

## 带自由面流体的多体耗散粒子动力学模拟\*

周楠 陈硕†

(同济大学航空航天与力学学院, 上海 200092)

(2013年11月4日收到; 2013年11月27日收到修改稿)

利用多体耗散粒子动力学 (MDPD) 方法对介观尺度下液滴动力学进行了模拟分析. 探讨了 MDPD 系统中液气共存界面的形成, 并对表面张力进行了模拟研究. 研究表明, MDPD 方法形成的液气共存界面满足 Laplace 定律. 通过改变不同的粒子间保守力作用参数, 获得了液滴在固体壁面上不同的接触角, 并研究了保守力作用参数与接触角之间的变化规律. 进一步模拟了液滴在复杂微通道内的流动, 研究结果有助于解释带自由面流体在粗糙表面上的运动行为.

**关键词:** 多体耗散粒子动力学, 自由面, 液滴, 静态接触角

**PACS:** 47.10.-g, 47.11.-j, 47.27.nd, 47.61.Jd

**DOI:** 10.7498/aps.63.084701

## 1 引言

随着微机电系统的发展, 微流体技术作为微流控芯片的一项关键支撑技术受到人们越来越多的关注<sup>[1-3]</sup>. 流体在微细通道中流动时主要受外场力、黏性力和表面张力等的作用, 惯性力的影响往往可以忽略不计<sup>[4]</sup>. 由于尺度的缩小, 流体具有较大的面体比, 流体与微通道表面间的作用力常常成为影响输运性质的主导因素<sup>[5]</sup>. 对微流体在微细通道内的运动过程进行模拟, 并研究表面张力的作用机理, 有助于更好地理解、掌握并优化微流控芯片的设计. 目前用于微纳尺度流体数值模拟的方法主要有蒙特卡罗方法<sup>[6]</sup>、分子动力学方法<sup>[7]</sup>、格子玻尔兹曼方法<sup>[8]</sup>和耗散粒子动力学方法<sup>[9]</sup>等. 国内不少学者<sup>[10,11]</sup>采用这些方法, 已经模拟出微纳尺度下流体的动态和静态特性.

耗散粒子动力学 (dissipative particle dynamics, DPD) 是一种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定数量分子 (或原子) 的集合, 各个粒子之间由保守力、耗散力和随机力进行相互作用. 由于粒子之间的软相互作用势, 因

此采用比分子动力学大得多的时间步长具有更实际的用途. 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<sup>[12]</sup>. 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>[13]</sup>, 从这个意义上说, 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的流体模拟技术.

传统的 DPD 方法中, 粒子之间受到的保守力仅仅存在排斥力, 而且传统 DPD 中采用的保守力和密度之间产生的是“二次方关系”而非状态方程中的“三次方关系”, 使得传统 DPD 方法不能模拟液气共存现象. 如果要获得液气共存, 对于单组分系统, 状态方程需要满足 van der Waals 曲线.

目前有许多学者提出多种方法克服上述困难, 实现带自由面流体的模拟. 文献<sup>[14-17]</sup>基于吸引力和排斥力不同的影响范围, 将光滑粒子动力学 (SPH) 中不同强度和截距的光滑函数进行叠加, 构造了含长程吸引力与短程排斥力的作用势, 并将这种作用势引入 DPD 方法中. 这种处理方法可以模拟气液共存问题. 利用这种方法, 王晓亮等<sup>[18]</sup>

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51276130, 10872152) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20120072110037) 资助的课题.

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

模拟了具有自由面的稳定液滴; 张明焜等<sup>[19]</sup>模拟了液滴在微通道内的流动状态. Pagonabarrage 和 Frenkel<sup>[20]</sup>通过引入局部密度这一物理量, 改进保守力函数的形式, 提出了多体耗散粒子动力学方法 (many-body DPD, MDPD), 从而可以模拟液气共存或者带自由面流体的流动问题. 利用这种方法, Li 等<sup>[21]</sup>模拟了液滴在交流电作用下的震荡变形. 本文利用 MDPD 探讨了介观尺度下液气界面的模拟, 并对表面张力的计算进行了研究, 讨论了不同的 MDPD 参数对于静态接触角的影响, 模拟了液滴在复杂微通道内的流动, 并对影响液滴运动的一些因素做了分析.

## 2 DPD 方法及改进

在 DPD 系统中, 每个粒子的运动满足牛顿运动方程, 对于编号为  $i$  的粒子

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

式中  $\mathbf{r}_i$  和  $\mathbf{v}_i$  为粒子  $i$  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;  $t$  为时间. 将 DPD 系统中所有粒子都取相同质量, 其大小为无量纲单位质量, 即  $m_i = m = 1$ .

相互作用力  $\mathbf{f}_i$  由保守力、耗散力和随机力三部分组成, 其表达式为

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

其中  $\mathbf{F}_{ij}^C$  表示粒子  $j$  对粒子  $i$  作用的保守力,  $\mathbf{F}_{ij}^D$  表示耗散力,  $\mathbf{F}_{ij}^R$  表示随机力; 式中的求和符号表示对一定的截断半径  $r_c$  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). 本文中截断半径被定义为无量纲长度, 即  $r_c = 1$ .

