

微重力状态下自由液面构型的 Surface Evolver 软件计算

李永强, 叶致君, 李利辉

(东北大学 理学院, 辽宁 沈阳 110819)

摘 要: 以扇柱形贮箱为研究对象, 根据微重力状态下液体的毛细现象, 基于 Surface Evolver 软件平台, 建立了三维分析模型. 利用该模型进行数值模拟, 深入研究了微重力状态下扇柱形贮箱内角处自由液面的爬升特性. 数值分析结果与实验结果吻合良好, 证明了该方法的合理有效性. 通过数值分析, 详细探讨了接触角及容器中心角对微重力条件下自由液面爬升的影响规律, 发现液体与容器壁接触角之和小于 90° 时, 液体会不断爬升; 当中心角大于 50° 时, 液体爬升高度变化很小.

关 键 词: Surface Evolver; 数值模拟; 微重力; 自由液面界面; 毛细现象

中图分类号: TP 319 **文献标志码:** A **文章编号:** 1005-3026(2016)09-1364-05

Surface Evolver Calculation of Free Liquid Surface Configuration Under Microgravity

LI Yong-qiang, YE Zhi-jun, LI Li-hui

(School of Sciences, Northeastern University, Shenyang 110819, China. Corresponding author: LI Yong-qiang, E-mail: yqli@mail.neu.edu.cn)

Abstract: Taking a cylindrical storage box as the research subject and based on the liquid capillary phenomenon under microgravity, a 3-D analysis model was established based on the Surface Evolver software. Using this model in numerical simulation, the free liquid surface's climbing properties at the sector inner angle of the cylindrical storage box were studied under microgravity. The results of numerical analysis fitted the experimental results well, which confirmed the rationality and effectiveness of this method. By numerical analysis, the pattern of how the free liquid surface climbing was influenced by the contact angle and the container's central angle under microgravity was studied. It was found that when the sum of contact angle between the liquid and the container wall is less than 90° , the liquid is constantly climbing, and when the container's central angle is more than 50° , the liquid's climbing height changes little.

Key words: Surface Evolver; numerical simulation; microgravity; free liquid surface interface; capillary phenomenon

随着航天技术的不断发展, 航天器的性能及作用也在不断改变, 对其动力系统的要求也在不断提高. 航天动力系统的重要组成部分是液体推进剂贮箱, 因此在微重力条件下能否有效管理液体至关重要. 而在微重力环境下, 由于毛细现象的存在, 贮箱的形状对液体的爬升有很大影响^[1].

利用理论模型研究贮箱内自由液面的爬升问题虽然能准确地反映贮箱的性能, 但对自由液面

爬升规律的分析却存在较大局限性, 如不易收集液体爬升高度的数据及不易观察各个时刻液面构型等. 而数值分析方法不仅能逼真地再现液面爬升过程, 获得爬升过程中的相关物理量, 而且可以方便地进行不同初值、参数问题的数值计算, 开展不同实验条件下的液面特性仿真模拟. Surface Evolver^[2] (SE) 是常用的计算气液平衡界面的有限元模拟软件, 它基于最小能量原理和有限元数

值分析方法,针对表面成形演变过程分析的一种交互式软件工具,提供了灵活的函数定义方法和能量及约束条件的描述方法^[3]. Surface Evolver 作为三维气液平衡界面计算程序,已经被广泛地应用于工程、生物和化学领域,包括流体芯片^[4]、磷脂囊泡平衡^[5]、膜泡演化^[6]、电化学反应^[7]和空间飞行器贮箱^[8]等,并且得到了很好的验证. Collicott 等^[9-10]将 SE 程序的计算结果与经典的毛细稳定理论以及他们的实验结果进行对比,显示了 SE 程序的一致性和准确性. 本文通过对 SE 软件建立的仿真模型进行数值分析,深入研究了扇柱形贮箱参数对自由液面爬升特性的影响规律.

1 模型建立

在地球表面,宏观液体的流动必定受到重力的影响,而随着液体表面积的增加,表面张力也成为影响液体行为的因素. Bond 数是一个无量纲数,用来衡量重力和表面张力的比,关系式如下:

$$Bo = \frac{\rho g H^2}{\sigma}.$$

式中: ρ 为密度; g 为重力加速度; σ 为表面张力系数; H 为液体初始液面高度. 当 $Bo \ll 1$ 时,重力影响就可以忽略不计了. 对于给定的液体 ρ 和 σ 保持不变, g 和 H 的减小都可以使 $Bo \ll 1$. 研究微重力环境下自由液面构型时, $Bo \ll 1$, 故用 SE 软件模拟时,可忽略重力的影响.

