

## 带凹槽的微通道中液滴运动数值模拟\*

张明焜<sup>1)</sup> 陈硕<sup>1)†</sup> 尚智<sup>2)</sup>

1) (同济大学航空航天与力学学院, 上海 200092)

2) (Science and Technology Facilities Council, Daresbury Laboratory, Warrington WA4 4AD, UK)

(2011年4月18日收到; 2011年6月2日收到修改稿)

运用改进的耗散粒子动力学方法模拟了液滴在由凹槽所构成的粗糙表面微通道内的运动行为. 改进的耗散粒子动力学方法采用新近提出的“短程排斥、长程吸引”相互作用势能函数, 从而可以模拟带有自由面的流体, 如液滴等. 模拟了新势能函数下液滴与固体壁面的静态接触角, 并用2次多项式拟合了“接触角  $-a_{wf}/a_f$ ”的变化曲线. 研究了液滴在带凹槽的微通道中运动时, 微通道壁面浸润性、外场力、液滴温度对液滴流动特性的影响. 结果表明壁面浸润性和外场力对液滴流动特性的影响较大, 液滴温度对液滴流动特性的影响较小. 研究结果对运用耗散粒子动力学方法模拟并分析微流体在复杂微通道中的流动有一定的参考价值.

**关键词:** 液滴, 壁面浸润性, 接触角, 凹槽微通道

**PACS:** 47.10.-g, 47.11.-j, 47.55.nb, 47.61.Jd

## 1 引言

目前快速发展的微流体技术正在不断提升微流体器件的性能和功能. 例如, Yun 等<sup>[1]</sup> 研制了一种在微尺度条件下利用表面张力驱动的并具有极低能耗的微泵, 该系统有望应用于便携式生物医电器件中; Gordillo 等<sup>[2]</sup> 研制的微气泡生成装置可生成微米量级的气泡. 该气泡的液膜很薄, 理论上可以达到仅有表面活性剂和液体本身几层分子的厚度. 一些学者设法对微通道中液体与固体壁面之间的浸润性进行特殊处理, 以引导流体在固体表面运动, 甚至研制自洁基座等<sup>[3]</sup>. 这些技术可望以简单灵活的方式实现各种微米、纳米结构的加工<sup>[4]</sup>. 上述各种微器件的研发常常涉及微尺度条件下各类浸润现象、毛细现象以及带自由面流体的流动现象. 详细了解流体在微尺度条件下的流动机理, 是微流体技术开发的关键, 需要进行广泛深入的研究.

当系统的尺度变小时, 液体的表面积与体积比将会增大, 这使得液固之间的浸润性显著影响液体的运动特性. 流体在微通道中流动时主要受外场力、黏性力和表面张力的作用, 惯性力的

影响常常可以忽略不计<sup>[5]</sup>. 由于设备所限, 常常不能进行完善的微尺度流体实验, 而计算机数值模拟则可以提供比较详尽的信息. 目前适用于微米和纳米尺度流体数值模拟的方法主要有蒙特卡罗方法 (Monte Carlo method)<sup>[6]</sup>、分子动力学方法 (molecular dynamics method)<sup>[7]</sup>、格子-玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method, 简称 LBM)<sup>[8]</sup> 以及耗散粒子动力学方法 (dissipative particle dynamics, 简称 DPD)<sup>[9]</sup> 等. 由于 DPD 可以模拟较长时间内系统介观结构的演变过程, 而受到国内外学者的广泛关注. 目前 DPD 已经成功地应用于对复杂流体和复杂流动过程的模拟, 如聚合物、高分子、胶体溶液的微观形貌、相分离、流体流变特性、油/水/表面活性剂体系、多相流动以及微通道中流体流动的模拟等<sup>[10,11]</sup>, 例如 Liu 等运用 DPD 方法模拟了带有自由面的流体在平直通道和 Y 形通道<sup>[10,11]</sup> 和其他一些微器件<sup>[12]</sup> 中的流动, 模拟得到的结果与相应的实验观测吻合.

另一方面, 我们注意到最近针对荷叶超疏水效应的研究工作取得了一些引人注目的新进展. 过去人们一般认为组成荷叶的材质本身是疏水性的. 然

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10872152) 和上海市教委科研创新重点项目 (批准号: 09ZZ34) 资助的课题.

† E-mail: schen\_tju@mail.tongji.edu.cn

而近期的研究却表明组成荷叶的材质本身是亲水的<sup>[13]</sup>, 荷叶的疏水机理在于特殊的表面粗糙所导致的非浸润性, 也即荷叶表面特殊的微观结构决定了其超疏水性. 同时, 人们也发现, 表面微观形态所产生的效应还可促使液固之间由部分浸润向完全浸润转化<sup>[14]</sup>. 这些现象显示表面微结构对液固之间的浸润性可能会产生重要的影响. 到目前为止, 关于粗糙表面微结构对微流体流动影响的研究工作方兴未艾. 例如 Huang 等<sup>[15,16]</sup> 运用 LBM 模拟了流体在带凹槽的粗糙表面微通道中的流动; Mchale 等<sup>[14]</sup> 则模拟了粗糙表面对于液体在固体表面延展过程的影响等; 石自媛等<sup>[17]</sup> 通过控制壁面的浸润性梯度, 运用 LBM 模型模拟了液固表面张力梯度驱动的液滴运动. 这方面的探索有助于为完全搞清楚壁面拓扑结构对微流体流动行为的影响机理打下基础, 是一个非常值得研究的课题.

本文运用介观尺度数值模拟技术——耗散粒子动力学方法模拟了液滴在一种由凹槽所构成的粗糙表面微通道内的运动行为, 分析了由凹槽构成的粗糙表面对具有不同浸润性的液滴运动行为的影响. 本文采用的是由 Liu 等<sup>[10,11,18]</sup> 新近提出的一种的“短程排斥、长程吸引”的粒子间势能函数, 从而可以模拟液气共存或带有自由面流体的流动. 首先, 我们模拟了液滴在不同温度下的静态接触角, 讨论了固液之间、液液之间粒子相互作用与静态接触角的关系; 其次, 研究了从疏水性 ( $\theta = 130^\circ$ ) 到亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ) 条件下具有不同壁面浸润性的凹槽微通道对液滴运动特性的影响; 再次, 通过改变外场力向下的分量 ( $\alpha_F = 45^\circ, \alpha_F = 30^\circ, \alpha_F = 0^\circ$ ), 研究了不同角度外场力对液滴运动特性的影响; 最后, 通过改变液滴的温度 ( $k_B T = 1.0, k_B T = 0.8$ ) 以改变液滴的黏度和液气密度比, 从而讨论温度对液滴在凹槽微通道中运动特性的影响.

## 2 DPD 简介

### 2.1 DPD 模型

DPD 是一种新兴的介观尺度流体模拟技术, 于 1992 年由 Hoogerbrugge 和 Koelman 提出<sup>[9]</sup>. 在 DPD 中, 每个粒子代表的是一团分子(或原子), 各分子团之间由保守力、耗散力和随机力相互作用. 由于这些分子团之间的相互作用比分子之间的相互作用“软”得多, 因此可以采用比分子动力学大

得多的时间步长. 长的时间步长和大的粒子尺度使得耗散粒子动力学比分子动力学在模拟流体方面有更实际的用途. DPD 遵循质量守恒, 而粒子之间相互作用的对称性, 保证了系统的动量守恒. DPD 中的粒子由于在连续的空间而非离散的格子上运动, 因此遵循 Galilean 不变性. DPD 可以理解为宏观的微分流动控制方程在小尺度上的随机描述<sup>[19]</sup>, 从这个意义说, DPD 方法是连接微观分子动力学方法和宏观流体力学方法的一座桥梁, 是一种比较实用的介观尺度流体模拟技术.

基于牛顿运动方程, DPD 系统中每个粒子的位置和速度随时间的变化规律为

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{f}_i + \mathbf{F}_e, \quad (1)$$

式中:  $\mathbf{r}_i$  和  $\mathbf{v}_i$  为粒子的位置和速度矢量;  $\mathbf{f}_i$  为所有其他粒子(不包括粒子  $i$  本身)作用在粒子  $i$  上的力;  $\mathbf{F}_e$  为粒子所受到的其他外力如高分子链的弹性力等;  $t$  为时间. DPD 系统中单位质量为单个粒子的质量, 因此作用在每个粒子上的力的大小等于粒子的加速度值. 粒子之间的动力相互作用由耗散力和随机力组成, 这两部分作用相互补偿使得系统的平均动能为一恒定值.

$\mathbf{f}_i$  包括保守力  $\mathbf{F}_{C,ij}$ , 耗散力  $\mathbf{F}_{D,ij}$  和随机力  $\mathbf{F}_{R,ij}$  三部分, 其中每一部分都表示粒子之间的两两相互作用:

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} (\mathbf{F}_{C,ij} + \mathbf{F}_{D,ij} + \mathbf{F}_{R,ij}), \quad (2)$$

式中的求和符号对一定的截断半径  $r_c$  内所有的不包括粒子  $i$  的其他粒子进行求和(如果粒子之间的距离  $r_{ij} > r_c$ , 则粒子之间的相互作用为零).

