

容器内角处流体界面特性与 Surface Evolver 程序适用性的研究*

徐升华 王林伟 孙祉伟[†] 王彩霞

(中国科学院力学研究所, 中国科学院微重力重点实验室, 北京 100190)

(2011年11月11日收到; 2012年1月17日收到修改稿)

微重力条件下内角处液体行为的研究对于认识表面张力主导的液体行为, 预测和控制空间微重力条件下的液体位置、瞬时状态, 以及对空间流体进行有效的管理等方面都非常重要. 通过分析接触角与流体界面在容器内角处的接触线方向之间的关系, 并与 Concus-Finn 理论进行比较, 提出了内角处接触线、接触角和几何形状之间相互关联的机理, 并探讨了 Concus 和 Finn 等的相关理论结果的物理内涵. 在此基础上, 进一步将内角处的相关理论结果与 Surface Evolver 程序得出的数值结果进行了比较, 指出当容器中的内角小于 180° 时, Surface Evolver 程序通过自动划分网格即可比较准确地预言内角处的接触线和液面行为, 但是当内角大于 180° 时, 自动划分网格得到的数值结果有较大的误差, 需要通过手动划分网格减少网格奇异才能减小误差. 因此, 对于具有复杂几何形状的容器, 需注意网格的奇异性, 并对内角处的液面进行定量的验证, 才能有效判断 Surface Evolver 程序结果的正确性. 本工作对于深入认识内角处的液面特性和机理, 理解 Surface Evolver 程序的适用条件, 以及分析微重力条件下容器内角处的液体行为等方面都具有明显意义.

关键词: 接触线, 接触角, 内角, Surface Evolver

PACS: 68.03.-g, 68.03.Hj, 68.08.Bc, 47.55.np

1 引言

Bond 数是一个无量纲数, 它常被用来比较重力和表面张力的作用, 其表达式为 $Bo = \rho g l^2 / \sigma$, 其中 ρ 为密度, g 为重力加速度, l 为特征尺度, σ 为表面张力系数. 当 Bond 数大于 1 时一般认为重力为主要作用, 而当 Bond 数小于 1 时一般认为表面张力占主导. 在地面条件下, 除非体系尺度很小, 通常 Bond 数明显大于 1, 也就是重力对液体的影响明显优于界面张力的影响. 于是, 在没有其他外力的情况下, 液体的形态和流动行为主要由重力支配. 然而, 在微重力条件下, Bond 数很小^[1,2], 界面张力成为影响液面行为的主导因素, 液体的界面和流动特征与地面情况下有很大不同. 随着航天技术和空间实验研究的发展, 人们遇到了越来越多的微重力

环境下的具有气-液自由界面的体系, 因此微重力条件下的流体行为特征也越来越受到人们的重视.

微重力条件下界面的行为主要依赖于接触角和容器(固体面)的几何参数^[3]. 接触角是固、液、气三相接触线处, 固液界面经液体内部至气液界面之间的夹角, 其大小影响润湿与毛细现象, Young 方程^[4]指出接触角的大小取决于气液、气固、固液的界面张力. 在微重力或小尺度条件下, 由于界面张力成为了主要的作用力, 接触角的大小会显著地影响液体的各种行为. 因此, 在微重力空间流体管理以及微重力条件下液体的毛细流动等方面的研究中, 接触角是一个十分重要的参数^[2,3,5,6].

除了接触角之外, 固体壁面的几何特性也会显著地影响液面的形状和液体的流动^[7-9]. 虽然在重力条件下容器中的液体基本处于容器的底部, 不同的容器中液面的形状在宏观上差别并不明显, 但

* 国家自然科学基金(批准号: 11032011, 11172302)和中国科学院创新工程(批准号: KJCX2-YW-L08)资助的课题.

[†] E-mail: sunzw@imech.ac.cn

是在微重力条件下,不同形状的固体容器中液体的行为明显不同.在有些容器中只有非常特殊的液面形状才是稳定的,甚至对于有的容器或固体壁形状,在微重力条件下根本不存在稳定的构型.已有的研究表明,之所以固体壁面的几何特性或者容器形状会对微重力条件下的液面特性产生很大的影响,一个很重要的因素就是固体面之间的夹角.当内角满足一定条件时,在微重力条件下液体甚至可以在表面张力的驱动下自发地沿着内角输送.因此,微重力条件下内角处液体行为的研究对于认识表面张力主导的液体行为,预测和控制空间微重力条件下的液体位置、瞬时状态,以及对空间流体进行有效的管理等方面都非常重要.

文献 [10—15] 通过数学上的推导给出,当接触角 θ 与内角 2α 之间的关系不同时,在微重力条件和有重力条件下内角处是否存在稳定界面、稳定界面是否有界等情况有很大的不同,相关的理论结果已被落塔及空间站中进行的相关实验所证实 [7,16,17], Concus 和 Finn^[10,11] 的相关理论也成为很多内角处流体行为研究的理论基础.

