

重庆大学学报
Journal of Chongqing University
ISSN 1000-582X, CN 50-1044/N

《重庆大学学报》网络首发论文

题目：相场格子 Boltzmann 方法模拟含表面活性剂液滴的剪切动态行为
作者：陈涛，姚丽萍，张良奇，曾忠，谢守勇
收稿日期：2023-11-16
网络首发日期：2024-04-28
引用格式：陈涛，姚丽萍，张良奇，曾忠，谢守勇. 相场格子 Boltzmann 方法模拟含表面活性剂液滴的剪切动态行为[J/OL]. 重庆大学学报.
<https://link.cnki.net/urlid/50.1044.N.20240426.1719.002>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

doi: 10.11835/j.issn.1000-582X.2024.254

相场格子 Boltzmann 方法模拟含表面活性剂液滴的剪切动态行为

陈涛¹, 姚丽萍¹, 张良奇², 曾忠², 谢守勇¹

(1. 西南大学 工程技术学院, 重庆 400715; 2. 重庆大学 航空航天学院, 重庆 400044)

摘要: 表面活性剂可以降低流体界面的表面张力, 显著改变固体表面的润湿特性, 在工业生产中被广泛使用。为探究载表面活性剂液滴在固体表面上的运动特性, 基于 Cahn-Hilliard 相场格子玻尔兹曼方法, 引入由实验得出的考虑三相接触线移动速度的 Yokoi 动态接触角模型, 建立了一种考虑可溶性表面活性剂流动的移动接触线模型。根据控制方程独立开发计算程序, 并采用并行化处理提高了计算效率。在此基础上研究了线性剪切作用下液滴的动态过程, 分析了有效毛细数 Ca_e 和固体表面润湿性对纯净液滴和载表面活性剂液滴变形的影响规律。结果表明: 有效毛细数 Ca_e 增大会促进液滴变形, 当其增大到一定程度时液滴会产生破裂, 载表面活性剂液滴相对于纯净液滴有更大的变形量和移动速度。当液滴附着于亲水性固体表面时, 在相同剪切作用下, 载表面活性剂液滴相对于纯净液滴有更长的相对弧长和相对润湿长度; 且液滴在亲水表面比其在中性表面变形的相对弧长和相对润湿长度值亦更大。而当液滴附着于疏水性固体表面时, 液滴则会在剪切作用下脱离固体表面; 在相同的毛细数下, 载表面活性剂液滴相对于纯净液滴先脱离固体表面且移动速度更快。研究结果表明可溶性表面活性剂的存在会对液滴剪切运动和变形产生较大影响, 其可以促进液滴的变形, 增大液滴的移动速度。本文的数值方法可用于计算载有可溶性表面活性剂液滴的移动接触线问题。

关键词: 相场法; 格子玻尔兹曼方法; 可溶性表面活性剂; 剪切; 液滴

中图分类号: O359+1

文献标志码: A

Phase-field lattice Boltzmann method simulation of shear dynamic behavior of surfactant-laden droplets

CHEN Tao¹, YAO Liping¹, ZHANG Liangqi², ZENG Zhong², XIE Shouyong¹

(1. College of Engineering and Technology, Southwest University, Chongqing 400715, P. R. China; 2. College of Aerospace Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, P. R. China)

Abstract: Surfactants can reduce the surface tension of fluid interfaces and significantly alter the wetting properties of solid surfaces, making them widely used in industrial production. In order to investigate the motion characteristics of surfactant-laden droplets on solid surfaces, a mixed model incorporating soluble surfactant flow and contact line dynamics was established based on the Cahn-Hilliard phase field lattice Boltzmann method, and the Yokoi dynamic contact angle model considering the speed of three-phase contact line movement obtained from experiments. A computational program was independently developed based on the governing equations, and parallel processing was used to improve computational efficiency. Subsequently, the dynamic process of droplets under linear shear was studied, and the influence of the effective capillary number (Ca_e) and the solid surface wettability on the deformation of clean droplets and surfactant-laden droplets was analyzed. The results show that the increase of the effective capillary number (Ca_e) promotes droplet deformation, but when it reaches a certain value, the droplet will rupture. While, surfactant-laden droplets exhibit the greater deformation and the movement speed compared to pure droplets.

收稿日期: 2023-11-16

基金项目: 国家自然科学基金(12172070, 12102071); 重庆市科技局直通车项目(CSTB2022BSXM-JCX0086)。

Supported by National Natural Science Foundation of China (12172070, 12102071) and Chongqing Doctoral Through Train Program (CSTB2022BSXM-JCX0086).

作者简介: 陈涛(1997—)男, 硕士研究生, 主要研究方向为格子玻尔兹曼方法的研究与应用, (E-mail)chentaoswu@126.com。

通信作者: 姚丽萍(1983—)女, 博士, 副教授, (E-mail)lpyao@swu.edu.cn。

When droplets are attached to hydrophilic solid surfaces, they are further elongated under shear, exhibiting longer relative arc length and relative wetting length compared to neutral surfaces, while surfactant-laden droplets have longer relative arc length and relative wetting length compared to pure droplets. However, when droplets are attached to hydrophobic solid surfaces, they will detach from the solid surface under shear, and surfactant-laden droplets detach earlier than pure droplets. The research results indicate that the presence of soluble surfactants has a significant impact on the shear motion of droplets, promoting droplet deformation and increasing droplet movement speed. The numerical methods used in this study can be applied to calculate the moving contact line problem of droplets with soluble surfactants.

Keywords: phase-field method; lattice Boltzmann method; soluble surfactants; shear; droplets

液滴在固体表面上的运动在工业^[1]、农业^[2]和医学^[3]等方面应用广泛,研究其运动特性具有重要的科学和实用价值。引入表面活性剂能够显著改变固体表面润湿性,这引起了学者们的广泛关注^[4-9]。界面上表面活性剂的存在会改变局部的表面张力,表面活性剂浓度分布不均会导致不均匀的表面张力并诱发 Marangoni 应力,这使得液滴的形态变化更为复杂,进而影响整个流场的分布,而表面活性剂的浓度分布在流场的作用下也会产生相应变化。如何合理描述载有表面活性剂液滴的变形行为成为当下的热点问题^[4]。

当前,采用理论与实验方法在获取流场分布、界面上的动力学特性以及表面活性剂浓度分布情况等方面具有一定难度,而数值模拟可以完整地获得上述信息,可为载有表面活性剂液滴在固体表面上的运动特性提供一种描述方式^[10]。格子玻尔兹曼方法(lattice Boltzmann method, LBM)的介观描述方式使其既能够考虑部分微观运动的细节影响,又可以获得宏观尺度上的流动行为^[11-12],这一优势极大地推动了其在界面流动研究中的应用。当前已经发展了几种多相流模型,并被用于负载活性剂情况下的模拟,如颜色梯度模型^[13],伪势模型^[14],自由能模型^[15]和相场(phase field, PF)模型^[16-17]。相场模型是一种扩散界面方法,该模型引入具有一定厚度的界面来描述界面上的动力学行为,相比其他多相流方法,相场法能够将尖锐、不连续的界面变化连续的描述出来,并实现对界面上物理参数变化的捕捉。基于以上优势,耦合相场法的格子玻尔兹曼方法(PF-LBM)在描述复杂多相流流体动力学现象时越来越被重视。

基于 Allen-Cahn(A-C)相场框架,Liang 等^[18]提出了一种 LBM 用于模拟不混溶二元流体在固体表面上的接触线运动,并对比了几何润湿边界模型与立方表面能润湿边界条件,发现两者在中等角度下具有相似的精度,且几何润湿边界对计算三相接触线位置有更高的精度。Zhang 等^[19]在 Liang 等^[18]的工作基础上发展了 A-C 相场多松弛时间因子 LBM 模型,在几何润湿边界条件下发展了 2 种与 lattice Boltzmann (LB)模型对应的润湿边界格式,计算了理想固体表面上的液滴铺展、毛细侵入和非理想固体表面的剪切运动,研究了具有大密度比二元流体的接触线运动和接触角滞后。基于守恒相场 LBM,Chen 等^[20]研究了在具有非均匀表面润湿性的微流体通道中流动的液-液分散体的动力学和稳定性,并对其进行了三维模拟。基于 Cahn-Hilliard(C-H)方程的相场理论,Zong 等^[21]提出了一种改进的 LBM,研究了载有可溶性表面活性剂液滴置于流场正中间的静态液滴问题,单液滴剪切问题和双液滴剪切问题,该方法能够有效的捕捉液滴的拓扑变化。Zhu 等^[22]针对含有可溶性表面活性剂的两相体系,建立了相场移动接触线模型,并研究了二维和三维液滴在固体表面的铺展行为。

同时,对于移动接触线问题,学者们在接触角的合理描述上做出了大量的研究^[23-29]。在动态润湿中接触角会受到接触线速度的影响,Yokoi 等^[23]结合实验提出了一种优化动态接触角模型,李家宇等^[30]将其应用于模拟液滴撞击铺展问题上,所得计算结果与实验结果吻合较好。该模型尚未应用于载有表面活性剂液滴剪切行为研究中。笔者采用耦合相场和 LBM (PF-LBM),对线性剪切作用下载有可溶性活性剂液滴的剪切动力学行为进行研究。首先,结合表面活性剂浓度对流扩散方程,流体力学基本控制方程和基于相场模型的界面演化方程,引入 Yokoi 等^[23]提出的动态接触角模型描述移动接触线,完善描述液滴在固体表面剪切行为的理论模型;然后,基于上述理论模型,发展相应的 LBM 两相流动数值方法并完成程序自主开发;最后,系统研究了有效毛细数 Ca_e 和固体表面润湿性对载有可溶性表面活性剂液滴剪切行为的影响。