保守力  $\mathbf{F}_{C,ij}$  为作用在两个粒子质心连线方向上粒子之间的作用力, 可表示为:

$$\mathbf{F}_{C,ij} = a_{ij} w_C(r_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (3)$$

式中:  $a_{ij}$  为保守力系数, 表示粒子  $i$  与粒子  $j$  之间最大作用的值,  $w_C(r_{ij})$  为保守力权函数, 其取值与粒子间距离  $r_{ij}$  有关.  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ ,  $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$ ,  $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/|\mathbf{r}_{ij}|$ .

粒子  $j$  作用在粒子  $i$  上的耗散力(或者阻力)  $\mathbf{F}_{D,ij}$  可以表达为:

$$\mathbf{F}_{D,ij} = -\gamma w_D(r_{ij}) (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (4)$$

式中:  $w_D$  为与粒子间距离  $r_{ij}$  有关的权函数, 当  $r_{ij} > r_c$  时,  $w_D$  为零;  $\mathbf{v}_{ij}$  为粒子之间相对速度,  $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ ;  $\gamma$  为耗散系数,  $\gamma$  前面的负号表明耗散力的作用方向总是和相对速度  $\mathbf{v}_{ij}$  方向相反.

耗散力的作用总是阻止粒子之间的相对运动, 因此耗散力作用的结果会降低系统的动能. 系统动能的降低将由随机力  $\mathbf{F}_{R,ij}$  引起的粒子的随机运动进行补偿, 随机力  $\mathbf{F}_{R,ij}$  可表达为:

$$\mathbf{F}_{R,ij} = \sigma w_R(r_{ij}) \xi_{ij} \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (5)$$

式中:  $w_R$  也为与粒子之间距离  $r_{ij}$  有关的权函数, 称为随机力权函数, 当  $r_{ij} > r_c$  时  $w_R$  为零;  $\xi_{ij}$  为随机变量, 其平均值为零且方差为  $\Delta t^{-1}$ ,  $\Delta t$  为时间步长;  $\sigma$  为随机力系数. 与保守力一样, 随机力和耗散力也作用在粒子质心的连线方向.

Espanol 等<sup>[20]</sup> 的研究表明, (4), (5) 式中的两个权函数相互关联, 两者只能任取一个, 其相互关系可表达为:

$$w_D(r) = w_R^2(r). \quad (6)$$

耗散力系数  $\gamma$  和随机力系数  $\sigma$  也相互关联, 两者也只能任取一个:

$$\sigma^2 = 2\gamma k_B T, \quad (7)$$

式中:  $k_B T$  为系统的 Boltzmann 温度, 与系统的涨落 - 耗散理论相类似<sup>[21]</sup>.

Fan 等<sup>[22]</sup> 的研究表明, 采用平方根的权函数有利于提高 DPD 系统的 Schmidt 数, 因此本文中采用改进的权函数表达式, 即

$$w_D(\mathbf{r}_{ij}) = w_R^2(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} \sqrt{1 - \frac{r_{ij}}{r_c}} & r_{ij} < r_c \\ 0 & r_{ij} \geq r_c, \end{cases} \quad (8)$$

改进后的权函数能够在粒子之间产生较强的耗散力.

## 2.2 保守力权函数的改进

传统的 DPD 方法采用的保守力权函数为一个纯排斥性的线性递减函数

$$w_C(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} 1 - \frac{r_{ij}}{r_c} & r_{ij} < r_c \\ 0 & r_{ij} \geq r_c, \end{cases} \quad (9)$$

(9) 式中这种保守力权函数迫使粒子远离彼此, 占据整个计算空间. 所以运用这种权函数只能模拟类似气体的性质, 不能模拟液气共存现象和带有自由表面的流体流动现象<sup>[23,24]</sup>. Liu 等<sup>[11]</sup> 参考光滑粒子动力学 (SPH) 中的光滑函数, 利用 3 次样条函数的线性组合构造了新的保守力权函数, 新的保守力权函数在粒子趋近时表现为排斥的形式, 而当粒子

趋远时表现为吸引的形式. 新的保守力权函数适用于本文的模拟. SPH<sup>[25]</sup> 中最常用的三次样条光滑函数为

$$W(r) = W(r, r_c) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} \left(\frac{2r}{r_c}\right)^2 + \frac{3}{4} \left(\frac{2r}{r_c}\right)^3 & 0 \leq \frac{2r}{r_c} < 1, \\ \frac{1}{4} \left[2 - \left(\frac{2r}{r_c}\right)\right]^3 & 1 \leq \frac{2r}{r_c} < 2, \\ 0 & \frac{2r}{r_c} \geq 2. \end{cases} \quad (10)$$

这里  $r_c$  为截断半径, 对应于 SPH 方法中的光滑长度  $h$ , 该 3 次样条函数是非负、单调减少的, 并且在左右端点处保持光滑. 选取这种 3 次样条函数的一种线性组合, 分别配以不同的系数和截断半径, 然后乘以作用强度  $a$ , 从而得到粒子间相互作用势函数, 表达为

$$U(r) = a[AW(r, r_{c1}) - BW(r, r_{c2})], \quad (11)$$

这里  $W(r, r_{c1})$ ,  $W(r, r_{c2})$  是 (10) 式中的三次样条函数,  $r_{c1}$ ,  $r_{c2}$  为截断半径,  $A$ ,  $B$  为可调的作用强度系数,  $a$  为保守力系数.  $W(r, r_{c1})$  和  $W(r, r_{c2})$  分别表征排斥作用和吸引作用,  $A$  和  $B$  分别表征排斥作用和吸引作用的强度,  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$  分别表征排斥作用和吸引作用的作用范围.  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$  以及  $A$  和  $B$  的选择就定了  $U(r)$  的形状. DPD 粒子间的保守力为势函数作用梯度的相反数, 即

$$\mathbf{F}_{C,ij} = -\frac{dU(r)}{dr} \hat{\mathbf{r}}_{ij} = -a[AW'(r, r_{c1}) - BW'(r, r_{c2})] \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (12)$$

联立 (3) 式和 (12) 式得到改进后的保守力权函数为

$$W_C(r_{ij}) = -[AW'(r, r_{c1}) - BW'(r, r_{c2})]. \quad (13)$$

合理选择  $r_{c1}$  和  $r_{c2}$  以及  $A$  和  $B$ , 就能得到相应的含“短程排斥、长程吸引”的保守力势函数和权函数. 一些学者的前期研究中取  $A = 18.75$ ,  $A = 2.0$ ,  $B = 1.0$ ,  $r_{c1} = 0.8$ ,  $r_{c2} = 1.0$ , 即保守力势函数为

$$U(r) = 18.75[2.0W(r, 0.8) - W(r, 1.0)], \quad (14)$$

(14) 式中各个参数的组合, 可以使得液气之间的密度比大于 600, 从而出现界限分明的液气界面<sup>[18]</sup>, 因此取 (14) 式为保守力势函数能有效地模拟带有自由面的流体. 上述势能函数所形成的液气界面的详细讨论, 可参见文献 [18,26,27]. 本文模拟所采用的保守力势函数即为 (14) 式的形式.

### 3 静态接触角的模拟

静态接触角的模拟过程如图 1 所示. 该模拟区域的几何尺寸长 ( $X$  轴)、宽 ( $Y$  轴)、高 ( $Z$  轴) 各为 80, 2, 80. 在  $Z$  方向布置上下壁面, 该壁面由三层静止的粒子组成, 在模拟区域中心布置一个圆柱形液滴. 该模型共由 8336 个粒子组成, 其中流体粒子 6416 个, 壁面粒子 1920 个. 模型中  $X$  和  $Y$  方向采用周期性的边界条件, 通道壁面采用 Fan 等 [22] 提出的无滑移边界条件. 该壁面模型采用“冻注”的粒子代表壁面, 在壁面附近的流体区域设置一簿层, 在这一簿层内保持流动无滑移条件. 具体为令簿层内的粒子速度方向随机分布, 而速度的大小与给定的系统温度相对应, 各个粒子速度的矢量平均值为零 (与静止的壁面对应). 进一步, 令该簿层内的粒子以一定速度离开壁面, 从而保证粒子不穿透壁面. 其离开的速度为:

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_R + \mathbf{n}(\sqrt{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_R)^2} - \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_R), \quad (15)$$

其中,  $\mathbf{v}_R$  为随机速度矢量,  $\mathbf{n}$  为壁面单位法向矢量 (指向流体), 详见文献 [22]. 其他一些重要参数为:  $\sigma = 3.0$ , 经验参数  $\lambda$  与时间步长  $\Delta t$  分别为 0.65 和 0.01.

本文模拟采用改进的 DPD 保守力势能函数, 流体粒子之间相互作用的势能函数为  $U(r) = a_f[AW(r, r_{c1}) - BW(r, r_{c2})]$ ,  $a_f$  为流体粒子和流体粒子之间的作用力系数; 壁面粒子和流体粒子之间相互作用的势能函数为  $U(r) = a_{wf}[AW(r, r_{c1}) - BW(r, r_{c2})]$ , 其中  $a_{wf}$  为壁面粒子和流体粒子之间

的作用力系数. 上述势能函数中的参数取 (14) 式确定的值, 即  $A = 2.0$ ,  $B = 1.0$ ,  $r_{c1} = 0.8$ ,  $r_{c2} = 1.0$ ,  $a_f = 18.75$ . 这样模型便能达到液气平衡状态: 大部分流体粒子会聚在一起, 形成稳定的圆柱形自由面; 少部分流体粒子在模拟区域中形成气态.

