

双液滴在具有接触角滞后性微通道内的运动行为研究

严裕, 娄钦, 陈家豪

Lattice Boltzmann Study on the Motion of Dual Droplets in Microchannels With Contact Angle Hysteresis

YAN Yu, LOU Qin, and CHEN Jiahao

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.21656/1000-0887.430165>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

T型微通道内的幂律流体液滴破裂行为的格子Boltzmann方法模拟

Power-Law Fluid Droplet Dynamic Behaviors in T-Junction Micro-Channels With the Lattice Boltzmann Method

应用数学和力学. 2020, 41(10): 1125-1145 <https://doi.org/10.21656/1000-0887.400341>

锥形微通道内液滴自输运特性及力学驱动机制研究

Droplets' Directional Motion Characteristics in Conical Microchannels and Driving Mechanisms

应用数学和力学. 2017, 38(3): 284-294 <https://doi.org/10.21656/1000-0887.370158>

相场方法模拟液滴的动态润湿行为

Numerical Simulation of Droplets' Dynamic Wetting Process With the Phase Field Method

应用数学和力学. 2019, 40(9): 957-967 <https://doi.org/10.21656/1000-0887.400129>

空间分数阶电报方程的格子Boltzmann方法

A Lattice Boltzmann Method for Spatial Fractional-Order Telegraph Equations

应用数学和力学. 2021, 42(5): 522-530 <https://doi.org/10.21656/1000-0887.410311>

矩形容器中黏性流体的横波谐振: 格子Boltzmann浸没边界方法

Transverse Harmonic Oscillation of Rectangular Container With Viscous Fluid: a Lattice Boltzmann Immersed Boundary Approach

应用数学和力学. 2018, 39(4): 371-394 <https://doi.org/10.21656/1000-0887.390040>

PDMS表面上的液滴蒸发实验研究

Experimental Investigation of Evaporating Sessile Droplets on PDMS Surface

应用数学和力学. 2017, 38(5): 495-502 <https://doi.org/10.21656/1000-0887.370358>



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

双液滴在具有接触角滞后性微通道内的运动行为研究*

严 裕, 娄 钦, 陈家豪

(上海理工大学 能源与动力工程学院, 上海 200093)

摘要: 接触角滞后表现为流体在非理想固体表面上运动时前进接触角和后退接触角不同, 是两相流体在润湿表面上流动的重要现象. 该文采用改进的伪势格子 Boltzmann (LB) 多组分模型, 并与几何润湿边界条件相结合, 研究了两个液滴在具有接触角滞后性微通道表面上的运动行为, 主要研究了通道内特征数、通道表面性质以及液滴初始参数的影响. 研究表明: 毛细数的增大有助于液滴的移动, 然而并不利于液滴的排出, 且毛细数的增加对上游液滴的影响大于其对下游液滴的影响; 另一方面, 接触角滞后性窗口越大, 液滴运动和形变更迟缓, 但形变程度更明显, 两液滴更早地发生合并, 但更晚地排出管道; 液滴间距的增加使液滴的运动行为在不同阶段表现为不同的模式, 但都导致通道中残留小液滴, 使得液滴排出通道的时间增加. 研究结果还表明: 上游液滴和下游液滴的相对尺寸差距越大, 越不利于液滴排出管道.

关键词: 接触角滞后性; 格子 Boltzmann 方法; 液滴相互作用; 剪切流

中图分类号: O359⁺.1 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.430165

Lattice Boltzmann Study on the Motion of Dual Droplets in Microchannels With Contact Angle Hysteresis

YAN Yu, LOU Qin, CHEN Jiahao

(School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, P.R.China)

Abstract: The contact angle hysteresis is defined as the difference between the advancing and receding contact angles, and is an important phenomenon in the two-phase flow on the wet surface. An improved pseudo-potential lattice Boltzmann (LB) multiphase flow model, combined with geometric wetting boundary condition, was employed to study the motion behavior of dual droplets in microchannels with contact angle hysteresis. The effects of the capillary number, the wettability, the contact angle hysteresis window width, the initial distance between the two droplets and the relative size of the droplets on the dynamic behavior of the droplets in the microchannel, were investigated. The research results show that, the increase of the capillary number is conducive to the movement of droplets, but not conducive to the discharge of droplets from the microchannel, and the influence of the capillary number on the upstream droplet is greater than that on the downstream droplet. On the other hand, the larger the contact angle hysteresis window is, the slower the droplet motion and deformation will be, but the more obvious the deformation will be, and the earlier the two droplets will merge but the later

* 收稿日期: 2022-05-16; 修订日期: 2022-08-17

基金项目: 国家自然科学基金 (51976128); 上海市自然科学基金 (19ZR1435700)

作者简介: 严裕 (1998—), 男, 硕士生 (E-mail: yayu0311@163.com);

娄钦 (1984—), 女, 副教授, 博士, 博士生导师 (通讯作者. E-mail: louqin560916@163.com).

引用格式: 严裕, 娄钦, 陈家豪. 双液滴在具有接触角滞后性微通道内的运动行为研究[J]. 应用数学和力学, 2023, 44(3): 304-318.

they will discharge from the microchannel. In addition, with the increase of the initial distance between the two droplets, the droplet motion mode will differ among different stages, but the duration of the droplet discharge will extend. Correspondingly, the larger the relative size difference between upstream and downstream droplets is, the more difficultly the droplets will discharge from the microchannel.

Key words: contact angle hysteresis; lattice Boltzmann method; droplet interaction; shear flow

0 引 言

剪切流作用下液滴的变形和分离在工业过程以及日常生活中广泛存在, 例如采油过程中聚合物溶液驱替残油^[1]、油水乳液微滤过程中膜表面油滴分离^[2]和质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 中气体扩散层 (GDL) 表面上水滴的运动^[3]等. 液滴在剪切力作用下的运动过程涉及变形^[4]、合并^[5]以及脱离^[6-7]等一系列界面动力学行为, 而液滴的界面行为对液滴宏观运动过程有重要的影响, 因此研究固体表面上液滴的界面行为具有重要意义.

在过去的几十年里, 大量学者研究了不同润湿性表面下液滴的运动特性. 例如 Seevaratnam 等^[8]通过实验方法研究了油滴在疏水表面上的运动模式, 主要观察到“滑动”“爬行”“分离”三种模式. Schleizer 等^[9]研究了不同润湿性表面上液滴的形状变化. Hao 等^[10]和 Zhu 等^[11]研究了质子交换膜燃料电池气体扩散层内水滴的变形、脱离过程. Mondal 等^[12]研究了不同润湿性表面上液滴的运动速度, 他们指出: 对于亲水性通道表面, 较大的液壁接触面积导致液滴运动较慢.

上述研究结果表明, 表面润湿性极大地影响了液滴的运动特性. 然而以上研究主要是基于剪切力作用下单个液滴在具有静态接触角壁面上的运动行为, 实际工业应用中常涉及多液滴在剪切流作用下的运动问题, 如流动沸腾^[13]、微流控器械^[14]等. 目前已有学者研究了双液滴以及多液滴在微通道壁面运动过程的影响因素. 例如 Zhang 等^[15]模拟了两个相同的液滴在疏水性表面上自发聚结的过程, 发现两个液滴合并时释放的表面能足以使得液滴脱离表面, 并且向合并液滴中再增加液滴将增大脱离速度. Han 等^[16]采用格子 Boltzmann 模型调查了燃料电池气体通道中两个液滴的发展和相互作用, 发现亲水表面上两个液滴以薄膜形式紧密附着在通道壁上, 并沿流动方向扩散, 而疏水表面随着表面接触角的增加, 两个液滴之间的相互作用变弱, 液滴更易于去除. 除了静态接触角表面外, 还有一些学者研究了具有动态接触角表面上液滴的运动过程^[17]. 动态接触角表现为液滴在固体表面运动时其前进接触角和后退接触角存在差异, 这个现象也称为接触角滞后^[18]. Qian 等^[19]在研究过程中观察到具有接触角滞后的表面上, 接触线的运动变化更复杂. 但接触角滞后对于准确预测流体间的相界面, 以及表面张力和黏性力之间的平衡非常重要^[18, 20]. 例如 Yang 等^[21]研究了考虑滞后性壁面上单液滴在大 Bond 数 (Bo) 下的气流剪切震颤过程, 发现在大 Bo 下可以观察到液滴振荡, 并且当表面波在液滴的顶部扩散时, 这种振荡会导致液滴的破裂和合并. Fang 等^[22]提出了基于 VOF 的三维接触角滞后模型, 并模拟了微通道中团状流, 结果表明, 接触角滞后是团状伸长和分离后不稳定性原因. Dussan 等^[23]研究了接触角滞后窗口大小和前进接触角对黏性剪切流中单液滴运动过程的影响, 分析了临界剪切速率和壁面滞后性之间存在的关系.

以上研究表明微通道的润湿性, 尤其是动态润湿性对液滴运动行为有较大影响, 然而目前关于动态润湿性对液滴运动行为, 特别是对多液滴的运动行为的研究尚不充分. 在本文中, 采用格子 Boltzmann 模型对双液滴在具有接触角滞后性微通道内的运动行为进行数值模拟, 主要分析了通道内特征数、通道表面性质以及液滴初始参数对双液滴运动行为的影响.

1 数值方法

1.1 格子 Boltzmann 方法

格子 Boltzmann 方法 (LBM) 作为一种介观的数值方法, 由于可以方便地处理不同相之间的相互作用, 在多相数值模拟领域受到越来越多的关注^[24-26]. 目前, 已经提出了几类较成熟的 LBM 多相流模型, 包括颜色 (color-gradient) LBM 模型^[27-28]、自由能 (free-energy) LBM 模型^[29]、伪势 (pseudo-potential) LBM 模型^[30-31]和基

于相场的 (phase-field) LBM 模型^[32-33].