1 理论模型和数值方法

LBM 具有高效的计算效率和易并行等优点, PF 方法也已经被证明可以捕捉复杂的界面变化, 两者的结合可实现对复杂界面变形的捕捉。因此, 这里采用 LBM 和 PF 方法, 研究可溶性表面活性剂在固体表面的线性剪切行为, 物理模型如图 1 所示。相应的 PF-LBM 模型、润湿边界条件和表面活性剂吸附方程, 动态接触角模型等展开如下。

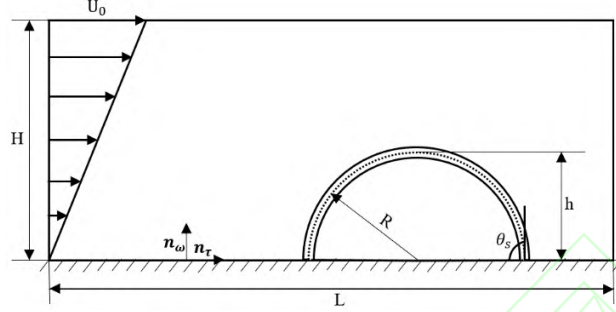


图 1 固体表面上液滴受线性剪切问题示意图

Fig. 1 Illustration of droplets on solid surfaces undergoing linear shear

1.1 PF-LBM

在两相相场方法中, 相参数 C_A 和 C_B 分别代表不同的流体, 一相取 1 则另一相取 -1, 两相界面参数取值范围为 $-1 < C < 1$ 。这里所使用的 LB 模型为单松弛时间因子 D2Q9 模型。在该模型中, 速度离散成 9 个均匀分布的分量, 其速度配置为

$$\xi_\alpha = \begin{cases} (0,0), & \alpha = 0, \\ (\pm 1, 0)c, (0, \pm 1)c, & \alpha = 1 \sim 4, \\ (\pm 1, \pm 1)c, & \alpha = 5 \sim 8, \end{cases} \quad (1)$$

式中: $c = dx/dt$, dx , dt 分别为网格尺寸和时间步长, 常取 x 方向和 y 方向的网格尺寸相同, 即 $dx = dy = 1$ 。

各方向的权系数为:

$$\omega_\alpha = \begin{cases} 4/9, & \alpha = 0, \\ 1/9, & \alpha = 1 \sim 4, \\ 1/36, & \alpha = 5 \sim 8. \end{cases} \quad (2)$$

宏观流场中流体的质量守恒和动量守恒方程:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\rho \nu [\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T]) + \mathbf{F}, \quad (4)$$

式(3)(4)中: \mathbf{u} 代表流体的速度, ρ 为流体的密度, p 表示流体动力学压力, ν 为流体的运动学黏度, 源项 $\mathbf{F} = \mathbf{F}_s + \mathbf{F}_g$, \mathbf{F}_g 为重力, \mathbf{F}_s 为体相区界面力^[31-32],

$$\mathbf{F}_s = \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_\Gamma + \delta_\Gamma (\nabla \sigma - \sigma \mathbf{n} (\nabla \cdot \mathbf{n})). \quad (5)$$

式中: κ 为界面曲率, $\delta_\Gamma = \frac{6\sqrt{2}\varepsilon}{|C_A - C_B|^3} |\nabla C|^2$ 为 Dirac 函数, $\mathbf{n} = \frac{\nabla C}{|\nabla C|}$ 为法向单位矢量。式右端第 1 项为法向界面张力, 后 2 项为切向的 Marangoni 应力。势形式的表面张力可表示为^[21]

$$\mathbf{F}_s = \alpha [|\nabla C|^2 \nabla \sigma - \nabla \sigma \cdot \nabla C \nabla C + \frac{\sigma}{k} \mu_C \nabla C], \quad (6)$$

式中, $\alpha = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{k}{2\beta}}$ 。

相参数 C 和表面活性剂浓度 ψ 的分布随时间 t 的演化由 2 个对流 C-H 方程控制,

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{u}) = \nabla \cdot M_C \nabla \mu_C, \\ \mu_C = 4\beta(C^3 - C) - k\nabla^2 C, \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi\mathbf{u}) = \nabla \cdot M_\psi \nabla \mu_\psi, \\ \mu_\psi = k_b T \ln \frac{\psi}{1-\psi} - \beta(C^2 - 1)^2 + \frac{W}{2} C^2, \end{cases} \quad (8)$$

式(7)(8)中: M_C 代表相参数的迁移率, μ_C 代表相参数对应的化学势, ψ 代表表面活性剂浓度, M_ψ 代表表面活性剂的迁移率, μ_ψ 代表表面活性剂对应的化学势。这里假设表面活性剂在 2 种流体中溶解度相同^[21, 31, 33], 对自由能泛函数 $F(C) = \int_{\Omega} (F_C + G_{C,\psi}) d\Omega$ 进行变分处理得到 2 个化学势的计算公式, 其中 T 为绝对温度, k_b 与 W 为 2 个自由参数, $k_b T$ 与 W 存在转化关系: $k_b T = 4\beta P_i$, $W = (4\beta)/E_x$ 。 β 和 k 与界面厚度 D 和纯净的界面张力 σ_0 相关:

$$D = \frac{1}{C_A - C_B} \sqrt{\frac{8k}{\beta}}, \quad (9)$$

$$\sigma_0 = \frac{|C_A - C_B|^3}{6} \sqrt{2k\beta}, \quad (10)$$

式(9)(10)中: C_A 为液滴的相参数, C_B 为环境流体的相参数。

为了求解不可压 Navier-Stokes 方程和 2 个相场 Cahn-Hilliard 方程, 分别用分布函数 f_α 追踪流场, 分布函数 g_α 追踪相界面, h_α 追踪表面活性剂浓度, 其演化方程为:

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \xi_\alpha dt, t + dt) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + dt F_\alpha(\mathbf{x}, t), \quad (11)$$

$$g_\alpha(\mathbf{x} + \xi_\alpha dt, t + dt) - g_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} [g_\alpha(\mathbf{x}, t) - g_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + dt G_\alpha(\mathbf{x}, t), \quad (12)$$

$$h_\alpha(\mathbf{x} + \xi_\alpha dt, t + dt) - h_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_h} [h_\alpha(\mathbf{x}, t) - h_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + dt H_\alpha(\mathbf{x}, t), \quad (13)$$

式(11)~(13)中: $\mathbf{x} = (x, y, z)$ 是控制位置矢量; $F_\alpha(\mathbf{x}, t)$, $G_\alpha(\mathbf{x}, t)$ 和 $H_\alpha(\mathbf{x}, t)$ 分别为源项分布函数; τ_f , τ_g 和 τ_h 分别为三组控制方程中的松弛时间, 其与流场中流体运动黏度 ν , 相参数迁移率 M_C 和表面活性剂迁移率 M_ψ 的关系为 $\nu = c_s^2(\tau_g - 0.5)dt$, $M_C = \eta_1 c_s^2(\tau_f - 0.5)dt$, $M_\psi = \eta_2 c_s^2(\tau_h - 0.5)dt$ 。 $f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$, $g_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ 和 $h_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ 分别为其局部平衡态分布函数^[34]:

$$f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} \frac{p}{c_s^2}(\omega_\alpha - 1) + \rho s_\alpha(\mathbf{u}), & \alpha = 0, \\ \frac{p}{c_s^2}\omega_\alpha + \rho s_\alpha(\mathbf{u}), & \alpha \neq 0, \end{cases} \quad (14)$$

$$g_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} C + (\omega_\alpha - 1)\eta_1 \mu_C, & \alpha = 0, \\ \omega_\alpha \eta_1 \mu_C + \omega_\alpha \frac{\xi_\alpha \cdot (\partial(C\mathbf{u})/\partial t)}{c_s^2}, & \alpha \neq 0, \end{cases} \quad (15)$$

$$h_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} \psi + (\omega_\alpha - 1)\eta_2 \mu_\psi, & \alpha = 0, \\ \omega_\alpha \eta_2 \mu_\psi + \omega_\alpha \frac{\xi_\alpha \cdot (\partial(C\mathbf{u})/\partial t)}{c_s^2}, & \alpha \neq 0, \end{cases} \quad (16)$$

式(14)(15)中: $c_s = c/\sqrt{3}$ 为格子声速; η_1 为调节相参数迁移率 M_C 的自由参数; η_2 为调节表面活性剂迁移率 M_ψ 的自由参数。

$$s_\alpha(\mathbf{u}) = \omega_\alpha \left[\frac{\xi_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\xi_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right] \quad (17)$$

为实现对相界面的准确捕捉和保证表面活性剂控制方程的正确恢复, 应在式(11)~(13)中设置合适的源项^[21, 34]:

$$F_\alpha = (1 - \frac{1}{2\tau_f})\omega_\alpha [\mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \frac{\xi_\alpha \cdot \mathbf{F}}{c_s^2} + \frac{u \nabla \rho \cdot (\xi_\alpha \xi_\alpha - c_s^2 \mathbf{I})}{c_s^2}], \quad (18)$$

$$G_\alpha = (1 - \frac{1}{2\tau_g})\omega_\alpha \frac{\xi_\alpha \cdot (\partial(C\mathbf{u})/\partial t)}{c_s^2} \quad (19)$$

$$H_\alpha = (1 - \frac{1}{2\tau_h})\omega_\alpha \frac{\xi_\alpha \cdot (\partial(\psi\mathbf{u})/\partial t)}{c_s^2}. \quad (20)$$

