arXiv:2303.03477v1 [physics.flu-dyn] 6 Mar 2023

多孔表面上熔融砂液滴的动态铺展与渗入

预印本

Rahul Babu Koneru*
航空航天工程系
马里兰大学
大学公园市，马里兰州 20742
rkoneru@umd.edu

Garrett Foresman
化学与生物化学系
马里兰大学
大学公园市，马里兰州 20742

Alison Flatau
航空航天工程系
马里兰大学
大学公园市，马里兰州 20742

Zhen Li
机械工程系
克莱姆森大学
克莱姆森，南卡罗来纳州 29634

Luis Bravo、Muthuvel Murugan、Anindya Ghoshal
美国陆军研究实验室
阿伯丁试验场，马里兰州 21005

George Em Karniadakis
应用数学部
布朗大学
普罗维登斯，RI 02912

摘要

与光滑表面相比，液滴在多孔表面上的铺展更为复杂，并与许多工程应用相关。在本研究中，我们采用多相多体耗散粒子动力学（mDPD）方法，研究熔融砂液滴在结构化多孔表面上的渗透动力学。我们针对不同的平衡接触角和表面孔隙率开展了三维模拟。润湿区域半径的时间演化遵循幂律，这与光滑表面上的情况相同。另一方面，渗透速率取决于铺展与孔隙毛细抑制之间的竞争。此外，本文还展示了液滴高度和多孔表面上接触角的时间演化。

关键词 介观模拟，mDPD，液滴渗入，多孔表面

1 引言

多孔介质流动广泛存在于自然界和许多工业应用中 [1, 2]。在非多孔表面上，早期铺展由惯性毛细力主导，直至接触线处的黏性耗散使系统达到平衡。在多孔表面上，由于接触线的横向运动与孔隙的毛细抑制之间存在竞争，铺展动力学更加复杂。这取决于系统的物理性质，也取决于多孔基底的拓扑结构。人们已通过理论、实验和数值方法广泛研究液滴在多孔基底上的铺展 [3, 4, 5]。Frank等人 [5] 的格子玻尔兹曼（LB）模拟以及 Das等人 [4] 进行的完全解析流体体积法模拟，深入揭示了低黏度液体在多孔表面上的润湿与渗入动力学。通常，在大多数理论研究中，假设液滴保持球冠形状，并采用达西定律描述渗入过程。然而，大量证据表明，液滴冠部形状并非球形，而是取决于表面纹理的拓扑结构，因此需要在孔隙尺度进行详细研究。

*通讯作者

特别值得关注的是，熔融砂液滴（通常称为 CMAS）在燃气涡轮发动机热障涂层（TBC）上的铺展与渗入。熔融砂液滴会渗入多孔热障涂层，并在凝固后改变其热学性质，导致机械失效。为开发抗 CMAS 热障涂层，必须了解渗入过程的内在界面动力学。本研究采用多体耗散粒子动力学（mDPD）方法开展三维（3D）数值模拟，研究熔融 CMAS 在多孔基底上的铺展与渗入。模拟在两个平衡接触角下进行： $\theta_{eq} = 39^o$ 和 70^o。多孔表面由相同圆柱形凸柱构成各向同性排列，用以表征热障涂层的面涂层。尽管实际的 CMAS沉积过程是非等温的，为了单独考察热传递的影响，本研究假设液滴温度均匀，保持在 1260 ∘C。

2 数值方法

mDPD粒子之间的相互作用被视为成对作用，其运动遵循牛顿第二运动定律 [6]。第 i个mDPD粒子的位置和速度通过以下方式追踪

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i,\ m_i\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i = \sum_{j\neq i}\mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R + \mathbf{F}_{ij}^C, \tag{1}$$

其中， m_i、$\mathbf{r}_i$、$\mathbf{v}_i$和$\mathbf{F}_i$ 分别表示粒子 i的质量、位置、速度和力矢量。总力$\mathbf{F}_i$ 是相邻粒子 i 和 j之间耗散力（$\mathbf{F}_{ij}^D$）、随机力（$\mathbf{F}_{ij}^R$）和保守力（$\mathbf{F}_{ij}^C$）的线性叠加，其计算方式为

$$\mathbf{F}_{ij}^C = A\omega_c(r_{ij})\mathbf{e}_{ij} + B\left(\rho_i + \rho_j\right)\omega_d(\mathbf{r}_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \tag{2}$$

