

三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题的改进 SPH 模拟*

许晓阳, 彭 严, 邓方安

(陕西理工学院 数学与计算机科学学院, 陕西 汉中 723000)

摘要: 基于光滑粒子动力学(smoothed particle hydrodynamics, SPH)方法,对三维 Phan-Thien-Tanner(PTT)黏弹性液滴撞击固壁面问题进行了数值模拟.为了有效地防止粒子穿透固壁,且缩减三维数值模拟所消耗的计算时间,提出了一种适合三维数值模拟的改进固壁面边界处理方法.为了消除张力不稳定性问题,采用一种简化的人工应力技术.应用改进 SPH 方法对三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题进行了数值模拟,精细地捕捉了液滴在不同时刻的自由面,讨论了 PTT 黏弹性液滴不同于 Newton(牛顿)液滴的流动特征,分析了 PTT 拉伸参数对液滴宽度、高度和弹性收缩比等的影响.模拟结果表明,改进 SPH 方法能够有效而准确地描述三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题的复杂流变特性和自由面变化特征.

关键词: 光滑粒子动力学; 三维; Phan-Thien-Tanner; 黏弹性; 液滴; 固壁面

中图分类号: O242 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2015.06.006

引 言

作为一种典型的自由表面流问题,黏弹性液滴撞击固壁面现象广泛存在于自然界和工业生产过程中,如喷墨打印、燃油雾化和轮机叶片腐蚀等^[1].深入研究黏弹性液滴的流动机理对化工工程、环境工程以及石油产业等有着重要的指导意义,但由于其具有复杂的流变特性,实验和解析求解比较困难,因此数值模拟技术成为一个很好的选择^[2-3].

目前,基于网格的数值方法已被应用于该问题的数值模拟中,但这需要借助额外的界面追踪技术来追踪自由界面,实施过程比较繁琐.2002年,Tomé等^[4]在软件 GENSMAC 的基础上,结合有限差分法(finite difference method, FDM)和标记网格法(marker and cell, MAC)数值模拟了二维 Oldroyd-B 黏弹性液滴撞击固壁面问题.Oishi等^[5]在 Tomé等^[4]研究的基础上,发展了一种高效的隐格式 FDM 方法,通过 MAC 方法追踪自由液面,对二维 Oldroyd-B 黏弹性液滴撞击固壁面问题进行了模拟研究.2013年,Figueiredo等^[6]采用 MAC 方法数值模拟了三维 Oldroyd-B 黏弹性液滴撞击固壁面问题.

光滑粒子动力学(SPH)方法是由 Lucy^[7],Gingold 和 Monaghan^[8]于 1977 年分别独立提出的一种纯 Lagrange 型无网格粒子法.与基于网格的数值方法相比,SPH 方法具有自适应特性、

* 收稿日期: 2014-11-13; 修订日期: 2015-03-02

基金项目: 国家自然科学基金(11305097);陕西省教育厅科研计划项目(2013JK0616)

作者简介: 许晓阳(1987—),男,石家庄人,讲师,博士(通讯作者. E-mail: xiaoyang.xu@snut.edu.cn).

Lagrange 特性以及粒子性质和 Lagrange 性质的和谐结合等优势,因此适宜模拟大变形自由表面流问题^[9]。1994 年, Monaghan^[10] 给出了求解 Navier-Stokes 方程的对称化离散格式,应用 SPH 方法成功模拟了溃坝流等问题。近年来,随着 SPH 方法计算精度和稳定性的不断改善,该方法已被广泛地应用于自由表面流^[10-11]、不可压缩流^[12-13] 和多相流^[14-15] 等的数值模拟中。然而,对于黏弹性流动问题的数值模拟,由于其非线性本构方程的引入而极大地增加了问题求解的复杂度,因此相关文献研究报道较少。2006 年, Fang 等^[16] 为消除粒子的非物理簇集现象,通过在 SPH 离散方程中引入人工应力项,对二维 Oldroyd-B 黏弹性液滴撞击固壁面问题进行了数值模拟。2007 年, Rafiee 等^[17] 通过压力 Poisson 方程计算流体压力,采用不可压 SPH 方法数值模拟了二维 Oldroyd-B 黏弹性液滴撞击固壁面问题。2011 年, 杨波等^[18] 基于 Phan-Thien-Tanner (PTT) 本构模型^[19] 对二维液滴碰撞问题进行了 SPH 模拟。关于 SPH 方法更详细的介绍,可参阅 Monaghan^[20] 的研究综述。

本文在文献[18]的基础上,对三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题进行数值模拟研究。为了有效地防止粒子穿透固壁,且缩减三维数值模拟所消耗的计算时间,提出了一种适合三维数值模拟的改进固壁边界处理方法。为了消除张力不稳定性问题,采用一种适合三维数值模拟的简化人工应力技术。应用改进 SPH 方法对三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题进行了数值模拟,精细地捕捉了液滴在不同时刻的自由面,讨论了 PTT 黏弹性液滴不同于 Newton 液滴的流动特征,分析了 PTT 拉伸参数对液滴宽度、高度和弹性收缩比等的影响。

1 PTT 黏弹性流体控制方程

在 Lagrange 坐标系下,三维等温、可压缩黏弹性流体的控制方程组可表示为

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \frac{\partial v^\beta}{\partial x^\beta}, \quad (1)$$

$$\frac{dv^\alpha}{dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta} + F^\alpha, \quad (2)$$