最近,我们通过分析给出了内角处接触线方向和接触角之间的定量关系,提出了在内角处测量接触角的新方法,并利用此方法研究了微重力条件下动态接触角的变化规律^[18].若能建立该方法与 Concus-Finn 理论之间的联系,将可以充分证实这一新方法的合理性和明确该方法的适用条件,并帮助理解 Concus 和 Finn 等通过纯数学推导得出的相关理论的物理内涵.

由于在很多条件下的液面形状无法给出分析解,因此数值计算成为研究不同参数条件下的液面构型的重要方法, Surface Evolver^[19] 就是进行相关数值计算的一个重要的程序,它在许多学科领域都得到了广泛的应用,包括泡沫流变^[20,21]、晶粒成长^[22]、细胞膜模型^[23]等.对于微重力条件下内角处的液面特性,也常用该程序来进行研究^[8,9,16,24—26],相关的结果与 Concus 和 Finn 等的理论预测都比较一致.然而,这种比较大都是较为定性的,例如,与理论比较液面是否具有稳定的构型^[8,26],以及稳定液面构型的大致形状等^[9,16,25],因此对 Surface Evolver 能否精确地给出内角处液面的构型还缺乏定量的验证. Surface Evolver 作为一个在很多不同领域都被广泛应用的数值计算程序,定量研究其精确性以及适用条件显然是非常必

要的.

针对上述的几个问题,本文首先通过内角处接触角的全新测量方法与 Concus 和 Finn 等的理论结果比较,证实了这一新的研究接触角方法的合理性,给出了内角处接触线方向和接触角之间的定量关系的相关机理,并进一步分析 Concus 和 Finn 等的相关理论结果的物理内涵.在此基础上,本文以内角处接触线方向和接触角之间的联系为依据,定量检验了 Surface Evolver 程序在内角处的液面构型的数值结果,指出了该程序在复杂的固体面几何形状下存在的问题和产生原因.相关结果对于内角处接触角研究新方法的进一步应用、Surface Evolver 程序在内角处数值结果的精确性判断和误差分析、理论和数值计算相关的机理的理解以及接触角和内角共同影响下的微重力流体行为的研究都有重要的价值.

2 相关理论和数值计算程序

2.1 内角处接触线方向与接触角之间的定量关系

文献 [18] 中,我们通过对内角处界面的分析建立了接触角、内角以及接触线方向之间的联系,其推导过程简述如下.

如果液面与内角处的棱交于一点,且在该点存在切面,其液面示意图如图 1 所示.图 1 中的灰色曲面 ALL' 为内角处的液面,点 A 为该液面与内角处的棱的交点,则曲线 AL 和 AL' 分别是液面与容器的两个器壁的接触线.按照接触角的定义,接触线上的任意一点处的液面(气液界面)与固面(固液界面)之间的夹角都等于接触角.因为 A 点既是接触线 AL 上的点,又是接触线 AL' 上的点,因此 A 点处液面的切面 ACC' 与形成容器内角的两个固体面 ABC 与 ABC' 的夹角均为接触角 θ .

由于 DF, EF 均垂直于 AC , 因此 $\angle DFE = \theta$. $\angle DFE$ 的值与 φ 以及 α 的值有关,其中 $\varphi = \angle BAC = \angle BAC'$ 为接触线与形成内角处棱 AB 之间的夹角, $\alpha = \angle DBC = \angle DBC'$ 为内角 $\angle CBC'$ 的一半.由图 1 中的几何关系, $FE = CE \cdot \cos \varphi$, $DE = CE \cdot \cot \alpha$, 因此

$$\tan \theta = \frac{DE}{FE} = \frac{\sec \varphi}{\tan \alpha}, \quad (1)$$

(1) 式给出了接触角 θ 、内角 2α 以及接触线与棱的夹角 φ 之间的关系, 从而可以对 Surface Evolver 程序能否精确地给出内角处的液面构型进行定量的验证.

