

文章编号:1006-2467(2014)02-0239-05

# 液滴在非均匀润湿表面上的动力行为

龚 帅, 郑 平

(上海交通大学 机械与动力工程学院, 上海 200240)

**摘 要:** 用一种改进的格子 Boltzmann 方法(LBM)两相流模型模拟了三维液滴在非均匀润湿表面上的动力学行为. 该模型在数值精度和稳定性上都有很大改善. 在几种不同的非均匀润湿表面上, 分析了液滴的铺展行为和运动过程. 通过对液滴分裂过程中速度场的分析, 阐明了液滴在润湿梯度作用下的运动和分裂机理.

**关键词:** 液滴; 格子 Boltzmann 方法; 润湿性; 接触角

**中图分类号:** O 359 **文献标志码:** A

## Droplet Dynamics on Surfaces with Non-Uniform Wettability

GONG Shuai, CHENG Ping

(School of Mechanical Engineering, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China)

**Abstract:** Three-dimensional droplet dynamics on surfaces with non-uniform wettability were investigated based on an improved lattice Boltzmann method (LBM) for multiphase flows. Both the accuracy and numerical stability were improved in this model. Droplet spreading and movement on surfaces with non-uniform wettability was analyzed. The mechanism of droplet movement and splitting under the action of wettability gradient was illustrated based on the analysis of velocity field during the droplet splitting process.

**Key words:** droplet; lattice Boltzmann method(LBM); wettability; contact angle

液滴在固体表面上的铺展行为存在于许多工程应用中,如喷墨打印、粘合、润滑、喷涂等.尤其是近年来,伴随着微机电系统(MEMS)科技的迅速崛起,微流控芯片、微混合器、微制动器等相继出现,引发了对微液滴运动进行调控的广泛研究<sup>[1-3]</sup>.

作为一种新的数值建模方法,格子 Boltzmann 方法(LBM)近年来受到越来越多的关注.不同于传统的基于离散求解 N-S 方程的宏观数值方法,LBM 基于介观动理论并能直接引入微观的作用力.这使得 LBM 在涉及界面动力学(如多相流<sup>[2]</sup>)和复杂边

界(如多孔介质流动<sup>[4]</sup>)的流动问题上具有独到优势.在 Shan 等<sup>[5]</sup>的伪势 LBM 模型基础上,文献<sup>[2]</sup>中提出了一种改进的 LBM 两相流模型.采用新的作用力形式和选取合理的作用力引入方法,改进之后的模型在精度和稳定性上都有了很大改善.另外,伪势 LBM 模型用于两相流模拟时气液两相自动分离,不需要追踪界面,计算效率较 VOF (Volume of fluid)<sup>[6]</sup>和 Level Set<sup>[7]</sup>等基于界面捕捉的两相流模型大幅提高.本文用该改进的伪势模型研究不同的非均匀润湿表面上液滴的动力学行为.

收稿日期:2013-04-23

基金项目:国家自然科学基金资助(51036005; 51276109),上海交通大学研究生创新能力培养基金,上海交通大学优秀博士学位论文培育基金资助

作者简介:龚 帅(1986-),男,河南省周口市人,博士生,主要研究方向为两相流及沸腾传热.郑平(联系人),博士生导师,中国科学院院士.主要从事传热传质研究.电话(Tel.):021-34206337; E-mail: pingcheng@sjtu.edu.cn.

## 1 计算模型

在 LBM 中,通过微观的粒子分布函数的演化来描述流体.采用 BGK(Bhatnagar-Gross-Krook)碰撞算子,则分布函数演化方程可以写为<sup>[2]</sup>

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_{eq,i}(\mathbf{x}, t)) + \Delta f_i(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

式中: $i$  为格子方向; $f_i(\mathbf{x}, t)$  为  $t$  时间步位于  $\mathbf{x}$  处以速度  $\mathbf{e}_i$  运动的粒子分布函数; $\tau$  为松弛时间; $f_{eq,i}(\mathbf{x}, t)$  为相应的平衡态粒子分布函数,

$$f_{eq,i} = \omega_i \rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \quad (2)$$

