

润湿性梯度驱动液滴运动的格子 Boltzmann 模拟*

石自媛 胡国辉[†] 周哲玮

(上海大学上海市应用数学和力学研究所, 上海 200072)

(2009 年 3 月 24 日收到; 2009 年 8 月 4 日收到修改稿)

运用考虑了固体与液体间分子作用力的格子 Boltzmann 方法, 数值研究了由于固液界面上表面张力梯度引起的 Marangoni 效应驱动的液滴运动. 当表面张力梯度较小时, 计算结果和前人的理论预测符合较好. 而表面张力梯度较大时, 由于液滴不变形和准平衡态等假设不再满足, 理论预测的液滴运动速度高于数值模拟的结果. 计算结果显示, 在向亲水端运动过程中液滴内部出现旋涡结构, 当润湿性梯度较大时, 其前进速度和接触角随时间变化出现振荡.

关键词: 润湿性, 格子 Boltzmann 方法, Marangoni 效应, 液滴

PACC: 4755K, 6810C

1. 引 言

微纳米制造技术的发展导致微纳尺度系统的面积-体积比大幅度增加, 使得表面和表面能的控制成为至关重要的问题. 研究表明, 通过化学表面处理、介质上的电润湿、光学等方法在固体表面形成润湿性梯度, 是在微系统中驱动液体运动的行之有效的办法^[1-4]. 通过分泌油性液体薄膜, 许多昆虫可以保证其足垫表皮和光滑壁面之间的黏附, 从而实现在光滑壁面的快速爬行^[5].

固体表面润湿性质的研究吸引了众多的研究者. Cassie 等^[6]较早对化学不均匀光滑表面的润湿问题进行了研究, 他们通过理论分析, 得到了经典的 Cassie 方程. Brochard^[7]通过固流界面的能量梯度得到了液滴移动的动力, 又通过对液滴的黏性应力积分得到液滴移动的阻力, 在假设梯度很小的情况下, 令动力和阻力平衡, 进而得到了预测液滴移动速度的方程. Fabrice 等^[8]同样在固体表面的化学梯度小, 液滴移动没有形变的假设下, 得到动态接触角与混合表面两边的平衡接触角之间的关系, 并且综合考虑了固体表面的化学反应速率等因素, 得到了关于移动速度的理论公式. Bain 等^[1]在实验中巧妙地通过颗粒的化学反应, 将液滴经过的固体表

面变成疏水表面, 而将液滴前方的固体表面设计为亲水表面. 这样只要液滴前方有亲水表面存在, 液滴就会一直向前运动, 甚至还可以克服重力往高处运动. 上述研究工作为平衡态液滴、液膜在固体表面上的浸润行为做出了理论描述, 但目前人们对其中的动力学特性的研究尚不足. Yeo 等^[9]基于润滑近似, 将考虑电场影响的流体力学方程简化为长波方程, 研究了电场对液滴的控制和操纵问题. 但由于长波方程的局限性, 它无法精确地捕捉流场的整体特征. 本文拟考虑分子间的作用力、固体表面的作用等因素的影响, 运用格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, LBM) 研究这个问题, 这不仅可以增进人们对液滴运动的动力学特性的了解, 而且可以考虑较大表面张力梯度、液滴变形等复杂情况.

分子动力学 (MD) 模拟是研究微纳米尺度流体运动的重要工具, 但当时间和空间尺度较大时, 这种方法所需的计算量极其巨大. LBM 是根据分子运动理论建立起来的动理学模型, 能较好地描述介于原子和连续介质之间的尺度上流体的运动, 这对于本质上是介观的流体界面问题有着天然的优势. 目前人们已经根据润湿问题所具有的物理特征, 陆续建立了一些 LBM 的模型. Martys 和 Chen^[10]基于伪势 (pseudo-potential) 方法考虑不掺混的两组分流体

* 国家自然科学基金 (批准号: 10872122)、上海市基础研究重点计划 (批准号: 08JC1409800)、上海市科学技术发展基金 (批准号: 071605102) 和上海市教委科研创新基金 (批准号: 08YZ10) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: ghhu@staff.shu.edu.cn

