

研究论文

DOI: 10.11949/j.issn.0438-1157.20181213

随机粗糙表面上剪切变稀流体液滴的沉积过程模拟

夏红桃, 邹思宇, 肖杰

(苏州大学材料与化学化工学部化工与环境工程学院, 苏州市绿色化工重点实验室, 江苏 苏州 215123)

摘要: 采用计算流体力学相场方法模拟了单个剪切变稀非牛顿流体液滴在随机粗糙表面的沉积过程, 并分析揭示了随机粗糙表面形貌对液滴运动状态及平衡状态的影响。结果表明, 在指定的相同操作条件下, 即使在光滑表面, 剪切变稀流体液滴比牛顿流体液滴铺展更大且回缩至平衡所需时间更少, 不存在二次铺展; 剪切变稀流体液滴最大铺展直径随均方根粗糙度 R_r 与 Wenzel 粗糙度 W_r 的增加而略有增加。 W_r 相同时, 随着 R_r 增大, 液滴最终铺展系数减小, 高度系数增大, 平衡接触面积及接触角有所减小。在 R_r 相同情况下, 随着 W_r 增大, 液滴达到平衡所需时间缩短, 平衡接触面积线性增大。

关键词: 随机粗糙表面; 液滴沉积; 非牛顿流体; 气液两相流; 数值模拟; 涂层

中图分类号: TQ 02

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (2019) 02-0634-12

Numerical simulation of shear-thinning droplet impacting on randomly rough surfaces

XIA Hongtao, ZOU Siyu, XIAO Jie

(Suzhou Key Laboratory of Green Chemical Engineering, School of Chemical and Environmental Engineering, College of Chemistry, Chemical Engineering and Materials Science, Soochow University, Suzhou 215123, Jiangsu, China)

Abstract: The computational fluid dynamics phase field method was used to simulate the deposition process of single shear thinning non-Newtonian fluid droplets on a random rough surface. The analysis revealed the influence of random rough surface morphology on the movement state and equilibrium state of droplets. It was shown that, even on a smooth surface, under the same operating conditions, a shear-thinning droplet can demonstrate quite different impact behavior as compared with a Newtonian droplet. The shear-thinning property offers a much larger spreading ratio, and shorter time to reach equilibrium. The initial spreading phase is followed by a recoiling to equilibrium phase for the shear-thinning droplet, while the Newtonian droplet has a second spreading phase after the recoiling phase. On randomly rough surfaces, the maximum spreading ratio increases with the increase of either root-mean-square roughness (R_r) or Wenzel roughness parameter (W_r). With the same value of W_r , increasing R_r can lead to the decrease of the final spreading ratio, and slight decreases of equilibrium contact area and contact angle. With the same value of R_r , increasing W_r offers a faster deposition to reach an equilibrium state, and a linearly increased contact area.

收稿日期: 2018-10-16 修回日期: 2018-12-28

通信作者: 肖杰(1980—), 男, 博士, 教授, jie.xiao@suda.edu.cn

第一作者: 夏红桃(1993—), 女, 硕士研究生, 20164209240@stu.suda.edu.cn

基金项目: 江苏省自然科学基金优秀青年基金项目(BK20170062); 国家自然科学基金青年项目(21406148); 江苏双创计划项目; 江苏特聘教授计划项目; 江苏优势学科PAPD项目

引用本文: 夏红桃, 邹思宇, 肖杰. 随机粗糙表面上剪切变稀流体液滴的沉积过程模拟[J]. 化工学报, 2019, 70(2): 634–645

Citation: XIA Hongtao, ZOU Siyu, XIAO Jie. Numerical simulation of shear-thinning droplet impacting on randomly rough surfaces[J]. CIESC Journal, 2019, 70(2): 634–645

Key words: randomly rough surface; droplet deposition; non-Newtonian fluids; gas-liquid two-phase flow; numerical simulation; coatings

引 言

液滴撞击固体壁面的现象在自然界中十分常见,例如雨滴撞击地面、海水拍打礁石、滴水穿石现象等。在人类生产活动中非牛顿流体液滴撞壁现象更是有着广泛的应用,例如喷墨打印、涂层喷涂、燃油喷雾碰壁^[1]、血溅形态分析等^[2]。一直以来,此类现象都是流体动力学和物理学界的研究热点^[3]。

汽车表面覆盖着多层厚度、组成及功能各异的涂层,其中底漆和清漆位于最外层,通常由两个连续的操作步骤形成:喷漆和固化成膜^[4-5]。在实验中发现,喷涂表面的原始形貌会影响最终的涂层形貌。粗糙表面上的某些纹理特征会最终出现在涂层表面^[6]。因此研究粗糙表面的原始形貌对涂层最终形貌的影响在涂层质量控制中起到非常重要的作用。对于车辆面板上(通常为随机粗糙表面)的喷涂过程,实际上是大量液滴与固体表面撞击并形成液膜的过程。而单液滴撞壁过程的研究是多液滴碰撞成膜过程研究的基础^[7]。

液滴撞壁过程中的铺展动力学受很多因素的影响,主要包括以下几点:①液滴的性质,如液滴的大小、密度、黏度、表面张力等;②液滴的运动状态,如液滴的撞击速度、撞击角度等;③沉积表面的性质,如表面的形状、温度、粗糙度及表面的亲疏水性等,对于液滴与固体表面撞击这一复杂的变化过程,任何一个因素的变化均会对液滴的铺展和沉积带来影响,因此了解这些因素对液滴的运动和形态的影响至关重要。国内外学者在研究不同因素对液滴碰撞壁面动态过程的影响方面已经开展了大量的实验和理论研究。近年来,也有不少学者开始基于已有的理论分析和实验数据对液体碰撞壁面的行为进行数值模拟研究。Engel^[8]早在1955年即研究了水滴在光滑表面上的铺展情况,其先用高速摄像机拍了一系列液滴铺展的液滴追踪照片,而后根据液滴的撞击速度和流体的流动速度的动量公式,推导了液滴在表面铺展的半经验公式。毕菲菲等^[9]用高速摄像仪记录了蒸馏水、无水乙醇和甘油液滴撞击固体表面的形态变化过程,并探讨了液滴撞击参数对撞击过程液滴形态的影响。Dong等^[10]实验研究了液滴铺展到不同润湿性的表面上的铺

展动力学情况,详细分析了最大铺展直径、回缩、反弹以及最终达到平衡的过程变化。李大树等^[11]、梁超等^[12]研究了壁面浸润性对碰撞结果及最大铺展因子的影响。Scheller等^[13]研究了一系列不同牛顿流体的最大铺展直径与碰撞速度、液滴黏度等的关系,也总结了一些关于最大铺展直径的经验和半经验公式。Fukai等^[14-15]构建了液滴撞击光滑表面的数值模型,研究了表面润湿性对液滴铺展的影响,结果表明:前进角越大,液滴最大铺展直径越小,且表面润湿性对液滴运动的影响显著。Gao等^[16]用实验和仿真两种方法研究了水滴在光滑表面上的铺展和回缩过程,结果表明表面的润湿性对最大铺展半径和回缩过程都有很大影响。其中以仿真软件为主的数值模拟方法能较准确地模拟出实际的物理现象。

以上诸多研究大多针对液滴在光滑表面的铺展情况,实际的固体表面很多都是随机粗糙表面,故以光滑表面或规则表面来进行液滴撞击随机粗糙表面的动力学研究与实际情况必定是有偏差的。而液滴在随机粗糙表面的研究更是充满挑战性:一是如何量化随机表面的粗糙形貌对液滴形貌演变的影响至今缺乏系统方法,二是如何追踪随机粗糙表面非牛顿流体液滴的气液界面至今也未有报道的模拟方法。液滴在粗糙表面沉积过程的研究相对较少,特别是针对随机粗糙表面上的液滴沉积过程更少。Li等^[17]推导出了一个具有规则圆柱形表面图案的最大铺展系数的理论模型。毛靖儒等^[18]也利用高速摄像技术,系统研究了水滴撞击在锯齿形固体表面时的流体动力学特性。David等^[19]在随机粗糙的表面上研究了接触角和迟滞现象,通过模拟垂直板浸入一个液体池中,描述了固体表面液体的润湿行为,但它并不是一个液滴沉积的研究。液滴在表面上的铺展过程也可以用lattice Boltzmann(LBM)模型描述^[20-23]。Kai等^[24]提出壁面粗糙度是影响液滴碰撞形态的重要因素。最近,Xiao等^[25]利用相场方法模拟随机粗糙表面上单液滴的沉积过程,并系统分析了随机粗糙表面形貌对动态沉积过程的影响。

