

介观尺度通道内多相流动的耗散粒子动力学模拟*

刘汉涛¹⁾ 刘谋斌²⁾ 常建忠^{1)†} 苏铁熊¹⁾

1) (中北大学机电工程学院, 太原 030051)

2) (中国科学院力学研究所, 北京 100190)

(2012年9月7日收到; 2012年10月22日收到修改稿)

采用四次方光滑函数构造了包含远程吸引近距排斥的保守力势函数, 应用该势函数, 采用耗散粒子动力学方法, 对十字型微通道内的多相流动进行了计算. 计算结果表明, 该势函数能有效模拟十字型微通道内的流动过程及模式.

关键词: 多相流, 耗散粒子动力学, 保守力势函数

PACS: 47.61.-k, 47.11.-j

DOI: 10.7498/aps.62.064705

1 引言

微观或介观尺度下多相流体流动包含复杂的流体动力学特性, 对于现代微纳米工程、生物工程、水资源及环境工程具有极为重要的作用. 然而目前由于实验研究和数值模拟的局限性, 对其复杂的流动特性还未能很好地理解和掌握^[1-3].

耗散粒子动力学最初是由 Hoogerbrugge 和 Koelman^[4,5] 在研究悬浮时引入的, 并结合了分子动力学、格子气自动机和格子-波尔兹曼方法的优点. Espanol 和 Warren^[6], Marsh 等^[7] 的工作奠定了耗散粒子动力学 (DPD) 方法在统计力学方面的基础, DPD 方法已成功应用于高分子溶液、胶体及多相流的模拟. 与光滑粒子动力学 (SPH) 方法相比, DPD 方法主要区别在于粒子间的相互作用力除耗散力外还包含了随机力和保守力, 随机力引起粒子间的随机振动, 增加系统的动能, 提高系统的温度, 这种振动只有在微观尺度时才凸显出来, 这使 DPD 方法本质上成为一种介观尺度上的模拟技术. 国内采用 DPD 方法对简单单相流体的流动及液滴的破碎和碰撞进行了模拟^[8], 国外 DPD 应用于多相系统的研究也只局限于相分离、不同相在界面处排斥的界面过程. Visser 等^[9] 通过控制相互作用的粒

子间耗散力近似不同粒子间黏度, 对两种不同黏度的流体系统进行了研究. 模拟中采用将不同相的流体通过镜面反射在分界面上严格分开, 但实际上不同相的流体在界面上可以相互渗透, 粒子可以通过界面进行扩散.

DPD 方法一般采用传统平方形式的权函数 $(1-r/r_c)^2$, 或为提高系统施密特数, 耗散力权函数和随机力权函数的形式可以采用如下形式:

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2 = \begin{cases} (1-r/r_c)^{1/2} & r < r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases}, \quad (1)$$

式中, r_c 为截距, 粒子-粒子间的两两相互作用力局限在有限的截距内. 耗散力权函数和随机力权函数采用上述形式时, 粒子间表现为纯排斥性的作用力, 导致 DPD 粒子在计算区域内因相互排斥而分散开来, 从而占据整个计算区域. 因此, 基于这种纯排斥性权函数的 DPD 方法实际上模拟的是气体. 虽然有的研究者利用传统的 DPD 方法做了一些研究, 这些研究都是基于模拟多组分系统性液-液和液-固交接面, 而非单一组分下带有液-气共存流体动力学特性. 因此传统的带纯排斥性权函数的 DPD 方法不能模拟带有液-气共存的多相流体或带有自由表面的流动.

* 国家自然科学基金 (批准号: 50976108) 和山西省国际科技合作项目 (批准号: 2011081040) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: changjz01@nuc.edu.cn

2 DPD 方法及参数

文中 DPD 方法的基本思想、控制方程及数值方法可参见文献 [8].

文献 [10—12] 采用光滑粒子动力学的分段光滑三次函数, 通过叠加不同作用强度和截距, 构造了一种部分区域为正、部分区域为负的函数, 作为 DPD 模型中粒子间相互作用的保守力势函数, 本文采用 Liu^[13] 提出的四次方光滑函数:

$$W(r) = W(r, r_c) = \alpha_d \begin{cases} 1 - \frac{27}{16} \left(\frac{2r}{r_c}\right)^2 + \frac{57}{48} \left(\frac{2r}{r_c}\right)^3 - \frac{15}{64} \left(\frac{2r}{r_c}\right)^4 & 0 \leq \frac{2r}{r_c} \leq 2, \\ 0 & \frac{2r}{r_c} > 2, \end{cases} \quad (2)$$

式中, r_c 为截距, 根据正则化或归一化条件要求 $\int W(|r|) dr = 1$, 在一维、二维和三维空间中, α_d 分别取为 $1/h$, $15/7\pi h$, $315/208\pi h^3$.