$\omega_i$  为权重系数, $\rho$  为密度, $\mathbf{u}$  为临时速度项, $c_s$  为格子声速; $\Delta f_i(\mathbf{x}, t)$  为作用力项.作用力的引入方法大致可以分为 3 种<sup>[2]</sup>:速度修正格式,离散作用力格式,精确差分格式.文献<sup>[2]</sup>中的结果表明,精确差分格式易于实施,而且数值精度和稳定性优于现存的其他作用力引入格式.因此,本文选用这种格式引入作用力.精确差分格式中作用力项由下式给出<sup>[8]</sup>:

$$\Delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_{eq,i}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_{eq,i}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}) \quad (3)$$

式中: $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \Delta t / \rho$  为时间步长  $\Delta t$  内由于力的作用引起的速度变化,作用力  $\mathbf{F}$  由下式给出:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}) + \mathbf{F}_s(\mathbf{x}) + \mathbf{F}_g(\mathbf{x}) \quad (4)$$

$\mathbf{F}_{int}$  为导致相分离的粒子间作用力, $\mathbf{F}_s$  为流体和固体壁面间的作用力, $\mathbf{F}_g$  为重力.在 Shan-Chen 模型<sup>[5]</sup>中, $\mathbf{F}_{int}$  由下式给出:

$$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}) = -c_0 m(\mathbf{x}) g \nabla m(\mathbf{x}) \quad (5)$$

式中: $m(\mathbf{x})$  为有效质量,它是密度的函数,并通过下式由状态方程决定:

$$m(\rho) = \sqrt{\frac{2(p - \rho c_s^2)}{c_0 g}} \quad (6)$$

$p$  为压力, $g$  为作用力强度系数, $c_0$  由所选用的格子结构确定.对于常用的 D2Q9 和 D3Q19 格子模型, $c_0 = 6.0$ .Yuan 等<sup>[9]</sup>也沿用了作用力表达式(5).另外,Zhang 等<sup>[10]</sup>提出了如下的  $\mathbf{F}_{int}$  表达式:

$$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}) = -\nabla(p - \rho c_s^2) \quad (7)$$

将 Shan-Chen 的  $\mathbf{F}_{int}$  作用力形式(即式(5))进行数学上的等效变形,可得:

$$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}) = -c_0 g \nabla m^2(\mathbf{x}) / 2 \quad (8)$$

结合式(5)和(8),本文提出采用如下的  $\mathbf{F}_{int}$  作用力形式:

$$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}) = -\beta c_0 m(\mathbf{x}) g \nabla m(\mathbf{x}) - (1 - \beta) c_0 g \nabla m^2(\mathbf{x}) / 2 \quad (9)$$

式中: $\beta$  为权重因子,取值可参见文献<sup>[2]</sup>.编程求解时,采用如下的作用力离散格式<sup>[2]</sup>:

$$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}) = -\beta m(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{x}'} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') m(\mathbf{x}') (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - \frac{1 - \beta}{2} \sum_{\mathbf{x}'} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') m^2(\mathbf{x}') (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \quad (10)$$

式中, $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  由下式给出:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{cases} g_1, & |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = 1 \\ g_2, & |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = \sqrt{2} \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \quad (11)$$