在 LBM 中, 宏观量可以通过对分布函数求矩获得。对分布函数 g_α 和 h_α 求零阶矩可以得到相参数 C 以及表面活性剂浓度 ψ 的值:

$$C = \sum_\alpha g_\alpha, \quad (21)$$

$$\psi = \sum_\alpha h_\alpha. \quad (22)$$

流体的密度通过对相参数进行线性插值得到

$$\rho = \frac{C - C_B}{C_A - C_B} (\rho_A - \rho_B) + \rho_B, \quad (23)$$

式中: ρ_A 为液滴的密度, ρ_B 为环境流体的密度。

为耦合外力的影响, 宏观速度由以下方程计算:

$$\rho \mathbf{u} = \sum_\alpha \xi_\alpha f_\alpha + 0.5 dt \mathbf{F}. \quad (24)$$

压力的计算方法^[35]:

$$p = \frac{c_s^2}{1 - \omega_0} [\sum_\alpha f_\alpha + 0.5 dt \frac{C - C_B}{C_A - C_B} \mathbf{u} \cdot \nabla C + \rho s_0(\mathbf{u})] \quad (25)$$

文中时间导数通过显式欧拉格式离散, 梯度项采用二阶各向同性中心差分离散:

$$\partial_t(X) = \frac{X(t) - X(t - dt)}{dt} \quad (26)$$

$$\nabla X(x) = \sum_{\alpha \neq 0} \frac{\omega_\alpha \xi_\alpha X(x + \xi_\alpha dt)}{c_s^2 dt} \quad (27)$$

$$\nabla^2 X(x) = \sum_{\alpha \neq 0} \frac{2\omega_\alpha [X(x + \xi_\alpha dt) - X(x)]}{c_s^2 dt^2} \quad (28)$$

式中: X 表示运用运算符的任意变量, x 是对应的自变量。

1.2 润湿边界条件

液滴在固体表面的润湿性通过液滴的几何形态表现。学者们大都采用的润湿边界条件主要有几何润湿边界条件和立方表面能润湿边界条件 2 种模型^[18, 29, 36]。几何润湿边界条件模型不需要在边界处施加虚拟层易于实现, 并且精度与立方表面能模型相似^[18]。在本文中, 亦采用几何润湿边界条件。

计算域 (如图 1 所示) 左右两侧为周期边界, 上下两侧为无滑移边界, 物理边界条件如下:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \partial_n C = 0, \quad \partial_n \psi = 0, \quad \partial_n \mu_C = 0, \quad \partial_n \mu_\psi = 0. \quad (29)$$

计算域下侧的固体表面上, 相界面与固体表面间形成的角度可通过几何公式处理:

$$\mathbf{n}_\omega \cdot \nabla C = -\tan(\frac{\pi}{2} - \theta) |\mathbf{n}_\tau \cdot \nabla C|. \quad (30)$$

式中, \mathbf{n}_ω 表示垂直于固体表面的单位向量, \mathbf{n}_τ 表示与固体表面相切的单位向量, θ 表示三相接触线处的静态接触角。

将式(30)离散后可以得到:

$$\frac{C(x, 1) - C(x, 0)}{dx} = -\tan(\frac{\pi}{2} - \theta) |\mathbf{n}_\tau \cdot \nabla C|. \quad (31)$$

式(31)中固壁上的切向分量 $\mathbf{n}_\tau \cdot \nabla C$ 可通过二阶外推方案得到^[18]:

$$\mathbf{n}_\tau \cdot \nabla C = \frac{\partial C(x, 1/2)}{\partial x} = 1.5 \frac{\partial C(x, 1)}{\partial x} - 0.5 \frac{\partial C(x, 2)}{\partial x}. \quad (32)$$

式(32)中右侧的导数由二阶中心差分近似得到:

$$\frac{\partial C(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial C(x+1, y) - \partial C(x-1, y)}{2\partial x}. \quad (33)$$

边界条件处理格式直接决定计算的精度和稳定性。文中左右两侧采用周期边界格式, 上下两侧采用非平衡态外推边界格式^[37]。周期边界假定流体粒子从一侧边界离开流场时, 在下一时间步从对应的另一侧边界重新进入流场。例如在 x 方向上流动的周期为 N , 其边界格式为:

$$f_\alpha(0, y, z, t + dt) = f'_\alpha(N, y, z, t + dt), \quad (34)$$

$$f_\alpha(N, y, z, t + dt) = f'_\alpha(0, y, z, t + dt). \quad (35)$$

非平衡态外推格式将边界节点上的分布函数分成平衡态部分和非平衡态部分, 其中平衡态部分通过构造一个平衡态分布函数近似, 非平衡态的部分则根据相邻格点的信息通过插值法获得, 即

$$f_\alpha(N, y, t) = f_\alpha^{(eq)}(N, y, t) + f_\alpha(N - dx, y, t) - f_\alpha^{(eq)}(N - dx, y, t) \quad (36)$$

式中: 右端第 1 项为平衡态部分; $f_\alpha(N - dx, y, t) - f_\alpha^{(eq)}(N - dx, y, t)$ 为非平衡态部分。当采用相邻 2 个节点计算时, 该格式具有二阶精度, 具有较好的数值稳定性。

1.3 状态方程

表面活性剂的存在会降低两相流体间的界面张力。本文中使用 Gibbs 吸附方程并假定该模型满足 Langmuir 等温线, 相应的无量纲状态方程为^[38]:

$$\sigma(\psi) = \sigma_0[1 + \beta_s \log(1 - \psi)], \quad (37)$$

式中: $\sigma(\psi)$ 表示载有活性剂时的表面张力, σ_0 表示纯净液滴的表面张力, β_s 表示表面活性剂浓度 ψ 对界面张力 σ 影响程度的弹性系数。

1.4 动态接触角

接触线移动会改变接触角, 式(30)中的静态接触角 θ 变为动态接触角 θ_d 。最近, Hoffmann 函数^[27]已经被许多学者用于动态接触角模拟^[30, 39-41], 该模型考虑到接触线移动速度 u_{cl} 对接触角的影响。基于该模型 Yokoi 等^[23]结合实验提出了一种改进的动态接触角模型。在该模型中, 当三相接触线移动速度 $u_{cl} > 0$ 时, 接触角倾向于最大前进角 θ_{mad} ; 当 $u_{cl} < 0$ 时, 接触角倾向于最小后退角 θ_{mdr} ,

$$\theta_d = \begin{cases} \min \left\{ \theta_s + \left(\frac{Ca_{cl}}{k_a} \right)^{\frac{1}{3}}, \theta_{mad} \right\}, & \text{if } u_{cl} > 0, \\ \max \left\{ \theta_s + \left(\frac{Ca_{cl}}{k_r} \right)^{\frac{1}{3}}, \theta_{mdr} \right\}, & \text{if } u_{cl} < 0, \end{cases} \quad (38)$$

式中: $Ca_{cl} = \nu_A u_{cl} / \sigma_{cl}$ 为三相接触线处的局部毛细数, ν_A 是液滴黏度, k_a 和 k_r 分别为前进和后退的变化系数, σ_{cl} 接触线处气液界面表面张力。表面张力 σ_{cl} 是影响动态接触角的一个关键因素, 表面活性剂会降低表面张力, 从而使得三相接触线处的局部毛细数 Ca_{cl} 增大, 进而影响动态接触角的变化。本文中, 取 $\theta_{mad} = 114^\circ$, $\theta_{mdr} = 77^\circ$, $k_a = 9.0 \times 10^{-9}$, $k_r = 9.0 \times 10^{-8}$ 。

移动接触线速度是动态接触角的另一个重要影响因素。由于采用无滑移边界条件, 即边界上速度为 0, 故采用接触线附近单元点的速度值 u_{cell} 来代替接触线的速度^[38]:

$$u_{cl} = (\mathbf{I} - \mathbf{n}_\omega \mathbf{n}_\omega) \cdot \mathbf{u}_{cell} \cdot \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{n}_\omega \mathbf{n}_\omega) \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{I} - \mathbf{n}_\omega \mathbf{n}_\omega| \cdot \mathbf{n}}. \quad (39)$$

1.5 相关参数取值与初始条件

本文计算中, 参数 $\eta_1 = \eta_2 = 1$, 迁移率 $M_C = M_\psi = 1$, 界面厚度 $D = 4$, 表面活性剂弹性系数 $\beta_s = 0.5$, 无量纲参数 $Pi = 1.35$, $E_x = 0.117$, 黏度 $\nu_A = \nu_B = 1$, 密度 $\rho_A = \rho_B = 1$, 相 C 与密度 ρ 的初始分布为:

$$C(x, y) = \frac{C_A + C_B}{2} + \frac{C_A - C_B}{2} \tanh \frac{2[R - \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}]}{D}, \quad (40)$$

$$\rho(x, y) = \frac{\rho_A + \rho_B}{2} + \frac{\rho_A - \rho_B}{2} \tanh \frac{2[R - \sqrt{(x-x_c)^2 + (y-y_c)^2}]}{D} \quad (41)$$