在复杂几何边界下的流动,将流体之间以及流体与固体之间的作用力作为外力项直接加入演化方程,通过调节流、固之间作用力大小的参数来控制液体在固体表面的润湿性.当参数为正时,流体与固体之间的浸润性表现为亲水性,当参数为负时,表现为疏水性.他们成功地将该模型运用到多孔介质的流动中. Raiskinmäki 等^[11]也利用该方法研究了三维液滴在光滑和粗糙的固体表面铺展的动力学过程,并发现粗糙表面将减慢液滴的铺展,减小平衡时液滴的半径. Fang 等^[12]用 LBM 方法对复杂几何形状中互不相溶的流体运动进行了模拟. Fan 等^[13]同样基于伪势模型考虑了毛细管壁面与流体之间的接触角问题,得到了与平衡态热力学理论计算和 MD 计算相一致的结果,证明了 LBM 在模拟接触线动力学问题上的优势. Kang 和 Chen 等^[14]将 Martys 等^[10]提出的考虑流体与固体之间作用力的外力项简化,模拟了管道中液滴在不同浸润条件,重力场下的动力学行为,分别考虑了接触角的影响和 Bond 数(重力与表面张力的比值)的影响等. Huang 等^[15]通过引入润湿的边界条件,构造了有几何结构的纳米疏水管道,并研究了液滴在管道中的运动特性.

上述方法从各种角度都证明了 LBM 在对液滴铺展的模拟问题上是有力的工具,但是他们的模拟方法与该问题的物理实质有不一致的地方.例如,为了得到亲水性条件,将固体与流体之间的作用表示为吸引力,而为了得到疏水性条件,又将固体与流体之间的作用示为排斥力;另外,尽管统计力学和 MD 模拟已经证实固体表面附近流体的密度分布是振荡的,但上述 LBM 模型依然只能得到密度是常数的结果.

Xing 等^[16]基于单相自由面模型,通过在与固体表面邻近的液体层的分布函数中加入扰动的办法,考虑了表面张力和润湿特性,得到了控制浸润的参数与接触角的线性变化关系,并且模拟了不同浸润条件下液滴从喷嘴喷出的不同形状等.在 Swift 等^[17]提出的自由能模型中,由于固体表面的不可穿透性,致使与其邻近的流体层出现不连续,因此控制固液界面作用力大小的参数不能真实反映固体-流体系统的物理实质. Dupuis 和 Yeomans^[18]通过将自由能最小化,建立了控制密度导数和接触角的固体与流体间的浸润边界条件,并利用该模型模拟了液滴在具有拓扑结构的固体表面下的铺展,发现了液滴在此结构下的超疏水行为. Zhang 等^[19]同样基

于自由能模型,提出了平均场自由能方法,得到了与热力学,MD 定性一致的模拟结果. Kawasaki 等^[20]将固体边界看成是不移动,不变形的流体层,将流体之间的界面以及流体和固体之间的界面统一处理.因此计算固体边界处物理量的梯度时,就能采用和处理流体间边界相似的方法.该模型成功地模拟了固壁处的滑移速度对接触角的依赖性以及动态接触角与静态接触角之间的关系问题.

2. 格子 Boltzmann 模型

Zhang 等^[19]提出的模型原理清晰,易于编程,通过调整控制参数就能得到不同的接触角.本文采用该模型对润湿性梯度驱动的液滴运动进行数值模拟.

根据 van der Waals 理论中的平均场近似,可以得到流体系统的总自由能

$$U = \int d\mathbf{r} \{ \psi[\rho(\mathbf{r})] + \frac{1}{2}\rho(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' \phi_{ff}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \times [\rho(\mathbf{r}') - \rho(\mathbf{r})] + \rho(\mathbf{r})V(\mathbf{r}) \}, \quad (1)$$

其中右边第一项中 $\psi(\rho)$ 是密度为 ρ 的某一相的总自由能,第二项是由于液体界面或液固界面处密度变化引起的表面能, $\phi_{ff}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ 是位于 \mathbf{r}' 和 \mathbf{r} 处的两个粒子之间的作用势,第三项代表了外部势能 $V(\mathbf{r})$ (如重力、固体表面对液体的作用势等)对自由能函数 U 的贡献.得到自由能的表达式后,可以定义压力为

$$P(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})\psi'[\rho(\mathbf{r})] - \psi[\rho(\mathbf{r})] + \frac{1}{2}\rho(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' \phi_{ff}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \times [\rho(\mathbf{r}') - \rho(\mathbf{r})]. \quad (2)$$

