arXiv:2305.01850v1 [physics.flu-dyn] 3 May 2023

采用流体体积法至离散相模型的鼻腔喷雾雾化器初级喷雾破碎

Kendra Shrestha[a]、James Van Strien[b]、David F Fletcher[c]、Kiao Inthavong[a]、*

[a]机械与汽车工程，工程学院，皇家墨尔本理工大学，*Bundoora*，维多利亚州 *3083* ，澳大利亚

[b]科学、工程与建筑环境学院，工程学院，迪肯大学，吉朗沃恩庞兹，澳大利亚

[c]悉尼大学化学与生物分子工程学院，新南威尔士州*2006*年，澳大利亚

摘要

喷雾雾化过程涉及复杂的多相现象。关于喷雾建模在工业应用中的研究和验证已有大量文献，例如内燃机和涡轮喷气发动机中的燃料喷射。然而，针对低压应用（如鼻喷雾）的研究寥寥无几，且主要局限于离散相建模。本研究旨在深入了解连续喷雾的外部及喷嘴近场喷雾特征，并通过实验验证模型，取得了良好的吻合。

研究采用三维（3D）X射线扫描仪提取鼻腔喷雾喷嘴的内部几何结构，并据此重建几何结构以建立三维计算模型。研究使用一种新颖的流体体积法至离散相转换模型（VOF-DPM），根据液团的形状和尺寸追踪液相及其向液滴的转变。

本研究考察了喷雾羽流发展早期的稳定前期和稳定阶段。通过定性与定量分析验证了计算模型。液柱从喷嘴喷出，随着时间推移，其底部发生变形，最终形成空心锥形液膜。随后，液膜因不稳定性而破碎，产生波动并形成液丝，进而导致二次破碎。

*通讯作者：kiao.inthavong@rmit.edu.au

提交至《*Physics of Fluid*》的预印本 *2023*年*5*月*4*日

本研究深入探讨了液体射流破碎和液滴形成，为未来鼻喷雾装置的设计及相关技术提供了有价值的参考，有助于实现更有效的靶向鼻腔给药。

关键词： 鼻腔、鼻喷雾、一次破碎、二次破碎、计算流体力学、VOF-DPM 转换、计算流体力学、鼻腔沉积

---

1. 引言

喷雾雾化过程涉及复杂的多相破碎现象，与许多工业应用密切相关，例如燃料喷射、燃气轮机、喷涂、消防、航空发动机和推进系统。针对这类在高压力下运行的工业喷雾，已有大量研究（Treleaven 等人，2022年；Rostami 和 Mahdavy Moghaddam，2021年）。利用不稳定性理论，研究人员开发了许多数学模型来描述喷雾特性，从而无需显式模拟雾化过程（Hossainpour 和 Binesh，2009年；Yu 等人，2016；Schmidt 等人，1999）。然而，仅有少数研究探讨了鼻喷雾的雾化，且仅限于离散相模型（Inthavong 等人，2008年、2011年；Fung 等人，2013年；Kolanjiyil 等人，2021年；Calmet 等人，2019），其工作压力与工业喷雾相比要低得多。

鼻喷装置产生的喷雾通常由单元式雾化器（也称为压力旋流雾化器）形成，其特征是配有切向入口。这些入口将液体沿切向导入旋流室，以促进强烈的旋转运动并形成气核区。因此，在轴向力和切向力的共同作用下，液体以锥形液膜的形式从雾化器的喷嘴中流出（Inthavong 等，2012年）（Zheng 等，2023）。由于喷嘴排出的中空锥形液膜增强了气液相互作用，这种结构具有良好的雾化性能（Rizk 和 Lefebvre，1987）（Taylor，1948；Moon 等，2007年；Dombrowski 和 Hasson，1969；Rizk 和 Lefebvre，1987，1985）。

液膜形成后，会受到气动不稳定性的影响，进而破碎成液丝，最终形成液滴。鼻喷雾的主要作用是将含药液体转化为细小的雾化液滴，从而提高表面积与体积之比，以增强其治疗鼻部疾病的生物活性，并将液滴输送至鼻腔。与其他应用一样，喷雾特性会受到

由于喷嘴轴向压力较低而形成的气核（Liu 等人，2017年）。最常研究的特性包括液滴尺寸分布、速度大小、喷雾锥内的质量分布、喷雾锥角，以及液滴与环境空气的相互作用（Cheng 等人，2001；Suman 等人，2002；Dayal 等人，2004年；Guo 和 Doub，2006年；Foo 等人，2007年；Guo 等人，2008年；Liu 等人，2010；Van Strien 等人，2022年）。

鼻喷雾装置的药物递送功效取决于许多因素，例如装置设计、装置操作方式以及药物制剂的物理性质（Suman 等，2002；Dayal 等，2004年）。惯性撞击会导致90%的液滴沉积在鼻腔前部区域，从而限制输送至目标鼻甲的气溶胶量（Newman 等，1988；Kimbell 等，2007年；Kelly 等，2004年）。因此，提高递送功效需要深入了解鼻喷雾的一次雾化和二次破碎。对于鼻喷雾而言，药物液滴需要在环境条件下进行输送；这不同于燃料喷射，在燃料喷射中，燃料是在高压力和受控腔室压力下引入的，而这有助于雾化。由于这一限制，鼻喷雾处于低韦伯数和低气液动量比状态。由于破碎过程主要由液体动量主导，这种破碎状态被定义为轴对称破碎（Rajamanickam 和 Basu，2017年）。鼻喷雾–壁面相互作用和沉积后液体运动是影响药物生物活性的其他重要方面。计算流体力学研究揭示，喷雾动量对表面液体的运动以及由剪切应力和重力引起的表面液膜运动均具有显著影响（Kolanjiyil 等，2022年；Si 等，2021年）。Shang 等开发了一种新方法，将计算流体力学（CFD）技术与一维黏液扩散模型相结合，以更准确地预测鼻喷药物吸收（Shang 等，2021年）。

此外，鼻喷雾的有效给药还受到患者器械操作能力和驱动力的限制（Gao 等人，2020年；Tong 等人，2016；Basu 等人，2020年）。与燃料喷雾应用中通过施加喷射压力来增强雾化不同，驱动力是鼻腔喷雾应用中的另一个限制因素。因此，在鼻腔给药应用中，器械设计是改善雾化效果时必须考虑的关键因素。

已有多项研究使用高速成像来深入了解鼻喷雾的近场特性。Inthavong 等人采用高速摄影和颗粒液滴图像分析仪，进一步揭示了鼻腔喷雾雾化的物理机制（Inthavong 等人，2014年）。研究得出结论，提高驱动压力会使雾化速度更快，且

喷雾速度增加、液滴尺寸减小、喷雾时间缩短。Fung 等人确定了喷雾发展的三个主要阶段（稳定前期、稳定期和稳定后期），这些阶段可通过观察喷雾宽度来关联（Fung 等人，2013年）。Liu 等人使用相位多普勒测量法（相位多普勒风速测量法）评估了鼻喷装置的液滴速度和尺寸（Liu 等人，2010）。针对鼻腔喷雾应用，Shrestha 等人采用图像处理技术提取了其他几项喷雾参数，例如破碎长度、扩散角、破碎半径和锥角，这些参数为鼻腔喷雾应用的离散相建模（二次破碎）提供数值输入（Shrestha 等人，2020年）。这项研究仅针对一种非处方鼻腔喷雾装置。后来，Van Strien 等人（2022年）进一步扩展了这项研究，纳入耳鼻喉科诊所使用的四种不同类型的市售鼻喷雾剂，并提供了大量鼻腔喷雾特性数据（Van Strien 等人，2022年）。

迄今为止，尚未发现针对鼻腔喷雾应用、能够解析一次雾化所涉及全部复杂物理过程的数值研究。不过，已有研究考察了旋流雾化器（Patil 和 Sahu，2021年；Sahu 等人，2022年；Kuo 和 Trujillo，2022年）以及其他雾化器（如空心锥雾化器（Di Martino 等人，2022年）、气力雾化器（Patil 和 Sahu，2021年）和同轴雾化器（Kumar 和 Sahu，2020年；Charalampous 等人，2019）的破碎机制。进一步开展鼻腔喷雾应用的计算研究，有助于深入了解液膜的一次破碎；一次破碎会影响鼻喷雾的二次破碎，并最终影响液滴特性。

本研究采用高保真数值模拟，对低压鼻喷雾应用中的液膜形成及其破碎成液滴的过程进行了表征。本研究旨在深入了解连续喷雾在喷嘴附近内部和外部的喷雾特性，并通过与实验数据进行良好验证，确保模拟结果的可靠性。此外，本研究采用一种新颖的流体体积法-离散相模型转换方法，并结合自适应网格细化（AMR）技术，详细揭示了鼻喷雾旋流液体射流中液膜、液丝和液滴的形成机制。本研究结果可作为基准，用于确定鼻腔应用喷雾雾化模型开发所需的理想参数。

2. 方法

2.1. 数值方法与框架

2.1.1. 流体体积法（*VOF*）建模

采用流体体积法（VOF）自由表面建模技术来追踪气液界面（Hirt和Nichols, 1981年）。质量和动量守恒方程为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla.(\rho \vec{u}) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla.(\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\nabla p + \nabla.\left[\mu\left(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^{T}\right)\right] + \rho \vec{g} + \vec{F} \tag{2}$$

其中，$\vec{v}$ 表示速度向量，t 表示时间，p 表示静压，ρ 表示流体密度，μ 表示动力黏度，$\vec{g}$ 表示重力向量，F 表示代表表面张力的附加力。体积分数 α_l 用于追踪气液界面的运动，其在液体中的值为1，在气相中的值为0。它通过以下公式计算：

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \vec{u}.\nabla \alpha_l = 0 \tag{3}$$

在输运方程中，两相的材料性质由每个控制体积中组分相的存在情况决定，并通过下标 l 和 g 表示。因此，例如，每个单元中的密度可表示为

$$\rho = \alpha_l \rho_l + (1 - \alpha_l)\rho_g \tag{4}$$

表面张力（$\vec{F}$）采用连续表面力方法进行建模（Brackbill等，1992），界面处的表面曲率根据表面法向的局部梯度计算。模型方程为

$$\vec{F} = \sigma \kappa \nabla \alpha_l \tag{5}$$

$$\kappa = -\nabla.\left(\frac{\nabla \alpha_l}{|\nabla \alpha_l|}\right) \tag{6}$$