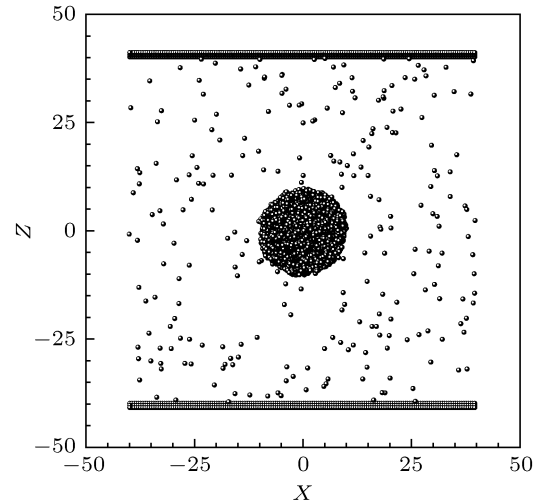


图 1 静态接触角模拟模型示意图

模拟中给液滴施加一个沿  $Z$  轴负方向的很小的速度, 让其慢慢靠近下壁面. 由于壁面粒子和液滴粒子之间的相互作用, 液滴会因浸润能力的不同而不同程度地吸附到壁面上, 形成稳定的静态接触角. 通过改变  $a_{wf}/a_f$  的值来改变液滴的浸润能力. 本文模拟研究了液滴温度  $k_B T = 1.0$  和  $k_B T = 0.8$  两种情况下, 液滴的接触角随  $a_{wf}/a_f$  的变化. 模拟过程共运行  $10^5$  步.

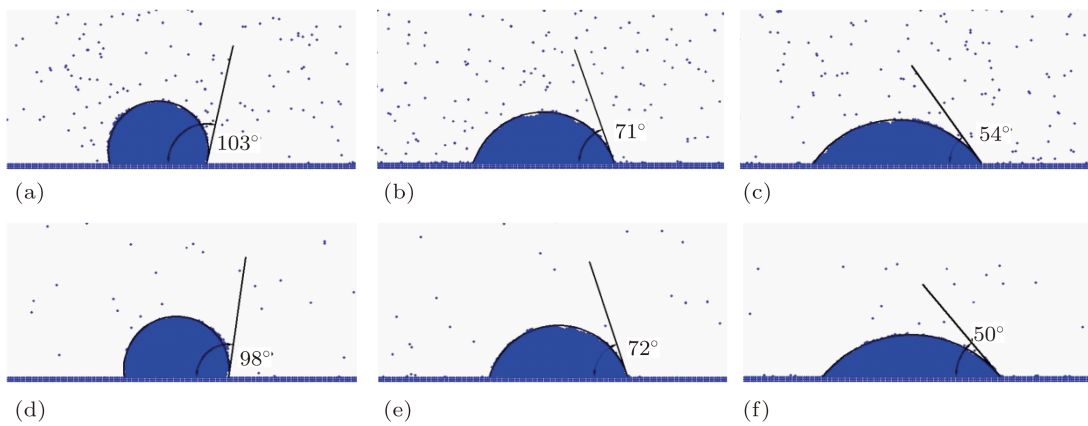


图 2 不同条件下液滴与壁面形成的静态接触角. (a)  $k_B T = 1.0$ ,  $a_{wf}/a_f = 0.707$ ; (b)  $k_B T = 1.0$ ,  $a_{wf}/a_f = 1.0$ ; (c)  $k_B T = 1.0$ ,  $a_{wf}/a_f = 1.225$ ; (d)  $k_B T = 0.8$ ,  $a_{wf}/a_f = 0.707$ ; (e)  $k_B T = 0.8$ ,  $a_{wf}/a_f = 1.0$ ; (f)  $k_B T = 0.8$ ,  $a_{wf}/a_f = 1.225$

当液滴下落至下壁面并与下壁面接触达到动态平衡后,液滴的形状近似于以壁面为割线的半圆,如图 2 所示. 这样我们就能测得液滴的接触角  $\theta$ <sup>[28]</sup>. 图 2 (a), (b), (c) 是  $k_B T = 1.0$ ,  $a_{wf}/a_f$  的值分别为 0.707, 1.0, 1.225 时形成的静态接触角; 图 2(d), (e), (f) 是  $k_B T = 0.8$ ,  $a_{wf}/a_f$  的值分别为 0.707, 1.0, 1.225 时形成的静态接触角.

液滴在固体壁面形成的接触角的大小是流体粒子之间的内聚力和流体粒子与壁面粒子之间的吸附力相互抗衡的结果. 由图 2 所示,随着  $a_{wf}$  与  $a_f$  比值的增大,壁面粒子对流体粒子的吸引作用逐渐增强<sup>[29]</sup>,液滴受到的壁面吸附力增大,液滴的接触角逐渐减小,浸润性增大. 温度降低后,液滴的黏度增大,液气密度比显著增大. 温度的改变略微地影响液滴在固体壁面的接触角.

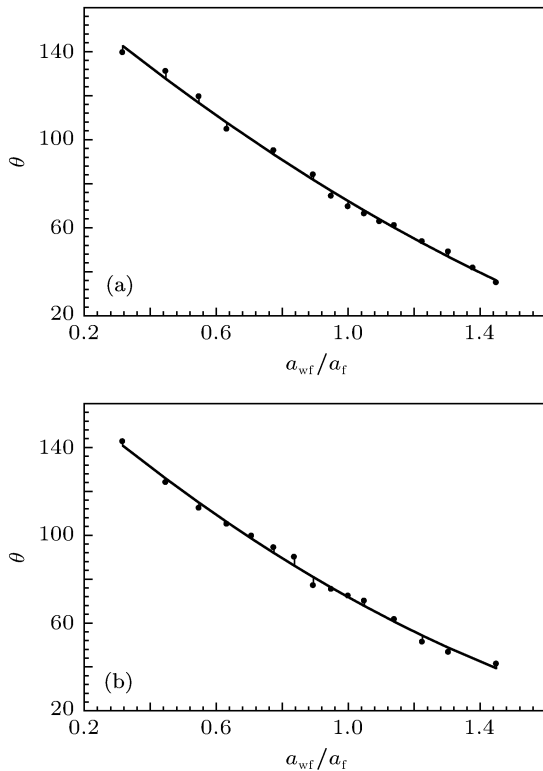


图 3  $a_{wf}/a_f$  与静态接触角的关系. (a)  $k_B T = 1.0$ ; (b)  $k_B T = 0.8$

由于 DPD 模拟中存在随机力,所以液滴与壁面最终达到的是动态平衡状态,因此接触角也会随着时间发生微小的波动. 鉴于此,在测量每个  $a_{wf}/a_f$  值所对应的接触角时,我们测出 3 个时刻的接触角,然后将这 3 个测量值的平均值作为该  $a_{wf}/a_f$  值对应的接触角. 图 3 所示为在  $k_B T = 1.0$  和  $k_B T = 0.8$  两种温度下  $a_{wf}/a_f$  之

值与静态接触角的关系.

利用 2 次多项式拟合上述两组数据,拟合出的公式分别为:

当  $k_B T = 1.0$  时,

$$\theta = 20.202 \left( \frac{a_{wf}}{a_f} \right)^2 - 129.71 \left( \frac{a_{wf}}{a_f} \right) + 181.61, \quad (16)$$

当  $k_B T = 0.8$  时,

$$\theta = 25.509 \left( \frac{a_{wf}}{a_f} \right)^2 - 134.63 \left( \frac{a_{wf}}{a_f} \right) + 180.89. \quad (17)$$

从拟合的图线可以看出,在同一  $a_{wf}/a_f$  的比值下,  $k_B T = 0.8$  时的接触角略大于  $k_B T = 1.0$  时的接触角,温度降低后,流体粒子之间的内聚力增大,克服壁面吸附力的能力增强,所以温度降低后滴液的接触角略有增大.

## 4 液滴在带有凹槽的微通道中的运动模拟与分析

### 4.1 壁面浸润性对液滴运动特性的影响

凹槽微通道模型如图 4 所示. 该通道的几何尺寸为  $120 \times 10 \times 16$  (长  $\times$  宽  $\times$  高),凹槽的几何尺寸为  $7 \times 3$  (长  $\times$  高),凹槽段凸触的几何尺寸为  $3 \times 3$  (长  $\times$  高). 该通道及其中的流体共由 37760 个粒子组成,其中利用三层静止的粒子组成壁面,组成通道壁面的粒子总数为 16960 个,组成流体的粒子总数为 20800 个. 壁面与流体粒子的初始排列由前处理软件生成,流体粒子的初始速度方向是随机的,其大小与系统所设定的温度相对应,而壁面粒子的速度始终为零(即被“冻住”). 模拟中,  $Y$  方向(垂直于纸面方向)和  $X$  方向(水平方向)均采用周期性的边界条件,通道壁面采用 Fan 等<sup>[22]</sup>提出的无滑移边界模型,其他一些参数为:  $\sigma = 3.0$ , 经验参数  $\lambda = 0.65$ , 时间步长  $\Delta t = 0.01$ .