对于密度均匀的单相流体,非局部积分项为零,方程(2)成为流体的状态方程.广泛使用的 BGK 模型^[21]中,流体颗粒运动时分布函数 f_α 遵循

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha, t + 1) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)], \quad (3)$$

其中 α 表示颗粒运动的方向, τ 为松弛时间, f_α^{eq} 是平衡态分布函数,即

$$f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = t_\alpha \rho \left[1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right], \quad (4)$$

式中 $c_s = 1/\sqrt{3}$ 是格子的声速,流体运动黏性系数 $\nu = c_s^2(\tau - 1/2)$. 宏观流体的密度 ρ 和动量 $\rho\mathbf{u}$ 可以通过分布函数得到

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha},$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} + \tau \mathbf{F} \quad (5)$$

其中 \mathbf{F} 为外力. 通过 Chapman-Enskog 展开, 可以得到系统的状态方程为

$$P = c_s^2 \rho + \Phi, \quad (6)$$

其中 Φ 是与外力 \mathbf{F} 有关的势函数

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = -\nabla \Phi(\mathbf{x}, t). \quad (7)$$

将方程(5)与方程(2)联立起来, 可以得到

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}) \psi'[\rho(\mathbf{x})] - \psi[\rho(\mathbf{x})] + \frac{1}{2} \rho(\mathbf{x}) \int d\mathbf{x}' \phi_{ff}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \times [\rho(\mathbf{x}') - \rho(\mathbf{x})] - c_s^2 \rho(\mathbf{x}). \quad (8)$$

利用 van der Waals 理论, 可以得到某一相流体的自由能表达式

$$\psi(\rho) = \rho k_B T \ln \frac{\rho}{1 - b\rho} - a\rho^2, \quad (9)$$

其中 $a = 9/49$, $b = 2/21$ 分别是 van der Waals 常数^[17], k_B 是 Boltzmann 常数, T 是绝对温度.

流体之间的作用势 ϕ_{ff} 被简化为单个参数 K 的表达式

$$\phi_{ff}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = \begin{cases} K & (|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| = 1) \\ K/4 & (|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| = \sqrt{2}), \\ 0 & \text{其他} \end{cases}, \quad (10)$$

其中 K 代表两个最近的粒子之间的作用势大小. 然后将固体与流体之间的势用固体粒子 (\mathbf{x}_s) 和流体粒子 (\mathbf{x}_f) 之间的吸引力表示为

$$\mathbf{F}_s = \begin{cases} K_w \rho(\mathbf{x}_f) (\mathbf{x}_s - \mathbf{x}_f) & (|\mathbf{x}_s - \mathbf{x}_f| = 1) \\ K_w \rho(\mathbf{x}_f) (\mathbf{x}_s - \mathbf{x}_f) / 4\sqrt{2} & (|\mathbf{x}_s - \mathbf{x}_f| = \sqrt{2}), \\ 0 & \text{其他} \end{cases}, \quad (11)$$

其中正数 K_w 作为吸引力项, 可以调节它的大小从而得到不同的浸润性. Zhang 等^[19] 的计算表明, 接触角随 K_w 的增加而线性减小.

3. 物理模型和计算结果

为了尽量简化问题, Raphaël^[22] 在理论模型中通常假定液滴移动的时候没有形变, 即假定两边表面的表面梯度非常小, 从而得到了关于液滴动态接触角以及移动速度的预测公式. 若不考虑化学反应, 对于上述简单的不均匀表面, 可得到液滴移动的速度

$$V = \frac{\gamma}{6lv} \tan \theta^* (\cos \theta_{pe} - \cos \theta_{Ac}), \quad (12)$$

其中 γ 是液体表面张力; l 是衡量宏观尺度和分子尺度的比例参数; θ^* 为动态接触角, 与两种不同浸润性表面的静态接触角的关系为

$$2\cos \theta^* = \cos \theta_{Ac} + \cos \theta_{pe}. \quad (13)$$

图 1 是本文构造的不均匀固体表面示意图. 该表面由两种不同浸润性表面组成, 一种亲水性表面用 P 表示, 另一种疏水性表面用 A 表示. 这样的表面存在表面张力梯度, 为了尽量减小表面能, 液滴将自发从表面 A 向表面 P 移动. 为了保持液滴的持续运动, 我们通过不断追踪液滴移动, 将液滴左侧的固体表面始终设定为疏水表面, 右侧的固体表面设定为亲水表面, 从而将计算结果和有关实验以及理论预测^[11] 相比较.

