

弹性液滴的复杂界面特性模拟

骆政园 白博峰

(西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 西安 710049)

摘要 弹性液滴(弹性膜包裹黏性流体)在流场中的变形、运动等界面动力学特性显著影响液滴内外流体间的物质运输等特性,而液滴界面的弹性、抗弯特性等复杂力学性质是影响其动力学特性的决定因素之一。基于 FTM(Front tracking method),建立了弹性液滴在流场中变形运动的三维模型,考虑界面弹性、抗弯特性等复杂力学性质,重点分析了抗弯特性对液滴变形及界面内应力分布的影响。结果表明抗弯特性使液滴变形量降低,减小界面内最大应力和最小应力的值,抑制界面上波浪形褶皱条纹的形成,增强液滴界面稳定性。

关键词 弹性液滴; 界面弹性; 界面抗弯特性

中图分类号: O359 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2016)02-0337-05

Numerical Simulation of Complex Membrane Characteristics of Elastic Capsules

LUO Zheng-Yuan BAI Bo-Feng

(State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract Dynamics of elastic capsules (elastic membrane enclosing viscous fluid) under flow, which is determined by membrane mechanical characteristics, significantly influence mass transfer across the capsule membrane. Based on front tracking method, a three-dimensional model with considering membrane elasticity and bending resistance was developed to study the effect of bending resistance on the capsule deformation and membrane tensions. It is found that as the bending resistance increases, both the capsule deformation and membrane tensions decrease. Besides, the inclusion of bending resistance inhibits the formation of membrane buckles, thus enhances the membrane stability of capsules.

Key words elastic capsules; membrane elasticity; bending resistance

0 前 言

弹性液滴,即弹性膜包裹黏性流体而成,在自然界和工程应用中广泛存在。石油工程中,沥青质等表面活性剂可吸附在油水液滴界面形成弹性界面膜;细胞等生物液滴往往由弹性细胞膜包裹而成;用于药物输送的聚合物液滴常由聚合物弹性膜包裹。弹性液滴处于流场中,外部流动作用于液滴的黏性应力使液滴产生复杂的变形、运动等行为。弹性液滴的变形运动一方面影响液滴群流体的流动阻力等特性,另一方面影响液滴物质输送等特性。因此,研究弹性液滴的变形运动等行为十分重要。

弹性液滴动力学的影响因素有液滴形状、内外流体黏度比、流场剪切率和流动形式等^[1-7]。液滴弹性膜的力学性质直接决定膜内应力应变,是影响液滴动力学和液滴物质运输的关键因素。弹性液滴表

面膜由于其复杂结构可体现复杂的力学性质。以细胞等生物液滴为例,膜内蛋白质相互连接形成网状结构,使膜具有弹性;膜主体为磷脂双分子层,厚度 10 纳米左右,使膜具有抗弯特性;膜与两侧流体没有磷脂分子交换,通常在变形过程中保持面积不变^[8]。弹性液滴动力学研究重点考虑膜弹性影响,抗弯特性对膜内应力的影响尚未见报道。

弹性液滴尺寸通常在微米级,实验观测单个液滴在流场中的变形十分困难,理论分析和数值模拟是更有效的方法。理论分析法对流动控制方程进行分析求解,局限于 Stokes 流动中极小变形量的球形弹性液滴研究。数值模拟方法中,边界元和边界积分法针对 Stokes 方程求解,无法考虑流体惯性。水平集法和流体体积法等两相流模拟方法不能追踪界面

收稿日期: 2015-01-07; 修订日期: 2016-01-19

基金项目: 国家杰出青年科学基金 (No.51425603)

作者简介: 骆政园 (1986-), 男, 博士研究生, 主要从事液滴动力学研究。 通信作者: 白博峰, 教授, E-mail: bfbai@mail.xjtu.edu.cn