$g_1$  和  $g_2$  为不同的格子间距下的作用力强度系数; $\mathbf{x}'$  为周围格点的位置.对于三维模拟,本文选用 D3Q19 格式.在该格式中, $g_1 = g, g_2 = g/2$ .该格式对应的权重系数为: $i = 0$  时, $\omega_i = 1/3$ ;  $i = 1 \sim 6$  时, $\omega_i = 1/18$ ;  $i = 7 \sim 18$  时, $\omega_i = 1/36$ .D3Q19 格式的离散速度为:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0 &= [0 \ 0 \ 0]c, & \mathbf{e}_1 &= [1 \ 0 \ 0]c \\ \mathbf{e}_2 &= [-1 \ 0 \ 0]c, & \mathbf{e}_3 &= [0 \ 1 \ 0]c \\ \mathbf{e}_4 &= [0 \ -1 \ 0]c, & \mathbf{e}_5 &= [0 \ 0 \ 1]c \\ \mathbf{e}_6 &= [0 \ 0 \ -1]c, & \mathbf{e}_7 &= [1 \ 1 \ 0]c \\ \mathbf{e}_8 &= [-1 \ -1 \ 0]c, & \mathbf{e}_9 &= [1 \ -1 \ 0]c \\ \mathbf{e}_{10} &= [-1 \ 1 \ 0]c, & \mathbf{e}_{11} &= [1 \ 0 \ 1]c \\ \mathbf{e}_{12} &= [-1 \ 0 \ -1]c, & \mathbf{e}_{13} &= [1 \ 0 \ -1]c \\ \mathbf{e}_{14} &= [-1 \ 0 \ 1]c, & \mathbf{e}_{15} &= [0 \ 1 \ 1]c \\ \mathbf{e}_{16} &= [0 \ -1 \ -1]c, & \mathbf{e}_{17} &= [0 \ 1 \ -1]c \\ \mathbf{e}_{18} &= [0 \ -1 \ 1]c \end{aligned}$$

式中, $c = \Delta x / \Delta t$  为格子速度, $\Delta x$  为格子长度.在 LBM 中, $c$  通常取为 1.0.

本文对液滴在非均匀润湿表面上运动的模拟将采用如下的 Shan-Chen 状态方程<sup>[5]</sup>:

$$p = \frac{1}{3} \rho + \frac{c_0}{2} g \rho_0^2 (1 - e^{-\rho/\rho_0})^2 \quad (12)$$

式中, $\rho_0 = 1.0$ .令压力对密度的一阶和二阶导数为零,就可以得到状态方程的临界参数.对 Shan-Chen 状态方程,临界参数为<sup>[2]</sup>:

$$\rho_c = \rho_0 \ln 2, \quad g_c = -2/(9\rho_0) \quad (13)$$

在 Shan-Chen 状态方程中,温度定义  $T = -1/g$ .因此,临界温度即为  $T_c = 4.5\rho_0$ .

表面的润湿特性(接触角)通过流体和固体壁面之间的作用力  $\mathbf{F}_s$  引入.这一作用力由下式给出<sup>[2]</sup>:

$$\mathbf{F}_s(\mathbf{x}) = -m(\mathbf{x}) \sum_i [18g_s \omega_i s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t) \cdot \mathbf{e}_i \Delta t] \quad (14)$$

式中: $g_s$  为壁面作用力强度系数,用于调节接触角的大小; $s(\mathbf{x})$  为指示函数,当  $\mathbf{x}$  为固体节点时其值等于 1,当  $\mathbf{x}$  为流体节点时其值等于 0.

在 D3Q19 格式中,  $c_s^2 = c^2/3$ . 运动黏度由下式给出:

$$\nu = c_s^2 (\tau - 1/2) \Delta t \quad (15)$$

在相界面处, 流体的物性  $\chi$  通过插值方法由下式给出:

$$\chi = \chi_l \frac{\rho - \rho_v}{\rho_l - \rho_v} + \chi_v \frac{\rho_l - \rho}{\rho_l - \rho_v} \quad (16)$$

式中:  $\chi_l$ 、 $\chi_v$  分别为液相和气相的物性;  $\rho_l$ 、 $\rho_v$  分别为液相和气相的密度.

前述公式中的密度和临时速度由下式给出:

$$\rho = \sum_i f_i(x, t), \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{e}_i f_i(x, t) \quad (17)$$

需要注意的是, 上式中的  $\mathbf{u}$  并不是真实的流体速度. 真实的流体速度  $\mathbf{u}_R$  为<sup>[2]</sup>

$$\rho \mathbf{u}_R = \rho \mathbf{u} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{F} \quad (18)$$

## 2 模型验证及静态接触角的确定

为了验证上述改进的模型的适用能力, 图 1 中比较了几个模型的共存曲线. 图中,  $T_r$  和  $v_r$  分别为无量纲的饱和温度和比体积. 共存曲线是指模拟得到的气液密度与通过 Maxwell 构造得到的理论解的对比<sup>[2]</sup>. 可见, 与文献[9-11]中的模型相比, 本文的改进模型不仅数值精度明显提高, 而且稳定性也优于其他模型, 可以实现更宽的温度范围的模拟(也即可以实现更高的密度比).