传统的 DPD 方法中, 保守力  $\mathbf{F}_{ij}^C$  作用在两粒子质心连线方向上, 表示为

$$\mathbf{F}_{ij}^C = a_{ij}\omega_C(r_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \quad (3)$$

式中,  $a_{ij}$  为排斥力系数, 表示粒子  $i$  与粒子  $j$  之间的最大作用值;  $r_{ij}$  表示粒子  $i$  与粒子  $j$  之间的距离;  $\mathbf{e}_{ij}$  为  $\mathbf{r}_{ij}$  的单位矢量, 即  $\mathbf{e}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/|\mathbf{r}_{ij}|$ ,  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ ;  $\omega_C(r_{ij})$  为保守力权函数, 其取值与粒子间距离  $r_{ij}$  有关, 通常选取  $\omega_C(r_{ij}) = 1 - r_{ij}/r_c$  的形式. 这种形式的保守力使得粒子之间仅存在排斥力, 并且没有与密度形成“三次方关系”. 在

MDPD 中, 保守力包括排斥力与吸引力, 其中排斥力与其相近位置的粒子密度无关, 吸引力直接与粒子密度的权函数成正比:

$$\mathbf{F}_{ij}^C = A_{ij}\omega_c(r_{ij})\mathbf{e}_{ij} + B_{ij}(\bar{\rho}_i + \bar{\rho}_j)\omega_d(r_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \quad (4)$$

其中权函数  $\omega_c(r_{ij}) = 1 - r_{ij}/r_c$ ,  $\omega_d(r_{ij}) = 1 - r_{ij}/r_d$ . 当粒子间距为  $r_{ij} > r_c$  时, 权函数  $\omega_c(r_{ij})$  值为零; 当  $r_{ij} > r_d$  时,  $\omega_d(r_{ij})$  值为零. (4) 式中第一项代表粒子之间的吸引力, 第二项代表依赖于粒子密度的排斥力. 吸引力系数  $A_{ij} > 0$ , 而排斥力系数  $B_{ij} < 0$ , 两个系数的取值与粒子的类别有关.

粒子  $i$  处位置的密度  $\rho_i$  可由即时加权平均得到, 公式为

$$\rho_i = \sum_{i \neq j} \omega_\rho(r_{ij}), \quad (5)$$

其权函数  $\omega_\rho$  公式如下:

$$\omega_\rho = \frac{15}{2\pi r_d^3} (1 - r_{ij}/r_d)^2, \quad (6)$$

其中  $\omega_\rho$  在  $r_{ij} > r_d$  时为零, 并且为了简便, 一般定义  $\int d^3r_{ij} \omega_\rho(r_{ij}) = 1$ .

随机力、耗散力与保守力一样, 也作用在粒子间质心连线方向, 粒子  $j$  作用在粒子  $i$  上的耗散力 (或阻力) 可表示为

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma\omega^D(r_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \quad (7)$$

其中  $\omega^D(r_{ij})$  为与粒子间距离  $r_{ij}$  有关的权函数, 当  $r_{ij} > r_d$  时  $\omega^D(r_{ij})$  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, 负号表明耗散力的作用方向总是和相对速度方向相反.

耗散力阻止粒子之间的相对运动, 因此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  $\mathbf{F}_{ij}^R$  引起的粒子的随机运动进行补偿, 随机力可表示为

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \sigma\omega^R(r_{ij})\xi_{ij}\mathbf{e}_{ij}, \quad (8)$$

其中  $\omega^R(r_{ij})$  也为与粒子间距离  $r_{ij}$  有关的权函数, 称为随机力权函数, 当  $r_{ij} > r_c$  时  $\omega^R(r_{ij})$  为零;  $\sigma$  为随机力系数;  $\xi_{ij}$  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.

1995 年 Español 和 Warren<sup>[22]</sup>指出耗散力和随机力中两个权函数之间只能任取一个, 耗散力系数  $\gamma$  和随机力系数  $\sigma$  也只能任取一个:

$$\omega^D(r_{ij}) = [\omega^R(r_{ij})]^2, \quad (9)$$

$$\sigma^2 = 2\gamma k_B T, \quad (10)$$

其中  $k_B T$  为 Boltzmann 温度.

本文中选用权函数表达式如下:

$$\omega^D(r_{ij}) = [\omega^R(r_{ij})]^2 = \begin{cases} (1 - r_{ij}/r_c)^2 & (r_{ij} < r_c) \\ 0 & (r_{ij} \geq r_c) \end{cases} \quad (11)$$

### 3 液气界面表面张力研究

Arienti 等 [23] 的研究发现, 吸引力系数  $A_{ij}$ , 排斥力系数  $B_{ij}$ , 排斥力截断半径  $r_d$  这三个主要参数的改变对表面张力的大小有较大影响.