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma\omega_D(r_{ij})\left(\mathbf{e}_{ij}\cdot\mathbf{v}_{ij}\right)\mathbf{e}_{ij}, \tag{3}$$

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \beta\omega_R(r_{ij})(dt)^{-1/2}\xi_{ij}\mathbf{e}_{ij}. \tag{4}$$

成对相互作用由权重函数$\omega_{(*)}$ 控制，该函数取决于粒子 i 和 j之间的相对距离 $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ 。这些相互作用具有紧支撑，并在超过截断距离r_c后消失。常数 γ、 β、 A 和 B 决定各个力的强度。一对粒子之间的相对速度由$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$给出。一对粒子之间的力始终沿中心连线$\mathbf{e}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/r_{ij}$方向作用。高斯白噪声 ξ_{ij} 是从高斯分布中抽取的随机变量，其满足$\langle\xi_{ij}(t)\rangle = 0$ 和 $\langle\xi_{ij}(t)\xi_{kl}(t')\rangle = (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})\,\delta(t-t')$，其中 δ_{ij} 为克罗内克δ函数， $\delta(t-t')$为狄拉克δ函数。该随机常微分方程组采用改进的速度-Verlet（MVV）方法进行时间积分。涨落耗散定理（FDT）[6] 给出了这两种力的权重与强度之间的如下关系

$$\omega_D = \omega_R^2,\ \beta^2 = 2\gamma k_B T, \tag{5}$$

其中 $\omega_D = \omega_R^2 = (1 - r_{ij}/r_D)^s$，其中 $s = 0.5$、 $r_D = 1.45$，无量纲温度 $k_BT = 1.0$，其中k_B 为玻尔兹曼常数。粒子的局部密度 ρ 通过对其邻居进行加权求和计算得出，即$\rho_i = \sum\omega_\rho(r_{ij})$。更多详细讨论请参见 [7]。

2.1 参数映射

在 mDPD 模拟中，流体性质（例如 ρ、 σ 和 ν）是通过 mDPD 模拟事后计算得出的；而在连续介质方法中，这些性质则是直接设定的。为了准确表征流体性质，必须谨慎选择 mDPD 参数，将其映射到所关注的物理系统，即熔融 CMAS。1260 ∘C 下 CMAS 的物理性质为 [8]: 密度 $\rho_l = 2690\ \mathrm{kg/m^3}$, ，表面张力 $\sigma_l = 0.46\ \mathrm{N/m}$，动力黏度 $\mu_l = 3.6\ \mathrm{Pa\cdot s}$。根据 Arienti等人 [9], ，参考长度 [L], 、质量[M] 和时间 [T] 尺度用于对系统进行无量纲化。参考量以参考单位定义如下

$$\rho_{ref} = \frac{[M]}{[L]^3};\ \sigma_{ref} = \frac{[M]}{[T]^2};\ \nu_{ref} = \frac{[L]^2}{[T]}. \tag{6}$$

按照Koneru等人 [7], 的方法，采用双周期泊肃叶流和薄膜法计算mDPD系统的运动黏度（ν）和表面张力（σ）。所得物理量和参考量列于表1。

表1：熔融CMAS的物理和参考性质。

性质	物理单位	mDPD 单位
密度，ρ	2690 千克/米^3	6.74
动力黏度，μ	3.6 Pa ·s	196.08
运动黏度，ν	$1.33 \times 10^{-3}\,\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$	29.093
表面张力，σ	0.46 N/m	9.287
长度 $[L]$	$17.017 \times 10^{-6}\,\mathrm{m}$	1.0
质量 $[M]$	$1.964 \times 10^{-8}\,\mathrm{kg}$	1.0
时间 $[T]$	6.297×10^{-6} 秒	1.0