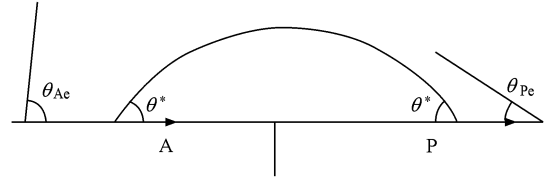


图 1 液滴被置于于浸润性不同的 A 和 P 组成的混合表面上示意图 θ_{Ac} , θ_{pe} 分别表示液滴在表面 A 和表面 P 上的平衡接触角, θ^* 是动态接触角

本文采用如图 2 的二维九速度方形格子 (D2Q9) 进行模拟, (4) 式中 $t_0 = 4/9$, $\alpha = 1-4$ 时 $t_{\alpha} = 1/9$, $\alpha = 5-8$ 时 $t_{\alpha} = 1/36$. 计算区域取为 400×100 个网格, 其中液滴的初始半径为 $R = 20$ 个网格, 计算中两种流体的密度比设为 12.3. 左右边界条件为周期边界, 上边界为镜面, 下边界为固壁, 使用标准反弹格式. 这里只考虑小液滴 (尺寸小于毛细长度) 的运动, 这样的情况下可以忽略重力的影响.

为了和上述理论公式作比较, 本文取 P 表面固体与液体吸引力 $K_{wP} = 0.165$, 此时对应平衡态接触角为 75.4° . 通过改变 A 表面的 K_{wA} 而改变对应的静态接触角 θ_{Ac} , 并得到不同的动态接触角 θ^* 值. 如图 3 所示, 由图可以看到, 动态接触角基本上呈线性变化, 当表面张力梯度较小时, 数值结果与理论公式 (13) 符合得较好, 这表明液滴在这种不均匀表面的运动是一个连续地不断失去平衡的过程. 液滴运动的驱动力为表面张力梯度产生的 Marangoni 效应, 阻力是黏性力. 计算发现液滴基本上保持匀速运动, 这表明驱动力和黏性阻力是大致相等的. 图 4 是

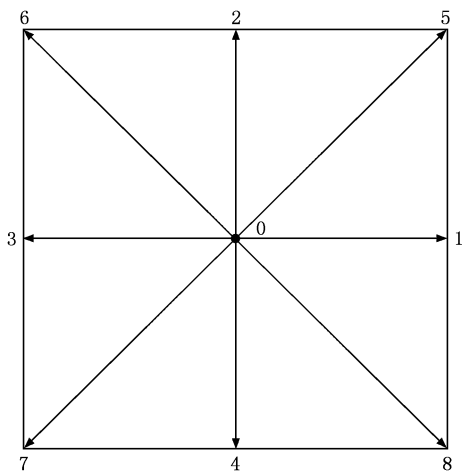


图2 二维九速度方形(D2Q9)格子

液滴移动速度 V 随亲疏水表面控制参数 K_w 的比值的 变化关系,其中本文以液滴最前端的运动速度来 表示该速度.与图3类似,当该比值较小的时候,即 表面张力梯度更大时,数值结果与理论公式预测的 结果不太一致.这是由于此时理论公式的液滴不变形 和准静态等假设不能满足的缘故.液滴的变形需要 消耗一定的能量,因此液滴的运动速度低于理论的 预测值.

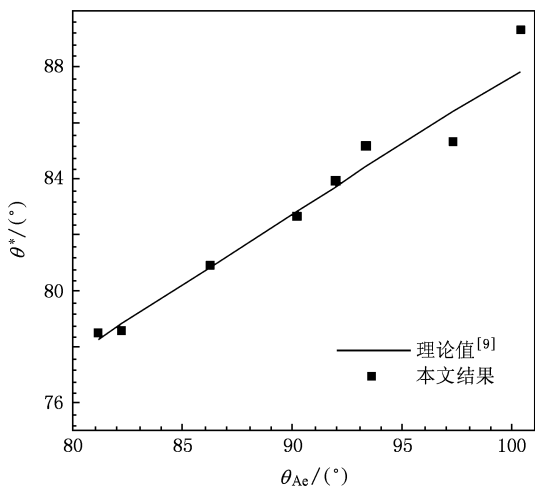


图3 P表面接触角 θ_{pe} 固定为 75.4° 时,动态接触角随A表面接 触角变化的关系

如果不把液滴经过的固体表面不断地变成疏 水表面,那么液滴的运动将持续到接触表面完全为 均匀表面为止.我们给固体表面设定一个较大的阶 梯的浸润性梯度来研究液滴的运动,计算中 $K_{wp} = 0.16, K_{wa} = 0.07$ (对应的静态接触角约为 127°).