本文采用 Porter 等^[34] 提出的基于伪势模型的多松弛多相多组分格子 Boltzmann 模型来研究非理想微通道表面上双液滴的动力学行为, 该模型的分布函数演化方程为

$$f_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) - f_i^k(\mathbf{x}, t) = \mathbf{T}^{-1} \bar{\mathbf{S}}^k \mathbf{T} [f_i^{k, \text{eq}}(\mathbf{x}, t) - f_i^k(\mathbf{x}, t)] + \delta t \mathbf{T}^{-1} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2} \bar{\mathbf{S}}^k \right) \mathbf{T} \mathbf{F}_i^k(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

其中 $i = 0, 1, 2, \dots, b$, b 为离散粒子速度方向数, $f_i^k(\mathbf{x}, t)$ 是混合流体中第 k 组分 (本研究中 $k = 1, 2$) 在 \mathbf{c}_i 方向、 t 时刻 \mathbf{x} 位置上的粒子分布函数, δt 是时间步长, \mathbf{c}_i 为离散速度方向, $\mathbf{F}^k(\mathbf{x}, t)$ 代表外力项. 第 k 组分的平衡态分布函数 $f_i^{k, \text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ 的形式如下:

$$f_i^{k, \text{eq}} = w_i \rho \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}^{k, \text{eq}}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}^{k, \text{eq}})^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}^{k, \text{eq}}|^2}{2c_s^2} \right], \quad (2)$$

其中 w_i 表示权重系数, c_s 表示格子声速. 本文采用二维九速多松弛模型 (D2Q9-MRT), 权重系数 w_i 设置为 $w_0 = 4/9$, $w_{1-4} = 1/9$, $w_{5-8} = 1/36$, 离散速度 \mathbf{c}_i 为

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} c(0, 0), & i = 0, \\ c \left(\cos \left[(i-1) \frac{\pi}{2} \right], \sin \left[(i-1) \frac{\pi}{2} \right] \right), & i = 1, 2, 3, 4, \\ \sqrt{2}c \left(\cos \left[(2i-1) \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[(2i-1) \frac{\pi}{4} \right] \right), & i = 5, 6, 7, 8, \end{cases} \quad (3)$$

其中 $c = \delta x / \delta t$ (本研究中设为 1), δx , δt 分别表示格子步长和时间步长. 另外, 格子声速 c_s 与 c 满足 $c_s = c / \sqrt{3}$, 变换矩阵 \mathbf{T} 定义为

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

可以根据 $\mathbf{m}^k = \mathbf{T} f^k$, $\mathbf{m}^{k, \text{eq}} = \mathbf{T} f^{k, \text{eq}}$, $\bar{\mathbf{F}}^k = \mathbf{T} \mathbf{F}^k$ 将 f^k , $f^{k, \text{eq}}$, \mathbf{F}^k 映射到对应矩空间中. 式 (1) 中 $\bar{\mathbf{S}}^k$ 是对角松弛矩阵:

$$\bar{\mathbf{S}}^k = (s_c^k, s_e^k, s_\epsilon^k, s_c^k, s_q^k, s_c^k, s_q^k, s_v^k, s_v^k), \quad (5)$$

其中 s_i^k 是松弛参数, 本研究中分别设置为 $s_c^k = 1.0$, $s_e^k = 1.0$, $s_\epsilon^k = 1.5$, $s_q^k = 0.8$, s_v^k 与黏性系数 ν 的关系为 $s_v^k = \nu / (c_s^2 \delta t) + 0.5$. 在式 (1) 等式右边第二项中的 \mathbf{F}_i^k 表示由于外力 \mathbf{G}^k 引起的组分 k 分布函数的变化, 其表达式为

$$\mathbf{F}_i^k = \frac{\mathbf{G}^k \cdot (\mathbf{c}_i - \mathbf{u}^{k, \text{eq}})}{\rho^k c_s^2} f_i^{k, \text{eq}}. \quad (6)$$

外力项 \mathbf{G}^k 由流体粒子间相互作用力 $\mathbf{G}_{\text{int}}^k$, 流体与壁面间作用力 $\mathbf{G}_{\text{ads}}^k$, 以及外部体积力 $\mathbf{G}_{\text{ext}}^k$ 构成:

$$\mathbf{G}^k = \mathbf{G}_{\text{int}}^k + \mathbf{G}_{\text{ads}}^k + \mathbf{G}_{\text{ext}}^k, \quad (7)$$

其中流体粒子间相互作用力 $\mathbf{G}_{\text{int}}^k$ 的形式为^[35]

$$\mathbf{G}_{\text{int}}^k = -\psi^k(\mathbf{x}) \sum_{\bar{k}} g^{k\bar{k}} \sum_i w_i \psi^{\bar{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t) \mathbf{c}_i. \quad (8)$$

流体与壁面间相互作用力 $\mathbf{G}_{\text{ads}}^k$ 的形式为

$$\mathbf{G}_{\text{ads}}^k = -\psi^k(\mathbf{x}) \sum_{\bar{k}} g^{k\bar{k}} \sum_i w_i \psi_w^{\bar{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t) \mathbf{c}_i. \quad (9)$$

在式 (8) 和 (9) 两式中, $g^{k\bar{k}}$ 分别表示粒子间相互作用强度, $g^{11} = g^{22} = 0$, $g^{12} = g^{21} = 3.06$, $\psi(\mathbf{x})$ 表示有效密度函数, $\psi^k(\mathbf{x})$, $\psi^w(\mathbf{x})$ 分别为组分 k 和壁面上有效密度函数. 本研究中将有效密度函数设置为 $\psi^k(\mathbf{x}) = \rho^k(\mathbf{x})$ ^[36]. $\mathbf{S}(\mathbf{x})$ 函

数在固相为 1, 在流体相为 0. 该模型中, $\mathbf{u}^{k,\text{eq}}$ 表达式如下:

$$\mathbf{u}^{k,\text{eq}} = \frac{\sum_k s_c^k \rho^k \mathbf{u}^k}{\sum_k s_c^k \rho^k}, \quad (10)$$

各组分的宏观参数表达式为

$$\begin{cases} \rho^k = \sum_i f_i^k, \\ \rho^k \mathbf{u}^k = \sum_i \mathbf{c}_i f_i^k + \frac{\delta t}{2} \mathbf{G}^k, \end{cases} \quad (11)$$

混合流体总密度、总体速度、压力分布分别为

$$\begin{cases} \rho = \sum_k \sum_i f_i^k, \\ \mathbf{u} = \frac{\sum_k \rho^k \mathbf{u}^k}{\sum_k \rho^k}, \\ p = c_s^2 \sum_k \rho^k + \frac{1}{2} \sum_{k\bar{k}} g^{k\bar{k}} \rho^k \rho^{\bar{k}}. \end{cases} \quad (12)$$

1.2 接触角滞后性模型

本研究采用 Ding 等^[37] 提出的基于几何公式的润湿边界条件:

$$\tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) = \frac{-\mathbf{n} \cdot \nabla \rho}{|\nabla \rho - (\mathbf{n} \cdot \nabla \rho) \mathbf{n}|}, \quad (13)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \rho = 1.5 \partial_x \rho|_{x,1} - 0.5 \partial_x \rho|_{x,2}, \quad (14)$$

其中 \mathbf{n} 是壁面单位法向量, θ 为气液接触角. 将上述几何边界条件应用于本研究采用的多组分格子模型中, 可以得到壁面上的未知密度, 其形式为

$$\rho_{x,0}^k = \rho_{x,1}^k + 0.5 \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) |1.5(\rho_{x-1,1}^k - \rho_{x+1,1}^k) - 0.5(\rho_{x+1,2}^k - \rho_{x-1,2}^k)|, \quad (15)$$

$\rho_{x,0}^k$, $\rho_{x,1}^k$ 和 $\rho_{x,2}^k$ 分别表示水平壁面 x 位置组分 k 的密度和其对应的垂直壁面上第一、二层临近流体密度. 因此通过对壁面附近流体密度进行插值, 可以计算出 $\rho_{x,0}^k$ 的值.

在 LBM 中, 可通过以下步骤考虑接触角滞后性: ① 根据初始接触角 C_A 和方程 (15) 获得 $\rho_{x,0}^k$, 通常 $C_A = (\theta_A + \theta_R)/2$, 这里 θ_A 和 θ_R 分别是前进角和后退角. ② 每一时间步都根据式 (12) 获取 $\rho_{x,0}^k$, 并通过式 (13) 获得局部接触角 θ . ③ 根据 θ 与 θ_A 和 θ_R 的大小更新壁面密度, 如果 $\theta \geq \theta_A$, 则 $\theta = \theta_A$ 并更新壁面密度 $\rho_{x,0}^k$; 如果 $\theta < \theta_R$, 则 $\theta = \theta_R$ 并更新壁面密度 $\rho_{x,0}^k$; 如果 $\theta_R < \theta < \theta_A$, 则保持 θ 和 $\rho_{x,0}^k$ 不变.