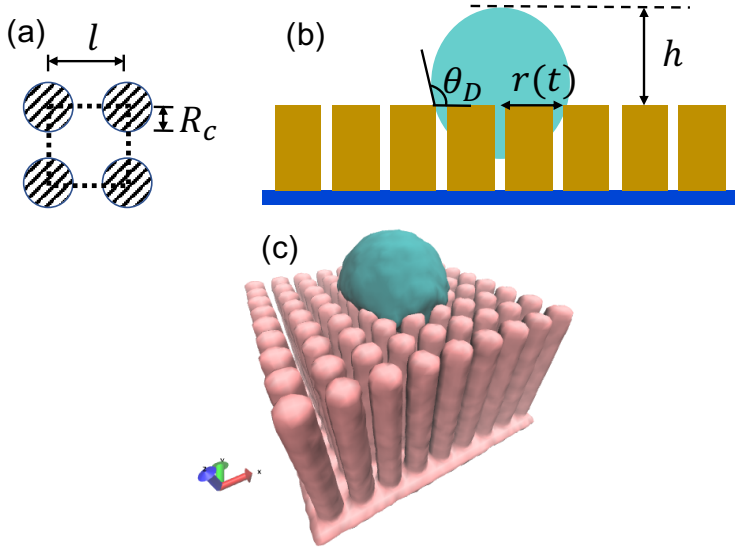


图1：（a）表面孔隙率的代表性晶格。阴影圆表示半径为 R_c、间距为 l 的圆柱形柱体的横截面。（b）以多孔表面顶部为基准测量的接触角、铺展半径和液滴高度。（c）模拟的透视图，展示液滴在柱体顶部的铺展过程。

2.2 模拟设置

液滴和多孔壁均由随机生成并经过预平衡的mDPD粒子组成。在模拟中，液滴的初始半径固定为 $R = 10$ mDPD 单位，相当于物理单位下的0.17 mm。多孔表面由各向同性排列的圆柱形凸柱构成。通过改变凸柱的半径，同时保持凸柱数量不变，来调节表面的空隙率 $\phi_v = 1 - \pi R_c^2/l$。这样，不同空隙率下液滴与圆柱形凸柱之间的相互作用保持一致。图1展示了多孔表面横截面的示意图。本研究针对$\phi_v = 0.35$，0.47和0.58开展模拟。多项实验研究 [10, 8]表明，熔融CMAS的平衡接触角较小。本研究使用的mDPD参数与 [7]中的参数相同；该研究考察了熔融CMAS在无孔表面上的润湿行为。

3 结果

Ohnesorge数 $Oh = \mu/\sqrt{\sigma\rho R}$ 通常用于确定黏性力与惯性力的相对强度。本文中熔融CMAS液滴的该数值为 7.85。鉴于较大的 Oh 表明铺展由黏性主导，因此采用 τ_v 作为参考时间尺度。图 2 展示了液滴在表面孔隙率为 $\phi_v = 0.58$ 的表面上的渗入情况，分别对应三个不同的无量纲时间 t/τ_v；液滴在无孔表面上的平衡接触角为 $\theta_{eq} = 70^o$ 和 39^o。对于 $\theta_{eq} = 39^o$的情况，液滴在极短的无量纲时间内便完全渗入。由于液滴受到侧向和法向的共同抑制，渗入过程高度不均匀，且液滴未渗入部分偏离了球冠形状。