如图5所示,液滴在运动过程中,有较大的形

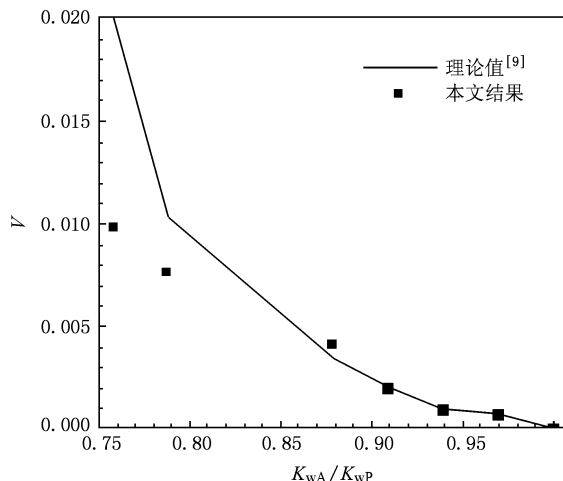


图4 P表面固体与液体吸引力设为 $K_{wp} = 0.165$ 时,液滴的移 动速度随 K_{wA}/K_{wP} 的值变化的关系

变,液滴从A表面一直向P表面运动,直到液滴铺 展在固体表面的最左角到达A表面和P表面相交 的点时,液滴后缘停止向前运动,最终在亲水表面P 达到平衡态.为了分析液滴运动的详细过程,我们 以 $t = 1000$ 时刻为代表,分析了液滴内部的速度矢 量,如图6所示.有趣的是,我们发现液滴运动不是 平动,而是滚动着往前运动,在液滴内部有一个旋 涡.绕涡心的周向速度随着半径增大,形成与固体 涡核类似的结构,这将导致在流体界面处存在较大 的剪切应力.

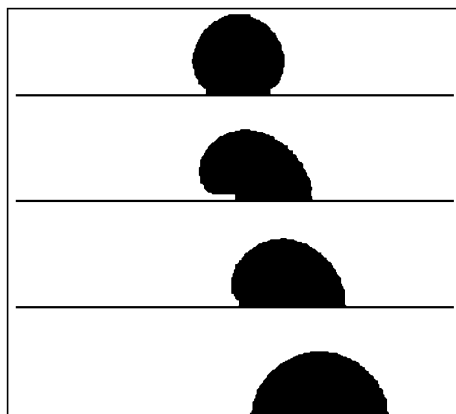


图5 $K_{wp} = 0.16, K_{wa} = 0.07$ 时液滴的运动过程 从上到下时 间 $t = 0, 1000, 2000, 3000$

图7通过液滴前缘运动速度分析其运动过程. 图中显示,经过一个瞬态过程后,液滴的速度随着 时间变化的基本趋势是线性的,但是速度的值出现 振荡.图8表明液滴在此运动过程中的前进角和后

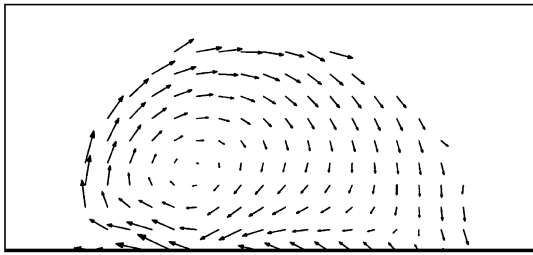


图6 $K_{wP} = 0.16, K_{wA} = 0.07$ 时液滴内部的速度矢量图 $t = 1200$

退角的大小在运动过程中也出现振荡. 我们对该问题做了网格依赖性的分析, 发现这样的振荡同样是存在的. 实际上, 在运用分子动力学模拟研究纳米尺度界面去润湿问题时, 也发现类似的接触角随时间振荡的现象^[23, 24]. 因此该振荡的出现可能蕴涵着复杂的物理或动力学机理, 尚有待进一步深入分析. 该图还显示由于前缘附着于亲水表面, 前进接触角总体上小于后退接触角; 后缘靠近亲水端时, 后退接触角很快下降, 最后两者趋向一致, 液滴达到平衡态.