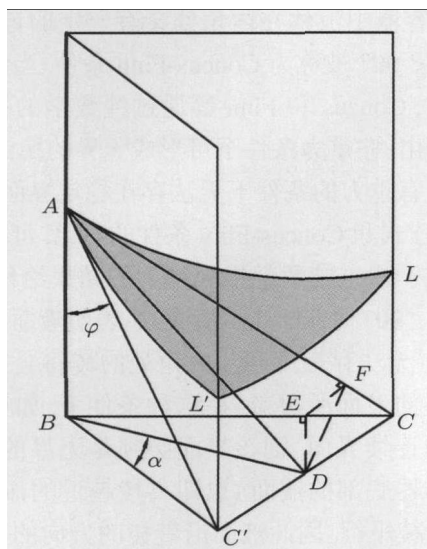


图1 内角处的液面示意图, 灰色曲面 ALL' 为液面

2.2 Concus 和 Finn 等的相关理论

Concus 和 Finn 等从纯数学的角度给出了内角处液体的界面特性与容器内角 2α 以及接触角 θ 之间的关系^[10-15]. 其相关结果表明, 当内角小于 180° , 即 α 的取值范围为 $(0, 90^\circ)$ 时, 在内角处存在有界界面且界面连续的条件是 $|\theta - 90^\circ| \leq \alpha$ ^[10-12]; 而当 α 的取值范围为 $(90^\circ, 180^\circ)$ 时, 内角处存在有界界面且界面连续的条件是 $|\theta - 90^\circ| \leq 180^\circ - \alpha$ ^[14,15].

另外, 当 θ 的取值范围为 $(0, 90^\circ)$ 时, 液体浸润于固体面, 若容器内角又小于 180° , 则容器中液体在内角处会有一定的铺展. 这样的参数范围是最常见、也是相关微重力研究最关注的情况. 对于这种情况, Concus 和 Finn 等还给出了有重力和无重力条件下的内角处液面的区别. 对于不满足 Concus-Finn 条件 $(\theta + \alpha \geq 90^\circ)$ 的情况, 液面在内角处的铺展会形成如图 1 所示的平衡液面, 因此在有重力和无重力情况下该平衡界面都是有界的. 当满足 Concus-Finn 条件 $(\theta + \alpha < 90^\circ)$ 时, 在有重力条件下内角处平衡液体界面的解存在但无界, 即存在稳定界面但在内角处铺展了非常薄的液层(或液膜); 在无重力条件下, 平衡液体界面的解将不存在, 即如果内角处的棱是无限长的话, 液体将会一直沿

着内角的棱铺展, 而不能达到平衡.

2.3 Surface Evolver 数值计算程序

Surface Evolver 程序基于最小能量原理和有限元数值分析方法, 可以方便地进行液面构型的数值计算. 由于很多情况下液面的构型无法给出分析解, 该程序就成了对液面平衡构型的相关方面进行研究的重要工具^[19]. 利用 Surface Evolver 程序可以方便地改变接触角、容器的形状、内角大小等参数, 通过数值计算来确定液面的构型, 再利用得到的结果研究液面的相关参数和性质.

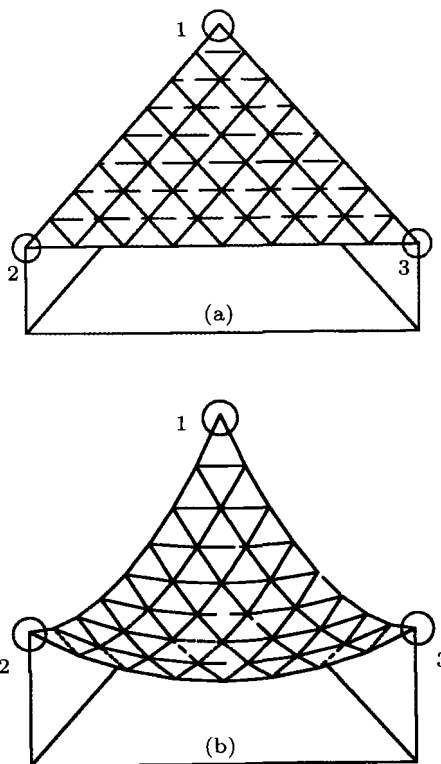


图2 Surface Evolver 程序计算液面的过程 (a) 计算前的液面; (b) 计算后的液面

在本文中, 我们针对几种不同截面形状的容器, 给定不同的接触角参数, 利用 Surface Evolver 程序来得到容器中的液体在微重力条件下的稳定液面构型. 例如在等边三角形截面容器中, Surface Evolver 程序的初始液面构型如图 2(a) 所示, 该程序将表面处理为一系列三角形组成的单纯复形, 每加一次网格, 有限三角元的个数增加为原来的四倍. 在程序计算过程中, 这些网格将在液体体积给定的情况下发生变化, 最终形成稳定的自由面, 从而能够得到给定参数下的稳定液面构型(如图 2(b)). 通过对内角处液面构型的分析(如图中的节点 1,

2, 3 处), 可以得到棱与接触线之间的夹角 φ , 由于内角 2α 和接触角 θ 都是在 Surface Evolver 程序模拟计算中的已知参数, 利用数值计算得到的 φ 值和 (1) 式可以对该程序进行定量的验证.