以中心角为 60° 的扇形截面的柱形容器为例,假设柱形容器无限高,容器的骨架和初始液面形状如图 1 所示. 编程时利用几何条件确立各个面的形状,由于 SE 软件使用的是有限元法,在未进行迭代运算时,无法表现出曲线和曲面. 容器由 6 个点、9 条线段、5 个面组成,其中,线段 2 与 5 会在迭代运算中演化成弧线. 线段为矢量且在定义线段时,起、终点可互相替换,但在定义面时需满足线段的绕向为面的外法线方向. 线段 2, 9, -5, -8 (负号表示与图 1 所示线段的方向相反)组成的面会演化成圆弧面.

在给定限制条件和运行迭代后,容器里的液体会朝着使系统能量最小时的自由液面形状进化. 以线段 2, 9, -5, -8 组成的圆弧面为例,分析该面的能量限制条件. 系统总能量包括液体的重力势能和系统所有表面的表面自由能,表示如下:

$$E = -\rho \iiint_{V_{\text{总}}} g z dV + (\sigma \iint_{\Sigma} dS + \iint_{\Sigma^*} k dS^*). \quad (1)$$

式中: V 为液体积分微元体积; S 为自由面积分微元面积; S^* 为润湿面积分微元面积; $V_{\text{总}}$ 是液体体积; Σ 是所有自由面; Σ^* 是所有润湿表面. 由于在微重力环境下可假定重力加速度为 0,在 SE 计算中对于重力势能,即右边第一项不予考虑;对于右边第二项,自由液面离散后,每个单元的能量顶点所受到的力都可以看成是顶点位置的函数,由 SE 自动计算;对于右边第三项,可以用 Stokes 公式将其化为线积分.

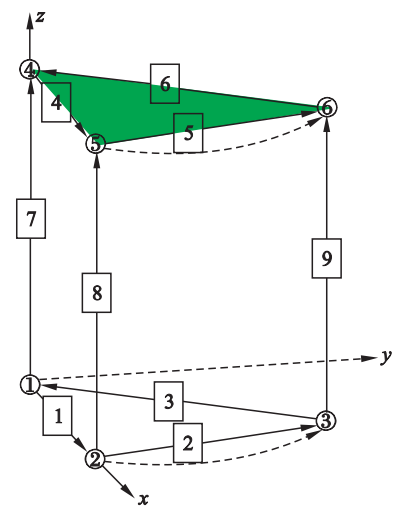


图 1 容器的骨架和初始液面形状
Fig. 1 Frame of vessel and shape of initial liquid surface

线段 2, 9, -5, -8 组成的面转化成线积分为

$$\iint_{S^*} \mathbf{k}_n \cdot d\mathbf{S}^* = \int_{\partial S} |\boldsymbol{\omega}| dl. \quad (2)$$

其中: ∂S 是固液接触线; \mathbf{k}_n 是固体表面的单位法向量,且 $\mathbf{k}_n = \nabla \times \boldsymbol{\omega}$, ∇ 为哈密顿算子,表达式为

$$\nabla = \frac{d}{dx} \mathbf{i} + \frac{d}{dy} \mathbf{j} + \frac{d}{dz} \mathbf{k}. \quad (3)$$

圆弧面的约束方程为

$$\sqrt{x^2 + y^2} = R. \quad (4)$$

由以上可得

$$\boldsymbol{\omega} = -\frac{Ryz}{x^2 + y^2} \mathbf{i} + \frac{Rxz}{x^2 + y^2} \mathbf{j}. \quad (5)$$

式(5)即为由线段 2, 9, -5, -8 组成的圆弧面所受到的能量限制条件.

改变相关参数后迭代运行,可得到不同条件下的自由液面. 由文献[8]可知,对于内角均小于 180° 的容器,当容器越接近于正多边形,SE 的数值结果越精确. 图 2 是中心角为 60° 时,在迭代步数为 200 时的自由液面. 图 3 为扇形内角的虚拟内角和液面高度, h 为液面高度, α' 为所求虚拟内

角 2α 为容器中心角, θ_1 为液体与容器直边壁的接触角, θ_2 为液体与容器圆弧边壁的接触角.

