

文章编号: 1000-0887(2006) 01-0060-07

液滴碰撞和聚合模型研究^{*}

李 强, 蔡体敏, 何国强, 胡春波

(西北工业大学 航天学院, 西安 710072)

(林建忠推荐)

摘要: 建立了描述液滴碰撞和聚合过程的数学模型, 设计了一种高效的计算液滴碰撞对搜索算法, 并在已有研究成果的基础上对液滴碰撞的结果做了进一步的发展。借助平滑粒子流体动力学方法两种实现方式各自的优点, 将液滴间的相互作用局限在其周围一定数目的液滴之间, 并采用积分核函数定义了液滴间碰撞的概率, 通过数值模拟探讨了模型的特性。结果表明, 所建模型对所采用的计算网格没有明显的依赖性, 具有较高的计算精度和计算效率, 不但能很好地维持系统动量的守恒性, 而且对液滴初始尺寸分布没有明显的依赖性。

关键词: 液雾; 液滴; 碰撞和聚合; 数学模型

中图分类号: V430 **文献标识码:** A

引 言

液雾中液滴间存在着碰撞和聚合过程, 这一物理现象已经引起越来越多的关注。Kitron^[1]指出由碰撞诱发的破碎与聚合对液滴尺寸的分有很大的影响。Marion^[2]通过实验研究, 指出气流湍流度对液滴的破碎和聚合有很大影响, 但其计算模型中假设液滴在破碎时只能破碎成两个大小相同的液滴, 在聚合时也只能大小相等的液滴发生聚合。目前描述液滴间碰撞和聚合过程的数学模型以 O' Rourke^[3]提出的模型最具代表性, 但该模型存在网格依赖性很强、计算量大、工程计算精度低等缺点^[4]。在 O' Rourke 模型的基础上, Bird^[5]提出了 TC 模型, 但该模型对所假定的液滴分布有很大的依赖性。为减小计算量, Schmidt^[6]提出了 NTC 模型, 和 O' Rourke 模型相比, 该模型以每次生成离散相计算网格和新的计算液滴为代价减小了计算量, 但两套计算网格的存在给动量的耦合计算带来了困难, 计算液滴的随机生成也可能使系统动量出现不守恒现象, 计算结果表明该模型也存在对计算网格的依赖性。

本文基于平滑粒子流体动力学(SPH smoothed particle hydrodynamics)^[7]方法的基本思想, 建立了新的描述液滴间碰撞和聚合过程的数学模型, 并通过数值模拟对模型的属性进行了探讨。

1 液滴碰撞和聚合模型

在建立液滴碰撞和聚合模型时, 需要解决的主要问题包括: 计算液滴碰撞对的搜索; 计算

* 收稿日期: 2004_10_27; 修订日期: 2005_05_31

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50376054); 航空科学基金资助项目(03c53021)

作者简介: 李强(1976—), 男, 陕西人, 博士(联系人. Tel: + 86_29_88492417; Fax: + 86_29_88494163;

E_mail: liqiangnpu@sina.com)•

液滴碰撞与否的判断及液滴碰撞的结果。本文利用 SPH 方法两种不同实现方式各自的优点解决液滴碰撞和聚合模型中前两个问题。

1.1 计算液滴碰撞对的搜索

由于液滴间的碰撞最有可能发生在距离最近的液滴之间, 较远距离的液滴间碰撞的概率几乎为 0, 所以为了提高计算精度, 减少可能发生碰撞的计算液滴对的搜索次数, 本文借用 SPH 方法第二种实现方式的优点, 将可能发生碰撞的计算液滴按液滴间的相对距离局限在其周围 N_0 个计算液滴之间, 考虑到湍流对液滴的扩散作用, 对二维情况取 $N_0 = 18$, 对三维情况取 $N_0 = 54$ 。