3 结果和讨论

3.1 理论结果与 Concus-Finn 条件对比

由前面的推导, 如果液面与内角处的棱交于一点且在该点存在切面, 则可由 (1) 式给出接触线与棱的夹角、内角和接触角之间的关系. 由于 $|\sec \varphi| \geq 1$, (1) 式的成立需要满足一定的条件, 即液面与内角处的棱交于一点需要满足一定条件. 将 (1) 式变为

$$\sec \varphi = \tan \theta \cdot \tan \alpha, \quad (2)$$

则当 $0 < \alpha < 90^\circ$ 时, $\tan \alpha > 0$, 由 $|\sec \varphi| \geq 1$ 得 $\tan \alpha / \tan |\theta - 90^\circ| \geq 1$, 由于 α 和 $|\theta - 90^\circ|$ 的取值范围都在 $(0, 90^\circ)$ 内, 正切函数在该范围内为正且单调递增, 因此得出 $|\theta - 90^\circ| \leq \alpha$. 这表明图 1 中所示的液面如果能存在, 就必须满足这一条件. 根据 Concus 和 Finn 等通过纯粹的数学分析得到的结果, 当内角小于 180° , 即 α 的取值范围为 $(0, 90^\circ)$ 时, 在内角处存在有界面且界面连续的条件是 $|\theta - 90^\circ| \leq \alpha$. 因此, (1) 和 (2) 式的定量关系与 Concus 和 Finn 等的理论完全一致. 类似地, 当 $90^\circ < \alpha < 180^\circ$ 时, $\tan \alpha < 0$, 由 (2) 式可以得到 $\tan(180^\circ - \alpha) / \tan |\theta - 90^\circ| \geq 1$, 因此有 $|\theta - 90^\circ| \leq 180^\circ - \alpha$. 这也与相关的理论所指出的“当 α 的取值范围为 $(90^\circ, 180^\circ)$ 时, 内角处存在有界面且界面连续的条件是 $|\theta - 90^\circ| \leq 180^\circ - \alpha$ ”这一结果完全一致.

这一结果验证了 α , θ 和 φ 之间的定量关系即 (1) 式的正确性. 这也表明, 在文献 [18] 中, 利用 (1) 式所建立的内角处接触角的研究方法是有效的. 该结果还进一步给出了 (1) 式的适用条件, 即 $0 < \alpha < 90^\circ$ 且 $|\theta - 90^\circ| \leq \alpha$, 或者 $90^\circ < \alpha < 180^\circ$ 且 $|\theta - 90^\circ| \leq 180^\circ - \alpha$, 从而为文献 [18] 提出的内角处接触角测量方法的合理和准确应用提供了基础.

此外, 这一结果还建立了定量验证 Surface Evolver 程序在内角处的液面数值结果的有效判据. 在下一节中, 我们将利用这一判据来研究 Sur-

face Evolver 数值结果的精确性和适用性.

微重力条件下流体在内角处界面特性的研究中, 比较受关注的是 α 与 θ 的取值范围都为 $(0, 90^\circ)$ 的情况, 此时液体浸润于固体面, 若容器内角又小于 180° , 容器中液体在内角处会有一定的铺展. 此时 $\theta + \alpha < 90^\circ$ 被称为 Concus-Finn 条件, 当满足这一条件时, Concus 和 Finn 等通过纯数学的推导从理论上给出, 在重力条件下可形成无界的稳定界面, 但是在没有重力的条件下无法存在稳定界面. 利用本文中 (1) 式和 Concus-Finn 条件的对比, 可以从物理上对这一通过纯数学推导得到的结果给出解释: 当 $\theta + \alpha < 90^\circ$ 时, (1) 式不能成立, 表明液面的铺展使得 A 点无法存在, 因此, 内角处的棱将会完全被连续铺展的液面所覆盖. 在这种条件下, 如果能存在稳定的连续界面, 则该界面必须是无界的, 那么在远离容器底部的液面 (也即离棱越近的液面) 将趋向于与棱平行, 因此液面沿着棱的方向的曲率趋于 0. 此时, 接触角只影响液面垂直于棱的方向的曲率. 当液体薄层厚度越小时, (给定接触角的) 液面的曲率半径越小, 曲率越大, 对于无界的界面来说, 越远离容器底部, 液体薄层厚度越接近 0, 因此离容器底部无穷远处, 液面的垂直于棱方向的曲率将趋向于无穷大. 这样, 满足 Concus-Finn 条件的液面无法保证处处曲率相等, 因而在微重力条件下无法存在稳定的液面 (微重力条件下界面的曲率应处处相等), 而在有重力条件下, 则可以存在无界的稳定界面.

3.2 理论结果与 Surface Evolver 数值模拟结果对比

上一节的分析给出了 (1) 式, 即在内角处可以存在有界连续液面的条件, 对于满足该条件的不同的 θ 和 α 的参数值, Surface Evolver 程序都能给出稳定液面形状的数值结果, 再按照 2.3 节的分析, 可以得到 φ 的数值, 将其与 (1) 式进行比较就能定量验证 Surface Evolver 程序给出的内角处界面形状的准确性.