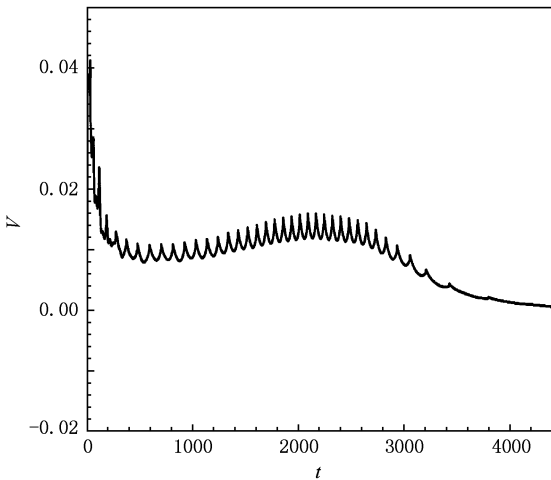


图7 $K_{wP} = 0.16, K_{wA} = 0.07$ 时液滴运动的速度随时间的变化 (横坐标为计算时间步)

以上结果表明, 由于固体表面不同位置对液体分子的吸引力之差 ΔK_w 而引起的润湿性梯度是液滴的驱动力, 对于密度为 ρ , 初始半径为 R , 运动黏性系数为 ν 的液滴, 可以定义无量纲参数 Galileo 数 Ga 和 Bond 数 Bo , 分别衡量驱动力与黏性力和液体表面张力 σ 的比值:

$$\begin{aligned} Ga &= \frac{\Delta K_w R^3}{\nu^2}, \\ Bo &= \frac{\Delta K_w \rho R^2}{\sigma}. \end{aligned} \quad (14)$$

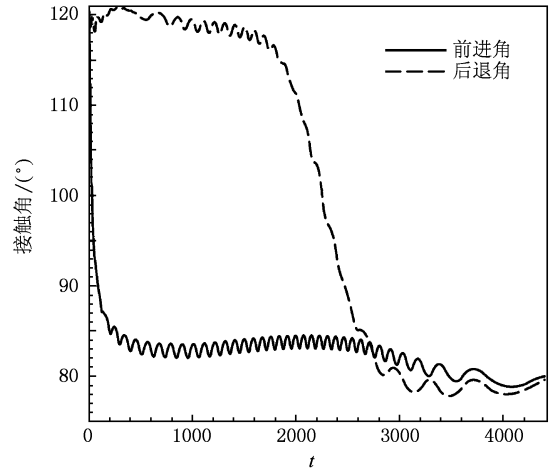


图8 $K_{wP} = 0.16, K_{wA} = 0.07$ 时液滴运动的前进角和后退角随时间的变化 (横坐标为计算时间步)

对于本文计算的情况, 有 $Ga = 1280, Bo = 6941$. 我们将在以后的研究中深入探讨这些无量纲参数对物理过程的影响.

4. 结 论

利用表面力进行驱动是微纳米尺度流体控制的有效手段. 格子 Boltzmann 方法因其理论基础的介观性、处理复杂边界问题的灵活性和高效的并行性, 成为模拟微纳米尺度流体界面问题的有力工具. 通过在 LBM 模型中考虑固体对液体的吸引力, 来描述固体表面的不同润湿性, 由此可以模拟液固表面张力梯度驱动的液滴运动. 本文首先通过不断追踪液滴的运动, 将液滴左侧的固体表面始终设定为疏水表面, 右侧的固体表面设定为亲水表面. 计算结果发现, 当表面张力梯度较小时, 液滴运动的速度、动态接触角与前人的理论公式符合得较好; 而当梯度较大时, 诸如液滴不变形、准平衡态等理论公式建立的假设不成立, 因此得到的液滴运动速度低于理论预测. 若将液滴置于初始时刻为阶梯状的不同浸润性表面, 可以捕捉到液滴从运动到静止的过程, 发现液滴铺展边界的一端始终被两种不同浸润性表面的交点拖住, 最后在均匀的亲水表面上达到平衡态. 对速度矢量的分析显示液滴是滚动着向亲水端运动的, 其内部出现类似固体涡核状的旋涡. 在我们计算的参数下, 液滴运动的速度、动态接触角总体变化趋势是线性的, 但随时间变化出现振荡, 其中的物理机理尚待进一步研究.