采用该方法确定液滴碰撞对搜索范围的优点在于用计算液滴间的相对距离代替了 O'Rourke 模型中计算网格对计算液滴的限制, 从根本上消除了计算网格大小、形状和计算液滴空间分布密度对液滴碰撞结果的直接影响, 减少了计算液滴碰撞对的搜索次数, 使计算量维持在和计算液滴数相同的数量级上。

针对以上模型, 本文提出了一种快速的搜索算法。在液滴碰撞对的搜索过程中, 最终目标是对计算液滴 P^0 , 根据液滴间的相对距离筛选出距离最近的 N_0 个计算液滴 P^1, P^2, \dots, P^{N_0} 来组成可能发生碰撞的计算液滴碰撞对集合 $(P^0, P^1), (P^0, P^2), \dots, (P^0, P^{N_0})$ 。

搜索算法描述如下:

1) 将和 P^0 所处的网格相邻的 N_{cell} 个(二维时 $N_{\text{cell}} = 9$, 三维时 $N_{\text{cell}} = 27$) 网格内所有的计算液滴作为本次搜索的对象, 假设共有 N_p 个计算液滴, 如果 $N_p < N_0$, 将 N_{cell} 扩大一倍并返回第 1 步。

2) 将搜索到的计算液滴记为集合 G_0 , 计算出这 N_p 个计算液滴和 P^0 的相对距离 d_1, d_2, \dots, d_{N_p} 。

3) 以 d_1, d_2, \dots, d_{N_p} 的平均值 d_c 作为阈值, 将这 N_p 个计算液滴分成集合 G_L 和 G_S , 分别由相对距离大于和小于 d_c 的计算液滴组成。

4) 判断第 3 步形成的集合 G_S 中的计算液滴数 N_S 是否大于 N_0 , 如果是, 则将 G_S 作为 G_0 , 返回第 2 步; 否则, 保存 G_S , 将 G_L 作为 G_0 , 用 $N_0 - N_S$ 取代 N_0 并返回第 2 步, 直到 $N_0 = N_S$ 。

将该过程用一个简单的例子说明。要求从 10 个液滴中选取距离最近的 4 个液滴, 搜索过程如图 1 所示。

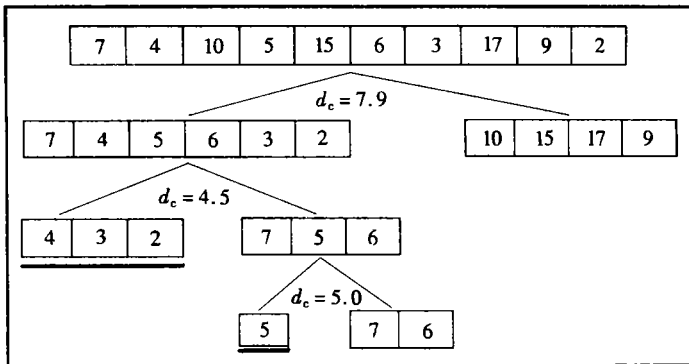


图 1 液滴碰撞对搜索过程示意图

1.2 液滴间碰撞的判断

对于计算液滴碰撞对之间碰撞与否的判断, O' Rourke 模型通过选取随机数的方法, 使其模型计算结果的随机性较大, 同时将计算液滴的普遍性绝对化。本文按照 O' Rourke 提出的球形计算液滴模型, 借助 SPH 方法第一种实现方式的思想, 将计算液滴类比为 SPH 方法中负载物理量的粒子, 以质量为例, 计算液滴所负载的质量将以积分核的形式在空间连续展开, 它所代表的真实液滴数密度在空间也将按积分核的形式连续分布, 这样一个液滴与另一个计算液滴所代表的液滴中一个液滴发生碰撞的概率就是积分核函数在该处的值, 所以在本文模型中采用 SPH 积分核函数来定义液滴间碰撞的概率。