任意点位移,无法求解弹性膜应力应变,难以考虑膜弹性和抗弯特性。FTM(Front Tracking Method)通过拉格朗日点可准确追踪界面任意点的位移。本文基于界面追踪法建立弹性液滴膜弹性、抗弯特性等复杂力学性质的数值模拟方法,重点研究了抗弯特性对液滴变形及膜内应力的影响。

1 计算模型

Front Tracking Method 采用拉格朗日点追踪界面位置,连接拉格朗日点离散界面为三角形面元,可结合有限元方法计算界面应变和应力场。有限元方法中,界面应变和应力场由界面三角形面元的应变及应力场组成。通过每个时刻三角形面元顶点位置与其初始位置对比可计算顶点位移、面元应变及应力。假设液滴变形过程中界面上三角形面元始终保持为平面。通过坐标转换(平移和旋转)可将变形后和初始状态的三维空间三角形面元变换到二维空间的同一个平面上,坐标转换不影响面元变形。在此平面上可得面元三个顶点的位移:

$$\boldsymbol{\nu}_i = \boldsymbol{x}'_i - \boldsymbol{x}_i \quad (1)$$

其中, i 为顶点标号, \boldsymbol{x}'_i 和 \boldsymbol{x}_i 分别为变形后和初始状态顶点在坐标转换平面内的坐标。通过线性插值可得面元内任意点的位移:

$$\boldsymbol{\nu} = \sum_{i=1}^3 N_i \boldsymbol{\nu}_i \quad (2)$$

其中, N_i 为线性插值函数:

$$N_i = \frac{a_i + b_i x + c_i y}{2A}$$

$$a_i = x_j y_k - x_k y_j \quad b_i = y_j - y_k \quad c_i = -x_j + x_k$$

$$2A = a_i + b_i x_i + c_i y_i \quad (3)$$

i, j, k (顶点标号)依次轮换可求得 a_j, b_j, c_j 和 a_k, b_k, c_k 。三角形面元的应变为:

$$\varepsilon = \frac{d(x + \nu)}{dx} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{2A} \sum_{i=1}^3 b_i \nu_{xi} & \frac{1}{2A} \sum_{i=1}^3 c_i \nu_{xi} \\ \frac{1}{2A} \sum_{i=1}^3 b_i \nu_{yi} & 1 + \frac{1}{2A} \sum_{i=1}^3 c_i \nu_{yi} \end{bmatrix} \quad (4)$$

应变矩阵的特征值及特征向量即为面元主方向拉伸比 λ_1, λ_2 及对应的主方向向量 $[e_{x1}, e_{y1}]^T, [e_{x2}, e_{y2}]^T$ 。

采用SK本构关系^[9]考虑界面剪切弹性和面积守恒特性,其应变能函数为:

$$W = \frac{E_s}{8} \left[(\lambda_1^4 + \lambda_2^4 - 2\lambda_1^2 - 2\lambda_2^2 + 2) + C (\lambda_1^2 \lambda_2^2 - 1)^2 \right] \quad (5)$$

式中, E_s 为剪切弹性模量, C 为面积膨胀模量与剪切弹性模量比值(其值越大,界面面积变化越小)。三角形面元的主应力可计算为:

$$\tau_1 = \frac{1}{\lambda_2} \frac{\partial W}{\partial \lambda_1} \quad \tau_2 = \frac{1}{\lambda_1} \frac{\partial W}{\partial \lambda_2} \quad (6)$$

采用方程(5)、(6),其他本构关系也可以应用于界面应力求解。假设弹性界面是各向同性的,其主应力方向与主拉伸方向相同。由此可得面元应力:

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_1 e_{x1} e_{x1} + \tau_2 e_{x2} e_{x2} & \tau_1 e_{x1} e_{y1} + \tau_2 e_{x2} e_{y2} \\ \tau_1 e_{x1} e_{y1} + \tau_2 e_{x2} e_{y2} & \tau_1 e_{y1} e_{y1} + \tau_2 e_{y2} e_{y2} \end{bmatrix} \quad (7)$$

