

# 改性疏水固壁润湿性反转现象的格子 Boltzmann 方法模拟\*

刘邱祖<sup>1)2)</sup> 寇子明<sup>1)2)</sup> 贾月梅<sup>3)</sup> 吴娟<sup>1)2)</sup> 韩振南<sup>1)†</sup> 张倩倩<sup>1)</sup>

1)(太原理工大学机械工程学院, 太原 030024)

2)(山西省矿山流体控制工程实验室, 太原 030024)

3)(太原理工大学力学学院, 太原 030024)

(2013年12月2日收到; 2014年1月25日收到修改稿)

基于疏水固壁改性会引起润湿性反转的特点, 采用考虑固体与液体间分子力的格子 Boltzmann 方法, 从壁面的线性 and 瞬时改性两方面对润湿性反转现象进行了数值模拟, 并结合流体体积方法处理界面层质量. 结果表明: 壁面线性改性的过程中润湿性反转变化的平稳, 润湿所需时间大幅减少, 所得到的接触角与固液吸引力系数的关系与其他文献结果一致; 壁面瞬时改性幅度越大说明固壁对液滴作用力越强, 表现为润湿性变化越明显, 瞬时改性后接触角随时间呈指数规律变化, 这与现有结论相符合. 研究发现: 在改性条件下液膜铺展过程中伴随着振荡变化, 线性改性的振动峰值与改性幅度相关; 瞬时改性的液膜速度会在某一时刻突然增大, 这种现象与夹带空气有关.

**关键词:** 改性疏水固壁, 润湿性反转, 格子 Boltzmann 方法, 数值模拟

**PACS:** 47.11.-j, 68.35.Ja, 68.08.Bc

**DOI:** 10.7498/aps.63.104701

## 1 引言

润湿性反转是在液滴沿固壁铺展范畴内一种典型的液体表面自由流动现象, 普遍存在于湿式降尘、喷淋冷却、煤层注水、煤层气采收、原油化学驱等工业领域. 尤其是针对疏水固壁, 对于如何改善其润湿性能并使之表现出亲水性一直是一个难题. 对润湿性反转现象的研究不仅能促进对气液两相流问题的理论探讨, 而且对生产应用也具有积极的意义. 在固壁改性导致的润湿性反转过程中, 常伴有夹带空气、振荡等物理现象, 这增加了研究的困难<sup>[1-3]</sup>.

近年来, 国内外学者针对润湿性反转现象开展了大量研究工作. Tsekova 等<sup>[4]</sup>通过建立润湿特性的单相自由面模型, 研究了固壁参数与润湿接触角间的关系. 文献<sup>[5, 6]</sup>分别从时间演化角度和高

速成像实验角度对液滴沿不同固壁的铺展半径变化情况进行了研究. Beacham 和 Matar<sup>[7]</sup>研究了液滴表面张力对润湿特性的影响. Liu 等<sup>[8]</sup>通过测量微/纳米级层次的结构模型分析了硅表面水润湿接触角的变化. Zhu 等<sup>[9]</sup>利用硬脂酸研究了铜表面的润湿性改性. 毕菲菲等<sup>[10]</sup>利用高速摄像机研究了不同液滴撞击固壁后的振荡特性. Yang 等<sup>[11]</sup>以疏水性碳纳米管为研究对象, 研究了在加热状态下表面活性剂超亲水润湿性的变化. Gao 和 Sun<sup>[12]</sup>使用半经验原子嵌入法建立铺展过程的分子动力学模型, 分析了固液界面结构对润湿性反转的影响. Gong 等<sup>[13]</sup>通过所建立的疏水表面的半浸润模型分析了润湿接触角与固体参数、液体参数间的关系.