式中, ρ 为流体密度, v^β 为流体速度矢量 \mathbf{v} 的第 β 个分量, x^β 为空间坐标, $\sigma^{\alpha\beta}$ 为总应力张量 $\boldsymbol{\sigma}$ 的第 (α, β) 个分量, F^α 表示单位质量的流体所受到的外力(如重力), d/dt 表示物质导数, $d/dt = \partial/\partial t + v^\beta \partial/\partial x^\beta$ 。

通常,总应力张量 $\sigma^{\alpha\beta}$ 可分解为各向同性压力 p , 来自 Newton 溶剂的贡献 $2\eta_s d^{\alpha\beta}$ 和弹性偏应力张量 $\tau^{\alpha\beta}$, 即

$$\sigma^{\alpha\beta} = -p\delta^{\alpha\beta} + 2\eta_s d^{\alpha\beta} + \tau^{\alpha\beta}, \quad (3)$$

式中, $\delta^{\alpha\beta}$ 为 Kronecker 函数, η_s 表示 Newton 溶剂黏度,

$$d^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\beta} + \frac{\partial v^\beta}{\partial x^\alpha} \right)$$

表示形变率张量。

1.1 本构方程

为封闭控制方程(1)和(2),需结合关于弹性偏应力张量 $\tau^{\alpha\beta}$ 的本构方程。对于 PTT 本构模型,其本构方程可表示为^[19]

$$f(\text{tr}(\boldsymbol{\tau}))\boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_p d^{\alpha\beta}, \quad (4)$$

式中, λ_1 表示流体的松弛时间, η_p 表示聚合物溶剂黏度, $\eta = \eta_s + \eta_p$ 表示流体总黏度,符号

“(∇)”表示上随体导数,定义为

$$\overset{\nabla}{\tau}{}^{\alpha\beta} = \frac{d\tau^{\alpha\beta}}{dt} - \frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\gamma} \tau^{\gamma\beta} - \frac{\partial v^\beta}{\partial x^\gamma} \tau^{\gamma\alpha}. \quad (5)$$

另外,本构方程(4)中, $f(\text{tr}(\boldsymbol{\tau}))$ 表示应力系数函数,它可以采用如下的线性形式^[19]:

$$f(\text{tr}(\boldsymbol{\tau})) = 1 + \frac{\lambda_1 \varepsilon}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}), \quad (6)$$

式中, ε 为 PTT 本构模型中的拉伸参数,一般取正值.

综合式(4)和式(5),可得

$$\frac{d\tau^{\alpha\beta}}{dt} = \frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\gamma} \tau^{\gamma\beta} + \frac{\partial v^\beta}{\partial x^\gamma} \tau^{\gamma\alpha} - \frac{f(\text{tr}(\boldsymbol{\tau}))}{\lambda_1} \tau^{\alpha\beta} + \frac{2\eta_p}{\lambda_1} d^{\alpha\beta}. \quad (7)$$

显然,当 PTT 拉伸参数 $\varepsilon = 0$ 时,PTT 本构模型将退化为 Oldroyd-B 本构模型.

1.2 状态方程

目前,SPH 方法中求解压力有两种方法:1) 在每个时间步求解压力 Poisson 方程;2) 将不可压缩流体看成弱可压缩流体,采用一个合适的状态方程求解压力.方法 1) 求解的压力比较精确,但由于在每一时间步,均需求解压力 Poisson 方程,故计算量很大;方法 2) 直接给出密度和压力的关系,故数值实现相对容易,计算量也较小.本文选用第 2 种方法,其状态方程为^[16]

$$p = c^2(\rho - \rho_0), \quad (8)$$

式中, c 表示声速,通常,声速 c 取为流体最大速度的 10 倍左右,以保证人为可压缩性带来的密度计算误差控制在 1% 以内.

2 光滑粒子动力学 (SPH) 方法

SPH 方法是一种纯 Lagrange 性质的无网格粒子方法.在该方法中,流体域 Ω 被离散为一系列性质相同的粒子,这些粒子不仅用于估算场变量和近似控制方程,而且表征着介质系统的密度、速度和压力等物理属性.

2.1 控制方程的离散

在 SPH 方法中,对流体控制方程组有多种不同的离散形式^[20].本文对质量和动量守恒方程采用如下 SPH 离散形式^[16]:

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_j m_j (v_i^\beta - v_j^\beta) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}, \quad (9)$$

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt}\right)_i = \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2}\right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} + F_i^\alpha, \quad (10)$$

式中, m_j, ρ_j 和 v_j^β 分别表示第 j 个粒子的质量、密度和速度的第 β 个分量, $W_{ij} = W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h)$ 表示核函数, h 是核函数影响区域的光滑长度.本文对所有数值模拟均采用分段三次样条函数作为核函数,此时支持域半径为 $2h$.

对于 PTT 本构方程,其 SPH 离散主要取决于速度偏导数的离散,因此本文引入

$$k_i^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\beta}\right)_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (11)$$

于是,PTT 本构方程的 SPH 离散格式可写为

$$\left(\frac{d\tau^{\alpha\beta}}{dt}\right)_i = k_i^{\alpha\gamma} \tau_i^{\gamma\beta} + k_i^{\beta\gamma} \tau_i^{\gamma\alpha} - \frac{f(\text{tr}(\boldsymbol{\tau}_i))}{\lambda_1} \tau_i^{\alpha\beta} + \frac{2\eta_p}{\lambda_1} d_i^{\alpha\beta}. \quad (12)$$

2.2 消除张力不稳定性的人工应力方法

当 SPH 方法应用到具有材料强度的固体力学问题时,会产生张力不稳定性^[21].本文研究发现,若应用 SPH 方法直接解决三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题,也会出现张力不稳定性,如图 1 所示.目前,许多学者已提出不同的方法用于消除张力不稳定性.在本文,作者将采用 Monaghan^[22]和 Gray 等^[23]提出的人工应力方法.该方法的基本思想是对相互作用的两个粒子施加一个小排斥力,以防止它们靠得过近,其具体表达式为^[22-23]

$$S_{ij}^{\alpha\beta} = f_{ij}^n (R_i^{\alpha\beta} + R_j^{\alpha\beta}), \tag{13}$$

式中, $n = W(0, h) / W(\delta_0, h)$ 为指数型因子, $f_{ij} = W_{ij} / W(\delta_0, h)$ 为人工应力系数, $R^{\alpha\beta}$ 为人工应力张量, δ_0 为相邻粒子间的初始间距.

