

LBM Modeling and Calculation for Droplet Dynamics on Solid Wall

Yanggui Li^{1,2}, Dacheng Liang^{3*}

¹School of Mathematics and Statistics, Lingnan Normal University, Zhanjiang Guangdong

²Institute of Synthetic Biology, Shenzhen Institute of Advanced Technology, Chinese Academy of Sciences, Shenzhen Guangdong

³Department of Mathematics, Guangdong Preschool Normal College in Maoming, Maoming Guangdong
Email: liyanggui@126.com, *3459740493@qq.com

Received: May 8th, 2019; accepted: May 21st, 2019; published: May 28th, 2019

Abstract

In this paper, the dynamic model for the droplet on the solid wall is studied with Shan-Chen multiphase lattice Boltzmann method. Based on the model, the spreading behavior of droplet on the horizontal solid wall and the slip behavior on the vertical solid wall are simulated.

Keywords

Droplet Dynamics, Lattice Boltzmann Method, Solid-Liquid Interaction, Multiphase Flow

固壁上液滴动力学的LBM建模与计算

李阳贵^{1,2}, 梁大成^{3*}

¹岭南师范学院, 数学与统计学院, 广东 湛江

²中国科学院深圳先进技术研究院, 合成生物学研究所, 广东 深圳

³广东茂名幼儿师范专科学校, 数学系, 广东 茂名

Email: liyanggui@126.com, *3459740493@qq.com

收稿日期: 2019年5月8日; 录用日期: 2019年5月21日; 发布日期: 2019年5月28日

摘要

本文采用Shan-Chen多相格子Boltzmann方法建立液滴在固壁上的动力学模型。并根据该模型模拟了液滴在水平固壁上的铺展行为以及在垂直固壁上的滑移行为。

*通讯作者。

关键词

液滴动力学, 格子Boltzmann方法, 流固相互作用, 多相流

Copyright © 2019 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

固液相互作用流在许多领域都有应用, 如地质封存二氧化碳、地下污染物修复、石油开采和质子交换膜燃料电池(PMEFC)等。

当面对这些问题时, 数值技术可以提供很大帮助。典型的方法是基于离散化 Navier-Stokes 方程, 但不容易模拟细尺度问题, 且非线性对流项的处理存在困难。

格子 Boltzmann 方法(LBM)是一种介观尺度方法, 它能够正确处理微尺度的复杂性, 同时再现流动的宏观特征。Shan-Chen 模型是一种多相 LBM [1], 已成功应用于许多研究[2]。近年来, 流固相互作用的研究引起广泛关注[3] [4] [5] [6] [7]。

本文根据 LBM 的介观特性, 利用 Shan-Chen 多相模型建立液滴在固壁上的动力学模型。本文的主要内容如下: 首先对 LBM 和 SC 模型进行了描述, 接着建立固壁与液滴相互作用的模型, 最后给出了应用该模型模拟液滴在固壁上铺展与滑行的结果。

2. 理论与模型

2.1. 格子 Boltzmann 方法

Boltzmann 方程描述了由于其分子的流动和碰撞而导致的流体状态的演化。LBM 是通过对 Boltzmann 方程的相空间进行离散化得到的, 其中大量的分子速度被一组有限的速度矢量(晶格)代替[1]。LBM 模型包含三要素: 格子结构、流体粒子的离散速度集合、演化方程, 其描述了流体粒子分布函数在固定格子上的演化过程

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

式中 \mathbf{x} 是格子上的格点, $\{\mathbf{e}_i : i = 1, 2, \dots, m\}$ 是流体粒子的离散速度集合, δ_t 是时间增量, t 是当前时间步, f_i 是以速度 \mathbf{e}_i 运动的速度分布函数, Ω_i 是碰撞算子, 表示流体粒子间的碰撞对速度分布函数的影响。流体的密度和宏观速度由离散分布函数的和得到

$$\rho = m \sum_i f_i, \quad \rho \mathbf{u} = m \sum_i \mathbf{e}_i f_i \quad (2)$$

m 为流体粒子质量。

2.2. 多相或多组分格子 Boltzmann 模型

常用的多相或多组分格子 Boltzmann 模型为颜色模型、自由能模型和 Shan-Chen 模型。由于 Shan-Chen 模型具有能模拟大密度差多相流的优点, 本文采用 Shan-Chen 模型。Shan-Chen 模型考虑了具有不同分子质量的任意数量组分的密度分布函数。粒子之间的相互作用通过一组势包含在动力学中。第 k 组分的 LB 方程可写成以下形式:

$$f_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_i, t + \delta_i) - f_i^k(\mathbf{x}, t) = -\frac{f_i^k(\mathbf{x}, t) - f_i^{k(eq)}(\mathbf{x}, t)}{\tau_k} \quad (3)$$