虽然上述研究工作分析了液体流动特性, 但对其中内部分子动力学特性的考虑尚存在不足. 目

\* 国家自然科学基金联合基金 (批准号: U1261107) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zhennan\_han@hotmail.com

前反映分子间相互作用力的方法主要有光滑粒子动力学 (SPH) 方法和格子 Boltzmann 方法 (LBM). SPH 方法作为一种具有自适应性的纯拉格朗日无网格算法, 适合求解诸如液滴碰撞破碎等大变形问题 [14,15]. LBM 是一种求解流场方程的介观领域的数值方法, 其基本演化方程经多尺度展开可得到 Navier-Stokes 方程. LBM 与宏观流体力学存在天然的联系, 能够深刻地反映流体本质的物理特性. 在近 20 年来, 该方法取得了飞速的发展, 具有天然的并行性、编程简单及边界条件容易实现等优点 [2,16]. 关于液滴沿固壁铺展动态过程, 已有不少学者建立了相应的 LBM 研究模型. 液滴铺展是自由能趋于最小化的过程, 研究多是从这个角度出发通过控制不同的润湿边界条件建立相应的模型, 以分析不同固壁对液滴铺展的影响 [17,18]. Sun 等 [19] 建立了一个具有隐式边界的耦合方程, 并基于此模型研究了微通道内粒子聚焦的流动现象. 文献 [20, 21] 通过建立表面张力和润湿特性的单相自由面模型, 分别模拟了流动速度和固壁润湿参数与接触角的关系. Kang 等 [22] 提出简化考虑固体与液体间作用力的外力项, 模拟了重力场中不同浸润条件下管道中液滴的动力学行为.

采用考虑了固体与液体间分子作用力的 LBM 模型, 本文对改性疏水固壁润湿性反转现象进行了数值模拟, 并把液体体积 (VOF) 方法的基本原理应用到对界面层质量的均摊处理, 还分析了在线性改性和瞬时改性两种情况下壁面的润湿性反转情况.

## 2 数值模型

### 2.1 LBM 模型

LBM 模型起源于格子气自动机 (LGA), 根据分子运动理论和统计力学原理建立粒子系统, 并赋予迁移和碰撞的运动规则, 计算原理为布尔运算, 进而保证了模型的稳定性. LGA 的演化过程中包含了粒子的随机脉动, 宏观物理量 (如速度、密度) 可以通过对粒子系统状态量在空间和时间上做统计平均而得到. McNamara 和 Zanetti [16] 提出用粒子分布函数  $f_a$  代替粒子系统状态量进行演化. 目前应用最广的是格子 Bhatnagar-Gross-Krook 方法的二维九速度模型 (图 1), 其碰撞过程、迁移过程的演化方程分别为

$$\tilde{f}_a(x, t) = f_a(x, t) - \frac{1}{\tau}(f_a(x, t) - f_a^{\text{eq}}(x, t)), \quad (1)$$

$$f_a(x + ce_a\delta_t, t + \delta_t) = \tilde{f}_a(x, t), \quad (2)$$

式中,  $f_a$  和  $\tilde{f}_a$  分别为碰撞前后  $a$  方向的粒子分布函数;  $x$  为位置坐标;  $c$  为粒子运动速率,  $c = \delta_x/\delta_t$ , 其中  $\delta_x$  和  $\delta_t$  分别为网格步长和时间步长;  $\tau$  为无量纲弛豫时间;  $f_a^{\text{eq}}$  为平衡态分布函数.

平衡态分布函数  $f_a^{\text{eq}}$  是宏观变量  $\rho, u$  的函数, 采用 Boltzmann-Maxwell 平衡分布的  $O(M^2)$  阶近似, 即

$$f_a^{\text{eq}} = \rho w_a \left[ 1 + \frac{e_a u}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{e_a u}{c_s^2} \right)^2 - \frac{u^2}{2c_s^2} \right], \quad (3)$$

式中,  $c_s = \frac{\sqrt{3}}{3c}$ ,  $e_a$  和  $w_a$  分别为离散速度和数值积分公式的权系数.  $e_a$  和  $w_a$  取值如下:

$$\begin{aligned} e_0 &= (0, 0), \\ e_{1,2,3,4} &= (\cos(\pi(a-1)/2), \sin(\pi(a-1)/2)), \\ e_{5,6,7,8} &= \sqrt{2}(\cos(\pi(a-0.5)/2), \sin(\pi(a-0.5)/2)); \\ w &= 4/9, \\ w_{1,2,3,4} &= 1/9, \\ w_{5,6,7,8} &= 1/36. \end{aligned}$$

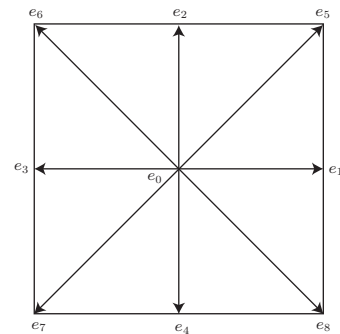


图 1 二维九速度方形格子模型

宏观流体的密度  $\rho$  和动量  $\rho u$  可以通过分布函数得到,

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_a f_a^{\text{eq}}, \\ \rho u &= \sum_a f_a^{\text{eq}} e_a + \tau F, \end{aligned} \quad (4)$$

式中  $F$  为固体粒子与流体粒子间的吸引力. 流体运动黏性系数  $\nu = c_s^2(\tau - 1/2)\delta_t$ .