构造势函数:

$$U(r) = a(AW_1(r, r_{c1}) - BW_2(r, r_{c2})), \quad (3)$$

式中, $W(r, r_{c1}), W(r, r_{c2})$ 为 (2) 式所表示的未正则化的四次函数, r_{c1}, r_{c2} 分别是权函数的截距, A, B 为权函数常系数, a 为粒子间相互作用力系数. 图 1 为取不同截距、不同系数时的势函数.

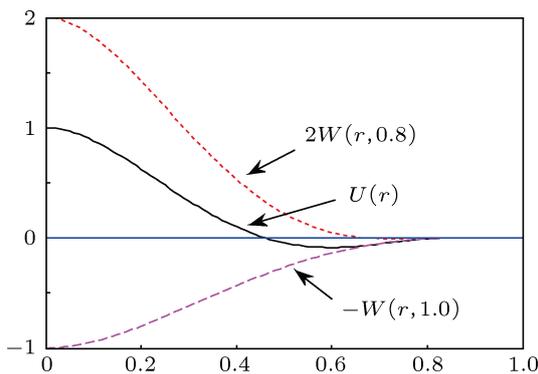


图 1 $a = 1, A = 2, r_{c1} = 0.8, B = -1, r_{c2} = 1.0$ 时四次方函数及新构造的势函数 $U(r)$

与三次函数相比, 四次函数具有更高的精确性、稳定性, 并且是一条连续函数, 而不是分断连续的函数.

DPD 模型中保守力权函数是势函数的导数:

$$w^c = -U'(r) = -a(AW_1'(r, r_{c1}) - BW_2'(r, r_{c2})). \quad (4)$$

如图 2 所示, 可以看出, DPD 粒子近时表现为排斥形式, 距离趋远时表现为吸引形式. 这种远程吸引近距排斥的势函数, 使得模拟液气共存的多相流动过程成为可能. 本文利用新构造的保守力势函数, 对流体流过十字型通道进行了计算. 计算过程中采用的 DPD 参数如表 1 所示.

表 1 模拟过程中采用的 DPD 参数

模拟参数	符号	参数值
流体密度	ρ	4
流体与流体间保守力系数	a_f	18.75
耗散力系数	γ	4.5
随机力系数	δ	3.0
系统温度	$k_B T$	1
作用强度系数	A	2
作用强度系数	B	-1

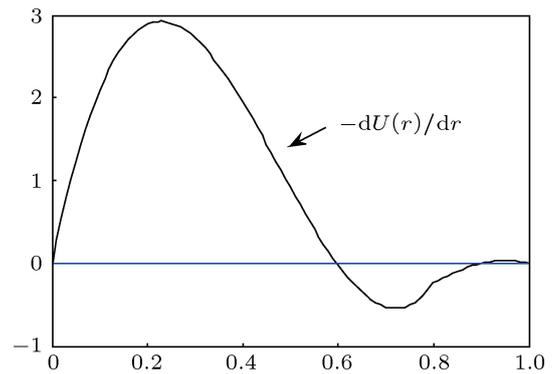


图 2 由 $U(r)$ 函数构造的 DPD 粒子间相互作用的保守力

3 算例及分析

计算时首先将粒子注射到 $40 \times 40 \times 3$ 的计算区域, 粒子密度 $\rho = 4$, 达到平衡后, 只保留计算边界一个 DPD 单位的粒子, 冻结作为十字型固壁边界, 因而固壁粒子是随机布置, 与采用规则分布的固壁粒子相比, 这种新的壁面能有效模拟复杂固壁, 并准确实施壁面边界条件^[14]. 固壁粒子数为 1655, 模拟中 DPD 粒子从十字型通道左部随机注射进去, 注射速率是每 100 时间步 100 个粒子, 流体与固体间保守力系数为 $a_w, a_w/a_f = 2$, 粒子在向右的外力 $g = 0.01$ 驱动下流动.