2 模型验证

2.1 Laplace 定律

本节采用 Laplace 定律验证所采用的多组分格子 Boltzmann 模型的正确性. 初始时, 在 $M \times N$ 的计算区域中心放置一个半径为 R , 密度为 ρ^k 的液滴, 其余区域放置充满密度为 $\rho^{\bar{k}}$ 的气相, 四周边界均为周期性边界条件. 数值模拟中 $M \times N = 128 \times 128$, $\rho^k = 1.0$, $\rho^{\bar{k}} = 1.0$, 半径分别取 15, 20, 25, 30, 35, 40. 需要指出的是, 以上单位均为格子单位 (lattice unit). 根据 Laplace 方程, 当系统稳定时, 液滴内外压力差 Δp 与表面张力 σ 成正比, 与液滴半径 R 成反比:

$$\Delta p = \frac{\sigma}{R}. \quad (16)$$

通过选取不同半径进行模拟, 并通过式 (12) 得到压力分布, 利用压差和液滴半径来计算液滴表面张力. 如

图 1 所示,可以看出,目前方法下得到的表面张力与 Laplace 方程吻合良好。

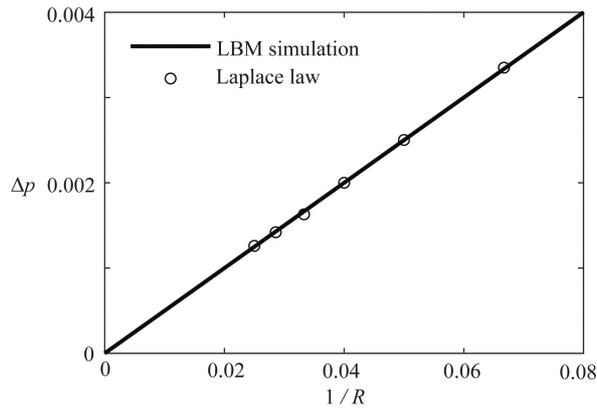


图 1 Laplace 定律验证
Fig. 1 Evaluation of Laplace's law

2.2 接触角滞后性

下面测试剪切流作用下滞后性通道内二维液滴的运动行为,并将所得的结果与 Liu 等^[38]的数值结果进行比较。

初始时刻,在长 $L = 500$,宽 $H = 64$ 的矩形通道下壁面 $(x_r, 0)$ 处放置一个半径为 R 、密度为 ρ^k 的液滴,区域其他位置是密度为 ρ^k 的气相,通道上壁面以 u_w 的恒定速度运动.左右边界条件为周期性边界条件,下壁面采用标准反弹格式实现无滑移边界条件,上边界速度边界采用 Ladd 格式^[39].为了方便对比,本文选取的模拟参数和无量纲参数与文献 [38] 相同,相关参数设置如下: $M_v = 1$, $C_a = 0.15$, $\rho^k = 1.0$, $\rho^k = 1.0$.在图 2 中,我们对比了 $C_a = 0.15$, $A_d^* = 0.5$,窗口 $(5^\circ, 175^\circ)$ 下本文和文献 [38] 模拟得到的平衡液滴形状,其中使用液滴初始直径 R 对 x 和 y 坐标相对于计算域中心 (x_0, y_0) 进行了归一化.从图中结果可知,本文得到的平衡液滴形状与文献中的结果完全一致.为了进一步验证本文模型的正确性,下面研究不同接触角滞后窗口下液滴的运动过程.考虑了四种接触角滞后性窗口 (θ_R, θ_A) 分别为 $(5^\circ, 175^\circ)$, $(5^\circ, 110^\circ)$, $(70^\circ, 175^\circ)$ 和 $(70^\circ, 110^\circ)$.数值模拟中 $x_r = 100$, $R = 30$, $C_a = 0.5$,其余模拟参数和边界条件与上相同.图 3 给出了不同滞后性窗口下液滴运动的时间演化过程.如图所示,对于最小滞后性窗口 $(\theta_R, \theta_A) = (70^\circ, 110^\circ)$ 的情况,液滴保持固定并连续变形,直到上游和下游接触角达到其滞后极限,然后液滴开始在壁面开始滑动.随着滞后性窗口的增加,接触点的钉扎现象越来越明显.例如对于 $(\theta_R, \theta_A) = (5^\circ, 110^\circ)$ 的情况,上游接触点保持静止,对于下游接触点,初始接触角小于 110° 时固定,然后在接触角大于 110° 时向下游移动.对于 $(\theta_R, \theta_A) = (70^\circ, 175^\circ)$ 的情况,下游接触角连续增加,但始终保持在滞后窗口范围内.因此,下游接触点保持静止,对于上游接触点,当局部接触角小于 70° 时,其沿表面向下游延伸.当滞后性窗口增加到 $(\theta_R, \theta_A) = (5^\circ, 175^\circ)$ 的情况时,运动初期,上游和下游接触角均不能超出滞后性窗口的范围,因此两个接触点保持固定.本文观察到的液滴在不同滞后性窗口下的动力学行为与 Liu 等^[38]模拟现象定性吻合。

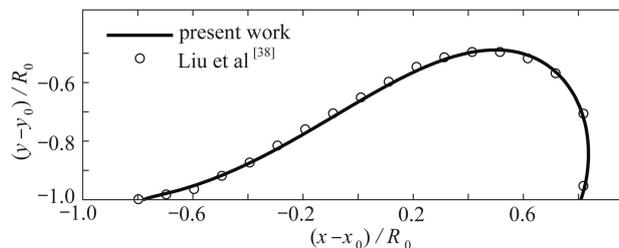


图 2 平衡液滴形态和文献 [38] 结果的对比
Fig. 2 Comparison of the simulated equilibrium droplet shape with the numerical results of ref. [38]

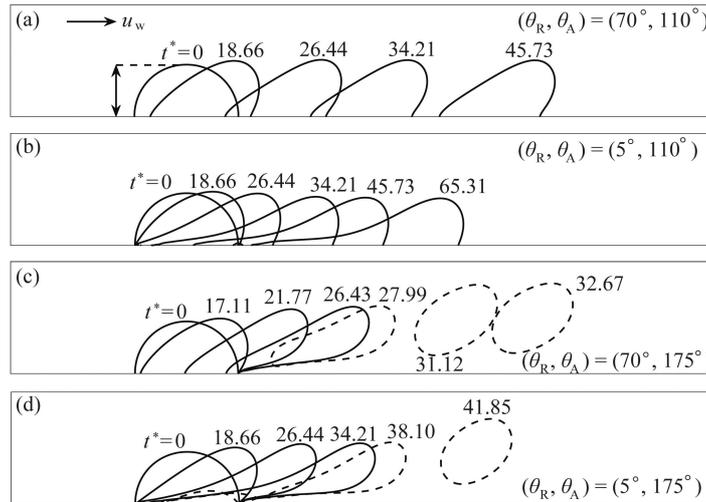


图 3 剪切流动条件下液滴的时间演化
Fig. 3 Temporal evolutions of drop shapes subject to shear flow

3 问题描述

本文所研究的物理问题如图 4 所示. 初始时, 两个半圆形液滴, 放置在长、宽分别为 $L = 1\ 200\ \mu\text{m}$ 和 $2H = 400\ \mu\text{m}$ 的微通道内的下壁面上, 在微通道内的其他部分充满气体. 微通道进口为速度边界条件, 出口为自由边界条件, 进口处速度场由充分发展的 Poiseuille 流描绘:

$$u(y) = U_c \left(1 - \frac{(y-H)^2}{H^2} \right), \tag{17}$$

其中 U_c 是通道 $y = H$ 处的速度. 上壁面和下壁面为无滑移边界条件. 此外, 放置液滴的微通道下壁面为粗糙壁面, 表现为其前进角 θ_A 和后退角 θ_R 不同, 对应的壁面的滞后性窗口大小为 $\theta_H = \theta_A - \theta_R$, 初始接触角 C_A 设置为前进角和后退角的平均值. 位于微通道左侧的上游液滴与位于右侧的下游液滴的圆心距离为 S , 上、下游液滴半径设为 R_1 和 R_r , 相应的液滴间相对大小 $k_r = R_1/R_r$. 液滴和气体的密度分别为 ρ_l 和 ρ_g , 动力黏度为 μ_l 和 μ_g , 液滴与气体之间的表面张力为 σ . 刻画本问题的相关无量纲参数如下: $\rho_r = \rho_l/\rho_g$, $M_v = \mu_l/\mu_g$, 毛细数 $C_a = \mu_g U_c/\sigma$, 其可以描述液滴所受到黏性力和自身表面张力的比, 另外本研究中无量纲时间 $t^* = tU_c/H$.

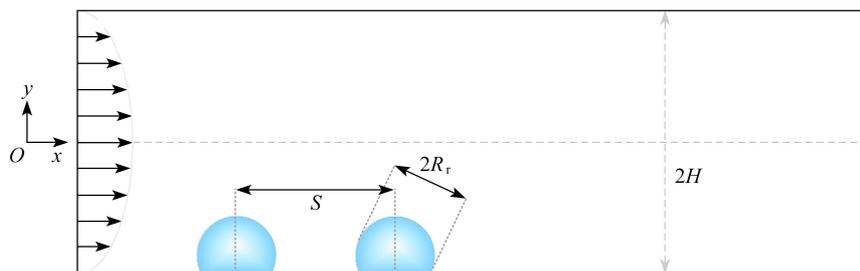


图 4 微通道表面上液滴示意图
Fig. 4 A schematic diagram of a droplet on the lower surface of the microchannel

在进行数值模拟之前, 首先进行网络无关性验证. 该验证中所采用的三种网格数如表 1 所示, $L \times 2H = 300 \times 100, 600 \times 200, 1\ 200 \times 400$, 分别对应的实际网格步长 Δx 为 $4\ \mu\text{m}, 2\ \mu\text{m}, 1\ \mu\text{m}$. 在数值模拟中, 对应的模拟参数为 $\rho_r = 1.0, M_v = 1.0, \sigma = 0.049\ 8, C_a = 0.5$, 下壁面的滞后性窗口为 $(80^\circ, 100^\circ)$, 液滴间距 $S = 5.5R$, 液滴相对大小 $k_r = 1.0$. 统计了几种情况下得到的液滴界面厚度 D , 液滴到达通道出口边界时间 t_a 和液滴完全排出时间 t_b , 并示于表 1 中. 从表中可以看出, $L \times 2H = 300 \times 100$ 得到的液滴界面厚度 D 较其他两种网格较大. 此外, 采用 $L \times 2H = 600 \times 200$ 与 $L \times 2H = 1\ 200 \times 400$ 的液滴基部接触长度相同, 而 $L \times 2H = 600 \times 200$ 网格得到的界面厚度、液滴到达边界时间以及液滴完全排出时间与网格数 $L \times 2H = 1\ 200 \times 400$ 得到的结果基本一致. 为方便

展示,下文单位为格子单位, L 和 $2H$ 分别固定为600和200.

