

液滴在固体表面流动特性的数值模拟及验证

张建林, 刘邱祖, 赖成, 李洪喜

(太原理工大学 机械工程学院, 山西 太原 030024)

摘要: 为了研究液滴在固体表面的流动特性, 采用格子 Boltzmann(LBM)分子动力学和水平集(LS)界面跟踪相结合的方法(LBM-LS)对液体在固体表面流动铺展过程进行数值模拟, 用 LBM 求解液体运动的流场, LS 捕捉运动的固液气界面。结果表明, 模拟结果与实验测定结果一致, 铺展接触角随时间呈指数变化规律, 液体表面张力越小铺展接触角越小, 证明采用 LBM-LS 模型模拟润湿性问题是可行的。

关键词: 液滴; 接触角; 格子 Boltzmann 方法; 水平集方法; 数值模拟

中图分类号: TK05 文献标志码: A

文章编号: 1008-5548(2016)03-0019-04

Numerical simulation of fluid flowing on solid surface and its experimental verification

ZHANG jian lin, LIU Qiu zu, LAI Cheng, LI Hong xi
(Taiyuan University of Technology, College of Mechanical Engineering, Taiyuan 030024, China)

Abstract: In order to clarify the flow characteristics of liquid on the surface, the fluid spreading process on solid surface was simulated numerically based on lattice Boltzmann molecular dynamics and level set interface tracking method. LBM was employed to solve the flow field of fluid motion, and the interface of solid-liquid-gas was captured by LS method. The obtained simulation results are in good agreement with the experimental measurement results. The spreading contact angle changes exponentially with time, and the contact angle reduces with the decreasing of fluid surface tension. It is certified that LBM-LS model proves feasible to simulate the wetting problem.

Keywords: droplet; contact angle; lattice Boltzmann method; level set method; numerical simulation

喷雾降尘、喷墨打印、粉体冶炼等工程中常遇

收稿日期 2015-05-18, 修回日期 2016-03-01。

基金项目 太原理工大学校基金 编号: 1205-04020202。

第一作者简介 张建林(1970—)男, 讲师, 硕士研究生, 研究方向为煤矿粉尘治理。E-mail: jlzhang1515@126.com。

通信作者简介 刘邱祖(1983—)男, 讲师, 博士研究生, 研究方向为多相流数值模拟。E-mail: liuqiuazu@126.com。

到表面润湿性问题, 属于雾滴沿固体表面铺展的液体动力学范畴^[1-2]。雾滴沿固体表面铺展的建模仿真已成为众多工程领域研究的热点和难点, 迄今存在许多问题亟待解决^[3]。国外研究多采用边界积分法、非结构移动网格法、伪势方法、最小二乘法以及模糊神经网络方法等, 这些方法存在各自的优点。陆军等^[4]提出了一种基于图像数据采集的时间序列分析与空间趋势面相结合的雾滴动态接触角建模方法, 并通过实验手段证明了该模型的准确性。陈啸等^[5]利用移动粒子半隐式法(MPS)结合改进后的表面自由能模型, 对受表面张力作用的自由面运动问题进行了研究和分析, 并对接触角及浸润面积等特征量进行分析。李春曦等^[6]从微结构角度对流体沿固体表面滑移流动特性进行了模拟仿真。以上研究选用的建模方法是在平衡态的基础上通过函数关系和推导方程建立界面流动模型达成动态趋势, 因此没能很好地体现分子间内部相互作用的问题。

格子 Boltzmann 方法(lattice Boltzmann method, LBM)作为介观领域的分子动力学的新型算法, 其起源是 Navier-Stokes 方程, 在处理分子的运动状态时引入了概率概念, 较深刻地体现了分子运动的物理本质。魏义坤等^[7]建立了液滴表面张力和固体表面润湿特性的单相自由面模型, 并研究了这两者之间的关系。石自媛等^[8]利用 LBM 方法分析了表面张力梯度对 Marangoni 效应的影响。

本文中采用 LBM 方法与水平集方法(level set, LS)方法相结合的建模与预测分析方法(LBM-LS), 对液体在固体表面流动特性进行了数值分析, 并与润湿性滴定实验进行了对比。