图 3 为粒子在不同时间步的分布情况, 若采用传统的只包含排斥力的权函数, DPD 粒子会充满整个计算区域, 只能模拟类似气体的流体, 采用包含

远程吸引近距排斥的保守力权函数后, 可以模拟液气共存的两相流动. 可以看出, 流体在流动过程中, 流体与壁面形成一个较小的接触角, 在流过十字型通道分叉处后, 以相同的流动速度和流动型式分别流入两个通道, 流动过程中接触角度保持不变. 在流体的表面张力、向右的流动重力以及流体与固壁相互作用下, 得到了其流动过程及流动模式. 图 4 为采用 Volume-of-fluid (VOF) 方法在不同时刻模拟的两相流组分分布情况, 模拟流体采用常温下水的性质, 同样在向右的重力作用下流动, 预先指定接触角 25° . 无量纲的 DPD 方法在三个不同时刻中, 采用的时间步间的比例为 $1:1.27:1.62$, 与 VOF 方法的真实时间步间的比例一致. 与基于网格的方法可以预先指定接触角不同, DPD 方法中的接触角由壁面与流体粒子间的相对位置计算得到. 可以看出,

两幅图中 DPD 方法与 VOF 方法得到的计算结果很符合.

每 100 时间步注入粒子数 100 个, 而粒子间相互作用力比值为 $a_w/a_f = 5$ 时, DPD 模拟结果如图 5 所示. 流体具有很强的润湿能力, 此时流体与壁面间的接触角变得很小, 在流过十字型通道分叉口前, 接触角基本保持不变, 在分叉口处, 流体被黏附在两侧壁面上, 分别经两个通道流出, 流体与壁面的接触角保持不变.

当增大流体与固体壁面间的作用力, 降低注入粒子数时, 采用每 100 时间步注入流体粒子 20 个, $a_w/a_f = 10$, x 方向重力加速度 $g = 0.01$. 如图 6, 由于流体流速较低, 流体与壁面间相互作用力很强, 流体在整个十字型通道内都会形成薄膜流动.

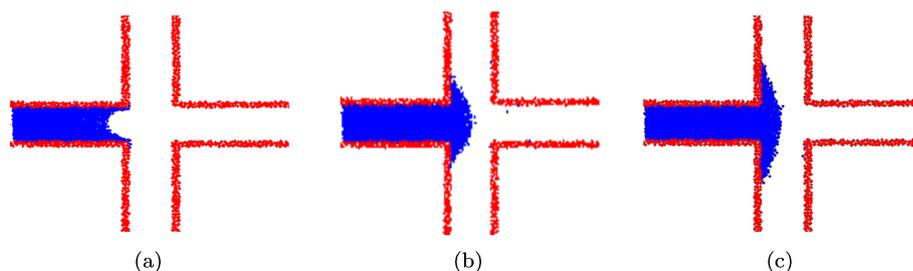


图 3 DPD 模拟中不同时刻粒子分布, 每 100 时间步注入 100 个粒子, $a_w = 2.0a_f$, $g = 0.01$ (a) 3300; (b) 4200; (c) 5400