其中，κ 为表面曲率。

2.1.2. 湍流建模

采用应力混合涡模拟（SBES）模型来捕捉射流区域的局部湍流。混合RANS-LES模型（如SBES）允许在近壁区域使用RANS模型，同时在远离壁面的流动区域使用大涡模拟（LES）。滤波操作产生的亚格子尺度（SGS）应力采用WLES S-Ω模型进行建模。流动的RANS部分采用SST k-ω模型。我们选择SBES模型的理由如下：

- SBES 模型无需在壁面处采用非常精细的网格（这对于精确的大涡模拟并不切实际），也无需使用其他近似方法，而是采用高度成熟且经过验证的雷诺平均纳维-斯托克斯方法。
- 采用 SBES 方法时，在关注度较低的近壁区域（对于鼻喷雾而言，即喷嘴内部流动区域）使用雷诺平均纳维-斯托克斯模型生成涡黏度。在网格精细、需要准确瞬态数据的区域，则采用大涡模拟模型（即液膜形成和破碎发生的喷嘴附近区域）。
- 雷诺平均纳维-斯托克斯模型产生的涡黏度与亚格子黏度通过快速转换进行混合，这对喷雾建模尤为重要。
- 与脱体涡模拟/延迟脱体涡模拟模型公式相比，SBES 模型的屏蔽特性有了显著改善。

*2.1.3. VOF-DPM*转换建模

采用 Ansys Fluent 2020R1 中的流体体积法至离散相模型多相计算流体力学模型，对液膜破碎成离散液滴的雾化过程进行模拟。这种建模方法利用经过细化的网格，通过流体体积法捕捉初始射流和一次破碎，而分散相则采用离散颗粒建模（DPM）进行建模。与仅使用流体体积法的方法相比，该模型降低了计算开销；后者需要捕捉液相、液相破碎成液滴（分散相）的过程，以及液滴后续的运动。流体体积法-离散相模型中使用的算法依据两个判据判断液相是否符合向分散相转变的条件：a）液团尺寸；b）非球形度。

本研究将尺寸范围为 5-80 μm 的团块转化为 DPM液滴。VOF 解中体积大于 80 μm 的液滴未被转化为拉格朗日液滴包，而是允许其自行破碎。

团块转化所采用的第二项判定标准（非球形度），基于利用半径标准差和半径-表面正交性计算出的非球形度上限。为了根据半径标准差筛选可转化为 DPM 的团块，针对团块表面（气液相界面）的每个面片，计算面片中心与团块重心之间的距离。这些距离值按照各团块边界面片的大小进行加权，随后计算所得数值的标准差，并以平均半径对其归一化。完美球体的该数值为零，形状偏离球形时则逐渐增大至 1。本研究中，数值小于 0.5 的团块被转化为离散相。半径-表面正交性用于确定根据平均半径-表面正交性计算出的最大非球形度。为计算该数值，针对团块表面的每个面片，求出从团块重心指向团块边界面片中心的向量。将该向量归一化后，与网格面的法向量进行点积，从而得到一个范围为 0 至 1 的相对正交性度量。对于完美球体，该数值为 1。随后，将这些数值按面片面积加权求平均，并用 1 减去该平均值，得到非球形度。对于近似球形的液滴，这种方法得到的非球形度远比基于标准差的非球形度接近 0。对于高度非球形的团块，这种方法得到的数值与基于标准差的非球形度相近。本研究将 0.5 设为半径-表面正交性的阈值。

将液团转换为拉格朗日液滴包的相变过程不会导致连续相发生体积位移。然而，这种方法无法守恒体积，可能导致动量源误差。因此，为避免产生虚假的动量源，VOF-DPF 算法会创建一个与液团体积相同的气体体积，以实现体积守恒。与该气体体积质量相当的质量源会影响整体质量平衡。

2.1.4. 离散相建模（*DPM*）

满足转变判据的团块被转换为液滴，并采用拉格朗日离散相建模方法进行追踪，以预测颗粒轨迹。离散相颗粒的轨迹通过对以下

作用于颗粒的力平衡方程进行积分来预测，其中包括阻力、惯性和重力：

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = m_p \frac{\vec{u} - \vec{u}_p}{\tau_r} + m_p \frac{\vec{g}\,(\rho_p - \rho)}{\rho_p} \tag{7}$$

其中， m_p 为颗粒质量， $\vec{u}$ 为流体相速度， $\vec{u}_p$ 为颗粒速度，ρ为流体密度， ρ_p为颗粒密度， $m_p(\vec{u} - \vec{u}_p)/\tau_r$为阻力，$\tau_r$ 为通过以下公式计算得到的液滴弛豫时间

$$\tau_r = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu} \frac{24}{C_d \mathrm{Re}} \tag{8}$$

其中， μ 为流体的分子黏度， d_p 为颗粒直径，Re 为颗粒雷诺数，其定义如下

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho d_p |\vec{u_p} - \vec{u}|}{\mu} \tag{9}$$

液滴偏离球形后，阻力系数会发生变化。阻力系数根据动态阻力定律理论（Liu 等人，1993年）计算。对于球形液滴，阻力系数表示为

$$C_{d,sphere} = \begin{cases} 0.424 & \mathrm{Re} > 1000 \\ \frac{24}{\mathrm{Re}}(1 + \frac{1}{6}\mathrm{Re}^{\frac{2}{3}}) & \mathrm{Re} \leq 1000 \end{cases} \tag{10}$$

初始为球形的液滴在气体中运动时，如果其韦伯数足够高以引发破碎，液滴的形状就会发生变形。在极端情况下，液滴形状将接近圆盘。在此过程中，阻力系数表示为

$$C_d = C_{d,sphere}(1 + 2.632y) \tag{11}$$

其中 y 表示根据此处采用的 Taylor 类比破碎模型（TAB）确定的液滴变形（Taylor，1963年）。当 $y = 0$时，可得到球体的阻力系数；而当 $y = 1$时，则会得到最大变形，此时阻力系数对应于圆盘。该模型基于 Taylor 的类比，是一种广泛用于计算低韦伯数应用中液滴破碎的方法。通过类比弹簧-质量系统来模拟液滴在表面张力、阻力和黏性力作用下发生的变形和振荡，其中弹簧-质量系统表示回复力

，外力和阻尼力分别对应弹簧的作用、外力和阻尼力。当液滴振荡增大至临界振幅时，“母”液滴会破碎成多个较小的“子”液滴。

为考虑两相之间的相互作用，采用了离散相与连续相之间的双向耦合。

2.2. 数值方法与模拟

2.2.1. 几何结构

使用3D Nano X射线扫描仪提取了Cophenylcaine鼻喷雾的内部特征。图中展示了X射线设备及其附件的实验装置示意图。1）。根据提取的几何结构进行逆向工程，创建了三维CAD模型（见图2a）。该几何结构由三个入口端口组成，可将液体沿切向导入旋流端口，再经直径为 $d_0 = 0.35$mm的喷嘴喷出。

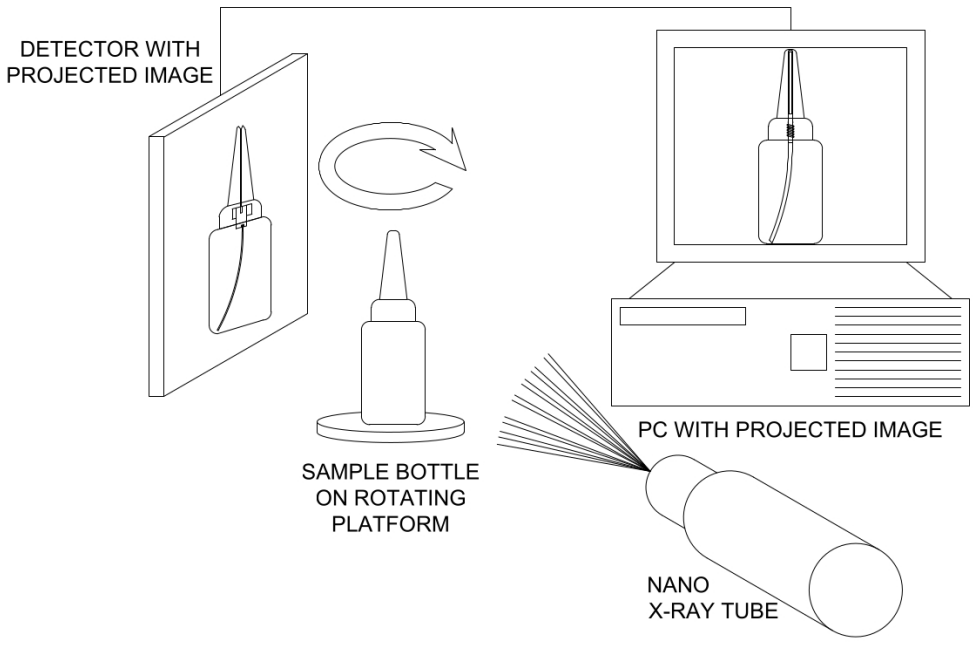

图1：X射线扫描方法示意图。

图中展示了鼻喷雾的喷嘴孔口垂直截面和旋流端口水平截面，说明了其内部结构

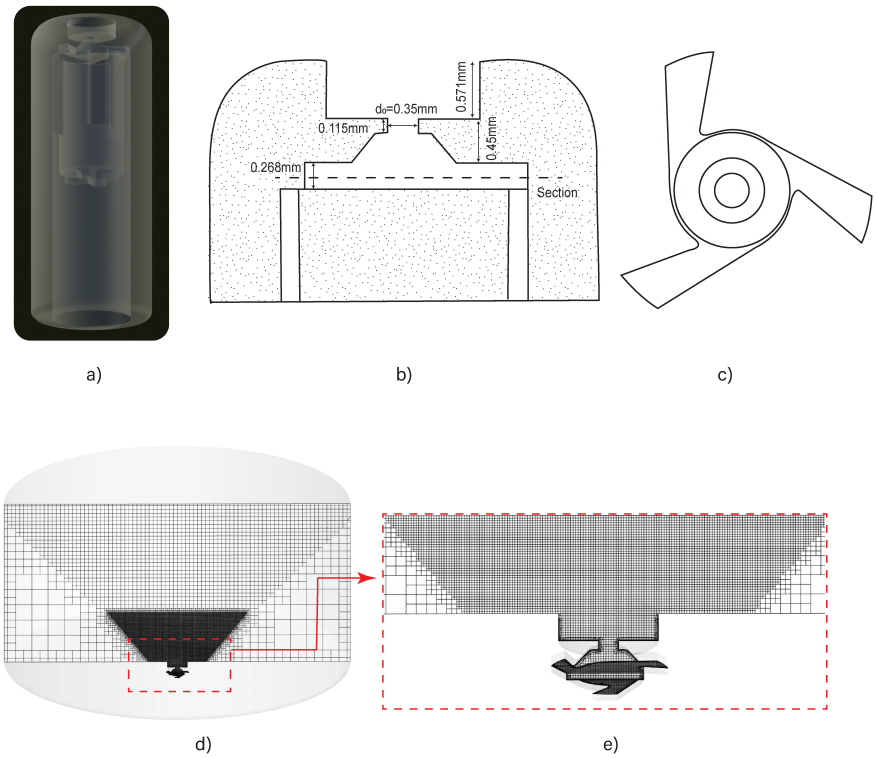

图2：a）喷嘴内部的X射线视图，b）穿过喷嘴中心的垂直截面，c）穿过旋流入口的水平截面，d）计算域，以及e）喷嘴内部的网格分辨率。

如图2b 和 2c 所示。喷嘴出口处连接了一个圆柱体，其直径和高度分别为 $d_c = 85d_0$ 和 $h_c = 42d_0$，用于捕捉一次破碎和二次破碎。三维计算域如图2d 和 2e 所示。在距喷嘴尖端 8 mm、12 mm 和 15 mm 处分别设置了三个平面，用于采集液滴样本，以评估液滴尺寸分布。