利用表示固体与流体之间势的 van der Waals 自由理论推导出固体粒子和流体粒子之间的吸引力  $F$  方程为 [23]

$$F = \begin{cases} k\rho(r_f)(r_s - r_f) & (|r_s - r_f| = 1), \\ \frac{k(r_f)(r_s - r_f)}{4\sqrt{2}} & (|r_s - r_f| = \sqrt{2}), \\ 0 & (|r_s - r_f| \neq 1, \sqrt{2}), \end{cases} \quad (5)$$

式中,  $r_s$  和  $r_f$  分别为固体粒子和流体粒子的半径,  $k$  为固体对液体的吸引力系数. 通过  $k$  可调节固壁的改性能力, 润湿接触角  $\theta$  随  $k$  的增大而线性减小 [24].

## 2.2 界面层处理

液滴铺展模拟中对界面层 (液膜) 的处理尤为重要. Ginzburg 和 Steiner [25] 假定小密度流体 (气相) 对大密度流体 (液相) 的影响可以忽略, 使得多相流问题转化为大密度流体在界面层的运动问题. 引入 VOF 方法中的体积分数  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon = m/\rho$ , 其中  $m$  为流体质量. 液相质量值定义  $m = \rho$ ; 气相质量值定义  $m = 0$ ; 液膜为单格子层, 其质量值定义  $\rho > m > 0$ .  $\varepsilon$  值通过求解 VOF 方法中定义的流体体积函数  $G$  得到, 函数  $G$  满足守恒传输方程 [26], 此方程写成梯度和散度形式为

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla G = 0, \quad (6)$$

式中  $\mathbf{V} = (u, v)$  是流体的速度场. 该方程需要配合质量守恒方程同步求解. 由于在疏水固壁突然改性的过程中, 格子传递存在的不稳定性和压力的陡然变化会使得疏水固壁出现局部密度不均匀, 从而导致质量变化量  $\Delta m$  局部过多或过少, 需要对  $\Delta m$  进行质量均摊处理 [27], 具体方法为

$$\Delta m = \gamma(f_a(x + ce_a\delta_t, t + \delta_t) - f_a(x, t)), \quad (7)$$

$$m(x, t + \delta_t) = \sum_{a=0}^8 \Delta m_a + m(x, t), \quad (8)$$

式中,  $\gamma$  为格子单元质量修正系数, 取值如下: 当  $x + ce_a\delta_t \in \phi_g$  (气相) 时,  $\gamma = 0$ ; 当  $x + ce_a\delta_t \in \phi_l$  (液相) 时,  $\gamma = 1$ ; 当  $x + ce_a\delta_t \in \phi_i$  (液膜) 时,  $\gamma = (\varepsilon(x + ce_a\delta_t, t + \delta_t) + \varepsilon(x, t))/2$ . 这里  $\phi_g, \phi_l, \phi_i$  分别为气相、液相、界面层的格子单元. 如果  $m(x, t + \delta_t) > \rho$ , 表示该格子的密度大于正常值, 此时液滴被压缩, 多余质量  $m^e = m(x, t + \delta_t) - \rho$  应根据自由表面法线方向分配到周边格子单元中. 若  $m(x, t + \delta_t) = 0$ , 表示此时为气相或液相内部吸入了空气. 这种计算  $\Delta m$  的方式易于实施, 且保证了自由界面质量守恒.

在 LBM 中, 边界条件的处理对模型的计算精度和稳定性影响很大, 设计的原则是保证质量守恒和动量守恒. 本模型在左右边界采用周期格式, 上下边界采用反弹格式, 即上边界为镜面, 下边界为固壁 [28]. 铺展初始时刻液滴刚好与壁面接触, 宏观上没有速度. 设定液滴初始直径  $D_0$  为  $20 \mu\text{m}$ , 液膜为单分子层, 厚度为  $2 \mu\text{m}$ .