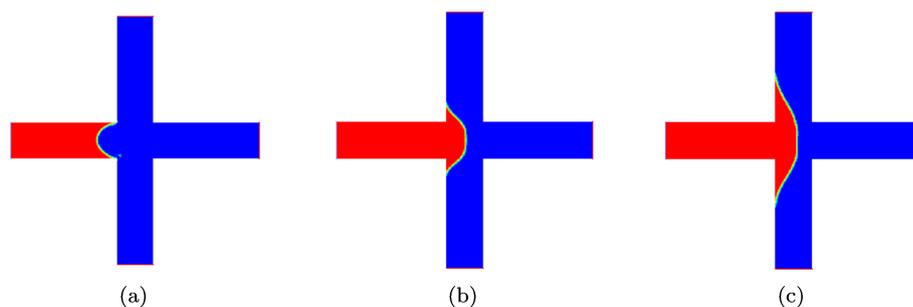


图 4 VOF 方法模拟不同时刻两相流动分布 (a) 0.37; (b) 0.47; (c) 0.60

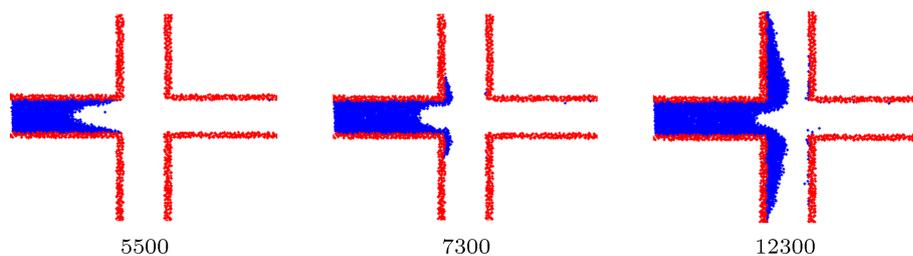


图 5 DPD 模拟中不同时刻粒子分布, 每 100 时间步注入 100 个粒子, $a_w = 5.0a_f$, $g = 0.01$

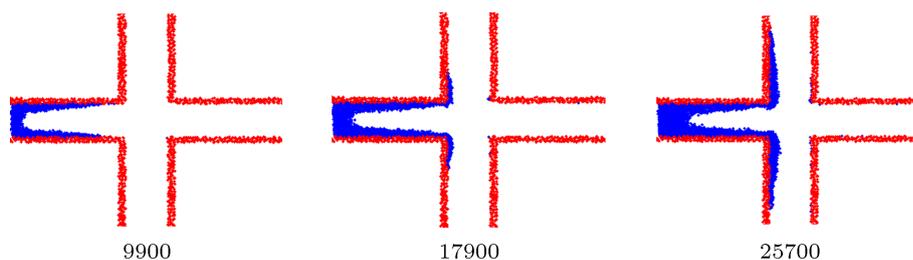


图6 DPD模拟中不同时刻粒子分布, 每100时间步注入20个粒子, $a_w = 10.0a_f$, $g = 0.01$

4 结论

1) 由于四次函数具有较高的精确性、稳定性, 是一条连续函数, 采用四次方光滑函数构造了包含远程吸引近距排斥的保守力势函数, 并对十字型通道内的流动过程进行了计算, 得到了其流动过程和流动模拟, 并与基于网格的VOF计算结果进行了

对比, 计算结果一致;

2) 采用不同的 a_w/a_f , 粒子注入速率模拟了不同的多相系统界面和接触线动力学特征, 得到了其流动过程及模式. 这种新的势函数也可采用不同的排斥项系数 A 和不同的吸引项系数 B 以获得不同的流体属性, 如流体表面张力、输运性质等.

-
- [1] Tindall J A, Kunkel J R 1999 *Unsaturated Zone Hydrology for Scientists and Engineers* (New Jersey: Prentice Hall) p273
- [2] Chang C L 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 1132
- [3] Muhammad A, Kamal M A 2009 *Appl. Math. Model.* **33** 1933
- [4] Hoogerbrugge P J, Koelman J M V A 1992 *Europhys. Lett.* **19** 155
- [5] Koelman J M V A, Hoogerbrugge P J 1993 *Europhys. Lett.* **21** 363
- [6] Espanol P, Warren P 1995 *Europhys. Lett.* **30** 191
- [7] Marsh C A, Backx G, Ernst M H 1997 *Phys. Rev. A* **56** 1676
- [8] Chang J Z, Liu M B, Liu H T 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3954 (in Chinese) [常建忠, 刘谋斌, 刘汉涛 2008 物理学报 **57** 3954]
- [9] Visser D C, Hoefsloot H C J, Iedema P D 2006 *J. Comput. Phys.* **214** 491
- [10] Liu M, Meakin P, Huang H 2006 *Phys. Fluids* **18** 017101
- [11] Liu M, Meakin P, Huang H 2007 *J. Comput. Phys.* **222** 110
- [12] Wang X L, Chen S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6778 (in Chinese) [王晓亮, 陈硕 2010 物理学报 **59** 6778]
- [13] Liu G R, Liu M B 2003 *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Mesh-free Particle Method* (Singapore: World Scientific) p58
- [14] Liu M B, Chang J Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7556 (in Chinese) [刘谋斌, 常建忠 2010 物理学报 **59** 7556]

Dissipative particle dynamics simulation of multiphase flow through a mesoscopic channel*

Liu Han-Tao¹⁾ Liu Mou-Bin²⁾ Chang Jian-Zhong^{1)†} Su Tie-Xiong¹⁾

1) (*School of Mechatronic Engineering of North University of China, Taiyuan 030051, China*)

2) (*Key Laboratory for Hydrodynamics and Ocean Engineering, of Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(Received 7 September 2012; revised manuscript received 22 October 2012)

Abstract

A new conservative interaction potential with short-range repulsion and long-distance attraction is constructed by a quartic equation function. The multiphase flow through a cross-shape mesoscopic channel is simulated by dissipative particle dynamics with this new potential function. The results show that the new method is capable of simulating the flow process and flow pattern.

Keywords: multiphase flow, dissipative particle dynamics, conservative interaction potential

PACS: 47.61.-k, 47.11.-j

DOI: 10.7498/aps.62.064705

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50976108) and Funds for International Joint Research Program of Shanxi Province, China (Grant No. 2011081040).

† Corresponding author. E-mail: changjz01@nuc.edu.cn