表1 网格无关性
Table 1 Grid independence

$L \times 2H$	D	t_a	t_b
300 × 100	8	53.5321	67.7234
600 × 200	6	54.4856	68.5080
1 200 × 400	6	54.4832	68.5093

4 数值模拟及分析

4.1 毛细数的影响

本小节研究毛细数对双液滴运动行为的影响. 主要考虑了 $C_a = 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8$ 五种情况. 在数值模拟中, 选取接触角窗口 ($80^\circ, 100^\circ$), 上游圆心坐标 (50, 0), 下游圆心坐标 (160, 0), 上、下游液滴半径 $R_1 = R_2 = 20$, 对应的液滴间距 $S = 5.5R$. 不同的毛细数通过改变气流中心速度获得.

图5中给出了 $C_a = 0.2, 0.5, 0.8$ 三种工况下, 两液滴在不同时刻的瞬时流型图. 当 $C_a = 0.2$ 时 (如图5(a)所示), 两液滴在气流拖曳下前倾, 它们的形态基本保持不变. 当 $t^* = 50.32$ 时, 上游液滴追及下游液滴, 该现象与前人得到的结果一致^[40]. 随后两液滴逐渐合并成一个大液滴, 合并后的大液滴继续向前滑行, 其前倾程度未发生明显的变化. 当 $C_a = 0.5$ 时 (如图5(b)所示), 两液滴在滑动过程中的倾斜程度较 $C_a = 0.2$ 时有所增加, 同时, 两液滴合并的发生时间提前到 $t^* = 47.58$ 时刻. 此时, 由于上游液滴前倾幅度变大, 上游液滴的头部率先与下游液滴接触, 此时两液滴间最先合并的点发生在壁面的上方而不是发生在壁面上, 这与 $C_a = 0.2$ 时得到的两液滴合并的位置紧贴壁面不同. 此外, 对比图5(a)和图5(b)还可以发现, 当 C_a 由0.2增加到0.5时, 合并后的大液滴在接下来的运动的过程中又一次分裂成两个, 这是因为随着 C_a 的增加, 合并后的大液滴所受到黏滞拖曳力相对于受到的表面张力增加, 因此液滴在运动的过程中更容易变形和断裂. 随着 C_a 进一步增加, 当 $C_a = 0.8$ 时 (如图5(c)所示), 液滴受到的黏滞拖曳力更大, 上游液滴在追及下游液滴之前先发生了一次断裂 ($t^* = 37.32$). 另一方面, 随着 C_a 增加, 上游液滴追及下游液滴的时间更早 ($t^* = 40.06$), 且液滴在运动过程中变形更严重, 导致两液滴合并时最先接触的位置距离下壁面的距离更远, 两液滴合并时下游液滴已形成明显的颈. 因此, 液滴合并后下游液滴在表面张力和剪切力的作用下迅速分裂成两个小液滴, 在管道内出现了三个液滴共存的现象. 通过对比图5(a) — (c) 中的现象可知, 随着 C_a 增大, 液滴的变形加剧, 两液滴合并的位置与下边界之间的距离增加, 且液滴在运动过程中分裂的次数增加.

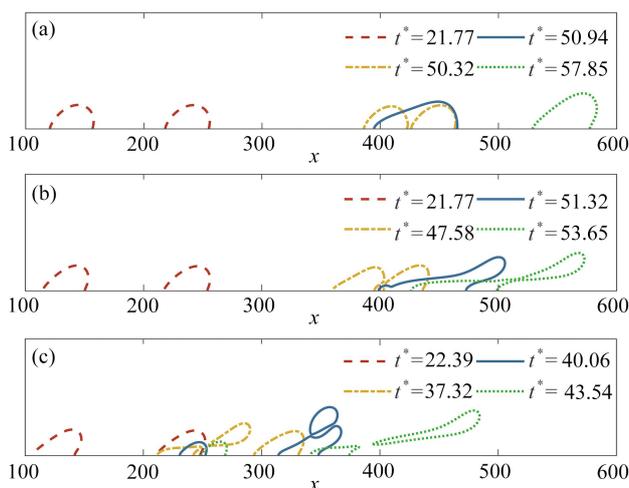


图5 双液滴在不同时刻的瞬时流型: (a) $C_a = 0.2$; (b) $C_a = 0.5$; (c) $C_a = 0.8$

Fig. 5 Instantaneous flow patterns of two droplets at different moments: (a) $C_a = 0.2$; (b) $C_a = 0.5$; (c) $C_a = 0.8$

注 为了解释图中的颜色, 读者可以参考本文的电子网页版本, 后同.

图5结果表明, 不同的 C_a 不仅影响液滴的变形、合并、脱离等一系列动力学行为, 还影响液滴合并时间、

分裂时间和在管道内的运动时间. 为了进一步说明 C_a 对液滴运动行为的影响, 图 6 给出了不同 C_a 时液滴合并时间、首次脱离时间、二次脱离时间、到达通道出口所需时间和液滴完全排出通道所需时间. 从图中结果可以看出, 液滴合并时间、首次脱离时间、二次脱离实际和到达通道出口时间随着 C_a 增大而减小, 且液滴到达通道出口的时间和液滴合并时间趋势完全一致, 它们都随着 C_a 的增加而近似线性减小. 但完全排出时间随 C_a 的变化趋势却非常复杂: 其先缓慢增加, 再快速增加, 然后又缓慢增加, 这是由于 C_a 增加会导致液滴的运动行为变得非常复杂. 例如随着毛细数的增加, 两液滴合并发生的时间越来越早, 且两液滴依次经历合并后不断裂、合并后断裂、断裂后合并三种模式. 由于液滴合并发生的时间提前, 并且因为液滴受到的拖曳力增加, 液滴更容易达到出口. 然而, 液滴在合并前或者合并后会进一步发生断裂, 且断裂后的小液滴由于体积较小而难以流出管道, 因此尽管随着 C_a 的增加液滴到达出口的时间缩短, 但液滴排出通道的时间会急剧增加.

为了进一步说明 C_a 对两液滴运动行为的影响, 图 7 给出了 $C_a = 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8$ 时, 上、下游液滴在运动过程中与壁面接触时的接触线长度 C_{conl} . 需指出的是, 当发生以下两种情况中的其中一种情况时, 统计结束: ① 当上游液滴和下游液滴在下边界上发生合并时, 即两液滴不再区分上、下游液滴; ② 当液滴到达通道边界但上游液滴还未完全与下游液滴合并时. 从图 7 可以看出, 以 $C_a = 0.5$ 为分界点有三种液-壁接触长度变化趋势. 当 $C_a < 0.5$ 时 (如 $C_a = 0.2, 0.4$), 上、下游液滴的合并模式为合并后不断裂, 且两液滴的合并发生在壁面上, 对应的上、下游液滴的液-壁接触长度在运动过程中基本保持初始值不变. 当 C_a 适中如 $C_a = 0.5$ 时, 上、下游液滴的合并发生没有发生在壁面表面上而是发生在壁面上方, 则当两液滴接触时, 上游液滴的 C_{conl} 迅速下降, 下游液滴的 C_{conl} 迅速上升, 其合并为先合并后断裂模式. 当 $C_a > 0.5$ 时 (如 $C_a = 0.6, 0.8$), 上游液滴先发生断裂然后与下游液滴合并, 且上游液滴断裂的时间随着 C_a 的增加而提前, 因此其接触长度 C_{conl} 变化开始减小的时间也随着 C_a 的增加而提前. 并且 $C_a > 0.5$ 时上游液滴最终的液-壁接触长度基本相同, 稳定在 $C_{conl} = 0.5$. 对于下游液滴, 当 $C_a = 0.6$ 时, 受主流剪切力的作用也发生形变, 液-壁接触长度先减小, 之后由于上游断裂液滴的并入突然增大, 随后黏滞拖曳力的作用液滴的头部被拉起, 其 C_{conl} 又出现下降趋势. 当 $C_a = 0.8$ 时, 下游液滴与壁面接触长度的变化趋势与 $C_a = 0.6$ 时基本一致, 只是 $C_a = 0.8$ 时 C_{conl} 在后期的下降过程中出现了小幅度振荡. 这是主流液滴所受到的黏滞拖曳力更大导致的, 液滴被剧烈拉伸, 上游液滴断裂后尽管与下游液滴有接触行为, 但其受到的气流对其的浮升作用大于重力, 加速了下游液滴的形变和断裂并使其 C_{conl} 不断下降. 此外, 结合图 6 和图 7 还可以看出, 在 $C_a > 0.5$ 时的几种工况中, 上游液滴断裂达到稳定后具有相同的接触长度, 其受力、运动情况基本相同, 因此液滴完全排出时间由与上游液滴断裂时刻呈正相关.