## 3 结果分析

### 3.1 模型验证

图 2 给出了利用疏水固壁液滴铺展的 LBM 模型、移动粒子半隐式 (MPS) 数值方法 [29] 及理论公式 [30] 计算接触角  $\theta$  随时间  $t$  变化的结果比较, 其中,  $\theta$  衡量润湿性的大小,  $t$  为计算时间步. 从图 2 可以看出: 三种方法得到的接触角随时间变化的规律是一致的, 均呈指数变化, 且变化范围比较接近, 这与文献 [12, 28] 结果一致. LBM 模拟较 MPS 模拟得到的曲线更加平滑, 体现出 LBM 模拟高度并行性的优点. 这说明用 LBM 模拟疏水壁面液膜铺展的动态过程是可行的.

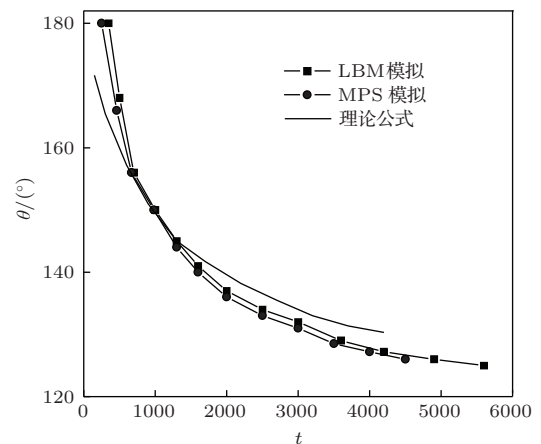


图 2 接触角  $\theta$  随时间  $t$  的变化

### 3.2 改性壁面的润湿性反转

对于疏水性壁面, 当壁面特性从疏水变成亲水时, 润湿性也会随之发生很大的变化, 甚至发生反转现象 [31]. 本文从壁面的线性改性和瞬时改性两方面研究润湿性反转现象.

#### 3.2.1 固壁线性改性的润湿性反转现象

图 3 给出了固壁线性改性下, 固液吸引力系数  $k$  从 0.1 变化到 0.4 的过程中  $k$  对疏水壁面润湿性的

影响. 从图3可以看出,  $\theta$ 与 $k$ 呈线性关系, 这与文献[24]得到的规律一致, 进一步说明了本模型在处理微液滴流动问题上的可行性. 从图3还可以看出, 在壁面线性改性的过程中, 固壁润湿性由疏水向亲水逐渐过渡,  $k = 0.2$ 是个转折点, 之后润湿性发生了反转, 在整个过程中润湿性的反转过渡较平稳, 接触角随固壁润湿性的增大而减小, 说明固壁对液滴作用力越大越易铺展, 此规律符合物理现象. 图4给出了液滴铺展所需时间与 $k$ 的关系. 由图4可见, 随着固壁润湿性的增大铺展所需时间大幅减少, 在 $k$ 从0.1变化到0.4的过程中润湿时间缩短了近80%,  $k = 0.4$ 时润湿时间为800时间步(相当于8 s). 在矿井喷雾降尘工程中, 液滴与粉尘的结合时间大约为5 s, 较长的铺展时间可能会导致润湿效率的降低. 因此, 单方面通过固壁改性来提高粉尘的润湿性是不够的, 实际工作中多采用通过添加降尘剂降低液滴表面张力以提高液滴与粉尘的结合能力.