粒子间的作用势函数  $U(r) = AW(r, r_{c1}) - BW(r, r_{c2})$  中的参数取值为  $A = 2.0$ ,  $r_{c1} = 0.8$ ,  $B = 1.0$ ,  $r_{c2} = 1.0$ , 流体粒子之间的保守力系数  $a_f = 18.75$ . 本次模拟中取  $k_B T = 1.0$ . 运用 (16) 式拟合 “ $a_{wf}/a_f \sim \theta$ ” 曲线求得当  $k_B T = 1.0$ ,  $a_f = 18.75$  时,接触角为  $130^\circ, 110^\circ, 90^\circ, 70^\circ, 50^\circ$ , 时对应的  $a_{wf}/a_f$  的值分别为 0.426, 0.610, 0.808, 1.024, 1.263. 为了便于比较不同浸润性条件下液滴在微通道凹槽表面的运动特性,我们将液滴与微通道上表面的静态接触角固定为  $90^\circ$  不变, (即取  $a_{wf}/a_f = 0.808$ ), 仅改变液滴与微通道下表面的

静态接触角. 通过调节下壁面的  $a_{wf}/a_f$  值来改变流体粒子与下壁面粒子之间的作用力, 以模拟在不同的下壁面浸润性条件下液滴的流动特性.

在模拟的初始阶段, 流体粒子可以自由运动, 一段时间后, 流体粒子在“短程排斥, 长程吸引”的势能函数作用下达到热力学平衡态: 大部分流体粒子汇聚在一起形成一段液滴, 即图 4 通道中黑色的部分; 少部分流体粒子在通道中形成气态. 达到平衡态后, 给每个流体粒子施加一个持续的斜向下外场力  $g = 0.01\sqrt{2}$ ,  $a_F = -45^\circ$  ( $g$  为外场

力的大小,  $a_F$  为外场力的作用方向, 即  $g_x = 0.01$ ,  $g_z = -0.01$ ), 滴液在外场力的作用下开始运动. 图 5 为微通道下壁面呈疏水性 ( $\theta = 110^\circ$ )、中性水 ( $\theta = 90^\circ$ )、亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ) 时, 液滴在每隔 20 个时间步长通过凹槽通道时的流动形态图.



图 4 微通道模型示意图

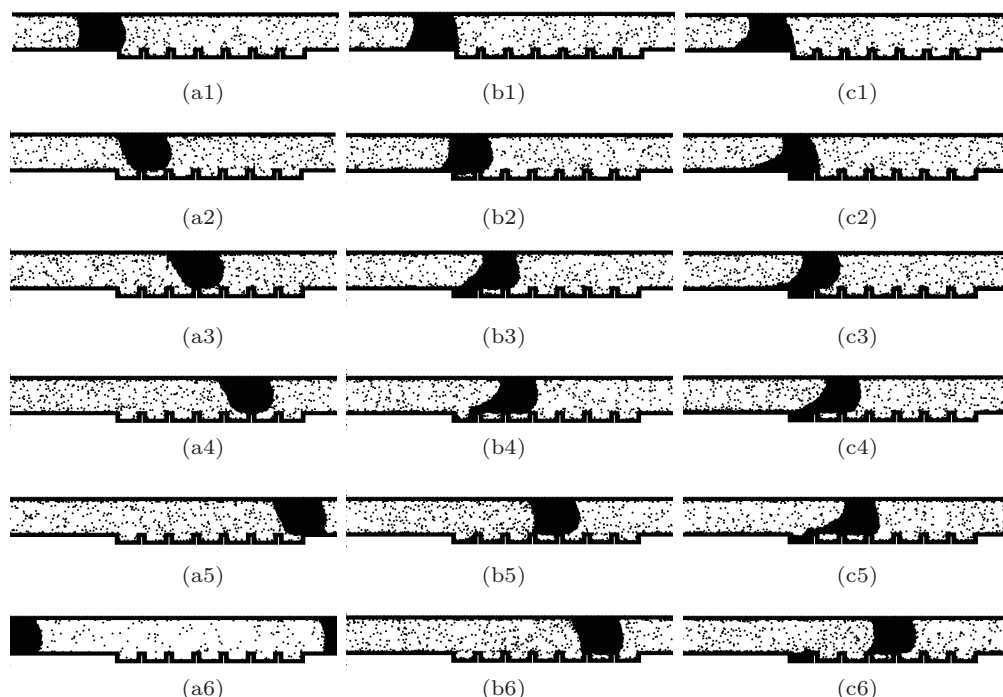


图 5 不同下壁面浸润性下, 液滴流动的形态图 (a<sub>1</sub>)  $\theta = 110^\circ$ ,  $t = 100$ ; (b<sub>1</sub>)  $\theta = 90^\circ$ ,  $t = 100$ ; (c<sub>1</sub>)  $\theta = 70^\circ$ ,  $t = 100$ ; (a<sub>2</sub>)  $\theta = 110^\circ$ ,  $t = 300$ ; (b<sub>2</sub>)  $\theta = 90^\circ$ ,  $t = 300$ ; (c<sub>2</sub>)  $\theta = 70^\circ$ ,  $t = 300$ ; (a<sub>3</sub>)  $\theta = 110^\circ$ ,  $t = 500$ ; (b<sub>3</sub>)  $\theta = 90^\circ$ ,  $t = 500$ ; (c<sub>3</sub>)  $\theta = 70^\circ$ ,  $t = 500$ ; (a<sub>4</sub>)  $\theta = 110^\circ$ ,  $t = 700$ ; (b<sub>4</sub>)  $\theta = 90^\circ$ ,  $t = 700$ ; (c<sub>4</sub>)  $\theta = 70^\circ$ ,  $t = 700$ ; (a<sub>5</sub>)  $\theta = 110^\circ$ ,  $t = 900$ ; (b<sub>5</sub>)  $\theta = 90^\circ$ ,  $t = 900$ ; (c<sub>5</sub>)  $\theta = 70^\circ$ ,  $t = 900$ ; (a<sub>6</sub>)  $\theta = 110^\circ$ ,  $t = 1100$ ; (b<sub>6</sub>)  $\theta = 90^\circ$ ,  $t = 1100$ ; (c<sub>6</sub>)  $\theta = 70^\circ$ ,  $t = 1100$

从图 5 可以看出, 达到平衡态以后, 液滴在外场力的作用下向右移动. 壁面浸润性的增大会增加液滴运动的阻力, 使得液滴的流动速度显著变小. 在刚开始运动时, 液滴在外场力的作用下出现变形, 如图 5(a<sub>1</sub>), (b<sub>1</sub>), (c<sub>1</sub>) 所示, 由于液滴上表面的接触角固定为  $90^\circ$ , 所以图 5(a<sub>1</sub>), (b<sub>1</sub>), (c<sub>1</sub>) 中液滴与上壁面的接触形态基本相似; 下表面不同的浸润性使得液滴与下壁面的接触形态有所不同, 浸润性越大, 液滴下表面的拖拽现象越明显, 也即与下表面的接触面积越大.

下壁面浸润性的不同也导致液滴经过第一个凹槽时呈现出不同的流动特性. 从图 5(a<sub>1</sub>), (a<sub>2</sub>)

中可以看出下壁面呈疏水性 ( $\theta = 110^\circ$ ) 时, 液滴不会浸入第一个凹槽而直接通过. 下壁面呈中性水 ( $\theta = 90^\circ$ ) 时, 液滴的前半部分直接通过第一个凹槽后 (如图 5(b<sub>2</sub>)), 液滴的后半部分并不能直接通过而是浸入凹槽底部 (如图 5(b<sub>3</sub>)). 中水性情况下固体表面与液滴之间的吸附力比疏水性时要强, 所以液滴浸入凹槽; 但是在表面张力的作用下, 随着液滴向右运动, 浸入在第一个凹槽中的液体会被拽出 (如图 5(b<sub>3</sub>)—(b<sub>5</sub>)), 最后液滴在凹槽表面形成完整的形态继续向右流动 (如图 5(b<sub>5</sub>)—(b<sub>6</sub>)). 下壁面呈亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ) 时, 从液滴的前缘进入凹槽区域开始, 随着液滴向右移动, 液滴前缘会逐渐浸入

第一个凹槽 (如图 5(c<sub>1</sub>)—(c<sub>2</sub>)), 因为亲水性情况下固壁表面与液滴之间的吸附力很强, 液滴在离开第一个凹槽时, 表面张力无法将浸入凹槽中的液体拽出, 液滴出现了断裂, 部分液滴保留在第一个凹槽中 (如图 5(c<sub>4</sub>)—(c<sub>6</sub>)), 最后剩余的液滴在凹槽表面形成稳定的形态继续向右流动 (如图 5(c<sub>6</sub>)).

进一步, 本模拟统计了不同下壁面浸润性情况下凹槽微通道中液滴运动的速度. 图 6 所示为  $\theta = 130^\circ$ ,  $\theta = 110^\circ$ ,  $\theta = 70^\circ$ ,  $\theta = 50^\circ$  分别与  $\theta = 90^\circ$  时液滴的运动速度对比图. 可以看出, 当下壁面为疏水性 ( $\theta = 130^\circ$ ,  $110^\circ$ ) 时, 液滴在凹槽表面运动速度的波动幅度较小 (如图 6(a), (b) 所示), 当下壁面为中水性 ( $\theta = 90^\circ$ ) 和亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ,  $50^\circ$ ) 时, 液滴在凹槽表面的速度会出现明显的规律波动 (如图 6(c), (d) 所示).