2.2.2. 网格与自适应网格加密（*AMR*）

采用切割单元网格划分，以在初始网格数量为 360 万的情况下，将单元数量降至最低并保持较低的纵横比，从而满足大涡模拟的要求。通过影响体局部加密（$\Delta x = 0.165$ mm）对喷嘴几何形状和喷嘴近场一次破碎区域进行了加密。采用自适应网格加密技术对气液界面处的单元进行加密，以捕捉流动中的一次破碎和湍流结构。使用了三个级别的网格加密，最低级别的网格尺寸为 5.5 微米，能够充分捕捉一次破碎。

基于以下两个标准，使用单元寄存器对单元进行加密和粗化：a) 等值面值；b) 体积分数曲率。体积分数大于 0.55 且 VOF界面曲率大于1×10^{-12} m^{-1} 的单元被归类为需加密单元；而体积分数小于 0.45、远离气液界面且曲率小于 1×10^{-14} m^{-1} 的单元则被归类为需粗化单元。曲率方法能够在相界面（液体和气体）两侧捕捉尽可能大范围的单元。在喷雾发展的稳定阶段，最终单元数量约为 700 万至 750 万。

2.2.3. 初始条件和边界条件

为模拟鼻喷雾剂预充的效果，假设鼻喷雾装置内从入口端口至喷嘴喉部充满液体。该区域的体积分数初始化为 1 ($\alpha_l = 1$)。使用水的物理性质来代表鼻腔溶液，并以环境空气作为气相。入口端口处液体的初始速度设为均匀的 5 m/s。

2.2.4. 求解器设置

采用 PISO求解器耦合速度和压力，因为它具有良好的求解稳定性。梯度离散采用基于单元的最小二乘法，压力空间离散选用 PRESTO!，以提高精度。动量离散采用有界中心差分，体积分数采用几何重构。为限制体积分数对流格式可能产生的数值扩散，应用了界面反扩散处理。湍流离散采用二阶迎风，瞬态公式采用一阶隐式，因为这是使用显式界面追踪时的要求。

瞬态流动采用可变时间步长进行建模，并受库朗数 1 的限制。最小和最大时间步长分别设置为 10^{-9} s 和 10^{-6} s，并根据计算域内最小的单元尺寸和最高速度进行调整。

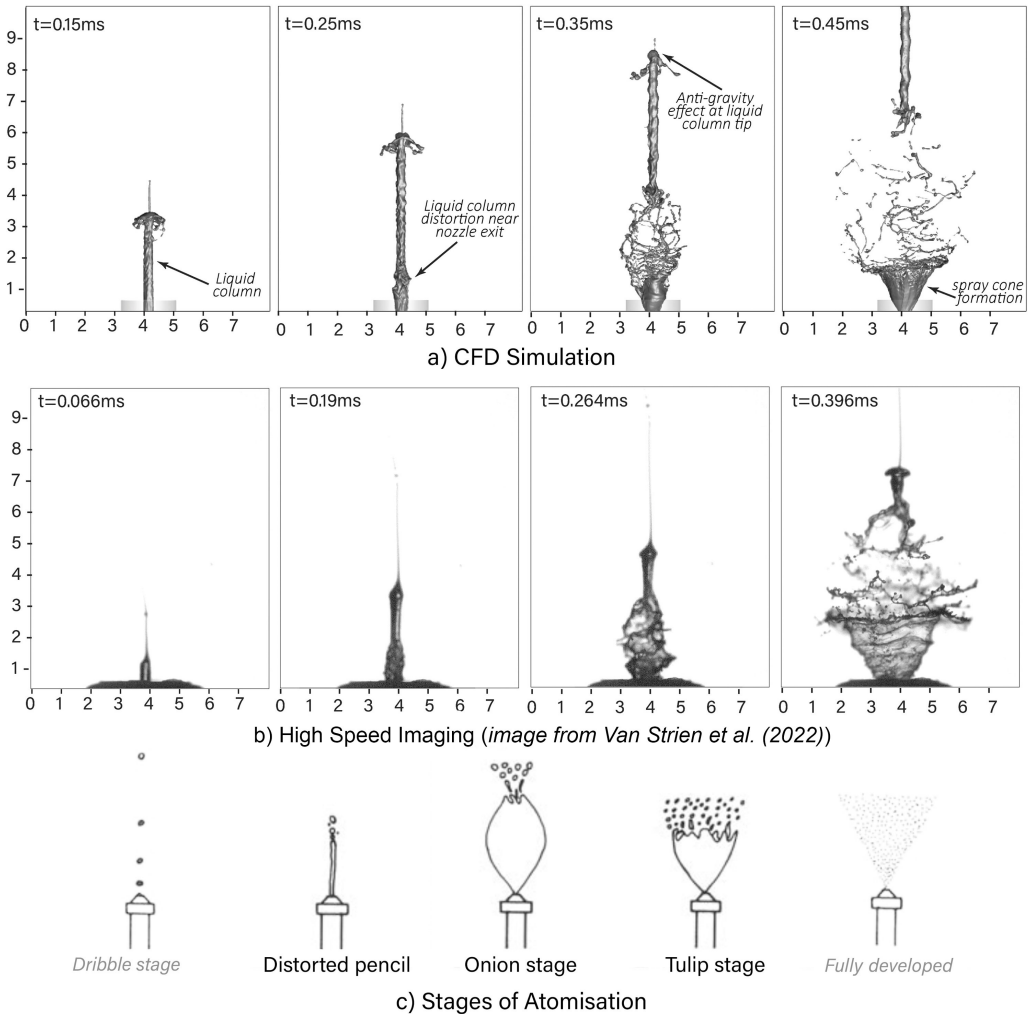

图 3： (a) 计算流体力学模拟和 (b) 高速成像所得的预雾化阶段结果，展示了旋流液柱转变为锥形液膜的过程，相关报道见 Van Strien 等人 (2022年）。计算流体力学模拟与高速成像的时间步略有错位，但两者早期阶段的持续时间相同，为 $\Delta t = 0.3$ 毫秒。(c) Lefebvre 和 McDonell (2017年) 以示意图形式描述了雾化的喷雾发展阶段，分别为变形铅笔状、洋葱阶段、郁金香阶段和充分发展阶段。

3. 结果

3.1. 雾化前验证

图 3 展示了喷雾发展早期阶段模拟结果与实验成像（见Van Strien 等人(2022年)）的定性比较。观察到计算流体力学模拟与高速成像之间存在时间滞后（差异）（图 3）。

时间上的不一致源于实验可视化中使用的实际驱动力与计算流体力学模拟中使用的恒定入口流速之间的差异。虽然计算流体力学模型中的恒定入口速度条件并未准确呈现实际喷雾驱动力的阶跃曲线，但喷雾事件的大部分过程是一致的，而由该差异引起的影响从图中各面板的时间差异中可以明显看出 3。

初始的圆柱形液柱射流从喷嘴中喷出。随后，液柱射流逐渐扩展，并在靠近喷嘴出口处发生变形，因为离心力导致不稳定性开始形成。随着质量流量增加，液柱的变形加剧，最终发展成锥形液膜结构；液膜上会出现开尔文–亥姆霍兹波，从而产生液膜不稳定性。上游压力所提供的惯性力和离心力相互竞争，促使液膜扩展并最终破裂；与此同时，液体的黏性力和表面张力则试图使液膜保持完整。Lefebvre 和 McDonell 所述的五个雾化阶段Lefebvre 和 McDonell(2017年) 如图 3c 所示。我们的结果显示，在雾化早期出现了变形铅笔状、洋葱状和郁金香状阶段。

喷雾发展早期阶段的喷雾贯穿距离如图4所示。直线的斜率决定了液体射流速度。计算流体力学模拟结果显示，平均速度为 24.80 m/s，高于测量数据中的 18.14 m/s。总体而言，若考虑计算流体力学模拟与测量结果之间的时间滞后差异，则计算流体力学模拟与实验结果在定性上吻合良好。

3.2. 液膜破碎

在主要雾化阶段，喷嘴内形成了典型的空气芯区，如图 5所示。模拟的初始条件将旋流室和喷嘴喉部区域设定为充满液体，以表示已预先启动的鼻喷雾装置。随着模拟进行，液体流经旋流