式中: x_c, y_c 表示液滴的几何中心坐标。表面活性剂浓度的初始分布为

$$\psi(x) = \frac{\psi_0}{\psi_0 + \psi_c(1 - \psi_0)}, \quad (42)$$

式中: ψ_0 为体相区表面活性剂浓度, 辅助变量 $\psi_c = \exp \frac{1}{2k_b T} (C^2 - 1)[2\beta(1 - C^2) + W]$, 无量纲参数 $k_b T$ 与 W 存在转换关系^[30]: $k_b T = 4\beta W$, $W = (4\beta)/E_x$ 。

为表征液滴的行为, 引入了以下几个无量纲参数: 雷诺数 Re , 毛细数 Ca 和 Pe 数, 其中毛细数描述了黏性力与表面张力的比值, 黏性力试图使液滴产生变形, 而表面张力的作用是维持液滴形态。毛细数越高表明粘滞力对液滴运动的影响越大, 液滴变形亦越大。

$$Re = \frac{\gamma R h}{\nu_A}, \quad Ca = \frac{\rho_A \nu_A \gamma h}{\sigma_0}, \quad Pe = \frac{\gamma R h}{M_\psi} \quad (43)$$

式中: R 是液滴的初始半径; h 是液滴高度; U_0 是施加的剪切速度; ν_A 是液滴动态黏度; γ 是剪切速率 ($\gamma = U_0/2R$)。

2 程序可靠性和网格有效性验证

2.1 程序可靠性验证

为验证所开发程序的可靠性, 首先, 计算了静置在环境流场中的静态液滴, 将所得结果与式(42)进行定量比较; 然后, 重复了放置于环境流场中的液滴受上下两侧剪切作用时液滴的变形问题, 并与前人的工作^[21]进行对比。2个模型的示意图如图2所示。

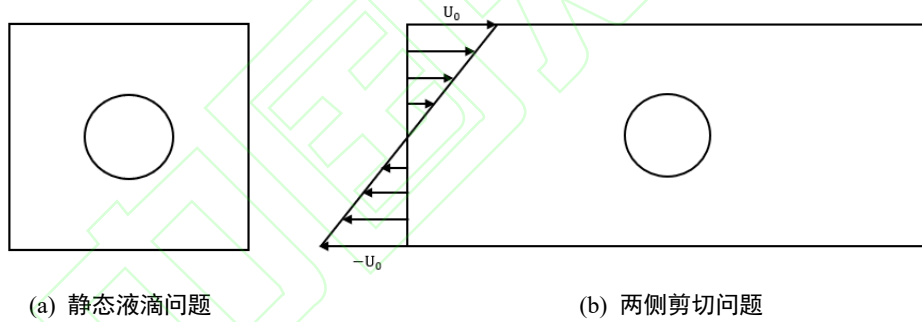


图2 验证模型示意图

Fig. 2 Verification model diagram

2.1.1 静态液滴计算

静态液滴问题中, 半径 $R = 60$ 的圆形液滴被放置在流场中间, 流场计算网格取 250×250 , $\sigma_0 = 0.001$ 。当表面活性剂浓度分别取 0.3, 0.5 和 0.7 时, 所得到的表面活性剂浓度分布与式(42)的对比如图3所示。从图3中可以看出, 不同表面活性剂浓度条件下, 采用所开发程序获得的计算结果与理论解吻合较好, 结果表明所开发程序具有较高可靠性。

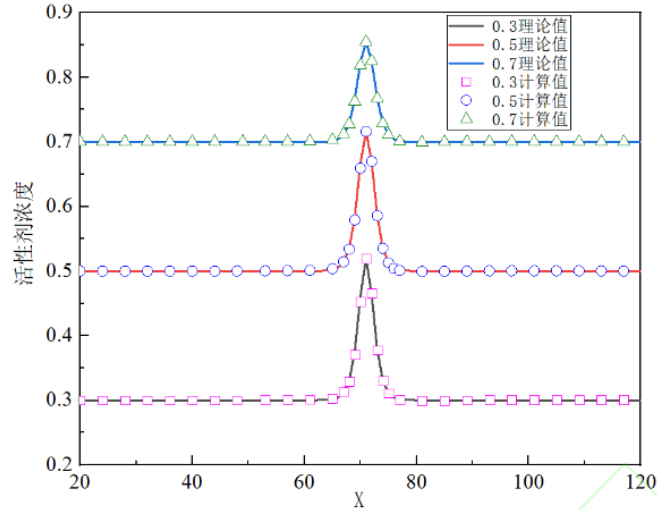
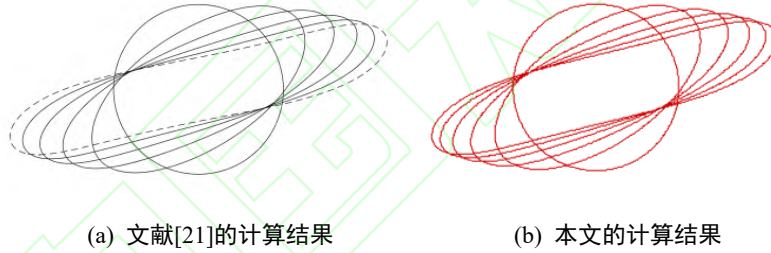


图3 表面活性剂浓度计算值与式(42)理论值对比

Fig.3 Comparison of the calculated value of surfactant concentration with the theoretical value from Equation (42)

2.1.2 对向剪切问题

本文计算得到载表面活性剂液滴在受剪切作用下的变形如图 4(b)所示,文献[21]的计算结果如图 4(a)所示。从图 4(a)中可以看出,在上下侧剪切作用下,液滴逐渐被拉长为椭圆形,本文所得到计算结果与文献[21]的结果基本一致,结果亦表明本文所开发程序的可靠性。网格取 500×200 ,半径 50;其余参数设置为: $Re = 0.1$, $\psi_0 = 0.1$, $U_0 = 0.1$, $Ca = 0.3$ 。



(a) 文献[21]的计算结果

(b) 本文的计算结果

图4 单液滴双侧剪切对比图

Fig.4 Comparison graph of single droplet double-sided shear

2.2 网格有效性验证

网格质量会影响数值计算结果的准确性,有必要对网格进行有效性验证。计算中,相关参数取 $Re = 1$, $Pe = 5$, $Ca_e = 0.15$, $\psi_0 = 0.01$ 。网格大小 $L \times H = 11.2R \times 2R$,其中半径 R 分别取 25, 50, 65。为了定量描述液滴的变形量,引入稳定弧长 S 。在表 1 中, S_0 表示液滴初始弧长, ψ_{\max} 为最大表面活性剂浓度。

由表 1 可知, $R=50$ 与 $R=65$ 时弧长归一化的相对误差小于 1%,而移动接触线速度归一化结果与 ψ_{\max} 的相对误差为 3.5%左右。综合考虑计算效率与精度,选择 $R=50$ 的网格量。

表 1 不同网格大小的稳态结果

Table 1 Steady-state results for different grid sizes

网格大小	S/S_0	u_{cl}/u_0	ψ_{\max}
$L \times H = 280 \times 50$	1.049 01	0.101 13	0.323 935
$L \times H = 560 \times 100$	1.101 30	0.105 06	0.361 865
$L \times H = 728 \times 120$	1.102 98	0.108 92	0.382 245

3 结果和讨论

基于以上验证,进一步系统调查了附着在固体表面上的液滴受线性剪切作用的动态特性,分析了有效毛

细数 Ca_e 和固体表面润湿性对液滴运动和变形的影响。在计算中取 $Re = 1$, $Pe = 5$, $\sigma_0 = 0.004$ 。

3.1 Ca_e 对液滴变形的影响

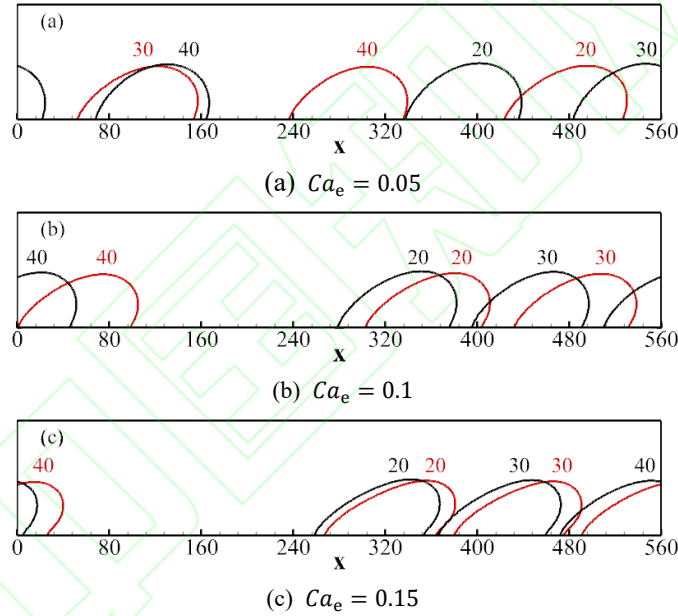
为了排除表面活性剂的存在降低界面张力使毛细数增大的影响, 需要定义有效毛细数 Ca_e 。而在线性剪切的问题中, 相同表面张力的条件下, 剪切速度是液滴变形的关键影响因素之一。其与有效毛细数 Ca_e 的关系可表示为:

$$Ca_e = \frac{v_A \gamma R}{\sigma_0 [1 + \beta_s \log(1 - \psi_0)]} = \frac{Ca}{1 + \beta_s \log(1 - \psi_0)} \quad (44)$$