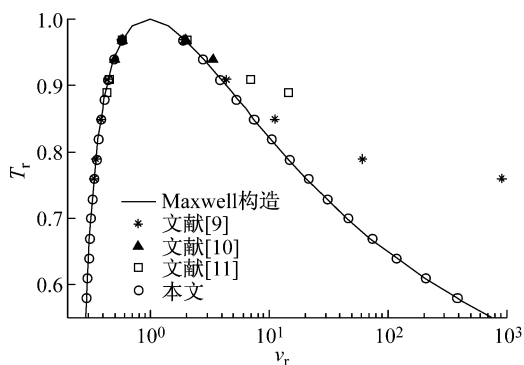
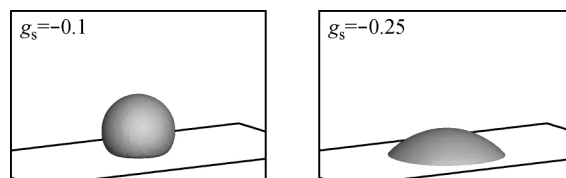


图 1 Peng-Robinson 状态方程共存曲线的对比<sup>[2]</sup>

Fig. 1 Coexistence curves based on Peng-Robinson equation of state<sup>[2]</sup>

前已述及, 接触角由式(14)中的  $g_s$  确定. 图 2 所示为具有不同接触角的 2 个表面. 取  $g_s = -0.10$  时, 对应于一个疏水表面, 相应的静态接触角  $\theta = 145^\circ$ ; 取  $g_s = -0.25$  时, 对应于一个亲水表面, 相应的  $\theta = 25^\circ$ . 需要指出的是,  $g_s$  和接触角  $\theta$  之间存在近似的线性关系<sup>[2]</sup>. 根据这一关系, 就可以预测相应于某一接触角的  $g_s$  值.



(a) 疏水表面

(b) 亲水表面

图 2 不同接触角的疏水表面(a)和亲水表面(b)

Fig. 2 Hydrophobic surface (a) and hydrophilic surface (b) with different contact angles

## 3 结果及讨论

本文的计算选用前述的 Shan-Chen 状态方程. 设  $T_r = T/T_c = 0.65$ , 对应的液相密度  $\rho_l = 2.745$ , 气相密度  $\rho_v = 0.0617$ . 黏度分别为:  $\mu_l = 0.4575$ ,  $\mu_v = 0.01028$ . 计算在  $80 \times 40 \times 30$  的格子空间进行. 上下表面是固体壁面, 其他表面采用周期边界格式. 初始时, 一个半径为 12 格子的半球形液滴位于下底面的中心位置. 本文共计算了图 3 所示的 4 个不同表面上的液滴运动过程. 其中, 图 3(a)、(b)、(d) 中黑色区域宽度为 8, 图 3(c) 中黑色区域宽度为 12.