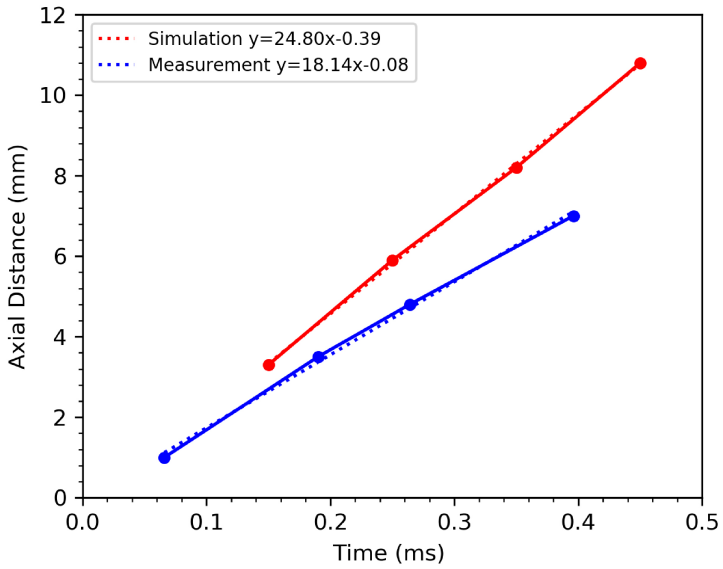

图4：实测喷雾发展早期液体贯穿距离与Van Strien 等人 （2022年）和模拟液柱的比较。通过线性回归线对其进行拟合，其斜率决定了贯穿速度大小。

室，并在切向入口的作用下以切向速度分量从喷孔喷出。喷孔中心形成负压，并形成气芯（$t = 1.15$ ms，见图 5）。

喷雾的充分发展阶段可通过其最大的气芯直径来确定。图5b 展示了喷雾形成不同阶段的气芯直径，这些阶段由液相体积分数（蓝色）表示。气芯区域在喷雾发展的整个稳定阶段都存在，并且在雾化过程中，随着液膜由压力旋流雾化器形成，其形状和大小会发生波动。

在近喷嘴区域，凯尔文-亥姆霍兹不稳定性（KH）会在图6a、b 所示的液膜上产生波浪，其中具有最大增长率波长的波浪会使液膜沿垂直于流动的方向发生周期性增厚Lefebvre 和 McDonell （2017年）。实验中测得的凯尔文-亥姆霍兹不稳定性长度尺度与模拟结果中的相似。两个波幅之间的距离由波长定义。

柱状液丝从逐渐变薄的锥形液膜上脱落，其中液丝所含的液体体积可估算为从液膜上切取的液丝部分的体积

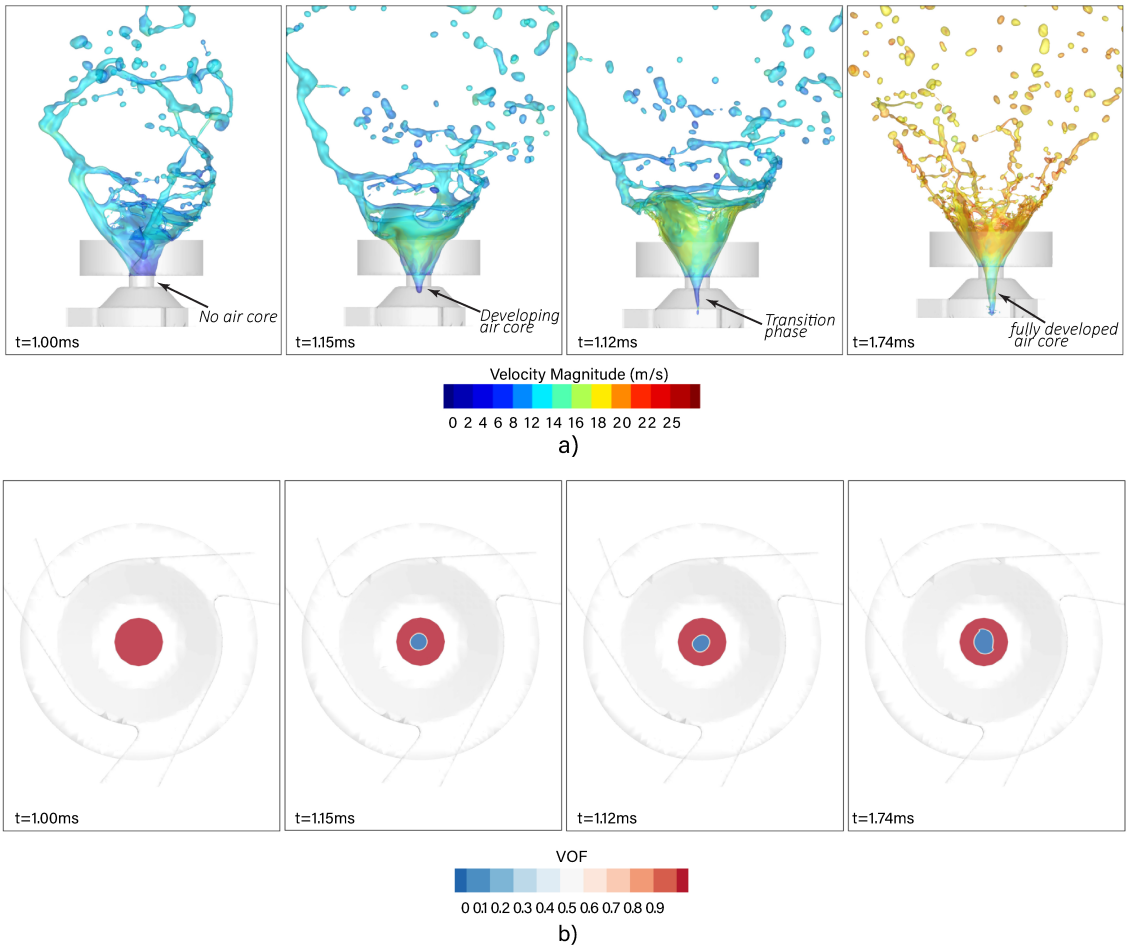

图5：a）喷雾发展早期阶段的气芯形成情况，以流体体积法（VOF）值为0.5的等值面表示，并按速度大小着色；b）喷嘴喉部的流体体积法（VOF）截面图，显示喷雾发展早期阶段的气芯直径。在充分发展阶段，气芯直径在0.13–0.20 mm之间波动。

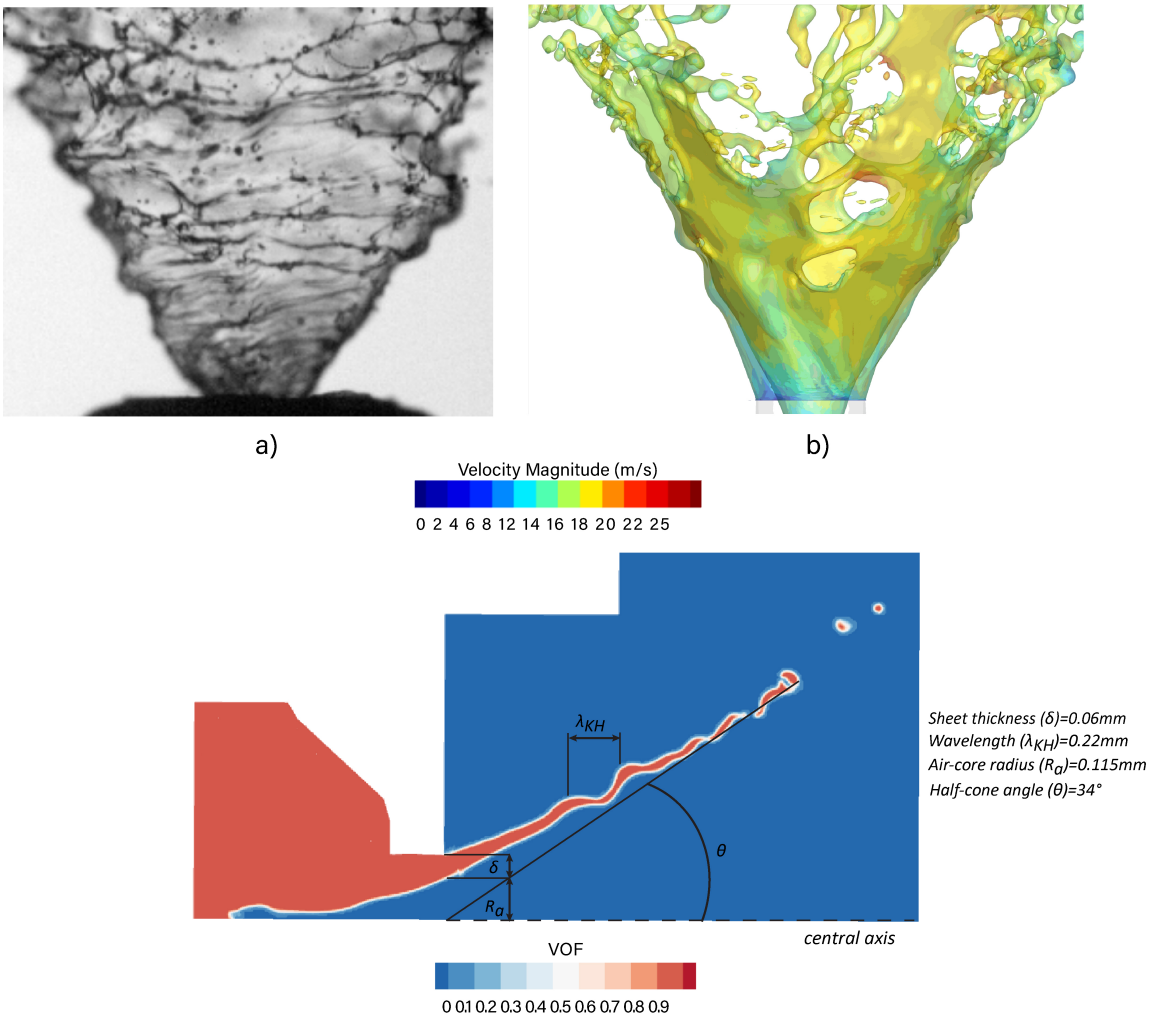

图6：喷嘴附近液膜，展示了 a) 实验中的表面波形成Van Strien 等人(2022年) 和 b) 模拟，以及 c) 一次破碎，展示液膜厚度、气芯半径、KH波发展和喷雾半锥角。

该液膜在破碎距离处的厚度与液膜厚度相同，宽度为一个波长，如图所示6c，通过射流中心轴处的液体体积分数确定。这些圆柱形液丝根据瑞利机制分解成液滴（York 等人，1953）。图中描绘了液膜厚度、扰动波长、气芯半径和半锥角等参数。喷雾锥角和破碎长度是表征一次破碎的最重要参数，前者表征液膜的空间分布范围，后者则表征液膜从喷嘴出口开始破碎的位置。