对于编号为 i 计算液滴 P^i , 首先根据上文提出的搜索算法, 确定可能和它发生碰撞的计算液滴, 编号记为 $\{i_1, i_2, \dots, i_{N_0}\}$, 对于计算液滴碰撞对 (P^i, P^{i_m}) , $i_m = i_1, i_2, \dots, i_{N_0}$, 假设其位移分别为 x_i, x_{i_m} , 速度分别为 V_i, V_{i_m} , 如果

$$(x_i - x_{i_m}) \cdot (V_i - V_{i_m}) > 0, \quad (1)$$

此时两个液滴向着相同的方向运动, 认为这两个液滴之间不可能发生碰撞。将满足条件 $(x_i - x_{i_m}) \cdot (V_i - V_{i_m}) < 0$ 的所有计算液滴的编号记为集合 $\{i_1, i_2, \dots, i_n\}$, 定义

$$s_j = |x_i - x_j|, \\ h = 2\max(s_j), \quad j = i_1, i_2, \dots, i_n, \quad (2)$$

定义编号为 i 的计算液滴中 P^i 一个液滴和编号为 k 的计算液滴 P^k ($k = i_1, i_2, \dots, i_n$) 中一个液滴发生碰撞的概率

$$P_{ik} = \frac{1}{h^{\dim} \pi^{\dim/2}} \exp\left(-\frac{s_{ik}^2}{h^2}\right), \quad (3)$$

其中 \dim 是空间的维数。

2 液滴碰撞结果

对于液滴碰撞的结果, O' Rourke 模型通过选取随机数将碰撞结果分为反弹和聚合两种状况, 而研究表明影响液滴碰撞结果的因素很多, 并根据实验现象将其可分为反弹、聚合和瞬间聚合 3 类。

Brazier_Smith^[8] 研究了聚合和瞬间聚合两种类型间的临界值, 其结论用数学公式可以表示如下, 当

$$E > E_{\text{coal}} \quad (4)$$

时, 液滴将发生瞬间聚合, 式中 E 和 E_{coal} 是聚合效率及其临界值^[8]。对于发生瞬间聚合的液滴, 其碰撞后的速度将由动量和能量守恒定律计算, 恢复系数 f_{μ} 定义如下:

$$f_{\mu} = \frac{E^{1/2} - E_{\text{coal}}^{1/2}}{1 - E_{\text{coal}}^{1/2}}. \quad (5)$$

当式(4)不能满足时, 液滴碰撞的结果可能是聚合或反弹, 对此 Jayaratne^[9] 进行了研究并指出液滴发生聚合的条件为:

$$R > E_{\text{boun}}, \quad (6)$$

其中 R 为 $[0, 1]$ 间的随机数, E_{boun} 是反弹效率^[9]。当(6)式不满足时, 液滴将发生反弹, 反弹后液滴速度的计算仍采用动量和能量守恒定律计算, 恢复系数 f_{μ} 则按下式计算:

$$f_{\mu} = (R^{1/2} - E_{\text{boun}}^{1/2}) / (1 - E_{\text{boun}}^{1/2}). \quad (7)$$

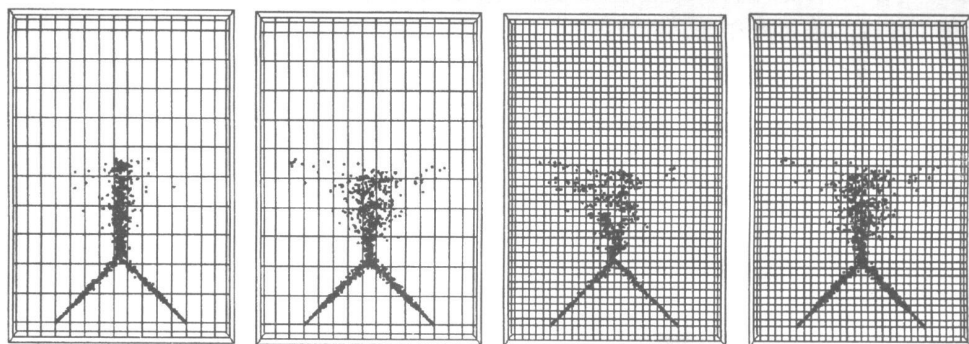
3 模型校验

3.1 液滴碰撞和聚合模型对计算网格的依赖性

和 O' Rourke 系列模型相比较, 本文所建模型从理论上对计算网格没有依赖性, 本节将通过数值算例予以说明, 比较的对象为本文模型和 O' Rourke 模型。