为了明确剪切速度对液滴剪切行为的影响, 对比研究了不同有效毛细数情况下的纯净液滴和载活性剂液滴运动形态。液滴以 $\theta_s = 90^\circ$ 的初始接触角置于固体表面上, 表面活性剂浓度 $\psi_0 = 0.01$, 有效毛细数的范围 $Ca_e = 0.05 \sim 0.2$ (增量为 0.025)。干净液滴和载活性剂液滴的形态结构均会随着有效毛细数的增加而产生转变: Ca_e 较小时, 液滴受剪切作用逐渐变形并最终达到稳定的形态, 之后以恒定速度在固体表面或流场中移动; Ca_e 较大时, 液滴受剪切作用将会产生破裂。

3.1.1 Ca_e 较小时

$Ca_e = 0.05, 0.1, 0.15$ 的条件下, 液滴在固体表面上的形态变化过程如图 5 所示。从图 5 中可以看出, 在剪切作用下, 纯净液滴和载活性剂的液滴均朝着剪切方向变形和移动, 且均随着 Ca_e 的增大其变形也逐渐增大。但是与纯净液滴相比, 载有活性剂液滴的变形更大, 滑动速度更快。



注: 黑色表示纯净液滴, 红色表示载活性剂液滴

图 5 不同 Ca_e 下液滴在无量纲时间分别为 20、30、40 时在固体表面上滑动示意图

Fig.5 Schematic of droplet sliding on a solid surface at nondimensional times of 20, 30, and 40 for different values of Ca_e

图 6 显示了 Ca_e 分别取 0.05, 0.1, 0.15 的条件下, 无量纲时间 30 时的活性剂浓度分布。从图 6 中可以看出, 在线性剪切的作用下, Ca_e 越大液滴的变形也越大; 同时, 表面活性剂从液滴左侧向液滴右侧边缘聚集, 随着 Ca_e 的增大朝着剪切速度方向移动得更快, 聚集的表面活性剂更多, 使得液滴右侧表面活性剂浓度较高, 而更高的活性剂浓度使得表面张力更小, 使得液滴更容易被拉长变形。

为更深入了解液滴的变形特性, 对不同 Ca_e 条件下纯净液滴与载活性剂液滴的相对弧长进行定量对比分析。相对弧长 $S_r = (S - S_0)/S_0$, S_0 是液滴的初始弧长, 显然 S_r 越大则液滴变形程度越大。图 6(a)为不同 Ca_e 下纯净液滴与载活性剂液滴的相对弧长的对比曲线图。从图中可以看出, 液滴的相对弧长随着 Ca_e 的增加单调递增, 即随着 Ca_e 的增加液滴产生更大变形, 该结论与图 5 所描述的结论一致。此外, 由于表面活性剂的作用, 载活性剂液滴的表面张力相比纯净液滴更低, 在相同的剪切作用下亦更容易变形; 同时, 在相同的剪切作用下, 载活性剂液滴亦更容易破裂。

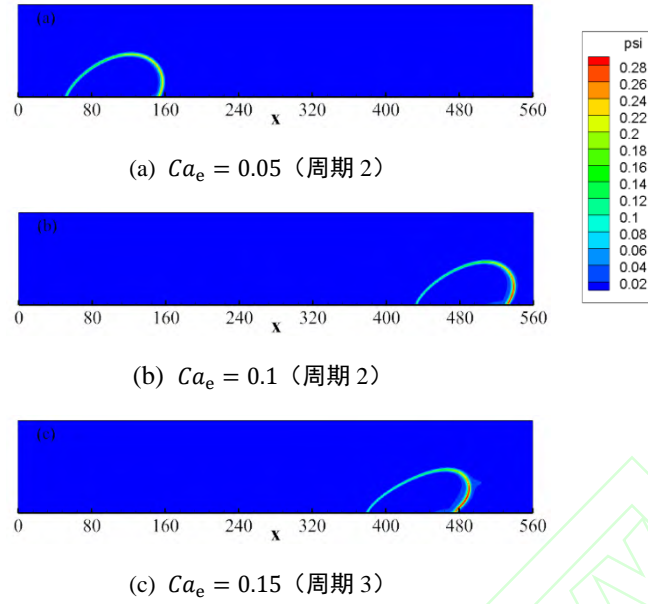
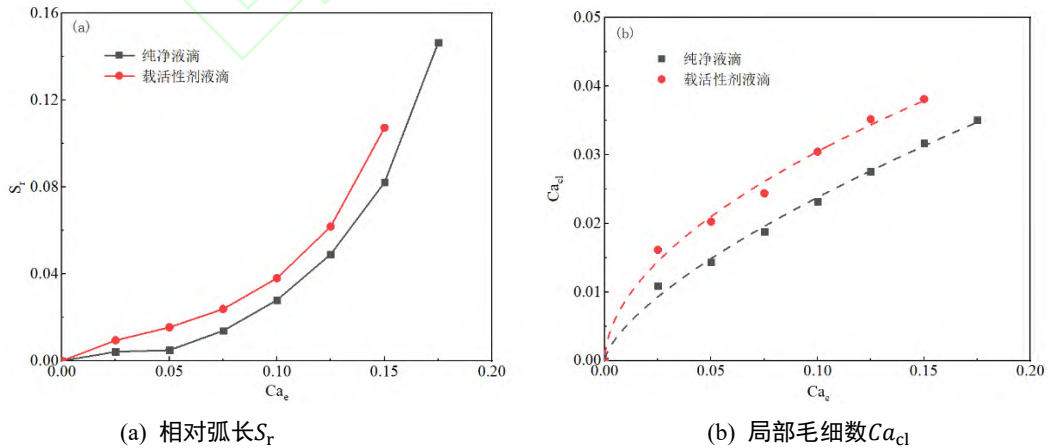


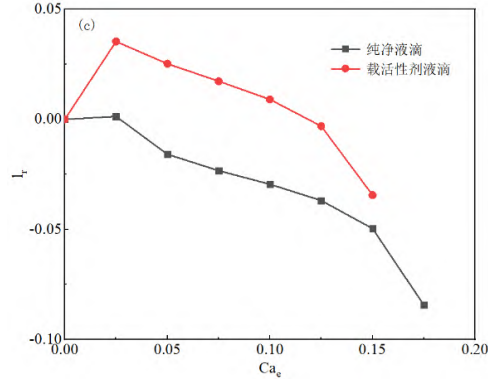
图 6 液滴在无量纲时间为 30 时表面活性剂浓度分布图

Fig.6 Surface surfactant concentration distribution of the droplet at a nondimensional time of 30

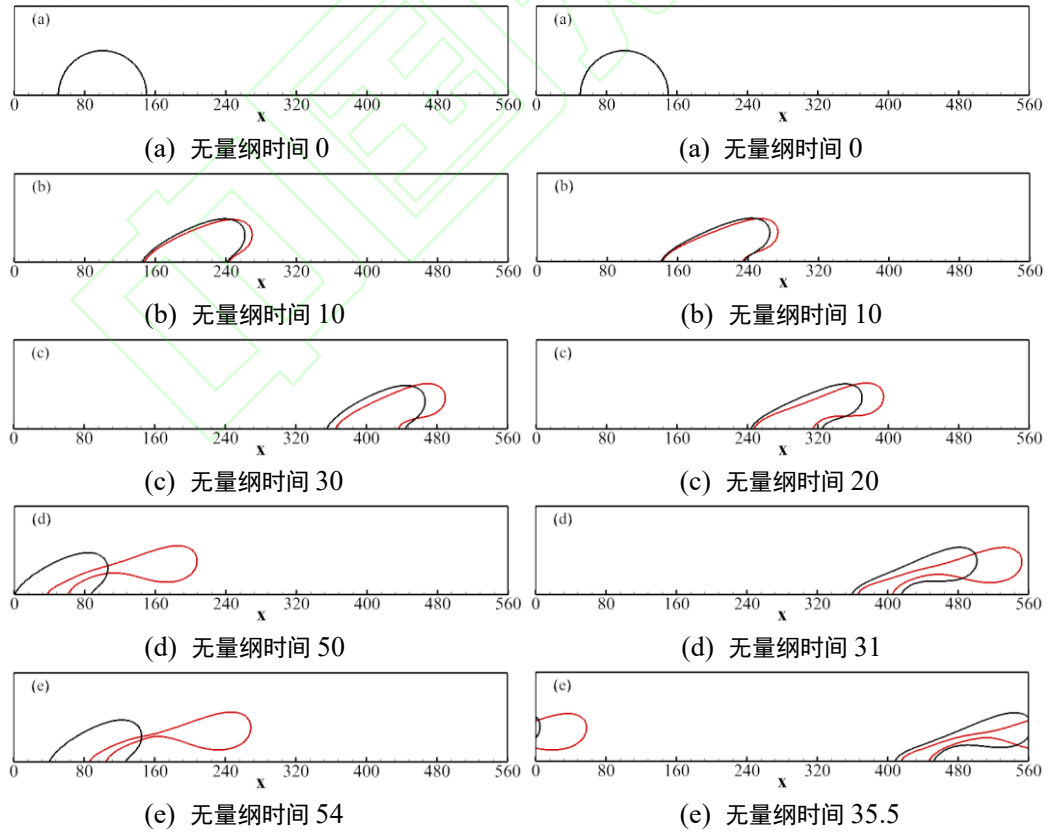
从图 7(a)可以看出, 载有活性剂液滴的变形量高于纯净液滴, 且在 $Ca_e = 0.175$ 时, 载有活性剂液滴已产生破裂。三相接触线处的局部毛细数 Ca_{cl} 是量化液滴运动与变形的一个重要参数, 其与有效毛细数 Ca_e 数的关系如图 7(b)所示。由图 7(b)可见, 纯净液滴与载活性剂液滴的局部毛细数 Ca_{cl} 均随 Ca_e 的增大近似线性递增; 并且 Ca_e 相同的条件下, 载活性剂液滴比纯净液滴的局部毛细数 Ca_{cl} 数更大。