3.2.1 $0 < \alpha < 90^\circ$ 的情况

对于这一情况, 我们选取了横截面分别为等边三角形、正方形以及长宽比为 1:3 的矩形的三种竖直容器, 并分别选取浸润 ($\theta < 90^\circ$) 和不浸润 ($\theta > 90^\circ$) 的接触角条件, 利用 Surface Evolver 程

序进行了数值计算, 并与 (1) 式的结果进行了比较, 结果的对比见表 1. 相应的几个典型的液面的数值结果如图 2—图 4 所示, 其中, 液面的网格划分都是 Surface Evolver 程序根据截面的形状自动划分的. 图 2 给出了等边三角形容器中利用 Surface Evolver 程序进行计算的初始液面和最终得到的稳定液面情况, 接触角等于 70° . 图 3 和图 4 给出的是 Surface Evolver 程序得到的另外两种条件下的最终液面情况. 图 3 为截面为正方形的容器, 接触角为 54° (浸润). 图 4 为截面为 1:3 长宽比的矩形容器, 接触角为 128° (不浸润).

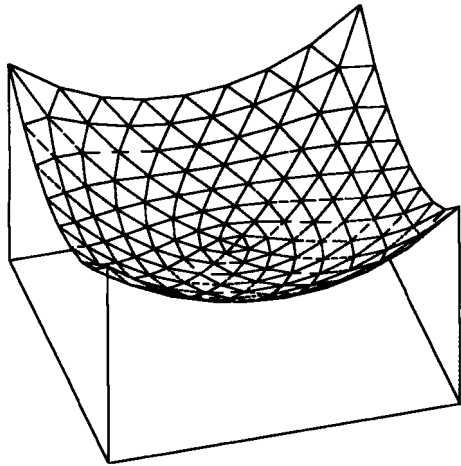


图 3 正方形截面容器中液面

容器, 如 θ 为 54° 的情况时, θ_{theo} 的值为 57.5° , 差别有 3.5° . 虽然这一差别不是很大, 但也比等边三角形和正方形截面的差别要明显得多. 这表明对于内角均小于 180° 的容器, 容器越接近于正多边形, Surface Evolver 对于内角处的数值结果越精确. 通过和 θ_{evol} 的对比还可发现, 其数值为 56.5° , 与 θ_{theo} 更为接近, 而与 θ 的值有一定偏差. 这一结果说明, 内角处的 (面) 网格与 (1) 式还是非常符合的, 而 θ_{theo} 与 θ 之间的差别主要是由于 Surface Evolver 程序得到的内角处 (面) 网格与壁面的接触角 θ_{evol} 的误差而引起的. 对于接触角大于 90° 的不浸润液体, 其结果也比较类似.

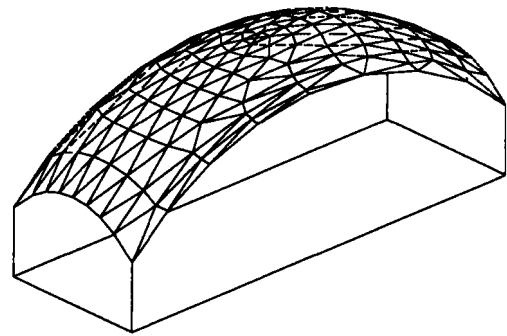


图 4 矩形截面 (长宽比为 1/3) 容器中的液面

表 1 中, θ 和 α 分别为 Surface Evolver 进行计算时给定的相关参数, φ_{evol} 是通过 Surface Evolver 程序计算得到的内角处的 φ 值, 而 θ_{theo} 是利用 φ_{evol} 和 (1) 式计算得到的接触角的值, 误差一列给出的是 θ_{theo} 和 θ 之间的误差. 为了分析误差的来源, 我们在 θ_{evol} 一列还给出了 Surface Evolver 程序得到的内角处的界面 (网格) 与固体壁面之间的接触角.

从表 1 的结果可以看出, 对于等边三角形和正方形的截面, 无论是浸润还是不浸润的液体, θ_{theo} 和 θ 都很接近. 但是对于 1:3 的长方形截面

这一结果表明, 对于内角小于 180° 的情况, Surface Evolver 程序可以通过自动划分网格, 在内角处得到较为精确的液面, 其内角处的接触线方向与接触角的关系基本满足 (1) 式这一定量判据.