对于二维数值模拟,人工应力张量 $R^{\alpha\beta}$ 可通过平面直角坐标系的旋转计算得到.然而,对于三维数值模拟,其坐标系的旋转计算十分繁琐.为此,本文采用如下较简化的人工应力张量表达式:

$$R^{\alpha\beta} = \begin{cases} -b\sigma^{\alpha\beta} / \rho^2, & \sigma^{\alpha\beta} > 0, \\ 0, & \sigma^{\alpha\beta} \leq 0, \end{cases} \tag{14}$$

式中, b 为常数,其值介于 0 和 1 之间.数值试验表明,该简化的人工应力表达式不仅能够有效地消除张力不稳定性问题,而且避免了三维直角坐标系的旋转计算,更适合三维空间的数值模拟.

于是,通过添加人工应力,动量守恒方程的 SPH 离散格式可写为

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt} \right)_i = \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} + S_{ij}^{\alpha\beta} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} + F_i^\alpha. \tag{15}$$

2.3 一种适合三维数值模拟的改进固壁边界处理

固壁边界的处理是 SPH 计算实施过程的一个重要组成部分,其处理是否得当,将直接影响到数值模拟的效率和稳定性.

目前应用较广泛的固壁边界处理方法有 Monaghan^[10]提出的边界排斥力法和 Morris 等^[24]提出的虚拟粒子法.前者计算简便,耗时少,但容易形成初始扰动,守恒性较差.后者能够很好地弥补边界处粒子的缺失问题,但虚粒子速度等物理量需要通过内部流体粒子的物理量插值得到,容易导致插值误差.尽管 Fang 等^[16]对其进行了改进,但需在流体区域靠近边界处构造一层伪粒子,再通过伪粒子的各物理量进行插值计算.而事实上,要得到伪粒子的各物理量,需事先对其支持域内所有流体粒子进行正则化插值计算.一方面,这极大地浪费了计算时间;另一方面,对于复杂边界问题,其伪粒子构造过程十分繁琐.

基于上述原因,本文提出一种适合三维数值模拟的改进固壁边界处理方法.改进的固壁边界处理方法采用两类虚粒子,即固壁上虚粒子和固壁外虚粒子.首先,在固壁上以粒子初始间距 δ_0 规则布置一层固壁上虚粒子.与 Monaghan^[10]方法不同的是,为防止粒子穿透固壁边界,固壁上虚粒子将不再用于对邻近边界的流体粒子施加排斥力.而类似于 Morris 等^[24]的工作,固壁上虚粒子参与控制方程中速度、压力和弹性偏应力的计算.在计算过程中,固壁上虚粒子的密度和位置始终保持不变.固壁上虚粒子的压力和弹性偏应力通过其支持域内所有流体粒

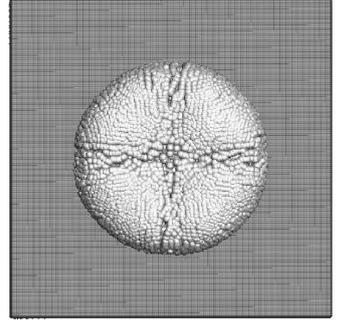


图 1 三维 PTT 液滴产生张力不稳定性 SPH 结果

Fig. 1 The SPH result of 3D PTT droplet with tensile instability

子的压力和弹性偏应力的加权平均得到,且采用 SPH 正则化插值公式,其表达式如下:

$$P_i = \frac{\sum_j (m_j/\rho_j) P_j W_{ij}}{\sum_j (m_j/\rho_j) W_{ij}}, \quad (16)$$

式中, P 代表压力或弹性偏应力, i 表示固壁上虚粒子, j 表示与粒子 i 相邻的流体粒子, 公式中的求和仅针对流体粒子。

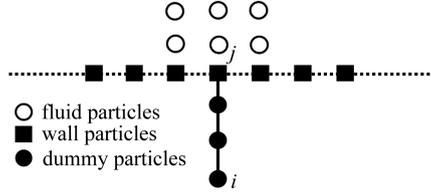


图2 固壁边界处理示意图

Fig. 2 Schematic of the wall boundary treatment

其次,为弥补边界处粒子的缺失问题,在固壁外以粒子初始间距 δ_0 规则布置若干层固壁外虚粒子.此时,若干层固壁外虚粒子可看作是固壁上虚粒子在边界处外法向上的垂直延伸,其垂直间距为粒子初始间距 δ_0 .与固壁上虚粒子相似,固壁外虚粒子的密度和位置也始终保持不变.然而,与 Fang 等^[16]不同的是,固壁外虚粒子的速度、压力和弹性偏应力不再通过构造内部伪粒子进行插值计算得到.本文中,每个固壁外虚粒子均有唯一的固壁上虚粒子与之相链接,其链接关系如图 2 所示.为满足无滑移边界条件,固壁上和固壁外虚粒子的速度均设置为 0.为满足齐次 Neumann 边界条件,固壁外虚粒子的压力和弹性偏应力的取值与相链接的固壁上虚粒子保持一致。