3.1.1 液滴碰撞和聚合模型对计算网格大小的依赖性

为研究计算网格大小对液滴碰撞和聚合模型的影响, 本节进行了两种不同大小网格上的数值模拟。计算对象为室温、室压条件下 $15\text{ cm} \times 20\text{ cm}$ 的二维空间内相距 9 cm 的两股垂直水雾间的碰撞过程, 单喷孔流量为 6.0 g/s , 温度为 300 K , 喷雾角为 10° , 液滴初始直径为 $100\text{ }\mu\text{m}$, 速度为 30.0 m/s ; 计算中采用 TAB 模型模拟液滴的破碎过程, 忽略液滴的蒸发; 工况 1 的网格数为 15×21 , 工况 2 为 30×42 。



O' Rourke 模型

本文模型

图 2 工况 1 计算结果中计算液滴分布图

O' Rourke 模型

本文模型

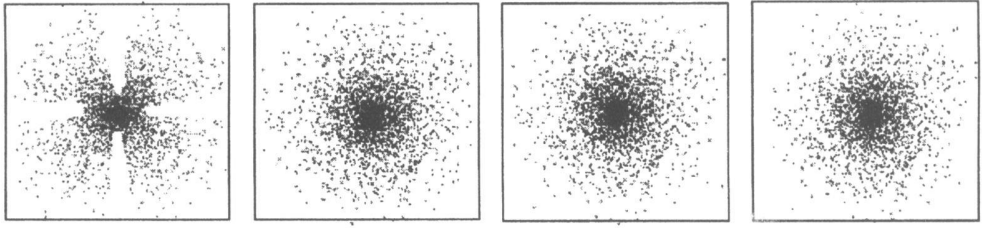
图 3 工况 2 计算结果中计算液滴分布图

图 2 和图 3 给出不同网格大小下计算结果中液滴的分布状况, 可以看出对于 O' Rourke 模型, 在网格加密前, 由于计算网格较大, 交汇点处网格内的液滴数密度很高, O' Rourke 模型会过多地计算液滴间的碰撞和聚合次数, 导致交汇点下游液雾分布比较集中; 网格加密后, 交汇点处单个网格内的液滴数密度减小, O' Rourke 模型能较准确地计算液滴之间的碰撞和聚合过程, 下游液雾呈扇形分布, 这说明 O' Rourke 模型对网格大小有较大的依赖性。对于本文模型, 由于其在液滴碰撞对的选取及碰撞概率的计算中均以液滴间的相对距离为依据, 且随液滴数密度的大小能够自适应调节, 在网格加密前后, 虽然交汇点处网格内的液滴数密度变化很大, 但计算结果中液滴的分布几乎没有变化, 和 O' Rourke 模型在网格加密后的计算结果相近, 这说明本文模型对计算网格的大小没有明显的依赖性。

3.1.2 液滴碰撞和聚合模型对计算网格类型的依赖性

Schmidt^[6]指出 O' Rourke 模型对所采用的网格类型也存在较大的依赖性。为了研究本文模型是否存在同样的依赖性, 本节进行了两种不同网格类型下单喷嘴外的流动, 计算区域为 $10\text{ cm} \times 10\text{ cm} \times 20\text{ cm}$ 的立方体, 液滴垂直立方体的端面射入, 工况 3 采用矩形网格, 工况 4 采用圆柱形网格, 网格剖分数均为 $30 \times 30 \times 60$, 其它计算参数同 3.1.1 节。