3.2.2 $90^\circ < \alpha < 180^\circ$ 的情况

对于这一情况, 我们选取了两个三角形对接的截面, 并对截面中 $90^\circ < \alpha < 180^\circ$ 的内角处的液面进行了分析, 两种截面的示意图和相关参数列在表 2 中. 相关的结果与 (1) 式的对比也在表 2 中列出, 表 2 中的各参数的意义与表 1 相同. 但与表 1 相比, 表 2 中增加了网格划分方式和网格数两列.

表 1 $0 < \alpha < 90^\circ$ 的情况下, 针对不同截面的容器 Surface Evolver 程序得到的内角处界面的相关参数结果

序号	截面形状	截面示意图	θ	2α	φ_{evol}	θ_{theo}	误差 /%	θ_{evol}
1	矩形 1/1	□	54°	90°	45.4°	54.9°	1.7	54.4°
2	矩形 1/1	□	128°	90°	139.0°	127.0°	0.7	127.6°
3	矩形 1/3	▭	54°	90°	50.4°	57.5°	6.1	56.5°
4	矩形 1/3	▭	128°	90°	132.8°	124.2°	3.0	125.6°
5	等边三角形	△	70°	60°	51.0°	70.1°	0.1	70.1°
6	等边三角形	△	118°	60°	153.8°	117.4°	0.5	117.4°

不同的网格划分得到的液面形状结果如图 5 所示. 其中图 5(a)—(c) 为初始网格划分情况, 图 5(d)—(f) 为根据相应的网格增加网格数后, 利用 Surface Evolver 程序得到的液面. 图 5 中的参数条件均为 $\theta = 70^\circ$, $\alpha = 120^\circ$, 不同初始网格划分情况下的网格数目在表 2 中列出. 从图 5(d)—(f) 的定性比较可以看出, 无论初始网格如何划分, 最终的液面形状基本相同. 因此, 若没有定量判据 (1) 式, 而按照以往的方式^[24] 进行定性的比较, 则无法判断不同的网格划分所得到的结果的精度.

从表 2 中利用 (1) 式得到的结果的定量对比可以看出, 对于自动划分网格的结果, θ_{theo} 和 θ 的差别相当大. 虽然我们尝试增加网格数目和迭代次数, 但也无法减小误差, 说明该差别主要是由网格划分的奇异性所导致的. 与 $\alpha < 90^\circ$ 的情况不同, 此时 θ_{evol} 和 θ 很接近, 这说明在内角处的 (面) 网格本身与 (1) 式并不相符. 从图 5 中可以看出, 容

器内角大于 90° 与内角小于 90° 处的分别是凸面和凹面, 因此整个液面的曲率要发生负曲率向正曲率的变化, 导致在大于 180° 内角处的曲率变化较大, 另外, 在内角处的液面被划分了 4 个以上的网格, 并且网格存在一定的奇异性. 因为这一原因, 曲率的变化使得 Surface Evolver 程序在进行能量最低的计算过程中不能保证这四个网格在同一平面, 也即网格的自动划分使得该程序不能在大于 180° 的内角处准确显示 $|\theta - 90^\circ| \leq 180^\circ - \alpha$ 条件下理论和 (1) 式所指出的液面的连续特性. 因此, 当 α 大于 90° 时, 无法通过自动划分网格准确预测液体在内角处的界面.

图 5(b) 所示的网格手动划分使得初始网格均为等边三角形, 得到的液面相关结果在表 2 的第二行列出, 与图 5(a) 所示的自动划分相比, 虽然其网格数比较少, 但得到的 θ_{theo} 和 θ_{evol} 的值都和 θ 很接近, 说明手动划分大大消除网格奇异之后, 可以得到精确的内角处液面.

表 2 $90^\circ < \alpha < 180^\circ$ 的情况下, 不同网格划分时 Surface Evolver 程序得到的内角处界面的相关参数结果

序号	截面形状	示意图	网格划分方式	网格数	θ	2α	φ_{evol}	θ_{theo}	误差 / %	θ_{evol}
1	对接三角形		程序自动划分 (图 5(a))	512	70°	120°	96.0°	79.7°	13.8	72.6°
2	对接三角形		正三角形拼接 (图 5(b))	256	70°	120°	101.3°	71.3°	1.8	72.2°
3	对接三角形		在自动划分基础上减少奇异 (图 5(c))	896	70°	120°	96.6°	78.8°	12.5	73.9°