相比于 Fang 等^[16]的方法,本文提出的改进固壁边界处理方法将不再需要构造流体区域靠近边界处的伪粒子,从而避免了应用式(16)对伪粒子进行正则化插值的繁琐操作.数值试验表明,本文提出的改进固壁边界处理方法不仅能够很好地防止粒子穿透固壁,而且程序设计简单,能够大幅度减少三维数值模拟所消耗的计算时间。

3 液滴撞击固壁面问题模拟

3.1 计算模型

本文研究基于 PTT 本构模型的三维液滴撞击固壁面问题,其计算模型如图 3 所示.考虑三维液滴,其直径 $D = 0.02$ m,其中心位于 $(0, 0, 0.04)$ m.固壁面几何尺寸取为 $\{(x, y, z) : -0.03 \text{ m} \leq x \leq 0.03 \text{ m}, -0.03 \text{ m} \leq y \leq 0.03 \text{ m}, z = 0 \text{ m}\}$.当 $t = 0$ 时,液滴处于无应力状态,初始速度为 $V = -1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$;当 $t > 0$ 时,液滴在重力加速度 g 的作用下开始加速下落,直至撞击固壁面发生铺展变形。

数值模拟中,液滴密度 $\rho = 1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$,液滴松弛时间 $\lambda_1 = 0.02 \text{ s}$,总黏度 $\eta = 4 \text{ Pa} \cdot \text{s}$,溶剂黏度 $\eta_s = 0.4 \text{ Pa} \cdot \text{s}$,聚合物黏度 $\eta_p = 3.6 \text{ Pa} \cdot \text{s}$,重力加速度 $g = -9.81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$,声速 $c = 12.5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.粒子初始间距设置为 $\delta_0 = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}$,对应粒子总数 $N = 500\,085$ 个,其中流体粒子数为 267 761 个,固壁上虚粒子数为 58 081 个,固壁外虚粒子数为 174 243 个.核函数采用分段三次样条函数,光滑长度设置为 $h = 1.5\delta_0$.采用蛙跳格式进行时间积分,时间步长取为 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$.为了消除张力不稳定性,本文对所有数值模拟均取人工应力系数 $b = 0.5$.

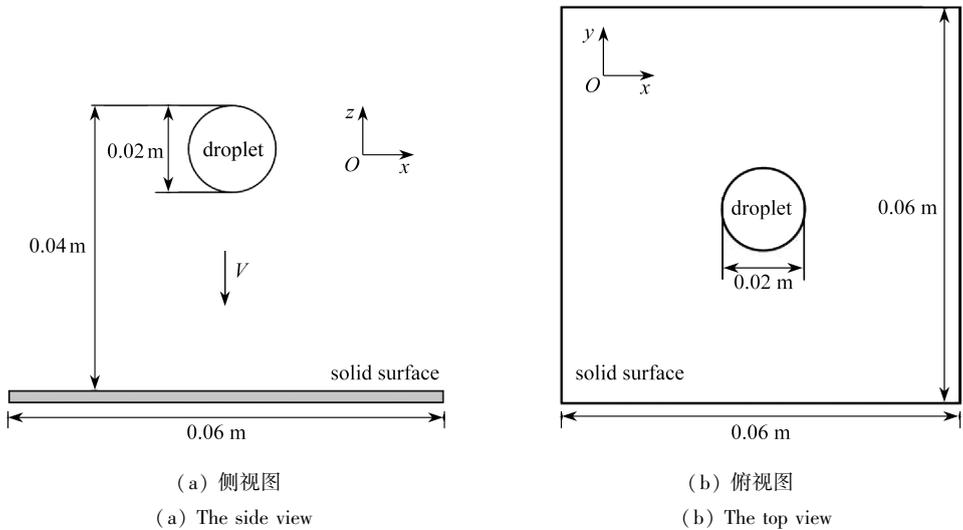


图3 三维液滴撞击固壁面问题的计算模型

Fig. 3 Schematic of a 3D droplet impacting onto a solid surface

3.2 算例及结果分析

3.2.1 有效性验证

目前,三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题尚没有文献报道,但值得注意的是,当 PTT 拉伸参数 $\varepsilon = 0$ 时,PTT 本构模型将退化为 Oldroyd-B 本构模型,而对于三维 Oldroyd-B 黏弹性液滴撞击固壁面问题,Figueiredo 等^[6]采用有限差分法进行了数值模拟,因此,为了验证 SPH 方法模拟三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题的有效性,本文首先对三维 Oldroyd-B 黏弹性液滴撞击固壁面问题进行数值模拟,另外,为了较好地体现黏弹性流体所特有的黏弹特性,本文也对三维 Newton 液滴撞击固壁面问题进行了数值模拟。

图 4(a)和图 4(b)分别给出了 Newton 液滴和 Oldroyd-B 液滴的宽度随时间的变化曲线,并将本文 SPH 结果和 Figueiredo 等^[6]的 FDM 结果进行了对比,值得注意的是,为了便于分析,这里采用无量纲时间 $T = tV/D$ 记录液滴的运动历程,从图 4 看出,本文 SPH 结果与 Figueiredo 等^[6]的 FDM 结果吻合较好,从而验证了 SPH 方法模拟三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题的有效性,进一步地,为了研究 SPH 方法模拟三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题的数值收敛性,本文特别增加了总粒子数分别为 156 459(对应于 $\delta_0 = 4.0 \times 10^{-4}$ m)和 885 697(对应于 $\delta_0 = 2.0 \times 10^{-4}$ m)的数值模拟,所有数值模拟的时间步长均取为 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$,以保证数值稳定性,所有数值模拟得到的 Newton 液滴和 Oldroyd-B 液滴的宽度随时间的变化曲线分别如图 4(a)和图 4(b)所示,不难看出,随着所用粒子数目的增加,本文改进 SPH 方法对于模拟三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题具有较好的数值收敛性。