4.2 接触角滞后性的影响

当液滴在粗糙表面或化学异构表面运动时, 会因为固体表面的粗糙性或不均匀性导致其前进角接触角和后退接触角不同的现象. 本小节将研究不同接触角滞后性窗口 (θ_R, θ_A) 对两液滴运动行为的影响, 其中 θ_A 和 θ_R 分别为固体壁面的前进角和后退角, 对应的滞后性窗口大小 $\theta_H = \theta_A - \theta_R$. 为不失一般性, 此部分考虑了亲水 ($C_A = 45^\circ$)、中性 ($C_A = 90^\circ$) 以及疏水 ($C_A = 120^\circ$) 三类滞后性窗口的情况. 且对于亲水和疏水滞后性窗口的情况, 为满足前进角与后退角都为对应情况内, 窗口不能过大, 所以对于上述情况考虑了 $\theta_H = 10^\circ, 30^\circ$ 两种滞后窗口. 对于以上所有情况, 初始接触角 C_A 为前进角和后退角的平均值. 在数值模拟中 C_a 固定为 0.5, 其他参数设置与 4.1 小节中相同.

图 8 给出了上、下游液滴在上述几种滞后性窗口下, 不同时刻的瞬时流型图. 从图 8(a) 可以看出, 在亲水

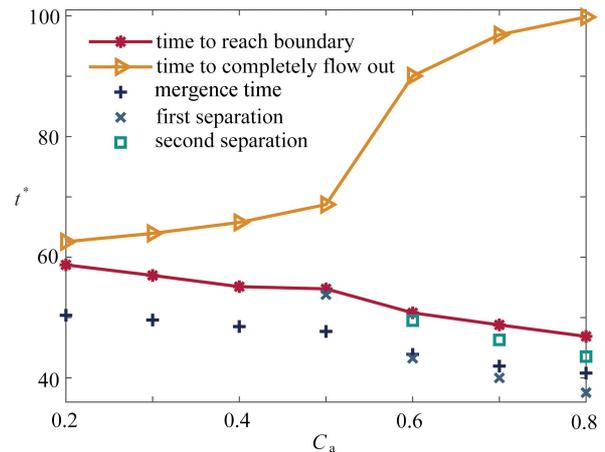


图 6 不同毛细数下液滴状态变化时间

Fig. 6 Droplet state change time under different capillary numbers

性窗口下两液滴与壁面的接触线长度较长,且当滞后性窗口大小 θ_H 由 10° 增加到 30° 时,液滴移动速度变慢且两液滴相对运动速度差距更大,表现为上游液滴追及下游液滴的时间缩短,而液滴到达出口的时间增加.例如,对于 $(40^\circ, 50^\circ)$ 的情况,上游液滴追及下游液滴的时间以及液滴到达出口的时间分别为 $t^* = 44.78$ 和 $t^* = 62.98$.而对于 $(30^\circ, 60^\circ)$ 的情况,上游液滴追及下游液滴的时间以及液滴到达出口的时间分别为 $t^* = 41.05$ 和 $t^* = 67.49$.对于中性滞后性窗口的两种情况(如图8(b)),同样有两液滴的运动速度随着壁面滞后性窗口大小的增加而减小,而两液滴相对运动速度随着滞后性的增加而增加.另一方面,与亲水性滞后窗口相比,液滴在中性滞后性窗口壁面上运动时头部抬得更高,因此液滴受到的黏滞拖曳力更大,变形更明显.中性窗口下滞后性窗口越大,两液滴合并后形变越明显,因此液滴在较大的滞后性窗口下更容易发生断裂.这主要是由于较大的接触角滞后性窗口将导致液滴受到的黏附力影响更大^[10,41],液滴在壁面上滑动变得困难.图8(c)展示了疏水窗口情况下的两液滴运动的瞬时流型.从图中结果可以看出,相对于亲水滞后窗口和中性滞后窗口的情况,疏水滞后窗口下得到液滴与壁面的接触面积更小,且液滴高度进一步升高,因此在拖曳力与升力共同作用下,液滴更易从微通道下壁面脱离,疏水滞后性窗口与中性和亲水滞后窗口类似,都随着接触角滞后性增加,两液滴相对速度速度差距更大、运动速度减小.然而对于疏水的情况,滞后性的改变对液滴到达出口的时间和排出时间的影响程度更小,例如当疏水窗口为 $(115^\circ, 125^\circ)$ 和 $(105^\circ, 135^\circ)$ 两种情况下得到液滴到达出口的时间分别为31.67,31.81,而液滴完全排出管道的时间分别为32.60,32.75,即当 θ_H 从 10° 增加到 30° ,液滴到达出口和完全排出的时间分别增加了了0.14%和0.15%.

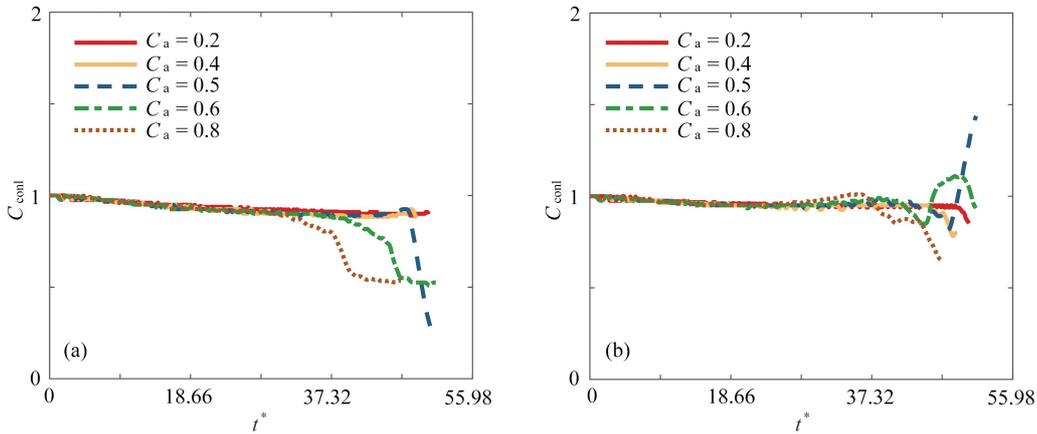


图7 不同毛细数下的上、下游液滴液-壁接触长度随时间的变化: (a) 上游液滴; (b) 下游液滴
Fig. 7 Droplet-wall contact lengths under different capillary numbers: (a) upstream droplets; (b) downstream droplets

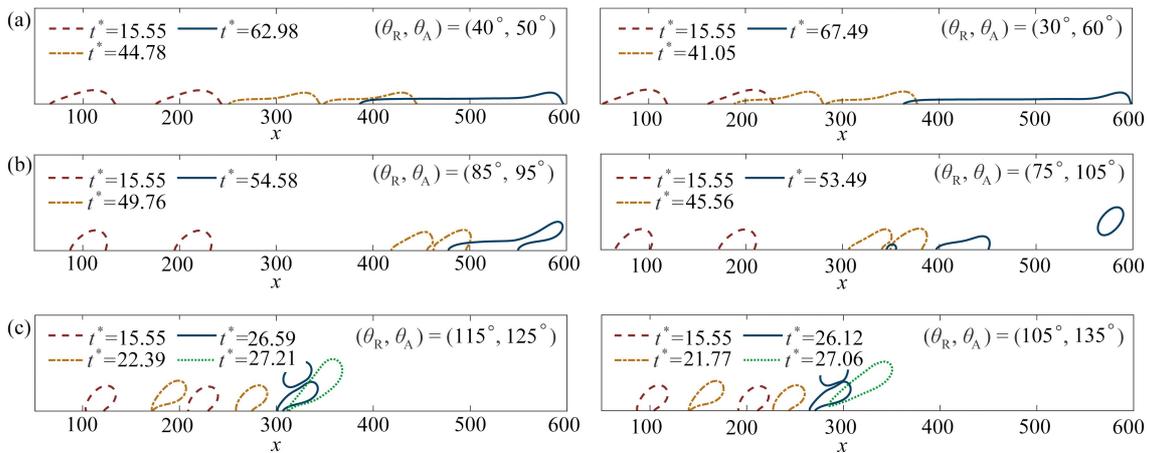


图8 不同滞后性窗口下两液滴的瞬时流型: (a) $C_A = 45^\circ$; (b) $C_A = 90^\circ$; (c) $C_A = 120^\circ$
Fig. 8 Instantaneous flow patterns of two droplets under different hysteresis windows: (a) $C_A = 45^\circ$; (b) $C_A = 90^\circ$; (c) $C_A = 120^\circ$

为了更深入地解释滞后性窗口大小对液滴运动行为的影响,图9给出了不同接触角滞后性窗口下上、下游液滴液-壁接触长度随时间的变化过程.从图中结果可以看出:对于亲水性滞后窗口的情况,都有上、下游液

滴与壁面的接触线长度大于液滴的初始半径; 对于不同的中性窗口的情况, 液滴与壁面的接触线长度在半径附近波动; 而对于疏水性接触角滞后性的情况, 液滴与壁面的接触线长度均小于初始半径. 对应地, 不同接触角滞后性窗口下得到的液滴合并时间、首次脱离时间、二次脱离时间和到达通道出口时间也有很大区别 (如图 10 所示), 当壁面亲水时, 接触角滞后性窗口对液滴达到通道边界和完全排出通道时间影响较大. 当壁面中性时, 只对完全排出时间有较大影响, 而在壁面疏水情况下, 滞后性窗口对液滴运动的形态影响微乎其微. 以上结论与液滴在壁面上运动时的动力学过程一一对应, 例如对于亲水性接触角滞后性窗口的情况, 液滴在运动过程初期迅速铺展润湿壁面, 因此接触长度迅速增加, 随后在前进角和后退角的限制下接触长度缓慢增长. 另一方面, 滞后性窗口越大, 液滴与壁面的接触长度越长, 当液滴到达通道出口时, $(40^\circ, 50^\circ)$ 和 $(30^\circ, 60^\circ)$ 两种窗口下得到的接触长度分别为初始单个液滴长度的 5.3 倍和 5.95 倍. 因此, 两液滴所受到的黏滞拖曳力随着滞后性的增加而减小, 导致液滴到达出口和完全排出管道的时间增加. 此外, 对于亲水、中性、疏水三种壁面润湿性不同滞后性窗口的情况, 都有在演化初期滞后性窗口越大、液滴运动越迟缓、液滴间的速度差越大、接触长度变化越慢, 这导致在中期时两液滴在更早的时间与更短的运动距离下合并, 合并后的液滴运动速度有所上升.