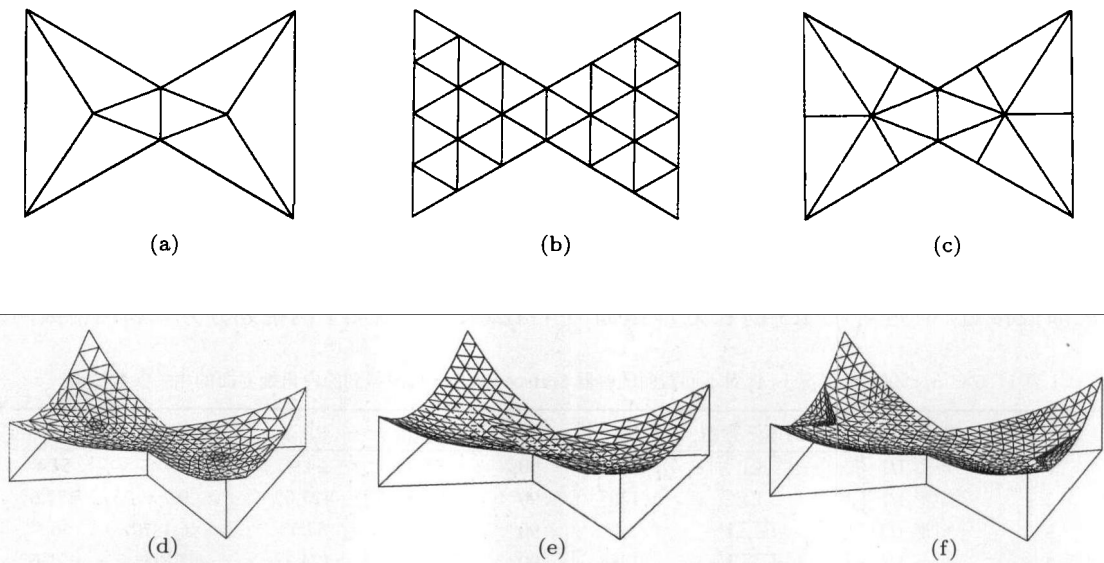


图 5 截面为对接三角形的容器的液面网格划分与 Surface Evolver 得到的液面构型 (a)—(c) 不同的网格划分示意图; (d)—(f) 相应的液面结果

手动划分减少网格奇异有多种方式, 在图 5(c) 所示的网格中, 我们在自动划分网格基础上增加了三条垂线, 它可以完全消除图 5(a) 中的钝角三角形网格, 从而减少了网格奇异. 然而, 这种网格划分得到的结果与图 5(a) 的结果类似, 其在内角处的误差仍然很大, 具体结果在表 2 的第三行给出.

这些结果表明, 网格的划分对大于 180° 的内角处液面的结果影响很大. 对于图 5 中所给出的容器截面, 可以通过图 5(b) 所示的划分方式得到精确的液面结果. 但事实上, 对于具有更复杂几何条件的容器, 很难通过划分界面完全消除网格奇异, 例如存在非常小的内角的情况, 必定存在较奇异的网格. 从图 5(c) 得到的结果可以看出, 有些减小奇异的网格划分并不能起到减小误差的作用. 因此, 对于复杂的容器, 在用 Surface Evolver 程序进行计算时, 不仅需利用手动划分网格尽量减少奇异, 而且还需将结果进一步与 (1) 式进行比较以定量判断手动划分的网格是否可以得到精确的内角处液面.

4 结论

通过对内角处接触线方向和接触角、内角之间的关系与 Concus-Finn 等的理论的对比, 明确了该定量关系成立的适用条件, 验证了其正确性, 此外还分析了 Concus 和 Finn 等的相关理论结果的物理内涵. 这对于理解液体在微重力条件下内角处的行为特性具有一定的理论价值, 也可为微重力条件

下内角处流体行为的实验研究和 (1) 式的进一步应用提供基础.

在这些理论分析的基础上, 我们以 α , θ 和 φ 之间的理论关系为判据定量地研究了在微重力条件下液面分析中广泛采用的 Surface Evolver 程序在内角处的适用性, 解决了该程序一直缺乏定量验证的问题. 本文的结果表明, 对于内角均小于 180° 的容器, Surface Evolver 可通过自动划分网格的方式在内角处得到比较精确的液面结果, 并且容器截面越接近于正多边形, Surface Evolver 程序在内角处的数值结果越精确. 对于和正多边形差别较大的容器, 内角处数值结果的误差主要是因为内角处的 (面) 网格与壁面的接触角存在一定的误差而引起的. 而对于内角大于 180° 的情况, Surface Evolver 程序通过自动划分网格得到的内角处液面的数值结果误差很大, 并且无法通过增加网格数目和迭代次数来减小误差, 只有有效地减小划分网格的奇异才可得精确的结果. 通过对不同的网格划分结果进行比较, 我们还发现, 虽然有些网格划分可减少奇异, 但仍不能非常精确地给出内角处的液面情况. 因此, 对于复杂的容器, 在用 Surface Evolver 程序进行计算时, 除了注意减少网格奇异之外, 还需将结果进一步与 (1) 式这一定量判据进行比较, 才能确定网格划分是否合理, 以及能否得到精确的内角处液面. 这一结果也为 Surface Evolver 程序在内角处的液面特性研究的应用中相关参数的选取、液面精确度判断以及误差分析等方面提供了有用的参考.