另外,为了表明本文提出的改进固壁边界处理方法具有较高的计算效率,本文也采用 Fang 等^[16]固壁边界处理方法进行了数值模拟研究,表 1 给出了采用不同固壁边界处理方法模拟 Newton 液滴和 Oldroyd-B 液滴所消耗计算时间的对比结果,很明显,本文提出的改进固壁边界处理方法能够大幅度地减少模拟所消耗的计算时间,这是由于该方法避免了 Fang 等^[16]边界处理方法中对伪粒子进行正则化插值处理的繁琐计算,总之,本文提出的改进固壁边界处理方法不仅能够很好地防止粒子穿透固壁,而且程序设计简单,能够大幅度减少三维数值模拟所消耗的计算时间。

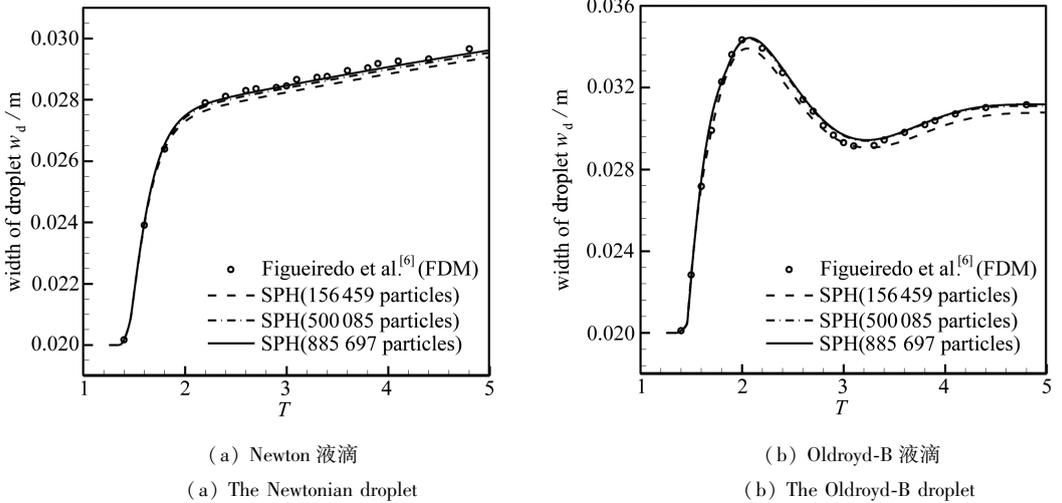


图 4 液滴宽度随时间的变化曲线

Fig. 4 The curves of the width of droplet varying with time

表 1 使用不同固壁边界处理方法所消耗时间的对比结果

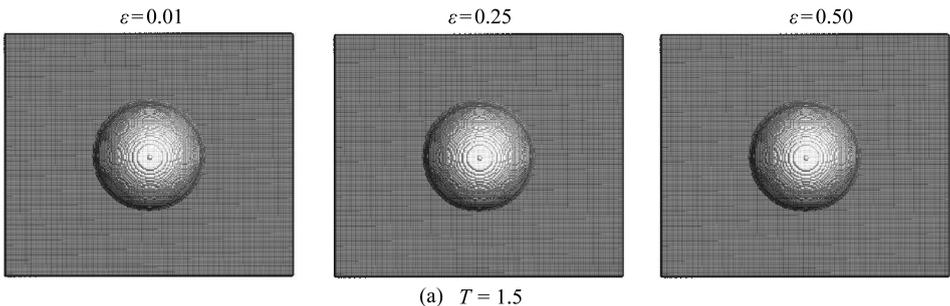
Table 1 The comparison of CPU times between different boundary treatment techniques