图 7a 展示了速度流场的线积分卷积，可视化了沿喷嘴中心轴的垂直和水平截面上的相干流动结构。在图 7b 中，截面 y1-y3 显示喷嘴内部流场，而截面 y4-y6 显示喷嘴近场流场，在此可观察到液体与静止气体的相互作用。旋流液体射流破碎按 We-MR空间（Rajamanickam 和 Basu，2017年）分类。其中，We表示韦伯数，MR 表示动量比（液气动量比）。在典型的鼻腔应用中，惯性力占主导地位，超过表面张力，$We < 2$且 $MR = 0$（假设气体静止）。这意味着，鼻喷雾在We-MR空间中处于轴对称区间，从而形成轴对称喷雾，如图7a 所示。图 8a 和 b 描绘了图 7所示 y1 至 y4 位置处沿中线截取的速度大小剖面。速度大小分解为轴向、切向和径向分量，如图8c-f 所示。喷嘴中的速度剖面呈双峰分布。沿切向入口和旋流室横截面，液体的切向速度远大于轴向和径向速度，表明液体的螺旋旋流运动占主导地位。在喷嘴喉部，切向速度和轴向速度大小相近，其峰值均位于气液界面处。径向速度分量的峰值为另外两个分量的三分之一。图中的体积分数范围表示喷雾雾化器不同截面处的气芯涡。在破碎长度处，轴向速度大小仍保持占主导地位，但切向速度显著减小。

图 9a 显示了喷雾形成充分发展阶段的主体液膜，其颜色根据总压进行标示。在高压区域识别出了液膜变薄过程。在惯性和离心力的作用下，液膜持续变薄，最终导致液膜穿孔（液膜上形成孔洞）。相互竞争的黏性力和表面张力则会抵抗液膜变薄

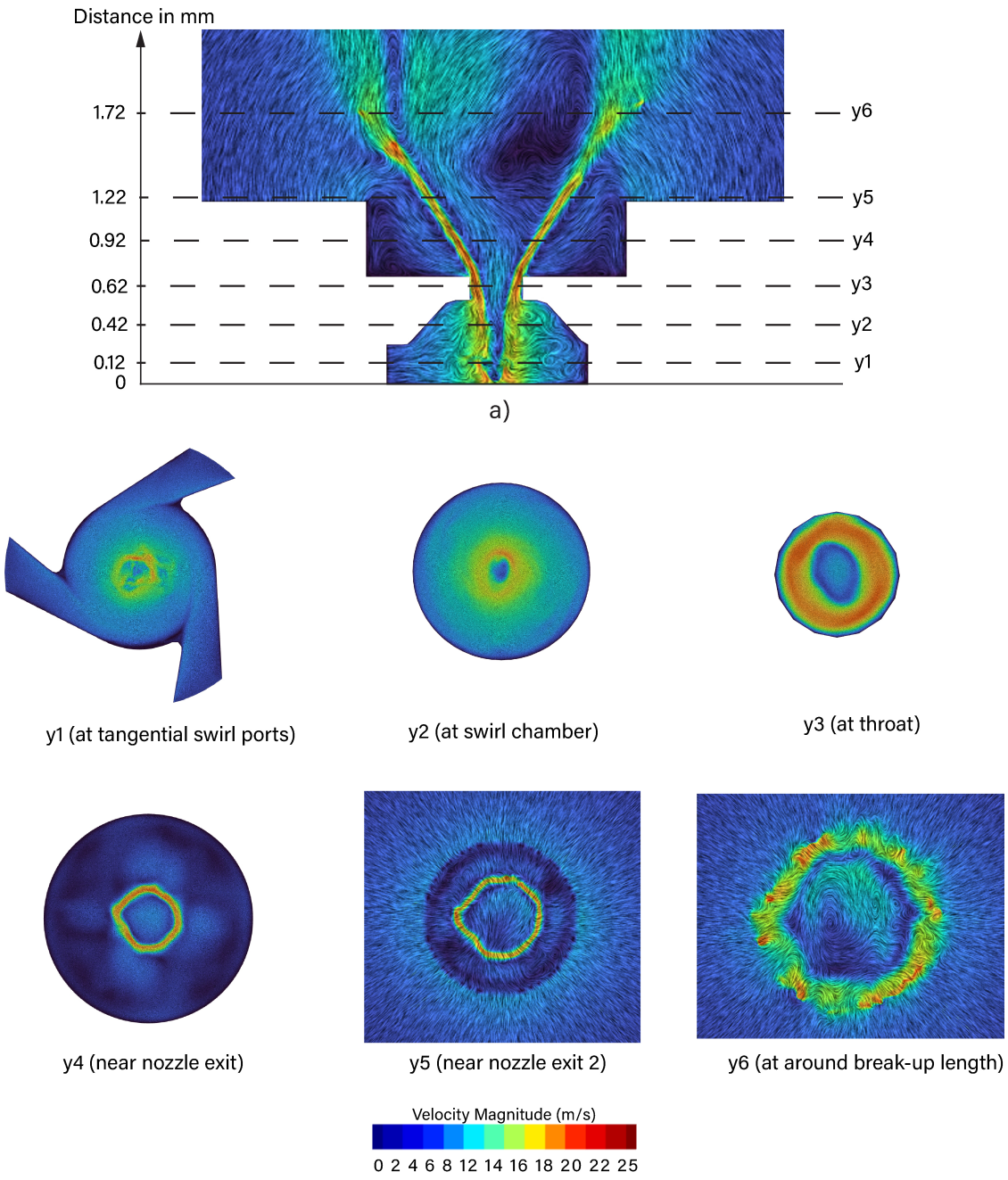

图7：a）穿过喷嘴中心的垂直切片；b）图a）所示的y1、y2、y3、y4、y5和y6处的水平切片。

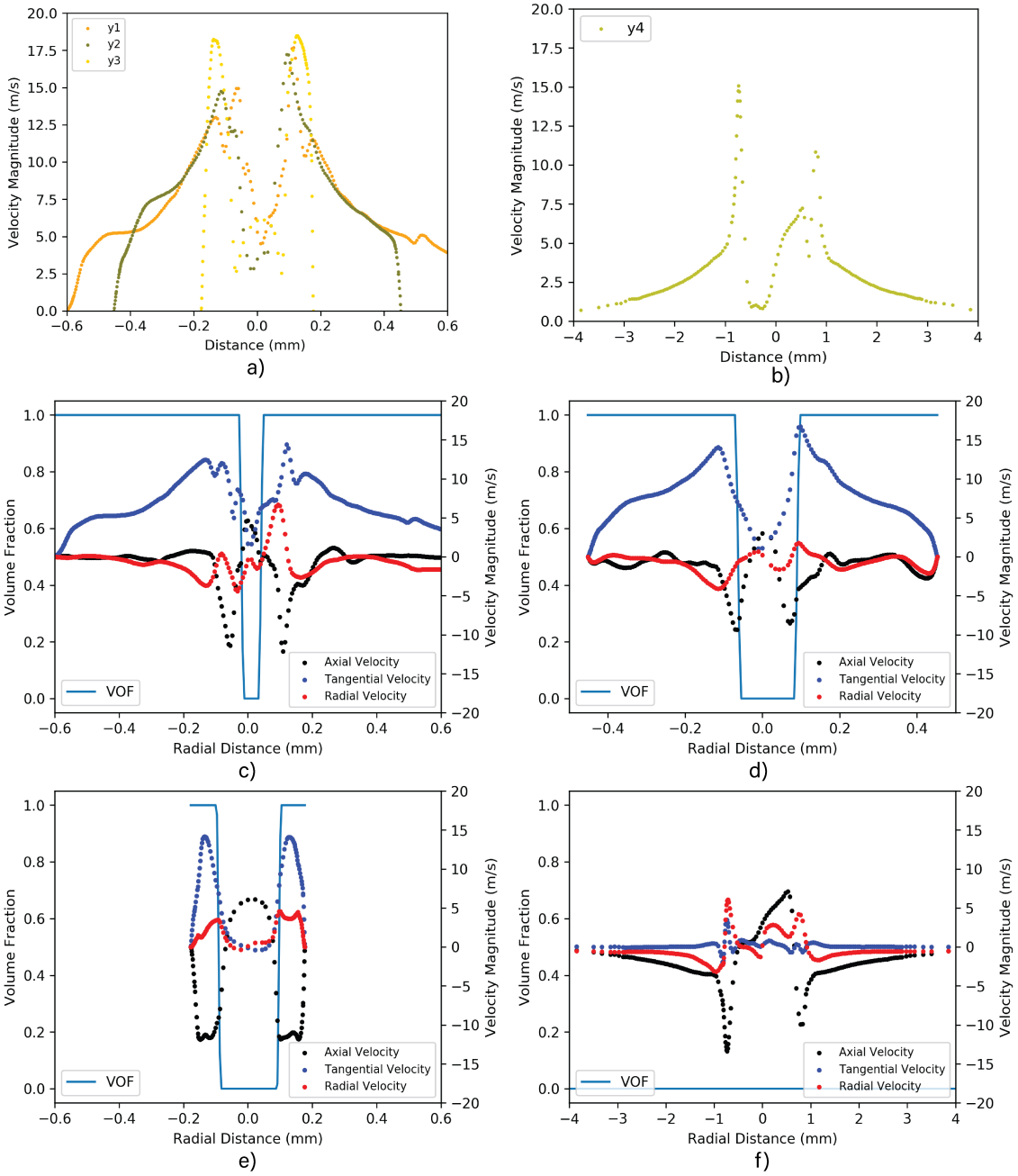

图8：a）喷嘴内部 y1、y2 和 y3 截面处以及 b）破碎长度处的速度大小。c）切向入口（y1）、d）旋流室（y2）、e）喷嘴喉部（y3）和 f）破碎长度处（y4）的速度分量和水体积分数。