本文压强的计算采用维里公式, 其表达式为

$$p^{\text{virial}} = \frac{\rho}{3} \langle (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}})^2 \rangle + \frac{1}{6V} \left\langle \sum_{i \neq j} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{F}_{ij}^C \right\rangle, \quad (12)$$

其中  $\langle \rangle$  表示在样本体积  $V$  内所取局部平均值,  $\bar{\mathbf{v}}$  是样本空间内的平均速度. 公式左边第一项代表分子热运动产生的压强, 第二项代表保守力贡献的压强.

#### 3.1 液膜的模拟

本文首先模拟研究了处于平衡状态下的液膜. 采用参数  $A_{ij} = -40$ ,  $B_{ij} = 25$ ,  $r_d = 0.75$ , 计算域大小为  $16 \times 16 \times 16$ , 包含 9728 个粒子, 其中壁面粒子数为 1536. 模型中,  $X$  和  $Y$  方向采用周期性边界条件, 经过 45 万步计算, 取其中 40 万步统计平均, 时间步长取  $\Delta t = 0.01$ .

图 1 为所形成的厚度为 10 的稳定液膜; 图 2 所示为液膜不同位置处的压强分布, 其选择区域为  $Z$  方向贯穿液膜的一个小薄片, 图中节点为选取的平均参数参考点, 可见液膜内部区域压强为零, 液气界面处压强为  $-8.94$ .

#### 3.2 液滴的模拟

对于液滴来说, 在表面张力的作用下, 液滴内部的压强会高于外部压强. 在平衡状态下, 液滴维持球形, 内外压差满足 Laplace 方程:

$$\Delta P = P_{\text{in}} - P_{\text{out}} = \frac{2\sigma_{\text{lv}}}{R}, \quad (13)$$

其中  $P$  代表压强, 下标 in 和 out 分别表示液滴内部和液滴外部;  $\sigma_{\text{lv}}$  为气液表面张力;  $R$  为球形液滴的平衡半径.

本文选用了不同的 MDPD 参数, 均得到稳定的液滴, 但形成液滴时密度不同, 并且其相应的表面张力也有所不同, 如表 1 所示. 结果与文献 [23] 相符.

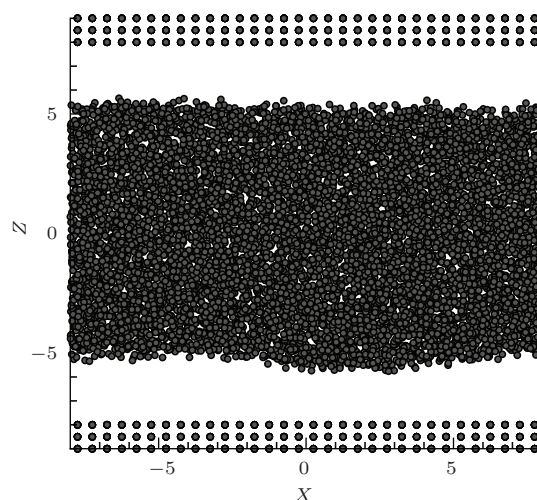


图 1 稳定的液膜

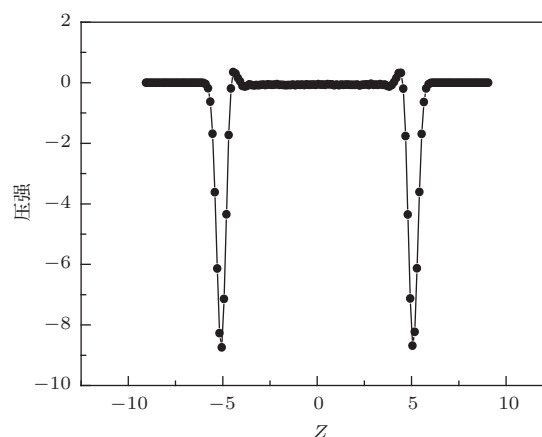


图 2 液膜不同位置处压强分布

表 1 不同参数形成液滴时的不同密度和表面张力

	$A_{ij}$	$B_{ij}$	$r_d$	$\rho$	$\sigma$
No.1	-40	25	0.75	6.10	7.30
No.2	-50	40	0.75	5.60	8.41
No.3	-30	25	0.75	5.27	3.49
No.4	-40	40	0.80	3.90	1.40
No.5	-40	40	0.75	5.12	4.68
No.6	-40	40	0.70	6.51	10.20
No.7	-40	25	0.70	7.82	14.40
No.8	-30	20	0.75	5.80	4.46
No.9	-40	80	0.70	5.47	6.56
No.10	-40	20	0.75	6.77	9.14

对表1中No.1参数设置, 取不同的计算区域, 注入不同的粒子数, 可以得到不同的半径下相应的液滴内外压强差, 如表2所示.

粒子数为2096时粒子密度沿液滴半径的分布如图3所示. 液滴周围气体密度接近为零, 液滴内

部气体密度约为6.1, 并且出现了稳定的液气界面. 图4所示为液滴内外维里压强沿液滴半径的分布. 液滴外部气体压强接近为零, 液滴内部压强约为3.43; 在气液界面处, 维里压强为-7.3, 与该处产生的表面张力相对应.