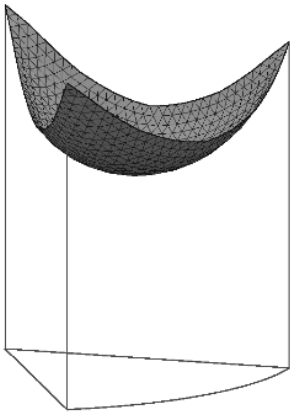


图 2 中心角为 60°时的自由液面
Fig. 2 Free liquid surface at central angle 60°

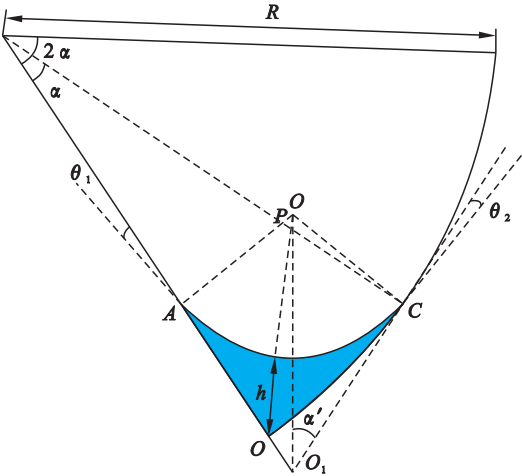


图 3 虚拟内角和液面高度图
Fig. 3 Sketch of dummy corner angle and meniscus height

2 数值分析

在给定中心角 2α 、接触角 θ_1 、 θ_2 条件后,通过迭代计算,提取自由面上节点的数据,再用 Fortran 编程处理节点数据,从而得到相应迭代步数下的前缘位置、虚拟内角和液面高度.接下来探讨扇形内角处毛细流动的 Concus - Finn 条件,以及中心角变化对扇形内角处毛细流动的影响.

2.1 扇形内角处毛细流动的 Concus - Finn 条件探究

在尖角处的静态平衡界面研究方面,Concus 和 Finn 首次提出了满足内角流动计算所需的 Concus - Finn 条件(C - F 条件). 如果以 θ 表示接触角, α 表示内角的一半,在无重力条件下,当 $\theta + \alpha > 90^\circ$ 时,容器的内角处存在稳定的平衡界

面,即液体会在内角处出现稳定的界面构型;当 $\theta + \alpha < 90^\circ$ (称为 C - F 条件)时,内角处液体界面不能稳定存在,即液体会沿着内角不断爬升.通过本节研究发现,对于扇形内角,也存在类似于尖角处的 C - F 条件.为了较全面地探究微重力下扇形内角处毛细流动的 C - F 条件,选取中心角 2α 为 70° 和 90° 两种情况进行研究.对于尖角处的毛细流动,要使其不满足 C - F 条件,即直边的接触角 $\theta_1 > 90^\circ - \alpha$,然后通过改变液体与圆弧边的接触角 θ_2 的大小,来观察液体与圆弧边接触角的变化对扇形内角处的液体前缘位置的影响.如果经过一定迭代次数后,前缘位置始终达不到稳定状态,则此时的扇形内角处毛细流动满足 C - F 条件.若前缘位置达到了稳定状态,则不满足 C - F 条件.基于以上分析,分别选取接触角 $\theta_1 = 70^\circ$ 和 90° ,容器半径 $R = 60\text{ mm}$,初始液体高度 $h_c = 0.05\text{ m}$.具体参数选择见表 1.

表 1 参数选择 Table 1 Parameters selection		
中心角 $2\alpha/(^\circ)$	接触角 $\theta_1/(^\circ)$	接触角 $\theta_2/(^\circ)$
70	60	29, 29.5, 30, 30.5, 31
	70	19, 19.5, 20, 20.5, 21
90	60	29, 29.5, 30, 30.5, 31
	70	19, 19.5, 20, 20.5, 21

通过表 1 的参数,可分析接触角变化对液体在扇形内角处爬升高度的影响,如图 4 所示.在进行迭代时,为了提高运算速度,对网格边小于 5 mm 的边进行细化.

由图 4a、4c 可知,当中心角 $2\alpha = 70^\circ$ 和 90° , $\theta_1 = 60^\circ$ 时,若 $\theta_2 > 30^\circ$,液体在扇形内角处的爬升逐渐趋于平衡,容器内的液体达到稳定界面;而当 $\theta_2 < 30^\circ$ 时,液体前缘位置随着迭代次数的增加而逐渐增大,即不会达到稳定界面,此时 $\theta_1 + \theta_2 < 90^\circ$,与中心角 2α 无关.同理,由图 4b、4d 可知, $\theta_1 = 70^\circ$ 时,若 $\theta_2 > 20^\circ$,液体在扇形内角处的爬升逐渐趋于平衡;而当 $\theta_2 < 20^\circ$ 时,液体前缘位置随着迭代次数的增加而逐渐增大,此时 $\theta_1 + \theta_2 < 90^\circ$,与中心角 2α 无关.由以上分析可以推断,扇形内角处的毛细流动计算所需的 Concus - Finn 条件为 $\theta_1 + \theta_2 < 90^\circ$.文献[8]中也得出“容器的内角大小对液体从重力下的平衡构型到微重力下的平衡构型的爬升高度有影响,内角越大,液体爬升的高度越小”的结论,与图 4 中各条件下液体前缘高度情况很好对应.