液滴与固体壁面接触时, 受两种作用力同时作

用: 一种是液体内部分子的内聚力, 一种是固体分子对液体分子在吸附力. 本模型中, 液滴在凹槽表面运动时重复着“与两个凸触接触—与一个凸触接触”的循环运动. 当液滴“与两个凸触接触”时, 液滴与下表面的接触面积最大, 所受到的壁面吸附力最大, 阻力就最大, 此时液滴减速; 当液滴“与一个凸触接触”时, 液滴与下表面的接触面积最小, 所受到的壁面吸附力最小, 阻力就最小, 此时液滴加速. 液滴在凹槽表面运动时加速与减速的交替出现造成了液滴速度的规律波动. 如果下壁面的浸润性较弱, 液滴粒子受到的凹槽凸触的吸附力相应较弱, 这对液滴运动速度的影响就较弱, 液滴的速度波动就较小. 如果下壁面的浸润性较强, 液滴粒子受到的凹槽凸触的吸附力相应较强, 这对液滴运动速度的影响就较强, 液滴的速度波动就较大.

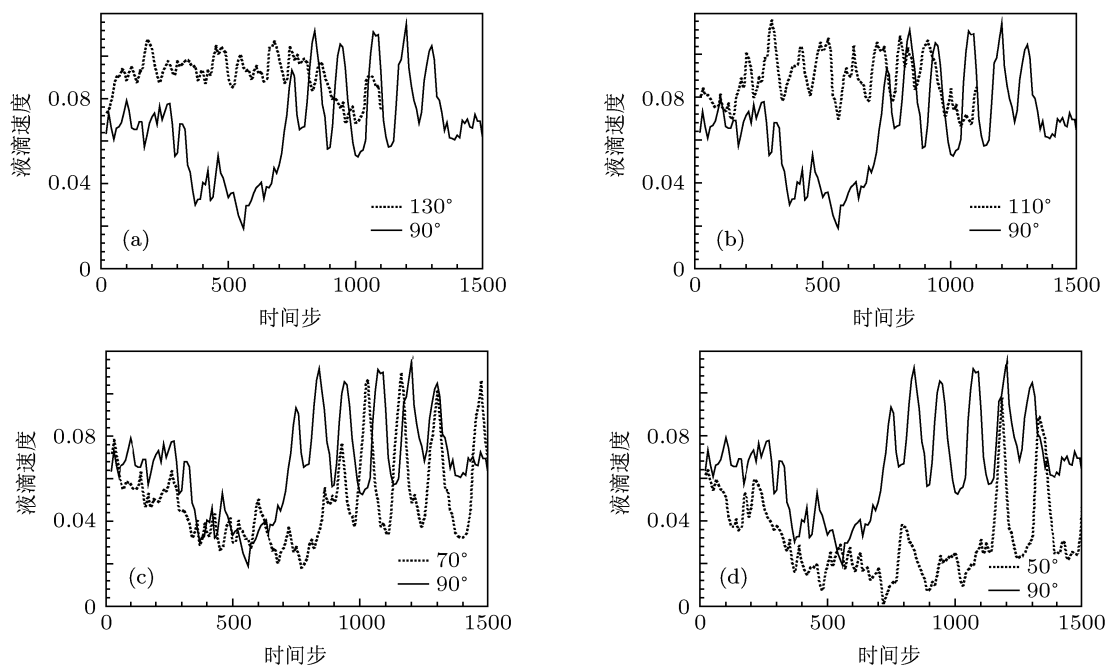


图 6 不同下壁面浸润性下, 液滴流速对比图 (a)  $\theta = 130^\circ$  与  $\theta = 90^\circ$  时流速对比; (b)  $\theta = 110^\circ$  与  $\theta = 90^\circ$  时流速对比; (c)  $\theta = 70^\circ$  与  $\theta = 90^\circ$  时流速对比; (d)  $\theta = 50^\circ$  与  $\theta = 90^\circ$  时流速对比

## 4.2 外场力对液滴运动特性的影响

本节模拟中保持第 4.1 节外场力的水平分量不变, 研究外场力竖直分量的变化对液滴运动特性的影响. 首先, 我们模拟了壁面呈中水性 ( $\theta = 90^\circ$ ) 且没有凹槽的平直通道中液滴的运动情况. 选取的平直通道的几何尺寸为  $120 \times 10 \times 16$  (长  $\times$  宽  $\times$  高), 该通道及其内部流体共由 35200 个粒子组成, 其中利用三层静止的粒子组成壁

面, 组成通道壁面的粒子总数为 14400 个, 通道内的液体由 20800 个粒子组成. 大部分流体粒子相互吸引并形成液滴, 部分流体粒子在通道内形成气态. 取  $k_B T = 1.0$ , 将直通通道壁面与液滴的接触角取为  $90^\circ$ , 即  $a_{wf}/a_f = 0.808$ . 选取  $\alpha_F = 45^\circ$  (即  $g_x = 0.01$ ,  $g_z = -0.01$ ) 和  $\alpha_F = 0^\circ$  (即  $g_x = 0.01$ ,  $g_z = 0$ ) 两种外场力. 图 7 为两种外场力作用下液滴在平直通道中的流动形态图. 从图 7 可以看出, 当  $\alpha_F = 45^\circ$  时液滴与下壁面的接



触面积明显大于与上壁面的接触面积;而  $\alpha_F = 0^\circ$  时,液滴与上下壁面的接触面积增大,导致液滴在流动过程中受到的阻力增大,出现近壁面流体的拖拽现象.

接下来我们模拟不同外场力作用下液滴在凹槽通道内的运动过程.我们采用:1)  $\alpha_F = 45^\circ$  的斜向下的外场力(即  $g_x = 0.01, g_z = -0.01$ );2)  $\alpha_F = 30^\circ$  的斜向下的外场力(即  $g_x = 0.01, g_z = -0.00577$ );3)  $\alpha_F = 0^\circ$  的水平外场力(即  $g_x = 0.01, g_z = 0$ ).本节模拟仍取  $k_B T = 1.0$ .

图8为上下壁面呈中水性( $\theta = 90^\circ$ )时液滴在三种不同外场力下的运动状态图.从图中可以看出,随着  $\alpha_F$  的减小,液滴与微通道上表面的接触面积增大,与下表面的接触面积减小.当  $\alpha_F = 45^\circ$ ,在通过首个凹槽时液滴后半段浸入凹槽中.随着液滴继续向前运动,浸入凹槽的流体被拽出,最后整个液滴在凹槽表面形成一个完整的形态向前运动,如图8(a<sub>1</sub>)—(a<sub>5</sub>)所示.当  $\alpha_F = 30^\circ$  和  $\alpha_F = 0^\circ$ ,由于竖直向下力的减小,液滴在通过第一个凹槽时不会浸入凹槽内而是直接顺利通过并向前运动,如图8(b<sub>1</sub>)—(b<sub>5</sub>), (c<sub>1</sub>)—(c<sub>5</sub>)所示.  $\alpha_F = 45^\circ$  时浸入首个凹槽的液体对整个液滴向前的运动造成较大的阻碍,所以当  $\alpha_F = 45^\circ$  时液滴在凹槽微通道内的平均流速明显低于  $\alpha_F = 30^\circ$  和  $\alpha_F = 0^\circ$  时液滴的平均流速.

保持液滴与上壁面的浸润呈中水性( $\theta = 90^\circ$ ),

当下壁面呈亲水性( $\theta = 70^\circ$ )时,液滴与下壁面的吸附力增强,液滴黏附下壁面的趋势增加.所以在  $\alpha_F = 45^\circ, \alpha_F = 30^\circ, \alpha_F = 0^\circ$  三种不同外场力下,液滴都会在越过首个凹槽时浸入凹槽底部,如图9所示.当  $\alpha_F = 45^\circ$  时,液滴通过首个凹槽后,浸入凹槽内的这部分液体不会被拽出而是保留在凹槽内,与液滴主体分裂,如图9(a<sub>1</sub>)—(a<sub>5</sub>)所示.当  $\alpha_F = 30^\circ$  时,由于竖直向下的力减小,液滴在通过首个凹槽后大部分浸入凹槽内的液体会被拽出,仅在凹槽内残留少部分液体,如图9(b<sub>1</sub>)—(b<sub>5</sub>)所示.当  $\alpha_F = 0^\circ$  时,竖直向下的力减小为0,浸入首个凹槽内的液体基本全被拽出.这说明当下壁面呈亲水性( $\theta = 70^\circ$ )时,外场力的作用方向会对液滴通过首个凹槽的运动状态产生很大的影响.  $\alpha_F$  越