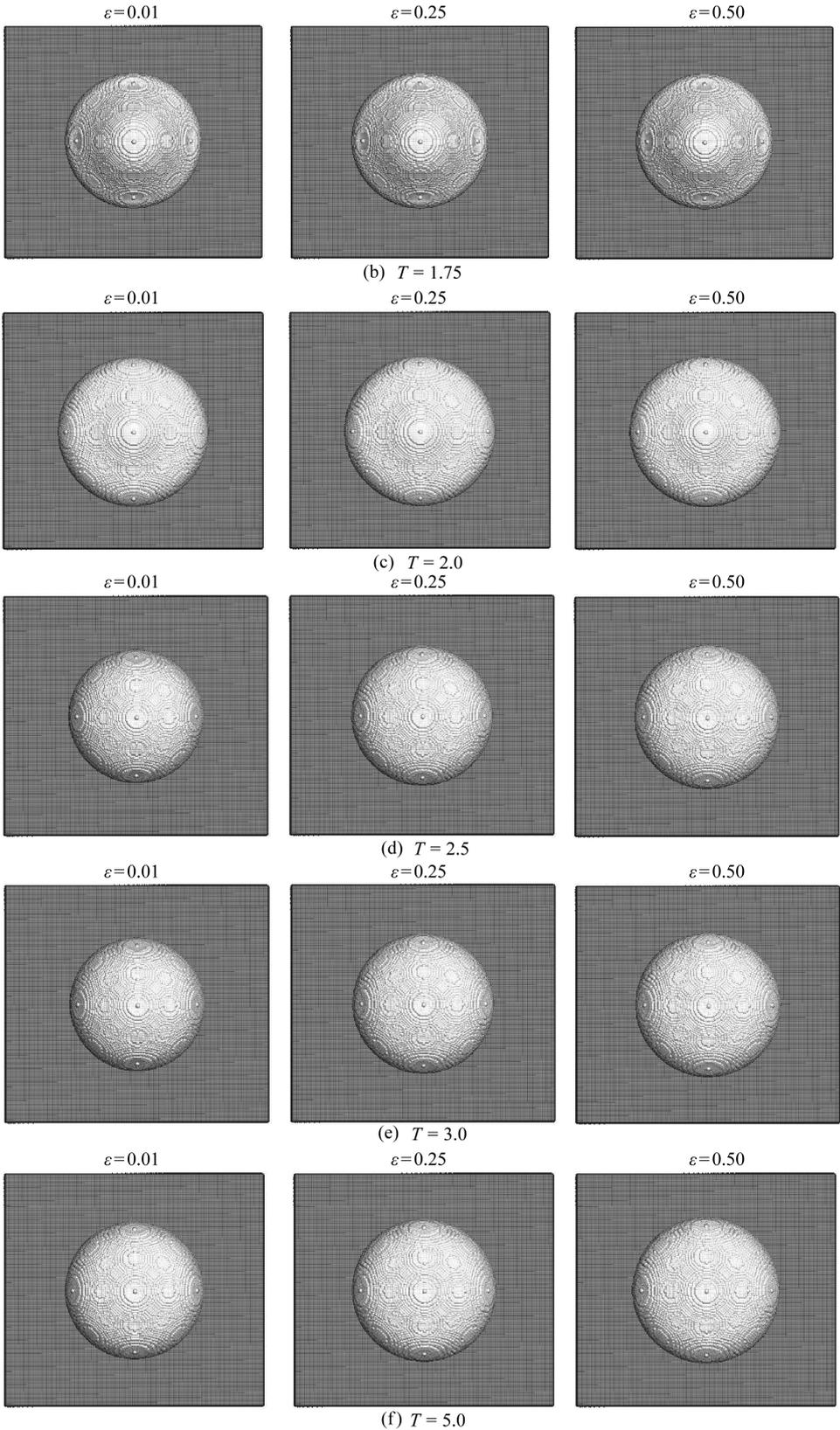
number of time steps N	CPU time t_c / s	
	present boundary treatment	boundary treatment by Fang et al. ^[16]
Newtonian droplet	100	1 513.22
	200	3 119.53
Oldroyd-B droplet	100	1 906.36
	200	3 911.42

3.2.2 拉伸参数 ε 对流动过程的影响

接下来,本文研究 PTT 拉伸参数 ε 对液滴铺展过程的影响.对于三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题,本文数值模拟了 17 500 个时间步数,这需要在联想深腾 1800 高性能服务器上使用 16 个处理器运行大约 11 h.

图 5 给出了 ε 取不同数值时 ($\varepsilon = 0.01, 0.25$ 和 0.5) PTT 液滴在几个不同时刻的俯视图.可以看出,不同 PTT 液滴铺展过程均经历了 3 个阶段:第 1 阶段,液滴撞击固壁面后,开始径向铺展;第 2 阶段,液滴铺展达到极大值后,由于受弹性力作用的影响,表现出特有的收缩效应;第 3 阶段,当液滴收缩到极小值后,液滴的弹性力逐渐变弱,以类似于 Newton 液滴的方式重新缓慢铺展.另外,由图 5 可知,随着 ε 的增大,PTT 液滴在第 2 阶段的收缩效应越来越弱(对应于 $T = 2.5$ 和 3.0),而在第 3 阶段的铺展趋势越来越明显(对应于 $T = 5.0$ 和 10.0).