图 4 和图 5 给出了两种网格类型下不同模型计算结果中液滴的分布状况, 可以看出, 采用矩形网格时, O' Rourke 模型计算结果中液滴的分布呈现明显的不对称性, 而采用圆柱型计算网格时, 没有出现这一现象, 这和 Schmidt^[6]的研究结果一致; 采用本文模型时, 对于两种网格类型, 计算结果中液滴的分布状况基本一致, 呈现出较好的轴对称性, 这说明本文模型对计算



O' Rourke 模型

本文模型

图 4 工况 3 计算结果中液滴分布图

O' Rourke 模型

本文模型

图 5 工况 4 计算结果中液滴分布图

网格的类型没有明显的依赖性。

3.2 液滴碰撞和聚合模型对计算耗时的影响

从理论分析的角度,假设流场中共有 N 个计算液滴,对于 O' Rourke 模型、NTC 模型和本文模型,用于计算液滴碰撞和聚合所消耗的时间分别为 $o(N^2)$ 、 $o(N\log_2 N)$ 和 $o(N)$ 。本节主要通过算例予以比较,比较的对象为 O' Rourke 模型、NTC 模型和本文模型。

计算对象为一直流自击式喷注器外的流动,喷注器的结构及实验参数见^[10],计算区域为 $4\text{ cm} \times 4\text{ cm} \times 6\text{ cm}$ 的长方体,网格数为 $20 \times 20 \times 30$,考虑液滴的蒸发和破碎过程,并采用 d^2 模型和 TAB 模型模拟;对于 NTC 模型,采用 50%、70% 和 90% 三种计算液滴抽样率。

表 1 给出了计算结果和实验结果的对比,可以看出与 O' Rourke 模型及 NTC 模型相比较,本文模型不但计算精度较高,而且计算耗时短;NTC 模型采取随机抽样的方法减小了计算量,但同时使计算精度明显降低,所以对于 NTC 模型,兼顾计算精度和计算耗时,如何选取合适的抽样率是一个需要进一步研究的问题。

表 1 计算结果和实验结果对比

	25mm 处		50mm 处		计算液滴碰撞和聚合过程所用时间(min)
	SMD(μm)	速度(m/s)	SMD(μm)	速度(m/s)	
实验测量值	83.8	15.4	90.6	18.6	
O' Rourke 模型	111.3	18.7	108.6	21.2	23.5
NTC 模型(50%)	125.7	20.2	124.3	22.4	6.8
NTC 模型(70%)	121.2	19.4	121.5	21.9	12.3
NTC 模型(90%)	109.1	18.1	106.3	21.4	21.4
本文模型	98.1	16.8	98.1	19.5	3.7

3.3 液滴碰撞和聚合模型对动量守恒的影响

由于 NTC 模型对计算液滴进行了随机抽样,造成其计算结果中可能出现动量不守恒现象,而本文模型和 O' Rourke 模型从理论上讲不会造成动量不守恒现象,本节主要通过数值算例予以比较,比较的对象为 NTC 模型和本文模型。

喷雾流动中,由于两相之间存在动量交换,因此总动量包括离散相动量和连续相动量,为了便于比较,本节进行了一个非稳态过程模拟,计算区域为一个 $4\text{ cm} \times 4\text{ cm} \times 10\text{ cm}$ 封闭立方体,网格划分为 $20 \times 20 \times 50$,以酒精为燃料,流量为 12.0 g/s ,流速度为 50.0 m/s ,别的参数同 3.1.1 节;考虑液滴的蒸发和破碎过程,并采用 d^2 模型和 TAB 模型模拟;总流动时间为 2.0 ms ,但只在 $0 \sim 1.5\text{ ms}$ 时间段内进行液体喷雾。