上述提及的大部分研究只集中在牛顿流体上。但是,非牛顿流体在人类的工业生产以及生活中十分常见,如沥青、熔融状态的塑料、悬浮液(如血液)

以及一些食品、果浆、奶油等。对于非牛顿流体的研究将有利于石油、化工、生物医学以及材料加工等诸多领域,因此具有重要的现实意义和应用价值。Nigen^[26]用实验方法研究了非牛顿流体液滴撞击在光滑的有机玻璃表面的情况,液滴黏度模型采用的是 Cross 模型。German 等^[27]用高速相机研究了剪切变稀流体和黏塑性流体撞击到固体表面的运动情况,他们指出,对于剪切变稀流体,稠度指数更能影响液滴的铺展直径,剪切变稀液滴的最大铺展直径明显大于牛顿流体。贺征等^[28]对液滴与固体表面碰撞破碎的过程进行了研究,同时结合 Euler-Lagrange 两相流模型对液滴撞击固体表面时液滴的运动过程进行了仿真。闵琪等^[29]基于 LBM 方法创建了非牛顿流体两相流动模型,同时用此模型模拟了牛顿流体和幂函数流体在光滑表面上的运动情况。

上述分析表明,非牛顿流体液滴在随机粗糙表面上的沉积动态过程的研究几乎为空白,而对这一过程的理解又有着很高的应用价值。本文将开发数值模拟方法研究分析这一重要过程。

1 建模与分析方法

1.1 控制方程

对于不可压缩流体,连续性方程和动量守恒控制方程分别为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{F} \quad (2)$$

其中, ∇ 为梯度算子; ρ 是流体密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$; \mathbf{u} 是速度矢量, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$; p 是压力,Pa; μ 是流体的黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$; \mathbf{F} 为外施加体积力, $\text{N} \cdot \text{m}^{-3}$ 。

液气相界面通过 Cahn-Hilliard 方程追踪

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \beta \nabla G \quad (3)$$

式中, ϕ 是相场参数梯度,无量纲; β 是决定 Cahn-Hilliard 扩散时间尺度的迁移率, $\text{m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$;除相界面处连续变化,Cahn-Hilliard 方程强制 ϕ 取值 1 或 -1,关系为

$$\alpha_k = \begin{cases} \min \left[\left(\max \left(\frac{1+\phi}{2}, 0 \right) \right), 1 \right], & k = 1 (\text{气相}) \\ 1 - \min \left[\left(\max \left(\frac{1+\phi}{2}, 0 \right) \right), 1 \right], & k = 2 (\text{液相}) \end{cases} \quad (4)$$

式中, α_k 为一个网格中气相或液相的体积分数。为了计算化学势,将混合能 $E_{\text{mix}} (\text{J} \cdot \text{m}^{-3})$ 假设为

Ginzburg-Landau 形式

$$E_{\text{mix}}(\phi, \nabla \phi) = \frac{1}{2} \lambda |\nabla \phi|^2 + \frac{\lambda}{4\epsilon^2} (\phi^2 - 1)^2 \quad (5)$$

式中, λ 是混合能量密度, N ; ϵ 是界面层厚度, m ; σ 是表面张力, $\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$,三者之间关系为^[30]

$$\sigma = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\lambda}{\epsilon} \quad (6)$$

结合式(5)和式(6)可计算化学势 $G (\text{J} \cdot \text{m}^{-3})$ 为

$$G = \frac{\partial E_{\text{mix}}}{\partial \phi} - \nabla \cdot \frac{\partial E_{\text{mix}}}{\partial \nabla \phi} = \lambda \left[-\nabla^2 \phi + \frac{\phi(\phi^2 - 1)^2}{\epsilon^2} \right] \quad (7)$$

1.2 计算区域网格划分及初始条件

本文借助 COMSOL Multiphysics 软件,通过相场的方法来追踪气液界面^[31],模拟清漆液滴在随机粗糙表面的沉积动态过程。计算区域选用 $180 \mu\text{m} \times 60 \mu\text{m}$ 的长方形区域,如图 1 所示。整个几何结构由三角形网格构建,经过网格无关性验证后,选取 84245 个网格。为更好地跟踪液滴撞击壁面过程中气液、气液固相界面和分析随机粗糙表面的形貌对沉积过程的影响,对粗糙表面处网格进行加密处理。此研究中,表面具有非均一形貌,对每一个随机粗糙表面,分别独立进行 5 个不同位置的液滴撞壁模拟(图 1)。

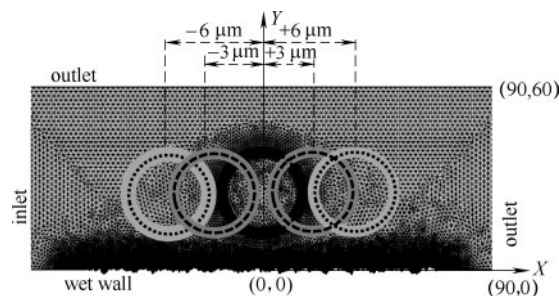


图 1 计算区域与网格划分

Fig.1 Computation domain and mesh grid

计算域划分为空气域和液体域,左边边界为空气进口,右边和顶部边界为空气出口。空气入口速度设为 0,顶部设定为无滑移边界。底部粗糙表面的润湿性通过设置表面的本征接触角及表面的物理形貌共同决定。本征接触角为 θ_0 ,而表面的物理形貌直接绘制在模拟系统几何中(图 1)。液滴初始速度为 0,为使液滴撞到壁面的速度为 $7.5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,对液滴在撞壁前施加一个体积力,表达式为

$$\mathbf{F} = \rho_2 \left(\frac{V_0^2/2}{h} - g \right) \quad (8)$$

式中, ρ_2 是液滴密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$; V_0 是液滴刚接触表面时的速度, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$; h 是液滴的下落高度, m (设定为 $25 \mu\text{m}$); g 是液滴的重力加速度, $\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$ 。

油漆液滴的密度由溶质固体密度、溶剂密度及溶质含量共同决定^[32]。剪切变稀非牛顿流体的剪切黏度与剪切速率^[33]的关系见图2,可以用式(9)描述

$$\mu = K \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^{n-1} \quad (9)$$

式中, K 是稠度系数, 代表流体的黏稠程度; n 是流变行为指数; u 为 x 方向的速度; $\frac{\partial u}{\partial y}$ 表示 x 方向的速度在 y 方向的梯度。表1列出本文中液滴与表面性质的具体参数值。