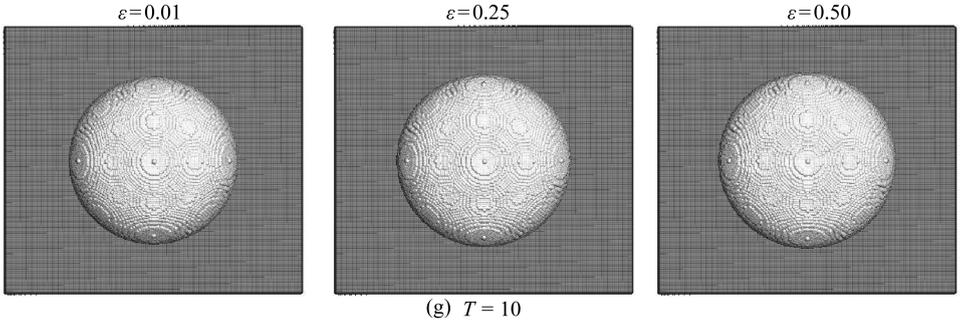


图 5 三维 PTT 液滴撞击固壁面的 SPH 俯视图

Fig. 5 The top views of 3D PTT droplets impacting on solid surfaces

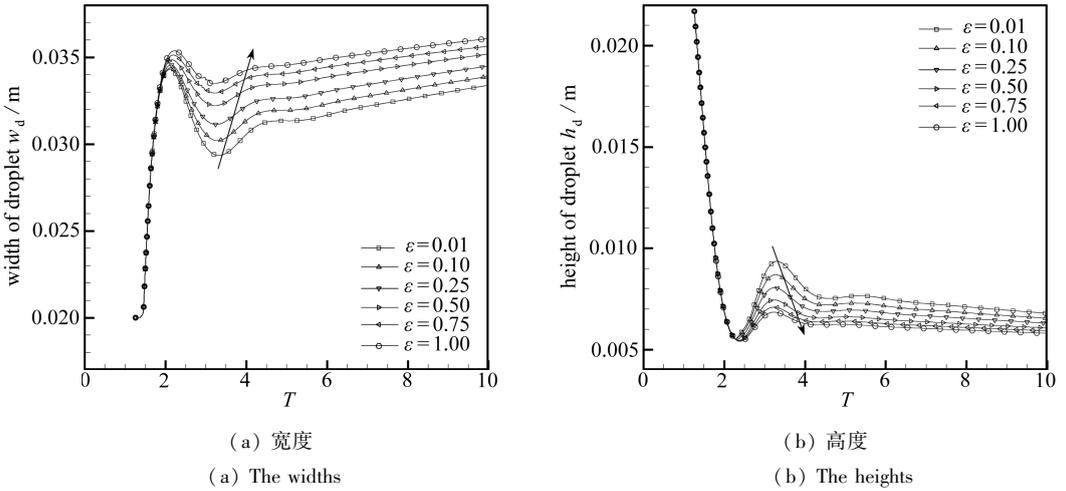


图 6 不同 ϵ 下 PTT 液滴的宽度和高度随时间的变化曲线

Fig. 6 The calculated results of the time-varying widths and heights of PTT droplets for different ϵ values

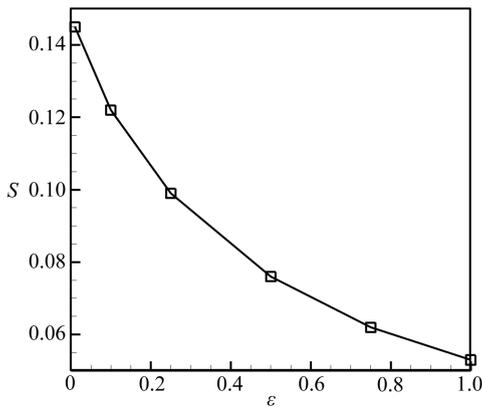


图 7 不同 ϵ 下 PTT 液滴的弹性收缩比值

Fig. 7 The calculated results of the contraction ratios of PTT droplets for different ϵ values

为了定量地研究 ϵ 对液滴铺展过程的影响,图 6(a)和图 6(b)分别给出了不同 ϵ ($\epsilon = 0.01, 0.1, 0.25, 0.5, 0.75$ 和 1.0) 下 PTT 液滴的宽度和高度随时间的变化曲线.由图 6 可以看出,不同 ϵ 对液滴首次铺展达到极大值阶段的影响比较小,但对后两个阶段的影响比较大,即 ϵ 越大,液滴在收缩阶段达到的极小值越大,这直接导致了 PTT 液滴在再次铺展阶段的宽度增

大,而高度减小。

进一步地,为了更合理地描述 PTT 黏弹性液滴的收缩效应,本文引入弹性收缩比,定义为

$$S = \frac{d_{\max} - d_{\min}}{d_{\max}}, \quad (17)$$

式中, d_{\max} 表示液滴在第1阶段径向铺展所达到的极大值, d_{\min} 表示液滴在第2阶段收缩所达到的极小值。图7给出了不同 ε 值 ($\varepsilon = 0.01, 0.1, 0.25, 0.5, 0.75$ 和 1.0) 下 PTT 液滴的弹性收缩比值。很明显,随着 ε 的增大,液滴的弹性收缩比呈下降趋势,这与图6所得结论是相吻合的。该现象可被解释如下:参数 ε 影响 PTT 黏弹性流体的拉伸行为,故 ε 越大,PTT 液滴在同一剪切速率下的拉伸粘度越大,拉伸作用也更加明显,这使得液滴的弹性所占比重较小,从而导致了液滴在再次铺展阶段的宽度增大,而高度减小,所对应的弹性收缩比值呈下降趋势。

4 结 论

本文应用改进 SPH 方法对三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题进行了数值模拟研究。首先,为了有效地防止粒子穿透固壁,且缩减三维数值模拟所消耗计算时间,提出了一种适合三维数值模拟的改进固壁边界处理方法。其次,为了消除张力不稳定性问题,采用一种简化的人工应力技术。最后,应用改进 SPH 方法数值模拟了三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题。本文所得结论如下:

- 1) 改进的固壁边界处理方法不仅能够很好地防止粒子穿透固壁,而且程序设计简单,能够大幅度减少三维数值模拟所消耗的计算时间。
- 2) 简化的人工应力方法不仅能够有效地消除张力不稳定性问题,而且避免了三维直角坐标系的旋转计算,更适合三维空间的数值模拟。
- 3) 改进的 SPH 方法能够有效而准确地描述三维 PTT 黏弹性液滴撞击固壁面问题的复杂流变特性和自由面变化特征。
- 4) PTT 拉伸参数 ε 对液滴铺展过程有着重要的影响,即 ε 越大,液滴的宽度增大,而高度减小,弹性收缩比值越小。

致谢 作者衷心感谢陕西理工学院博士科研启动基金(SLGKYQD2-15)对本文的资助。

参考文献(References):

- [1] Tran T, Staat J J, Prosperetti A, Sun C, Lohse D. Drop impact on superheated surfaces[J]. *Physical Review Letters*, 2012, **108**(3): 036101.
- [2] 谢驰宇, 张建影, 王沫然. 液滴在固体平表面上均匀蒸发过程的格子 Boltzmann 模拟[J]. 应用数学和力学, 2014, **35**(3): 247-253. (XIE Chi-yu, ZHANG Jian-ying, WANG Mo-ran. Lattice Boltzmann simulation of droplet evaporation on flat solid surface[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2014, **35**(3): 247-253. (in Chinese))
- [3] 夏盛勇, 胡春波. 三氧化二铝液滴对心碰撞直接数值模拟[J]. 应用数学和力学, 2014, **35**(4): 377-388. (XIA Sheng-yong, HU Chun-bo. Direct numerical simulation of head-on binary collision of aluminum oxide droplets[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2014, **35**(4): 377-388. (in Chinese))
- [4] Tomé M F, Mangiavacchi N, Cuminato J A, Castelo A, McKee S. A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2002, **106**(2/3): 61-106.