表2 不同粒子数与参数的模拟数据对比 (No.1 参数设置)

流体粒子数	$k_B T$	液滴密度	液滴半径	液滴内外压强差	$2/R$
2096	1	6.147	4.334	3.43	0.462
8880	1	6.119	7.023	2.08	0.285
12208	1	6.111	7.813	1.87	0.256
13088	1	6.101	8.000	1.81	0.250
18624	1	6.107	8.996	1.58	0.222

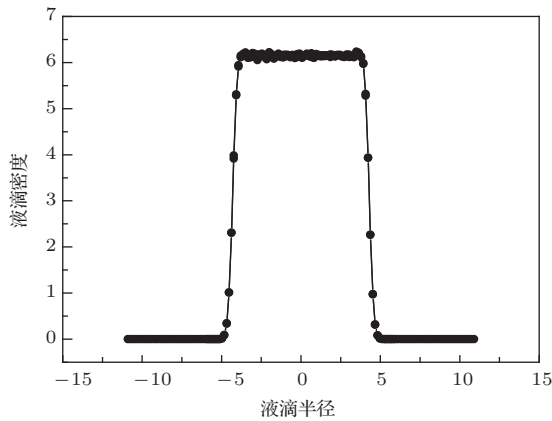


图3 液滴密度分布

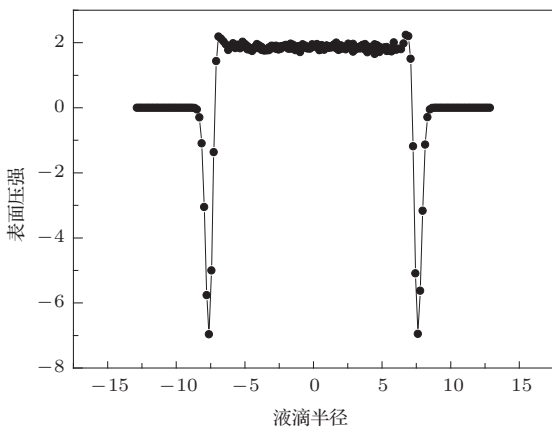


图4 液滴压强分布

对应表1中不同参数设置形成稳定液滴后, 液滴内外压强差与  $(2/R)$  的关系如图5所示, 其拟合的直线通过原点, 符合Laplace定律; 其不同吸引力系数、排斥力系数与截断半径可以形成不同的液滴, 藉此可以模拟不同物理性质的流体, 其中表1中No. 5与No. 8之间表面张力较为接近. 表明这可

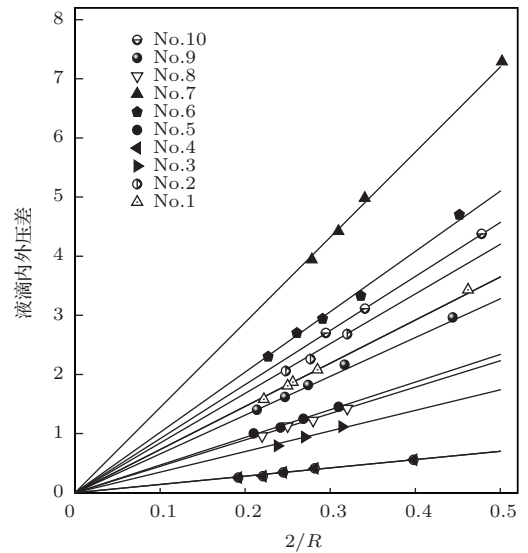


图5 表1中不同参数对应液滴内外压强差与  $(2/R)$  的关系

以用来模拟物理性质相近流体的混合流动.

压强分为两个部分, 第一部分为分子热运动产生的压强, 第二部分为保守力贡献的压强. 如图6所示, 在液滴内部, 维里压强保守力项为负值; 图7表明, 维里压强热运动项为正值; 图8表明, 两项合成后, 液滴内外压强总和为正值, 与液滴内部压强大于外部气体压强的实际相符.

## 4 静态接触角的模拟

根据Young方程, 液滴在固体表面的接触角由固-气表面张力、固-液表面张力和气液表面张力共同确定. 如果这三个表面张力发生改变, 液滴在固体表面上的接触角就发生了改变, 即润湿性改变.