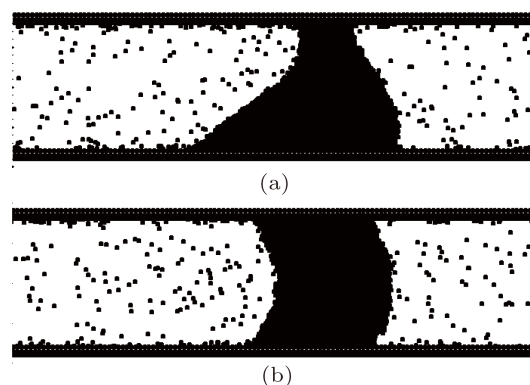


图7 下壁面呈中水性( $\theta = 90^\circ$ )时,两种外场力下液滴在平直通道中的流动形态图 (a)  $t = 230, \alpha_F = 45^\circ$ ; (b)  $t = 230, \alpha_F = 0^\circ$

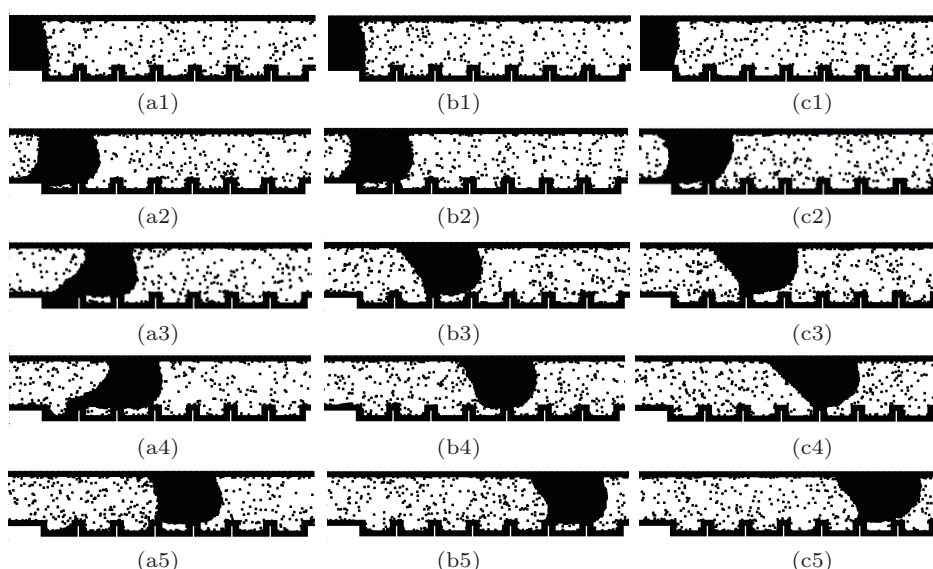


图8 下壁面呈中水性( $\theta = 90^\circ$ )时,不同角度外场力下液滴的流动形态图 (a<sub>1</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 100$ ; (b<sub>1</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 100$ ; (c<sub>1</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 100$ ; (a<sub>2</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 300$ ; (b<sub>2</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 300$ ; (c<sub>2</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 300$ ; (a<sub>3</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 500$ ; (b<sub>3</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 500$ ; (c<sub>3</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 500$ ; (a<sub>4</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 700$ ; (b<sub>4</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 700$ ; (c<sub>4</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 700$ ; (a<sub>5</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 900$ ; (b<sub>5</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 900$ ; (c<sub>5</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 900$



小,液滴与下壁面之间的接触面积越小,造成的阻力就越小.从图 9(a<sub>5</sub>), (b<sub>5</sub>), (c<sub>5</sub>) 可以看出,液

滴在  $\alpha_F = 0^\circ$  时流速最大,  $\alpha_F = 30^\circ$  时次之,  $\alpha_F = 45^\circ$  时流速最小.

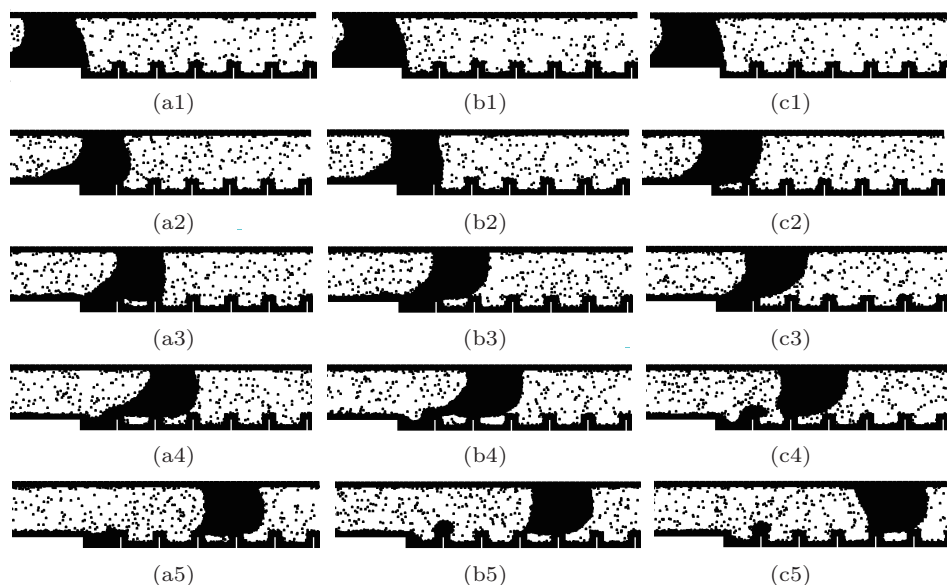


图 9 下壁面呈亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ) 时,不同角度外场力下液滴的流动形态图 (a<sub>1</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 100$ ; (b<sub>1</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 100$ ; (c<sub>1</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 100$ ; (a<sub>2</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 350$ ; (b<sub>2</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 350$ ; (c<sub>2</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 350$ ; (a<sub>3</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 600$ ; (b<sub>3</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 600$ ; (c<sub>3</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 600$ ; (a<sub>4</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 850$ ; (b<sub>4</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 850$ ; (c<sub>4</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 850$ ; (a<sub>5</sub>)  $\alpha_F = 45^\circ, t = 1100$ ; (b<sub>5</sub>)  $\alpha_F = 30^\circ, t = 1100$ ; (c<sub>5</sub>)  $\alpha_F = 0^\circ, t = 1100$

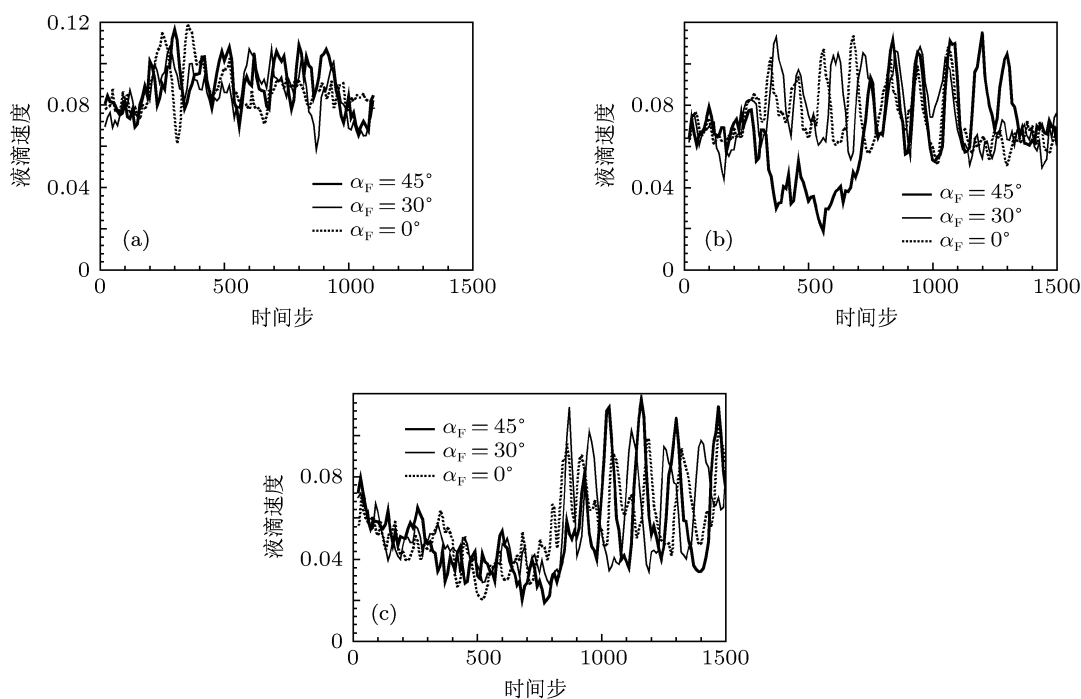


图 10 不同下壁面浸润性下,三种外场力作用下液滴流速对比图 (a)  $\theta = 110^\circ$ ; (b)  $\theta = 90^\circ$ ; (c)  $\theta = 70^\circ$

本模拟还统计了不同下壁面浸润性下,三种外场力作用下液滴的流速.微通道下壁面呈疏水性 ( $\theta = 110^\circ$ ) 时,液滴粒子和下壁面粒子间的吸附力较弱,液滴在凹槽表面运动时速度的波动幅

度较小,液滴运动速度在不同角度的外场力下的变化也不明显,如图 10(a) 所示.微通道下壁面呈中水性 ( $\theta = 90^\circ$ ) 时,液滴在凹槽表面运动时速度出现明显的规律波动,如图 10(b) 所示.当  $\alpha_F = 45^\circ$

时, 由于液滴不能直接通过首个凹槽而发生浸入现象, 阻碍了液滴向右运动, 故从图 10(b) 中可以看出, 当  $\alpha_F = 45^\circ$  时, 液滴通过第一个凹槽时速度下降, 出现一个低谷; 而后流速逐渐增加, 开始规律性的波动, 这时液滴整体通过了首个凹槽并继续稳定地向右运动. 当  $\alpha_F = 30^\circ$  和  $\alpha_F = 0^\circ$  时, 液滴在通过首个凹槽时不再出现浸入现象, 而是顺利过渡到凹槽面, 较  $\alpha_F = 45^\circ$  时提早出现速度的波动现象. 液滴在亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ) 凹槽壁面流动时, 速度的波动幅度较疏水性 ( $\theta = 110^\circ$ )、中水性 ( $\theta = 90^\circ$ ) 时大, 而且在 3 种外场力作用下都会出现首个凹槽的浸入现象. 在不同外场力下,  $\alpha_F = 45^\circ$  时, 液滴速度

规律波动的幅度最大,  $\alpha_F = 30^\circ$  时次之,  $\alpha_F = 0^\circ$  时波动的幅度最小, 如图 10(c) 所示.