1 数值模拟

1.1 LBM 数值模拟

为了保持与宏观流体 Navier-Stokes 方程的一致性, LBM 通过离散化的方法引入了粒子密度分布函数 $f(x, t)$, 其中 t 为时间, x 为位置, i 为格子点^[8]。首先要满足质量和动量守恒

$$\rho(x, t) = \sum_i f_i(x, t), \quad (1)$$

$$\rho(x, t)v = \sum_i f_i(x, t)e_i, \quad (2)$$

式中 $\rho(x, t)$ 、 v 和 e_i 为流体的密度、流动速度和速度矢量。

$f_i(x, t)$ 在时间上的演化方程表示为

$$f_i(x+e_i, t+1) = f_i(x, t) + \Omega_i[f_i(x, t)], \quad (3)$$

式中 $\Omega_i[f_i(x, t)]$ 为碰撞因子 $f_i(x+e_i, t+1)$ 为下一时间步的粒子密度分布函数。

$f_i(x, t)$ 的演化通过碰撞和传播两步处理得到。通过碰撞步使得格子的质量和动量在每个格子点的碰撞因子重新分布。通过传播步实现粒子分布从 x 流向邻近的 $x+e_i$ 位置。假设粒子以单一的速率松弛达到平衡状态，通过对 $\Omega_i[f_i(x, t)]$ 在 f_i^{eq} 处进行 Taylor 级数展开得到

$$f_i(x+e_i, t+1) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)], \quad (4)$$

式中 τ 为松弛系数，反映非平衡态趋向平衡态的快慢。相应的平衡分布函数为

$$f_i^{eq}(x, t) = \rho w_i \left[1 + 3(e_i v) + \frac{9}{2}(e_i v)^2 - \frac{3}{2}v^2 \right], \quad (5)$$

当 $i=1$ 时 $w_i=4/9$ ；当 $i=2, 3, 4, 5$ 时 $w_i=1/9$ ；当 $i=6, 7, 8, 9$ 时 $w_i=1/36$ 。

因为液滴在固体表面上向四周的流动是无规律且周期对称的，所以在左、右边界采用周期格式作为边界条件；为了保持液固接触区的粒子在运动过程中的质量和能量守恒，上、下边界采用反弹格式作为边界条件。

1.2 水平集方法

LS 方法的基本思想是，从物体几何的曲率梯度角度用高一维的 LS 隐式函数 $\varphi(x, y, t)$ 表示界面曲线 t 时刻的界面曲线是该时刻的零等值线。本文中采用的 LS 演化方程为

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

对于任意时刻 t 的两相分界面(液膜)上任意点 \vec{x} ，满足 $\varphi(\vec{x}, t) = 0$ ，从而有

$$\varphi_t + u \varphi_x + v \varphi_y = 0, \quad (7)$$

式中 u, v 为流速在坐标 x, y 上的投影。

函数 $\varphi(\vec{x}, t)$ 便是两相分界面的位置，但 LS 函数按照式(7)进行一个时间步求解之后，将不再符合点到界面的距离函数，需要对其重新初始化，通过求解如下偏微分方程的有限差分稳定解来实现。

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \text{sign}(\varphi_0) (1 - |\nabla \varphi|) \\ \varphi(x, 0) = \varphi_0(x) \end{cases}, \quad (8)$$

式中时间项 φ_t 用 3 阶 TVD-R-K (total variation

diminishing Runge-Kutta) 算法离散，空间项 φ_x 和 φ_y 用 5 阶 HJ-WENO (Hamilton Jacobi-weighted-essentially-non-oscillatory) 格式离散，该算法的加权形式如下：

$$\varphi_x = w_1 \varphi_x^1 + w_2 \varphi_x^2 + w_3 \varphi_x^3, \quad (9)$$

其中 $w_1 + w_2 + w_3 = 1$ ， $0 \leq w_i \leq 1$ ，取 $w_1 = 0.1$ ， $w_2 = 0.6$ ， $w_3 = 0.3$ 。

2 实验

2.1 材料与仪器

试剂与材料：Si 基片(中美合资合肥科晶材料技术有限公司)；乙醇(分析纯，山东济南建发化工公司)。

仪器：光学 DSA25 接触角测定仪(上海盈诺精密仪器有限公司)；Hamilton 微量注射器(量程为 0.5~100 μL ，上海济成分析仪器公司)；CCD300 万数字摄像头(郑州南北仪器设备有限公司)；电子天平(精度为 0.001 g，上海耀杰机电设备有限公司)；Jzhy1-180 表面张力仪(承德优特检测仪器销售有限公司)。