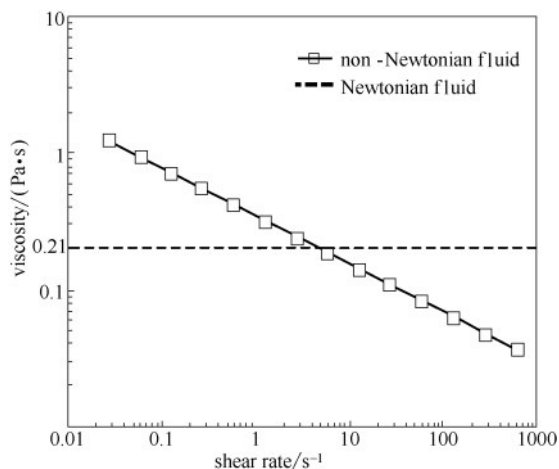


图2 液滴的流变特性

Fig.2 Rheological behavior of droplet

1.3 数据分析方法

为了定量分析液滴的沉积过程, 定义了以下参数描述液滴运动及粗糙表面。铺展系数 D^* 即液滴运动过程中的最大铺展直径 D 与液滴原始直径 D_0 的比值, 来表征液滴的铺展程度, 即

$$D^* = \frac{D}{D_0} \quad (10)$$

高度系数 H^* 即液滴运动过程中的最大高度 H 与液滴原始直径 D_0 的比值, 来表征液滴铺展过程的高度, 即

$$H^* = \frac{H}{D_0} \quad (11)$$

无量纲时间 t^* 定义为

$$t^* = \frac{tV_0}{D_0} \quad (12)$$

式中, t 为时间, s; V_0 为初始撞击速率, $m \cdot s^{-1}$ 。

相对接触面积 (A^*) 即液滴与固体表面的接触面积与原始面积的比值, 这里选用的是 2D 模型, 此参数即为固液接触线长度 (l) 与液滴初始直径的比值, 即

$$A^* = \frac{l}{D_0} \quad (13)$$

平衡表观接触角, 液滴达到平衡状态时的表观接触角。这里研究的固体表面是随机粗糙表面, 故以左右接触角的平均值来定量, 即

$$\theta = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \quad (14)$$

其中, θ_1 和 θ_2 分别为左右接触角, Xiao 等^[32]开发了一种三维粗糙表面上液滴的接触角的方法, 此方法可以直接应用。

为了描述粗糙表面, 使用两种粗糙度定量方式。Wenzel 粗糙度 Wr 为气-固接触面积 (s) 与气-固接触面投影面积 (s_0) 的比值^[34]

$$Wr = \frac{s}{s_0} \quad (15)$$

在二维空间中, 此定义为实际接触长度与投影长度的比值。

均方根粗糙度 Rr (μm) 为固体表面粗糙结构厚度的均方根值

$$Rr = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (h_i - \bar{h})^2}{n}} \quad (16)$$

式中, \bar{h} 指表面上 n 个采样点高度的平均值。

Weierstrass-Mandelbrot (W-M) 分形函数^[35]通常用来模拟粗糙表面 (图1), 如不锈钢板^[36]。此方法可以用来设计结构特征不同但粗糙度相同的表面。采用 W-M 函数就可以通过调节分形维度来改变均方根粗糙度 (Rr) 和 Wenzel 粗糙度 (Wr) 的值。本文所使用的表面分形维度值为 1.529 ~ 2.125。恒定 Wr , 减小分形维度, 微细结构减少, 边界之间断点的数

表1 液滴与表面性质

Table 1 Properties of droplet and surface

Case	Temperature/ $^{\circ}C$	Diameter/ μm	Density/ $(kg \cdot m^{-3})$	Velocity/ $(m \cdot s^{-1})$	Surface tension/ $(N \cdot m^{-1})$	Intrinsic contact angle, θ_b	Newtonian viscosity/ $(Pa \cdot s)$	Non-Newtonian viscosity [Eq.(9)]	
								K	n
validation case	20	1500	1009	1	0.06	128	—	0.0739	0.9382
investigated case	20	30	1080	7.5	0.02	80	0.21 (average value)	0.3485	0.6482

量减少, Rr 增加; 恒定 Rr , 增加分形维度, 表面中非规则结构增多, 结构变精细, Wr 增加。

在整个液滴沉积过程中, 每个粗糙表面上流体的剪切速率和黏度的大小变化可以帮助理解液滴形态的演变过程。

追踪三相(固-液-气)接触线的演变有助于深入理解不同粗糙表面的液滴动态润湿行为。本文的模型是在二维空间中粗糙表面, 因此可能出现的多条三相接触线即为多个接触点, 三相接触点的位置为粗糙表面轮廓和气-液界面轮廓的交点。

2 计算模型验证

为验证模型, 模拟结果与 Khoufech 等^[37]研究中的一个 1.5 mm 的非牛顿流体液滴撞击表面, 撞击速度为 $1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 接触角为 128° (表 1) 的实验做对比。模型参数全部取表 1 中的实验参数值。铺展系数 D^* 随无量纲时间 t^* 的变化如图 3 所示。模型可以较为准确地模拟液滴沉积动态过程。

3 结果与讨论

3.1 牛顿流体与剪切变稀非牛顿流体液滴沉积特性比较

即使针对光滑表面, 在平均黏度及碰撞速度相同情况下, 牛顿流体和剪切变稀非牛顿流体撞击表面后的运动状态也有很大差别。为了公平比较, 此工作中, 剪切变稀流体液滴黏度随剪切速率的变化如图 2 中的实线所示, 牛顿流体的黏度取为平均黏度, 即 $0.21 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ (见图 2 中的虚线)。

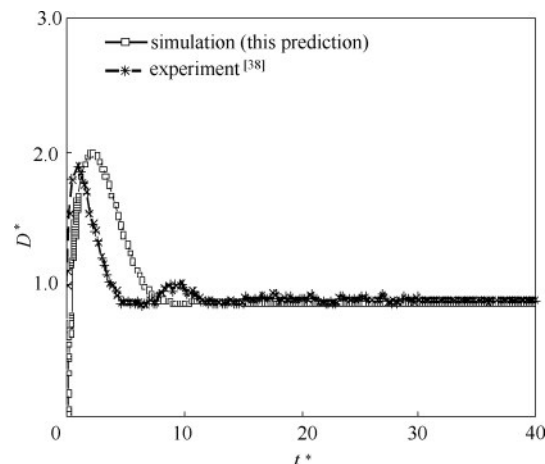


图 3 模拟结果与实验对比

Fig.3 Comparison between simulation results with experimental data

图 4(a) 显示剪切变稀非牛顿流体液滴撞击在光滑表面后铺展系数的动态变化。以液滴下落时为 0 时刻, 当 $t^* = 0.6$ 时, 液滴接触壁面, 依次经历铺展、回缩达到平衡两个过程。图 4(b) 中的牛顿流体液滴在达到最大回缩后进行二次铺展, 最终达到平衡状态。在铺展阶段, 剪切变稀非牛顿流体液滴铺展系数范围为 $D^* \in [1, 3.847]$, 明显高于牛顿流体液滴的 $D^* \in [1, 1.2173]$ 。铺展过后, 液滴在表面张力的作用下, 慢慢回缩, 剪切速率变小, 剪切变稀非牛顿流体液滴黏性增大, 阻碍其运动, 因此没有了二次铺展过程, 且达到平衡时所需时间相对少, t^* 约为 250, 对应牛顿流体达到平衡时间 t^* 约为 900。液滴达到平衡状态时, 平衡接触角与平衡接触面积基本相同 (图 5)。可见在其他条件完全相同情况下, 平均黏度相同的牛顿流体液滴与剪切变稀非牛顿流体液滴的

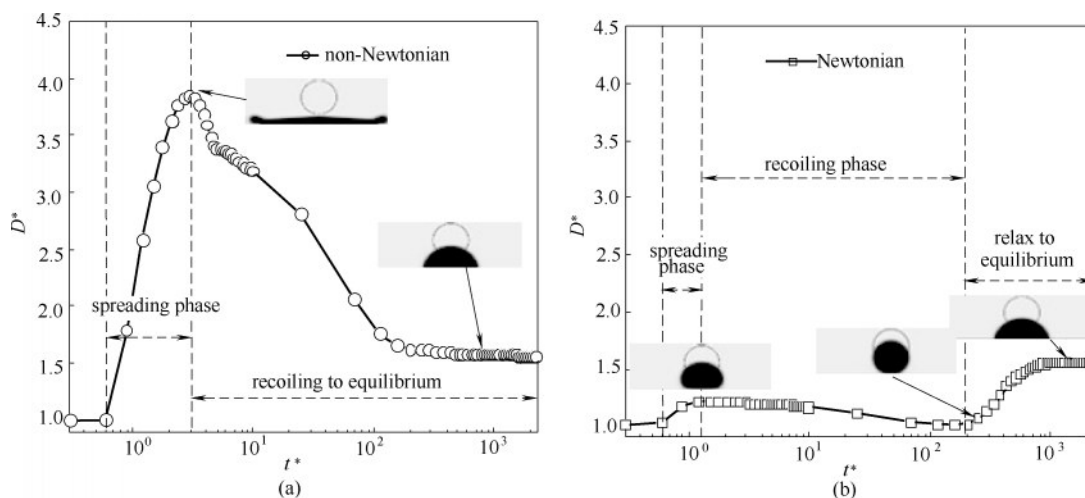


图 4 剪切变稀非牛顿流体(a)与牛顿流体(b)液滴在光滑表面上的形貌演变过程

Fig.4 Comparison of morphological evolution of shear-thinning droplet (a) and Newtonian droplet (b) impacting on smooth surface