润湿面积或长度是指液滴与固体壁面接触的面积或长度, 是反映液滴变形程度的一个重要的指标。采用相对润湿长度 l_r 来表征液滴变形, 相对润湿长度 $l_r = (l - l_0)/l_0$, 其中 l 是液滴稳定形态时的润湿长度, l_0 是液滴的润湿长度。在图 7(c)中量化了表面活性剂对润湿长度的影响, 相对润湿长度都是先增大后减小, 且载表面活性剂液滴的相对润湿长度始终比纯净液滴的大。在 $Ca_e = 0.025$ 时, 剪切作用都促进了相对润湿长度的增大, 但纯净液滴的 l_r 增大并不明显, 此后纯净液滴的相对润湿长度小于初始润湿长度, 而载活性剂液滴的相对润湿长度仍大于初始的润湿长度。随着 Ca_e 的增大相对润湿长度均单调递减。当 Ca_e 增大到液滴破碎临界值后 (如纯净液滴 Ca_e 为 0.175, 载表面活性剂 Ca_e 为 0.15) 相对润湿长度急剧减小, 表明了表面活性剂的存在会使液滴提前破裂。由于表面活性剂会降低液滴表面张力, 液滴形态更容易改变, 而聚集在液滴右侧的表面活性剂浓度高于左侧, 导致了液滴右侧的变形量和接触线移动速度更快, 所以载活性剂情况下的 S_r , Ca_{cl} 和 l_r 在相同 Ca_e 情况下始终大于纯净液滴。



(c) 相对润湿长度 l_r 图 7 纯净液滴与载活性剂液滴在不同 Ca_e 情况下物理量的对比曲线图Fig.7 Comparison curve of physical quantities between pure droplets and surfactant-laden droplets at different Ca_e values3.1.2 Ca_e 较大时

当 Ca_e 较大时, 纯净液滴与载活性剂液滴的剪切变形也随之增大, 液滴顶部会破裂出一个光滑小液滴, 随后与固体表面上残留的小液滴以稳定的形态匀速运动。但是由于载有活性剂液滴相比纯净液滴的表面张力更低, 在相同的剪切作用下, 其更容易产生拓扑结构变化。如图 8(A)所示, $Ca_e = 0.175$ 时载活性剂液滴被割裂出一个液滴, 而纯净液滴则是被拉得更长但没有破裂; 当 $Ca_e = 0.2$ 时, 2 种液滴均产生破裂, 但是载有活性剂液滴的破裂时间更早, 如图 8(B)所示, 表面活性剂在促进液滴变形占据主导地位。当 Ca_e 继续增大到 0.3 时, 如图 9 所示, 纯净液滴和载有活性剂液滴均迅速出现破裂, 变形特性与图 8(B)相似。此时, 纯净液滴和载有活性剂液滴的形变过程更加接近, 表明此时表面活性剂对液滴动态特性的影响相对于剪切速度的影响, 逐渐弱化。



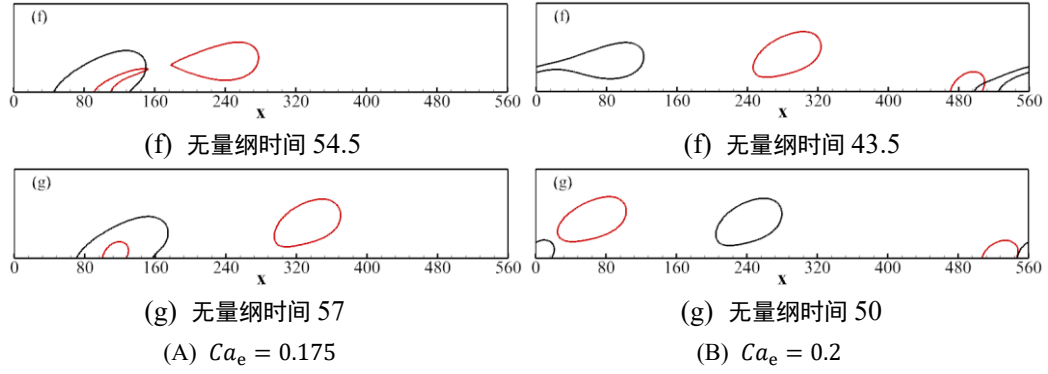
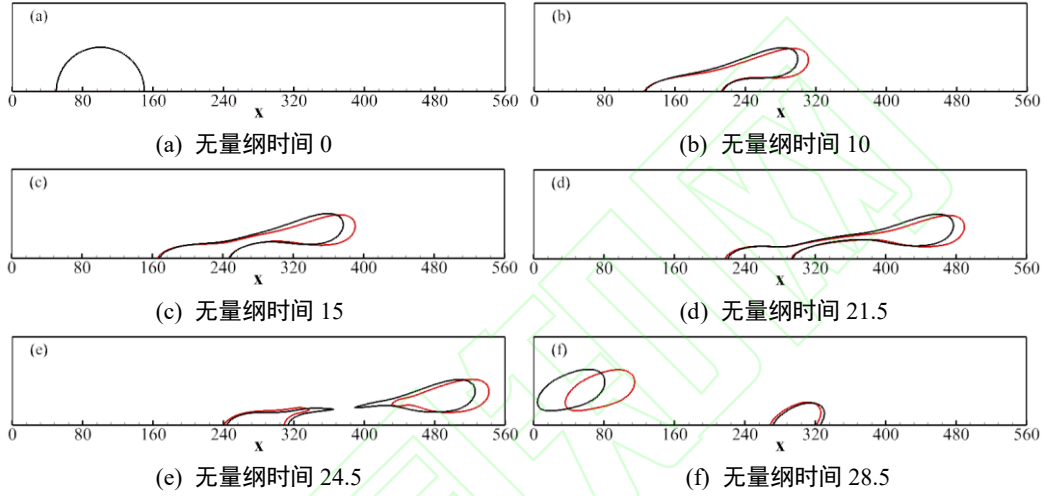


图 8 纯净液滴与载活性剂液滴的变形对比图

Fig. 8 Comparison graph of deformation between pure droplets and surfactant-laden droplets



注：黑线表示纯净液滴，红线表示载活性剂液滴

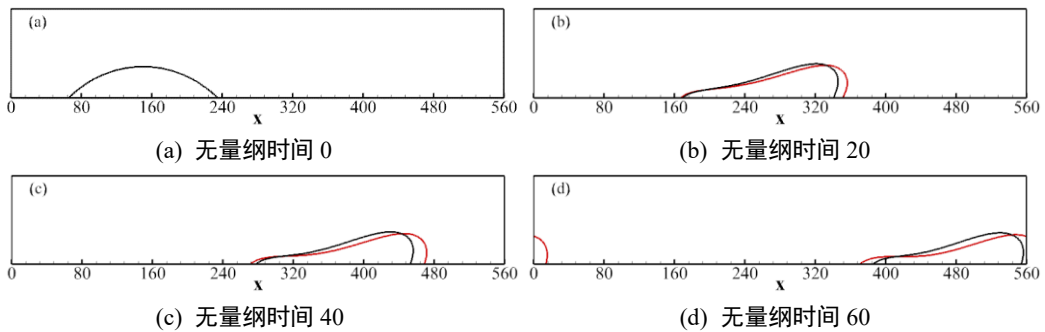
图 9 $Ca_e = 0.3$ 时纯净液滴与载活性剂液滴的变形对比图Fig.9 Comparison graph of deformation of pure droplets and surfactant-laden droplets at $Ca_e = 0.3$

3.2 固体壁面润湿性对液滴变形的影响

固体表面的润湿性是影响液滴的拓扑变化的关键因素之一。基于此，研究了纯净液滴和载活性剂液滴在亲水和疏水固体表面的剪切行为。相关参数取值： $\theta_s = 45^\circ, 135^\circ$, $Ca_e = 0.15$ 。

3.2.1 液滴在亲水表面的动态特性

图 10 为纯净液滴与载活性剂液滴在亲水表面 $\theta_s = 45^\circ$ 不同无量纲时间（0、20、40、60）下的变形对比结果。从图 10 中可以看出，不同时刻 2 种液滴的剪切变形几乎一致，载活性剂液滴比纯净液滴的相对润湿长度 l_r 的更长；载活性剂液滴左侧的接触线位置滞后于纯净液滴，而右侧则超前于纯净液滴。亲水表面上，载活性剂液滴和纯净液滴的相对弧长 S_r 分别为 0.23 和 0.13，大于中性表面上的 0.05 和 0.03，相对润湿长度 l_r 分别为 0.19 和 0.06，大于中性表面上的-0.05 和-0.03。



注：黑线表示纯净液滴，红线表示载活性剂液滴

图 10 亲水固体表面上纯净液滴与载活性剂液滴的变形对比图

Fig.10 Comparison graph of deformation between pure droplets and surfactant-laden droplets on a hydrophilic solid surface