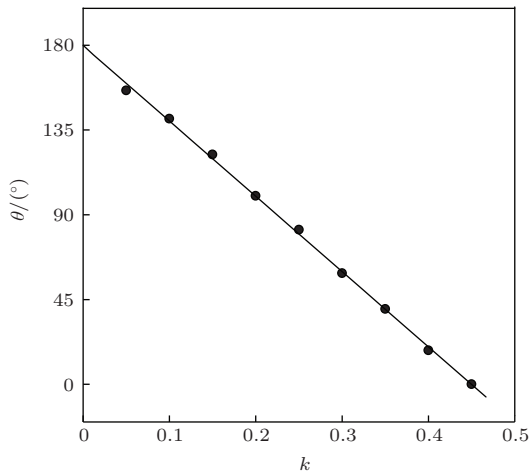


图3 固壁线性改性下固液吸引力系数 $k$ 与接触角 $\theta$ 的关系

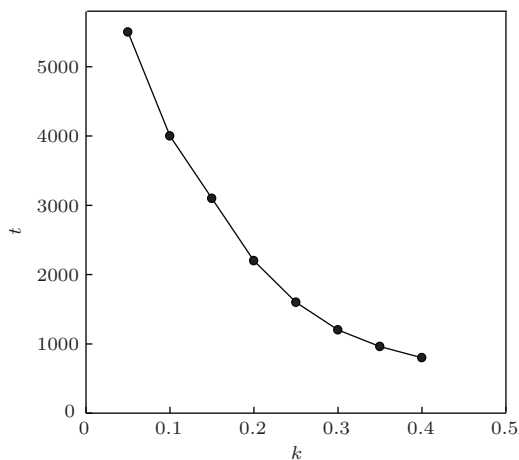


图4 固壁线性改性下铺展所需时间 $t$ 与固液吸引力系数 $k$ 的关系

### 3.2.2 壁面瞬时改性的润湿性反转现象

图5给出了瞬间改性下接触角随时间的动态变化过程. 这里模拟了三组瞬间变化, 即 $k$ 从0.1分别变化到0.2, 0.3和0.4. 从图5可以看出, 接触角随时间均呈指数规律变化, 随着 $k$ 的变化润湿性发生明显的反转, 改性幅度越大说明固壁对液滴的作用力越强, 表现为润湿性变化越大, 且开始铺展的时间越早. 以 $k$ 从0.1变化到0.4为例, 固壁改性50时间步之后液滴开始铺展, 200时间步之前接触角随时间减小幅度较大, 这是因为在液滴和壁面的综合作用下液膜有强烈的向四周铺展的趋势此后进入平稳减慢过程, 500时间步后铺展趋于稳定, 达到动态平衡. 注意到稳态时接触角为 $24.5^\circ$ 比图3所示结果( $21.3^\circ$ )大 $3.2^\circ$ , 这是由于液滴体积增大的缘故. 分析认为, 液滴体积增大是因为剧烈变化使其夹带空气所致[32], 进而导致液滴的整体轮廓增大, 表现为接触角增大. 于是通过液膜轮廓边界积分得到轮廓体积 $V$ ,

$$V = V_0 + \Delta V, \tag{9}$$

式中,  $V_0$ 为初始液膜体积,  $V_0 = 1/6\pi D_0^3 = 4.187 \mu\text{m}^3$ ;  $\Delta V$ 为由于吸入空气导致增加的体积. 图6为液膜体积随时间的变化, 随着铺展的进行液膜体积先减小再增大最后稳定. 分析发现, 一开始在内外力的作用下液滴处于压缩状态, 宏观上表现为液滴有所减小, 强烈的铺展导致卷吸空气, 由于空气进入液滴内部进而导致体积的增大. 以 $k$ 从0.1变化到0.4为例, 体积增大了 $0.006 \mu\text{m}^3$ , 经计算与接触角增加 $3.2^\circ$ 相符.