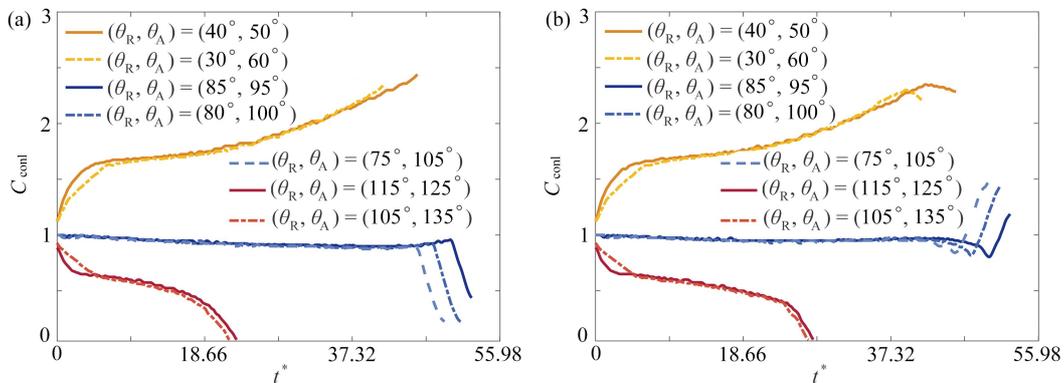


图 9 在不同滞后性窗口下的上、下游液滴液-壁接触长度随时间的变化: (a) 上游液滴; (b) 下游液滴

Fig. 9 Variations of liquid-wall contact lengths with time under different hysteresis windows: (a) upstream droplets; (b) downstream droplets

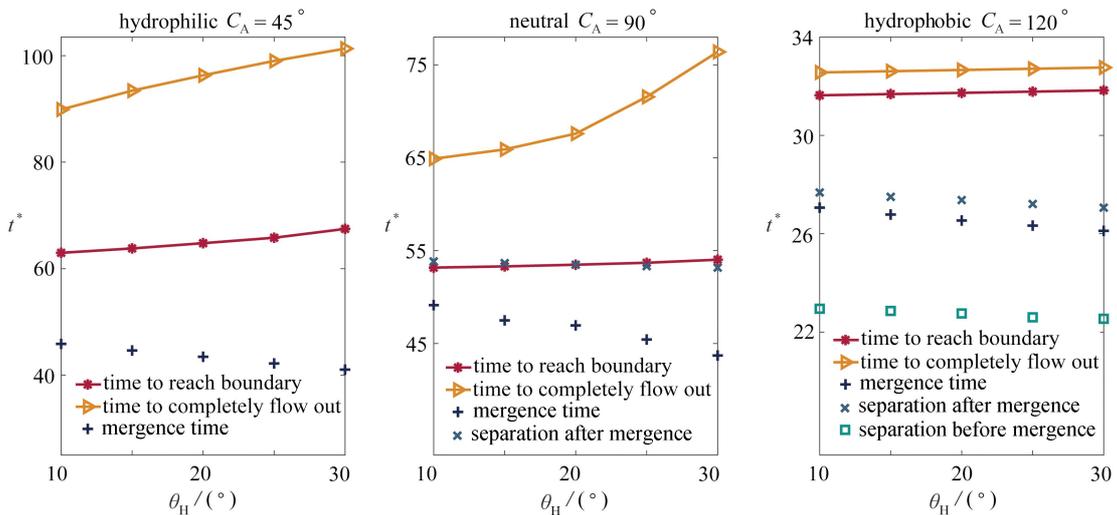


图 10 不同滞后性窗口下液滴形态变化时刻

Fig. 10 Droplet state change moments under different hysteresis windows

4.3 液滴间距的影响

当两个液滴放置在微通道壁面上时, 液滴之间的初始距离将直接影响两液滴之间的相互作用力, 本小节将研究两液滴初始距离对其运动行为的影响. 在数值模拟中保持上游液滴圆心为 $(50, 0)$, 通过改变下游液滴的位置来得到不同的液滴初始位置. C_a 设为 0.5, 数值计算中其他参数设置与 4.1 小节中相同.

图 11 给出了 $S = 4R, 6R, 7R$ 三种具有代表性液滴间距时, 上、下游液滴不同时刻的瞬时流型. 如图 11(a) 所示, 当液滴初始距离较小时 ($S = 4R$), 在上游液滴追及下游液滴时两液滴变形并不明显. 另一方面, 两液滴合并时的位置尚未到通道中间, 两液滴合并其所受到的剪切力增加, 在到达出口之前合并后的液滴又发生了一次断裂. 当 $S = 6R$ 时 (如图 11(b) 所示), 上游液滴追及下游液滴时形变加剧, 两液滴发生合并时接触点变高, 在合并过程上游液滴发生断裂, 其中一部分并入下游液滴, 另一部分小液滴残留在固体表面上继续前进. 当 $S = 7R$ 时 (如图 11(c) 所示), 液滴圆心间距约为通道长度 L 的 $1/4$, 上、下游液滴合并前发生断裂, 断裂后的前部液滴与下游液滴合并, 另一部分沿着管道流出通道.

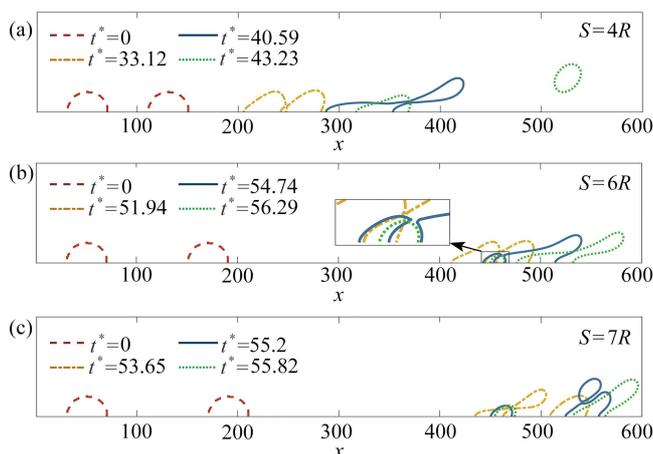


图 11 两液滴在 $S = 4R, 6R, 7R$ 下的瞬时流型

Fig. 11 Instantaneous flow patterns of two droplets for $S = 4R, 6R, 7R$

以上结果可以看出, 初始液滴间距不仅影响液滴断裂合并形式, 还影响液滴断裂位置, 进而影响液滴到达边界和排出边界的时间. 图 12 给出了初始液滴距离 $S = 4R \sim 7R$ 时, 上、下游液滴到达边界和完全排出边界时间. 当两液滴间距较小时 ($S < 5.8R$), 两液滴先合并再断裂, 液滴到达边界的时间随着液滴初始间距的增加而近似线性增加, 而液滴完全排出所需时间缓慢减小, 这是由于上游液滴追及下游液滴的时间随着两液滴初始距离之间的增加而增加, 且两液滴合并后发生分裂的位置也随着两液滴之间距离的增加更靠近出口. 当液滴间距增大到一定程度时 ($S > 5.8R$), 两液滴的合并模式从完全合并转为合并过程中发生断裂, 分裂为两个小液滴. 这里把分裂后的两个液滴从左到右依次称为第一个液滴和第二个液滴, 断裂后的第一个液滴体积非常小, 因此其受到的剪切力减小, 难以流出管道, 甚至两液滴初始距离在一定范围 ($S = 5.8R \sim 6.1R$) 内会出现由于第一个液滴过小而在通道内耗散的现象, 因此两液滴排出管道的时间急剧增加. 当液滴间距 $S > 6.1R$ 后, 两液滴合并断裂模式为上游液滴先断裂, 之后再与下游液滴合并, 此时两液滴到达边界时间和完全排出时间近似不变, 但此时排出时间远大于液滴间距较小时两液滴完全合并的情况.

综上所述, 两液滴初始距离 S 将决定上、下游液滴追及之前的形变程度, 从而影响液滴合并形态和合并位置. 当两液滴距离较小时, 液滴合并较早, 随后颈部断裂发生也较早, 到达边界时间最短, 当液滴间距增大到一定程度后, 液滴难以排出管道, 而当两液滴初始距离继续增加时, 将有助于下游液滴的运动速度上升, 有利于加快整体的排出.

4.4 液滴相对大小的影响

除了液滴距离外, 液滴的相对大小以及排布方式也会影响液滴的相互作用^[42]. 下面模拟中保持下游液滴半径 $R_r = 20$, 通过改变上游液滴半径 R_l 得到不同的上、下游液滴的相对大小 $k_r = R_l/R_r$, 以研究 k_r 变化对液滴动力学行为的影响. 数值模拟中毛细数 $Ca = 0.5$, 其他参数设置与 4.1 小节中相同.