作用于三角形面元三条边的弹性力即可计算为:

$$\boldsymbol{f}_{\text{edge}} = \int_{\text{edge}} \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{n}_{\text{edge}} dS \quad (8)$$

式中, $\boldsymbol{n}_{\text{edge}}$ 是边的单位法向量。作用于三角形面元顶点的弹性力 $\boldsymbol{f}_{\text{vertex}}$ 即为与其相连的所有边上弹性力之和。通过坐标变换即可将顶点上的弹性力 $\boldsymbol{f}_{\text{vertex}}$ 转换为流动坐标系中拉格朗日点上的弹性力。

抗弯特性由Helfrich弯曲能量函数^[10,11]考虑:

$$W_b = \frac{E_b}{2} \int_S (2\kappa - C_0)^2 dS + E_g \int_S \kappa_g dS \quad (9)$$

式中, κ, κ_g, C_0 分别为平均曲率、高斯曲率和自发曲率, E_b 和 E_g 分别为与平均曲率和高斯曲率相关联的弯曲模量。界面弯曲应力为:

$$\boldsymbol{f}_b =$$

$$-E_b [(2\kappa - C_0)(2\kappa^2 - 2\kappa_g + C_0\kappa) + 2\Delta_s \kappa] \boldsymbol{n} \quad (10)$$

式中, \boldsymbol{n} 为界面单位外法向量, Δ_s 为Laplace-Beltrami算子。

在界面弯曲应力的计算中,平均曲率、高斯曲率、Laplace-Beltrami算子、法向量等界面几何参数的计算至关重要。下面介绍采用二次多项式曲面拟合方法求解上述参数。对于界面网格节点 i ,估算节点 i 处法向量 \boldsymbol{n}_i 为与之相连的三角形面元外法向量的平均。构建局部坐标系 $O'X'Y'Z'$,节点 i 为坐标原点 O' ,节点 i 处法向量 \boldsymbol{n}_i 为 Z' 坐标轴。将

与节点 i 相连的所有节点 j 坐标转换至局部坐标系 $O'X'Y'Z'$ 。本文中采用的界面离散方法, 每个节点与其他 5 个或者 6 个节点相连。根据节点转换坐标可拟合得到二次多项式曲面:

$$Z' = e_1 X'^2 + e_2 X'Y' + e_3 Y'^2 + e_4 X' + e_5 Y' \quad (11)$$

拟合曲面的系数可更新节点 i 处的法向量 n_i :

$$n_i = \frac{1}{(e_4^2 + e_5^2 + 1)^{1/2}} [-e_4, -e_5, 1]^T \quad (12)$$

更新的法向量可更新局部坐标系, 从而迭代求解法向量 n_i 和二次多项式曲面拟合的系数。节点 i 处的平均曲率和 Gauss 曲率为:

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{e_1 + e_3 + e_1 e_5^2 + e_3 e_4^2 - e_2 e_4 e_5}{(1 + e_4^2 + e_5^2)^{3/2}} \\ \kappa_g &= \frac{4e_1 e_3 - e_2^2}{(1 + e_4^2 + e_5^2)^2} \end{aligned} \quad (13)$$

Laplace-Beltrami 算子采用以下方法在界面三角形网格上进行离散, 即对于任意界面网格节点 i 有:

$$\begin{aligned} \Delta_s \kappa_i &= \frac{1}{2 \sum_{j \in N(i)} A_j} \sum_{j \in N(i)} n_{jj+} \\ &(\nabla_s \kappa_j + \nabla_s \kappa_{j+}) \|x_j - x_{j+}\| \end{aligned} \quad (14)$$

式中, A_j 是三角形面元 $ijj+$ 的面积, $N(i)$ 是与节点 i 直接相连的所有节点, n_{jj+} 是边 $jj+$ 的单位外法向量。节点 i 处的曲率梯度 $\nabla_s \kappa_i$ 可从与之相连的三角形面元采用面积加权平均方法获得:

$$\nabla_s \kappa_i = \frac{1}{\sum_{j \in N(i)} A_j} \sum_{j \in N(i)} A_j \nabla_{ijj+} \kappa \quad (15)$$