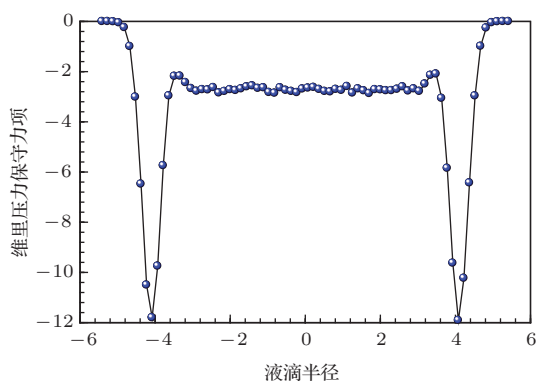


图6 维里压强保守力项

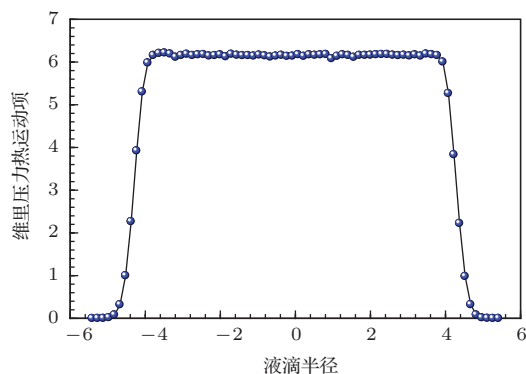


图7 维里压强热运动项

在液体和固体交界处, 液面与固体表面的切线的交角叫做接触角, 即为 $\theta$ . 当固液之间的吸附力较小时,  $\theta$ 为钝角, 呈现疏水性; 在吸附力较大时, 靠近固液界面处的液体分子被吸附到固体表面上,  $\theta$ 为锐角, 呈现亲水性. 吸附力越强, 接触角越小. 通常把液体被固体吸附和吸收的程度叫做浸润能力.

在本研究的静态接触角模拟过程中, 首先让液滴达到液气平衡状态, 形成稳定的液气界面; 然后在无外场力的条件下给液滴一个很小的沿 $Z$ 轴负向的初始速度, 让液滴慢慢靠近壁面. 由于壁面和

粒子间的相互作用, 液滴会按照与固体表面浸润能力不同而不同程度地在固体壁面上铺展开, 最终形成稳定的静态接触角. 一种有效的方法是通过改变液-固粒子间吸引力系数和排斥力系数可以模拟出不同亲疏水性固体壁面.

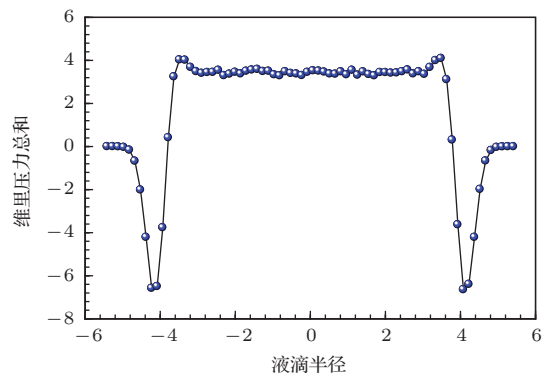


图8 维里压强 (保守力项与热运动项之和)

具体模拟过程为: 在 $20 \times 20 \times 20$ 的一个立方体区域内, 布置6896个DPD粒子, 其中4800个粒子为壁面粒子, 2096个粒子为流动粒子. 系统的参数参照如前所示表1中No.1设置, 对形成的稳定液滴运行20000步使接触角达到稳定状态. 壁面粒子与流体粒子相互作用仍然选用MDPD方法, 不过其中液体粒子与固体粒子之间的吸引力参数 $A_{ij}$ 与保守力参数 $B_{ij}$ 选取不同的参考值, 可以得到不同亲疏水性的固体壁面.

选取不同的 $A_{ij}$ 和 $B_{ij}$ 值, 可以得到不同亲疏水壁面的效应. 图9所示为相同温度下, 不同的 $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ 值时形成的不同接触角. 随着 $A_{ij} : B_{ij}$ 的值从1:1, 1:2到1:3变化的过程中, 接触角明显增大. 从图9还可以看出, 在相同 $A_{ij} : B_{ij}$ 比值下,  $A_{ij}$ 数值越大, 固体壁面表现出越强的亲水性.

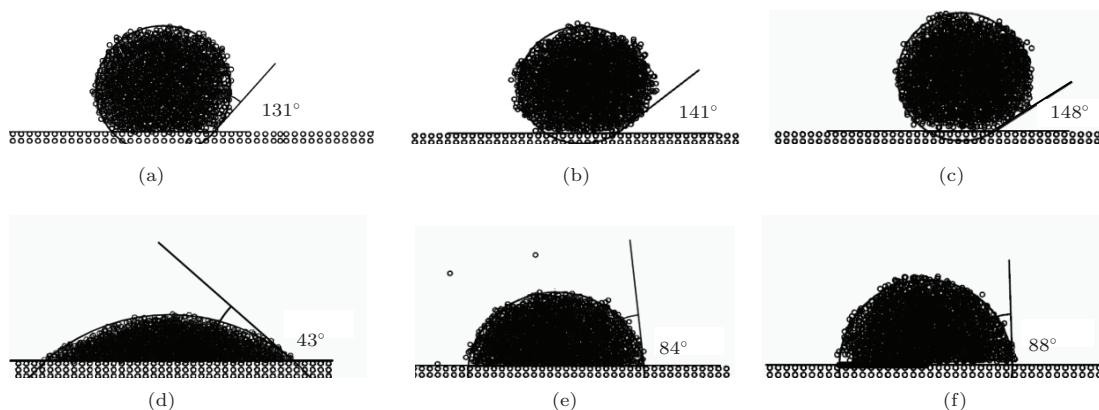


图9  $k_B T = 1.0$ ,  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$  取值不同但比值相同条件下形成的静态接触角 (a)  $A_{ij} = -10$ ,  $B_{ij} = 10$ ; (b)  $A_{ij} = -10$ ,  $B_{ij} = 20$ ; (c)  $A_{ij} = -10$ ,  $B_{ij} = 30$ ; (d)  $A_{ij} = -40$ ,  $B_{ij} = 40$ ; (e)  $A_{ij} = -40$ ,  $B_{ij} = 80$ ; (f)  $A_{ij} = -40$ ,  $B_{ij} = 120$