一定大小的竖直向下的分力可以加强液滴与凹槽表面的接触能力, 使液滴在“与两个凸触接触”时能更充分地与凹槽内壁接触, 增强了凹槽壁面对液滴的吸附力, 这样竖直向下的分力就类似于较强浸润性的壁面. 当然, 竖直向下分力不宜过大, 如果分力过大液滴的表面张力就无法克服壁面的吸附力, 致使部分液体嵌入凹槽内并与液滴主体发生断裂. 所以在一定范围内竖直向下的分力越大, 液滴在凹槽表面运动时出现的速度波动幅度就越大.

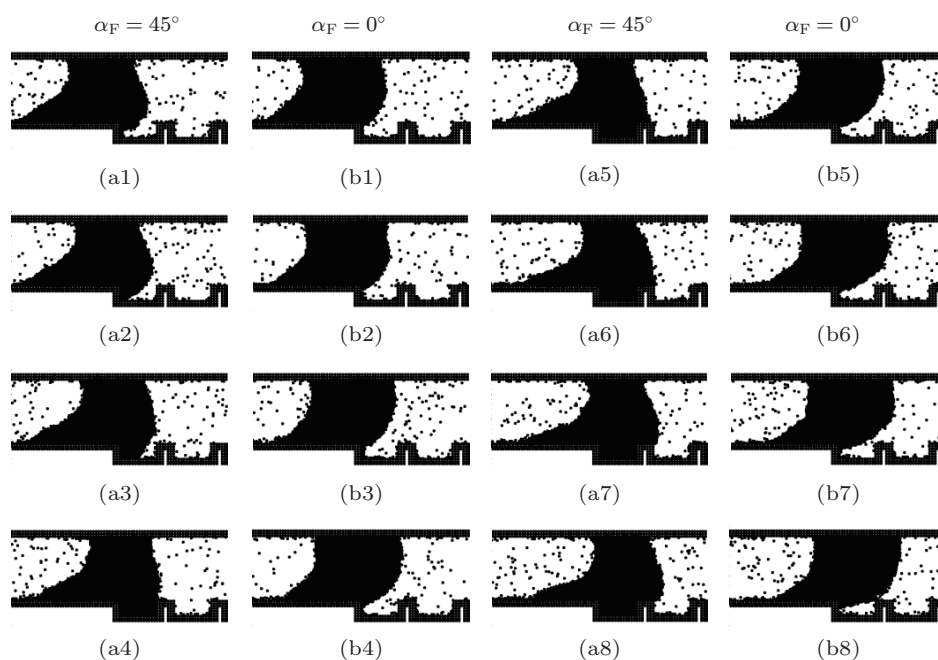


图 11 下壁面呈亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ) 时, 不同外场力下液滴流过首个凹槽的流动形态图 (a<sub>1</sub>)  $t = 200$ ; (b<sub>1</sub>)  $t = 200$ ; (a<sub>2</sub>)  $t = 220$ ; (b<sub>2</sub>)  $t = 220$ ; (a<sub>3</sub>)  $t = 240$ ; (b<sub>3</sub>)  $t = 240$ ; (a<sub>4</sub>)  $t = 260$ ; (b<sub>4</sub>)  $t = 260$ ; (a<sub>5</sub>)  $t = 280$ ; (b<sub>5</sub>)  $t = 280$ ; (a<sub>6</sub>)  $t = 300$ ; (b<sub>6</sub>)  $t = 300$ ; (a<sub>7</sub>)  $t = 320$ ; (b<sub>7</sub>)  $t = 320$ ; (a<sub>8</sub>)  $t = 340$ ; (b<sub>8</sub>)  $t = 340$

为了进一步研究不同角度外场力对液滴运动状态的影响, 我们着重分析微通道下壁面呈亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ) 时,  $\alpha_F = 45^\circ$  和  $\alpha_F = 0^\circ$  两种外场力作用下液滴流过首个凹槽时的流动形态. 当  $\alpha_F = 45^\circ$  时, 竖直向下的分力增加了液滴与下表面的吸附力, 所以液滴在运动过程中, 与下表面的接触面积要大于与上表面的接触面积, 如图 (11a<sub>1</sub>) 所示; 而  $\alpha_F = 0^\circ$  时, 液滴在运动过程中与上下表面的接触面积基本相等, 如图 11(b<sub>1</sub>) 所示. 当  $\alpha_F = 45^\circ$  时, 由于竖直向下分力的作用, 液滴前缘越过首个凹槽后, 就开始不断地浸入凹槽内, 其浸入过程如图 11(a<sub>1</sub>)—(a<sub>4</sub>) 所示; 而液滴的主体继续向前运动逐渐越过首个凸触, 如图 11(a<sub>5</sub>)—(a<sub>8</sub>)

所示. 当  $\alpha_F = 0^\circ$  外场力仅有水平分力时, 液滴前缘在通过首个凹槽时不会浸入到凹槽内, 而是前缘呈一条不断拉长的弧线向前运动, 如图 11(b<sub>1</sub>)—(b<sub>4</sub>) 所示; 液滴继续向前运动, 仍不会浸入首个凹槽, 直到液滴的前缘接触到首个凸触, 如图 11(b<sub>5</sub>)—(b<sub>8</sub>) 所示.

### 4.3 温度对液滴运动特性的影响

如前所述, 已给出当  $k_B T = 1.0$ ,  $a_f = 18.75$  时, 接触角为  $130^\circ$ ,  $110^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $70^\circ$ ,  $50^\circ$  所对应的  $a_{wf}/a_f$  的值; 进一步根据 (17) 式的拟合结果, 当  $k_B T = 0.8$ ,  $a_f = 18.75$  时, 接触角为  $130^\circ$ ,  $110^\circ$ ,

90°, 70°, 50° 所对应的  $a_{wf}/a_f$  之值分别为 0.410, 0.593, 0.795, 1.021, 1.285. 本节中我们仍将上壁面固定为中水性 ( $\theta = 90^\circ$ ), 外场力取为  $\alpha_F = 45^\circ$

( $g_x = 0.01, g_z = -0.01$ ), 以对比  $k_B T = 0.8$ , 和  $k_B T = 1.0$ , 两种情况下液滴在凹槽微通道中的运动情况.