沉积动态过程存在很大差异。

3.2 剪切变稀非牛顿流体液滴在三种不同表面上的沉积特性比较

剪切变稀非牛顿流体液滴在规则形貌表面和随机粗糙表面的运动状态也存在差异。为了公平比较粗糙表面的形貌对液滴沉积过程的影响,将规

则表面和随机粗糙表面采用相同的 Wenzel 粗糙度 ($Wr=1.8$) 和均方根粗糙度 ($Rr=0.5\ \mu\text{m}$), 粗糙度的参数值参照 Peters 等^[6]中关于汽车原始涂层随机粗糙表面的实验测量数据。

图6显示液滴撞击在三种不同表面时均经历铺展、回缩达到平衡状态两个阶段。在最初的铺展过

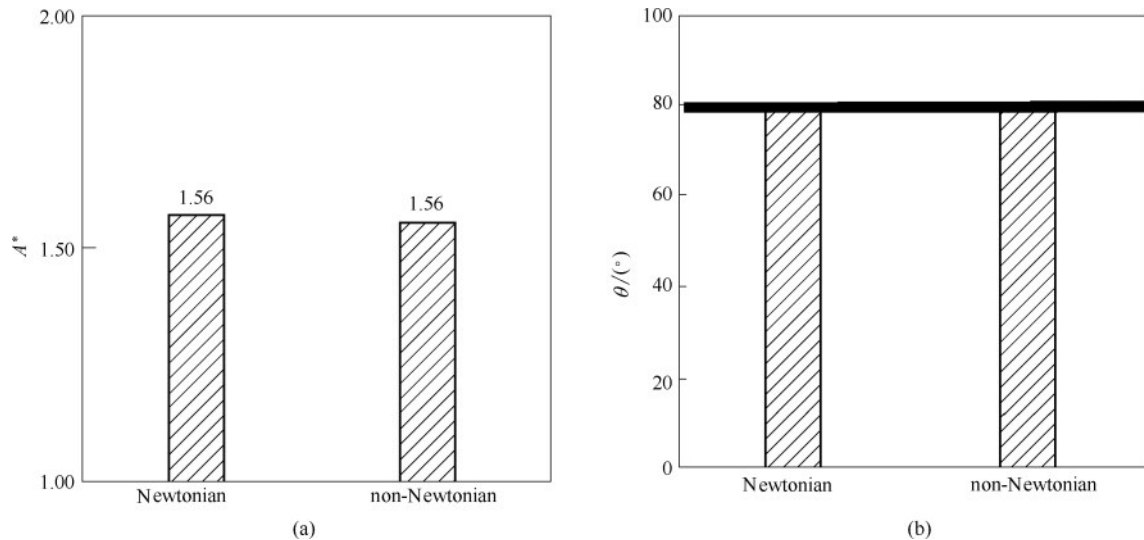


图5 牛顿流体与剪切变稀非牛顿流体液滴在光滑表面上的平衡状态的比较

Fig.5 Comparison of equilibrium states of Newtonian droplet and shear-thinning droplet impacting on smooth surface

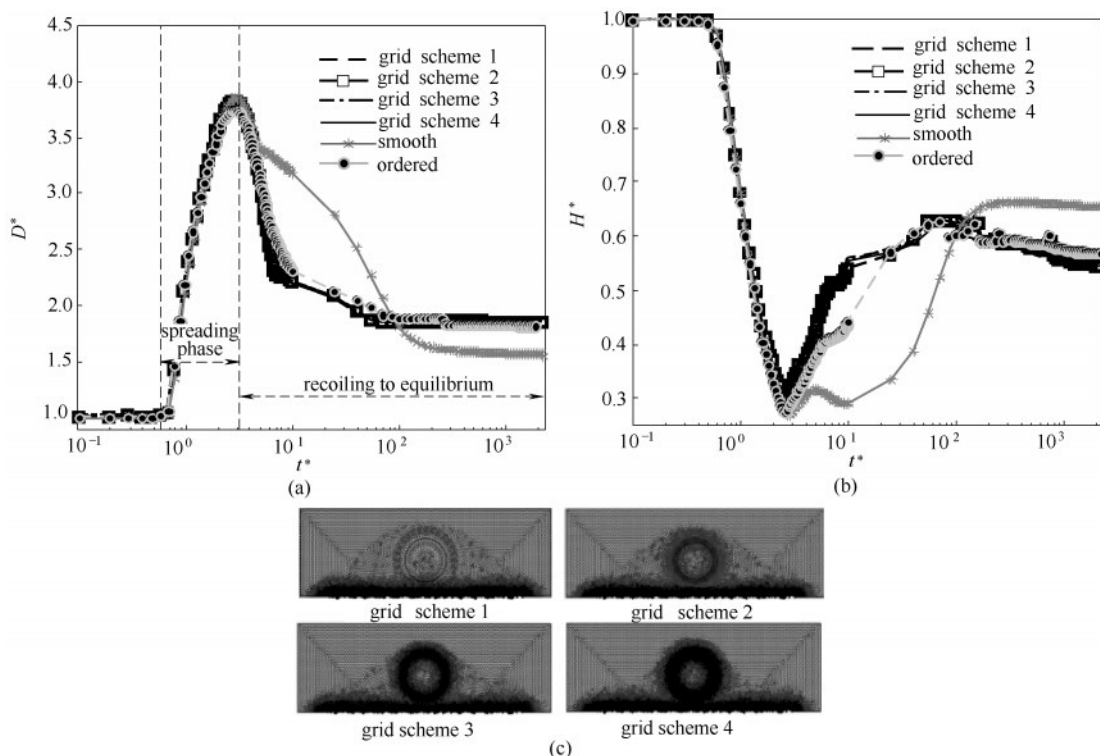


图6 剪切变稀非牛顿流体液滴在光滑、规则、随机粗糙表面上的形貌演变过程和网格无关性验证

Fig.6 Morphological evolution of shear-thinning droplet impacting on smooth, rectangle, and randomly rough surfaces together with mesh independence study

程中,表面形貌对铺展过程几乎无影响。回缩过程中,随机粗糙表面上的液滴有最大的高度系数。粗糙表面上的液滴达到平衡时间基本相似, t^* 约为150。针对剪切变稀非牛顿流体液滴在随机粗糙表面上的形貌演变模拟,进行了网格无关性验证。设计了四组不同的网格(网格数目分别为:scheme 1, 79451个;scheme 2, 84245个;scheme 3, 93045个;scheme 4, 102192个),如图6(c)所示。四种网格情况下,液滴的铺展系数与高度系数变化曲线几乎重合[图6(a)和(b)]。本文选取的网格数目为84245个[即为图6(c)中grid scheme 2],可以保证模型的精确性和一定的计算效率。

图7比较了液滴在平衡状态时接触面积与接触角的大小,这些数值由式(13)和式(14)得出。图7(a)