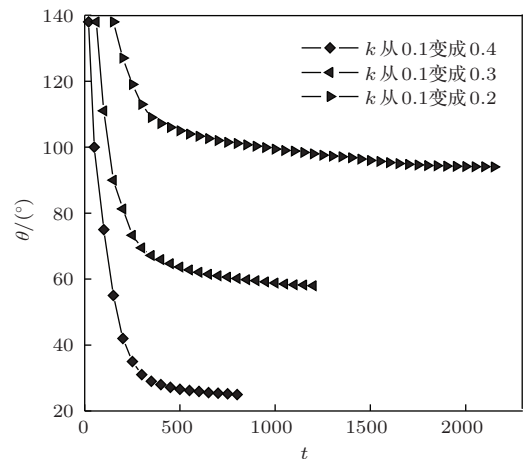


图5 壁面瞬时改性下接触角 $\theta$ 随时间 $t$ 的变化



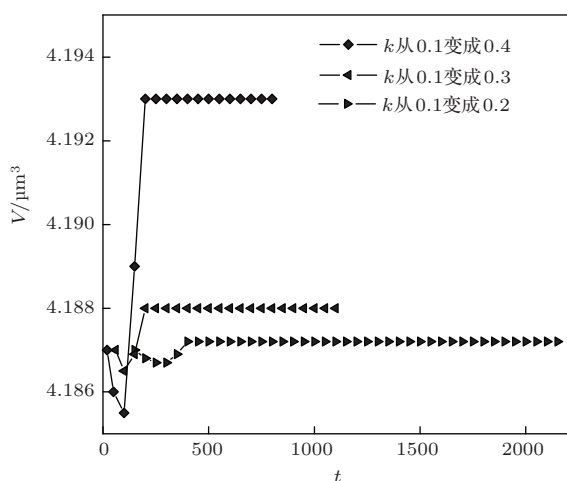


图6 壁面瞬时改性下液膜体积  $V$  随时间  $t$  的变化

### 3.3 振荡现象

#### 3.3.1 壁面线性改性的液膜振荡

通过跟踪液膜格子运动速度发现, 在由固壁线性改性引起的液滴铺展过程中  $k$  从 0.1 变化到 0.2, 0.3 以及 0.4 均存在液膜速度的振荡变化, 速度振动的峰值依次为 0.002, 0.005, 0.012 m/s. 图 7 给出了  $k$  从 0.1 到 0.4 线性变化下液膜速度随时间的变化. 从图 7 可以看出, 液膜速度经过几次振荡后在 100 时间步时达到峰值, 之后液膜速度变化趋于平稳减慢过程, 至 650 时间步后开始大幅度减小, 并且在整个铺展过程中始终伴随着振荡变化, 平稳段振幅大约稳定在 0.0105 m/s. 液膜类似于弹性体, 铺展过程中由于弹性作用会产生回缩的反趋势, 这个反趋势与正趋势的叠加作用造成了液滴的振荡, 文献 [33] 也发现了液膜的弹性振荡现象. 由于壁面的线性改变导致正反趋势的相互作用呈现出一致的规律性, 表现为液滴稳定的振荡现象.

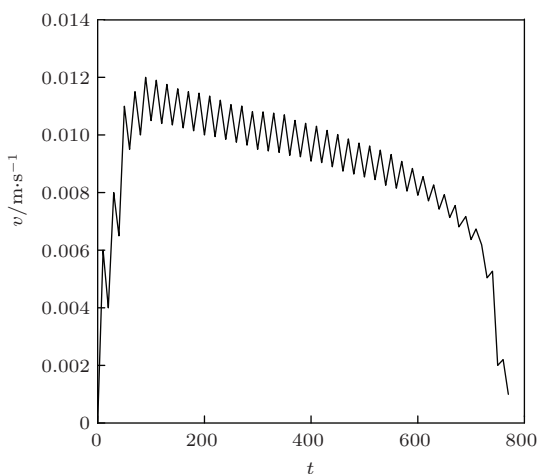


图7 固壁线性改性下液膜速度  $v$  随时间  $t$  的变化

#### 3.3.2 壁面瞬时改性的液膜振荡

图 8 为  $k$  从 0.1 到 0.4 瞬时改性下液膜速度随时间的变化. 由于瞬时改性造成液滴的压力骤然增大, 其正反趋势的叠加波动效应必然加强, 以致振动速度的峰值达到 0.035 m/s. 发现在固壁改性后液滴经过一个短暂的力量蓄积过程后速度突然增加, 在 20 时间步时增加到最大, 之后液膜开始铺展, 铺展速度随时间递减, 400 时间步后振荡趋于平缓, 在整个铺展过程中始终伴随着振荡变化. 同时注意到 200 时间步附近液膜速度突然变大, 分析认为这是由于铺展过程中夹带空气所致, 与图 6 所示结果一致. 当液膜卷吸空气时, 由于 Marangoni 效应液膜速度会出现突然增大. 文献 [34] 也发现铺展过程中伴随着振荡现象. 铺展过程中液膜的振荡现象属于波动学领域, 蕴含着复杂的分子力学运动机理, 有待进一步研究.