式中, $f_i^k(\mathbf{x}, t)$ 是第 i 个速度方向上第 k 组分在位置 \mathbf{x} 和时间 t 处的数密度分布, δ_i 是时间增量。在右边, τ_k 是组分 k 的弛豫时间, 以晶格单位表示, $f_i^{k(eq)}(\mathbf{x}, t)$ 是相应的平衡分布函数。对于二维 9-速度 LB 模型(D2Q9), (其中 D 是维数, Q 是速度方向数), $f_i^{k(eq)}(\mathbf{x}, t)$ 具有以下形式

$$f_0^{k(eq)} = \alpha_k n_k - \frac{2}{3} n_k \mathbf{u}_k^{eq} \cdot \mathbf{u}_k^{eq} \quad (4)$$

$$f_i^{k(eq)} = \frac{(1-\alpha_k)n_k}{5} + \frac{1}{3} n_k (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_k^{eq}) + \frac{1}{2} n_k (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_k^{eq})^2 - \frac{1}{6} n_k \mathbf{u}_k^{eq} \mathbf{u}_k^{eq} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (5)$$

$$f_i^{k(eq)} = \frac{(1-\alpha_k)n_k}{20} + \frac{1}{12} n_k (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_k^{eq}) + \frac{1}{8} n_k (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_k^{eq})^2 - \frac{1}{24} n_k \mathbf{u}_k^{eq} \mathbf{u}_k^{eq} \quad i = 5, 6, 7, 8 \quad (6)$$

在上述方程中, 离散速度 \mathbf{e}_i 取为

$$\mathbf{e}_i = \begin{cases} \mathbf{0} & i = 0 \\ \left(\cos \frac{(i-1)\pi}{2}, \sin \frac{(i-1)\pi}{2} \right) & i = 1, 2, 3, 4 \\ \sqrt{2} \left(\cos \left[\frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[\frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right] \right) & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (7)$$

α_k 是一个自由参数, 它与纯组分 k 区域的声速有关, 其关系式为 $(c_s^k)^2 = \frac{3}{5}(1-\alpha_k)$; $n_k = \sum_i f_i^k$ 是 k 组分的数密度。 k 组分的质量密度 ρ_k 定义为 $\rho_k = m_k n_k = m_k \sum_i f_i^k$, 组分 k 的流体速度 \mathbf{u}_k 定义为 $\rho_k \mathbf{u}_k = m_k \sum_i \mathbf{e}_i f_i^k$, 其中 m_k 是 k 组分的分子质量。参数 \mathbf{u}_k^{eq} 由如下关系式确定:

$$\rho_k \mathbf{u}_k^{eq} = \rho_k \mathbf{u}' + \tau_k \mathbf{F}_k \quad (8)$$

其中, $\mathbf{F}_k = \mathbf{F}_{1k} + \mathbf{F}_{2k} + \mathbf{F}_{3k}$ 是作用于第 k 组分的总力, 包括流体-流体相互作用 \mathbf{F}_{1k} 、外力 \mathbf{F}_{2k} 、流体-固体相互作用 \mathbf{F}_{3k} 。为使每个碰撞的动量守恒, \mathbf{u}' 必须满足关系

$$\mathbf{u}' = \left(\sum_{k=1}^s \frac{\rho_k \mathbf{u}_k}{\tau_k} \right) / \left(\sum_{k=1}^s \frac{\rho_k}{\tau_k} \right) \quad (9)$$

假设第 k 组分在 \mathbf{x} 点和第 \bar{k} 组分在 \mathbf{x}' 点之间的粒子相互作用力与它们的“有效数密度”的乘积 $\Psi_k(n_k)$ 成正比, $\Psi_k(n_k)$ 定义为局部数密度的函数。在 k 组分点 \mathbf{x} 处的总流体-流体相互作用力为

$$\mathbf{F}_{1k}(\mathbf{x}) = -\Psi_k(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{x}'} \sum_{\bar{k}=1}^s G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi_{\bar{k}}(\mathbf{x}') (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (10)$$

其中 $G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 满足 $G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G_{\bar{k}k}(\mathbf{x}', \mathbf{x})$, 而 $\Psi_k(\mathbf{x})$ 是 \mathbf{x} 处数密度 n_k 的一个函数。

$$G_{k\bar{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{cases} g_{k\bar{k}}, & |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = 1 \\ g_{k\bar{k}}/4, & |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = \sqrt{2} \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \quad (11)$$

这里, $g_{k\bar{k}}$ 是组分 k 和 \bar{k} 粒子之间作用势的强度。本研究中, 有效数密度 $\Psi_k(n_k)$ 取为 n_k 。常数体积力的作用可以简单地描述为

$$\mathbf{F}_{2k} = \rho_k \mathbf{g} = m_k n_k \mathbf{g} \quad (12)$$

式中 \mathbf{g} 是单位质量的体积力。

2.3. 流体与固壁之间的相互作用

在流体/固体界面, 固壁被视为具有恒定数密度的相。流体与壁面之间的作用力描述为

$$\mathbf{F}_{3k}(\mathbf{x}) = -n_k(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{x}'} g_{kw} n_w(\mathbf{x}') (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \quad (13)$$

式中, n_w 是墙的数量密度, 在墙处为常数, 在其他地方为零, g_{kw} 是组分 k 与墙之间的相互作用强度。 g_{kw} 对非润湿流体为正, 对润湿流体为负。通过调节, 我们可以得到不同的润湿性。