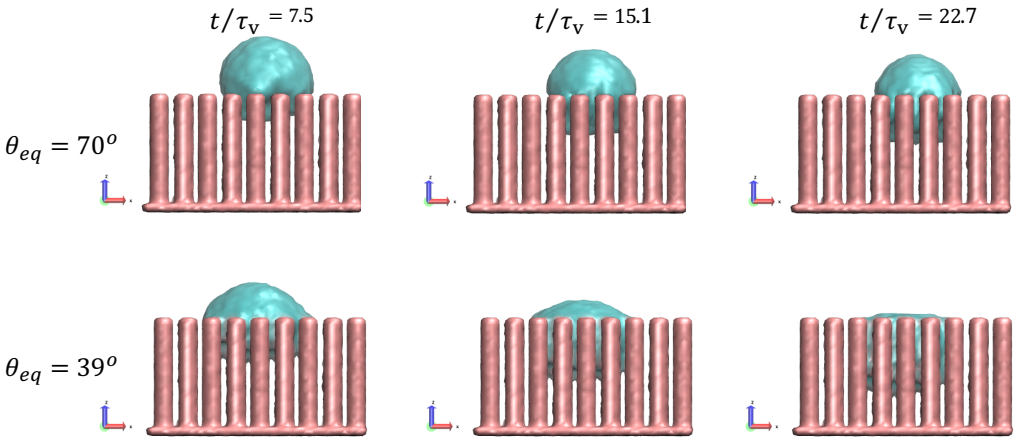


图 2：在 $\phi_v = 0.58$时，不同 θ_{eq} 条件下液滴的渗入与铺展。

图 3 绘出了无量纲铺展半径随无量纲时间的变化关系，其中无量纲铺展半径以液滴初始半径 R为尺度，无量纲时间以 τ_v 为尺度；图中比较了两种构型，它们在无孔表面上分别产生平衡接触角 $\theta_{eq} = 70^o$ 和 39^o。液滴铺展明显经历了惯性阶段，随后由于渗入，铺展半径减小。对于较小的 θ_{eq}，渗入速率远早于较大的 θ_{eq}时便超过铺展速率。与 $\theta_{eq} = 70^o$的情况相比， $\theta_{eq} = 39^o$ 在惯性阶段结束时的转变更加急剧，这是因为液滴与多孔表面的接触面积更大。在 [7], 中，有报道称液滴在无孔表面上的惯性铺展速率为 0.26。由于表面孔隙率的影响，惯性阶段的铺展速率略有降低，介于 0.18 至 0.21 之间。

图 4 绘出了从圆柱形柱体顶部测量的无量纲液滴高度随无量纲时间的变化。对于 $\theta_{eq} = 70^o$，在约 $t/\tau_v = 2$ 之前，所有表面孔隙率下液滴高度的下降都非常相似；此后， $\phi_v = 0.58$ 的情况开始出现偏离。多孔表面上的液滴高度曲线约在 $t/\tau_v = 10$处与非多孔表面上的曲线交叉。Frank等人 [5]也报告了这一交叉点。对于 $\theta_{eq} = 39^o$，这一交叉点出现得早得多，约在 $t/\tau_v = 2$，并观察到持续且完全的渗入。由于早期铺展由惯性驱动，液滴高度差异很小。在后期阶段，毛细抑制占主导，多孔表面上的液滴高度下降得更快；液滴高度的下降速率随孔隙率增加而增大，这与 Washburn 定律 [11]一致。我们还通过对液滴表面上的 mDPD粒子进行球面拟合，计算了液滴在多孔表面上的表观接触角。图 5 展示了多孔表面上表观接触角的时间演化，并列出了非多孔表面的数据。有趣的是，在 $\theta_{eq} = 70^o$ 时，多孔表面呈现 Cassie-Baxter 表面的特性，其表观接触角大于非多孔表面上的表观接触角。另一方面，在 $\theta_{eq} = 39^o$ 时观察到 Wenzel 类状态，此时表观接触角小于非多孔表面上的表观接触角。由于熔融CMAS的黏度很高，液滴在非多孔表面上需要很长时间才能达到平衡。本研究观察到孔隙的均匀润湿，即液体完全填充了多孔表面。

4 结论

本研究采用两个平衡接触角和三种不同的孔隙率，研究了熔融CMAS液滴在多孔表面上的铺展与渗入。由于本研究所用多孔表面的拓扑结构，渗入液体会绕圆柱形凸柱铺展，导致铺展不均匀。我们还观察到液滴偏离了球冠形状。对于给定的孔隙率，较低的平衡接触角会引发快得多的排液。与无孔表面上的情况一样，我们观察到惯性铺展阶段，但斜率有所降低，介于 0.18 和 0.21 之间。液滴横向铺展与毛细抑制之间的相互作用产生了有趣的结果。对于这两种接触角，在经过一定的 t/τ_v 后，液滴在多孔表面上的高度下降速度比在无孔表面上更快。多孔表面与无孔表面上的液滴高度交叉点出现得早得多，这是因为较小接触角下液滴有更大的表面积与