- [1] Bain C D, Burnett-Hall G D, Montgonerie R R 1994 *Nature* **372** 414
- [2] Mugele F, Baret J C 2005 *J. Phys. : Condens. Matter* **17** R705
- [3] Squires T M, Quake S R 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 977
- [4] Wang F, He F 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1005 [王 飞、何 枫 2006 物理学报 **55** 1005]
- [5] Zhang X H, Zhang X J, Liu Y H, Schaefer J A, Wen S Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4722 [张晓昊、张向军、刘永和、Schaefer J A、温诗铸 2007 物理学报 **56** 4722]
- [6] Cassie A B D 1948 *Discuss. Faraday Soc.* **3** 11
- [7] Brochard F 1989 *Langmuir* **5** 432
- [8] Fabrice D D S, Thierry O 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 2972
- [9] Yeo L Y, Craster R V, Matar O K 2007 *J. Colloid Interface Sci.* **306** 368
- [10] Martys N S, Chen H 1996 *Phys. Rev. E* **53** 743
- [11] Raikimäki P 2000 *Comput. Mat. Sci.* **18** 7
- [12] Fang H, Wan R, Fan L 2000 *Chin. Phys.* **9** 515
- [13] Fan L, Fang H, Lin Z 2001 *Phys. Rev. E* **63** 051603
- [14] Kang Q, Zhang D, Chen S 2002 *Phys. Fluids* **14** 3203
- [15] Huang J J, Shu C, Chew Y T 2009 *Phys. Fluids* **21** 022103
- [16] Xing X Q, Butler D L, Yang C 2006 *Comp. Math. Sci.* **7** 1
- [17] Swift M R, Orlandini E, Osborn W R, Yeomans J M 1996 *Phys. Rev. E* **54** 5041
- [18] Dupuis A, Yeomans J M 2005 *Langmuir* **21** 2624
- [19] Zhang J, Li B, Kwok D Y 2004 *Phys. Rev. E* **69** 032602
- [20] Kawasaki A, Onishi J, Chen Y, Ohashi H 2007 *Comp. Math. Appl.* **55** 1492
- [21] Guo Z L, Zheng C G 2009 *Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method* (Beijing: Scientific Press) (in Chinese) [郭照立、郑楚光 2009 格子 Boltzmann 方法的原理和应用(北京: 科学出版社)]
- [22] Raphaël E 1988 *C. R. Acad. Sci. Paris* **306** 751
- [23] Hu G H, Xu A J, Xu Z, Zhou Z W 2008 *Phys. Fluid.* **20** 102101
- [24] Koplík J, Banavar J R 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4401

Lattice Boltzmann simulation of droplet motion driven by gradient of wettability*

Shi Zi-Yuan Hu Guo-Hui[†] Zhou Zhe-Wei

(Shanghai Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Shanghai University, Shanghai 200072, China)

(Received 24 March 2009; revised manuscript received 4 August 2009)

Abstract

The lattice Boltzmann method is used to simulate numerically the droplet motion driven by Marangoni effect, which is induced by surface tension gradient on the solid-liquid interface, with the consideration of interaction between solid and liquid molecules. The computation results are well compared with the theoretical prediction available for smaller surface tension gradient, whereas the translation velocity of droplet is smaller than the theoretical value for larger gradient, because some assumptions, such as the quasi-equilibrium and non-deformable droplet, are not satisfied in the theoretical analysis anymore. Vortical structure with a solid-like core is found in the droplet when it moves to the hydrophilic end. The variations of velocity and contact angle of droplet are found to be oscillating with time for larger gradient of wettability.

Keywords: wettability, lattice Boltzmann method, Marangoni effect, droplet

PACC: 4755K, 6810C

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10872122), the Key Program of Shanghai Fundamental Research Foundation, China (Grant No. 08JC1409800), Shanghai Foundation for Development Science and Research (Grant No. 071605102), and the Scientific Research Innovation Foundation of Shanghai Municipal Education Commission (Grant No. 08YZ10).

[†] Corresponding author. E-mail: ghhu@staff.shu.edu.cn