图 13 给出 $k_r = 0.6, 1.0, 1.4$ 三种典型情况下上、下游液滴不同时刻的瞬时流型. 如图 13(a), 当 $k_r = 0.6$ (小-大模式) 时, 运动过程中两液滴间距逐渐增大, 上游液滴无法追及下游液滴, 下游液滴在靠近管道出口时发生断裂. 对于两液滴大小相同的情况 (图 13(b)), 上游液滴在 $t^* = 47.58$ 时追及下游液滴, 并合并成一个大液滴, 在 $t^* = 53.49$ 时, 该大液滴又分裂成两个小液滴. 而对于 $k_r = 1.4$ (大-小模式), $t^* = 22.08$ 时, 上游液滴追及下游液滴,

上游液滴头部与下游液滴接触, 而两液滴合并下方留有空隙. 因此两液滴合并的过程中又分裂为两个液滴 (分裂后的液滴从左到右称为第一个液滴和第二个液滴), 第一个液滴较小, 第二个液滴较大. 随后第二个液滴又分裂为两个液滴 (从左到右依次称为第二个液滴和第三个液滴). 此时, 第一个液滴最小, 其在表面张力作用下恢复成半圆形, 且液滴移动速度非常慢, 第二个液滴黏附在壁面上而第三个液滴与壁面完全脱离.

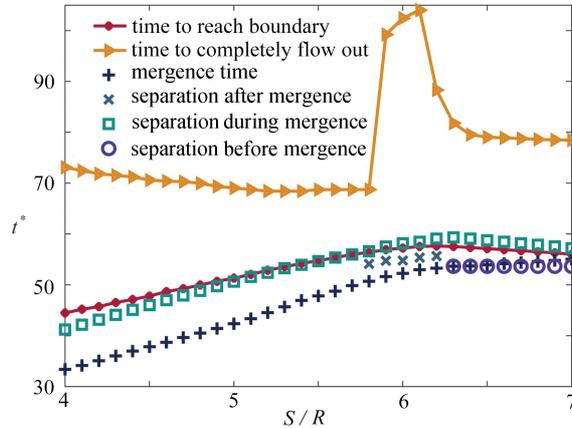


图 12 不同间距下液滴形态变化时刻

Fig. 12 Droplet state change moments under different drops distance

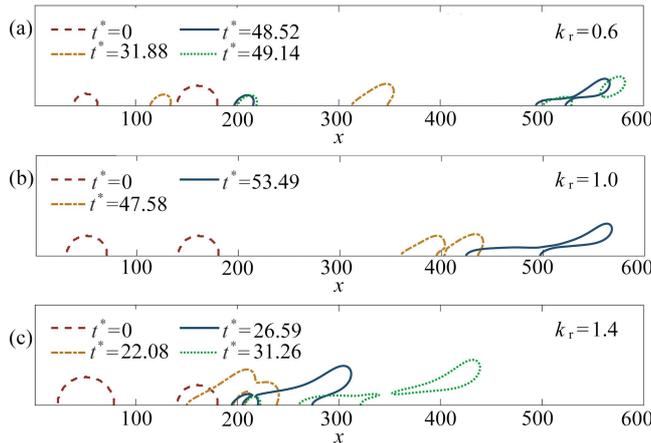


图 13 两液滴在 $k_r = 0.6, 1.0, 1.4$ 下的瞬时流型

Fig. 13 Instantaneous flow patterns of two droplets for $k_r = 0.6, 1.0, 1.4$

图 14 给出了 $k_r = 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 1.4$ 时, 上、下游液滴-壁接触长度 C_{con1} 随时间变化的过程. 对于小-大模式 ($k_r < 1.0$), 上游液滴皆未能追及下游液滴, 且上游液滴由于体积较小受到的拖曳力也较小, 其与壁面之间的接触线长度在运动过程中近似保持不变 (类似图 13(a)). 此时下游液滴在运动的过程中变形并发生断裂, 接触长度 C_{con1} 先近似不变后减小, 且上游液滴越小, 对气流的遮挡效果越小, 下游液滴形变越明显, 其对应的 C_{con1} 的下降程度越多. 对于大-小模式 ($k_r > 1.0$), 上游液滴在运动初始受到的拖曳力较大, 其头部抬起, 上游液滴 C_{con1} 在运动初期便开始缓慢下降. 与此同时, 在上游液滴显著的遮挡效果下, 下游液滴变形缓慢, 其 C_{con1} 开始下降时刻后移 (图 14(b)). 此外可以发现, k_r 越大, 碰撞发生时刻越早, 当上游液滴追及下游液滴并逐渐开始合并后, 上游液滴 C_{con1} 快速下降并达到稳定, 相应的下游液滴接触长度快速上升.

从以上结果可以看出, 液滴的初始大小影响两液滴的合并断裂模式和液滴在运动过程中和壁面之间的黏附力, 因此影响两液滴排出管道的时间. 图 15 展示了两液滴初始大小不同时合并发生时间、合并完成后脱离时间、合并过程中断裂时间、合并开始前脱离时间、到达出口的时间和完全排出管道的的时间. 从图中结果可以看出, 不同相对大小时, 液滴到达出口的时间与合并发生时间、合并完成后脱离时间、合并过程中断裂时间、合并开始前脱离时间直接相关. 从图中结果还可以看出, 两个液滴的相对大小对液滴到达壁面的时间影响很微弱, 而对两液滴完全排出管道的的时间影响很大. 不论是对于小-大模式还是对于大-小模式, 两液滴尺寸差距

越大,液滴排出管道需要的时间越长,这是因为对于小-大模式,两液滴尺寸差距越大,上游液滴越难追上下游液滴,而对于大-小模式,两液滴尺寸差距越大,大液滴和小液滴合并后再次发生断裂得到的小液滴越小.在其他参数不变的情况下,改变液滴相对大小将改变上、下游液滴合并形态,从而影响合并后的大液滴的 C_{conl} 来影响大液滴所受到的壁面黏附力.

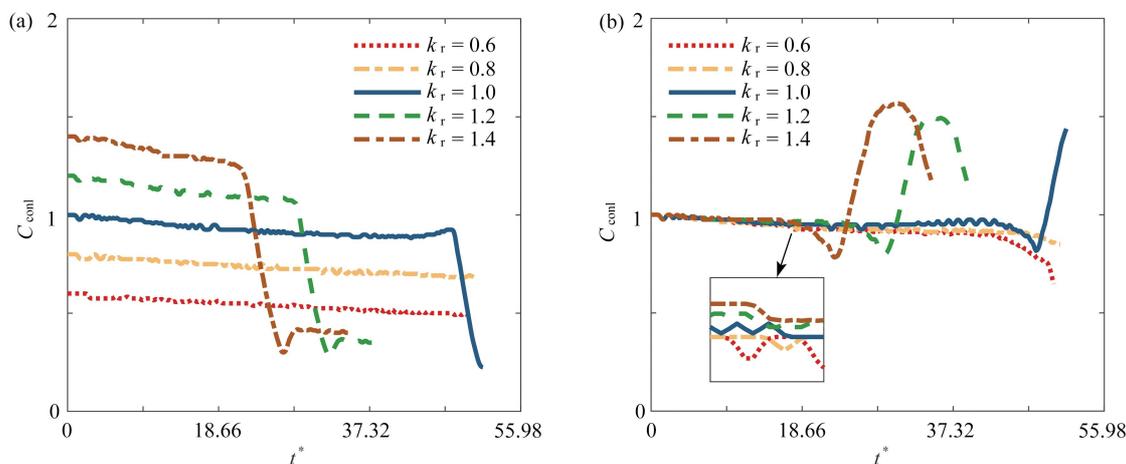


图 14 不同相对大小下的上、下游液滴接触长度随时间的变化: (a) 上游液滴; (b) 下游液滴

Fig. 14 Variations of liquid-wall contact lengths with time under different droplet relative sizes: (a) upstream droplets; (b) downstream droplets

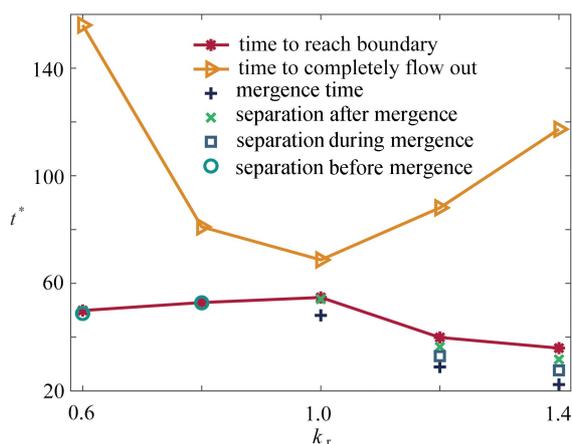


图 15 不同初始液滴相对大小下液滴状态变化时刻

Fig. 15 Droplet state change moments under different initial droplet relative sizes

5 结 论

本文研究了不同接触角滞后性表面上双液滴的运动行为,主要分析了毛细数、通道表面滞后性、液滴初始距离和初始大小对液滴运动形态、液滴与壁面的黏滞力大小、液滴到达出口以及离开通道的的影响.结果表明:

- 1) C_a 增加使得液滴断裂次数增加,有利于减小液滴到达出口的时间;然而 C_a 增加也会导致破碎的小液滴体积变小,使得液滴排出通道的时间增加.
- 2) 接触角滞后性窗口越大,液滴运动速度越慢且两液滴相对运动速度差越大,液滴到达出口和排出通道的时间增加.
- 3) 随着液滴间距的增加,两液滴的合并断裂转变为合并过程中断裂以及先断裂再合并模式,且液滴排出通道的时间随其间距的增加而增加.
- 4) 相对于小-大液滴模式,大-小液滴模式的运动现象更复杂,且两液滴尺寸差距越大,液滴排出通道所需时间越长.