载活性剂液滴中活性剂浓度分布如图 11 所示。表面活性剂浓度初始时在界面上呈双曲正切分布（见图 11 (a)）。由于表面活性剂的存在降低动态接触角，使液滴左侧有向左侧移动的趋势与剪切速度相抗衡，而右侧会有一个向右移动的趋势与剪切速度相叠加，故导致了载活性剂液滴左侧接触线移动速度慢于纯净液滴，而右侧载活性剂液滴接触线移动速度更快。随着剪切的进行，浓度分布被拉长变细，在右侧三相接触线附近聚集，使得右侧的浓度集中，载活性剂液滴右侧的变形也大于纯净液滴。表面活性剂对接触角的影响而产生的接触线移动与剪切速度相互抗衡又相互促进。

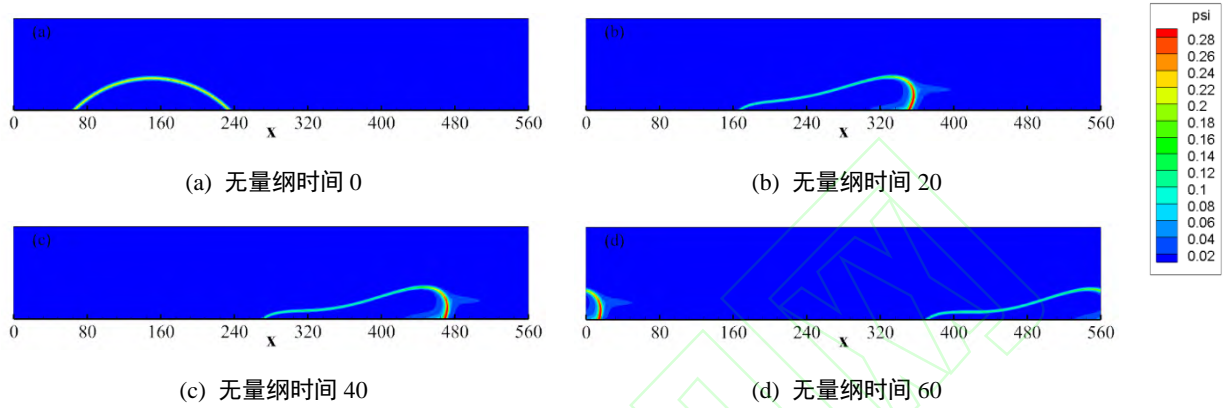
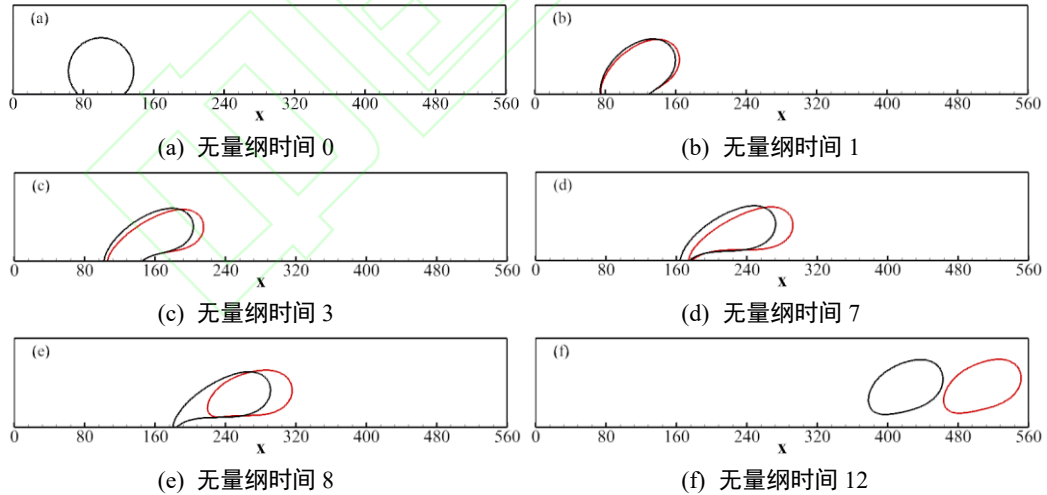


图 11 亲水固体表面上载活性剂液滴的表面活性剂浓度分布图

Fig.11 Surface surfactant concentration distribution of surfactant-laden droplets on a hydrophilic solid surface

3.2.2 液滴在疏水表面的动态特性

图 12 描述了纯净液滴与载活性剂液滴在疏水表面 $\theta_s = 135^\circ$ 不同无量纲时刻 (0、1、3、7、8、12) 的变形对比。在剪切作用前期，纯净液滴与载活性剂液滴顶端均被拉长，但载活性剂液滴的变形和移动速度更快，如图 12 (b) (c) (d) 所示；随着剪切的进行，载活性剂液滴先于纯净液滴脱离固体表面（见图 12 (e)），随后保持稳定的形态移动（见图 12 (f)）。



注：黑线表示纯净液滴，红线表示载活性剂液滴

图 12 疏水固体表面上纯净液滴与载活性剂液滴的变形对比图

Fig.12 Comparison graph of deformation between pure droplets and surfactant-laden droplets on a hydrophobic solid surface

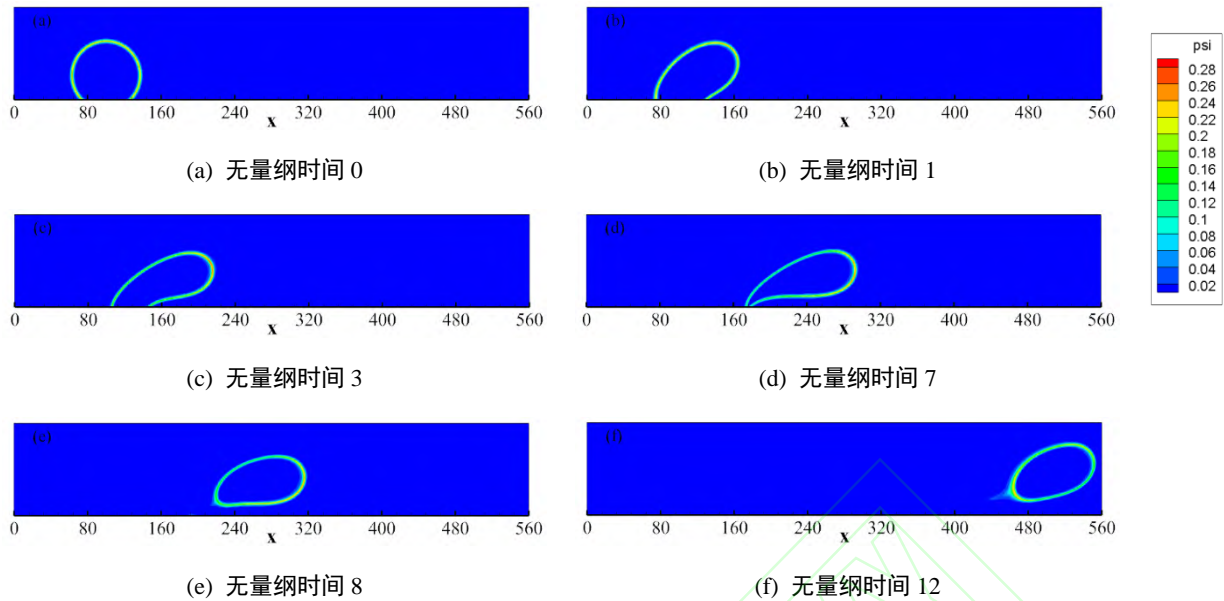


图 13 疏水固体表面上载活性剂液滴的表面活性剂浓度分布图

Fig.13 Surface surfactant concentration distribution of surfactant-laden droplets on a hydrophobic solid surface

载活性剂液滴的活性剂浓度分布如图 13 所示。初始时表面活性剂浓度在液滴界面上呈双曲正切分布；随着剪切的进行，表面活性剂向液滴顶部聚集，由于表面活性剂的影响，液滴顶部的变形更明显，在液滴顶部的拖拽下液滴逐渐脱离固体表面。当液滴脱离固体表面后，受剪切作用的影响表面活性剂向液滴两端聚集，相应的活性剂浓度略高于其他位置。研究表明，表面活性剂的存在加速了液滴脱离固体表面的过程。虽然表面活性剂可以通过降低接触角进而影响液滴的变形，但是受固体表面润湿性的影响，液滴在 135° 的初始形状下线性剪切速度在液滴左侧的绕流使液滴具有向上的速度，剪切速度对液滴变形的影响占据主导地位。

4 结 论

基于 PF-LBM 方法发展了相应的程序，研究了载有可溶性表面活性剂的接触线动力学问题，调查了有效毛细数 Ca_e 和固体表面润湿性对液滴剪切行为的影响。主要结论如下：

1) 有效毛细数 Ca_e 的增大会促进液滴变形，但当其增大到一定程度时液滴会产生结构破裂，且载表面活性剂液滴相对于纯净液滴有更大的变形量和移动速度。当 Ca_e 较小时，随着 Ca_e 增大，液滴的相对弧长 S_r 和接触角局部毛细数 Ca_{cl} 增大，相对润湿长度 l_r 先增大后减小。载活性剂液滴在剪切作用下表面活性剂向液滴右侧聚集，使得液滴右侧的表面张力更低，相同 Ca_e 情况下，表面活性剂对液滴动态特性的影响占主导地位。当 Ca_e 较大时，载活性剂液滴比纯净液滴更容易发生破裂。在破碎后载表面活性剂液滴变形速度与移动速度仍稍快于纯净液滴，但两者变形过程与结果趋于近似，表面活性剂的主导地位不再明显。