- [1] Ostrach S 1982 *Ann. Rev. Fluid Mech.* **14** 313
- [2] Stange M, Dreyer M E, Rath H J 2003 *Phys. Fluids* **15** 2587
- [3] Finn R 1999 *Not. AMS* **46** 770
- [4] Young T 1805 *Philos. Trans. R. Soc. London* **95** 65
- [5] Liu Y X, German R M 1996 *Acta Mater.* **44** 1657
- [6] Wang C X, Xu S H, Sun Z W, Hu W R 2010 *AIAA J.* **47** 2642
- [7] Weislogel M M, Lichter S 1998 *J. Fluid Mech.* **373** 349
- [8] Chen Y K, Collicott S H 2004 *AIAA J.* **42** 305
- [9] Bolleddula D A, Chen Y K, Semerjian B, Weislogel M M 2010 *Microgravity Sci. Technol.* **22** 475
- [10] Concus P, Finn R 1969 *Appl. Math. Sci.* **63** 292
- [11] Concus P, Finn R 1974 *Acta Math.* **132** 177
- [12] Simon L 1980 *Pacific J. Math.* **88** 363
- [13] Tam L F 1986 *Pacific J. Math.* **124** 469
- [14] Shi D Z 2006 *Pacific J. Math.* **224** 321
- [15] Lancaster K, Athanassenas M 2008 *Pacific J. Math.* **234** 201
- [16] Wang C X, Xu S H, Sun Z W, Hu W R 2010 *Int. J. Heat Mass Transer* **53** 1801
- [17] Concus P, Finn R, Weislogel M 2000 *Exp. Fluids* **28** 197
- [18] Xu S H, Wang C X, Sun Z W, Hu W R 2011 *Int. J. Heat Mass Transfer* **54** 2222
- [19] Brakke K A 1992 *Exp. Math.* **1** 141
- [20] Huang J, Sun Q C 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6124 (in Chinese) [黄晋, 孙其诚 2007 物理学报 **56** 6124]
- [21] Zhou X H, Zhang S G, Yang J Q, Qu X M, Liu Y S, Wang S G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6137 (in Chinese) [周晓华, 张劭光, 杨继庆, 屈学民, 刘渊声, 王斯刚 2007 物理学报 **56** 6137]
- [22] Wearire D, Mcurry S 1996 *Solid State Phys.* **50** 1
- [23] Zhou X H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 058702
- [24] Brakke K A 1996 *Philos. Trans. R. Soc. A* **354** 2143
- [25] Weislogel M M, Jenson R, Chen Y K, Collicott S H, Klatte J, Dreyer M 2009 *Acta Astronat.* **65** 861
- [26] Kamali M E, Schotté J S, Ohayon R 2010 *Comput. Mech.* **46** 169

The study on the mechanism of liquid surface in interior corner and the applicability of Surface Evolver*

Xu Sheng-Hua Wang Lin-Wei Sun Zhi-Wei[†] Wang Cai-Xia

(Key Laboratory of Microgravity, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(Received 11 November 2011; revised manuscript received 17 January 2012)

Abstract

The study on the fluid behavior under microgravity condition is of great importance for the investigation of the fluid behavior caused by surface tension, the prediction and control of the liquid location at microgravity, the fluid management in space, etc. In this study, we analyze the relationship between the contact angle and the direction of the contact line in interior corner of container, and compare it with the Concus-Finn theory. The mechanism of mutual correlation among the direction of contact line, the contact angle and the geometric shape of container, and the physical meaning of relevant theory by Concus and Finn etc. are also analyzed. By comparing the theoretical results with the numerical results calculated by Surface Evolver, we find that the Surface Evolver program can predict the contact line and the liquid surface in interior corner with angle smaller than 180° , simply by the automatically partitioned grid. However, when the angle of the interior corner is larger than 180° , the results given by Surface Evolver can have a remarkable error with the automatically partitioned grid. In order to reduce the error, it is necessary to manually partition the surface to reduce the singularity of grid. And the results from Surface Evolver should be tested quantitatively at the interior corners for complicated containers. The theoretical analysis and the numerical results calculated by Surface Evolver in this study will be helpful for understanding the characteristics and mechanism of liquid surface in interior corner, choosing the applicable parameters for Surface Evolver program, and the future study on the behavior of liquid in interior corner, especially under microgravity condition.

Keywords: contact line, contact angle, interior corner, Surface Evolver

PACS: 68.03.-g, 68.03.Hj, 68.08.Bc, 47.55.np

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11032011, 11172302) and the Knowledge Innovation Program of the Chinese Academy of Sciences (Grant No. KJCX2-YW-L08).

[†] E-mail: sunzw@imech.ac.cn