- [5] Oishi C M, Martins F P, Tomé M F, Alves M A. Numerical simulation of drop impact and jet buckling problems using the extended Pom-Pom model[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2012, **169**(1): 91-103.
- [6] Figueiredo R A, Cuminato J A, Oishi C M. Estudo numérico do impacto da gota 3D: influência dos parâmetros do modelo viscoelástico Giesekus[C]//*Congresso de Matemática Aplicada e Computacional(CMAC)*, 2013: 73-76.(in Brazil)
- [7] Lucy L B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis[J]. *Astronomical Journal*, 1977, **83**(1): 1013-1024.
- [8] Gingold R A, Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics theory and application to non-spherical stars[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 1977, **181**(1): 375-389.
- [9] Liu G R, Liu M B. *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Meshfree Particle Method*[M]. Singapore: World Scientific, 2003.
- [10] Monaghan J J. Simulating free surface flows with SPH[J]. *Journal of Computational Physics*, 1994, **110**(2): 399-406.
- [11] Le Touzé D, Colagrossi A, Colicchio G, Greco M. A critical investigation of smoothed particle hydrodynamics applied to problems with free-surface[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2013, **73**(7): 660-691.
- [12] Cummins S J, Rudman M. An SPH projection method[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, **152**(2): 584-607.
- [13] XU Xiao-yang, OUYANG Jie, JIANG Tao, LI Qiang. Numerical analysis of the impact of two droplets with a liquid film using an incompressible SPH method[J]. *Journal of Engineering Mathematics*, 2014, **85**(1): 35-53.
- [14] Monaghan J J, Kocharyan A. SPH simulation of multi-phase flow[J]. *Computer Physics Communications*, 1995, **87**(1/2): 225-235.
- [15] ZHOU Guang-zheng, GE Wei, LI Bo, LI Xi-peng, WANG Peng, WANG Jun-wu, LI Jing-hai. SPH simulation of selective withdrawal from microcavity[J]. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2013, **15**(4): 481-490.
- [16] Fang J N, Owens R G, Tacher L, Parriaux A. A numerical study of the SPH method for simulating transient viscoelastic free surface flows[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2006, **139**(1/2): 68-84.
- [17] Rafiee A, Manzari M T, Hosseini M. An incompressible SPH method for simulation of unsteady viscoelastic free-surface flows[J]. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 2007, **42**(10): 1210-1223.
- [18] 杨波, 欧阳洁, 蒋涛, 许晓阳. PTT 黏弹性流体的光滑粒子动力学方法模拟[J]. *力学学报*, 2011, **43**(4): 667-673.(YANG Bo, OUYANG Jie, JIANG Tao, XU Xiao-yang. Numerical simulation of the viscoelastic flows for PTT model by the SPH method[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2011, **43**(4): 667-673.(in Chinese))
- [19] Phan-Thien N, Tanner R T. A new constitutive equation derived from network theory[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1977, **2**(4): 353-365.
- [20] Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics and its diverse applications[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2012, **44**(1): 323-346.
- [21] Sweigle J W, Hicks D L, Attaway S W. Smoothed particle hydrodynamics stability analysis[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, **116**(1): 123-134.

- [22] Monaghan J J. SPH without a tensile instability[J]. *Journal of Computational Physics*, 2000, **159**(2): 290-311.
- [23] Gray J P, Monaghan J J, Swift R P. SPH elastic dynamics[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2001, **190**(49/50): 6641-6662.
- [24] Morris J P, Fox P J, Zhu Y. Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH [J]. *Journal of Computational Physics*, 1997, **136**(1): 214-226.

Numerical Simulation of 3D PTT Droplet Impact Onto Solid Surface With an Improved Smoothed Particle Hydrodynamics Method

XU Xiao-yang, PENG Yan, DENG Fang-an

(*School of Mathematics and Computer Science, Shaanxi University of Technology, Hanzhong, Shaanxi 723000, P.R.China*)

Abstract: Based on an improved smoothed particle hydrodynamics (SPH) method, the spreading deformation of 3D PTT droplets impacting onto solid surface was numerically simulated. In order to prevent the fluid particles from crossing the surface, an improved treatment technique for the surface boundary was proposed, which can drastically reduce the consumed CPU time for 3D numerical simulation. Furthermore, an artificial stress term was added to the momentum equation to remove the so-called tensile instability. The dynamic processes of 3D PTT droplets impacting onto solid surface were numerically simulated with the improved SPH method. The different flowing features between the Newtonian and PTT fluid droplets during impacting were discussed. The effects of the elongational parameter on the collision behavior were analyzed in detail. The simulation results demonstrate that the improved SPH method can effectively describe the rheological characteristics of 3D PTT droplets impacting onto solid surface.

Key words: smoothed particle hydrodynamics; 3D; Phan-Thien-Tanner; viscoelastic; droplet; solid surface

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(11305097)