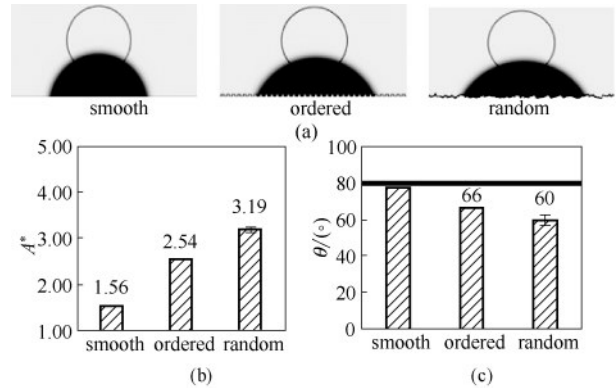


图7 剪切变稀非牛顿流体液滴在光滑、规则 and 随机粗糙表面上的平衡状态的比较

Fig.7 Comparison of equilibrium states of shear-thinning droplet impacting on smooth, rectangle, and randomly rough surface

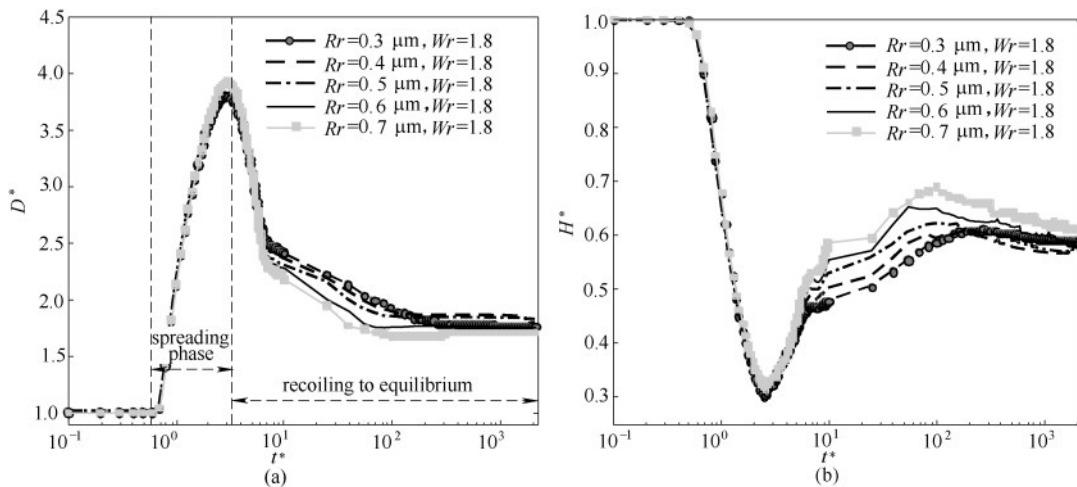


图8 液滴在相同 W_r 、不同 R_r 的五种表面上的形貌演变过程

Fig.8 Morphological evolution of droplet on surfaces having different values of root-mean-square roughness but same Wenzel roughness

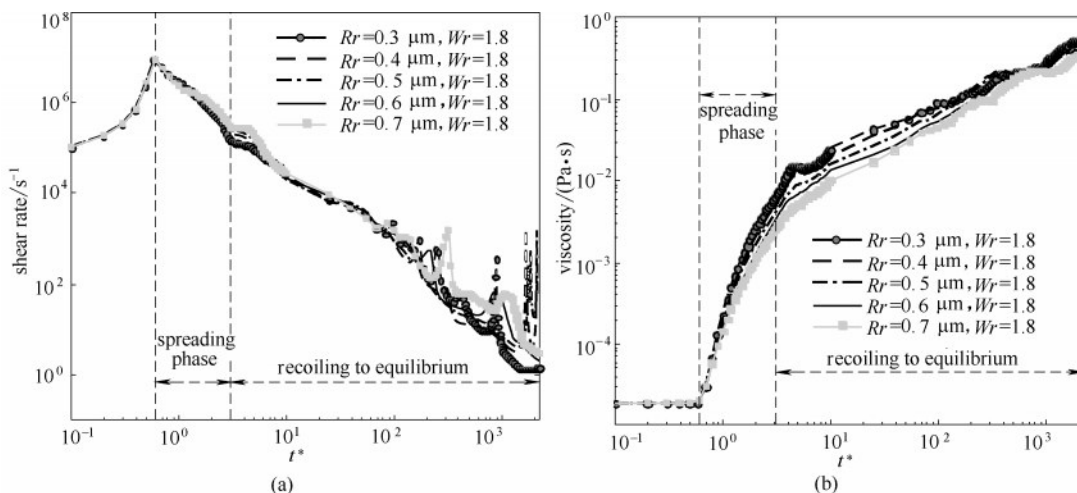


图9 液滴在相同 W_r 、不同 R_r 的五种表面上剪切速率与界面流体黏度的变化

Fig.9 Shear rate and viscosity evolution during droplet deposition on surfaces having different values of root-mean-square roughness but same Wenzel roughness

表2 粗糙表面参数值

Table 2 Parameter values for randomly rough surfaces

Case	$Rr/\mu\text{m}$	Wr
1	0.3	1.8
2	0.4	1.8
3	0.5	1.8
4	0.6	1.8
5	0.7	1.8
6	0.5	1.4
7	0.5	1.6
8	0.5	2.0
9	0.5	2.2

给出了在达到平衡状态时对应的液滴状态图,此时液滴已经完全润湿壁面,为 Wenzel 状态。由图 7(b)和(c)可以看出,光滑表面的平衡接触面积最小,规则表面、随机粗糙表面依次增大,而平衡接触角依次减小,且接触角均小于 80° 。根据经典 Wenzel 理论,增加亲水表面粗糙度,接触角减小,剪切变稀非牛顿流体液滴符合这一理论。尽管两种粗糙表面的粗糙度相同,在规则表面上的沉积特性规律也不能完全适用于随机粗糙表面。可以看到高度系数,平衡接触面积与接触角存在差异。在实际应用中,很多原始表面几乎均是随机粗糙表面,使用广泛研