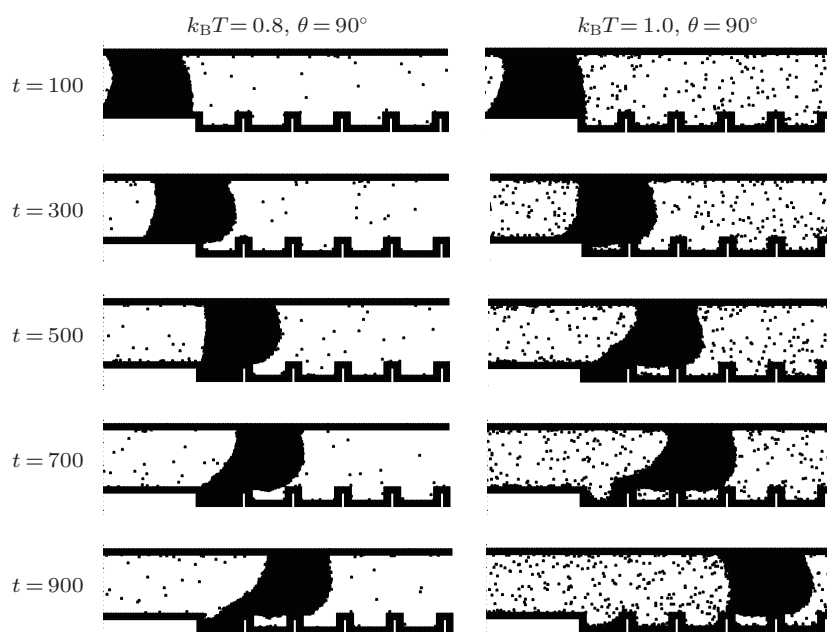


图 12 下壁面呈中水性 ( $\theta = 90^\circ$ ) 时, 不同温度下液滴流过首个凹槽的流动形态图

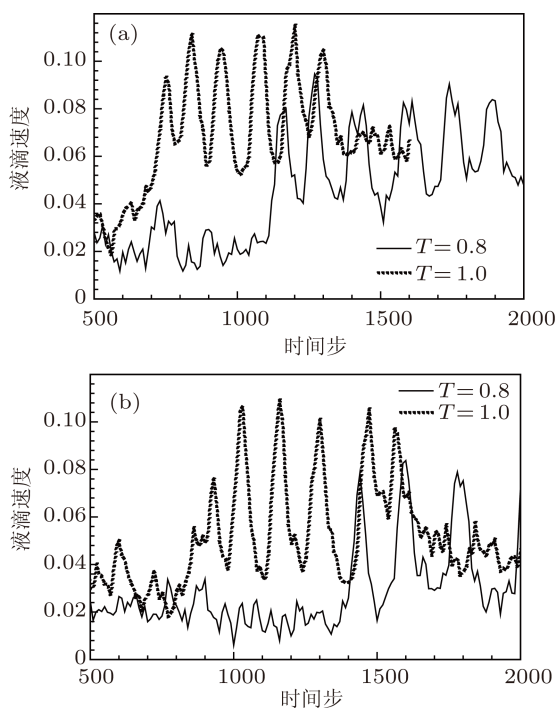


图 13 不同下壁面浸润性下, 在  $k_B T = 0.8$  和  $k_B T = 1.0$  时液滴流速对比图 (a)  $\theta = 90^\circ$ ; (b)  $\theta = 70^\circ$

图 12 为下壁面呈中水性 ( $\theta = 90^\circ$ ) 时, 两种温度下液滴的流动形态图. 可以看出  $k_B T = 0.8$  时流体粒子的液气比增大、黏度增大, 致使液滴在流动中阻力增大, 流速减小.

图 13 为下壁面呈中水性 ( $\theta = 90^\circ$ ) 和亲水性 ( $\theta = 70^\circ$ ) 时,  $k_B T = 0.8$  和  $k_B T = 1.0$  两种温度下液滴的流动速度图.  $k_B T = 0.8$  时, 液滴在全程的流速会降低, 液滴出现速度波动的时刻要明显滞后于  $k_B T = 1.0$  时的流况, 液滴在凹槽表面速度的波动幅度也略小于  $k_B T = 1.0$  时的流况. 温度降低后液滴的黏度增大, 致使液滴在流动中阻力增大, 流速降低. 液滴黏度增大后使得浸入首个凹槽中的液体的流动性减弱, 液滴通过首个凹槽的时间也相应变长.

### 5 结论

本文运用 DPD 方法并采用新近由 Liu 等 [10,11,18] 提出的一种“短程排斥、长程吸引”的改进势能函数模拟并研究了液滴与固体壁面的浸润特性以及液滴在带有凹槽的微通道中的流动行为. 本文首先模拟了液滴与固体壁面之间的静态接触角, 并用 2 次多项式拟合了静态接触角  $\theta$  与  $a_{wf}/a_f$  的关系; 然后模拟并分析了不同壁面浸润性、不同外场力以及不同温度对液滴在带有凹槽的微通道中运动行为的影响. 结论如下:

- 1) 壁面浸润性和外场力竖直向下的分量会显

著地影响液滴在凹槽微通道中的运动形态；而温度的改变不会很明显地影响液滴在凹槽微通道中的运动形态；

2) 壁面浸润性对液滴在凹槽表面的速度波动有很大的影响, 只有凹槽壁面与液滴之间的吸附力达到一定强度后, 液滴在凹槽壁面才会出现明显的速度波动;

3) 一定大小的竖直向下的分力可以加强液滴与凹槽壁面的接触能力, 增大了凹槽壁面对液滴的

吸附力, 其作用效果相当于增强了凹槽壁面的浸润性;

4) 当液滴温度降低时, 液滴的液气密度比增大、黏度增大, 流动阻力增大, 这使得液滴在全程的运动速度略有减小.

本文运用 DPD 方法的模拟结果与一些学者采用 LBM 方法<sup>[15,16]</sup>模拟的结果符合. 获得的结果对于表面粗糙微结构对微流体流动影响的研究有一定的参考价值.

- [1] Yun K S, Cho I J, Bu J U, Kim C J, Yoon E 2002 *J. Microelectromech. Sys.* **11** 454
- [2] Gordillo J M, Cheng Z D, Ganan-Calvo A M, Marquez M, Weitz D A 2004 *Phys. Fluids* **16** 2828
- [3] Lang W P, Yang J L, Chen Y J, Li C 2004 *Phys. Chem. of The New Century: Frontier and Prospects* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [梁文平, 杨俊林, 陈拥军, 李灿 2004 新世纪的物理化学: 学科前沿与展望 (北京: 科学出版社)]
- [4] De Gans B J, Schubert U S 2003 *Macromolecular Rapid Communications* **24** 659
- [5] Karniadakis G E, Beskok A 2002 *Micro Flows: Fundamentals and Simulation* (New York: Springer)
- [6] Alexander F J, Garcia A L 1997 *Comput. Phys.* **11** 588
- [7] Cao L X, Wang C Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 413 (in Chinese) [曹莉霞, 王崇愚 2007 物理学报 **56** 413]
- [8] Lim C Y, Shu C, Niu X D, Chew Y T 2002 *Phys. Fluids* **14** 2299
- [9] Hoogerbrugge P J, Koelman J M V A 1992 *Europhys. Lett.* **19** 155
- [10] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *Phys. Fluids* **19** 033302
- [11] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *J. Computation. Phys.* **222** 110
- [12] Liu M B, Chang J Z, Liu H T 2010 *The 2nd International Conference on Computer and Automation Engineering*, Singapore Feb. 26–28 2010 p334
- [13] Cheng Y T, Rodak D E 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 144101
- [14] Mchale G, Shirtcliffe N J, Aqil S, Perry C C, Newton M I 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 036102
- [15] Huang J J, Shu C, Chew Y T, Zheng H W 2007 *Int. J. Modern Phys. C* **18** 492
- [16] Huang J, Shu C, Chew Y T 2009 *Phys. Fluids* **21** 022103
- [17] Shi Z Y, Hu G H, Zhou Z W 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2595 (in Chinese) [石自媛, 胡国辉, 周哲玮 2010 物理学报 **59** 2595]
- [18] Liu M B, Meakin P, Huang H S 2006 *Phys. Fluids* **18** 017101
- [19] Espanol P, Serrano M, Zuniga I 1997 *Int. J. Modern Phys. C* **8** 899
- [20] Espanol P, Warren P 1995 *Europhys. Lett.* **30** 191
- [21] Huilgol R R, Phan-Thien N 1997 *Fluid Mechanics of Viscoelasticity: General Principles, Constitutive Modeling, Analytical And Numerical Technique* (Amsterdam: Elsevier)
- [22] Fan X J, Phan-Thien N, Ng T Y, Wu X H, Xu D 2003 *Phys. Fluids* **15** 11
- [23] Novik K E, Coveney P V 2000 *Phys. Rev. E* **61** 435
- [24] Chen S, Phan-Thien N, Fan X J, Khoo B C 2004 *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **118** 65
- [25] Liu M B, Liu G R, Lam K Y 2003 *J. Computation. Appl. Math.* **55** 263
- [26] Chang J Z, Liu M B, Liu H T 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3954 (in Chinese) [常建忠, 刘谋斌, 刘汉涛 2008 物理学报 **57** 3954]
- [27] Wang X L, Chen S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6778 (in Chinese) [王晓亮, 陈硕 2010 物理学报 **59** 6778]
- [28] Kong B, Yang X Z 2006 *Langmuir* **22** 2065
- [29] Liu J 2008 *Thermal Micro-System Technology* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [刘静 2008 热学微系统技术 (北京: 科学出版社)]

# Numerical simulation of a droplet motion in a grooved microchannel\*

Zhang Ming-Kun<sup>1)</sup> Chen Shuo<sup>1)†</sup> Shang Zhi<sup>2)</sup>

1) (School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China)

2) (Science and Technology Facilities Council, Daresbury Laboratory, Warrington WA4 4AD, UK)

(Received 18 April 2011; revised manuscript received 2 June 2011)

## Abstract

In this paper, an improved dissipative particle dynamics(DPD) method is used to simulate droplet motion in a grooved microchannel. In the improved DPD method, a recently proposed combination of short-range repulsive and long-range attractive interaction is adopted can simulate fluid flows with free surfaces, such as droplet motions. Firstly the static contact angle between the droplet and the solid wall is simulated with a new potential function, and “static contact angle $\sim a_{wf}/a_f$ ” curve is obtained by the 2nd order polynomial fit. Then the influences of wall wettability, flow field force, and droplet temperature on the flow pattern of droplet in the grooved microchannel are investigated. The results show that wall wettability and flow field force have large effects on the flow pattern of the droplet, while droplet temperature has little effects on it. The results in this paper are helpful for understanding the fluid flow behavior with free surfaces on rough surface.

**Keywords:** droplets, wall wettability, contact angle, grooved microchannel

**PACS:** 47.10.-g, 47.11.-j, 47.55.nb, 47.61.Jd

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10872152) and the Innovation Program of Shanghai Municipal Education Commission, China (Grant No. 09ZZ34).

† E-mail: schen\_tju@mail.tongji.edu.cn