实施 Chapman-Enskog 展开步骤可以获得流体混合物作为单一流体的连续性和动量方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (14)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\rho \nu (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla)] + \rho \mathbf{g} \quad (15)$$

式中, $\rho = \sum_k \rho_k$ 是流体混合物的总密度, 总流体速度 \mathbf{u} 由 $\rho \mathbf{u} = \sum_k \rho_k \mathbf{u}_k + \frac{1}{2} \sum_k \mathbf{F}_k$ 定义, 请注意, 引入流体-固体相互作用对宏观方程没有影响, 因为 \mathbf{F}_{3k} 只存在于固体/流体界面。

3. 数值模拟

应用上述模型, 模拟重力作用下液滴在水平固壁上铺展演化过程以及液滴在垂直壁面上的滑行过程。液滴铺展过程如图 1 所示, 在初始时刻, 液滴为半圆形, 在重力作用下, 液滴沿着固壁铺展, 液滴高度逐渐减小, 液滴与壁面的接触线逐渐增长。液滴滑行过程如图 2 所示, 恒定的重力沿壁面方向作用于两相流体, 密度大的液滴沿着壁面下滑, 液滴逐渐变形。随着时间的推移, 液滴变化逐渐减弱并趋于稳定。这些模拟结果与 VOF 模型的模拟结果一致[3]。

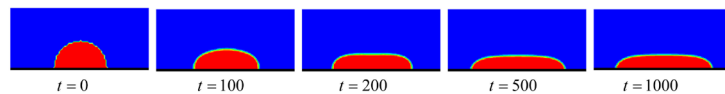


Figure 1. Evolution of droplet spreading on solid wall

图 1. 液滴在壁面上的铺展演化过程

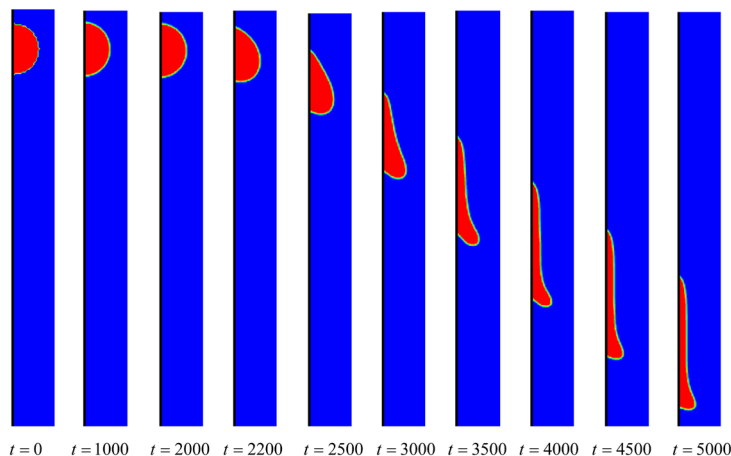


Figure 2. Evolution of droplet slipping on solid wall

图 2. 液滴在壁面上的滑落演化过程

4. 总结

本文基于 Shan-Chen 模型建立了固壁上液滴动力学模型, 并成功地实现了该算法, 模拟了重力作用下液滴在固体表面上的铺展以及滑移动力学行为。

基金项目

国家自然科学基金(51672224, 11804355, 31800083)。

参考文献

- [1] Shan, X.W. and Chen, H.D. (1993) Lattice Boltzmann Model for Simulation Flows with Multiple Phases and Components. *Physical Review E*, **47**, 1815-1993. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.1815>
- [2] Kang, Q.J., Zhang, D. and Chen, S. (2002) Displacement of a Two-Dimensional Immiscible Droplet in a Channel. *Physics of Fluids*, **14**, 3203-3214. <https://doi.org/10.1063/1.1499125>
- [3] Xing, X.Q., Butler, D.L. and Yang, C. (2007) Lattice Boltzmann-Based Single-Phase Method for Free Surface Tracking of Droplet Motions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **53**, 333-351. <https://doi.org/10.1002/fld.1282>
- [4] Tanaka, Y., Washio, Y., Yoshino, M. and Hirata, T. (2011) Numerical Simulation of Dynamic Behavior of Droplet on Solid Surface by the Two-Phase Lattice Boltzmann Method. *Computers & Fluids*, **40**, 68-78. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.08.007>
- [5] Wu, J., Huang, J.J. and Yan, W.W. (2015) Lattice Boltzmann Investigation of Droplets Impact Behaviors onto a Solid Substrate. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **484**, 318-328. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2015.07.043>
- [6] Mousavi Tilehboni, S.E., Fattahi, E., Afrouzi, H.H. and Farhadi, M. (2015) Numerical Simulation of Droplet Detachment from Solid Walls under Gravity Force Using Lattice Boltzmann Method. *Journal of Molecular Liquids*, **212**, 544-556. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2015.10.007>
- [7] Raman, K.A., Jaiman, R.K., Lee, T.S. and Low, H.T. (2016) Lattice Boltzmann Study on the Dynamics of Successive Droplets Impact on a Solid Surface. *Chemical Engineering Science*, **145**, 181-195. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.02.017>

知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2160-7567, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: app@hanspub.org