2) 固体表面的润湿性亦会影响液滴的动力学行为：当液滴附着于亲水性固体表面时，在剪切作用下液滴被进一步拉长，相对于中性表面的液滴具有更长的相对弧长和相对润湿长度。相同毛细数下，载表面活性剂液滴相对于纯净液滴在亲水表面有更长的相对弧长和相对润湿长度。此时表面活性剂对接触角的影响而产生的接触线移动与剪切速度在液滴左侧相互抗衡，在液滴右侧相互促进。而当液滴附着于疏水性固体表面时，液滴则会在剪切作用下脱离固体表面，在环境流体中以近似椭圆的形态匀速运动，载表面活性剂液滴相对于纯净液滴先脱离固体表面且有更快的移动速度。此时受固体表面润湿性影响，表面活性剂对接触线移动的作用不明显，剪切速度对液滴变形的作用占主导地位。

本文中所采用的 PF-LBM 方法能够有效计算可溶性活性剂下的接触线动力学问题。

参考文献

- [1] 马学虎, 兰忠, 王凯, 等. 舞动的液滴: 界面现象与过程调控[J]. 化工学报, 2018, 69(1): 9-43.
Ma X H, Lan Z, Wang K, et al. Dancing droplet: interface phenomena and process regulation[J]. CIESC Journal, 2018, 69(1): 9-43. (in Chinese)
- [2] 张晨辉. 表面活性剂对液滴在靶标表面润湿粘附行为的影响机制及调控[D]. 北京: 中国农业大学, 2017.
Zhang C H. The influence and regulatory mechanism about wetting and adhesion behavior of droplet on target solid surfaces by adding surfactants[D]. Beijing: China Agricultural University, 2017. (in Chinese)
- [3] 李建军, 赵亚溥. 细胞铺展动力学研究进展[J]. 力学学报, 2012, 44(5): 807-823.
Li J J, Zhao Y P. Research progress on kinetics of cell spreading[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2012, 44(5): 807-823. (in Chinese)
- [4] 朱君悦, 段远源, 王晓东, 等. 流体在固体表面超铺展特性的研究进展[J]. 化工学报, 2014, 65(3): 765-776.
Zhu J Y, Duan Y Y, Wang X D, et al. Review of super-spreading of fluids on solid substrates[J]. CIESC Journal, 2014, 65(3): 765-776. (in Chinese)
- [5] Venzmer J. Superspreading—Has the mystery been unraveled?[J]. Advances in Colloid and Interface Science, 2021, 288: 102343.
- [6] Zhang J G, Liu H H, Wei B, et al. Pore-scale modeling of two-phase flows with soluble surfactants in porous media[J]. Energy & Fuels, 2021, 35(23): 19374-19388.
- [7] Lai M C. Numerical simulation of moving contact lines with surfactant by immersed boundary method[J]. Communications in Computational Physics, 2019, 8(4): 735-757.
- [8] Ganesan S. Simulations of impinging droplets with surfactant-dependent dynamic contact angle[J]. Journal of Computational Physics, 2015, 301(C): 178-200.
- [9] Xu J J, Ren W Q. A level-set method for two-phase flows with moving contact line and insoluble surfactant[J]. Journal of Computational Physics, 2014, 263: 71-90.
- [10] Afkhami S. Challenges of numerical simulation of dynamic wetting phenomena: a review[J]. Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2022, 57: 101523.
- [11] 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, 12(4): 335-341.
Min Q, Duan Y Y, Wang X D, et al. Lattice Boltzmann simulation of droplet spreading of non-Newtonian fluid[J]. Journal of Thermal Science and Technology, 2013, 12(4): 335-341. (in Chinese)
- [12] Zhang L Q, Chen Z, Shu C, et al. A kinetic theory-based axisymmetric lattice Boltzmann flux solver for isothermal and thermal swirling flows[J]. Journal of Computational Physics, 2019, 392(C): 141-160.
- [13] Liu H H, Ba Y, Wu L, et al. A hybrid lattice Boltzmann and finite difference method for droplet dynamics with insoluble surfactants[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2018, 837: 381-412.
- [14] 梁佳, 高明, 陈露, 等. 液滴撞击不同湿润性固壁面上静止液滴的格子 Boltzmann 研究[J]. 计算物理, 2021, 38(3): 313-323.
Liang J, Gao M, Chen L, et al. Lattice boltzmann study of a droplet impinging on a stationary droplet on a fixed wall surface with different wettability[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2021, 38(3): 313-323. (in Chinese)
- [15] Huang J J, Huang H B, Xu J J. Energy-based modeling of micro- and nano-droplet jumping upon coalescence on superhydrophobic surfaces[J]. Applied Physics Letters, 2019, 115(14): 141602.
- [16] Zhang C H, Guo Z L, Liang H. High-order lattice-Boltzmann model for the Cahn-Hilliard equation[J]. Physical Review E, 2019, 99(2): 043310.
- [17] 周平, 曾忠, 乔龙. 假塑性流体液滴撞击壁面上的铺展的格子 Boltzmann 模拟[J]. 重庆大学学报, 2018, 41(12): 1-9.
Zhou P, Zeng Z, Qiao L. Simulation of shear-thinning droplets impact on solid surfaces by using Lattice Boltzmann method[J]. Journal of Chongqing University, 2018, 41(12): 1-9. (in Chinese)
- [18] Liang H, Liu H H, Chai Z H, et al. Lattice Boltzmann method for contact-line motion of binary fluids with high density ratio[J]. Physical Review E, 2019, 99(4): 063306.
- [19] Zhang S Y, Tang J, Wu H Y. Phase-field lattice Boltzmann model for two-phase flows with large density ratio[J]. Physical Review

E, 2022, 105(1): 015304.

[20] Chen Z A, Huang F L, Tsai P A, et al. Numerical study of microfluidic emulsion dynamics under the influence of heterogeneous surface wettability[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2022, 147: 103863.

[21] Zong Y J, Zhang C H, Liang H, et al. Modeling surfactant-laden droplet dynamics by lattice Boltzmann method[J]. *Physics of Fluids*, 2020, 32(12): 122105.

[22] Zhu G P, Kou J S, Yao J, et al. A phase-field moving contact line model with soluble surfactants[J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, 405: 109170.

[23] Yokoi K, Vadillo D, Hinch J, et al. Numerical studies of the influence of the dynamic contact angle on a droplet impacting on a dry surface[J]. *Physics of Fluids*, 2009, 21(7): 072102.

[24] Cox R G. The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface. Part 1. Viscous flow[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1986, 168: 169-194.

[25] Tanner L H. The spreading of silicone oil drops on horizontal surfaces[J]. *Journal of Physics D Applied Physics*, 1979, 12(9): 1473-1484.

[26] Voinov O V. Hydrodynamics of wetting[J]. *Fluid Dynamics*, 1976, 11(5): 714-721.

[27] Hoffman R L. A study of the advancing interface[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1983, 94(2): 470-486.

[28] Liu H H, Zhang J G, Ba Y, et al. Modelling a surfactant-covered droplet on a solid surface in three-dimensional shear flow[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2020, 897: A33.

[29] Zhang J G, Liu H H, Ba Y. Numerical study of droplet dynamics on a solid surface with insoluble surfactants[J]. *Langmuir: the ACS Journal of Surfaces and Colloids*, 2019, 35(24): 7858-7870.

[30] 李家宇, 曾忠, 乔龙. 相场方法模拟液滴的动态润湿行为[J]. *应用数学和力学*, 2019, 40(9): 957-967.

Li J Y, Zeng Z, Qiao L. Numerical simulation of droplets' dynamic wetting process with the phase field method[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019, 40(9): 957-967.(in Chinese)

[31] Soligo G, Roccon A, Soldati A. Coalescence of surfactant-laden drops by Phase Field Method[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 376: 1292-1311.

[32] Kim J. A continuous surface tension force formulation for diffuse-interface models[J]. *Journal of Computational Physics*, 2005, 204(2): 784-804.

[33] Yun A N, Li Y B, Kim J. A new phase-field model for a water-oil-surfactant system[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2014, 229: 422-432.

[34] Liang H, Xu J R, Chen J X, et al. Phase-field-based lattice Boltzmann modeling of large-density-ratio two-phase flows[J]. *Physical Review E*, 2018, 97(3): 033309.

[35] Liang H, Shi B C, Guo Z L, et al. Phase-field-based multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for incompressible multiphase flows[J]. *Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2014, 89(5): 053320.

[36] Liu Y S, Yao Y C, Li Q Y, et al. Contact angle measurement on curved wetting surfaces in multiphase lattice boltzmann method[J]. *Langmuir: the ACS Journal of Surfaces and Colloids*, 2023, 39(8): 2974-2984.

[37] 何雅玲, 王勇, 李庆. 格子Boltzmann方法的理论及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009.

He Y L, Wang Y, Li Q. Lattice Boltzmann method: theory and applications[M]. Beijing: Science Press, 2009.(in Chinese)

[38] Manikantan H, Squires T M. Surfactant dynamics: hidden variables controlling fluid flows[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2020, 892: P1.

[39] Jiang M C, Zhou B. Improvement and further investigation on Hoffman-function-based dynamic contact angle model[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, 44(31): 16898-16908.

[40] Jiang M C, Zhou B, Wang X C. Comparisons and validations of contact angle models[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, 43(12): 6364-6378.

[41] Malgarinos I, Nikolopoulos N, Marengo M, et al. VOF simulations of the contact angle dynamics during the drop spreading: standard models and a new wetting force model[J]. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2014, 212: 1-20.