图 6 给出了不同模型计算结果中动量随时间的变化情况,可以看出,NTC 模型采取计算液

滴随机抽样的方法减小了计算量,但造成计算结果中动量不守恒现象比较严重,各动量随时间发生随机脉动,脉动量随抽样率的提高有所减小;而本文模型计算结果中各动量守恒性较好,没有出现脉动现象。

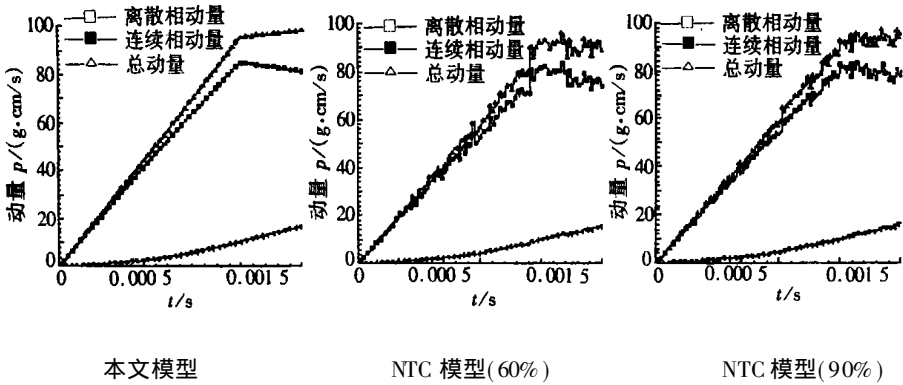


图6 本文模型和 NTC 模型计算结果中动量随时间的变化

3.4 液滴碰撞聚合模型对液滴初始直径分布依赖性

Kitron^[1]指出液滴尺寸的初始分布对 O' Rourke 模型的计算结果有较大的影响,本节将通过数值算例分析不同模型对液滴初始尺寸分布的依赖性,比较对象为 O' Rourke 模型和本文模型。

计算区域为一个 $6\text{ cm} \times 6\text{ cm} \times 20\text{ cm}$ 的开放长方体,网格剖分数为 $60 \times 60 \times 200$,其余参数同 3.3 节;计算中假定液滴初始分布服从 χ^2 分布,取两种不同的液滴初始 SMD,分别为 $160\text{ }\mu\text{m}$ 和 $150\text{ }\mu\text{m}$,记为 PDF1 和 PDF2。