本文的工作可为实际工业过程,如质子交换膜燃料电池气体扩散层液滴的移出、微流体液滴制备系统液滴的控制、微滴喷射技术中液滴形成过程等提供理论指导。

参考文献(References):

- [1] GUPTA A K, BASU S. Deformation of an oil droplet on a solid substrate in simple shear flow[J]. *Chemical Engineering Science*, 2008, **63**(22): 5496-5502.
- [2] LIU Y, FAN J W, LIU L L, et al. Numerical simulation of residual oil flooded by polymer solution in microchannels[J]. *Geofluids*, 2018, **2018**: 8947839.
- [3] QIN C Z, RENSINK D, HASSANIZADEH S M, et al. Direct simulation of liquid water dynamics in the gas channel of a polymer electrolyte fuel cell[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2012, **159**(4): B434-B443.
- [4] ISMAIL M S, HUGHES K J, INGHAM D B, et al. Effects of anisotropic permeability and electrical conductivity of gas diffusion layers on the performance of proton exchange membrane fuel cells[J]. *Applied Energy*, 2012, **95**: 50-63.
- [5] YANG X G, ZHANG F Y, LUBAWY A L, et al. Visualization of liquid water transport in a PEMFC[J]. *Journal of Power Sources*, 2004, **7**(11): A408-A411.
- [6] CHO S C, WANG Y, CHEN K S. Droplet dynamics in a polymer electrolyte fuel cell gas flow channel: forces, deformation and detachment II: comparisons of analytical solution with numerical and experimental results[J]. *Journal of Power Sources*, 2012, **210**: 191-197.
- [7] ZHAN Z G, WANG C, FU W G, et al. Visualization of water transport in a transparent PEMFC[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, **37**(1): 1094-1105.
- [8] SEEVARATNAM G K, DING H, MICHEL O, et al. Laminar flow deformation of a droplet adhering to a wall in a channel[J]. *Chemical Engineering Science*, 2010, **65**(15): 4523-4534.
- [9] SCHLEIZER A D, BONNECAZE R T. Displacement of a two-dimensional immiscible droplet adhering to a wall in shear and pressure-driven flows[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1999, **383**: 29-54.
- [10] HAO L, CHENG P. Lattice Boltzmann simulations of liquid droplet dynamic behavior on a hydrophobic surface of a gas flow channel[J]. *Journal of Power Sources*, 2009, **190**: 435-446.
- [11] ZHU X, SUI P C, DJILALI N. Three-dimensional numerical simulations of water droplet dynamics in a PEMFC gas channel[J]. *Journal of Power Sources*, 2012, **181**(1): 101-115.
- [12] MONDAL B, JIAO K, LI X. Three-dimensional simulation of water droplet movement in PEM fuel cell flow channels with hydrophilic surfaces[J]. *International Journal of Energy Research*, 2011, **35**(13): 1200-1212.
- [13] RAMAN K A, BIRGERSSON E, SUI Y, et al. Electrically induced droplet ejection dynamics under shear flow[J]. *Physics of Fluids*, 2020, **32**(3): 032103.
- [14] CRISTINI V, TAN Y C. Theory and numerical simulation of droplet dynamics in complex flows: a review[J]. *Lab on a Chip*, 2004, **4**(4): 257-264.
- [15] ZHANG K X, LI Z, MAXEY M, et al. Self-cleaning of hydrophobic rough surfaces by coalescence-induced wetting transition[J]. *Langmuir*, 2019, **35**(6): 2431-2442.
- [16] HAN B, YU J, MENG H. Lattice Boltzmann simulations of liquid droplets development and interaction in a gas channel of a proton exchange membrane fuel cell[J]. *Journal of Power Sources*, 2012, **202**: 175-183.
- [17] 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 Jiayu, ZENG Zhong, QIAO Long. Numerical simulation of droplets' dynamic wetting process with the phase field method[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019, **40**(9): 957-967.(in Chinese))
- [18] ERAL H B, T MANNETJE D, OH J M. Contact angle hysteresis: a review of fundamentals and applications[J]. *Colloid and Polymer Science*, 2013, **291**(2): 247-260.
- [19] QIAN B A, BREUER K S. The motion, stability and breakup of a stretching liquid bridge with a receding contact line[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2011, **666**: 554-572.
- [20] DAI Q, HUANG W, WANG X. Contact angle hysteresis effect on the thermocapillary migration of liquid droplets[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2018, **515**: 32-38.
- [21] YANG J P, MA X, FEI L L, et al. Effects of hysteresis window on contact angle hysteresis behaviour at large Bond number[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2020, **556**(3): 327-337.
- [22] FANG C, HIDROVO C, WANG F M, et al. 3-D numerical simulation of contact angle hysteresis for microscale

- two phase flow[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2008, **34**(7): 690-705.
- [23] DUSSAN E B. On the ability of drops to stick to surfaces of solids III: the influences of the motion of the surrounding fluid on dislodging drops[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1987, **174**: 381-397.
- [24] 柴振华, 郭照立, 施保昌. 利用多松弛格子Boltzmann方法预测多孔介质的渗透率[J]. 工程热物理学报, 2010, **31**(1): 107-109. (CHAI Zhenhua, GUO Zhaoli, SHI Baochang. Prediction of permeability in porous media with multi-relaxation-time lattice Boltzmann method[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2010, **31**(1): 107-109.(in Chinese))
- [25] 谢驰宇, 张建影, 王沫然. 液滴在固体平表面上均匀蒸发过程的格子Boltzmann模拟[J]. 应用数学和力学, 2014, **35**(3): 247-253. (XIE Chiyu, ZHANG Jianying, WANG Moran. Lattice Boltzmann simulation of droplet evaporation on flat solid surface[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2014, **35**(3): 247-253.(in Chinese))
- [26] 张贝豪, 郑林. 倾斜多孔介质方腔内纳米流体自然对流的格子Boltzmann方法模拟[J]. 物理学报, 2020, **69**(16): 164401. (ZHANG Beihao, ZHENG Lin. Numerical simulation of natural convection of nanofluids in an inclined square porous enclosure by lattice Boltzmann method[J]. *Acta Physica Sinica*, 2020, **69**(16): 164401.(in Chinese))
- [27] BA Y, LIU H H, SUN J J, et al. Color-gradient lattice Boltzmann model for simulating droplet motion with contact-angle hysteresis[J]. *Physical Review E*, 2013, **88**: 043306.
- [28] 许友生, 刘慈群, 俞慧丹. 多孔介质中两相驱离的格子Boltzmann模型新研究[J]. 应用数学和力学, 2002, **23**(4): 353-358. (XU Yousheng, LIU Ciqun, YU Huidan. New studying of lattice Boltzmann method for two phase driven in porous media[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2002, **23**(4): 353-358.(in Chinese))
- [29] SWIFT M R, ORLANDINI E, OSBORN W R, et al. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems[J]. *Physical Review E*, 1996, **54**(5): 5041-5052.
- [30] LI Q X, CHAI Z H, SHI B C, et al. Deformation and breakup of a liquid droplet past a solid circular cylinder: a lattice Boltzmann study[J]. *Physical Review E*, 2014, **90**: 043015.
- [31] 梁佳, 高明, 陈露, 等. 基于格子Boltzmann方法的液滴撞击具有不同润湿性孔板的研究[J]. 应用数学和力学, 2022, **43**(1): 63-76. (LIANG Jia, GAO Ming, CHEN Lu, et al. Study on droplets impacting on orifice plates with different wettabilities based on the lattice Boltzmann method[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2022, **43**(1): 63-76.(in Chinese))
- [32] EBADI A, HOSSEINALIPOUR S M. The collision of immiscible droplets in three-phase liquid systems: a numerical study using phase-field lattice Boltzmann method[J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2022, **178**: 289-314.
- [33] YUE P T. Thermodynamically consistent phase-field modelling of contact angle hysteresis[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2020, **899**: A15.
- [34] PORTER M L, COON E T, KANG Q J, et al. Multicomponent interparticle potential lattice Boltzmann model for fluids with large viscosity ratios[J]. *Physical Review E*, 2012, **86**(3): 036701.
- [35] SHAN X W. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models[J]. *Physical Review E*, 2006, **73**(4): 047701.
- [36] KANG Q, ZHANG D, CHEN S. Displacement of a two-dimensional immiscible droplet in a channel[J]. *Physics of Fluids*, 2002, **14**(9): 3203-3214.
- [37] DING H, SPELT P D M. Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion[J]. *Physical Review E*, 2007, **75**(4): 046708.
- [38] LIU H H, JU Y P, WANG N N, et al. Lattice Boltzmann modeling of contact angle and its hysteresis in two-phase flow with large viscosity difference[J]. *Physical Review E*, 2015, **92**(3): 033306.
- [39] LADD A J C. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation part 1: theoretical foundation[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1994, **271**: 285-309.
- [40] WANG C, SHEN C Q, WU S C, et al. Hydrodynamic binary coalescence of droplets under air flow in a hydrophobic microchannel[J]. *Chinese Physics B*, 2019, **28**(2): 024702.
- [41] ZHANG F Y, YANG X G, WANG C Y. Liquid water removal from a polymer electrolyte fuel cell[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2005, **153**(2): A225.
- [42] WU J, HUANG J J. Dynamic behaviors of liquid droplets on a gas diffusion layer surface: hybrid lattice Boltzmann investigation[J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, **118**(4): 044902.