2.2 方法

配制质量分数分别为 10%、20%、30%、40%、50%、60%、70%、80%、90%、100% 的 10 种乙醇溶液。实验室的环境调控温度为 $(25 \pm 1)^\circ\text{C}$ ，相对湿度为 $(55 \pm 1)\%$ 。

2.2.1 乙醇液体表面张力测定

液体的表面张力系数与其浓度存在着一定的关系，应用表面张力仪，基于圆环法测量液体表面张力系数。

2.2.2 润湿性滴定实验

设定摄像机为连续记录模式，并设定图像采集速度为 10.65 帧/s，图像采集时间设为 8 s。调整好仪器针头的位置和高度后开始控制液体滴落，并同时按下摄像机的启动键。记录下 10 种不同浓度的乙醇液体在 Si 基片表面上的动态铺展图像，利用接触角测定仪主机自带的图像分析软件对这些连续的铺展图像进行处理(每帧间隔为 94 ms，共 85 帧)，即测得 10 种不同浓度的乙醇液体在 Si 基片表面上的连续 8 s 内的动态润湿数据(接触角 θ)。

3 结果与讨论

3.1 测定结果

3.1.1 表面张力

不同浓度的乙醇表面张力测试结果见图 1 所示。通过与文献[9]比较证明测定结果的准确性，该表面张力数据可为 LBM-LS 数值模型提供计算数据。

3.1.2 润湿性

图 2 为接触角的测量图像，接触角为液滴轮廓切线与固液气三相接触线之间的夹角。不同质量分数的乙醇润湿性接触角测试结果见图 3 所示。

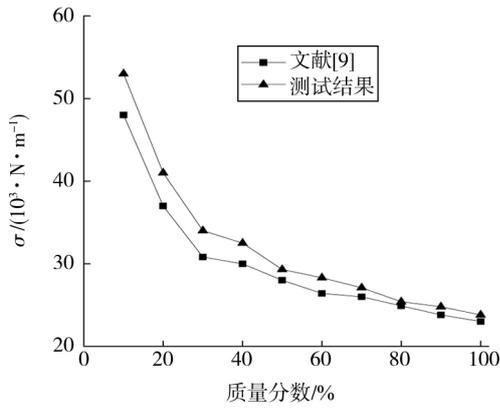


图 1 表面张力测定结果
Fig. 1 Measurement results of surface tension

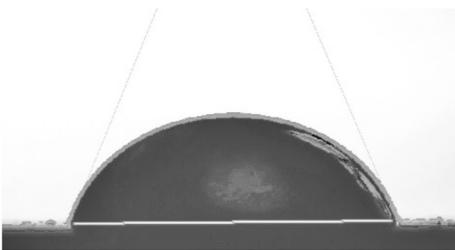


图 2 接触角滴定图像
Fig. 2 Titration image of contact angle

3.2 数值模型验证

把实验得到的不同质量分数乙醇的表面张力值代入 LBM-LS 数值模型, 计算输出液滴铺展过程中最小的接触角值, 并与接触角, 测定实验结果进行比较, 如图 3 所示。由图可知, 数值模拟结果与实验结果得到的稳态接触角随液体质量分数的变化规律一致, 之间的平均相对误差小于 5°, 证明了 LBM-LS 数值模型的准确性。

3.3 测定结果与数值仿真结果比较

3.3.1 接触角随时间的动态变化过程

图 4 为接触角随时间的动态变化。可知, 接触角

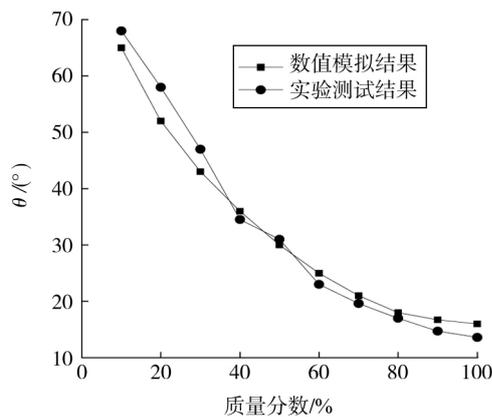


图 3 不同浓度乙醇的铺展稳态接触角
Fig. 3 Static contact angle with different concentrations ethanol