止以　防止液膜破裂。图 9b 显示，随着多个穿孔　s

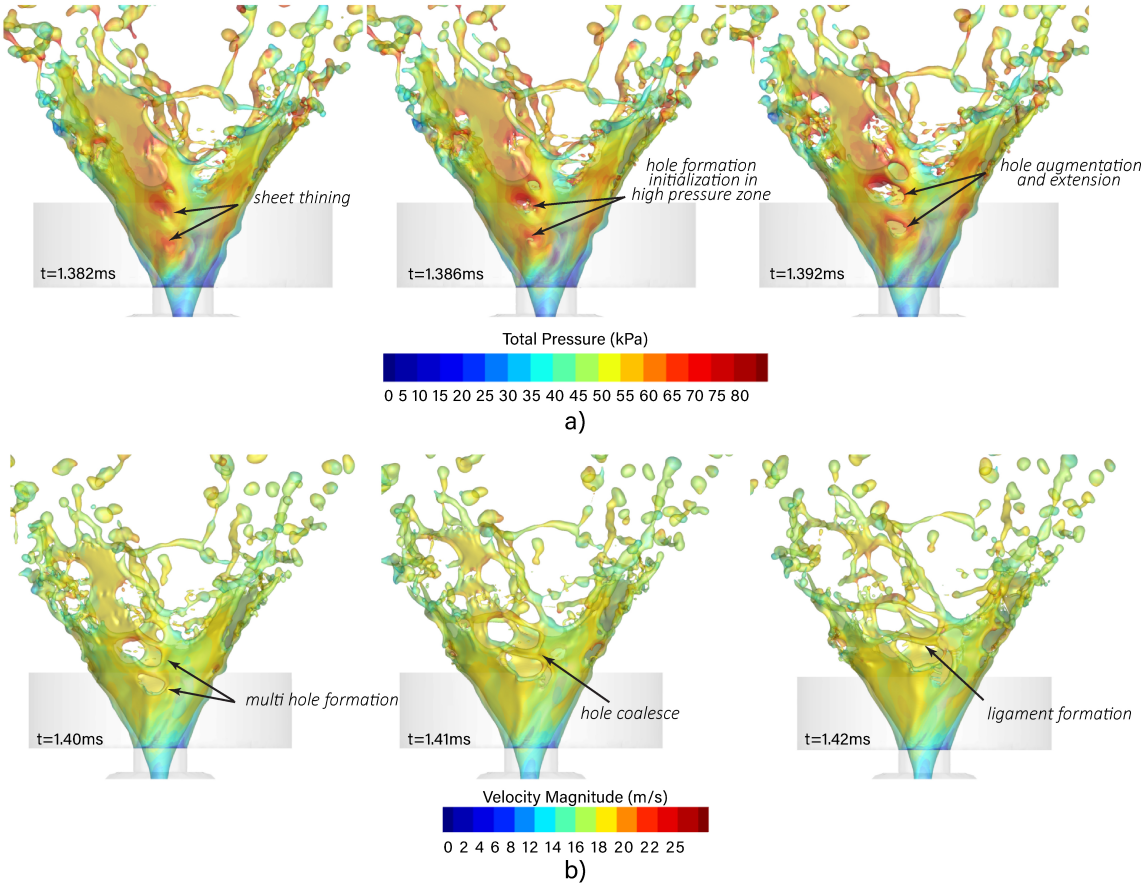

图 9：a）高压区域形成液膜孔洞；b）液膜经历孔洞扩展并形成液丝。

出现后，穿孔（例如孔洞）相互合并，形成细液丝。

图 10a 展示了计算流体力学模拟与实验所得喷雾形成稳定阶段充分发展喷雾的定性比较。从定性上看，数值模拟很好地捕捉到了喷雾羽流体积和喷雾角。图 10b 展示了依据液团非球形度判据转换为离散颗粒的液团。非球形度小于 0.5 的液团被转换为离散液滴。模拟解析了喷雾总质量的 98.99%，其余喷雾质量则发生了扩散。

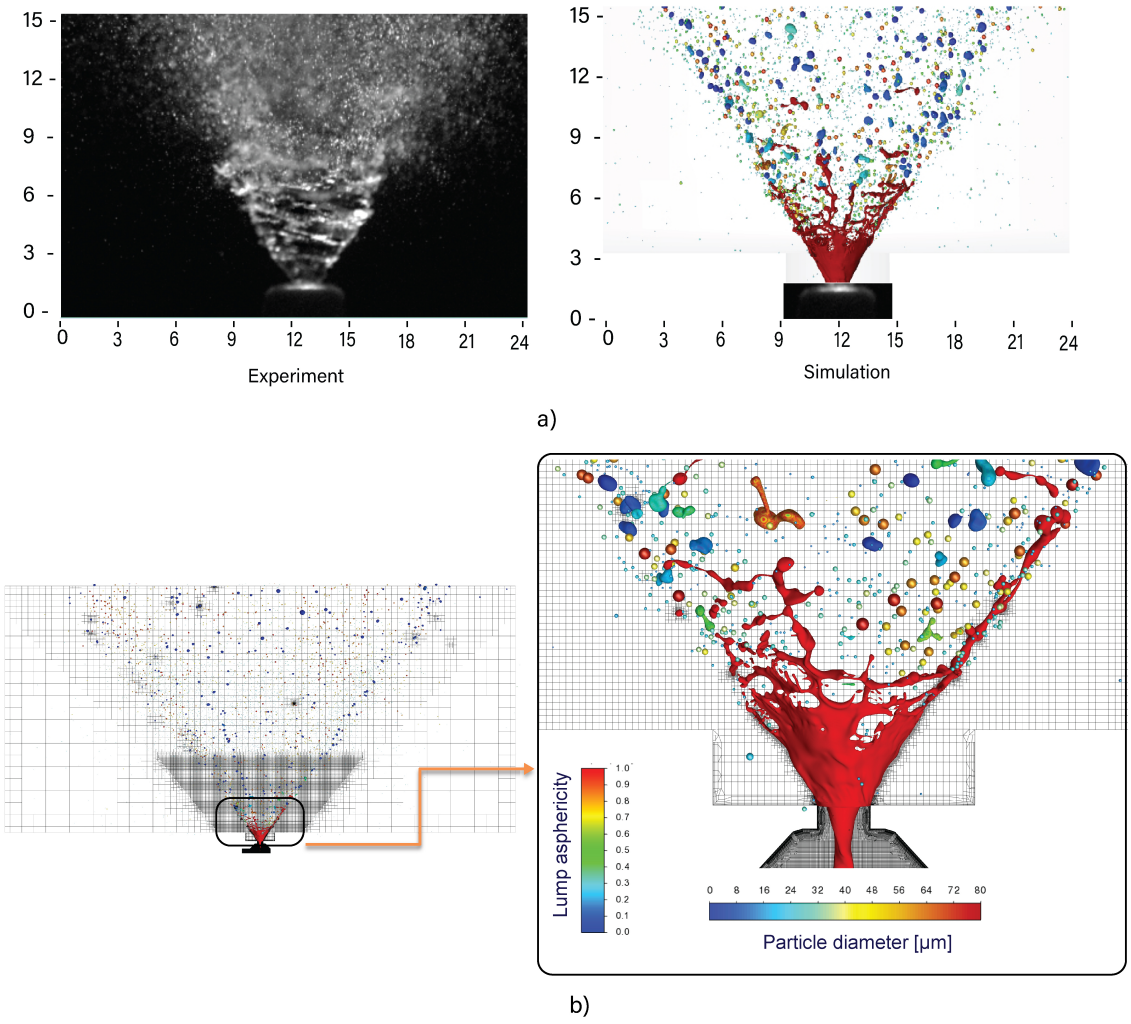

图10：a）来自实验的稳定阶段充分发展喷雾的Van Strien 等人（2022年）与模拟结果的定性比较；b）基于液团非球形度判据将流体体积法转换为DPM。非球形度 < 0.5 的液团将被转换为离散颗粒。

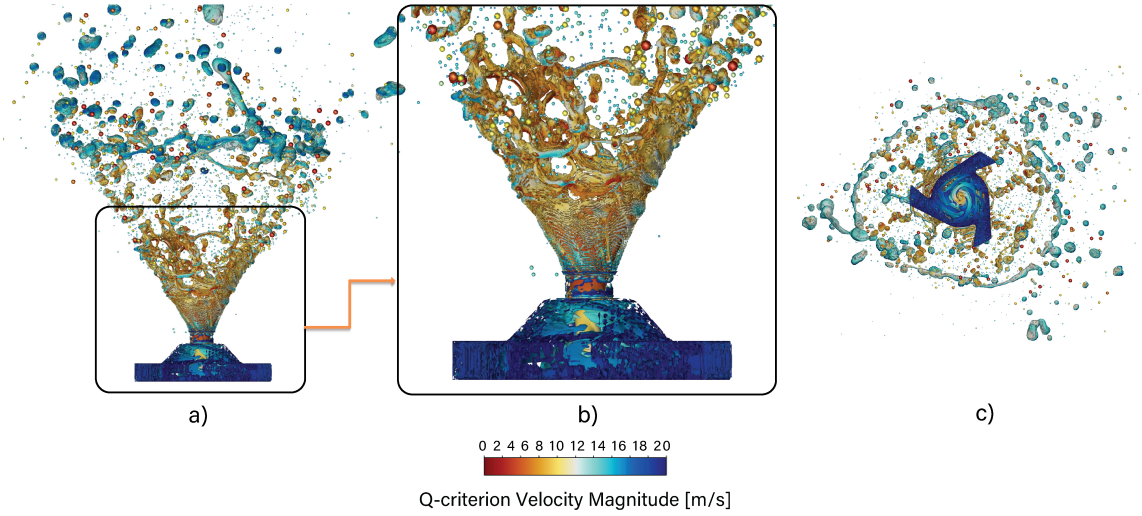

图11：a）液相中的Q判据等值面；b）喷嘴附近大尺度湍流的放大视图；c）仰视图

快速运动的液膜与气相耦合产生的湍流如图所示11 ，该图通过 Q 判据值为 1000 s^{-2} 的等值面展示了液相中按速度大小着色的情况。大尺度湍流结构得到了解析，在近喷嘴区域和雾化器内部均可观察到。生成的雾化液滴直径通过索特平均直径计算得出。图12a 展示了实验测得的索特平均直径箱线图与模拟得到的平均索特平均直径的对比。模拟高估了平均索特平均直径，但其数值仍在测量值的上四分位数范围内。图12b 展示了测量结果与模拟结果的液滴累积分布（几何直径），图12c 展示了测量结果与模拟结果的罗辛-拉姆勒分布。较大直径的颗粒（$> 50\,\mu$m）得到了较好的预测，而较小颗粒则被高估。实验与数值分析之间的差异可能有两个原因。a）实验采用喷雾衍射法获取液滴尺寸分布，但该方法检测较小液滴的精度存在截止限制（即 $< 10\ \mu$m），这些高速运动的较小液滴可能未能被充分捕捉。b）二次破碎采用了默认破碎颗粒组的 TAB 破碎模型。这意味着当满足 TAB 破碎准则时，一个母颗粒只生成一个子颗粒组和一个母颗粒组，因此二次破碎颗粒组的数量有限。因此，较小液滴容易被过度表示，导致较小液滴的预测值偏高