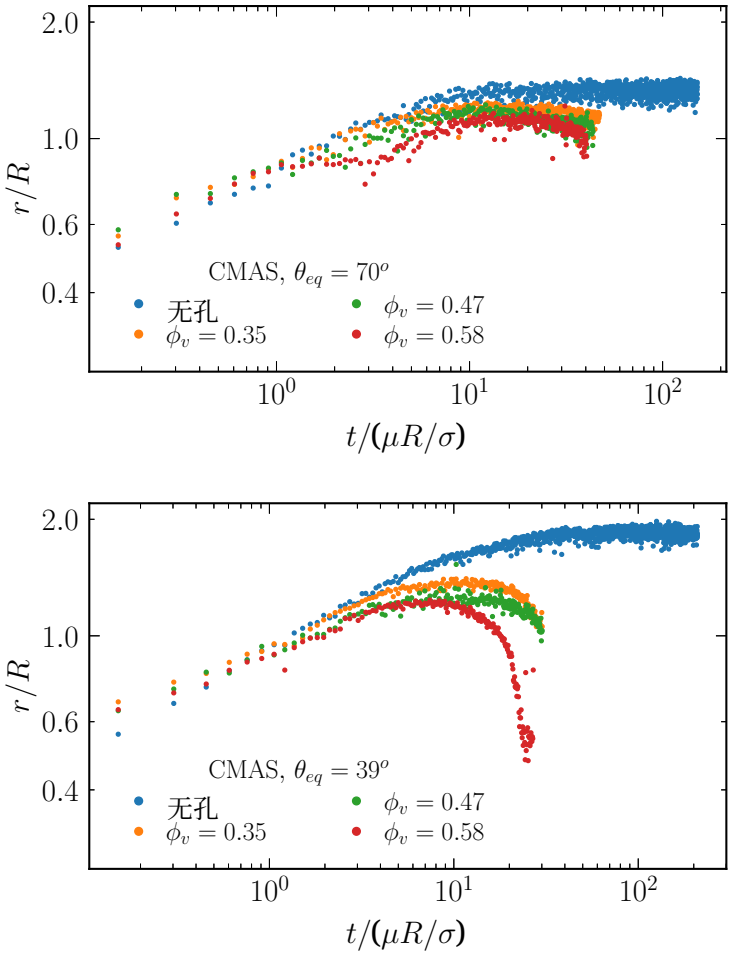


图3：(a) 无量纲 熔融CMAS液滴的铺展半径，其中 (a) $\theta_{eq} = 39^o$ 和 (b) $\theta_{eq} = 70^o$.

多孔表面接触。我们观察到，表面孔隙率对接触角演变的影响方向相反。与无孔表面相比，对于较大的 θ_{eq}，多孔表面会增大表观接触角；而对于较小的 θ_{eq}，表观接触角则会减小。

致谢

作者 A.F 和 R.B.K 感谢美国陆军研究办公室数学科学部通过资助编号 W911NF1910225 为本研究提供的支持。L.B、A.G、M.M 获得了美国陆军研究实验室推进科学6.1基础研究计划的支持。Z.L 感谢美国国家科学基金会资助 OAC-2103967 和美国国家航空航天局项目 80NSSC21M0153 的支持。作者谨此感谢国防部超级计算资源中心（DSRC）提供的资源和支持；本研究使用了“ Narwhal”超级计算资源，该工作属于2022前沿项目“燃气涡轮发动机瞬态气动热力学大规模集成模拟”的一部分。本文所述观点和结论仅代表作者的意见，不应被解释为代表美国陆军研究实验室或美国政府的官方政策或立场，无论其为明示还是暗示。美国政府有权为政府用途复制和分发再版文件，尽管本文中注明了任何版权信息。