本文模拟了线性剪切流场中 (剪切率为 γ) 单个球形弹性液滴 (半径为 R) 的变形, 重点分析了界面抗弯特性的影响。采用特征长度 R , 特征速度 γR , 特征时间 $1/\gamma$, 液滴外流体密度和黏度 ρ_0 和 μ_0 无量纲化。控制液滴变形的参数有雷诺数 $Re = \rho_0 \gamma R^2 / \mu_0$ 、毛细数 $Ca = \mu_0 \gamma R / E_s$ 、无量纲弯曲模量 $E_B^* = E_b / (R^2 E_s)$ 、内外黏度比 $\lambda = \mu_1 / \mu_0$ 。液滴变形参数包括: 变形指数 $D = (L - B) / (L + B)$, L 和 B 为变形液滴的长轴和短轴; 倾角 θ 为长轴与流动方向的夹角。控制方程求解的详细过程参见文献 [7], [8], [12]~[14]。

2 结果与讨论

文献 [7], [8], [12]~[14] 验证了膜弹性模型, 本文进一步验证膜抗弯特性模型。方程 (10) 可见, 考虑

膜抗弯特性的关键在界面平均曲率计算。图 1 展示了模型计算的平均曲率与分析解的对比。长短轴比值为 2 的长椭球形在长轴末端平均曲率最大, 短轴末端平均曲率最小。尽管三种网格数下计算的平均曲率分布与分析解都对得非常好, 我们采用网格数 20480 用于后续液滴变形研究。

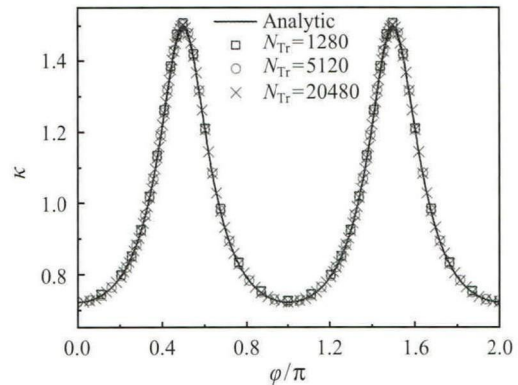


图 1 模型验证
Fig. 1 Model validation

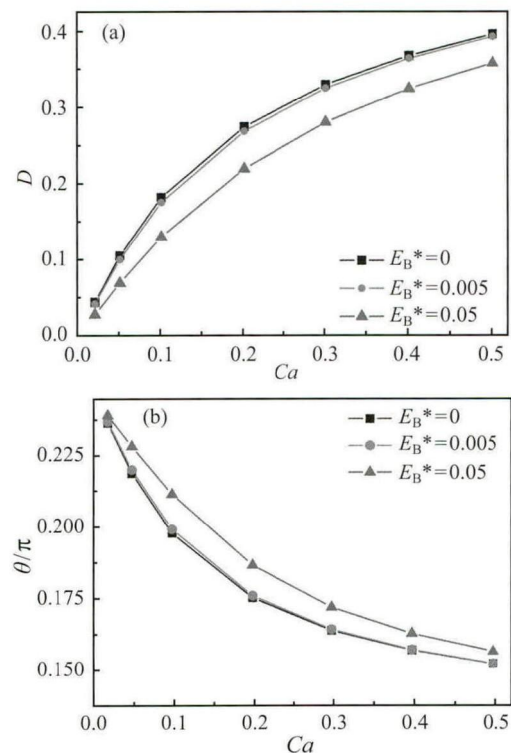


图 2 不同弯曲模量下球形液滴变形特性, 即 (a) 变形指数 D 和 (b) 倾角 θ 随毛细数的变化
Fig. 2 Capsule deformation at different bending modulus. (a) deformation index and (b) inclination angle