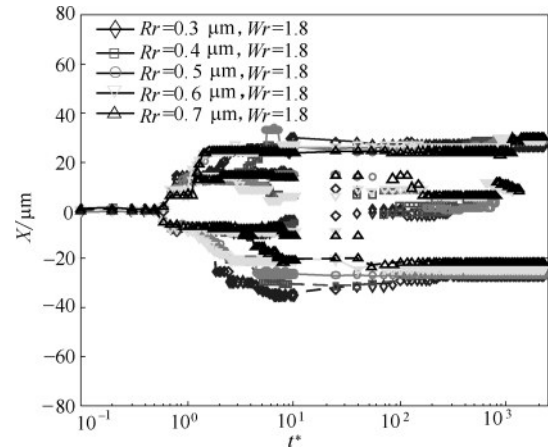


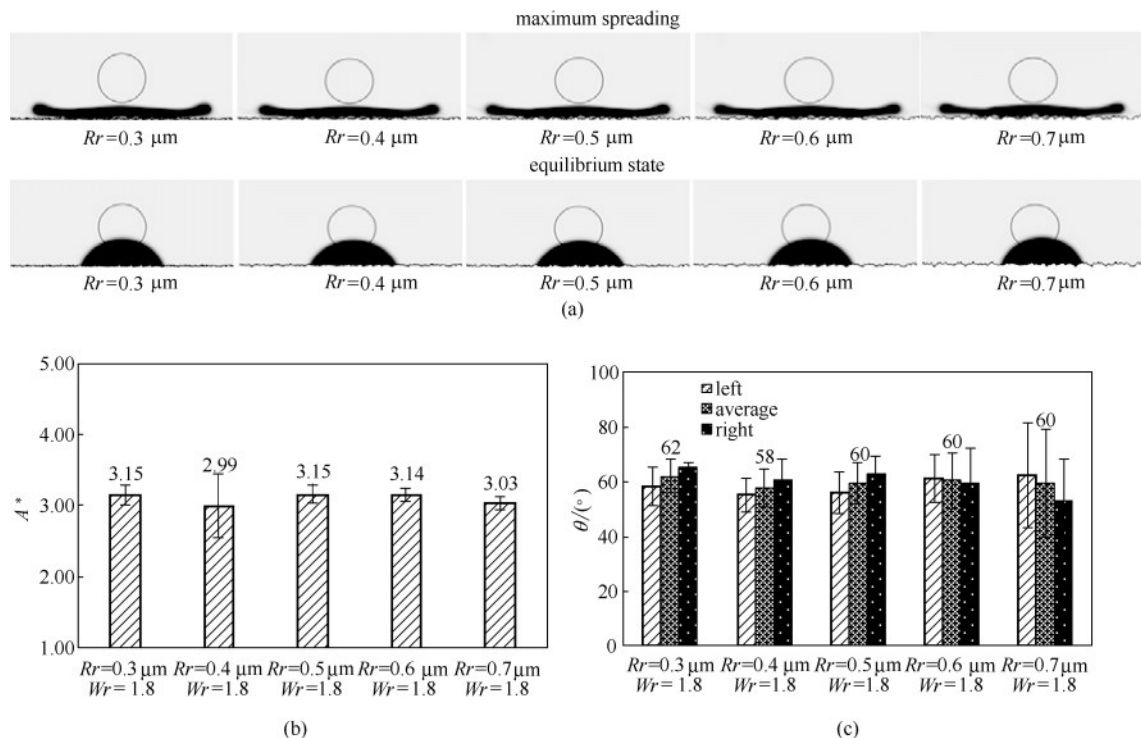
图10 三相(固-液-气)接触点的演变

Fig.10 Evolution of triple-phase (solid-liquid-gas) contact points

究过的光滑表面或者规则表面上液滴的沉积规律来理解随机粗糙表面上的沉积过程是不科学的。进一步说明本文研究剪切变稀非牛顿流体液滴撞击在随机粗糙表面的沉积特性的必要性和重要性。

3.3 均方根粗糙度 Rr 对液滴沉积过程的影响

为了更深入地探究随机表面形貌对液滴沉积过程的影响。本文设计了9组不同的随机粗糙表面,粗糙度具体参数列于表2中。以 case 3 为基准粗糙表面,case 1 ~ case 5 用于研究相同 Wr 条件下,

图11 液滴在随机粗糙表面的最大铺展及平衡状态($Wr = 1.8$, $Rr = 0.3 \sim 0.7 \mu\text{m}$)Fig.11 Comparison of maximum spreading and equilibrium states of droplets on randomly rough surfaces with same value of $Wr = 1.8$ and different Rr ranging from $0.3 \mu\text{m}$ to $0.7 \mu\text{m}$

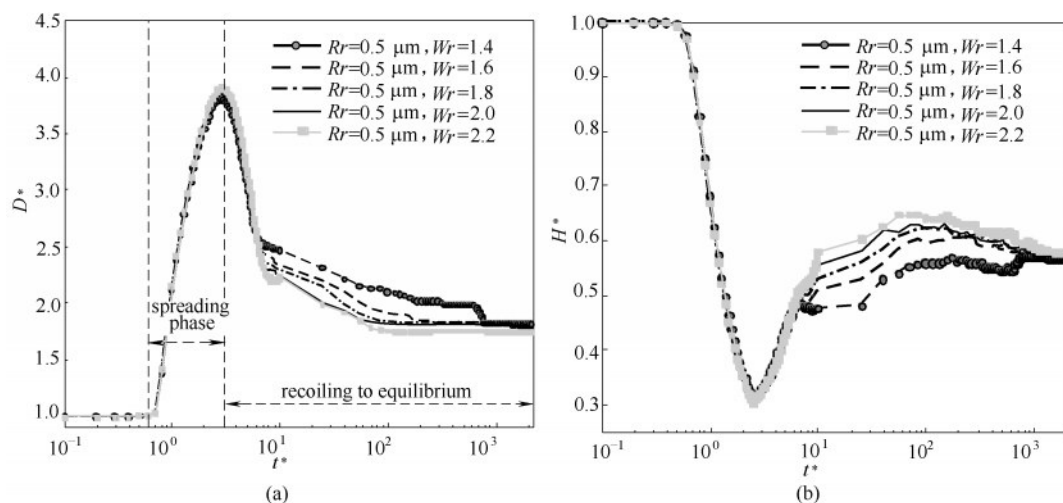


图 12 液滴在相同 R_r 、不同 W_r 的五种表面上的形貌演变过程

Fig.12 Morphological evolution of droplet impacting on surfaces having different values of Wenzel roughness but same root-mean-square roughness

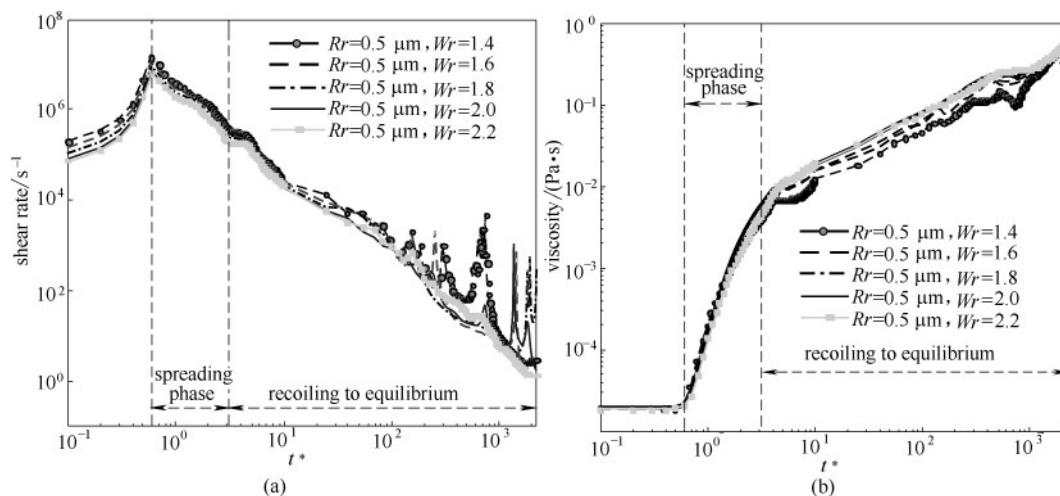


图 13 液滴在相同 R_r 、不同 W_r 的五种表面上剪切速率与界面流体黏度的变化

Fig.13 Shear rate and viscosity evolution during droplet deposition on surfaces having different values of Wenzel roughness but same root-mean-square roughness

不同 R_r 对液滴沉积过程的影响。case 3 和 case 6 ~ case 9 用于研究相同 R_r 条件下, 不同 W_r 对液滴运动的影响。针对任一随机粗糙表面, 进行 5 个独立的液滴沉积过程模拟, 分别对应于图 1 中给出的 5 个液滴下落位置, 以下分析结果都是基于这五组独立模拟实验的均值。

由图 8 可以看出, 在液滴下落阶段, 因为液滴具有相同的动能, 液滴铺展系数与高度系数变化曲线重合。碰到壁面后, 在铺展阶段, 随着 R_r 减小, 铺展系数减小, 这是因为固液界面上的流体的剪切速率减小, 黏度增大, 阻碍了液滴的铺展(图 9)。液滴达到最大铺展时, $R_r=0.7 \mu\text{m}$ 时的铺展系数最大。经

过最大铺展之后, 液滴因表面张力的作用往中心方向回缩, R_r 越大, 界面上流体的剪切速率越大, 黏度越小, 回缩越多, 因此铺展系数(D^*)越小, 高度系数(H^*)越大。液滴在回缩过程中, 出现多个三相点, 表明液滴由 Cassie 状态向 Wenzel 状态转变(图 10), 当 t^* 约为 900 左右时, 每个粗糙表面上均只有左右各一个接触点, 表明液滴完全浸润表面, 为 Wenzel 状态。图 11(a) 显示液滴在平衡状态时, 均会在固体表面全润湿。