接下来分析不同温度对接触角的影响. 模拟  $k_B T = 1.0$  与  $k_B T = 0.8$  时液滴的接触角, 其他主要参数参考表 1 中 No.1 设置. 根据多次模拟结果, 取呈亲水性 ( $A_{ij} = -40, B_{ij} = 40$ )、疏水性 ( $A_{ij} = -20, B_{ij} = 40$ ) 及接近中水性 ( $A_{ij} = -40, B_{ij} = 120$ ) 的液滴进行对比分析.

图 10 为疏水性、中水性、亲水性的液滴在不同温度下形成的稳定静态接触角. 三种液滴在温度由  $k_B T = 0.8$  增加到  $k_B T = 1.0$  时, 接触角均减小了  $7^\circ$ — $17^\circ$  不等. 温度升高后, 流体粒子内部热运动加快, 内聚力减小, 克服壁面吸附力的能力降低, 所以温度升高后, 液滴的接触角略有减小. 其中呈亲水性的壁面的接触角的变化最小, 呈中水性的壁面在温度变小后其浸润性也发生变化, 呈疏水性.

进一步可以模拟液滴在粗糙微通道内的运动,

模拟区域为  $120 \times 10 \times 16$  (长  $\times$  宽  $\times$  高), 凹槽为直角梯形梯形, 其中底边长度为 3, 上边长为 6, 高为 3. 凹槽段凸触也为直角梯形, 其中上边长和高均为 3. 一共布置 35980 个粒子, 其中利用三层静止的粒子组成壁面, 组成通道壁面的 DPD 粒子总数为 15180 个, 组成流体的 DPD 粒子总数为 20800 个. 首先在通道内形成稳定的液滴, 然后给流体粒子施加一个持续向右的外场力  $g = 0.01$ , 滴液在外场力的作用下开始运动. 一共计算 15 万步, 前 4 万步用来形成液滴, 后 11 万步为在外力作用下液滴的运动情况.

图 11 所示为微通道壁面呈疏水性 ( $\theta = 122^\circ$ )、中水性 ( $\theta = 84^\circ$ )、亲水性 ( $\theta = 43^\circ$ ) 时, 液滴在几个特征时刻通过凹槽通道时的流动形态.

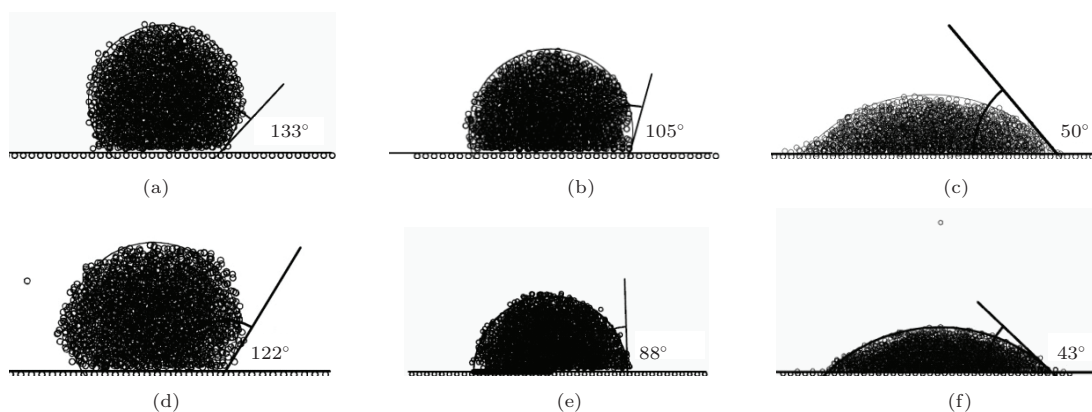


图 10 不同温度下形成的静态接触角 (a)  $k_B T = 0.8, A_{ij} = -20, B_{ij} = 40$ ; (b)  $k_B T = 0.8, A_{ij} = -40, B_{ij} = 120$ ; (c)  $k_B T = 0.8, A_{ij} = -40, B_{ij} = 40$ ; (d)  $k_B T = 1.0, A_{ij} = -20, B_{ij} = 40$ ; (e)  $k_B T = 1.0, A_{ij} = -40, B_{ij} = 120$ ; (f)  $k_B T = 1.0, A_{ij} = -40, B_{ij} = 40$

