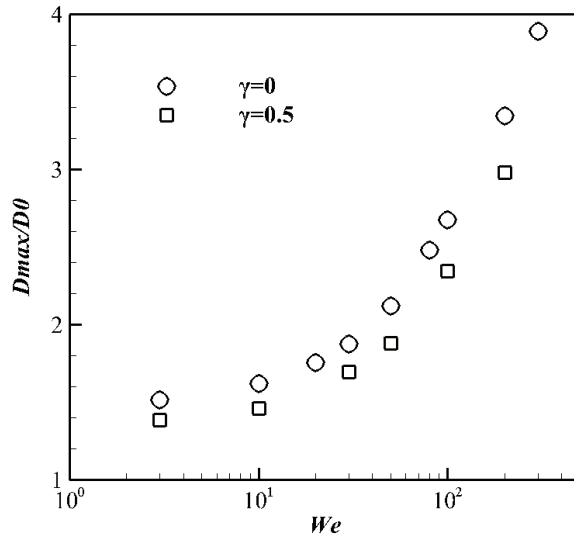


图5 不可混溶液滴正面碰撞后，不同表面张力系数比液滴的最大铺展直径随 We 数变化

3.2 液滴最大铺展

图5展示了不可混溶液滴正面碰撞之后最大伸展直径随韦伯数的变化。从图中我们可以观察到以下两点：①液滴最大伸展直径随韦伯数的增大而增大；②在相同韦伯数条件下，由于不可混溶液滴撞击造成的额外的液-液界面的存在，不可混溶液滴撞击的最大伸展直径要小于相同液滴撞击的最大伸展直径。

4 结论

本研究使用三相扩散界面方法数值模拟了不可混溶液滴正面碰撞的动力学过程，定量研究了气-液之间与液-液之间的表面张力系数比值以及韦伯数对液滴正面碰撞后的最大伸展直径的影响。由于撞击液滴之间不可混溶界面的存在，我们发现不可混溶液滴碰撞的最大伸展直径要小于相同液滴碰撞的最大伸展直径。

在研究中，我们假设了正面碰撞的两个液滴与环境气体的表面张力系数相等，且两个液滴具有相同的尺寸大小、密度和黏性系数，因此碰撞的结果是关于碰撞平面对称的。两个液滴在前述物性参数上的差异会破坏碰撞的对称性，对液滴正面碰撞的结果产生巨大的

影响。不可混溶液滴不对称的碰撞已经超过本研究的范围，后续研究有待进一步展开。

。

参 考 文 献

- 1 Brazier S P R, Jennings S G, Latham J. The interaction of falling water drops: coalescence . Proc. R. Soc. Lond. A, 1972, 326: 393-408.
- 2 Okushima S, Nisisako T, Torii T, Higuchi T. Controlled production of monodisperse double emulsions by two-step droplet breakup in microfluidic devices . Langmuir, 2004, 20: 9905-9908.
- 3 Ashgriz N, Poo J Y. Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops . J. Fluid Mech., 1990, 221: 183-204.
- 4 Jiang Y J, Umemura A, Law C K. An experimental investigation on the collision behavior of hydrocarbon droplets . J. Fluid Mech., 1992, 234: 171-190.
- 5 Qian J, Law C K. Regimes of coalescence and separation in droplet collision . J. Fluid Mech., 1997, 331: 59-80.
- 6 Gao T C, Chen R H, Pu J Y, Lin T H. Collision between an ethanol drop and a water drop . Exp. Fluids, 2005, 38: 731-738.
- 7 Chen R H, Chen C T. Collision between immiscible drops with large surface tension difference: diesel oil and water . Exp. Fluids, 2006, 41: 453-461.
- 8 Planchette C, Lorenceau E, Brenn G. The onset of fragmentation in binary liquid drop collisions . J. Fluid Mech., 2012, 702: 5-25.
- 9 MacNeice P, Olson K M, Mobarry C, Fainchtein R D, Packer C. PARAMESH: A parallel adaptive mesh refinement community toolkit . Comput. Phys. Commun., 2000, 126: 330-354.
- 10 Zhang C Y, Hang D, Gao P, Wu Y L. Diffuse interface simulation of ternary fluids in contact with solid . J. Comput. Phys., 2016, 309: 37-51.
- 11 Smith K A, Solis F J, Chopp D L. A projection method for motion of triple junctions by level sets . Interfaces Free Bound., 2002, 4: 263-276.

Numerical simulation of head-on collision of immiscible droplets

ZHANG Jian-tao, LIU Hao-ran, DING Hang

(Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei, 230027. Email: hding@ustc.edu.cn)

Abstract: The phenomena of binary droplet collision is ubiquitous both in nature world and industrial application. The investigations of the dynamics of droplet collision have crucial significance in the understanding of scientific problems and the guidance to manufacture in industry. The dynamics of head-on collision of immiscible droplets has been researched by direct numerical simulation. The ternary phase diffuse interface method has been used in our numerical simulation. We particularly focus on the influence of the ratio of the surface tension coefficient between gas and liquid to that between liquid to liquid and the Weber number on the maximum spreading diameter of droplets after head-on collision. According to the numerical results, due to the existence of a liquid-liquid interface between two droplets after head-on collision, the maximum spreading diameter of immiscible droplet collision is larger than that of identical droplet collision.

Key words: Droplet collision; Immiscible fluids; Diffuse interface method; Adaptive mesh refinement.