随时间呈指数变化趋势, 液滴流动前 3 s 接触角随时间变化幅度很大, 此时液体在重力的作用下有强烈的向四周铺展的趋势, 液滴迅速的铺展开来, 接触角也变随之快速减小; 之后进入平稳过程, 6 s 后液滴流动趋于稳定, 在铺展的最后阶段数值模拟和实验数据均表明接触角有反弹的趋势。在整个液滴沿固体表面流动的过程中数值模拟和实验结果基本一致, 这验证了所建立模型的准确性。

3.3.2 液体表面张力对铺展的影响

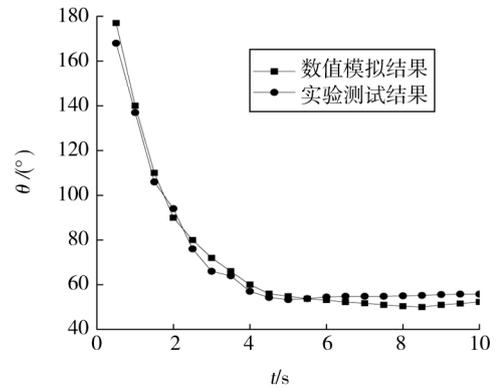


图 4 接触角随时间的动态变化
Fig. 4 Dynamic changes of contact angle with time

液体表面张力是由液体内部分子间的相互作用产生的一种内聚力, 液体表面张力越强收缩能力越强。图 5 为液体表面张力对铺展过程中稳态接触角影响的仿真结果与实验结果对比曲线, 2 条曲线变化规律基本一致, 即接触角随液体表面张力的增大呈增大趋势, 这符合液体自身的性质规律, 表面张力越大, 液滴越难在固体表面铺展开来, 表现为润湿性越差。实验结果略大于仿真结果, 经分析可能与实验中环境温度影响有关。此结论为添加润湿剂来降低液滴表面张力以改善润湿性提供了依据。

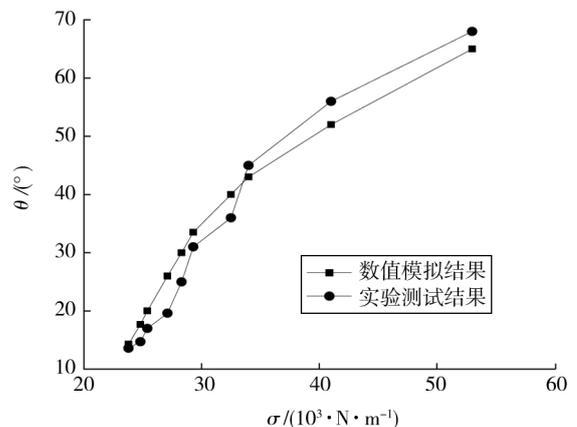


图 5 稳态接触角与表面张力的关系
Fig. 5 Relationship between static contact angle and surface tension

(下转第 26 页)

发生粉尘燃烧甚至爆炸事故。根据实验结果,聚酰胺纤维粉尘云的最小点火能为 15.8 MJ,粉尘层的最低着火温度为 307 °C,从工艺角度来看,点火源难以控制,因此有效的通风除尘系统是必要的,确保激光切割点附近聚酰胺纤维粉尘云和粉尘层状态受控。另外聚酰胺纤维粉尘热分解温度较低,激光束在聚焦点处使材料吸收能量,导致高温熔化或气化聚酰胺纤维粉的时候极可能产生可燃性气体,甚至局部可能达到或超过可燃气体爆炸下限,气体爆炸也有可能引发粉尘爆炸事故。通过聚酰胺纤维粉的最大爆炸压力及爆炸指数判断,该类型粉尘爆炸将会产生较严重的灾难,导致企业重大的人员及财产损失,因此企业必须要做好相应的防护对策。

4 结论

1)通过对汽车安全气囊生产过程中的聚酰胺纤维粉尘的燃烧、爆炸特性测试,得出了聚酰胺纤维粉尘的粒径分布、粉尘层最低着火温度、粉尘云最低着火温度、最大爆炸压力及其浓度、最大爆炸指数及其浓度。虽然粉尘爆炸烈度分级为 St1 级,但聚酰胺纤维粉尘的最小点火能量为 15.8 MJ,对静电释放接近高度敏感等级,应该对工艺过程静电放电进行防护。