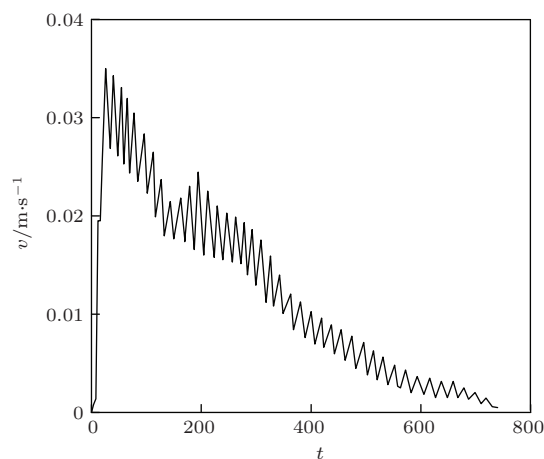


图8 固壁瞬时改性下液膜速度  $v$  随时间  $t$  的变化

## 4 结 论

疏水固壁的润湿性反转一直是工业中常见的分子层自由流动现象. 因 LBM 适用于研究纳米级流体界面问题, 所以在处理固壁润湿性问题时其有天然的优势. 本文采用 LBM 对改性疏水固壁润湿性反转现象进行数值模拟, 利用 VOF 基本原理对界面层的质量进行了均摊处理, 从壁面的线性改性和瞬时改性两方面分析了润湿性反转现象. 结果发现: 壁面线性改性时, 接触角与固液吸引力系数  $k$  呈线性关系, 在整个铺展过程中润湿性的反转过渡较平稳, 铺展所需时间也得到大幅度的减少, 且在铺展过程中液膜速度始终存在着振荡变化, 振动峰值与改性幅度相关; 壁面瞬时改性后, 接触角随时

间呈指数规律变化, 改性幅度越大说明固壁对液滴的作用力越强, 表现为润湿性变化越大, 且开始铺展的时间越早. 在固壁改性后液滴经过一个短暂的力量蓄积过程后液膜速度突然增加然后随之递减, 在整个铺展过程中始终伴随着振荡变化. 研究发现在200时间步时液膜速度突然增大, 这可能是由于铺展过程中夹带了空气的缘故, 于是通过跟踪液滴轮廓体积进行了验证. 改性壁面引起的润湿性反转中的振荡现象属于波动学理论, 其中的复杂机理有待进一步研究.