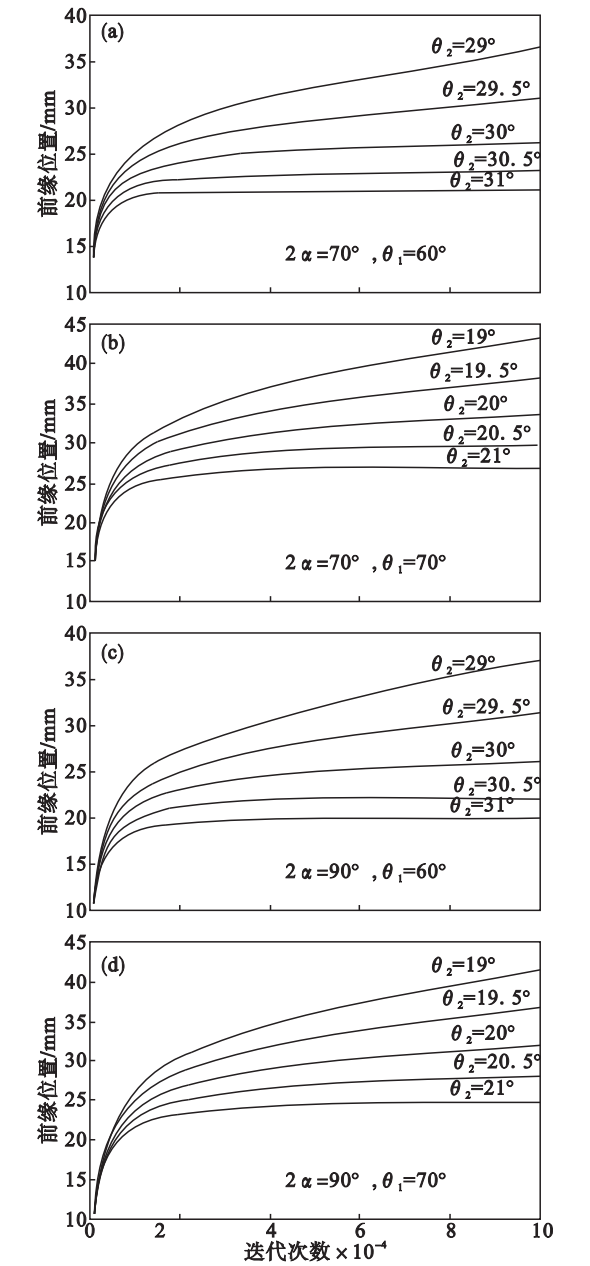


图 4 不同参数时 ,液体前缘位置随迭代次数变化的关系曲线图

Fig. 4 Changes of the front position with iteration times under different parameter selections

2.2 中心角变化对液体爬升高度的影响

本节研究中心角变化对液体爬升高度的影响 ,参数选择见表 2.

表 2 参数选择			
Table 2 Parameter selection			
容器半径 R/m	接触角 $\theta_1 = \theta_2$	初始液体 高度 H_z/m	中心角 $2\alpha/(\text{^\circ})$
0.06	0°	0.05	30 40 ,
			50 60 ,
			70 80 90

根据上面选择的参数 ,通过改变容器中心角 ,可以分析容器中心角对液体在扇形内角处爬升高度的影响 ,如图 5 所示 .在进行迭代时 ,为了提高运算精度 ,对网格边小于 0.5 mm 的边进行细化 .

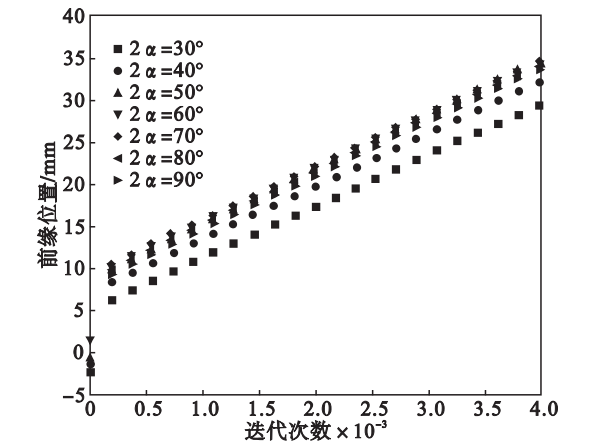


图 5 不同中心角时 ,液体前缘位置随迭代次数变化的关系曲线图

Fig. 5 Change of the front position with iteration times at different central angles