颗粒。

4. 讨论

根据近喷嘴喷雾锥的形状，喷雾雾化可分为三个阶段：i）稳定前期或扩展阶段；ii）充分发展稳定阶段；iii）塌缩阶段。

在稳定前期，即喷雾形成之前，液体离开喷嘴出口时会形成旋流强度相对较低的液柱。此时，轴向速度较低，气动力相对较小，且没有旋流运动，因此表面张力占主导地位，限制了液体射流的变形。随着进入雾化器的液体质量增加、压力升高，液体发生变形（图3）。

喷雾的充分发展稳定阶段具有最大的喷雾锥角，且雾化器内气芯已充分形成。当旋流的离心力克服黏性力，并且旋流室内旋流液体的运动在喷射器出口附近形成低压区时，气芯便会形成（Amini，2016）。多种参数会影响气芯直径，且驱动力增大时，气芯直径也会增大（Liu 等人，2017年）。在鼻腔喷雾应用中，由于患者手动驱动装置造成的驱动压力偏差很小，范围为 0.2–0.6 MPa（Van Strien 等人，2022年），因此其对气芯直径的影响可以忽略。然而，喷嘴内部几何结构会显著影响气芯直径，进而影响一次破碎，并最终影响液滴尺寸分布。气芯直径随旋流室长度增加而减小；当长度达到临界长度时，气芯便会消失（Liu 等人，2017年）。不过，鼻喷雾剂的旋流室通常足够短，能够在整个喷雾持续时间（∼0.15 s）内保持气芯，从而提高剂量的可控性和重复性。

在充分发展喷雾形成阶段，识别出三个不同区域。区域1涉及连续液膜射流上的表面波；区域2存在水平液丝；区域3则是液滴形成区。液膜破碎机制是一种复杂现象，因为多种作用力相互作用，使流动模式变得更加复杂。Fraser等人（Fraser，1953）提出了液膜破碎的三种基本模式：a）边缘型，b）波浪型，c）穿孔液膜型。

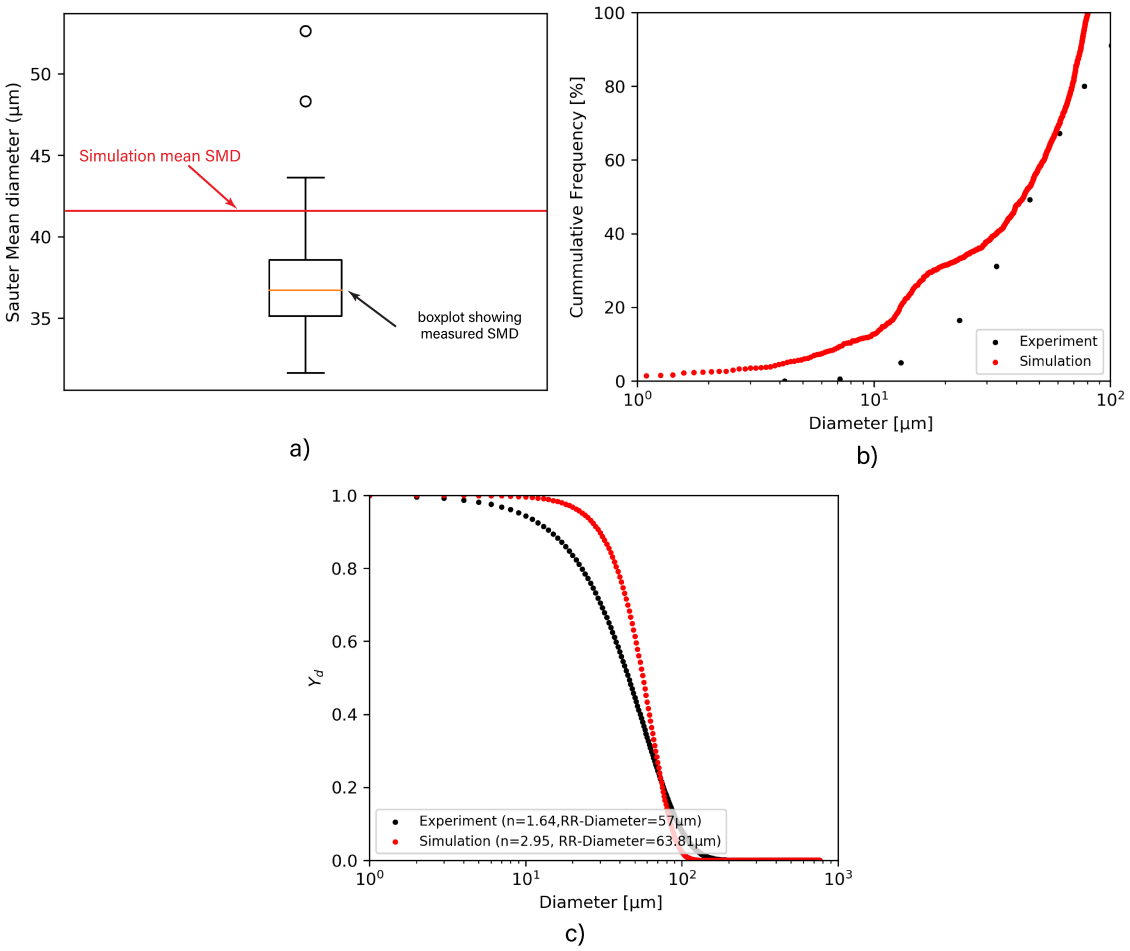

图12：a）测量的索特平均直径与模拟平均索特平均直径的箱线图，b）测量数据与模拟结果的液滴尺寸分布，以及 c）测量与模拟的罗辛-拉姆勒分布。定量实验数据摘自Van Strien 等人(2022年)。

边缘模式是高黏度和高表面张力液体发生破碎的一种显著模式（Chinn，1996）。这一现象最初是在喷雾发展初期观察到的，此时表面张力占主导地位（图 3 ，时间为 $t = 0.45$ ms（模拟）和 $t = 0.396$ms（实验））。当雾化器内液体产生的压力升高时，液膜破碎的后续模式（波浪和穿孔液膜）会变得显著。在液膜破碎的边缘模式中，表面张力会使液膜的自由边缘收缩，形成较厚的边缘。由于静止气体与液体界面之间强烈的剪切效应，液膜边缘会变薄并形成丝状结构，称为液丝。这些液丝进一步破碎，形成液滴；液滴继续沿原方向运动，但仍通过液丝附着在液膜上。液滴和液丝都会继续进一步破碎。

液体破碎的第二种模式是由于气体与液体界面处不稳定波的增长所致（图 6）。这些不稳定波也称为凯尔文-亥姆霍兹不稳定性，会产生速度和压力的波动，从而使表面波（液膜）变形为液丝。通常，鼻喷雾在低 We 数状态下运行（$We = 1.$ 06-2.71）。 We 表示流体惯性相对于表面张力的相对重要性，其定义为 $We = \rho \times U^2 \times L/\sigma$，其中 ρ 为气体密度， U 为18-30 m/s的平均喷雾速度， L 为特征长度，取孔口直径0.35 mm， σ 为液体表面张力。对于鼻腔喷雾应用， $We < 2$ 表明以波状波形式存在的长波不稳定性占主导地位。

在穿孔液膜破碎模式下，液膜的高压区会出现孔洞（图 9a）。该过程始于表面张力作用下液膜变薄。随后，这些孔洞扩展并合并，形成一系列网状不规则液丝。

在旋流运动和气动力的作用下，这些液膜和液丝破碎成微小的液团。在这一阶段，一种新颖的流体体积法-离散相模型（VOF-DPM）转换方法开始发挥作用。根据非球形度和直径判定符合流体体积法向离散相模型转换条件的液团，将被转换为离散相（图 10）。

本研究存在以下局限性。

- 采用恒定速度分布作为入口边界条件，而非采用实际手动按压所代表的速度剖面。

- 由于X射线扫描无法获取详细的喷嘴内部几何结构，因此缺失了这些信息。

无法解析圆角等几何特征，例如喷嘴边缘上的圆角。这可能会导致喷雾的流动动力学发生一些变化。

- 为减少计算开销，计算域的轴向长度限制为 15 mm。

- 网格敏感性研究超出了本研究的范围。不过，为确保数值精度具有较高可信度，本研究采用了范围为 10^{-9} s 至 10^{-6} s 的极小时间步长（喷雾发展稳定阶段的平均时间步长为 10-8 s），并进行了三级自适应网格细化，将全局库朗数限制为 1。所用的最小网格尺寸为 $5.5\ \mu$m，约为液膜厚度特征尺度的 1/11。

5. 结论

对于鼻喷雾应用而言，理解小型压力旋流雾化器中旋流液体的破碎过程的物理机制，对于实现可控的鼻腔给药至关重要。目前，现有的鼻腔喷雾给药数值研究只能部分解决与鼻喷雾一次雾化相关的复杂物理问题。因此，文献中亟需开展计算研究，以帮助理解液膜一次破碎对鼻喷雾二次破碎及最终液滴特性的影响。基于这一动机，本研究旨在利用计算流体力学（CFD）研究喷嘴内部流动，以及旋流液膜破碎过程中液膜、液丝和液滴的形成。在本研究中，我们采用一种新颖的流体体积法-离散相模型（VOF-DPM）方法，结合自适应网格细化（AMR）技术进行数值模拟，以解析液体结构，并将模拟结果与实验结果进行相关性验证。雾化过程分为五个阶段：滴流、变形铅笔状、洋葱状、郁金香状和充分发展阶段。具体而言，我们的结果展示了雾化早期阶段的变形铅笔状、洋葱状和郁金香状形态。此外，我们观察到，鼻喷雾在We-MR空间中处于轴对称区间，从而形成更易控制且可重复的轴对称喷雾。此外，我们还识别出鼻喷雾发展过程中液膜破碎的三种不同模式：边缘破碎、波浪破碎和穿孔液膜破碎。本研究提供了定性和定量数据，以更好地理解鼻喷雾应用中的一次雾化和二次雾化。从定性角度来看，实验结果为本研究提供的模拟结果提供了充分的证据支持。

6. 致谢

作者衷心感谢 Garnett Passe and Rodney Williams Foundation Conjoint Grant 2019-22 提供的资金支持，以及澳大利亚国家计算基础设施（国家计算基础设施）提供的高性能计算服务。