图 11 列出了液滴在五种表面上平衡状态时的接触面积和接触角的结果。在每个随机粗糙表面的 5 个不同的撞击位置得到的数据平均值与标准偏

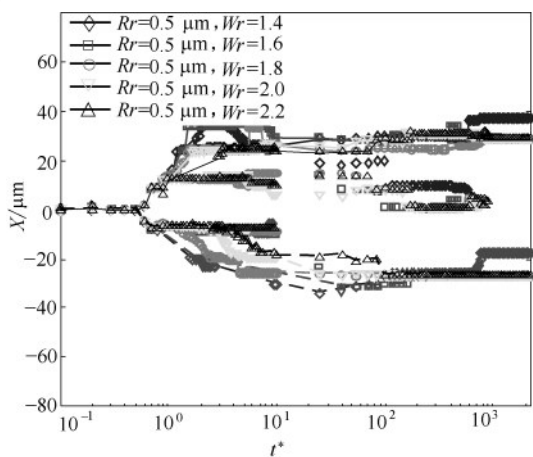


图14 三相(固-液-气)接触点的演变

Fig.14 Evolution of triple-phase (solid-liquid-gas) contact points

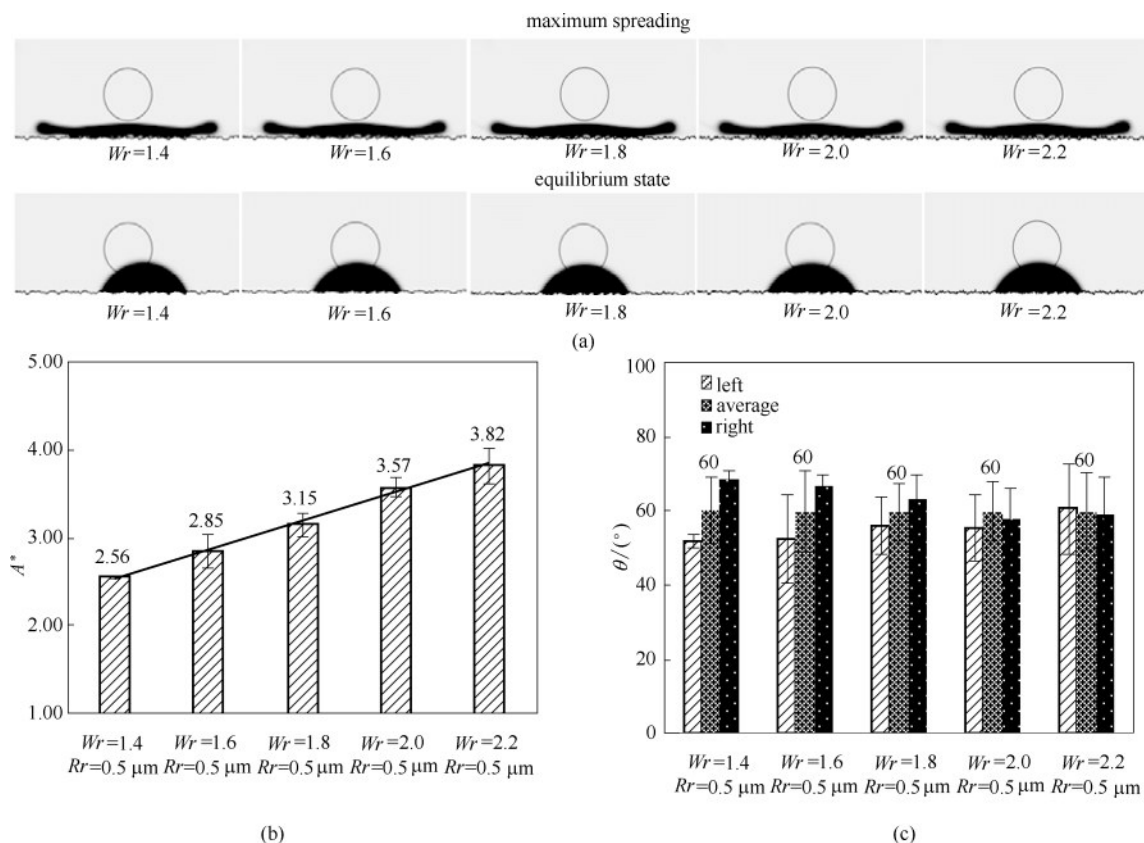
差,均标注在图上。从图中可以看出,均方根粗糙度 R_r 增加,液滴的平衡接触面积略有减小,液滴的平衡接触角也略有减少。这说明对于剪切变稀非牛顿流体液滴,均方根粗糙度 R_r 对液滴铺展过程的确带来影响,但对平衡状态的影响不大。

3.4 Wenzel粗糙度 W_r 对液滴沉积过程的影响

研究 W_r 对液滴的沉积特性的影响时,保持表面均方根粗糙度为 $0.5 \mu\text{m}$, W_r 分别为 1.4、1.6、1.8、2.0、2.2。图 12 表明 W_r 对液滴初始铺展阶段几乎无影响,铺展系数与高度系数基本相似。液滴在回缩过程中, W_r 越大,界面上流体的剪切速率越小,黏度越大(图 13),越容易达到稳定状态,因此达到平衡所需时间越少(图 12)。图 14 可以看出:当 t^* 达到 900 后,每个粗糙表面上均只有左右各一个接触点,表明液滴完全浸润表面,为 Wenzel 状态,与图 15(a)显示的液滴状态一致。图 15 是液滴在五种粗糙表面上达到最大铺展和平衡时的状态以及平衡接触面积和接触角的结果。液滴的平衡接触面积随着 W_r 增加而从 2.56 线性增加至 3.82,而接触角平均值几乎不变。

4 结 论

本文利用相场方法模拟研究了剪切变稀流体液滴撞击在随机粗糙表面的沉积过程,揭示了随机

图15 液滴在随机粗糙表面的最大铺展及平衡状态($R_r = 0.5 \mu\text{m}$, $W_r = 1.4 \sim 2.2$)Fig.15 Comparison of maximum spreading and equilibrium states of droplets on randomly rough surfaces with same value of $R_r = 0.5 \mu\text{m}$ and different W_r ranging from 1.4 to 2.2

粗糙表面形貌对液滴沉积过程的影响。虽然以下总结的液滴在随机粗糙表面的沉积行为只针对剪切变稀流体,但本文开发的模拟及分析方法在指定不同黏度方程后,同样适用于其他非牛顿流体。

(1) 非牛顿流体与牛顿流体因液滴性质的差异,即使在光滑表面的整个沉积过程中,液滴的形貌演变过程也存在很大差异。在本文的研究条件下,剪切变稀流体液滴的最大铺展直径明显高于牛顿流体液滴。牛顿流体液滴的三阶段沉积过程变成剪切变稀非牛顿流体的两阶段沉积过程。

(2) 剪切变稀非牛顿流体液滴在规则矩形表面和随机粗糙表面的模拟结果表明,即使两个表面具有相同的粗糙度,不同的表面形貌赋予了液滴不同的沉积特性及不同的平衡状态。达到平衡状态时,在随机粗糙表面上的液滴显示了更高的接触面积和较低的接触角。

(3) 随机粗糙表面的 Wenzel 粗糙度(W_r)和均方根粗糙度(R_r)对剪切变稀非牛顿流体液滴的沉积过程有很大的影响:液滴最大铺展直径随着均方根粗糙度 R_r 与 Wenzel 粗糙度 W_r 的增加而增加;均方根粗糙度 R_r 增加,液滴的最终铺展系数减小,液滴与表面的相对平衡接触面积和平衡接触角均减小;Wenzel 粗糙度 W_r 越大,液滴达到平衡所需时间越少;液滴与表面的相对平衡接触面积随 W_r 增加而线性增加,液滴的平衡接触角不随 W_r 变化而变化。