2)聚酰胺纤维粉尘反应热解特性过程中其挥发分初始析出温度 T_0 为 228 °C,DTG 峰值温度为 429.1 °C,最大失质量速率为 6.99%/min,热分解动力学较明显,进一步验证了粉尘燃烧反应速度较快速。

总之,常被忽视的聚酰胺纤维粉尘发生粉尘爆炸的危险性和危害较大,粉尘爆炸热分解温度较低,点

火能较低,爆炸压力大,在汽车安全气囊等相关加工生产过程中常常被忽视,研究结果表明应加强对该类型颗粒物通风除尘及爆炸防护。

参考文献(References):

- [1] LUNN G A, HOLBROW P, ANDREWS S, et al. Dust explosions in totally enclosed interconnected vessel systems [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 1996, 9(1):45-58.
- [2] HOLBROW P, ANDREWS S, LUNN G A. Dust explosions in interconnected vented vessels [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 1996, 9(1):91-103.
- [3] ROSER M, VOGL A, RADANDT S, et al. Investigations of flame front propagation between interconnected process vessels. Development of a new flame front propagation time prediction model [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 1999, 12(5):421-436.
- [4] KOSINSKI P, HOFFMANN A C. An investigation of the consequences of primary dust explosions in interconnected vessels[J]. Journal of Hazardous Materials, 2006, 137(2):752-761.
- [5] PROUST C, DAUBECH J, LEPRETTE E. Differentiated routes for the simulation of the on sequences of explosions [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2009, 22(3):288-294.
- [6] SKJOLD T. Review of the DESC project [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2007, 20(456):291-302.
- [7] BIELERT U, SICHEL M. Numerical simulation of dust explosions in pneumatic conveyors[J]. Shock Waves, 1999, 9(2):125-139.
- [8] 李新光,王健,钟圣俊,等. 初始湍流对粉尘爆炸影响的实验研究[J]. 中国粉体技术:2010, 16(5):37-41.
- [9] 李伟. 通风管道中细微粉尘的湍流沉积规律 [J]. 中国粉体技术:2014, 20(2):56-60.
- [10] 李刚. 过程工业粉尘爆炸及其危险性评价 [C]// 2003 中国(南京)首届城市与工业安全国际会议. 2003.
- [11] 潘峰,马超,曹卫国,等. 玉米淀粉粉尘爆炸危险性研究[J]. 中国安全科学学报, 2011, 21(7):46-51.

(上接第 21 页)

4 结论

1)采用 LBM-LS 模型对液体在固体表面流动铺展过程进行数值模拟,将模拟结果与实验结果进行对比,表明本模型在模拟润湿性问题是可行的。

2)铺展过程中接触角随时间呈指数变化趋势,液体表面张力越小,液滴越容易在固体表面铺展开来,通过与实验结果比较,进一步证明了本模型的准确性。

参考文献(References):

- [1] 刘邱祖,韩振南,王志坚,等. 呼吸性粉尘润湿机理及润湿剂复配实验研究[J]. 中国粉体技术, 2014, 20(2):1-5.
- [2] LI Y Q, QIN Y, YANG X B. Procedia engineering [M]. Beijing:

Elsevier Press, 26(2011): 738.

- [3] 范鹏飞,刘邱祖. 液滴表面张力对煤尘润湿影响的数值模拟和实验研究[J]. 中国粉体技术, 2015, 21(2):86-89.
- [4] 陆军,张红涛,魏德云,等. 基于时间序列分析的雾滴叶面动态接触角预测与建模[J]. 农业机械学报, 2013, 44(2):80-86.
- [5] 陈啸,孙中国,席光. 表面自由能模型的改进及液滴浸润数值研究[J]. 西安交通大学学报, 2012, 46(7):115-121.
- [6] 李春曦,裴建军,叶学民. 壁面微结构对超薄液膜流动特性的影响[J]. 西安交通大学学报, 2013, 47(7):40-46.
- [7] WEI Y K, QIAN Y H. Reducing spurious velocities at the interfaces of two-phase flows for lattice boltzmann simulations [J]. Chin Phys Lett, 2012, 29(6): 64705-64707.
- [8] 石自媛,胡国辉,周哲玮. 润湿性梯度驱动液滴运动的格子 Boltzmann 模拟[J]. 物理学报, 2010, 54(9):2595-2600.
- [9] 刘竹琴,冯红侠. 几种液体表面张力系数与其浓度关系的实验研究[J]. 延安大学学报, 2008, 27(2):34-36.