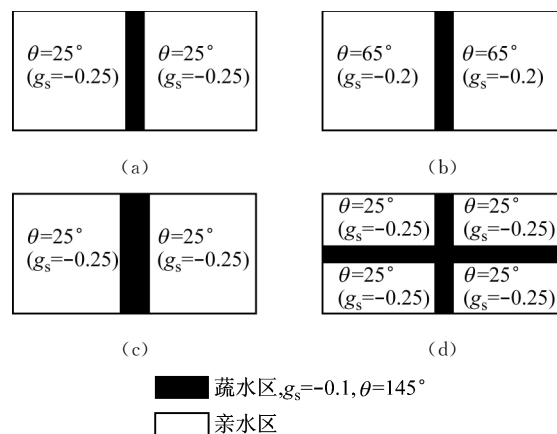


图 3 4 种工况的非均匀润湿表面

Fig. 3 Four heterogeneous surfaces under different conditions

最终, 液滴在图 3 中 4 个不同的非均匀润湿表面上都达到了稳态. 达稳态后的三维液滴形状和俯视图如图 4 所示. 由图 4 可见, 图 3(a) 工况下液滴的最终铺展面积明显大于图 3(b) 工况的, 这是因为图 3(a) 的亲水区拥有更小的接触角; 疏水区域的宽度对最终的液滴形貌也存在着很大的影响; 图 3(c) 工况下的疏水区域最宽, 液滴在润湿梯度的作用下分裂成了 2 个完全相同的小液滴; 图 3(d) 工况下液滴最终演变成了花瓣状. 这些结果表明: 可以通过表面润湿带的分布有效调控液滴的形貌和分裂行为; 随着亲水区接触角的减小, 液滴铺展面积增大; 亲疏

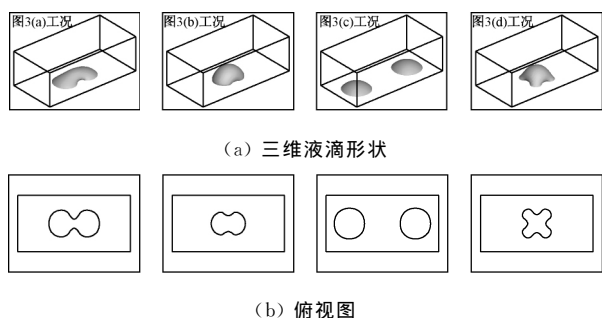


图4 4个表面上的液滴最终形貌

Fig. 4 Droplet shapes at equilibrium state of four heterogeneous surfaces

水区域的接触角差值足够大且疏水区域的宽度达到一定值时,液滴甚至发生分裂行为。

图5所示为图3(c)工况的液滴分裂过程图。由图可见,在润湿梯度的驱动下,液滴逐渐向两端移动,与壁面的接触面积逐步加大;液滴中部出现了一个液桥,在由润湿势(即由于接触角的差别而引起的润湿梯度)产生的拉伸力作用下,液桥逐渐变窄;在 $t = 2\,700$ 时间步液桥已经非常窄,接近断裂;在 $t = 2\,800$ 时间步,液桥断裂,液滴分裂成2个小液滴。

为了进一步研究液滴的运动和分裂机理,图6所示为液滴分裂过程中4个时刻的速度场和液滴侧

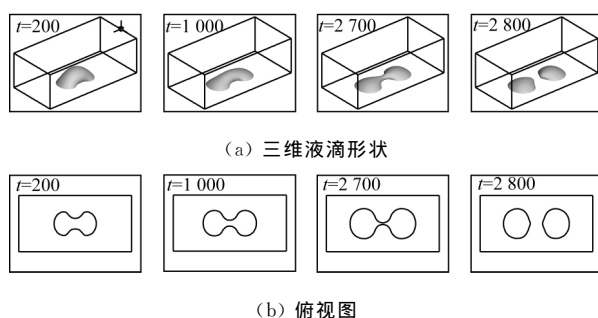


图5 图3(c)工况的液滴分裂过程

Fig. 5 Droplet splitting process for the case in Fig. 3(c)

视图。由图可见,  $t = 200$  时间步,液滴的两端正在向两侧和壁面移动,周围的气相被液滴迅速推开。有趣的是,液滴中间靠近壁面处存在2个环流。这2个环流所在的位置正是亲水区域和疏水区域的分界线。正是这2个由润湿梯度诱发的环流提供了液滴分裂的动力;在 $t = 1\,000$ 处,这2个环流得到了进一步的发展,继续驱动液滴的分离;在 $t = 2\,700$ 时,液滴的顶部向下塌陷,液滴已经接近断裂;  $t = 2\,800$ 时液滴断裂,这2个环流也随之消失;断裂后的2个小液滴分别向两侧移动,而且可以明显看出移动过程中的前进角小于后退角。