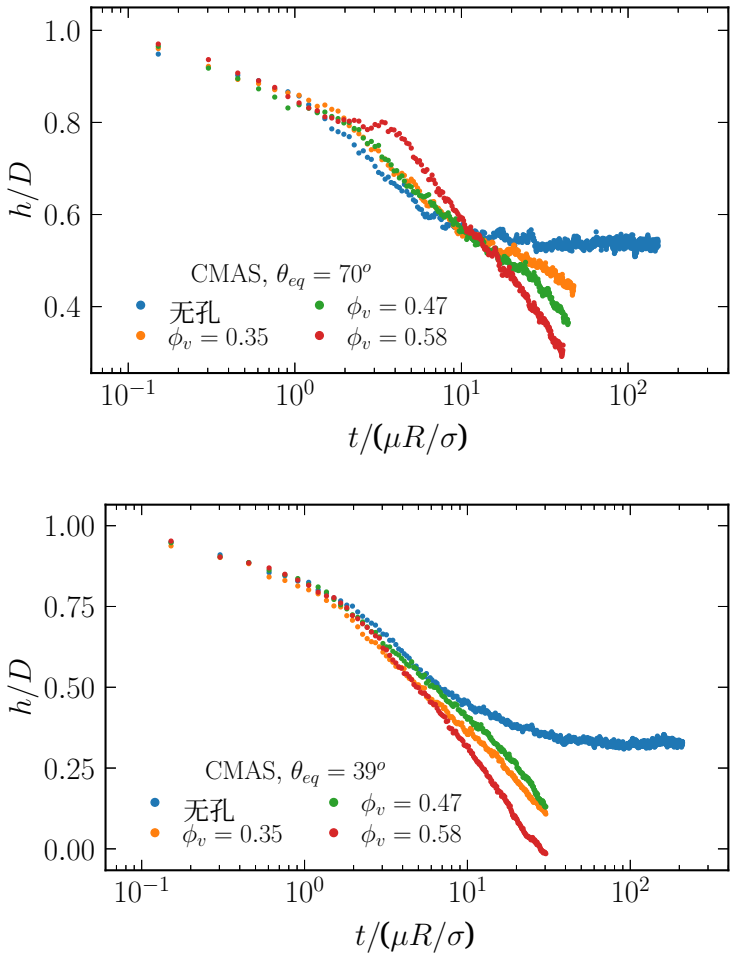


图 4: (a)（a） $\theta_{eq} = 39^o$ 和 (b) $\theta_{eq} = 70^o$对应的无量纲液滴高度。

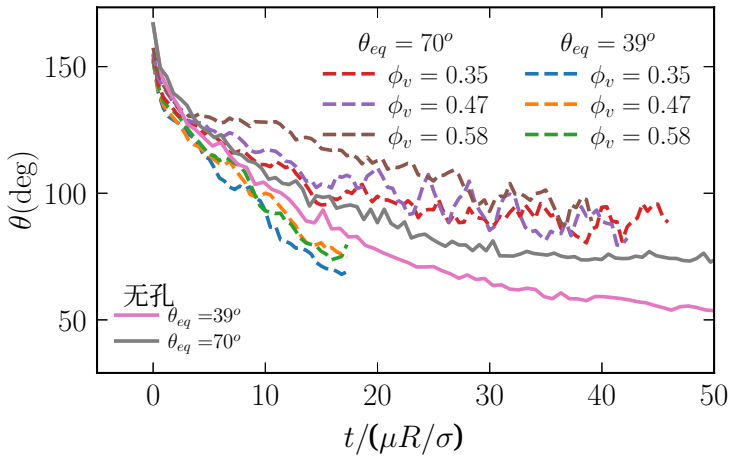


图 5: $\theta_{eq} = 39^o$ 和 $\theta_{eq} = 70^o$对应的表观接触角随时间的演化。

参考文献

[1] Detlef Lohse。喷墨打印中的基础流体动力学挑战。流体力学年度评论，54:349–382，2022。[2] Tatiana Gambaryan-Roisman。多孔层上的液体：润湿、自发浸润与输运过程。胶体与界面科学最新观点，19(4):320–335，2014。[3] Timothy W Munuhe、Ruey-Hung Chen、Liang Zhu 和 Ronghui Ma。非等温热障涂层中的熔融液滴铺展与渗入建模。国际传热与传质杂志，182:121942，2022。[4] Saurish Das、HV Patel、E Milacic、NG Deen 和 JAM Kuipers。多孔介质中的液滴铺展与毛细浸润：基于耦合IB-VOF方法的数值研究。流体物理学，30(1):012112，2018。[5] X Frank 和 Patrick Perré。多孔表面上的液滴铺展：一项格子玻尔兹曼研究。流体物理学，24(4):042101，2012。[6] Robert D Groot 和 Patrick B Warren。耗散粒子动力学：弥合原子尺度与介观模拟之间的鸿沟。化学物理学杂志，107(11):4423–4435，1997。[7] Rahul Babu Koneru、Alison Flatau、Zhen Li、Luis Bravo、Muthuvel Murugan、Anindya Ghoshal 和 George Em Karniadakis。利用多相介观模拟量化熔融砂液滴的动态铺展。物理评论：流体，7(10):103602，2022。[8] Ravisankar Naraparaju、Juan J Gomez Chavez、Philipp Niemeyer、Kai-Uwe Hess、Wenjia Song、Donald B Dingwell、Siddharth Lokachari、CV Ramana 和 Uwe Schulz。EB-PVD热障涂层中CMAS渗透深度的估算：一种由实验方法支持的新约束模型。欧洲陶瓷学会杂志，39(9):2936–2945，2019。[9] Marco Arienti、Wenxiao Pan、Xiaoyi Li 和 George Karniadakis。液体/蒸气与液体/固体相互作用的多体耗散粒子动力学模拟。化学物理学杂志，134(20):204114，2011。[10] YX Kang、Y Bai、GQ Du、FL Yu、CG Bao、YT Wang 和 F Ding。具有定制表面微结构的CMAS与YSZ涂层之间的高温润湿性。材料快报，229:40–43，2018。[11] Edward W Washburn。毛细流动的动力学。物理评论，17(3):273，1921。