## 参考文献

- [1] Sun Z H, Han R J 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3185
- [2] Shen Z Y, He Y 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 024703
- [3] Mahmood R S, Sonia B, Luc G F 2012 *Appl. Surf. Sci.* **258** 6416
- [4] Tsekova R, Borissov D, Karakasheva S I 2013 *Colloids Surf. A* **423** 77
- [5] Lee K S, Starov V M 2009 *J. Colloid Interf. Sci.* **329** 3615
- [6] Winkels K G, Weijts J H, Eddi A, Snoeijer J H 2012 *Phys. Rev. E* **85** 055301
- [7] Beacham D R, Matar O K 2009 *Langmuir* **25** 14174
- [8] Liu S S, Zhang C H, Zhang H B, Zhou J, He J G, Yin H Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 106801
- [9] Zhu X T, Zhang Z Z, Men X H, Yang J, Xu X H, Zhu X T, Xue Q J 2011 *Appl. Surf. Sci.* **257** 3753
- [10] Bi F F, Guo Y L, Shen S Q, Chen J X 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 184702 (in Chinese) [毕菲菲, 郭亚丽, 沈胜强, 陈觉先 2012 物理学报 **61** 184702]
- [11] Yang J, Zhang Z Z, Men X H, Xu X H, Zhu X T 2011 *Carbon* **49** 19
- [12] Gao Y F, Sun D Y 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 066802
- [13] Gong M G, Liu Y Y, Xu X L 2010 *Chin. Phys. B* **19** 106801
- [14] Su T X, Ma L Q, Liu M B, Chang J Z 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 064702 (in Chinese) [苏铁熊, 马理强, 刘谋斌, 常建忠 2013 物理学报 **62** 064702]
- [15] Wang J F, Sun F X, Cheng R J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 060201
- [16] McNamara G R, Zanetti G 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2332
- [17] Dupuis A, Yeomans J M 2005 *Langmuir* **21** 2624
- [18] Wang W X, Shi J, Qiu B, Li H B 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8371 (in Chinese) [王文霞, 施娟, 邱冰, 李华兵 2010 物理学报 **59** 8371]
- [19] Sun D K, Jiang D, Xiang N, Chen K, Ni Z H 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 074702
- [20] Kawasaki A, Onishi J, Chen Y, Ohashi H 2007 *Comp. Math. Appl.* **55** 1492
- [21] Xing X Q, Butler D L, Yang C 2006 *Comp. Math. Sci.* **7** 1
- [22] Kang Q, Zhang D, Chen S 2002 *Phys. Fluids* **14** 3203
- [23] 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]
- [24] Zhang J F, Li B M, Kwok D Y 2004 *Phys. Rev. E* **69** 032602
- [25] Ginzburg I, Steiner K 2003 *J. Comput. Phys.* **185** 61
- [26] Zhang M L, Hao Z N, Zhang Y P 2013 *Acta Oceanol. Sin.* **32** 38
- [27] Ding Q L, Wang D G, Wang L L 2010 *Shuili Xuebao* **8** 991 (in Chinese) [丁全林, 汪德耀, 王玲玲 2010 水利学报 **8** 991]
- [28] Liu Q Z, Kou Z M, Han Z N, Gao G J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 234701 (in Chinese) [刘邱祖, 寇子明, 韩振南, 高贵军 2013 物理学报 **62** 234701]
- [29] Xiong J B, Seiichi K, Mikio S 2011 *J. Nucl. Sci. Technol.* **48** 145
- [30] Lee K S, Ivanova N, Starov V M, Hilal N, Dutschk V 2008 *Adv. Colloid Interf. Sci.* **144** 54
- [31] Li H, Zheng M J, Liu S D, Ma L, Zhu C Q, Xiong Z Z 2013 *Surf. Coat. Technol.* **224** 88
- [32] Liu S S, Zhang C H, He J G, Zhou J, Yin H Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 206201 (in Chinese) [刘思思, 张朝辉, 何建国, 周杰, 尹恒洋 2013 物理学报 **62** 206201]
- [33] Siddhartha F L, Vivek V B, Nigam K D P 2007 *Chem. Eng. Sci.* **62** 7214
- [34] Hu G H, Xu A J, Xu Z, Zhou Z W 2008 *Phys. Fluids* **20** 102101

# Wettability alteration simulation of modified hydrophobic solid surface by lattice Boltzmann method\*

Liu Qiu-Zu<sup>1)2)</sup> Kou Zi-Ming<sup>1)2)</sup> Jia Yue-Mei<sup>3)</sup> Wu Juan<sup>1)2)</sup>  
Han Zhen-Nan<sup>1)†</sup> Zhang Qian-Qian<sup>1)</sup>

1) (*College of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China*)

2) (*Mine Fluid Control Engineering Laboratory of Shanxi Province, Taiyuan 030024, China*)

3) (*College of Mechanics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China*)

( Received 2 December 2013; revised manuscript received 25 January 2014 )

## Abstract

Based on the wettability alteration caused by the modified hydrophobic solid surface, the phenomenon of wettability alteration is simulated numerically in terms of linear and instantaneous modification by using the lattice Boltzmann method which can properly reflect the interaction of solid-liquid molecules, combined with the volume of fluid method to dispose the quality of interface layer. Results show that the wettability changes smoothly in the process of linear modification, the time needed for wetting significantly decreases, and the relationship between the contact angle and attractive coefficient of solid-liquid accord well with literature data. The more greatly the amplitude of instantaneous modification changes, the stronger the force of solid acting on droplet is, which is reflected by the obvious change of wettability. It is also found that the contact angle changes exponentially with time after instantaneous modification, which is in good agreement with the existing conclusions. Further investigation shows that the liquid oscillation exists in the whole spreading process. The vibration peak is associated with the modified amplitude of linear modification. And liquid film velocity increases suddenly at sometime after instantaneous modification, which is associated with entrained air.

**Keywords:** modified hydrophobic solid surface, wettability alteration, lattice Boltzmann method, numerical simulation

**PACS:** 47.11.-j, 68.35.Ja, 68.08.Bc

**DOI:** [10.7498/aps.63.104701](https://doi.org/10.7498/aps.63.104701)

---

\* Project supported by the Joint Funds of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U1261107).

† Corresponding author. E-mail: [zhennan\\_han@hotmail.com](mailto:zhennan_han@hotmail.com)