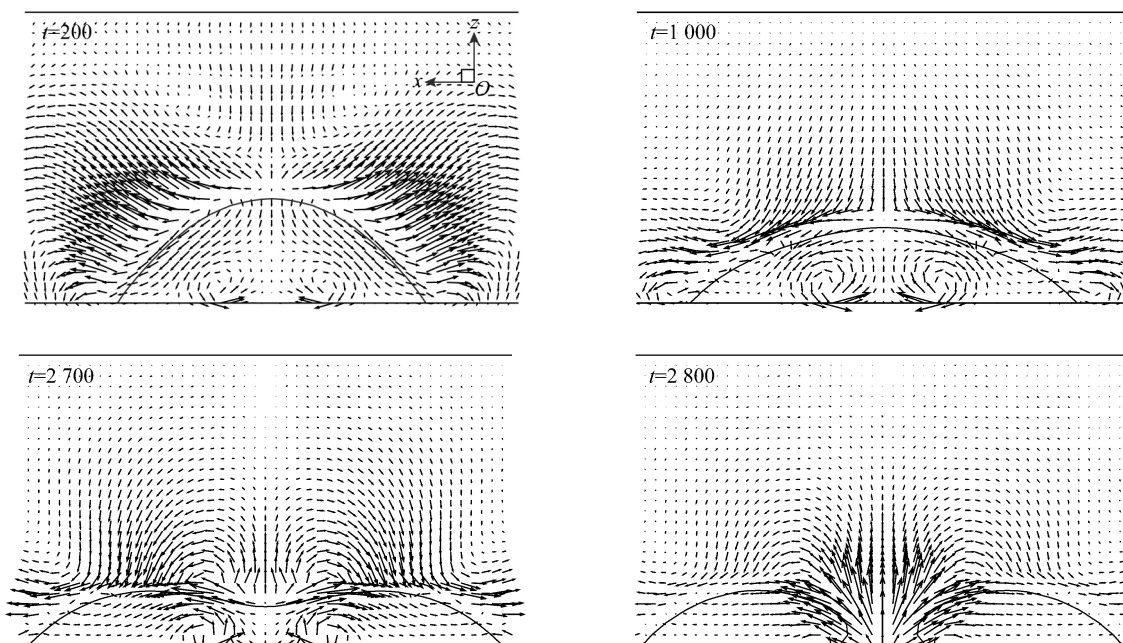


图6 图3(c)工况的液滴分裂过程速度场及液滴侧视图

Fig. 6 Side view and velocity field of droplet splitting process for the case in Fig. 3(c)

## 4 结 语

用本文提出的改进的伪势模型模拟了液滴在4个不同的非均匀润湿表面上的动力学行为。该模型在数值精度和稳定性上都有很大改善。通过对液滴

分裂过程中的速度场的深入分析,阐明了液滴在润湿梯度作用下的运动和分裂机理。

一个稳健的两相流模型是相变模型的基础。在两相流模型的基础上耦合能量方程,可以实现相变过程的模拟。因此,这一两相流模型对于发展气液相

变模型也有一定的意义.