参考文献

Amini, G.，2016年。单孔旋流喷嘴中的液体流动。《国际多相流期刊》79，225–235。Basu, S.，Holbrook, L.T.，Kudlaty, K.，Fasanmade, O.，Wu, J.，Burke, A.，Langworthy, B.W.，Farzal, Z.，Mamdani, M.，Bennett, W.D.，等，2020年。用于改进鼻腔给药的喷雾位置数值评估。《科学报告》10，1–18。Brackbill, J.U.，Kothe, D.B.，Zemach, C.，1992年。表面张力建模的连续介质方法。《计算物理学杂志》100，335–354。Calmet, H.，Inthavong, K.，Eguzkitza, B.，Lehmkuhl, O.，Houzeaux, G.，V´azquez, M.，2019年。不同吸入条件下人体鼻腔内的鼻腔喷雾颗粒沉积。《公共科学图书馆·综合》14，e0221330。Charalampous, G.，Hadjiyiannis, C.，Hardalupas, Y.，2019年。同轴气流喷雾器中一次破碎和喷雾的适当正交分解。《流体物理学》31，043304。Cheng, Y.，Holmes, T.，Gao, J.，Guilmette, R.，Li, S.，Surakitbanharn, Y.，Rowlings, C.，2001年。鼻喷雾泵及其在人体鼻腔气道复制模型中沉积分布的表征。《气溶胶医学杂志》14，267–280。Chinn, J.J.，1996年。旋流雾化喷嘴的内部流动物理学。博士论文。曼彻斯特大学：UMIST。Dayal, P.，Shaik, M.S.，Singh, M.，2004年。使用Malvern Spraytec®评估影响鼻喷雾液滴尺寸分布的不同参数。《药学科学杂志》93，1725–1742。Di Martino, M.，Ahirwal, D.，Maffettone, P.L.，2022年。空心锥雾化的计算流体力学表征：牛顿流体喷雾与非牛顿流体喷雾的比较。《流体物理学》34，093318。Dombrowski, N.，Hasson, D.，1969年。低黏度液体旋流（离心式）压力喷嘴的流动特性。《美国化学工程师学会期刊》15，604–611。Foo, M.Y.，Cheng, Y.S.，Su, W.C.，Donovan, M.D.，2007年。喷雾特性对鼻内沉积的影响。《气溶胶医学杂志》20，495–508。Fraser, R.，1953。液体雾化器性能研究。Imp. Coll. Chem. Eng. Soc. J. 7，52–68。

Fung, M.C.，Inthavong, K.，Yang, W.，Lappas, P.，Tu, J.，2013年。鼻喷雾装置产生的非稳态喷雾雾化外部特性。《药学科学杂志》102，1024–1035。Gao, M.，Shen, X.，Mao, S.，2020年。经鼻喷雾给药过程中影响鼻腔药物沉积的因素。《药学研究杂志》50，251–259。Guo, C.，Doub, W.H.，2006年。致动参数对鼻喷雾产品体外测试的影响。《药学科学杂志》95，2029–2040。Guo, C.，Stine, K.J.，Kauffman, J.F.，Doub, W.H.，2008年。使用Box-Behnken实验设计评估鼻喷雾体外测试的影响因素。《欧洲药学科学杂志》35，417–426。doi:10.1016/j.ejps.2008.09.001。Hirt, C.W.，Nichols, B.D.，1981年。用于自由边界动力学的流体体积（VOF）法。《计算物理学杂志》39，201–225。Hossainpour, S.，Binesh, A.，2009年。重型柴油发动机中的燃油喷雾雾化研究及不同喷雾破碎模型的比较。《燃料》88，799–805。Inthavong, K.，Fung, M.C.，Tong, X.，Yang, W.，Tu, J.，2014年。鼻喷雾给药的高分辨率可视化与分析。《药物研究》31，1930–1937。Inthavong, K.，Ge, Q.，Se, C.M.，Yang, W.，Tu, J.，2011年。包括鼻喷雾装置在内的人体鼻腔喷雾颗粒沉积模拟。《气溶胶科学杂志》42，100–113。Inthavong, K.，Tian, Z.F.，Tu, J.，Yang, W.，Xue, C.，2008年。使用计算流体力学优化鼻喷雾参数以实现高效给药。《生物学与医学中的计算机》38，713–726。Inthavong, K.，Yang, W.，Fung, M.C.，Tu, J.，2012年。鼻喷雾装置雾化产生的连续喷雾的外部及近喷嘴特性。《气溶胶科学与技术》46，165–177。Kelly, J.T.，Asgharian, B.，Kimbell, J.S.，Wong, B.A.，2004年。不同方法制造的人体鼻腔气道复制模型中的颗粒沉积。第一部分：惯性区颗粒。《气溶胶科学与技术》38，1063–1071。Kimbell, J.S.，Segal, R.A.，Asgharian, B.，Wong, B.A.，Schroeter, J.D.，Southall, J.P.，Dickens, C.J.，Brace, G.，Miller, F.J.，2007年。使用人体鼻道计算流体力学模型表征鼻喷装置产生的沉积。《气溶胶医学杂志》20，59–74。Kolanjiyil, A.V.，Alfaifi, A.，Aladwani, G.，Golshahi, L.，Longest, W.，2022年。喷雾–壁面相互作用及沉积后液体运动对药用鼻喷雾传输与递送的重要性。《药剂学》14，956。Kolanjiyil, A.V.，Hosseini, S.，Alfaifi, A.，Hindle, M.，Golshahi, L.，Longest, P.W.，2021年。喷雾云运动及双向动量耦合对药用鼻喷雾传输的重要性。《气溶胶科学杂志》156，105770。Kumar, A.，Sahu, S.，2020年。同轴双流体喷射器中液体射流破碎记忆效应对下游喷雾波动的影响。《流体物理学》32，073302。Kuo, C.W.，Trujillo, M.F.，2022年。液体射流雾化与液滴破碎的模拟

采用流体体积法拉格朗日–欧拉策略。《流体物理学》34，113326。Lefebvre, A.H., McDonell, V.G., 2017.《雾化与喷雾》。CRC出版社。Liu, A.B., Mather, D., Reitz, R.D., 1993. 液滴阻力和破碎对燃料喷雾影响的建模。《美国机械工程师学会会刊》，83–95。Liu, X., Doub, W.H., Guo, C., 2010. 使用相位多普勒测量法（PDA）评估鼻喷装置产生的液滴速度和尺寸。《国际药剂学杂志》388，82–87。Liu, Z., Huang, Y., Sun, L., 2017. 单纯形压力旋流雾化器气芯尺寸研究。《国际氢能杂志》42，18649–18657。Moon, S., Bae, C., Abo-Serie, E., Choi, J., 2007. 不同燃料温度下压力旋流雾化器的内部及近喷嘴流动。《雾化与喷雾》17，529–550。Newman, S., Moren, F., Clarke, S., 1988. 鼻喷雾剂在人体中的沉积分布。《鼻科学》26，111–120。Patil, S., Sahu, S., 2021. 空气旋流效应对双射流横流气动雾化喷射器喷雾特性和液滴扩散的影响。《流体物理学》33，073314。Rajamanickam, K., Basu, S., 2017. 对喷雾–旋流相互作用动力学的深入研究。《流体力学杂志》810，82–126。Rizk, N., Lefebvre, A., 1987. 单纯形旋流雾化器速度系数和喷雾锥角的预测。《国际涡轮与喷气发动机杂志》4，65–74。Rizk, N., Lefebvre, A.H., 1985. 单纯形旋流雾化器的内部流动特性。《推进与动力杂志》1，193–199。Rostami, E., Mahdavy Moghaddam, H., 2021. 速度和黏度对不同燃料环状喷雾雾化的影响。《燃烧理论与建模》25，158–192。Sahu, T.L., Chetan, U., Mahato, J., Kar, P.K., Das, P.K., Lakkaraju, R., 2022. 黏性旋流液体射流中扭转液丝的形成与破碎。《流体物理学》34，112118。Schmidt, D.P., Nouar, I., Senecal, P., Rutland, J., Martin, J., Reitz, R.D., Hoffman, J.A., 1999. 近场压力旋流雾化。SAE 汇刊，471–484。Shang, Y., Inthavong, K., Qiu, D., Singh, N., He, F., Tu, J., 2021. 黏液纤毛清除对鼻喷药物吸收的影响预测。《公共科学图书馆·综合》16，e0246007。Shrestha, K., Van Strien, J., Singh, N., Inthavong, K., 2020. 鼻喷雾的一次破碎与雾化特性。《公共科学图书馆·综合》15，e0236063。Si, X.A., Sami, M., Xi, J., 2021. 液膜迁移显著促进鼻喷药物递送至嗅觉区：一项数值模拟研究。《药剂学》13，903。Suman, J.D., Laube, B.L., Lin, T.c., Brouet, G., Dalby, R., 2002. 水性喷雾泵体外测试作为鼻腔沉积替代指标的有效性。《药物研究》19，1–6。Taylor, G.I., 1948. 旋流雾化器力学，载于：第七届国际应用力学大会，第280–285页。Taylor, G.I., 1963. 高速气流中液滴的形状与加速度。《GI Taylor 科学论文集》3，457–464。

Tong, X., Dong, J., Shang, Y., Inthavong, K., Tu, J., 2016. 鼻腔药物递送装置及其取向对真实人体鼻腔内喷雾颗粒沉积的影响。《生物学与医学中的计算机》77，40–48。Treleaven, N.C., Laera, D., Carmona, J., Odier, N., Gentil, Y., Dombard, J., Daviller, G., Gicquel, L., Poinsot, T., 2022. 将燃烧模拟与旋流喷雾火焰大涡模拟中的雾化和液膜模型耦合。《流动、湍流与燃烧》109，759–789。Van Strien, J., Petersen, P., Lappas, P., Yeo, L., Rezk, A., Vahaji, S., Inthavong, K., 2022. 鼻腔喷雾雾化产生的喷雾特性。《气溶胶科学杂志》165，106009。York, J.L., Stubbs, H., Tek, M., 1953. 液膜破碎机理。《美国机械工程师学会会刊》75，1279–1286。Yu, Y., Li, G., Wang, Y., Ding, J., 2016. 使用新型破碎模型对高压燃油喷雾雾化进行建模。《应用数学建模》40，268–283。Zheng, L., Zhao, R., Nian, Y.L., Liu, J., Cheng, W.L., 2023. 切向与轴向速度比及喷嘴内部结构参数对喷雾特性影响的数值与实验研究。《流体物理学》35，043303。