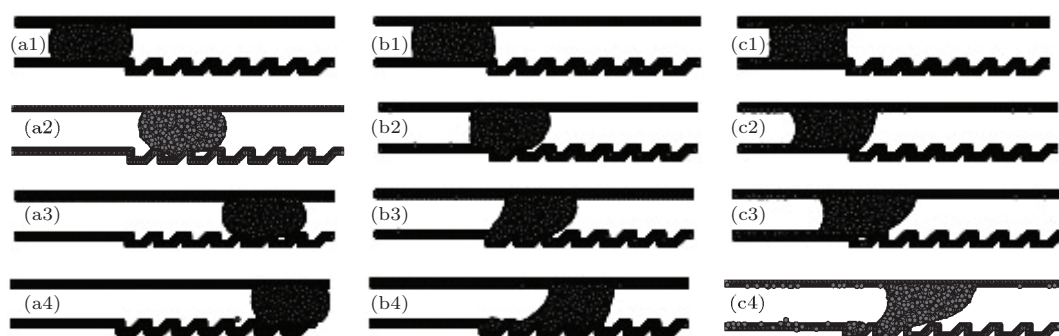


图 11 不同浸润性粗糙壁面内液滴的运动 (a1)  $\theta = 122^\circ, t = 0$ ; (a2)  $\theta = 122^\circ, t = 15$ ; (a3)  $\theta = 122^\circ, t = 25$ ; (a4)  $\theta = 122^\circ, t = 40$ ; (b1)  $\theta = 84^\circ, t = 0$ ; (b2)  $\theta = 84^\circ, t = 15$ ; (b3)  $\theta = 84^\circ, t = 25$ ; (b4)  $\theta = 84^\circ, t = 85$ ; (c1)  $\theta = 43^\circ, t = 0$ ; (c2)  $\theta = 43^\circ, t = 15$ ; (c3)  $\theta = 43^\circ, t = 25$ ; (c4)  $\theta = 43^\circ, t = 85$

从图 11 可以看出, 液滴首先会达到平衡态, 然后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. 图 11 (a1), (b1), (c1) 中浸润性越强, 液

滴与固体表面的接触面积越大. 在疏水性壁面 ( $\theta = 122^\circ$ ) 中, 液滴的前半部分直接通过第一个凹槽后 (如图 11 (a2)), 液滴的后半部分并不能直接通过, 而是浸入凹槽底部, 但是在液滴内部作用力

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 11(a3)),最后液滴在凹槽表面形成完整的形态继续向右流动,而且液前一部分不会与凹槽全部接触(如图 11(a3), (a4)),并且液滴的流动速度比起在亲水性、中水性壁面中要快许多.在中水性壁面( $\theta = 84^\circ$ )中,从液滴的前缘进入凹槽区域开始,随着液滴向右移动,液滴前缘会浸入第一个凹槽(如图 11(b2), (b3)),因为中水性固壁表面与液滴之间的吸附力较强,液滴内部作用力无法将浸入凹槽中的液体拽出,最终分裂,将一部分液滴粒子保留在第一个凹槽中,液滴在运动过程中每离开一个凹槽总会留下一些小的液滴粒子,剩下大部分粒子将继续向右移动(如图 11(b4)).从图 11(c2), (c3) 中可以看出,在亲水性壁面( $\theta = 43^\circ$ ),液滴同样会在第一个凹槽内留

下一部分粒子,但由于液滴粒子与壁面之间吸附力较大,液滴在第二个凹槽处向前运动停止.

对比液滴在三种不同浸润性壁面的运动情况可知,液滴在呈疏水性壁面的凹槽内运动速度最快,其次是中水性,亲水性的壁面因固壁表面与液滴粒子之间的吸附力很强,阻力很大,导致运动速度最慢,甚至停止.

微流体系统中,微通道壁面与流体粒子的相互作用力,对流体流动影响较大<sup>[3]</sup>.本文改变微通道凹槽形状,将凹槽与凸触改成等腰梯形,凹槽上边长为6,下边长为3,高为3.并且计算了亲水壁面、疏水壁面、中水壁面中液滴的流动情况,模拟参数选取与图 11 相同,注入的流体粒子数依然为20800个,如图 12 所示.

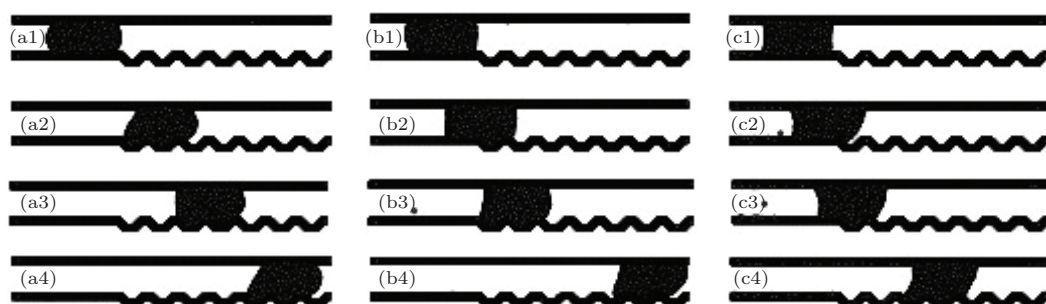


图 12 不同浸润性粗糙壁面内液滴的运动 (a1)  $\theta = 122^\circ, t = 0$ ; (a2)  $\theta = 122^\circ, t = 15$ ; (a3)  $\theta = 122^\circ, t = 25$ ; (a4)  $\theta = 122^\circ, t = 40$ ; (b1)  $\theta = 84^\circ, t = 0$ ; (b2)  $\theta = 84^\circ, t = 15$ ; (b3)  $\theta = 84^\circ, t = 25$ ; (b4)  $\theta = 84^\circ, t = 85$ ; (c1)  $\theta = 43^\circ, t = 0$ ; (c2)  $\theta = 43^\circ, t = 15$ ; (c3)  $\theta = 43^\circ, t = 25$ ; (c4)  $\theta = 43^\circ, t = 85$