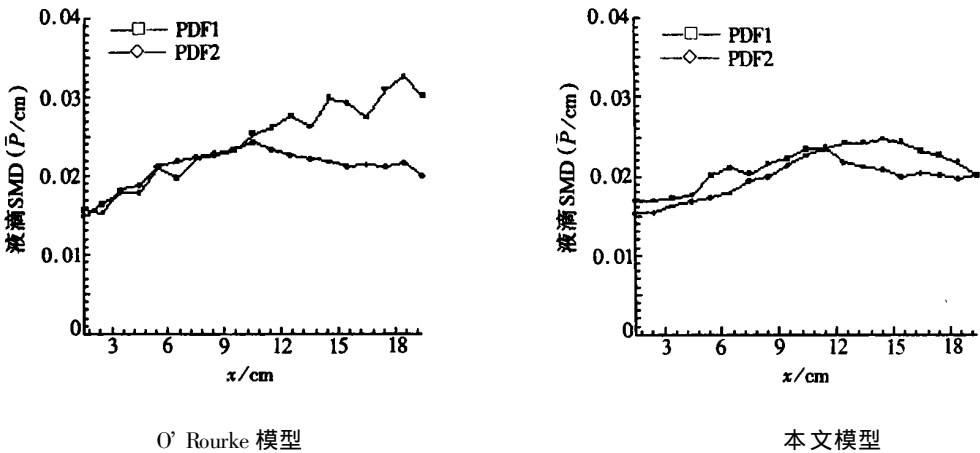


图7 不同模型计算结果中液滴 SMD 沿喷嘴中心线方向的分布

图7给出了不同模型计算结果中液滴 SMD 沿喷嘴轴线方向的分布情况,可以看出采用 O' Rourke 模型时,对于分布 PDF1,沿轴线方向液滴 SMD 呈递增趋势,而对于 PDF2,沿中心线方向液滴 SMD 呈变化平缓,PDF1 的计算结果明显大于 PDF2 的计算结果,分析认为造成其直接原因是该模型中液滴碰撞和聚合的概率是液滴半径的函数,且随液滴半径的增加呈平方增长,较大的液滴半径会导致较大的碰撞和聚合概率,从而生成直径较大的液滴的概率也随之增加;而本文模型中液滴碰撞和聚合概率与液滴的直径没有直接关系,计算结果中液滴 SMD 分布没有显著差异,计算结果稳定。

4 结 论

基于 SPH 方法两种实现方式各自的优点,建立了描述液滴间碰撞和聚合过程的数学模型,设计了新的计算液滴碰撞对搜索算法,并对液滴碰撞的结果做了进一步的发展。计算结果表明,本文所建模型具有较高的计算精度,计算结果稳定、可靠,对计算网格没有明显的依赖性,计算耗时明显小于 O'Rourke 模型和 NTC 模型,不但能很好地维持系统动量的守恒,而且对液滴初始直径分布的依赖性很小。

[参 考 文 献]

- [1] Kitron A, Elperin T, Tamir A. Stochastic modeling of the effects of the liquid droplet collisions in impinging streams absorbers and combustors[J]. *Int J Multiphase Flow*, 1991, **17**(2): 274—282.
- [2] Marion G, Dicharry C, Mendibourne B. Contribution of the modelization of the surfactant concentration influence on droplet size distribution in oil/water emulsion[J]. *Progress in Collid & Polymer Science*, 1993, **21**(25): 307—311.
- [3] O'Rourke P J. Collective drop effects on vaporizing liquid sprays[D]. Ph D dissertation. Department of Mechanical and Aerospace Engineering. Princeton University, 1981.
- [4] Asheim J P, Peters J E. Modeling of a hollow-cone liquid spray including droplet collisions[J]. *J Propulsion*, 1988, **144**(5): 231—238.
- [5] Bird G A. *Molecular Gas Dynamics* [M]. Oxford: Clarendon Press, 1994, 167—172.
- [6] Schmidt, David P, Rutland C J. A new droplet collision algorithm[J]. *Journal of Computational Physics*, 2000, **164**(7): 62—80.
- [7] Monaghan J J, Gingold R A. Shock simulation by the particle method sph[J]. *Journal of Computational Physics*, 1983, **374**(52): 82—96.
- [8] Btzazier_Smith P R, Jennings S G, Latham J. The interaction of falling water droplets: coalescence[J]. *Proc R Soc Lond*, 1972, **326**(2): 642—648.
- [9] Jayaratne O, Mason B. The coalescence and bouncing of water drops at an air/water interface[J]. *Proc R Soc Lond*, 1974, **380**(5): 218—242.
- [10] 李宇飞. 火箭基组合循环发动机性能研究[D]. 硕士论文. 西安: 西北工业大学, 2003, 42—44.

Droplet Collision and Coalescence Model

LI Qiang, CAI Ti_min, HE Guo_qiang, HU Chun_bo

(College of Astronautics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China)

Abstract: A new droplet collision and coalescence model was presented, a quick_sort method for locating collision partners was also devised and based on theoretical and experimental results, further advancement was made to the droplet collision outcome. The advantages of the two implementations of SPH method were used to limit the collision of droplets to a given number of nearest droplets and define the probability of coalescence, numerical simulations were carried out for model validation. Results show that the model presented is mesh_independent and less time consuming, it can not only maintain the system momentum conservation perfectly, but not susceptible to initial droplet size distribution as well.

Key words: liquid spray; droplet; collision and coalescence; mathematical model