球形弹性液滴在线性剪切流中变形至近椭球形, 最终保持形状稳定 (变形指数 D 不变), 椭球长轴与流动方向呈倾角 θ 。图 2 展示了膜弹性和抗弯特性对液滴变形稳定后的 D 和 θ 的影响。毛细数反映

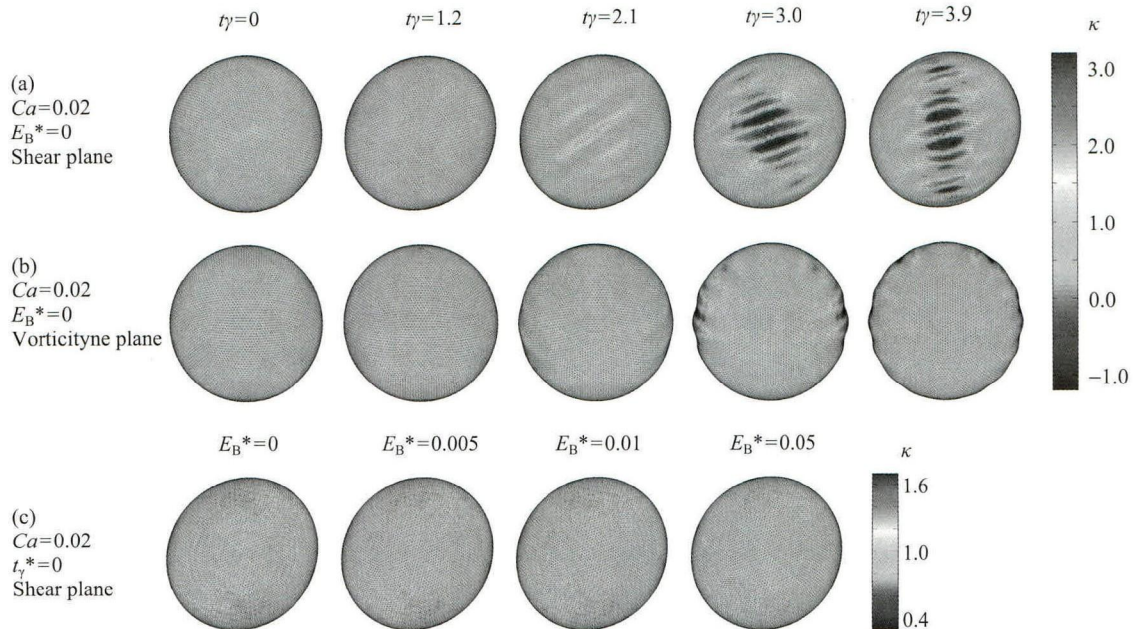


图3 液滴界面平均曲率分布。(a)和(b)为不考虑抗弯时剪切平面内和涡量平面内,(c)为考虑抗弯时的剪切平面内
Fig. 3 Mean curvature distribution. (a) in shear plane and (b) in vorticity plane without considering bending resistance, (c) in shear plane with considering bending resistance

黏性力与界面弹性力的比。毛细数越大,界面弹性力作用越小,液滴保持初始形状的能力越弱,因此变形指数随 Ca 增大而增大。 Ca 增大, D 增大而 θ 减小,这一定性规律与已有的不考虑抗弯特性的液滴变形研究一致^[8]。无量纲弯曲模量 E_B^* 体现了抗弯作用力与膜弹性力的相对大小。结果表明 E_B^* 较小时,抗弯特性对液滴变形影响可忽略;而 E_B^* 较大时(如 0.05),抗弯作用使液滴变形减小。

如图 3, $Ca = 0.02$ 的液滴在不同抗弯模量下界面平均曲率分布有显著不同。不考虑抗弯特性时,界面出现波浪式的褶皱条纹。褶皱首先在剪切流涡量方向液滴两端出现,褶皱的振幅及影响的界面面积随着液滴变形而逐渐增大。弹性液滴界面不稳定现象在以前的实验研究中也有报道^[15]。我们还发现界面抗弯曲特性的引入抑制了界面形成褶皱。如图 3(c) 所示,界面抗弯作用越强,液滴界面越光滑。