从图 12 可以看出,将固体凹槽形状改为等腰梯形后,液滴与凹槽接触面积增大,不过没有直角的存在.液滴在通过亲水性及中性凹槽时运动加快,并且不会有部分液滴粒子停留在凹槽内部;相同条件下,液滴不会停止运动.对于疏水性壁面,液滴会与凹槽全部接触,加大了液滴与壁面间的相互作用,速度反而会有所降低.

## 5 结 论

本文运用MDPD方法模拟了介观尺度下带自由面流体的动力学特性;分析了液滴内计算所得中分子热运动和保守力贡献的维里压强;模拟了液滴的静态接触角以及液滴在粗糙微通道内的运动.结论如下:

- 1) 模拟所得液滴内外压强差满足Laplace定律;
- 2) 运用不同的MDPD参数组合,可以模拟出

不同的液滴浸润性,在吸引力系数 $A$ 较大时,固体壁面展现出很强的亲水性;当排斥力系数 $B$ 较大时,展现出很强的疏水性;在温度升高的情况下,液滴与壁面的接触角略有减小,可能使中水性壁面呈现出亲水的效果;

3) 液滴在粗糙微通道表面运动时,受到壁面浸润性的影响较大,在疏水性的壁面上,液滴克服壁面粒子吸附力较小,运动较快;在亲水性壁面上,液滴运动需要克服更多阻力,运动速度较慢;并且改变凹槽形状后,对液滴在壁面上的流动有较大影响.

## 参考文献

- [1] Fan X J, Phan-Thien N, Chen S, Wu X, Ng T Y 2006 *Phys. Fluids* **18** 063102
- [2] Yun K S, Cho I J, Bu J U, Kim C J, Yoon E 2002 *J. Microelectromechanical. Sys.* **11** 454

- [3] Guo J H, Dai S Q, Dai Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2601 (in Chinese) [郭加宏, 戴世强, 代钦 2010 物理学报 **59** 2601]
- [4] Karniadakis G, Beskok A 2002 *Micro Flows: Fundamental and Simulation* (New York: Springer.)
- [5] Gad-el-Hak M 2001 *Mécaniq. Indust.* **2** 313
- [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] 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]
- [11] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5305 (in Chinese) [曹炳阳, 陈民, 过增元 2006 物理学报 **55** 5305]
- [12] Maesh C A 1998 *Ph. D. Dissertation* (London: University of Oxford)
- [13] Espanol P, Serrano M, Zuniga I 1997 *Int. J. Modern Phys. C* **8** 592
- [14] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *J. Computational. Phys.* **222** 110
- [15] Liu M B, Meakin P, Huang H 2006 *Phys. Fluids* **18** 017101
- [16] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *Phys. Fluids* **19** 033302
- [17] 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]
- [18] 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]
- [19] Zhang M K, Chen S, Shang Z 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 034701 (in Chinese) [张明焜, 陈硕, 尚智 2012 物理学报 **61** 034701]
- [20] Pagonabarraga I, Frenkel D 2001 *J. Phys. Chem.* **115** 5015
- [21] Li Z, Zhou Z W, Hu G H 2012 *J. Adhes. Sci. Technol.* **26** 1883
- [22] Espanol P, Warren P 1995 *Europhys. Lett.* **30** 191
- [23] Arienti M, Pan W, Li X, Karniadakis G 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 204114



# The study of fluid with free surface by many-body dissipative particle dynamics<sup>\*</sup>

Zhou Nan    Chen Shuo<sup>†</sup>

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

( Received 4 November 2013; revised manuscript received 27 November 2013 )

## Abstract

The dynamics of a drop on a mesoscopic scale is investigated by using the many-body dissipative particle dynamic (MDPD) method. The formation of liquid-vapor coexistence interface in the MDPD system is explored. The simulations of the pressure inside/outside the drop and the surface tension are carried out, and it is verified that Laplace's law is satisfied in our simulation. Different contact angles are obtained by changing conservative interaction parameters between particles. The relationship between MDPD parameters and contact angles is discussed. Based on the results, the flow behaviors of a drop moving in grooved microchannels are simulated. The results in this paper are useful in studying the fluid with free surfaces flow behavior on rough surface.

**Keywords:** many-body dissipative particle dynamics, freesurface, droplet, static contact angle

**PACS:** 47.10.-g, 47.11.-j, 47.27.nd, 47.61.Jd

**DOI:** 10.7498/aps.63.084701

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51276130, 10872152) and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20120072110037).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [schen\\_tju@tongji.edu.cn](mailto:schen_tju@tongji.edu.cn)