#### 参考文献:

- [1] Hong F J, Jiang D D, Cheng P. Frequency-dependent resonance and asymmetric droplet oscillation under ac electrowetting on coplanar electrodes [J]. **Journal of Micromechanics and Microengineering**, 2012, 22 (8): 085024.
  - [2] Gong S, Cheng P. Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved lattice Boltzmann model for phase transitions and multiphase flows [J]. **Computers & Fluids**, 2012, 53: 93-104.
  - [3] Gong S, Cheng P, Quan X. Lattice Boltzmann simulation of droplet formation in microchannels under an electric field [J]. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, 2010, 53 (25-26): 5863-5870.
  - [4] Hao L, Cheng P. Lattice Boltzmann simulations of water transport in gas diffusion layer of a polymer electrolyte membrane fuel cell [J]. **Journal of Power Sources**, 2010, 195 (12): 3870-3881.
  - [5] Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components [J]. **Physical Review E**, 1993, 47 (3): 1815-1819.
  - [6] Nikolopoulos N, Nikas K S, Bergeles G. A numerical investigation of central binary collision of droplets [J]. **Computers & Fluids**, 2009, 38 (6): 1191-1202.
  - [7] Lee W, Son G. Numerical study of droplet impact and coalescence in a microline patterning process [J]. **Computers & Fluids**, 2011, 42 (1): 26-36.
  - [8] Kupershtokh A L, Medvedev D A. Lattice Boltzmann equation method in electrohydrodynamic problems [J]. **Journal of Electrostatics**, 2006, 64 (7-9): 581-585.
  - [9] Yuan P, Schaefer L. Equations of state in a lattice Boltzmann model [J]. **Physics of Fluids**, 2006, 18 (4): 042101.
  - [10] Zhang R, Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows [J]. **Physical Review E**, 2003, 67 (6): 066711.
  - [11] Zeng J B, Li L J, Liao Q, *et al.* Simulation of phase transition process using lattice Boltzmann method [J]. **Chinese Science Bulletin**, 2009, 54 (24): 4596-4603.
- 
- (上接第 238 页)
- [7] CHEN W J, Xiao W W, FU G Y, *at al.* Structural performance evaluation procedure for large flexible airship of HALE stratospheric platform conception [J]. **Journal of Shanghai Jiaotong University (Science)**, 2007, 12(2): 293-300.
  - [8] 高海健. 大型平流层空间平台柔性飞艇结构分析理论与特性研究[D]. 上海: 上海交通大学船建学院, 2010.
  - [9] 高海健, 陈务军, 付功义. 预应力薄膜充气梁模态的分析方法及特性[J]. **华南理工大学学报: 自然科学版**, 2010, 38(7): 135-139.  
GAO Hai-jian, CHEN Wu-jun, FU Gong-yi. Modal analysis method and modal behavior of pre-stressed inflatable fabric beam[J]. **Journal of South China University of Technology: Natural Science Edition**, 2010, 38(7): 135-139.
  - [10] 黄伟良, 宋笔锋. 基于有限元的软式飞艇主气囊动态特性分析[J]. **科学技术与工程**, 2008, 8(14): 3863-3867.  
HUANG Wei-liang, SONG Bi-feng. Dynamic characteristics airship by analysis of the envelope of nonrigid finite element method[J]. **Science Technology and Engineering**, 2008, 8(14): 3863-3867.
  - [11] 谭惠丰, 李云良, 毛丽娜, 等. 空间充气展开支撑管的自振特性研究[J]. **哈尔滨工业大学学报**, 2008, 40 (5): 709-713.  
TAN Hui-feng, LI Yun-liang, MAO Li-na, *et al.* Free vibration characteristics of inflatable supporting tube[J]. **Journal of Harbin Institute of Technology**, 2008, 40(5): 709-713.
  - [12] Minami H. Added mass of a membrane vibrating at finite amplitude[J]. **Journal of Fluids and Structures**, 1998, 18(12): 919-923.
  - [13] 高海健, 陈务军, 付功义. 平流层验证飞艇结构体系比较研究[J]. **宇航学报**, 2011, 32(4): 713-718.  
GAO Hai-jian, CHEN Wu-jun, FU Gong-yi. Comparison investigation for architecture of stratospheric demonstration airship [J]. **Journal of Astronautics**, 2011, 32(4): 713-718.
  - [14] 王磊, 李元齐, 沈祖炎. 薄膜振动附加质量试验研究[J]. **振动工程学报**, 2011, 24(2): 125-132.  
WANG Lei, LI Yuan-qi, SHEN Zu-yan. Experimental investigation on the added mass of membranes vibrating in air[J]. **Journal of Vibration Engineering**, 2011, 24(2): 125-132.
  - [15] 于肖宇, 张继革, 顾卫国, 等. 薄壁圆筒结构附加质量的实验研究[J]. **水动力学研究与进展**, 2010, 25(5): 655-658.  
YU Xiao-yu, ZHANG Ji-ge, GU Wei-guo, *at al.* Experimental study of added mass of the thin-walled cylinder structure [J]. **Journal of Hydrodynamic**, 2010, 25(5): 655-658.