界面应力状态直接影响界面两侧物质运输,图 4 和图 5 分析了界面弹性和抗弯特性对界面应力的影响。图 4(a) 说明 $Ca = 0.02$ 的液滴界面应力出现负值,即界面处于压缩状态,从而导致界面出现褶皱,而抗弯作用使界面负应力值减小,从而起到抑制界面褶皱的作用。毛细数增大时,如图 4(b), $Ca = 0.5$,界面负应力不再出现,此时液滴界面处于拉伸状态。界面最大应力超过极限值时,液滴弹性膜结构可被破坏。如图 5(a) 所示,毛细数越大,界面最大应力越大;而界面抗弯模量增大会减小最大应力值。原因在于毛细数增大导致液滴变形增大,而抗弯作用增

大使液滴变形减小。图 5(b) 可看出,液滴界面最大应力随液滴变形增加呈指数增长规律。液滴界面最大应力与变形关系符合: $\tau_{\max}/E_s = 0.82(e^{2.97D} - 1)$ 。

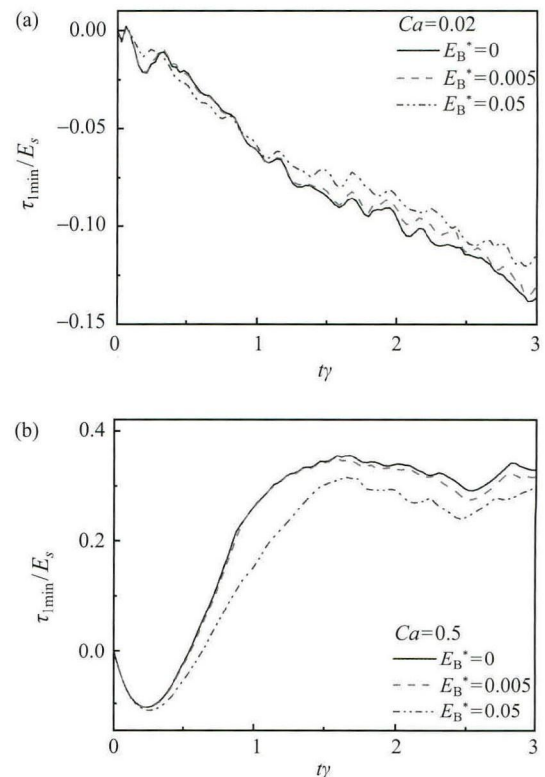


图4 界面最小应力随时间的变化。(a) $Ca = 0.02$, (b) $Ca = 0.5$
Fig. 4 Time evolution of the minimum tension in the membrane. (a) $Ca = 0.02$, (b) $Ca = 0.5$

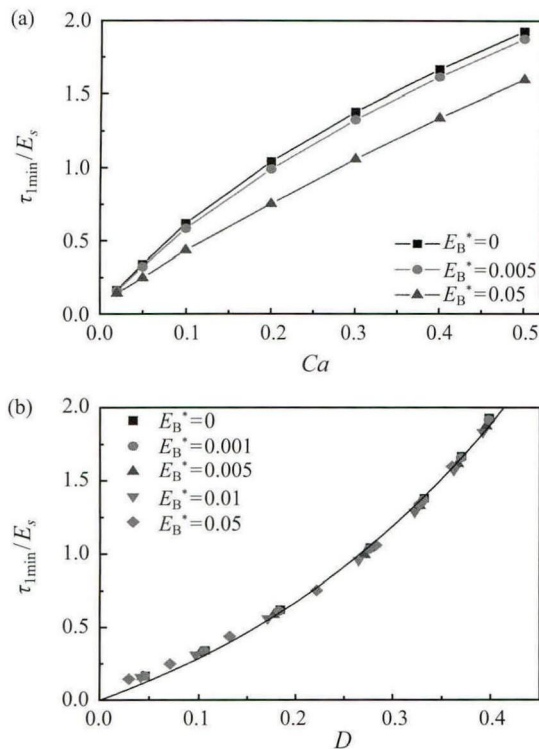


图 5 界面最大应力分析。(a) 随 Ca 变化, (b) 随 D 变化
Fig. 5 Analysis of the maximum tension in the membrane.
(a) versus Ca and (b) versus D