由图 5 可知 ,容器中心角 $2\alpha < 50^\circ$ 时 ,随着迭代次数的增加 ,液体爬升高度随着中心角的增大而增大 ;当 $2\alpha \geq 50^\circ$ 时 ,中心角的变化对液体的爬升高度几乎没有影响 .说明在设计贮箱时 ,导流板的数量为 4 ~ 8 个时 ,不会对贮箱内毛细爬升的前缘高度以及速度产生影响 ,这与文献 [11 - 13] 中由实验得到的“在分别安装 4 6 8 个导流板的情况下实验液体均爬升到出液口 ,将其全部覆盖 ,并且爬升过程中的速度几乎相同”的实验结果一致 .

3 结 论

- 1) 扇形内角处毛细流动的 Concus - Finn 条件为 $\theta_1 + \theta_2 < 90^\circ$.
- 2) 容器中心角小于 50° 时 ,液体爬升高度随着中心角的增大而增大 ,中心角大于 50° 后 ,中心角大小对扇形内角处的毛细流动影响很小 .
- 3) SE 软件数值模拟得到的部分规律与文献 [11 - 13] 中的实验结果吻合 ,说明 SE 可以很好地定性分析微重力环境下内角毛细流动问题 .

参考文献：

[1] 刘玲 .微重力下扇形内角处的毛细流动研究 [D] .沈阳 :东北大学 2014 .
(Liu Ling . Study of capillary flow in fan-shaped interior corner under microgravity [D] . Shenyang : Northeastern University 2014 .)

[2] Brakke K A. The surface evolver [J]. *Experimental Mathematics* ,1992 ,1(2) :141 – 165.

[3] Weaire D. A fresh start for foam physics[J]. *Sciences* 2013 , 340(6133) :693 – 694.

[4] Gau H ,Herminghaus S ,Lenz P ,et al. Liquid morphologies on structured surfaces :from microchannels to microchips[J]. *Sciences* ,1999 ,283(5389) :46 – 49.

[5] Xavier M ,David B. Observation of sable shapes and conformal diffusion in Genus 2 vesicles[J]. *Sciences* ,1995 , 269(5224) :666 – 668.

[6] Saye R I ,Sethian J A. Multiscale modeling of membrane rearrangement ,drainage ,and rupture in evolving foams[J]. *Science* 2013 ,340(6133) :720 – 724.

[7] Flätgen G ,Krischer K ,Pettinger B ,et al. Two-dimensional imaging of potential waves in electrochemical systems by surface plasmon microscopy[J]. *Sciences* ,1995 ,269(5224) : 668 – 671.

[8] 徐升华 ,王林伟 ,孙祉伟 ,等. 容器内角处流体界面特性与 Surface Evolver 程序适用性的研究[J]. *物理学报* ,2012 , 61(16) :166801.
(Xu Sheng-hua ,Wang Lin-wei ,Sun Zhi-wei ,et al. Study of fluid interface properties at container's interior corner and Surface Evolver program applicability[J]. *Acta Physica Sinica* 2012 ,61(16) :166801.)

[9] Collicott S H ,Weislogel M M. Corner radius effects on capillary instability in tank geometries[C]// The 37th AIAA/SAE/ASME/ASEE Joint Propulsion Conference. Reston , VA : American Institute of Aeronautics and Astronautics 2001 :861 – 869.

[10] Collicott S H ,Weislogel M M. Computing existence and stability of capillary surfaces using Surface Evolver[J]. *AIAA Journal* 2004 ,42(2) :289 – 295.

[11] 张晨辉. 微重力下板式表面张力贮箱内流体管理的研究 [D]. 沈阳 :东北大学 ,2013.
(Zhang Chen-hui. Research on the liquid management in the plate surface tension tank under microgravity [D]. Shenyang :Northeastern University 2013.)

[12] 李永强 ,刘玲. 微重力下变内角毛细驱动流研究[J]. *物理学报* 2014 ,63(21) :248 – 257.
(Li Yong-qiang ,Liu Ling. A study of capillary flow in variable interior corners under microgravity[J]. *Acta Physica Sinica* 2014 ,63(21) :248 – 257.)

[13] Wei Y X ,Chen X Q ,Huang Y Y. Interior corner flow theory and its application to the satellite propellant management device design[J]. *Science China :Technological Sciences* , 2011 ,41(9) :1218 – 1224.