参考文献

- [1] 宋云超, 宁智, 孙春华, 等. 液滴撞击湿润壁面运动形态及飞溅运动机制[J]. 力学学报, 2013, 6: 833-842.
Song Y C, Ning Z, Sun C H, et al. Droplet impact on wet wall and splash motion mechanism[J]. Chinese Journal of Mechanics, 2013, 6: 833-842.
- [2] Smith F R, Buntzma N C, Brutin D. Roughness influence on human blood drop spreading and splashing[J]. Langmuir, 2018, 34: 1143-1150.
- [3] Šikalo Š, Wilhelm H D, Roisman I V, et al. Dynamic contact angle of spreading droplets: experiments and simulations[J]. Physics of Fluids, 2005, 17(6): 1-13.
- [4] Li J, Xiao J, Huang Y L, et al. Integrated process and product analysis: a multiscale approach to paint spray[J]. AIChE J., 2007, 53: 2841-2857.
- [5] Xiao J, Li J, Lou H H, et al. ACS-based dynamic optimization for curing of polymeric coatings[J]. AIChE J., 2006, 52: 1410-1422.
- [6] Peters C A, Nichols M E, Ellwood K R J. The evolution of surface texture in automotive coatings[J]. Journal of Coatings Technology and Research, 2011, 8: 469-480.
- [7] 刘红, 解茂昭, 史俊瑞, 等. 单液滴碰撞多孔介质过程的数值研究[J]. 燃烧科学与技术, 2011, 17(4): 287-294.
Liu H, Xie M Z, Liu H S, et al. Numerical simulation of single droplet impact on a wall in porous media[J]. Science and Technology of Combustion, 2011, 17(4): 287-294.
- [8] Engel O G. Waterdrop collisions with solid surfaces[J]. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1955, 54(5): 281-98.
- [9] 毕菲菲, 郭亚丽, 沈胜强, 等. 液滴撞击固体表面铺展特性的实验研究[J]. 物理学报, 2012, 61(18): 1-6.
Bi F F, Guo Y L, Shen S Q, et al. Experimental study of spread characteristics of droplet impacting solid surface[J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(18): 1-6.
- [10] Dong H, Carr W W, Bucknall D G, et al. Temporally-resolved inkjet drop impaction on surfaces[J]. AIChE J., 2007, 53(10): 2606-2617.
- [11] 李大树, 仇性启, 郑志伟, 等. 液滴冲击不同浸润性壁面的数值分析[J]. 农业机械学报, 2015, 46(7): 294-302.
Li D S, Qiu X Q, Zheng Z W, et al. Numerical analysis of droplet impact on surfaces with different wettabilities[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2015, 46(7): 294-302.
- [12] 梁超, 王宏, 朱恂, 等. 液滴撞击不同浸润性壁面动态过程的数值模拟[J]. 化工学报, 2013, 64(8): 2745-2751.
Liang C, Wang H, Zhu X, et al. Numerical simulation of droplet impact on surfaces with different wettabilities[J]. CIESC Journal, 2013, 64(8): 2745-2751.
- [13] Scheller B L, Bousfield D W. Newtonian drop impact with a solid surface[J]. AIChE J., 1995, 41(6): 1357-1367.
- [14] Fukai J, Shiiba Y, Yamamoto T, et al. Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a flat surface: experiment and modeling[J]. Physics of Fluids, 1995, 7(2): 236-247.
- [15] Fukai J, Shiiba Y, Miyatake O. Theoretical study of droplet impingement on a solid surface below the leidenfrost temperature [J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 1997, 40(10): 2490-2492.
- [16] Gao X, Li R. Spread and recoiling of liquid droplets impacting solid surfaces[J]. AIChE J., 2014, 60(7): 2683-2691.
- [17] Li X, Mao L, Ma X. Dynamic behavior of water droplet impact on microtextured surfaces: the effect of geometrical parameters on anisotropic wetting and the maximum spreading diameter[J]. Langmuir, 2013, 29(4): 1129-1138.
- [18] 毛靖儒, 施红辉, 俞茂铮. 液滴撞击固体表面时的流体动力学特性试验研究[J]. 力学与实践, 1995, 17(3): 52-54.
Mao J R, Shi H H, Yu M Z. Experimental study on hydrodynamic characteristics of drops impacting solid surfaces[J]. Mechanics and Practice, 1995, 17(3): 52-54.
- [19] David R, Neumann W. Contact angle hysteresis on randomly rough surfaces: a computational study[J]. Langmuir, 2013, 29: 4551-4558.

- [20] Dupuis A, Yeomans J M. Modeling droplets on superhydrophobic surfaces: equilibrium states and transitions[J]. *Langmuir*, 2005, **21**: 2624–2629.
- [21] Kusumaatmaja H, Yeomans J M. Modeling contact angle hysteresis on chemically patterned and superhydrophobic surfaces [J]. *Langmuir*, 2007, **23**: 6019–6032.
- [22] Kusumaatmaja H, Vrancken R J, Bastiaansen C W M, et al. Anisotropic drop morphologies on corrugated surfaces[J]. *Langmuir*, 2008, **24**: 7299–7308.
- [23] 胡雷, 郭加宏, 王小永. 格子 Boltzmann 方法模拟双液滴同时冲击固体表面液膜[J]. *水动力学研究与进展(A 辑)*, 2011, **26**(1): 11–18.
Hu L, Guo J H, Wang X Y. Lattice Boltzmann method for simulating simultaneous impact of two droplets on solid surface liquid membranes[J]. *Hydrodynamic Research and Progress (A Series)*, 2011, **26**(1): 11–18.
- [24] Kai R, Feuillebois F. Influence of surface roughness on liquid drop impact[J]. *J. Colloid Interface Sci.*, 1998, **203**(1): 16–30.
- [25] Xiao J, Pan F, Xia H T, et al. Computational study of single droplet deposition on randomly rough surfaces: surface morphological effect on droplet impact dynamics[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2018, **57**(22): 7664–7675.
- [26] Nigen S. Experimental investigation of the impact of an (apparent) yield-stress material[J]. *Atomization and Sprays*, 2005, **15**(1): 103–118.
- [27] German G, Bertola V. Impact of shear-thinning and yield-stress drops on solid substrates[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, **21**(37): 375111(16).
- [28] 贺征, 郜冶, 顾璇, 等. 液滴与壁面碰撞模型研[J]. *哈尔滨工程大学学报*, 2009, **30**(3): 267–270.
He Z, Gao Y, Gu X, et al. Study on droplet wall collision model[J]. *Journal of Harbin Engineering University*, 2009, **30**(3): 267–270.
- [29] 闵琪, 段远源, 王晓东, 等. 非牛顿流体液滴铺展过程的格子 Boltzmann 模拟[J]. *热科学与技术*, 2013, **4**(12): 1–7.
Min Q, Duan Y Y, Wang X D, et al. Lattice Boltzmann simulation of the spreading of non-newtonian fluids[J]. *Journal of Thermal Science and Technology*, 2013, **4**(12): 1–7.
- [30] Yue P T, Feng J J, Liu C, et al. A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2004, **515**(515): 293–317.
- [31] Xiao J, Chaudhuri S. Design of anti-icing coatings using supercooled droplets as nano-to-microscale probes[J]. *Langmuir*, 2012, **28**: 4434–4446.
- [32] Lou H H, Huang Y L. Integrated modeling and simulation for improved reactive drying of clearcoat[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2000, **39**(2): 500–507.
- [33] Xu J, Koelling K W. Temperature dependence of rheological behavior of a metallic automotive waterborne basecoat[J]. *Progress in Organic Coatings*, 2005, **53**(3): 169–176.
- [34] Kang H C, Jacobi A M. Equilibrium contact angles of liquid droplets on ideal rough solids[J]. *Langmuir*, 2011, **27**: 14910–14918.
- [35] Yang F, Zheng Z, Xiao R, et al. Comparison of two fractal interpolation methods[J]. *Phys. A*, 2017, **469**: 563–571.
- [36] Izquierdo S, Lopez C I, Valdes J R, et al. Multiscale characterization of computational rough surfaces and their wear using self-affine principal profiles[J]. *Wear*, 2012, **274**/275: 1–7.
- [37] Khoufch A, Benali M, Saleh K. Influence of liquid formulation and impact conditions on the wetting of hydrophobic surfaces by aqueous polymeric solutions[J]. *Chemical Engineering Research & Design*, 2016, **110**: 233–244.