3 结 论

本文建立了弹性液滴膜弹性、抗弯曲特性等复杂力学性质的模型。研究发现毛细数较小的弹性液滴界面可出现负应力, 处于压缩状态, 从而导致界面出现波浪形的褶皱条纹; 毛细数较大时液滴界面应力不再出现负值, 处于拉伸状态。界面抗弯曲特性减小了界面最小应力和最大应力的值; 随抗弯曲模量增大, 最大应力和最小应力都减小。界面抗弯曲特性抑制界面褶皱的形成。液滴界面内最大应力随液滴变形增大呈指数增长趋势。

参 考 文 献

[1] Ramanujan S, C Pozrikidis. Deformation of Liquid Capsules Enclosed by Elastic Membranes in Simple Shear Flow: Large Deformations and the Effect of Fluid Viscosi-

ties [J]. Journal of Fluid Mechanics, 1998, 361: 117-143

[2] Lac E. Spherical Capsules in Three-Dimensional Unbounded Stokes Flows: Effect of the Membrane Constitutive Law and Onset of Buckling. Journal of Fluid Mechanics, 2004, 516: 303-334

[3] Li X Y, K Sarkar. Front Tracking Simulation of Deformation and Buckling Instability of a Liquid Capsule Enclosed by an Elastic Membrane. Journal of Computational Physics, 2008, 227: 4998-5018

[4] Sui Y. A Front-Tracking Lattice Boltzmann Method to Study Flow-Induced Deformation of Three-Dimensional Capsules. Computers & Fluids, 2010, 39: 499-511

[5] Foessel E. Influence of Internal Viscosity on the Large Deformation and Buckling of a Spherical Capsule in a Simple Shear Flow. Journal of Fluid Mechanics, 2011, 672: 477-486

[6] Le D V, Z J Tan. Large Deformation of Liquid Capsules Enclosed by Thin Shells Immersed in the Fluid. Journal of Computational Physics, 2011, 229: 4097-4116

[7] Bai B F. Inertia Effect on Deformation of Viscoelastic Capsules in Microscale Flows. Microfluidics and Nanofluidics, 2013, 14: 817-829

[8] Luo Z Y. Inertia-Dependent Dynamics of Three-Dimensional Vesicles and Red Blood Cells in Shear Flow. Soft Matter, 2013, 9: 9651-9660

[9] Skalak R. Strain Energy Function of Red Blood Cell Membranes. Biophysical Journal, 1973, 13: 245-280

[10] Helfrich W. Elastic Properties of Lipid Bilayers: Theory and Possible Experiments. Zeitschrift Fur Naturforschung C-a Journal of Biosciences, 1973, C 28: 693-703

[11] Zhongcan O Y, W Helfrich. Bending Energy of Vesicle Membranes: General Expressions for the First, Second, and Third Variation of the Shape Energy and Applications to Spheres and Cylinders. Physical Review A, 1989, 39: 5280-5288

[12] Bai B F. Numerical Simulation of Cell Adhesion and Detachment in Microfluidics. Journal of Mechanics in Medicine and Biology, 2013, 13: 1350002

[13] Luo Z Y. Three-Dimensional Numerical Simulation of Vesicle Dynamics in Microscale Shear Flows. Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 2015, 15: 3081-3086

[14] Luo Z Y. Front Tracking Simulation of Cell Detachment Dynamic Mechanism in Microfluidics. Chemical Engineering Science, 2013, 97: 394-405

[15] Walter A, H Rehage, H Leonhard, Shear Induced Deformation of Microcapsules: Shape Oscillations and Membrane Folding. Colloids and Surfaces a-Physicochemical and Engineering Aspects, 2001, 183: 123-132